序

“年年岁岁花相似，岁岁年年人不同.”在世纪之交，经过高教体制改革，又一次强强合并后的新四川大学已成为我国西部地区规模最大、学科门类最齐全的新型综合性研究型大学. 校训“海纳百川，有容乃大；严谨勤奋，求是创新”已成为川大人求知治学的座右铭.

作为新世纪的献礼，我校研究生教材建设基金资助的又一批研究生优秀教材相继正式出版了，在此我表示热烈的祝贺.

众所周知，21 世纪是知识经济的世纪，国际竞争空前激烈. 竞争的焦点是科学技术，竞争的核心是创新型人才，竞争的关键是国民教育. 对于四川大学这样的国家重点大学而言，必须注意大力发展研究生教育，扩大规模，注重质量，强调创新.

校长、教师、教材是办学的三大要素，而教材是教学改革与师生智慧的重要结晶. 正是基于这种思考，我校建设以学科建设为龙头，作为一项重要的措施就是加强研究生的教材建设. 我们通过各种渠道，筹集了专项基金，用以资助研究生优秀教材的编写和出版. 我们在 1999 年首次资助的是有博士学位授权点的学科专业中涉及面大、使用面宽的研究生学位平台课程的优秀教材. 而今，我们扩大了教材基金资助的范围，无论文、理、工、管、医，只要是经过专家评审后认定的优秀教材，都可被列为资助对象. 特别是社会需求量大的应用学科、新兴学科、交叉学科及保护学科的优秀教材，更是优先资助出版.

我们推出的研究生教材的基本特点是：符合该学科教学大纲的基本要求，有较强的理论性和系统性. 这些教材既反映了该学科发展的新知识、新动向、新成就，也反映了我校教师在该门学科教学与科研中的新成果与新经验.

前人说得好，古今之成大事业、大学问者，都必须经过三种境界：“昨夜西风凋碧树. 独上高楼，望尽天涯路.”此第一境界也.“衣带渐宽终不悔，为伊消得人憔悴.”此第二境界也.“众里寻他千百度. 蓦然回首，那人却在，灯火阑珊处.”此第三境界也. 研究生优秀教材的建设应该算作一种“大事业”.

优秀教材的作者们对于研究生教育改革的执著追求，令人钦佩；他们的无私奉献精神，值得赞扬；他们所取得的教学科研成果应该积极推广，使其产生应有的社会效益，为百年名校增添光彩．我殷切希望在陆续出版的研究生教材中能出现“传诸后世”的佳作，更希望我校有更多教授、名家动手撰写研究生教材，分门别类，出版系列的研究生教材丛书，为建设国内一流、国际知名的新四川大学做出更大的贡献．

中国科学院院士
四川大学副校长　　刘宏明　教授
四川大学研究生院院长

前　言

2000年初，兰州大学物理科学与技术学院为了加强全院研究生基础理论课的教学工作，要我讲授全院研究生的必修课——高等量子力学．作为教师，我责无旁贷地接受了这项任务．要较好地完成这项任务，必须明确几个问题．

(1) 课程的目的与定位问题．它决定了教学大纲和教材的内容与深度，以及教学的目的与要求．高等量子力学是一门中国重点综合型大学物理学研究生的基础理论课程，在内容和深度上必须有较高的要求，要为物理学研究生阅读专业文献和从事物理学研究提供必要的量子力学理论基础，尽可能在量子论学习和微观物理学研究之间架设一座桥梁．此外，它还应包含当前科研工作中最有用的新成果．

(2) 研究生听众的组成问题．必修这门课程的80多名研究生来自理论物理、粒子物理与核物理、凝聚态物理与材料科学，以及量子光学等专业，其中学习实验物理学的研究生占多数（80%左右）．面对这一情况，为使各专业的学生都能从课程中受益，学到对他们有用的知识，本课程在内容上必须兼顾这些专业，而在教学和考试要求上又要有所区别．

(3) 与国内外教材的关系问题．目前，国内外有许多优秀的高等量子力学教材，但是前面两项要求决定了我必须花时间、花精力去编写一本教材，才能达成上面确定的目标．国内外优秀的高等量子力学教材是全世界高等教育的宝贵财富，教师对这些教材应当充分利用，同时又要使自己编写的教材能够与之互补，因为任何有生命力的书籍都应当是有特色、有个性的．基于上述认识，我花了半年多的时间写出了初稿，在兰州大学连续讲了三次，在西南交通大学讲了两次，2002年，我调往四川大学后，又在物理科学与技术学院讲了两次，常常出现每学期都授课的忙碌景况．其间，我针对讲授过程中出现的问题对教材进行了修改和补充．

2003年，四川大学研究生院制定了研究生基础课教材建设规划．物理科

学与技术学院和物理系的领导十分关心本学院研究生基础理论课的教学工作，多次敦促我在《高等量子论与量子多体理论》讲义的基础上，以正式出版物的形式在四川大学出版社出版．四川大学出版社的同志也十分热情，在他们的帮助下，本书得以顺利出版．

本书在撰写过程中注意了以下几点：强调量子论的应用，强调教材与科研接轨，强调基本理论问题，强调量子论的最新进展．因为量子论的应用所涉及的问题绝大多数是量子多体问题，因此本书用很大篇幅（第 3、4、5、6 章）介绍量子多体理论的基本概念和基本理论方法，希望对读者阅读有关专业文献以及开展量子多体问题研究有所裨益．在量子力学基本理论的阐述方面，本书包含了作者长期研究和思考得来的一些观点，如量子力学理论结构中关于“运动学和动力学”的观点，“量子力学对于经典力学的变革植根于运动学”的观点，真空量子涨落如何导致量子化的观点，把物理时空看作“真空背景的几何”的观点，把相对论效应看作“平稳真空背景的尺钟效应及其共轭的运动学效应”的观点，以及经典力学与量子力学的联系和本质区别的观点等等．对这些问题阐述的观点是作者个人的看法，希望对这些问题的研究能起到抛砖引玉的作用，引发年轻人对量子论基本问题的深入思考，这在物理学基本理论面临再一次变革的今天，将会是有益的．本书第 1，5，10，12 等章包含了作者的一些科研成果，第 9～11 章涉及量子力学新进展的一些方面，其中第 11 章只给读者建议了一个学习研究的提纲，并未展开讲述．

学习本书的读者，要求对大学物理系本科生的量子力学有比较全面扎实的基础，对群论特别是李群有一定的基础．具备上述条件的读者，学习本书不应有困难．对学习理论物理的学生，应还能从数学的准确度上掌握本书的基本内容．

本书力求对基本物理原理和基本理论方法的物理图像做尽可能清晰直观的讲述，强调对原理和概念要从物理层面上去理解，对基本公式和基本方法要从如何应用的角度去思考；对必要的数学推导，则尽可能简明扼要，重物理原理和概念的阐述，而不拘泥于数学细节．对学习理论物理的学生，则要求从数学表述上去准确掌握定量的物理原理，对学习实验物理的学生则建议他们注重对物理原理的理解和应用，而不要求对数学公式细节的推导．

本书也凝聚了笔者的亲人、同事与学生的心血和劳动. 我的妻子郭开惠始终热情、耐心地支持我的教学、科研工作，她在繁忙的教学工作之余，帮助我打印和校对了许多章节；学生们对各章节提出了许多好的改进意见，帮助绘制图表，校对全书；四川大学研究生院、物理科学与技术学院和物理系的领导对本书的出版给予了热情的关心、帮助和支持；四川大学出版社则热情、细致地组织了出版工作. 我在此对他们表示深切的感谢.

由于作者水平有限，书中的错误和不妥在所难免，请广大读者批评指正.

王顺金

2004 年 8 月于四川大学望江校区

目　录

第 1 章　量子力学的理论结构 …… 1

1.1　量子力学的理论结构 …… 1

1.1.1　运动学与动力学 …… 1

1.1.2　观测理论 …… 3

1.1.3　自由度 …… 4

1.1.4　表象理论 …… 4

1.2　量子力学的几种形式及其与经典力学的对应 …… 7

1.2.1　Heisenberg－Dirac 形式与 Poisson－Hamilton 形式的对应 …… 7

1.2.2　Schrödinger 形式与 Hamilton－Jacobi 形式的对应 …… 8

1.2.3　Feynman 形式与 Lagrangian 形式的对应 …… 9

1.2.4　Nelson 的随机形式与牛顿力学形式的对应 …… 10

1.3　量子力学的主要应用 …… 11

1.4　量子力学的近期发展 …… 12

第 2 章　对称性理论与守恒定律 …… 14

2.1　物理系统的对称性与守恒律 …… 14

2.1.1　对称性 …… 14

2.1.2　对称性的分类 …… 14

2.1.3　对称性的表述 …… 15

2.1.4　对称性的后果 …… 16

2.1.5　简并子空间的量子态按对称群不可约表示分类 …… 17

2.2 空间各向同性和系统的转动对称性
——角动量守恒及角动量理论精要…… 19
2.2.1 空间各向同性与系统的转动不变性…… 19
2.2.2 转动群的不可约表示，两个角动量的耦合与 $C-G$ 系数
…… 20
2.2.3 转动群元$\hat{R}(\Omega)$的矩阵表示——D－函数 …… 23
2.2.4 不可约张量算符，Wigner－Eckart 定理与选择定则…… 24
2.3 时空平移对称性和反射对称性…… 25
2.3.1 时间平移不变性与能量守恒…… 25
2.3.2 空间平移不变性与动量守恒…… 27
2.3.3 空间反射不变性与宇称守恒…… 28
2.3.4 时间反演不变性…… 30
2.4 全同粒子系统的置换对称性与统计性守恒…… 32
2.4.1 全同粒子…… 32
2.4.2 置换对称性…… 32
2.4.3 置换群…… 35
2.4.4 分数统计…… 36
2.5 量子系统$\hat{H}$的动力学对称性…… 37
2.5.1 动力学对称性的定义…… 37
2.5.2 具有动力学对称性的系统的性质…… 38
2.5.3 例 子…… 38
2.6 对称性与群论…… 49
2.6.1 对称性导致对称群…… 49
2.6.2 连续的对称变换导致李群——连续可微群…… 49
2.6.3 不连续的对称变换导致离散群…… 49
2.6.4 晶体的平移群是一般空间平移变换群的离散子群，而
晶体的点群是$O(3)$群的离散子群 …… 49

第3章　多体理论（Ⅰ）：平均场理论…… 51
3.1　量子力学多体问题…… 51
3.1.1　量子多体系统与量子多体问题…… 51
3.1.2　量子多体理论：微观理论和等效理论…… 51
3.1.3　微扰理论和非微扰理论…… 52
3.2　平均场理论：最简单的非微扰理论和处理多体问题的出发点…… 52
3.2.1　平均场理论的基本思想…… 52
3.2.2　平均场近似：时间有关的 Hartree－Fock 理论（TDHF）与 Hartree－Fock 理论（HF）…… 53
3.2.3　玻色子系统的平均场理论…… 59
3.2.4　平均场理论的意义…… 59
3.3　原子的平均场理论：原子的壳层结构…… 60
3.3.1　原子中电子的运动，类氢原子和电子－电子之间库仑相互作用修正…… 60
3.3.2　原子的平均场理论…… 61
3.3.3　原子平均场理论的改进，能量密度泛函方法…… 62
3.4　原子核的平均场理论：原子核的壳层结构…… 63
3.4.1　原子核中核子的独立粒子运动与幻数的存在…… 63
3.4.2　原子核的平均场理论：TDHT 和 HF 近似…… 63
3.4.3　原子核平均场理论的唯象形式——壳层模型…… 65
3.4.4　原子核的相对论性平均场理论…… 65
3.5　晶体的平均场理论：固体的能带结构…… 66
3.5.1　固体的量子力学多体问题…… 66
3.5.2　电子运动与原子核运动的分离：Born－Oppenheimer 近似…… 67
3.5.3　巡游电子运动方程的平均场近似：能带结构…… 68
3.5.4　固体平均场理论的改进…… 71
3.6　平均场理论的改进：密度泛函理论与局域密度近似…… 71
3.6.1　量子多体系统基态的性质：能量最低、能量泛函对波函数变

分极小 …… 72
3.6.2 Hohenberg－Kohn 定理 …… 73
3.6.3 Kohn－Sham 方程 …… 74
3.6.4 $E_{xc}[\rho]$的局域密度近似 …… 75
3.6.5 Car－Parrinello 的从头算分子动力学（Ab Initio Molecular Dynamics）（CP－AIMD） …… 76
3.6.6 时间有关的 Kohn－Sham 方程 …… 77
3.7 散射与反应问题的平均场理论——光学模型 …… 78
3.7.1 原子碰撞和原子核碰撞问题 …… 78
3.7.2 光学模型 …… 78

第 4 章 多体理论（Ⅱ）：剩余相互作用与二次量子化表象 …… 81
4.1 多粒子系统量子态的单粒子态描述 …… 81
4.1.1 多粒子系统中的单粒子状态：剩余相互作用与单粒子态量子跃迁 …… 81
4.1.2 单粒子量子态跃迁与单粒子量子态产生、消灭算符 …… 82
4.2 二次量子化表象 …… 83
4.2.1 二次量子化表象的基本精神 …… 83
4.2.2 玻色系统 …… 83
4.2.3 费米子系统 …… 89
4.2.4 量子多体系统二次量子化表象的场论形式 …… 91
4.3 原子核的组态混合模型 …… 94
4.4 固体物理中的几个模型 …… 95
4.4.1 固体的磁性与 Heisenberg 模型 …… 95
4.4.2 电子窄带关联与 Hubbard 模型：金属－绝缘相变 …… 98
4.4.3 杂质磁性与 Anderson 模型 …… 100
4.4.4 金属的超导电性与 Bardeen-Cooper-Schrieffer（BCS）模型 …… 100

第 5 章　多体理论（Ⅲ）：超越平均场近似的非微扰理论：密度矩阵理论和 Green 函数理论 …… 104
5.1　纯态与混合态、多体系统的关联等级描述 …… 104
5.1.1　纯态与混合态 …… 104
5.1.2　多体系统的关联等级理论 …… 104
5.2　密度矩阵理论：多体关联密度矩阵动力学 …… 105
5.2.1　密度矩阵与冯·诺意曼方程 …… 105
5.2.2　约化密度矩阵及其运动方程 …… 107
5.2.3　多体关联密度矩阵动力学 …… 108
5.2.4　二体关联密度矩阵动力学及其应用 …… 109
5.2.5　两类不同自由度的约化密度矩阵 …… 112
5.3　Green 函数理论：多体关联 Green 函数动力学 …… 113
5.3.1　一个粒子系统的 Green 函数 …… 114
5.3.2　多粒子系统的 Green 函数 …… 117
5.3.3　Green 函数的运动方程：多体关联 Green 动力学 …… 120
5.3.4　基态单粒子 Green 函数的 Lehmann 谱分解 …… 122
5.3.5　多体系统的 Green 函数，二次量子化表象形式 …… 123
5.4　量子统计力学初步 …… 125
5.4.1　非平衡态统计力学 …… 125
5.4.2　平衡态统计力学 …… 127

第 6 章　碰撞、散射和反应问题：光学模型与 S－矩阵 …… 133
6.1　碰撞、散射和反应问题 …… 133
6.1.1　结合态问题与非结合态碰撞问题：结构问题与碰撞问题 …… 133
6.1.2　势场散射与光学模型 …… 133
6.1.3　反应过程及其特点 …… 135
6.1.4　处理碰撞问题的任务 …… 135
6.2　Lippmann－Schwinger 方程 …… 135
6.2.1　碰撞问题的描述：反应道

——内部运动与相对运动的联合描述 …… 135
6.2.2 Lippmann－Schwinger 方程 …… 136
6.2.3 跃迁振幅 …… 138
6.2.4 反应过程的跃迁振幅 …… 139
6.3 光学模型和势场散射 …… 141
6.3.1 光学模型 …… 141
6.3.2 微观光学势与唯象光学势 …… 143
6.3.3 粒子在光学势场中的散射与吸收 …… 149
6.4 S－矩阵 …… 161
6.4.1 量子力学处理问题的三种绘景 …… 161
6.4.2 相互作用表象中状态随时间的演化 …… 163

第 7 章 相对论性量子力学 …… 171
7.1 微观粒子的相对论性动力学 …… 171
7.1.1 非相对论性量子力学的特点 …… 171
7.1.2 相对论性量子力学的特点 …… 172
7.2 Klein－Gordon 方程 …… 173
7.2.1 薛定格方程的建立 …… 173
7.2.2 相对论性量子力学方程 Klein－Gordon 的建立 …… 173
7.3 自由粒子的 Dirac 方程 …… 175
7.3.1 线性化 …… 175
7.3.2 α_i，β 的表示 …… 176
7.3.3 罗仑兹协变性 …… 177
7.3.4 从角动量守恒导出 Dirac 粒子内禀自旋为 1/2 …… 179
7.3.5 中微子的运动方程 …… 180
7.3.6 Dirac 方程的自由平面波解 …… 181
7.4 电磁场中电子的 Dirac 方程 …… 185
7.4.1 电磁场中电子的 Dirac 方程 …… 185
7.4.2 非相对论极限与电子磁矩 …… 186
7.4.3 中心力场下的非相对论极限：自旋轨道耦合力 …… 187

7.4.4 中心力场中电子运动的守恒量 …… 191
7.4.5 $(\hat{K}, j^2, j_z)$ 的共同本征态 …… 193
7.4.6 径向方程 …… 194
7.4.7 氢原子光谱的精细结构 …… 197
7.4.8 电子与电磁场相互作用系统的拉格朗日 …… 199
7.5 量子场论初步：量子电动力学（QED）、量子强子动力学（QHD）与 Walecka 模型 …… 200
7.5.1 量子电动力学（QED）初步 …… 200
7.5.2 量子强子动力学（Quantum Hadron Dynamics，QHD） …… 202

第 8 章 量子力学的积分形式与路径积分 …… 206
8.1 量子力学的路径积分形式 …… 206
8.1.1 从薛定格微分形式到费曼的路径积分形式 …… 206
8.1.2 从费曼形式到薛定格形式 …… 211
8.1.3 相空间的路径积分形式 …… 215
8.1.4 费曼的路径积分形式的意义 …… 216
8.2 量子场论的路径积分方法 …… 217
8.3 统计物理中的路径积分 …… 218

第 9 章 量子力学的几何相位 …… 220
9.1 引 言 …… 220
9.2 AB 效应、AS 效应与磁通量子化 …… 221
9.2.1 AB 效应 …… 221
9.2.2 AS 效应 …… 222
9.2.3 磁通量子化 …… 224
9.3 Berry 相位 …… 225
9.3.1 含时哈密顿量的瞬时本征值问题 …… 225
9.3.2 含时量子系统的时间演化 …… 226
9.3.3 绝热近似 …… 227

9.3.4 绝热 Berry 相位 …… 228
9.3.5 一个例子：自旋为 1/2 的粒子在转动磁场中的运动 …… 229
9.3.6 非绝热 Berry 相位 …… 231
9.3.7 非绝热非周期性几何相位——Pancharatnam 几何相位 …… 231
9.3.8 几何相位的量子经典对应——Hannay 角 …… 232
9.4 物理空间的几何效应与规范场 …… 232
9.4.1 物理空间 …… 232
9.4.2 诱导规范场 …… 232
9.4.3 Hilbert 空间的参数空间的弯曲及其几何效应的描述 …… 233
9.4.4 经验与教训 …… 233

第 10 章 非自治系统量子力学 …… 235
10.1 人造量子系统与非自治量子系统 …… 235
10.1.1 人造量子系统与量子光学系统 …… 235
10.1.2 非自治量子系统 …… 236
10.1.3 代数动力学 …… 237
10.2 代数动力学 …… 238
10.2.1 动力学的诸要素 …… 238
10.2.2 代数动力学及其内涵 …… 240
10.3 人造量子系统与量子光学系统的理论研究：代数动力学的应用 …… 247
10.3.1 可积系统与规则运动 …… 247
10.3.2 不可积系统与量子无规运动 …… 263
10.4 讨论与展望 …… 277
10.4.1 人造量子系统问题 …… 277
10.4.2 代数动力学方法与其他相关方法的比较 …… 278
10.4.3 展 望 …… 279

第 11 章　量子力学前沿问题 …… 282
11.1　量子 Hall 效应 …… 282
11.2　Bose－Einstein 凝聚（BEC） …… 283
11.3　Josephson 效应 …… 283
11.4　Van der Waals 力与 Casimir 效应 …… 283
11.5　Bell 定理与实验 …… 283
11.6　量子态纠缠与退相干 …… 284
11.7　拓扑量子力学 …… 284
11.8　量子信息与量子通讯 …… 284
11.9　量子编码与量子计算 …… 284

第 12 章　结语：量子力学问题 …… 286
12.1　按照系统的动力学性质进行分类 …… 286
12.2　按照理论认识路线进行分类 …… 287
12.3　按照系统的量子运动方程的可积性进行分类 …… 288
12.4　按照系统的非线性度进行分类 …… 289
12.5　按照系统的哈密顿量的时间依赖性进行分类 …… 289
12.6　按照系统的来源进行分类 …… 290
12.7　按照系统与环境的关系进行分类 …… 290

附　录 …… 292
一、一般参考书目 …… 292
二、关于各专业研究生学习重点的建议 …… 294
三、关于《高等量子论与量子多体理论》习题的建议 …… 294

第 1 章　量子力学的理论结构

本章的目的是对大学本科所学的量子力学基本理论知识进行复习与提升，对量子力学的主要应用与近期发展作简要的介绍．本章是学习本书其余各章节的基础和向导．

1.1　量子力学的理论结构[1-3]

量子力学作为物理学最重要的理论体系之一，像其他严密的科学理论体系一样，有着严谨的理论结构．这一严谨而简洁的理论结构反映出物理学的微观粒子动力学理论的科学之美．透视和了解这一理论结构可以帮助我们更深刻地理解和掌握量子力学的本质与精华，对量子力学其他内容的学习将起到纲举目张的作用．

1.1.1　运动学与动力学

作为微观粒子动力学理论的量子力学的基本理论构架可分为运动学与动力学两个部分．

运动学与动力学是所有科学动力学理论的普适构架．

(1) 运动学：物理学中运动学的目的是解决物理系统运动状态的描述问题，它的具体任务是确定运动学变量及其代数关系．

像经典力学一样，量子系统的基本运动学变量是广义坐标 $\hat{q}_i$ 和广义动量 $\hat{p}_i$，它们之间的代数关系是 Heisenberg 代数：

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij} \tag{1-1a}$$

$$[\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0 \tag{1-1b}$$

其中 $\hat{a}, \hat{b}$ 之间的对易子按通常定义为

$$[\hat{a}, \hat{b}] \equiv \hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a} \tag{1-1c}$$

用对易子定义的运动学代数 (1－1a)，(1－1b)，(1－1c) 使得量子力学

的基本运动学变量 $\{\hat{q}_i,\hat{p}_i\}$ 成为不对易的算符（q－数或 q－变量），本质上不同于经典力学的基本运动学变量 $\{q_i,p_i\}$.

作为对比，经典力学的基本运动学变量也是广义坐标 q_i 与广义动量 p_i，但它们服从的却是 Poisson 代数，即

$$\{q_i,p_j\}=\delta_{ij} \tag{1-2a}$$

$$\{q_i,q_j\}=\{p_i,p_j\}=0 \tag{1-2b}$$

Poisson 括号 $\{A,B\}$ 的定义为

$$\{A(q,p),B(q,p)\}\equiv\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i}-\frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i} \tag{1-2c}$$

用 Poisson 代数定义的运动学代数（1－2a），（1－2b），（1－2c）使经典力学的基本运动学变量 $\{q_i,p_i\}$ 成为普通的可对易的变量（c－数或 c－变量）.

既然量子力学的基本运动学变量是算符，那么由它们组成的任何物理学力学量 $\hat{O}(\hat{q},\hat{p})$ 也自然成为算符，它们必须作用于具体的对象上才能给出物理上可观测量的数值. 量子力学的力学量算符作用的对象称为态矢（状态矢量）. 态矢描述量子系统的状态，用可归一化的波函数 $|\psi\rangle$ 表示，代表量子态的几率幅. 因为波函数包含振幅和相位两个函数，因此波函数一般用复函数描述. 所有态矢的集合构成量子态的 Hilbert 空间，力学量算符则是作用于 Hilbert 空间的算符；态叠加原理使得量子态的 Hilbert 空间成为矢量空间. 量子态的 Hilbert 空间通常是无限维的函数空间，是解析几何中有限的矢量空间的推广. 波函数常常用一组量子数来标志与分类. 一些量子数确定的波函数的集合有时生成一个有限维 Hilbert 子空间，所有 Hilbert 子空间的集合生成整个 Hilbert 空间.

（2）动力学：物理学中动力学的任务是确定物理系统的运动状态如何随时间变化. 具体来说，就是确定基本运动学变量 $\{q_i,p_i\}$ 或一般物理学力学量 $\hat{O}(\hat{q}_i,\hat{p}_i)$，或者状态波函数 $|\psi\rangle$ 随时间变化的规律. 为实现这一目标，动力学要解决三个问题：

①惯性律问题：其任务是确定度量物理客体惯性的质量 m. 惯性描述运动的永恒性（守恒），是物理客体的基本属性，是运动可被确定的必要条件.

②力律问题：其任务是确定使物理客体的运动发生变化的势场 $V(\vec{r},t)$. 势场描述环境与客体相互作用的能量的时空分布（其在空间的分布表现为力，其在时间的分布表现为功率）.

惯性律与力律二者确定了由客体与环境组成的系统的哈密顿量：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \tag{1-3}$$

它包含了系统的全部动力学信息，规定了系统的动力学演化.

③运动方程问题：运动方程是系统能量守恒的微分形式，决定系统的时间演化（即时间平移）规律. 保持能量守恒的动力学演化（时间平移），要求时间平移算子等于 $\hat{H}/\hbar$（见第 2 章).

对力学量而言，运动方程为 Heisenberg 方程：对基本运动学变量，广义坐标与广义动量有

$$\frac{\mathrm{d}\,\hat{q}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i, \hat{H}] \tag{1-4a}$$

$$\frac{\mathrm{d}\,\hat{p}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i, \hat{H}] \tag{1-4b}$$

对一般力学量有

$$\frac{\mathrm{d}\,\hat{O}(\hat{q}, \hat{p})}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{O}, \hat{H}] \tag{1-4c}$$

对量子态而言，运动方程为薛定格方程：

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{1-5}$$

1.1.2 观测理论

观测理论要解决理论对象（力学量算符和波函数（$\hat{O}, \psi$））与实验对象（观测量）之间的对应问题，这是量子论所特有的，因为力学量对应于算符（操作），必须作用于状态波函数才能给出可观测值.

力学量对应于算符 $\hat{O}$，量子态对应于态矢 ψ，这使得量子力学理论处理的物理量与实验上的观测量之间有一个距离，观测理论就是要回答如何从力学量算符和量子态波函数或态矢经过一定操作（运算）获得实验上的观测值. 其规则如下：

(1) 波函数 ψ（$\vec{r}$）是状态的几率幅，而 $|\psi(\vec{r})|^2$ 才代表粒子在空间 $\vec{r}$ 处的几率密度.

(2) 只有力学量 $\hat{O}$ 的本征值 O_n 是可观测的. 一般情况下，一次观测到本征

值 O_n 的几率为 p_n，多次观测给出力学量 $\hat{O}$ 的平均值为：

$$\langle \psi \mid \hat{O} \mid \psi \rangle = \sum_n p_n O_n \tag{1-6a}$$

其中力学量的本征方程给出其本征值 O_n 和本征状态 ψ_n：

$$\hat{O}\psi_n = O_n \psi_n \tag{1-6b}$$

几率 p_n 由波函数 $\psi(\vec{r})$ 按本征状态 ψ_n 的下列展开式系数计算：

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n \tag{1-6c}$$

$$p_n = \mid C_n \mid^2 \tag{1-6d}$$

1.1.3 自由度

自由度是指物理系统的运动学变量的数目，可分为运动学自由度与动力学自由度. 运动学自由度是指系统中一切运动学变量的数目，即可能的自由度（d）；动力学自由度是指在一定的几何、运动学和动力学约束条件下，系统在物理上可以实现运动的运动学变量的数目，即实现自由度（d_{eff}），有时也称为有效自由度. 显然 $d \geqslant d_{\text{eff}}$. 二者的差别来源于：

（1）几何约束或物理约束（对称性原理），使得一部分运动学自由度在物理上不能实现，成为非物理的自由度. 几何约束使得算盘珠从三维运动变为一维运动；物理约束是对称性（守恒律）约束，如引力势的特殊球对称性使得在三维空间的行星由于角动量守恒总是在平面内做二维运动. 规范场的非物理自由度也是由于系统的拉格朗日具有（较大的）局域对称性所致.

（2）量子体系的能量的量子阶梯性或能量标度原理，使得在较低能量的物理条件下，那些具有较高激发能的运动学自由度因得不到足够的激发能量而被冻结. 这一点在物理学科学实践中是非常重要的，它使得我们能对复杂的量子多体系统作出简单的描述，从众多运动学自由度中约化出少数相关自由度. 例如：

分子系统：　　转动激发　　振动激发　　内部电子激发

能　标：　E_{rot}（$<0.01\text{eV}$）$\ll E_{\text{vib}}$（$<0.1\text{eV}$）$\ll E_{\text{electron}}$（$1\text{eV}-k\text{eV}$）

因而，一定能区的光子，只能激发相应的运动模式.

1.1.4 表象理论

表象理论是选择理论描述的标架的问题（标架理论）. 它是经典力学中选

择坐标系的理论在量子力学中的推广．经典力学的坐标和动量是普通空间的矢量：

$$\vec{q} = \sum_i q_i \vec{e}_i, \quad \vec{p} = \sum_i p_i \vec{e}_i, \quad \langle \vec{e}_i \mid \vec{e}_j \rangle = \delta_{ij} \tag{1-7}$$

量子力学的态矢是 Hilbert 空间的矢量，即

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n \tag{1-8}$$

Hilbert 空间是无限维的函数空间，它的基矢 ψ_n 通常组成数目为无限的正交完备系，满足正交归一性条件，即

$$\langle \psi_n \mid \psi_m \rangle = \delta_{nm} \tag{1-9a}$$

和完备性条件

$$\sum_n \mid \psi_n \rangle \langle \psi_n \mid = I \tag{1-9b}$$

量子力学的力学量 $\hat{O}$ 是作用于 Hilbert 空间的算符，其微分表示为

$$\hat{O} = O(\hat{q}, \hat{p}) \tag{1-10a}$$

矩阵表示为

$$\underline{O} = (O_{nm}), \quad O_{nm} = \langle \psi_n \mid \hat{O} \mid \psi_m \rangle \tag{1-10b}$$

Dirac 抽象表示为

$$\hat{O} = \sum_{m,n} \mid \psi_n \rangle O_{nm} \langle \psi_m \mid \tag{1-10c}$$

其中 $\{\psi_n\}$ 为任一正交完备系．

Hilbert 空间的基矢 $\{\psi_n\}$ 称为表象的基矢，如果 ψ_n 是 $\hat{H}$ 的本征矢量：$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$，则称 $\{\psi_n\}$ 为能量表象；若 ψ_p 为 $\hat{\vec{p}}$ 的本征矢量：$\hat{\vec{p}}\psi_p = \vec{p}\,\psi_p$，则称 $\{\psi_p\}$ 为动量表象．作为表象基矢的最基本的要求是完备性，即

$$\sum_n \mid \psi_n \rangle \langle \psi_n \mid = I \tag{1-11a}$$

完备性表示任意态矢 ψ 都可以按基矢 $\{\psi_n\}$ 展开：

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n \tag{1-11b}$$

通常还要求表象基矢具有正交、归一性：

$$\langle \psi_n \mid \psi_m \rangle = \delta_{nm} \tag{1-12}$$

应当指出，完备性是表象基矢的必要条件，而正交、归一性只是为了方便．

正像经典力学可以选择坐标系一样，量子力学也可以选择表象. 选择表象是理论描述的自由，因而带有主观的成分. 选择表象的原则是它能方便地描述客观物理现象——简洁地反映其物理本质.

选定表象 $\{\psi_n\}$ 以后，任何态矢都可用它展开：

$$\psi = \sum_n C_n \psi_n \tag{1-13a}$$

力学量也可用它表示：

$$\hat{O} = \sum_{nm} |\psi_n\rangle O_{nm} \langle\psi_m| \tag{1-14a}$$

省去基矢 ψ_n 之后，状态可用列矢表示：

$$\psi \to \underline{C} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \tag{1-13b}$$

力学量可用矩阵表示：

$$\underline{O} = (O_{mn}) \tag{1-14b}$$

这样，量子力学就变成矩阵力学——Heisenberg 形式.

从一个正交归一表象基矢 $\{\psi_n\}$ 到另一个正交归一表象基矢 $\{\varphi_n\}$ 的变换是幺正变换：

$$|\varphi_n\rangle = U|\psi_n\rangle = \sum_m U_{mn}|\psi_m\rangle, \quad |\psi_n\rangle = U^{-1}|\varphi_n\rangle \tag{1-15}$$

因为有正交归一性：

$$\langle\varphi_n|\varphi_m\rangle = \langle\psi_n|U^+ U|\psi_m\rangle = \delta_{nm} \tag{1-16a}$$

所以有幺正性：

$$U^+ U = I, \quad U^+ = U^{-1} (U^+ = \tilde{U}^*) \tag{1-16b}$$

在 $\{\psi_n\}$ 表象中，力学量的矩阵表示是 $\underline{O}(\psi)$；在 $\{\varphi_n\}$ 表象中，力学量的矩阵表示是 $\underline{O}(\varphi)$. 从客观性原则来看，物理量对一个量子态的平均值是客观的，与表象选择无关，因而得到力学量的两个矩阵表示的变换关系：

$$\begin{aligned} \hat{O} &= \sum_{nm} O_{nm}(\psi)|\psi_n\rangle\langle\psi_m| = \sum_{nm} O_{nm}(\varphi)|\varphi_n\rangle\langle\varphi_m| \\ &= \sum_{nm}\sum_{kl} (U_{nk} O_{kl}(\psi) U^+_{ml})|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \end{aligned} \tag{1-17}$$

即

$$\underline{O}(\varphi) = U\underline{O}(\psi)U^+ \tag{1-18}$$

除了离散的正交完备系之外，还有连续的正交完备系，如动量表象 ψ_p，其正交归一化为 Dirac δ－函数：

$$\langle \psi_p \mid \psi_{p'} \rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}\,') \tag{1-19a}$$

完备性条件为

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')} d^3\vec{p} = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \tag{1-19b}$$

有时用离散和完备的斜交系更为方便．这时需引进双正交系 $\{\psi^i, \varphi_i\}$，它们满足

$$\langle \psi^i \mid \varphi_j \rangle = \langle \varphi_j \mid \psi^i \rangle = \delta_{ij} \tag{1-20a}$$

但

$$\langle \psi^i \mid \psi^j \rangle \neq \delta_{ij},\ \langle \varphi_i \mid \varphi_j \rangle \neq \delta_{ij} \tag{1-20b}$$

态矢可按斜交系展开：

$$\psi = \sum_i C_i \psi^i = \sum_i C^i \varphi_i \tag{1-21a}$$

其系数一个为逆变矢量 $\{C^i\}$，另一个为协变矢量 $\{C_i\}$，它们满足

$$\langle \psi \mid \psi \rangle = \sum_i C_i C^i = 1 \tag{1-21b}$$

斜交系有时是过完备的（基矢个数大于空间维数），如相干态表象 $\{\mid \alpha\rangle\}$，它们是连续的、斜交的、过完备的基矢．

1.2 量子力学的几种形式及其与经典力学的对应[4-10]

量子力学是在经典力学的基础上发展起来的，对应原理在量子力学的发展中起着十分重要的作用．像经典力学有几种理论形式一样，量子力学也有几种理论形式，它们与经典力学相应的理论形式有着深刻的对应关系．

1.2.1 Heisenberg－Dirac 形式与 Poisson－Hamilton 形式的对应

以下可以清楚地看出这种对应：

表 1－1　Heisenberg－Dirac 形式与 Poisson－Hamilton 形式的对应

	量子力学的 Heisenberg 形式	经典力学的 Poisson－Hamilton 形式	
运动学：	$[\hat{q}_i,\hat{p}_j],[\hat{q}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\,\delta_{ij}$	$\{q_i,p_j\},\{q_i,p_j\}=\delta_{ij}$	(1－22a)
动力学：	$H(\hat{q},\hat{p})$	$H(q,p)$	(1－22b)
	$\frac{\mathrm{d}\hat{q}_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i,\hat{H}]$	$\dot{q}_i=\{q_i,H\}$	(1－22c)
	$\frac{\mathrm{d}\hat{p}_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i,\hat{H}]$	$\dot{p}_i=\{p_i,H\}$	(1－22d)

其中 Poisson 括号定义为

$$\{X(q,p),Y(q,p)\}=\frac{\partial X}{\partial q_i}\frac{\partial Y}{\partial p_i}-\frac{\partial X}{\partial p_i}\frac{\partial Y}{\partial q_i} \tag{1-22e}$$

重复指标应求和. 显然，上述对应可以归结为从 Poisson 括号向 Heisenberg 对易子的过渡，即

$$\{X,Y\}\to\frac{1}{i\hbar}[\hat{X},\hat{Y}] \tag{1-22f}$$

在这一过渡中引进了量子物理常数 $\hbar$，它是量子力学的本质所在. 由此可见，量子力学不同于经典力学的本质植根于运动学(是运动学的变革)，正像相对论力学不同于非相对论力学的本质植根于时空观(是时空观的变革)一样.

上述对应是 Heisenberg 建立矩阵力学的推动力.

1.2.2　Schrödinger 形式与 Hamilton－Jacobi 形式的对应

表 1－2　Shrödinger 形式与 Hamilton－Jacobi 形式的对应关系

	Shrödinger 量子力学	Hamilton－Jacobi 经典力学	
薛定格方程	$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$		(1－23a)
	↓		
变换式	$\psi=\mathrm{Re}^{iS/\hbar}$		(1－23b)
密度函数的连续性方程	$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{j}=0,$	$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\vec{\nabla}\cdot\vec{j}=0$	(1－24a)
相位函数方程	$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\vec{\nabla}S)^2+V-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2R}{R}=0,$	$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}(\vec{\nabla}S)^2+V=0$	(1－24b)

注：表中 $\rho=R^2$，$\vec{j}=\frac{R^2}{m}\nabla S$，$\vec{p}=\nabla S=m\dot{\vec{r}}$.

Shrödinger 形式与 Hamilton－Jacobi 形式的对应关系如表 1－2 所示．薛定格方程经变换、变形为密度函数的连续性方程和相位函数方程，从而建立起与 Hamilton－Jacobi 经典力学方程的对应．

表 1－2 这种对应促使薛定格发现了波动力学．Hamilton－Jacobi 力学是经典粒子系综的力学，当系综密度 $\rho(\vec{r},t)=\delta(\vec{r}-\vec{r}(t))$ 时，其一阶矩方程就过渡到一个粒子的经典力学方程．Hamilton－Jacobi 力学引进了粒子运动等相位的波阵面函数——Hamilton－Jacobi 函数 $S(\vec{r},t)$（粒子动量是 $S(\vec{r},t)$ 的梯度），从而把粒子运动的波阵面与几何光学中光子运动的波阵面对应起来，使量子力学的 Schrödinger 形式也建立起与光学的对应．（1－24b）中量子力学方程的第四项称量子势，它为零时（$\hbar\to 0$），量子力学方程就过渡到经典力学方程．在经典力学中，具有确定轨道的粒子的运动所对应的密度分布是 δ－函数：$\rho(\vec{r},t)=\delta(\vec{r}-\vec{r}(t))$，粒子以百分之百的概率（决定论概率）在时空中沿一条确定的轨道运动．量子涨落的随机性破坏了这种决定论运动，使粒子的量子“轨道”弥散开来，把决定论的经典轨道提升为随机性的量子波函数；当 $\hbar\to 0$时，量子涨落的弥散效应消失，量子随机运动（波函数）又退化为经典决定论运动（轨道）．

1.2.3 Feynman 形式与 Lagrangian 形式的对应

表 1－3 反映了 Feynman 形式与 Lagrangian 形式的对应．

表 1－3 Feynman 形式与 Lagrangian 形式的对应

	量子力学 Feynman 形式	经典力学 Lagrangian 形式	
作用量	$S=\int L(q,\dot{q})\mathrm{d}t$	$S=\int L(q,\dot{q})\mathrm{d}t$	(1－25a)
粒子量子运动的传播子包括所有轨道的贡献，粒子沿经典轨道的运动由作用量最小决定：	$K(q',t';q,t)=\sum_{\text{path}}\mathrm{e}^{iS[q'(t');q(t)]/\hbar}$	$\delta S=0$	(1－25b)
由此得波函数的演化方程和轨道的演化方程	$\psi(q,t)=\int K(q,t;q',t')\psi(q',t')\mathrm{d}q'$	$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}-\frac{\partial L}{\partial q}=0$	(1－25c)

Feynman 形式的核心在于用路径积分计算量子力学的传播子或格林函数

(它包含了量子运动的全部信息，见第 5、第 8 两章)：把每一个可能的粒子轨道与一列波相联系，在运用与粒子轨道相联系的作用量 S 计算这列波的相位时引进了量子物理常数 $\hbar$，并考虑所有轨道对应的波列的等权叠加贡献. 计算中除 $\hbar$ 外，用到的都是经典量；经典运动（由于不考虑真空涨落）仅对应于一条稳定的能量守恒的轨道（$\delta S=0$ 的轨道），真空量子涨落提供的极大的涨落能量使得一切轨道的贡献成为可能，把一条决定论的经典轨道扩散开来变成随机的量子几率幅分布（波函数）. 因此，Feynman 通过计算传播子，提出了一种新的对所有轨道贡献求和的量子化方案，用积分的形式而不是微分的形式来包括量子涨落效应，从而实现运动学层次上的量子化. 他用的都是经典物理量，这就避免了使用力学量算符. 总之，微分形式的正则量子化是考虑了真空量子涨落的局域运动学效应，而积分形式的路径积分量子化则是考虑了真空量子涨落的整体运动学效应.

这种对应使 Feynman 发展了完整的量子力学的路径积分形式，发现了量子力学与 Lagrangian 经典力学的深刻联系. 由于 Lagrangian 力学与场论在形式上是相似的，因此 Feynman 路径积分形式特别适合于场的量子化（量子场论，特别是规范场量子化）. Feynman 路径积分形式从粒子轨道波的角度揭示了量子运动的随机性.

1.2.4 Nelson 的随机形式与牛顿力学形式的对应

表 1－4 反映了 Nelson 的随机形式与牛顿力学形式的对应. 其中 $\xi(t)$ 为随机力，而随机速度和平均速度定义为

$$\text{随机速度}\qquad \vec{u}(\vec{r},t)=\frac{\hbar}{m}\vec{\nabla}R \tag{1-26e}$$

$$\text{平均速度}\qquad \vec{v}(\vec{r},t)=\frac{\hbar}{m}\vec{\nabla}S \tag{1-26f}$$

Nelson 从无摩擦量子布朗运动的假定出发，运用随机过程理论导出了与薛定格方程等价的上述方程，在粒子坐标和速度的层次上揭示了量子运动的随机本质，促进了后来场的随机量子化理论的发展. 应当指出，由于郎之万方程所包含的是经典的实的随机力，因此由它导出的是经典统计分布函数的 Fokker－Planck 方程，而非量子力学薛定格方程.

表 1－4　Nelson 的随机形式与牛顿力学形式的对应

	量子力学的 Nelson 随机形式	经典力学的牛顿力学形式	
由薛定格方程	$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$		(1－26a)
经变换	$\psi=e^{R+iS/\hbar}$		(1－26b)
可得随机和速度平均速度的方程，	$\frac{\partial\vec{u}}{\partial t}=-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\vec{v}-\vec{\nabla}\ (\vec{v}\cdot\vec{u})$，		
与牛顿和万程之程对郎方应	$\frac{\partial\vec{v}}{\partial t}=-\frac{1}{m}\vec{\nabla}V$ (Newton)		(1－26c)
	$\frac{\partial\vec{v}}{\partial t}=-\frac{1}{m}\vec{\nabla}V+\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\vec{u}-(\vec{v}\cdot\vec{\nabla})\ \vec{v}+(\vec{u}\cdot\vec{\nabla})\ \vec{u}$，	$\frac{\partial\vec{v}}{\partial t}=-\frac{1}{m}\vec{\nabla}V+\xi\ (t)$ (Langevin)	(1－26d)

1.3　量子力学的主要应用

量子力学自 1925 年诞生以来，已走过了 80 年辉煌的历程．量子力学理论向场论的自然延伸和纵深发展，产生了量子场论和基本粒子理论．量子力学的横向发展与应用，使其在原子、分子物理、原子核物理、凝聚态物理以及量子光学等方面均取得了极其丰硕的成果．

量子力学在原子、分子物理中的应用，主要是发展了原子的壳层模型，研究了原子、分子的电子结构与光谱线问题，在此基础上处理原子、分子碰撞问题，为团簇物理、量子化学和量子生物学奠定了理论基础．

量子力学在原子核物理中的应用，发展了核子－核子强相互作用的核力理论，原子核结构的壳层模型和集体运动模型，以及各种核反应理论和核衰变理论．

量子力学在凝聚态物理中的应用，主要是发展了固体的能带理论以及以此为基础的各种模型理论，如 Heisenberg 模型、Anderson 模型、Hubbard 模型和超导体电性的 BCS 理论．

量子力学也成功地用于处理电磁辐射场（光子）与原子、分子的相互作用，发展了量子光学的各种模型理论，如腔场量子电动力学中的 Jaynes－Cummings 模型.

上述内容将结合量子力学的主要理论方法和理论概念的阐述在以下各章中予以简要介绍.

1.4 量子力学的近期发展[11－12]

量子力学在物理学各个分支的成功应用中，其理论概念和理论方法也得到发展. 其中最重要的发展有量子多体理论，动力学对称性理论，非自治系统量子力学，量子力学的几何相位和拓扑量子力学，宏观量子力学理论，量子信息、量子通讯与量子计算机等. 下面我们将选择几个方面进行介绍.

量子多体理论的概念与方法，主要包括平均场与剩余相互作用理论，二次量子化理论，密度矩阵与格林函数理论，多体关联与集团展开理论，以及量子统计所需的理论方法.

动力学对称性理论是一般对称性理论的发展与延伸，根据系统哈密顿量的代数结构去研究系统的特殊的对称性以及相应的守恒律和量子数. 动力学对称性理论在粒子物理、原子核物理、原子分子物理、量子光学以及凝聚态物理中都有成功的应用.

非自治系统量子力学研究的量子系统的哈密顿量的参数与时间有关，体现了环境对系统的影响或人类对量子系统的控制. 对这类系统的处理需要发展新的理论方法，其中代数动力学理论显得特别系统与成功. 由于许多人造的量子系统的哈密顿量是含时间的，因此非自治系统量子力学理论方法就具有特别重要的实用价值.

量子力学几何相位是近二十年的新发现，它充分揭示了量子运动的波动特性和量子态波函数的相位的客观内涵，以及物理空间拓扑性质对微观量子态的影响. 量子力学几何相位是非自治量子系统具有的普遍性质，也具有重要的理论意义和实用价值.

量子力学的其他近期发展，包括量子 Hall 效应，拓扑量子力学，Bose－Einstein 凝聚，Josephson 效应，Casimir 效应，Bell 定理与实验，量子态纠缠与退相干，量子信息、量子通讯与量子计算等.

【参考文献】

Ⅰ 量子力学及其理论结构

1 P. A. M. Dirac. The Principle of Quantum Mechanics. Oxford University Press, 1958

P. A. M. 狄拉克. 量子力学原理. 科学出版社, 1965

2 A. Messiah. Quantum Mechanics: Vol. Ⅰ & Ⅱ. North Holland, Amsterdam, 1962

3 王顺金. 人造量子系统的理论研究与代数动力学. 物理学进展, 1999, 19(4): 331~370

Ⅱ 量子力学路径积分形式

4 R. P. Feynman. Rev. Mod. Phys. 1948, 20: 367

5 R. P. Feynman and A. Ribbs. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York: Mc Graw-Hill, 1965

Ⅲ 量子力学与量子场论的随机形式

6 E. Nelson. Phys. Rev. 1966, 110(4): 1079

7 G. Parisi and Wu Yongshi. Scientia Sinica. 1981, 24(4): 35~48

8 P. H. Damgaard and H. Hueffel. Stochastic Quantization. World Scientific Publishing, 1988

Ⅳ 经典力学

9 H. Goldstein. Classical Mechanics. 2nd ed. Addison-Welsley Publishing Co., 1980

Ⅴ 量子场论

10 C. Itzykson and J - B Zuber. Quantum Field Theory: Vol. Ⅰ & Ⅱ. Mc Graw-Hill Inc, 1980

Ⅵ 量子力学的前沿问题

11 张礼, 葛墨林. 量子力学的前沿问题. 清华大学出版社, 2000

12 曾谨言, 龙桂鲁, 裴寿镛. 量子力学新进展. 清华大学出版社, 2003

第 2 章　对称性理论与守恒定律

物理学研究物理世界的运动规律，而物理世界中所谓的运动规律不过是物理世界各种守恒定律的体现. 量子力学研究微观世界的运动规律，即微观世界的各种守恒定律. 这些守恒定律可分为两类：适用于各种微观系统的比较普遍的守恒定律和与微观系统特性有关的特殊的守恒定律. 对称性理论研究物理守恒定律与时空背景和系统的对称性的关系.

本章着重介绍微观系统比较普遍的守恒定律，揭示这些守恒定律与对称性的深刻联系. 由于对称性理论涉及对微观世界的守恒定律的描述，本章介绍的内容就是量子论的基本内容.

2.1　物理系统的对称性与守恒律[1-7]

对称性在自然界中和在日常生活中都是常见的，它体现了一种自然美和人文美. 从物理学的观点考查，在对称性的后面，隐藏着某种物理规律性. 本章的目的，就是揭示物理系统的对称性及其相关的物理规律性之间的深刻联系.

2.1.1　对称性

系统的某种对称性是指系统在某种运动、变换下的不变性. 如球体在绕其中心的任意转动下是不变的，等边三角形绕其中心转动 120°，240°也是不变的. 这是物体的几何对称性. 物理系统在自由空间（真空）中的平移、转动下，其内部性质也是不变的，这与空间（真空背景）的性质有关，它对物体的影响是均匀的，各向同性的. 系统还有一些对称性与系统内部作用力的性质有关，如中心力具有转动不变性，导致系统的角动量守恒……因此，物理系统的对称性是多种多样的，其根源也是多种多样的.

2.1.2　对称性的分类

物理系统的对称性可分为：

(1) 外部环境的对称性，如：

①时空背景的对称性：包括时空平移、空间转动、时空反演（射）等对称性；

②物理背景的对称性：如晶体平移对称性与点群对称性（空间群对称性）.

(2) 内部相互作用的对称性，其又可分为：

①相互作用的整体对称性，如夸克模型的$SU(3)$对称性；

②相互作用的局域对称性，如量子色动力学（QCD）的色$SU(3)$对称性；

③动力学对称性，与系统的哈密顿量 $\hat{H}$ 的结构有关的对称性，它与某种量子运动模式的存在和守恒有关.

2.1.3 对称性的表述

设系统 $\hat{H}$（以后我们用系统的哈密顿量 $\hat{H}$ 表示该系统）对若干种变换 $\hat{S}_i$，$\hat{S}_j$ 具有不变性，按量子力学算符变换理论，这些不变性可表为

$$\hat{S}_i\hat{H}\hat{S}_i^{-1} = \hat{H} \quad 或 \quad [\hat{S}_i, \hat{H}] = 0 \tag{2-1a}$$

$$\hat{S}_j\hat{H}\hat{S}_j^{-1} = \hat{H} \quad 或 \quad [\hat{S}_j, \hat{H}] = 0 \tag{2-1b}$$

同时可证，系统对这两个变换的联合变换 $(\hat{S}_j\hat{S}_i)$ 也是不变的：

$$(\hat{S}_j\hat{S}_i)\,\hat{H}(\hat{S}_j\hat{S}_i)^{-1} = \hat{S}_j\hat{S}_i\hat{H}\hat{S}_i^{-1}\hat{S}_j^{-1} = \hat{H} \rightarrow [\hat{S}_j\hat{S}_i, \hat{H}] = 0 \tag{2-1c}$$

即 $(\hat{S}_j\hat{S}_i)$ 也是对称变换，因此对称变换具有封闭性. 此外，从定义可知，对称变换一定是可逆的，即若 $\hat{S}_i$ 存在，则逆元 $\hat{S}_i^{-1}$ 也存在，且

$$[\hat{S}_i^{-1}, \hat{H}] = 0 \tag{2-2a}$$

$$\hat{S}_i\hat{S}_i^{-1} = \hat{S}_i^{-1}\hat{S}_i = I \tag{2-2b}$$

即恒元 I 也存在. 此外，对称变换还满足结合律：

因为

$$(\hat{S}_j\hat{S}_k) = \hat{S}_j\hat{S}_k \rightarrow (\hat{S}_j\hat{S}_k)\hat{S}_k^{-1} = \hat{S}_j$$

$$\hat{S}_i(\hat{S}_j\hat{S}_k)\hat{S}_k^{-1} = \hat{S}_i\hat{S}_j = (\hat{S}_i\hat{S}_j)$$

所以

$$\hat{S}_i(\hat{S}_j\hat{S}_k) = (\hat{S}_i\hat{S}_j)\hat{S}_k \tag{2-3}$$

因此，对称变换的全体 $S = \{\hat{S}_i\}$ 符合群的公理，构成一个群，称为系统 $\hat{H}$ 的对称群.

2.1.4 对称性的后果

(1) 对称性导致守恒律：按照力学量的 Heisenberg 运动方程，因为

$$[\hat{S}_i, \hat{H}] = 0 \tag{2-4a}$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}\hat{S}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{S}_i, \hat{H}] = 0 \tag{2-4b}$$

即 $\hat{S}_i$ 是守恒量. 应特别强调，对称群的所有元素 $\hat{S}_i$ ($i=1, 2, \cdots, N$) 单独看都是守恒量，但这并不表示它们可以同时观测；只有彼此对易的守恒量才可以同时观测. 元素 $\{\hat{S}_i\}$ 中究竟有多少个元素可彼此对易，这是由对称群 S 自身的性质决定的.

(2) 对称算符 $\hat{S}_i$ 与 $\hat{H}$ 有共同的本征函数，而且能量对 $\hat{S}_i$ 的本征值简并.

若状态 ψ_n 是 $\hat{H}$ 的本征态：

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \tag{2-5a}$$

则

$$\hat{H}(\hat{S}_i\psi_n) = E_n(\hat{S}_i\psi_n) \tag{2-5b}$$

故另一状态 $\psi_{ni} = \hat{S}_i\psi_n$ 也是 $\hat{H}$ 的本征态，且能量仍为 E_n，因此对称群 S 造成能级简并（同一能级上有一个以上的不同状态）. 设所有 $\psi_{ni} = \hat{S}_i\psi_n$ ($i=1, 2, \cdots, N$) 生成一个 M ($M \leqslant N$) 维子空间，用 ψ_{ni} 表示 M 个独立基矢，则可以在这个子空间内把互易的 $\hat{S}_\alpha$ 同时对角化，其本征矢是 ψ_{ni} ($i=1, 2, \cdots, M$) 的线性组合，称为 ψ_{nm_α}，$\hat{S}_\alpha$ 的本征值为 m_α，并有

$$\hat{S}_\alpha\psi_{nm_\alpha} = m_\alpha\psi_{nm_\alpha}, \quad m_\alpha = 1, 2, \cdots, M \tag{2-6a}$$

$$\hat{H}\psi_{nm_\alpha} = E_n\psi_{nm_\alpha} \tag{2-6b}$$

即 $\hat{H}$ 与 $\hat{S}_\alpha$ 有共同的本征函数，且能量 E_n 对 $\hat{S}_\alpha$ 的 M 个本征态简并.

但是如果 $\hat{S}_i$ 与 $\hat{S}_j$ 不对易，则它们没有共同的本征函数，故 $\hat{H}$ 不能与所有的 $\hat{S}_i$ 有共同的本征函数. 设 $S = \{\hat{S}_i, i=1, 2, \cdots, N\}$ 有 r 个互易元素 $\hat{S}_\alpha$ ($\alpha=1, 2, \cdots, r$)，即

$$[\hat{S}_\alpha, \hat{S}_\beta] = 0 \tag{2-7}$$

则$\hat{H}$与 $\{\hat{S}_\alpha \mid \alpha = 1, 2, \cdots, r\}$ 组成一个互易算子集（Commuting Operators，简称 CO）：

$$CO = \{\hat{H}, \hat{S}_\alpha \mid \alpha = 1,2,\cdots,r\} \tag{2-8}$$

如上所述，它们有共同的本征函数 ψ_{nm_a}.

显然，能量 E_n 对对称群生成的所有量子态简并. 通常 $\hat{S}_\alpha$ （$\alpha = 1$, 2, $\cdots, r$）的共同的本征函数有有限个（M 个），这时能级是 M 重简并，ψ_{nm_a} 在能级 E_n 上仿射出对称群 S 的一个表示空间.

例如：氢原子，其互易的算子集是完备的，称为 CSCO（Complete Set of Commuting Operators，即可互易完备算子集），它们是

$$CSCO = \{\hat{H}, \hat{l}^2, \hat{l}_z\} \tag{2-9}$$

其共同本征函数为 ψ_{nlm}，本征方程为

$$\hat{H}\psi_{nlm} = E_n\psi_{nlm} \tag{2-10a}$$

$$\hat{l}^2\psi_{nlm} = l(l+1)\psi_{nlm} \tag{2-10b}$$

$$\hat{l}_z\psi_{nlm} = m\psi_{nlm} \tag{2-10c}$$

E_n 的简并度为：

$$M_n = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n(n-1) + n = n^2 \tag{2-11a}$$

考虑电子自旋后，应乘 2，即

$$M_n^s = 2n^2 \tag{2-11b}$$

每个能壳 E_n 可填充的电子数为

$$n = 1,2,3,4,5,6,\cdots$$

$$M_n^s = 2,8,18,32,50,72,\cdots$$

2.1.5 简并子空间的量子态按对称群不可约表示分类

设对称群 $S = \{\hat{S}_i\}$ 为李群，其第二类完备算子集为

$$CSCOII = \{\hat{C}_i, \hat{H}_\alpha\} \tag{2-12}$$

其中 $\hat{C}_i$ 是对称群的群链（$G_s \supset G_i \supset \cdots$）的 Casimir 算子，$\{\hat{H}_\alpha\}$ 为Cartan算子集，它们彼此对易，即

$$[\hat{C}_i, \hat{C}_j] = 0, \quad [\hat{H}_\alpha, \hat{H}_\beta] = 0, \quad [\hat{C}_i, \hat{H}_\alpha] = 0 \tag{2-13}$$

显然，对称群的 *CSCOII* 与系统的哈密顿量$\hat{H}$对易，共同组成系统$\hat{H}$的完备互易算子集，

$$CSCOII(H) = \{\hat{H}, \hat{C}_i, \hat{H}_a\} \tag{2-14}$$

他们的共同本征函数 $\psi_{nn_in_a}$ 满足下列本征方程：

$$\hat{H}\psi_{nn_in_a} = E_n\psi_{nn_in_a} \tag{2-15a}$$

$$\hat{C}_i\psi_{nn_in_a} = n_i\psi_{nn_in_a} \tag{2-15b}$$

$$\hat{H}_a\psi_{nn_in_a} = n_a\psi_{nn_in_a} \tag{2-15c}$$

$\psi_{nn_in_a}$ 给出系统状态的完全描述（每一个能级上的所有状态都有唯一的波函数和量子数与之对应，不重复，不遗漏），而且 n 相同而 $\{n_i, n_a\}$ 不同的 M_n 个状态具有相同的能量 E_n，因而是简并的（M_n 称为简并度）. 不考虑对称群的 *CSCOII*，这 M_n 个简并的状态没有分类和标志；考虑了对称群的 *CSCOII* 后，这个 M_n 维子空间则按照对称群的量子数 $\{n_i, n_a\}$ 分类. 因对称群的 *CSCOII* 是完全的（无量子数遗漏），故这个分类也是完全的. 基矢 $\psi_{nn_in_a}$ 构成对称群的 *CSCOII* 表示的基矢，而且是不可约的（不能再分成更小的对称群的不变子空间）. 因此，对称群 S 的 *CSCOII* 给出系统$\hat{H}$的简并能级的量子态空间的一个完全的分类：按对称群不可约表示的分类.

仍考虑以上例子，这是一个典型的例子，现在按前面论述的规则，把这个例子详述一遍. 其转动对称群 $SO(3)$ 的生成元为 $SO(3) = \{\hat{l}_i \mid i = x, y, z\}$，$SO(3)$ 的第二类完全互易算子集为

$$CSCOII(SO(3)) = \{\hat{C}_i, \hat{H}_a\} = \{\hat{l}^2, l_z\} \tag{2-16}$$

系统$\hat{H}$的互易完备算子集是

$$CSCOII(H) = \{\hat{H}, \hat{C}_i, \hat{H}_a\} = \{\hat{H}, \hat{l}^2, l_z\} \tag{2-17}$$

它们的共同本征函数为 ψ_{nlm}，且

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_{nlm} &= E_n\psi_{nlm} \\ \hat{l}^2\psi_{nlm} &= l(l+1)\psi_{nlm} \\ \hat{l}_z\psi_{nlm} &= m\psi_{nlm} \end{aligned} \tag{2-18}$$

E_n 的简并度为

$$M_n = \sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n(n-1) + n = n^2 \qquad (2-19a)$$

考虑电子自旋后，应乘2，即

$$M_n' = 2n^2 \qquad (2-19b)$$

不利用$SO(3)$对称群，这 n^2 个简并态没有分类；用了$SO(3)$对称群的$CSCOII$ 后，这 n^2 维子空间就按$SO(3)$的不可约表示分成 $l=0,1,\cdots,(n-1)$ 个子空间，每一个 l 确定的子空间不可再分为更小的$SO(3)$的不变子空间了，故称为不可约子空间.

本征值 $\{n, l, m\}$ 是一个完全的量子数集合，完全标志了量子态，且既没有遗漏也没有重复，同一 n 不同 $\{l, m\}$ 的量子态是简并的（有相同的能量 E_n），$\{l, m\}$是对称群$SO(3)$的量子数，也是其不可约表示基矢 Y_{lm}的指标. 因此，对称群$SO(3)$的不可约表示给出氢原子量子态的一个完全分类（对简并态子空间的分类），而 Y_{lm}是$SO(3)$的不可约表示空间的基矢.

下面运用上述一般理论，具体而详细地讲述物理系统普遍的各种对称性及相应的守恒定律，包括：①空间各向同性与系统的转动不变性，及其后果——角动量守恒；②时间均匀性与系统的时间平移不变性，及其后果——能量守恒；③空间均匀性与系统的空间平移不变性，及其后果——动量守恒；④基本物理过程可逆性与系统的时间反演不变性；⑤空间反射不变性，及其后果——宇称守恒；⑥全同粒子置换对称性，及其后果——统计性守恒.

2.2 空间各向同性和系统的转动对称性——角动量守恒及角动量理论精要[1-7]

2.2.1 空间各向同性与系统的转动不变性

自由空间或真空作为物理事件发生的背景，具有空间各向同性的性质，即一个物理系统不论其空间取向如何，其内部性质都是一样的，真空背景对物理系统的影响是各向同性的. 我们把物理系统的这种对真空背景的空间取向的不变性几何化后，称为空间转动不变性或转动对称性. 具有转动对称性的系统，其相应的对称群为转动群.

空间转动群的生成元为角动量算子$\hat{J}_i$（$i=x, y, z$），如系统没有内禀自旋（如无自旋粒子），则

$$\hat{J}_i = \hat{l}_i (i = x, y, z), \quad \hat{l}_x = -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \quad (\hbar = 1) \tag{2-20a}$$

轮换得 $\{\hat{l}_y, \hat{l}_z\}$. 转动群的李代数为 $so(3) = \{\hat{l}_i \mid i = x, y, z\}$. 如粒子的自旋为 1/2，则

$$\hat{J}_i = \hat{l}_i + \frac{1}{2}\sigma_i \quad (i = x, y, z) \tag{2-20b}$$

σ_i 为 Pauli 矩阵，其中

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2-20c}$$

这时转动群应扩展为其覆盖群 $SU(2)$，其李代数为 $su(2) = \{\hat{J}_i \mid i = x, y, z\}$. 其生成元的对易关系与 $so(3)$ 一样：

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{J}_k \tag{2-21}$$

转动群的群元可写成

$$\hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i\gamma\hat{J}_z)\exp(-i\beta\hat{J}_y)\exp(-i\alpha\hat{J}_z) \tag{2-22}$$

欧勒角 $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$ 的取值范围是：$0 \leqslant \alpha, \gamma \leqslant 2\pi, 0 \leqslant \beta \leqslant \pi$. (α, β) 取值用以覆盖普通空间的一切转动，γ 取值用以覆盖内禀自旋空间的转动. 群元用连续参数表示，而且可微的群称为李群，$SU(2)(SO(3))$ 是李群的一种.

系统 $\hat{H}$ 的转动不变性的数学表达为

$$[\hat{R}(\Omega), \hat{H}] = 0, \quad \hat{R}(\Omega)\hat{H}\hat{R}^{-1}(\Omega) = \hat{H} \tag{2-23a}$$

或等价于

$$[\hat{J}_i, \hat{H}] = 0, \quad i = x, y, z \tag{2-23b}$$

因此，$\hat{H}$ 是标量算子.

2.2.2 转动群的不可约表示，两个角动量的耦合与 $C-G$ 系数

转动群是 $\hat{H}$ 的对称群，它可以对系统的量子态进行分类. 分类是按对称群的不可约表示进行的. 而求转动群的不可约表示，可归结为找出其生成元的第二类完备的互易算子集 *CSCOII*. 从氢原子这个例子，我们知道

$$CSCOII(SO(3)) = \{\hat{C}_i, \hat{H}_o\} = \{\hat{l}^2, \hat{l}_z\} \tag{2-24a}$$

推广到有自旋情况

$$CSCOII(SU(2)) = \{\hat{C}_i, \hat{H}_a\} = \{\hat{j}^2, \hat{J}_z\} \tag{2-24b}$$

找$SO(3)(SU(2))$不可约表示，归结为求$CSCOII(SO(3))$的共同本征函数. 对$SO(3)$，已知为 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$:

$$\hat{l}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm} \tag{2-25a}$$

$$\hat{l}_z Y_{lm} = m Y_{lm} \tag{2-25b}$$

无自旋粒子的$\hat{H}$本征态为ψ_{nlm}，即

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \tag{2-26}$$

$$\hat{H}\psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm} \tag{2-27}$$

对自旋为 1/2 的粒子，要求出 $\{\hat{j}^2, \hat{J}_z\}$ 的共同的本征态，它们组成$SU(2)$群不可约表示空间的基矢. 为此，先求自旋空间的本征值问题. 自旋算符的完备集为 $\{\hat{S}^2, \hat{S}_z\}$，它们的共同的本征函数为 χ_{sv} $(v = \pm 1)$，

$$\chi_{s+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \chi_{s-1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{2-28}$$

易证

$$\hat{S}^2 \chi_{sv} = s(s+1)\chi_{sv} = \frac{3}{4}\chi_{sv} \tag{2-29a}$$

$$\hat{S}_z \chi_{sv} = \frac{v}{2}\chi_{sv}, \quad \hat{S}_z = \frac{1}{2}\sigma_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2-29b}$$

求 $\{\hat{j}^2, \hat{J}_z\}$ 的共同的本征函数，涉及两个角动量相加的问题：已知 $\{\hat{l}^2, \hat{l}_z\}$ 的本征态为 Y_{lm}和 $\{\hat{S}^2, \hat{S}_z\}$ 的本征态为 χ_{sv}，求两个角动量之和的算子集 $\{\hat{j}^2, \hat{J}_z\}$ 的共同的本征函数. 因为自旋空间与普通空间相互独立，自旋算子与轨道角动量算子互易，因此有

$$e^{i\alpha \hat{J}_z} = e^{i\alpha(\hat{l}_z + \hat{S}_z)} = e^{i\alpha \hat{l}_z} \cdot e^{i\alpha \hat{S}_z} \tag{2-30}$$

(2－30) 式表明，角动量 $\hat{l}_z$ 和自旋$\hat{S}_z$ 在群元指数上的相加性导致群元相乘，进而表示群元作用的函数空间 $\{Y_{lm}\}$ 和 $\{\chi_{sv}\}$ 是相乘的. 因此，$\{\hat{j}^2, \hat{J}_z\}$ 的共同的本征函数 ψ_{JM}必然是 $\{Y_{lm}\}$ 和 $\{\chi_{sv}\}$ 相乘的线性组合：

$$\psi_{JM} = \sum_{mv} C^{JM}_{lm,sv} Y_{lm} \chi_{sv} \tag{2-31}$$

线性叠加系数 $C^{JM}_{lm,sv}$叫做角动量耦合系数或 Clebsh－Gordon 系数 (C－G 系

数)，它由角动量耦合条件、其本征方程及基矢的正交归一条件定出．耦合条件和本征方程为：

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{l}} + \hat{\vec{S}} \tag{2-32}$$

$$\hat{J}^2\psi_{JM} = J(J+1)\psi_{JM}, \quad \hat{J}_z\psi_{JM} = M\psi_{JM} \tag{2-33}$$

由于考虑自旋后的完备算子集为

$$CSCOH(SU(2)) = \{\hat{J}^2, \hat{J}_z, \hat{l}^2, \hat{S}^2\} \tag{2-34}$$

故 ψ_{JM}还应是$\hat{l}^2$，$\hat{S}^2$ 的本征态．直接计算可知：

$$\hat{l}^2\psi_{JM} = l(l+1)\psi_{JM}, \quad \hat{S}^2\psi_{JM} = s(s+1)\psi_{JM} \tag{2-35}$$

由上述条件定出的 C－G 系数有表可查，其量子数满足矢量相加法则（三角形法则）：

$$|l-s| \leqslant J \leqslant l+s, \quad M = m+v$$

值得注意的是，两个角动量耦合之后，得出 $(2s+1)$ 个（如 $s<l$）不同的 J 标志的子空间都是$SU(2)$的不等价不可约表示空间，它们是彼此正交的子空间．从 $\{Y_{lm}\}$ 和 $\{\chi_{sv}\}$ 的正交归一性和 C－G 系数的性质，不难证明：

$$< \psi_{JM} \mid \psi_{J'M'} > = \delta_{JJ'}\delta_{MM'} \tag{2-36}$$

因此从基矢 $\{Y_{lm}\chi_{sv}\}$ 到基矢 $\{\psi_{JM}\}$ 的变换是幺正变换：

$$\sum_{mv} C^{JM}_{lmsv}C^{J'M'}_{lmsv} = \delta_{JJ'}\delta_{MM'}, \quad \sum_{JM} C^{JM}_{lmsv}C^{JM}_{lm'sv'} = \delta_{mm'}\delta_{vv'} \tag{2-37}$$

幺正变换自然保持 Hilbert 空间的维数（基矢的数目）不变．可验证如下：

$\{Y_{lm}\chi_{sv}\}$ 表示的基矢数为：$(2l+1)(2s+1)$，

$\{\psi_{JM}\}$ 表示的基矢数为：$\sum_{J=|l-s|}^{l+s}(2J+1) = (2l+1)(2s+1)$．

对 $\{Y_{lm}\chi_{sv}\}$ 基矢，总角动量是不确定的，由它们仿射的子空间尚未约化．事实上，从（2－31）的逆变换

$$Y_{lm}\chi_{sv} = \sum_{J=|l-s|}^{l+s} C^{JM}_{lmsv}\psi_{JM} \tag{2-38}$$

可以看出，$Y_{lm}\chi_{sv}$是按不同J 的本征函数 $\{\psi_{JM}\}$ 展开的，J 不确定，其取值区间为 $[|l-s|, l+s]$，因此 $Y_{lm}\chi_{sv}$不是$SU(2)$不可约表示的基矢．变到 $\{\psi_{JM}\}$ 表象中后，每一个 J 都构成$SU(2)$的一个不可约表示，它们是彼此正交的子空间，即角动量耦合的幺正变换（2－31）把可约的 $\{Y_{lm}\chi_{sv}\}$ 空间分解为 $(2s+1)$ 个彼此正交的 $\{\psi_{JM}\}$ 不可约子空间的直和：

$$|Y_{lm}\chi_{sv}| = \sum_{J=|l-s|}^{l+s} |\psi_{JM}| \tag{2-39}$$

如用 $|\psi_{JM}|$ 计算 $\hat{J}_i$ 的矩阵元，则它们是对角方阵

$$\underline{J}_i = \begin{bmatrix} X & 0 & 0 \\ 0 & Y & 0 \\ 0 & 0 & Z \end{bmatrix} \tag{2-40}$$

我们说两角动量耦合的直积空间 $|Y_{lm}\chi_{sv}|$ 可约化为 $(2s+1)$ 个不可约表示空间 $|\psi_{JM}|$ 的直和，其中算子 $\hat{J}_i$ 的矩阵表示均为对角方阵.

2.2.3 转动群元 $\hat{R}(\Omega)$ 的矩阵表示——D－函数

转动算符 $\hat{R}(\Omega)$ 作用到不可约表示空间 $|\psi_{JM}|$，不改变角动量量子数 J，只改变磁量子数 M，把该空间内的一个态矢转动成另一个. 由于 $|\psi_{JM}|$ 是完备的，因此，$\hat{R}(\Omega)|\psi_{JM}\rangle$ 是 $|\psi_{JM}|$ 的线性组合：

$$\hat{R}(\Omega)\,|\,\psi_{JM}\rangle = \sum_{M'} D^{J}_{M'M}(\Omega)\,|\,\psi_{JM'}\rangle \tag{2-41}$$

其中 D－函数是 $\hat{R}(\Omega)$ 在 $|\psi_{JM}|$ 空间的变换矩阵，即 $\hat{R}(\Omega)$ 在 $|\psi_{JM}|$ 空间的表示矩阵. 由 $|\psi_{JM}|$ 的正交归一性得：

$$\begin{aligned} D^{J}_{M'M}(\Omega) &= \langle \psi_{JM'}\,|\,\hat{R}(\Omega)\,|\,\psi_{JM}\rangle \\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha M'} d^{J}_{M'M}(\beta)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma M} \\ &= D^{J}_{M'M}(\alpha,\beta,\gamma) \end{aligned} \tag{2-42a}$$

$$d^{J}_{M'M}(\beta) = \langle \psi_{JM'}\,|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\hat{J}_y}\,|\,\psi_{JM}\rangle \tag{2-42b}$$

其中 D－函数有一般的解析公式可查. 因 $\hat{R}(\Omega)$ 是幺正变换 $\hat{R}^{+} = \hat{R}^{-1}$，它把一组正交基矢 $|\psi_{JM}|$ 变为另一组正交基矢 $|\hat{R}\psi_{JM}|$，所以作为 $\hat{R}$ 的变换矩阵的 D－函数就是转动算子在不可约表示空间 $|\psi_{JM}|$ 中的表示，它自然也是幺正的：

$$\sum_{M} D^{J}_{MM'}{}^{*}(\alpha,\beta,\gamma) D^{J}_{MM''}(\alpha,\beta,\gamma) = \delta_{M'M''} \tag{2-43}$$

因 $|\psi_{JM}|$ 对所有的 J、M 构成了角动量表示空间的一组完备基矢，故该空间的任意函数可按它们展开：

$$\psi(\theta,\varphi,S_z) = \sum_{JM} C_{JM}\psi_{JM}(\theta,\varphi,S_z) \tag{2-44}$$

它在转动算符作用下的变换为

$$\begin{aligned}\hat{R}(\Omega)\psi(\theta,\varphi,S_z) &= \sum_{JM} C_{JM}\hat{R}(\Omega)\psi_{JM}(\theta,\varphi,S_z)\\ &= \sum_{JM} C_{JM}\sum_{M'} D^J_{M'M}(\Omega)\psi_{JM'}\\ &= \sum_{JM'} C_{JM'}(\Omega)\psi_{JM'}\end{aligned}$$

$$C_{JM'}(\Omega) = \sum_{M} C_{JM}D^J_{M'M}(\Omega) \tag{2-45}$$

(2-45) 式表明，态矢的展开式的系数 C_{JM}（矢量的分量）分别在各自的 J 空间内变换，即转动群元素的矩阵表示在 $|\psi_{JM}|$ 表象中是按 J 约化的：

$$\langle\psi_{JM}|\hat{R}(\Omega)|\psi_{J'M'}\rangle = \delta_{JJ'}D^J_{M'M}(\Omega) \tag{2-46a}$$

或

$$\underline{R(\Omega)} = \begin{bmatrix} D^{J_1} & 0 & 0\\ 0 & D^{J_2} & 0\\ 0 & 0 & D^{J_3}\end{bmatrix} \tag{2-46b}$$

2.2.4 不可约张量算符，Wigner－Eckart 定理与选择定则

不可约张量算符 $\hat{T}_{\lambda\mu}$ 按变换性质定义为：它在转动群作用下具有基矢 $\psi_{\lambda\mu}$ 那样的变换性质：

$$\hat{R}(\Omega)\,\hat{T}_{\lambda\mu}\hat{R}^{-1}(\Omega) = \sum_{\mu'} D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega)\,\hat{T}_{\lambda\mu'} \tag{2-47}$$

类似于两个矢量 $\psi_{\lambda_1\mu_1}$ 和 $\psi_{\lambda_2\mu_2}$ 的乘积可以耦合成 $\psi_{\lambda\mu}$，即

$$\psi_{\lambda\mu} = \sum_{\mu_1\mu_2} C^{\lambda\mu}_{\lambda_1\mu_1\lambda_2\mu_2}\psi_{\lambda_1\mu_1}\psi_{\lambda_2\mu_2} \tag{2-48}$$

两个不可约张量 $\hat{T}_{\lambda_1\mu_1}$ 和 $\hat{T}_{\lambda_2\mu_2}$ 也可以耦合成 $\hat{T}_{\lambda\mu}$，即

$$\hat{T}_{\lambda\mu} = \sum_{\mu_1\mu_2} C^{\lambda\mu}_{\lambda_1\mu_1\lambda_2\mu_2}\,\hat{T}_{\lambda_1\mu_1}\,\hat{T}_{\lambda_2\mu_2} \tag{2-49}$$

其中（λ，μ）的取值也满足矢量相加的三角形法则：

$$|\lambda_1-\lambda_2| \leqslant \lambda \leqslant \lambda_1+\lambda_2, \quad \mu = \mu_1+\mu_2 \tag{2-50}$$

例如：原子物理和原子核物理中的多极算子

$$Q_{\lambda\mu} = Q_0 r^{\lambda}Y_{\lambda\mu}(\theta,\varphi) \tag{2-51}$$

就是 λ – 极不可约张量算子的例子，其转动变换规则为

$$\hat{R}(\Omega)Q_{\lambda\mu}\hat{R}^{-1}(\Omega) = \sum_{\mu'}D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega)Q_{\lambda\mu'} \tag{2-52}$$

$\hat{T}_{\lambda\mu}$作用在态矢 ψ_{jm}上后，$\hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm}$的变换性质为，

$$\begin{aligned}\hat{R}(\Omega)\ \hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm} &= \hat{R}(\Omega)\ \hat{T}_{\lambda\mu}\hat{R}^{-1}(\Omega)\ \hat{R}(\Omega)\psi_{jm} \\ &= \sum_{\mu'}D^{\lambda}_{\mu'\mu}(\Omega)\ \hat{T}_{\lambda\mu'}\sum_{m'}D^{j}_{m'm}(\Omega)\psi_{jm'}\end{aligned} \tag{2-53}$$

因此，$\hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm}$的变换性质与 $\psi_{\lambda\mu}\psi_{jm}$的变换性质一样，可以耦合成总角动量为 (JM) 的态：

$$\psi_{JM} = \sum_{m\mu}C_{\lambda\mu\ jm}^{\ JM}\hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm} = (\hat{T}_{\lambda}\psi_j)_{JM} \tag{2-54}$$

其逆变换为

$$\hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm} = \sum_{JM}C_{\lambda\mu\ jm}^{\ JM}(\hat{T}_{\lambda}\psi_j)_{JM} = \sum_{JM}C_{\lambda\mu\ jm}^{\ JM}\psi_{JM} \tag{2-55}$$

现在计算$\hat{T}_{\lambda\mu}$引起的从 ψ_{jm}态向 $\psi_{j'm'}$态的跃迁矩阵元：

$$\begin{aligned}\langle\psi_{j'm'}\mid\hat{T}_{\lambda\mu}\mid\psi_{jm}\rangle &= \langle\psi_{j'm'}\mid\sum_{J}C_{\lambda\mu\ jm}^{\ JM}\mid(\hat{T}_{\lambda}\psi_j)_{JM}\rangle \\ &= \delta_{j'J}\delta_{m'M}C_{\lambda\mu\ jm}^{\ JM}\langle\psi_{j'm'}\mid(\hat{T}_{\lambda}\psi_j)_{JM}\rangle \\ &= \delta_{j'J}\delta_{m'M}C_{\lambda\mu\ jm}^{\ JM}\langle\psi_{j'}\parallel\hat{T}_{\lambda}\parallel\psi_j\rangle\end{aligned} \tag{2-56}$$

即跃迁应满足角动量相加法则：

$$\begin{aligned}&\vec{j}\,' = \vec{\lambda} + \vec{j} = \vec{J} \\ &\mid j-\lambda\mid\leqslant J\leqslant j+\lambda, m' = \mu + m = M\end{aligned} \tag{2-57}$$

$C_{\lambda\mu jm}^{\ JM}$是矢量$\hat{T}_{\lambda\mu}\psi_{jm}$在矢量 $\psi_{j'm'}$上的分量（振幅），这是角动量守恒在状态跃迁振幅上的反映：角动量守恒导致的不可约张量算符$\hat{T}_{\lambda\mu}$引起的态 – 态跃迁的选择定则.

2.3 时空平移对称性和反射对称性[1-7]

2.3.1 时间平移不变性与能量守恒

如果真空背景在不同时刻对物理系统的影响是一样的，即真空背景对物理

系统的影响随着时间的流逝是平稳的，我们就说时间是均匀的，物理系统对时间平移是不变的，具有时间平移不变性.

时间平移变换 $\hat{T}_\tau$ 的描述及性质：

(1) 对坐标的变换：

$$t \to t + \tau, \vec{r} \to \vec{r} \tag{2-58a}$$

(2) 对波函数的变换：

$$\hat{T}_\tau \psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, t + \tau) \tag{2-58b}$$

由此可得

(3) 时间平移算符的表示：

$$\hat{T}_\tau = e^{\tau \frac{\partial}{\partial t}} \tag{2-58c}$$

其中时间平移的无穷小算符是：$\frac{\partial}{\partial t}$.

(4) 对算符的变换：

$$\hat{O} \to \hat{T}_\tau \hat{O} \hat{T}_\tau^{-1} \tag{2-58d}$$

(5) 其变换群是单参数阿贝尔群（只有一维不可约表示）：

$$[\hat{T}_\tau, \hat{T}_{\tau'}] = 0 \tag{2-58e}$$

系统 $\hat{H}$ 只要不显含时间 $(\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0)$，必有时间平移不变性：

$$\hat{T}_\tau \hat{H} \hat{T}_\tau^{-1} = \hat{H} \to [\hat{T}_\tau, \hat{H}] = 0 \to [\frac{\partial}{\partial t}, \hat{H}] = 0 \to \hat{H} \text{ 不显含时间} \tag{2-59}$$

这时，由 Heisenberg 方程有

$$\frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{H}, \hat{H}] = 0 \tag{2-60}$$

因此，能量算符 $\hat{H}$ 是守恒量，导致能量守恒.

从薛定格方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{2-61}$$

得其解

$$\psi(t + \tau) = e^{-i\hat{H} \cdot \tau/\hbar} \psi(t) \tag{2-62}$$

因而薛定格方程所描述的状态的时间演化不过是使状态在时间上发生一个平移. 这也可以由时间平移算子来实现:

$$\psi(t+\tau) = \hat{T}_\tau \psi(t) = \mathrm{e}^{\tau \frac{\partial}{\partial t}} \psi(t) \tag{2-63}$$

比较式 (2-62) 和 (2-63), 可得

$$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tag{2-64}$$

因此, $\hat{H}$是无穷小时间平移算子 (仅差一个常数因子 $i\hbar$): 由$\hat{H}$支配下的动力学演化所产生的时间平移, 自然保持$\hat{H}$ (能量) 自身守恒.

2.3.2 空间平移不变性与动量守恒

自由空间或真空作为物理事件发生的背景具有空间均匀的性质, 即一个物理系统不论放在空间一条直线上的各点, 其内部性质都是一样的, 真空背景对物理系统的影响对空间移动是均匀的. 我们把这种物理系统对真空背景的空间移动的不变性几何化后, 称为空间平移不变性或空间均匀性.

空间平移变换$\hat{T}_{\vec{a}}$的描述及性质:

(1) 对坐标的变换: $\vec{r} \to \vec{r} + \vec{a}$, $t \to t$ (2-65a)

(2) 对波函数的变换: $\hat{T}_{\vec{a}} \psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r} + \vec{a}, t)$ (2-65b)

由此可得

(3) 空间平移算符的表示: 由 Taylor 展开公式知

$$\hat{T}_{\vec{a}} = \mathrm{e}^{\vec{a} \cdot \vec{\nabla}} \tag{2-65c}$$

$$\vec{\nabla} = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \tag{2-65d}$$

其中, $\vec{\nabla}$是空间平移的无穷小算子 (生成元), 有三个分量, 彼此对易, 故$\hat{T}_{\vec{a}}$是阿贝尔群.

(4) 空间平移变换群$\hat{T}_{\vec{a}}$是三参数阿贝尔群, 只有一维表示.

(5) 对算符的变换: 如果系统的$\hat{H}$不包含绝对坐标$\vec{r}$, 则它具有空间平移不变性

$$\hat{T}_{\vec{a}} \hat{H} \hat{T}_{\vec{a}}^{-1} = \hat{H} \to [\vec{\nabla}, \hat{H}] = 0 \to \vec{\nabla} \hat{H} = 0 \tag{2-66}$$

$\hat{H}$与$\vec{r}$无关, 只是 $(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ 或 $(\vec{r}_i - \vec{R})$ 的函数. 如果粒子在一个势场中运

动，势场中心坐标为$\vec{R}$，则在势场中心系中观察，$V(\vec{r}-\vec{R})$具有平移不变性. 从 Heisenberg 方程

$$\frac{\mathrm{d}\hat{P}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{P},\hat{H}]=-[\vec{\nabla},\hat{H}]=0 \tag{2-67}$$

可知，空间平移不变性导致系统的动量$\vec{P}$守恒.

应当说明，时空平移变换的数学表示比较简单. 因为时空平移只改变时空坐标，通过时空坐标的改变来影响波函数，不改变波函数的张量性质即粒子的内禀性质，所以时空平移变换不涉及内禀自由度.

2.3.3 空间反射不变性与宇称守恒

如果物理系统在真空背景的$\vec{r}$和$-\vec{r}$两点的性质一样，则我们说它具有空间反射不变性或对称性. 如果对坐标系进行反射变换：$\vec{e}_i\to-\vec{e}_i$，则右手坐标系变成左手坐标系. 因此，具有反射对称性的系统，在左手坐标系和右手坐标系中的行为是一样的.

空间反射变换$\hat{P}_\pi$的描述及性质：

(1) 坐标的变换：$\vec{r}\xrightarrow{\hat{P}_\pi}-\vec{r}$，　$t\xrightarrow{\hat{P}_\pi}t$ (2-68a)

(2) 波（标量）函数的变换：$\psi(\vec{r})\to\hat{P}_\pi\psi(\vec{r})=\psi(-\vec{r})$ (2-68b)

(3) 空间反射变换算符的表示是离散的变换，无微分表示.

(4) 力学量算符的变换：

$$\begin{aligned}&\text{极矢量算符：}\hat{P}_\pi\vec{\hat{P}}\hat{P}_\pi^{-1}=-\vec{\hat{P}}\\&\text{轴矢量算符：}\hat{P}_\pi\vec{\hat{A}}\hat{P}_\pi^{-1}=\vec{\hat{A}}\\&\text{标量算符：}\quad\hat{P}_\pi\hat{S}\hat{P}_\pi^{-1}=\hat{S}\\&\text{赝标量算符：}\hat{P}_\pi\hat{S}_P\hat{P}_\pi^{-1}=-\hat{S}_P\end{aligned} \tag{2-68c}$$

(5) 空间反射变换群是离散的二元素的有限群：$\{I,\ \hat{P}_\pi\}$.

系统的空间反射不变性表示为

$$[\hat{P}_\pi,\hat{H}]=0 \tag{2-69}$$

这表明$\hat{H}$是标量算符. 因为

$$\hat{P}_\pi\hat{P}_\pi\psi(\vec{r})=\hat{P}_\pi\psi(-\vec{r})=\psi(\vec{r})$$

故

$$\hat{P}_\pi^2 = I, \quad \hat{P}_\pi^{-1} = \hat{P}_\pi \tag{2-70}$$

由

$$[\hat{P}_\pi \psi(\vec{r})]^+ = \hat{P}_\pi^+ \psi^*(\vec{r}) = \psi^*(-\vec{r}) = \hat{P}_\pi \psi^*(\vec{r}) \tag{2-71a}$$

可知$\hat{P}_\pi$是厄密的、幺正的：

$$\hat{P}_\pi^+ = \hat{P}_\pi = \hat{P}_\pi^{-1} \tag{2-71b}$$

宇称变换群只有两个元素 $\{I, \hat{P}_\pi\}$，它作用于函数空间只能生成二维空间 $\{\psi(\vec{r}), \hat{P}_\pi \psi(\vec{r})\}$，设$\hat{P}_\pi$的本征态为$\psi_\pm(\vec{r})$，则

$$\hat{P}_\pi \psi_\pm = P_\pm \psi_\pm, \quad \hat{P}_\pi^2 \psi_\pm = P_\pm^2 \psi_\pm = \psi_\pm \tag{2-72a}$$

$$P_\pm^2 = 1 \rightarrow P_\pm = \pm 1 \tag{2-72b}$$

一般的态$\psi(\vec{r})$总可以写成

$$\psi(\vec{r}) = c_+ \psi_+ + c_- \psi_- \tag{2-73a}$$

$$\psi_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(\vec{r}) \pm \psi(-\vec{r})] \tag{2-73b}$$

称 ψ_+为正宇称态，ψ_-为负宇称态.

因$\hat{H}$与$\hat{P}_\pi$对易，故$\hat{H}$的本征态应当有确定的宇称. 对中心力场中粒子的运动，宇称与 l 有关：l 的奇偶性与宇称的奇偶性一致，即 l = 奇→奇宇称，l = 偶→偶宇称，这是因为

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ \psi(-\vec{r}) &= R_{nl}(r) Y_{lm}(-\theta, \varphi + \pi) \\ &= (-1)^l R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ &= (-1)^l \psi(\vec{r}) \end{aligned} \tag{2-74}$$

因为宇称变换一般要改变张量，从而改变粒子的内禀量子态，因此对于有内禀量子数的粒子，宇称变换还必须包括作用于内禀空间的算子. 本节只讨论无自旋的标量粒子，宇称算子的内禀部分为恒元 I，因此只剩下外部空间部分.

$\hat{H}$中破坏空间反射对称性的项目的例子：自旋沿动量的投影（螺旋性）算符在宇称变换下改变符号：

$$\hat{P}_\pi \vec{P} \cdot \hat{\vec{\sigma}} \hat{P}_\pi^{-1} \to - \vec{P} \cdot \hat{\vec{\sigma}} \tag{2-75}$$

2.3.4 时间反演不变性

如果一个系统向未来演化的规律与向过去演化的规律一样，或者演化过程可逆，我们就说它具有时间反演不变性和对称性.

时间反演变换$\hat{T}$的描述及性质：

(1) 坐标的变换：$t \xrightarrow{\hat{T}} -t, \quad \vec{r} \xrightarrow{\hat{T}} \vec{r}$ (2-76a)

(2) 波函数的变换：

$$\begin{aligned} &\text{实函数：} \quad \psi(t) \xrightarrow{\hat{T}} \psi(-t) \\ &\text{复函数：} \quad \psi(t) \xrightarrow{\hat{T}} \psi^*(-t) \\ &\hat{T}\psi(t) = \psi^*(-t) \end{aligned} \tag{2-76b}$$

(3) 时间反演变换算符构成的变换群是离散的二元素的有限群 $\{\hat{T}, I\}$.

(4) 力学量算符的变换：

$$\begin{aligned} &\text{空间矢量算符：} \quad \vec{r} \to \vec{r} \\ &\text{动量（流）算符：} \quad \hat{T}\hat{\vec{P}}\hat{T}^{-1} \to -\hat{\vec{P}} \\ &\text{角动量（流）算符：} \quad \hat{T}\hat{\vec{l}}\hat{T}^{-1} \to -\hat{\vec{l}} \end{aligned} \tag{2-76c}$$

系统$\hat{H}$的时间反演不变性表示：

$$[\hat{T}, \hat{H}] = 0 \tag{2-77}$$

破坏时间反演不变性的例子：自旋磁矩在磁场中的能量算符在时间反演变换下要改变符号，即

$$\hat{T}\vec{B} \cdot \hat{\vec{\sigma}} \hat{T}^{-1} \to - \vec{B} \cdot \hat{\vec{\sigma}} \tag{2-78}$$

薛定格方程的时间反演不变性表明，ψ与$\hat{T}\psi$都满足同一薛定格方程：

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\hat{T}\psi) = H(\hat{T}\psi) \tag{2-79}$$

由式（2-77）和式（2-79）可得

$$\hat{T}(i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}) = \hat{T}H\hat{T}^{-1}\hat{T}\psi \tag{2-80a}$$

$$\hat{T}(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}T^{-1})(\hat{T}\psi) = H(\hat{T}\psi) \tag{2-80b}$$

比较薛定格方程（2--79）第二式和式（2--80b），可得

$$\hat{T}(i\hbar\frac{\partial}{\partial t})\,\hat{T}^{-1} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

考虑式（2-76a）后，进而有

$$\hat{T}(i\hbar)\,\hat{T}^{-1}\,\hat{T}\frac{\partial}{\partial t}T^{-1} = \hat{T}(i\hbar)\,\hat{T}^{-1}(-\frac{\partial}{\partial t}) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{2-81a}$$

$$\hat{T}(i\hbar)\,\hat{T}^{-1} = -i\hbar = (i\hbar)^* \tag{2-81b}$$

即在时间反演变换下，对普通数应取复共轭，从而证明了（2-76b）的正确性. 时间反演后的薛定格方程变为

$$i\hbar\frac{\partial\psi^*(-t)}{\partial t} = H\psi^*(-t) \tag{2-82a}$$

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*(\tau)}{\partial\tau} = H\psi^*(\tau),\tau = -t \tag{2-82b}$$

刚好是原方程的复共轭方程.

现在证明$\hat{T}$不是幺正算子（而是反幺正算子）：

$$\hat{T}\psi = \hat{T}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1^*\,\hat{T}\psi_1 + c_2^*\,\hat{T}\psi_2 \tag{2-83}$$

$$\langle\Phi\mid\hat{T}^+\,\hat{T}\mid\psi\rangle = \langle\hat{T}\Phi\mid\hat{T}\psi\rangle = \langle\Phi^*\mid\psi^*\rangle \neq \langle\Phi\mid\psi\rangle \tag{8-84a}$$

因此

$$\hat{T}^+\,\hat{T} \neq 1,\ \hat{T}^+ \neq \hat{T}^{-1} \tag{2-84b}$$

反幺正性来自式（2-83）. 但是

$$\hat{T}^2\psi(t) = \hat{T}\,\hat{T}\psi(t) = \hat{T}\psi^*(-t) = \psi(t) \to \hat{T}^2 = 1 \to \hat{T}^{-1} = \hat{T} \tag{2-85}$$

因此，$\hat{T}$的本征值为± 1.

反幺正算子不产生可观测量，但其本征值± 1可以用来对状态进行分类.

因时间反演变换涉及内禀量子态的改变（如复的波函数要变为其复共轭），故对于具有内禀量子数的粒子，时间反演变换还应当包含作用于内禀空间的算子. 这里的复数波函数可看作某种内禀自由度.

2.4 全同粒子系统的置换对称性与统计性守恒[6]

2.4.1 全同粒子

全同粒子是指内部量子数相同的粒子，如电子、质子、中子等. 对于同一种原子、分子，如果内部电子有激发，则可以根据不同的内部电子的量子数及相应的不同光谱区分它们，因而不是全同粒子. 两个粒子可区分的条件是有一个内部特征不同. 如果粒子的内部特征都一样，它们就不能区分了.

全同粒子的概念是一个微观的概念. 对于宏观粒子，粒子不可“区分”只是一个认识论的概念：人们看不出两个粒子的微小差别，而实际上是有差别的. “世界上没有两片完全相同的树叶”，宏观粒子是不可能全同的.

而微观粒子的不可区分性则是客观的属性，是可以探测其物理效应（统计性）的物理属性.

2.4.2 置换对称性

2.4.2.1 先考虑对换

对于 A 个全同粒子组成的系统，它的状态波函数是所有粒子坐标的函数：

$$\psi = \psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A) \tag{2-86}$$

这里的坐标 $\{x_i\}$ 包括粒子的空间坐标和自旋同位旋等内部坐标. 设 $\hat{P}_{ij}$ 是一对坐标 $\{x_i, x_j\}$ 的对换算符，$\hat{P}_{ij}$ 作用如下：

(1) 对坐标的变换：
$$\hat{P}_{ij}\ (x_i,\ x_j) = (x_j,\ x_i) \tag{2-87}$$

(2) 对波函数的变换：

$$\begin{aligned}&\hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)\\ =&\psi(x_1, x_2, \cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots, x_A)\end{aligned}$$

因为

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ij}^2\psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A) &= \hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots, x_A)\\ &= \psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)\end{aligned}$$

所以

$$\hat{P}_{ij}^2 = 1 \rightarrow \hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij} \tag{2-88}$$

即$\hat{P}_{ij}$的本征值为± 1.

以下证明$\hat{P}_{ij}$是幺正厄密算符：

因为

$$\begin{aligned}
&\langle \hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A) \mid \hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)\rangle \\
&= \langle \psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A) \mid \hat{P}_{ij}^{+}\hat{P}_{ij}\psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)\rangle \\
&= \langle \psi(x_1, x_2, \cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots, x_A) \mid \psi(x_1, x_2, \cdots, x_j, \cdots, x_i, \cdots, x_A)\rangle \\
&= \langle \psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A) \mid \psi(x_1, x_2, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_A)\rangle
\end{aligned} \tag{2-89a}$$

$$\hat{P}_{ij}^{+}\hat{P}_{ij} = 1 \rightarrow \hat{P}_{ij}^{+} = \hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{P}_{ij} \tag{2-89b}$$

所以$\hat{P}_{ij}$是幺正的和厄密的，其本征值为可观测量. 对于两个粒子的系统，设ψ_v是$\hat{P}_{ij}$的本征函数，则

$$\hat{P}_{ij}\psi_v = p_v\psi_v, \quad p_v = \pm 1, \quad v = \pm 1 \tag{2-90}$$

大家知道，两个粒子系统的波函数的对称性的确是可观测的.

2.4.2.2 推广到置换

置换运算$\hat{P}$是粒子坐标的一切可能的交换. 对于全同粒子系统，交换粒子坐标不改变系统状态，其波函数对于任意两个粒子坐标的交换应当是同一个态，故对置换变换有：

$$\hat{P}\psi_v = p\psi_v \tag{2-91}$$

因置换可以分解成若干对换的乘积，由此可证明$\hat{P}$也是厄密的和幺正的：

$$\hat{P} = \hat{P}^{+} = \hat{P}^{-1} \tag{2-92}$$

故两次置换使波函数还原：

$$\hat{P}^2\psi_v = p^2\psi_v = \psi_v \rightarrow p^2 = 1 \rightarrow p = \pm 1 \tag{2-93}$$

即ψ_v是$\hat{P}$的本征态，其本征值$p = \pm 1$.

因此对全同粒子系统，波函数对交换粒子具有对称性，而且只有两种可能

性：若$\hat{P}$是奇置换算符，则其本征值

$P=-1$,波函数完全反对称 —— 费米系统

$P=+1$,波函数完全对称 —— 玻色系统

2.4.2.3 全同粒子的$\hat{H}$的置换对称性

全同粒子系统的置换对称性也可以从$\hat{H}$讨论. 因为粒子是全同的，系统的性质不因交换粒子的坐标而改变，所以

$$\hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1}=\hat{H},\quad [\hat{P},\hat{H}]=0 \tag{2-94}$$

对一般力学量算子有

$$\hat{P}\hat{O}\hat{P}^{-1}=\hat{O} \tag{2-95}$$

若ψ是$\hat{H}$的本征态，即

$$\hat{H}\psi=E\psi \tag{2-96}$$

则由式（2-94）可证，$\hat{P}\psi$也是$\hat{H}$的本征态，且其本征值仍为E：

$$\hat{H}\hat{P}\psi=\hat{P}\hat{H}\psi=E\hat{P}\psi \tag{2-97}$$

对任一置换$\hat{P}$，总可以作线性组合，使得$\psi_{\pm}=\psi\pm\hat{P}\psi$对$\hat{P}$具有：

$$\hat{P}\psi_{\pm}=\hat{P}(\psi\pm\hat{P}\psi)=p_{\pm}\psi_{\pm},\quad p_{\pm}=\pm 1 \tag{2-98}$$

由于置换是离散变换，其本征值只有两个，而系统的p又守恒，因此，对于一个系统，$p_{\pm}$只能取一个值：若$\hat{P}$是奇置换算符，对费米子系统$p_{-}=-1$，对玻色子系统$p_{+}=+1$，达到了同一结论.（上述$\psi_{\pm}$只是$\hat{P}$的本征函数，并非全同粒子的波函数；后者要对一切可能的置换对称化（反对称化），见后文.）

$\hat{P}$和$\hat{P}_{ij}$是厄密的可观测量，对费米子系统，从 Pauli 效应可观测到$p=-1$及波函数的完全反对称性；从玻色－爱因斯坦凝聚，可观测到玻色子系统的$p=+1$及玻函数的完全对称性.

2.4.2.4 运动方程协变性

从$\hat{H}$的不变性可得出定态和时间有关的薛定格方程的协变性：

$$\hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1}\hat{P}\psi = \hat{H}(P\psi) = E(P\psi) \tag{2-99a}$$

$$\hat{P}i\hbar\frac{\partial\psi(x_1,x_2,\cdots,x_n)}{\partial t} = \hat{P}\hat{H}\psi(x_1,x_2,\cdots,x_n)$$

$$i\hbar\frac{\partial(P\psi)}{\partial t} = \hat{P}\hat{H}\hat{P}^{-1}\hat{P}\psi = \hat{H}(P\psi) \tag{2-99b}$$

2.4.3 置换群

n 个粒子所有可能的置换构成一个群，称置换群 S_n. 由全排列可知，S_n 有 $n!$ 个元素，$S_n = \{\hat{S}_i | i=1, 2, \cdots, n!\}$. 一切置换都可以分解成若干对换的乘积. 这种分解虽不唯一，但分解成的对换的个数的奇偶性不变. 由于 S_n 有 $n!$ 个不同的元素，一个多体系统的波函数通过 S_n 作用可以生成 $n!$ 个不同状态 $\{\hat{S}_i\psi | i=1, 2, \cdots, n!\}$，因此，这个状态空间是 $n!$ 维的，是 S_n 群的正则表示空间. 根据群表示论，正则表示空间一定是可约的，即一定可以把这个空间分解成若干个不变的子空间（不可约子空间）. 在 S_n 的任意元素作用下，每个不变空间内的状态只在这个子空间内变换，这些不变子空间对应于置换群的不可约表示，可以用如下的分布 $\{\nu_1, \nu_2, \nu_3, \cdots, \nu_n\}$ 来标记，而 ν_i 满足

$$\sum_{i=1}^{n}\nu_i = n \tag{2-100}$$

$$\nu_1 \geqslant \nu_2 \geqslant \nu_3 \geqslant \cdots \geqslant \nu_n$$

其中，有一个不可约表示是 $\{n, 0, \cdots, 0\}$，即

$$\nu_1 = n, \quad \nu_i = 0, \quad i = 2,3,\cdots,n \tag{2-101}$$

其表示空间是一维的，态矢对粒子的任意交换是完全对称的，它描述的是玻色子系统. 另一个不可约表示是 $\{1, 1, \cdots, 1\}$，即

$$\nu_i = 1, \quad i = 1,2,\cdots,n \tag{2-102}$$

其表示空间也是一维的，态矢对粒子的任意交换是完全反对称的，它描述的是费米子系统. 在这两种表示之间还有许多其他不可约表示，对于全同粒子系统是非物理的，但若把多体系统的空间坐标波函数和自旋坐标波函数分开考虑，则两种波函数的每一个都可以取互为共轭的中间型的不可约表示，两者乘起来可以构成完全反对称表示.

2.4.4 分数统计

前面讨论对换$\hat{P}_{ij}$时，认为两次对换（$\hat{P}_{ij}^2$作用）后，波函数恢复到原来的状态，这是从通常物理空间的常识得出的认识. 如果仔细分析就会对这个常识提出质疑. 把两个粒子的交换看作一个物理过程，则需要把粒子 i 从 x_i 按一定路线移动到x_j，而把粒子 j 从x_j按一定路线移动到x_i（见图 2－1）；再做一次交换，则粒子 i 又从x_j 位置回到x_i，而粒子 j 从x_i 回到x_j，这两个粒子的每一个都在 x 空间走了一个回路.

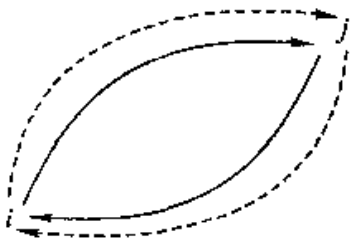


图 2－1　粒子（i，j）坐标的交换在物理空间的实现（两次交换后，每个粒子分别在物理空间走了一圈）

设粒子 i 的状态为φ_i，粒子 j 的状态为φ_j，在一般情况下，波函数绕物理空间一圈时，应当产生一个相因子，即有

$$\varphi_i \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha_i}\varphi_i \tag{2-103}$$

在通常情况下，粒子的波函数绕物理空间一圈时，或者还原（玻色子），或者反号（费米子）. 因此

$$\alpha_i = n\pi, \quad n \text{ 为整数} \tag{2-104}$$

对一次交换时，相位为

$$\alpha_i/2 = (n/2)\pi$$

一般情况下，由于空间的拓扑性质变化了（如有磁通通过），因此 α_i 可以在 [0，π] 之间取值. 如果考虑其他一些限制（如空间的拓扑守恒量可能的取值），则 α_i 可取 π 的分数：

$$\alpha_i = (q/p)\pi, \quad p \geqslant q, \text{且 } p, q \text{ 为整数} \tag{2-105}$$

这时就出现所谓的分数统计，而玻色统计是$q/p=0$的整数统计，费米统计是$q/p=1$的整数统计.

2.5 量子系统$\hat{H}$的动力学对称性[8-9]

前面介绍的是量子系统普遍的对称性，或者与时空背景的性质有关，或者与粒子的全同性有关，还有一种对称性与系统的哈密顿量$\hat{H}$的结构（相互作用的结构）有关. 对不同的系统，$\hat{H}$的结构不同，因而其对称性就不同. 因为$\hat{H}$决定系统的动力学性质，所以把与$\hat{H}$的结构有关的对称性称为动力学对称性. 动力学对称性常常是近似的，与某种特定的量子运动形态有关.

2.5.1 动力学对称性的定义

设系统的$\hat{H}$是某种动力学群G的生成元$g=\{X_i\}$的函数，可以把生成元X_i看作运动学变量，它们构成一个李代数g：

$$\hat{H}=\hat{H}(X_i),\ [X_i,\ X_j]=iC_{ij}^{k}X_k \tag{2-106}$$

g的Cartan形式为：

$$g=\{H_i,\ E_{\pm\alpha}\mid i=1,2,\cdots,r;\ \alpha=1,2,\cdots,(n-r)/2\} \tag{2-107}$$

H_i为Cartan算子，其个数r代表李代数的秩；$E_{\pm\alpha}$为升降（阶梯）算子.

设G包含一子群链：

$$G\supset G_1\supset G_2\supset\cdots\supset G_v \tag{2-108}$$

其相应的Casimir算子为

$$\hat{C}_s\quad \hat{C}_1\quad \hat{C}_2\quad \cdots\hat{C}_v \tag{2-109}$$

从群链的Casimir算子集$\{C_s,\ C_v\}$可以构成第二类完备的互易算子集

$$CSCOII=\{\hat{C}_s,\hat{C}_v,\hat{H}_i\} \tag{2-110}$$

$\hat{H}_i$为Cartan算子. $CSCOII$的共同本征函数$\psi_{n_sn_vn_i}$及相应的量子数为

$$\begin{pmatrix}\hat{C}_s\\ \hat{C}_v\\ \hat{H}_i\end{pmatrix}\psi_{n_sn_vn_i}=\begin{pmatrix}n_s\\ n_v\\ n_i\end{pmatrix}\psi_{n_sn_vn_i} \tag{2-111}$$

$\psi_{n_sn_vn_i}$完全给出了群G的所有不可约表示的基矢.

动力学对称性的定义：如果$\hat{H}$具有特殊的结构，使得$\hat{H}$通过*CSCOII*依赖于生成元$\{X_i\}$，即

$$\hat{H} = \hat{H}(X_i) = \hat{H}(\hat{C}_s(X_i), \hat{C}_v(X_i), \hat{H}_i(X_i)) \qquad (2-112)$$

则我们说系统$\hat{H}$具有以这种第二类完备的互易算子集*CSCOII*为标志的动力学对称性.

2.5.2 具有动力学对称性的系统的性质

(1) *CSCOII*与$\hat{H}$对易，是守恒量，与$\hat{H}$有共同的本征函数：

$$\left[\begin{pmatrix}\hat{C}_s\\ \hat{C}_v\\ \hat{H}_i\end{pmatrix}, \hat{H}\right] = 0 \qquad (2-113)$$

$$\hat{H}\psi_{n_s n_v n_i} = E(n_s, n_v, n_i)\psi_{n_s n_v n_i} \qquad (2-114)$$

$$E(n_s, n_v, n_i) = H(n_s, n_v, n_i) \qquad (2-115)$$

(2) 系统的本征值问题可用群论方法求解：

①$\hat{H}$的本征态就是*CSCOII*的本征态$\psi_{n_s n_v n_i}$，可用群论求得[见式(2-111)]；

②$\hat{H}$的本征能量$E(n_s, n_v, n_i) = H(n_s, n_v, n_i)$是可用群论构造的已知函数[只需把式(2-112)中的*CSCOII*用相应的本征值代入，即得本征能量，见式(2-115)].

2.5.3 例 子

2.5.3.1 外磁场中的磁转子

设磁转子的转动惯量为I，磁矩为μ，外磁场为B，则哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2I}\hat{J}^2 + \mu B\hat{J}_z \qquad (2-116)$$

其动力学群为$SU(2)$，其李代数为

$$g = \{\hat{J}_z, \hat{J}_\pm\} = \{\hat{H}_i, \hat{E}_{\pm\alpha}\}, \quad n = 3, \quad l = 1 \qquad (2-117)$$

群链为　　$SU(2) \supset U(1)$

相应的 Casimir 算子为　　$\hat{J}^2, \quad \hat{J}_z$

第二类完备互易算子集为

$$CSCOII = \{\hat{J}^2, \hat{J}_z\} \tag{2-118}$$

它们的本征解为

$$\begin{bmatrix} \hat{J}^2 \\ \hat{J}_z \end{bmatrix} \psi_{JM} = \begin{Bmatrix} J(J+1) \\ M \end{Bmatrix} \psi_{JM} \tag{2-119}$$

$$\hat{H}\psi_{JM} = E(J,M)\psi_{JM} \tag{2-120}$$

$$E(J,M) = \frac{\hbar^2}{2I}J(J+1) + \mu BM \tag{2-121}$$

严格讲，这里转子的波函数应为 D－函数，为了简化问题，省去了内禀角动量算子 $\hat{J}_3$ 及相应的量子数 K，D－函数约化为 ψ_{JM}.

2.5.3.2　*SU*(3)夸克模型的动力学对称性

系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = a\hat{C}_2 + b\hat{C}_3 + c\hat{Y} + d\hat{T}^2 + e\hat{T}_3 \tag{2-122}$$

其动力学群为 $SU(3)$，其李代数为

$$SU(3) = \{\hat{Y}, \hat{T}_3, \hat{E}_{\pm\alpha} \mid \alpha = 1,2,3\} \tag{2-123}$$

群链为

$$SU(3) \supset U(2) \supset SU(2) \supset U(1) \tag{2-124}$$

相应的 Casimir 算子为

$$\hat{C}_2, \hat{C}_3 \quad \hat{Y} \quad \hat{T}^2 \quad \hat{T}_3$$

$\hat{Y}$为超荷，$\{T, T_3\}$ 为同位旋及其第三分量. 第二类完备算子集为

$$CSCOII = \{\hat{C}_2, \hat{C}_3, \hat{Y}, \hat{T}^2, \hat{T}_3\} \tag{2-125}$$

CSCOII 的本征解为

$$\begin{bmatrix} \hat{C}_2 \\ \hat{C}_3 \\ \hat{Y} \\ \hat{T}^2 \\ \hat{T}_3 \end{bmatrix} \psi_{\lambda\mu YTM_T} = \begin{bmatrix} C_2(\lambda\mu) \\ C_3(\lambda\mu) \\ Y \\ T(T+1) \\ M_T \end{bmatrix} \psi_{\lambda\mu YTM_T} \tag{2-126}$$

$$\hat{H}\psi_{\lambda\mu YTM_T} = E(\lambda,\mu,Y,T,M_T)\psi_{\lambda\mu YTM_T} \tag{2-127}$$

$$E(\lambda,\mu,Y,T,M_T) = aC_2(\lambda\mu) + bC_3(\lambda\mu) + cY + dT(T+1) + eM_T \tag{2-128}$$

$$C_2(\lambda\mu) = \frac{2}{3}[(\lambda+3)(\lambda+\mu)+\mu^2] \tag{2-129}$$

C_3 为$SU(3)$的三阶 Casimir 算子.

2.5.3.3 氢原子：$SO(4)$动力学群

氢原子的能级 E_n 对角动量量子数 l 简并，不同 l 的状态具有相同的能量，表明氢原子的$\hat{H}$中应有一个比$SO(3)$转动群更大的对称群，可以把不同 l 的状态混合起来以形成能级对不同 l 的状态简并. 该群应包含$SO(3)$群作为其子群，使得（l，m）是好量子数，而$\hat{H}$应是这个大群的 Casimir 算子的函数，角动量的 Casimir 算子只是它的一部分. 比$SO(3)$群稍大的群是$SO(4)$群，因为这个$SO(4)$群与氢原子的$\hat{H}$的结构有关，所以叫做氢原子的动力学群. 氢原子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{\kappa}{r}, \quad \kappa = e^2 \tag{2-130}$$

显然$\hat{H}$具有$SO(3)$对称性，即

$$[\hat{L}_i,\hat{H}] = 0 \quad so(3) = \{\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z\} \tag{2-131}$$

除此之外，还可找到另一矢量算子 $\vec{\hat{R}}$

$$\vec{\hat{R}} = \frac{1}{2\mu\kappa}(\hat{p}\wedge\hat{L} - \hat{L}\wedge\hat{p}) - \frac{\vec{r}}{r} \tag{2-132}$$

$$[\vec{\hat{R}},\hat{H}] = 0, \quad \hat{R}\cdot\hat{L} = \hat{L}\cdot\hat{R} = 0 \tag{2-133}$$

$\hat{L}$和$\hat{R}$一起构成$so(4)$代数，其对易关系为

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] = i\hbar\, \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{L}_\gamma \tag{2-134a}$$

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{R}_\beta] = i\hbar\, \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{R}_\gamma \tag{2-134b}$$

$$[\hat{R}_\alpha, \hat{R}_\beta] = -\frac{2\hat{H}}{\mu\kappa^2} i\hbar\, \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{L}_\gamma \tag{2-134c}$$

$|\hat{L}_\alpha|$ 构成其子代数.

因$\hat{H}$与$\hat{L}$和$\hat{R}$对易，故可看作常数（在$SO(4)$不可约表示中，为一个常数）. 令

$$\hat{A} = \sqrt{-\frac{\mu\kappa^2}{2\hat{H}}}\,\hat{R} \tag{2-135}$$

$$\hat{I} = \frac{1}{2}(\hat{L} + \hat{A}), \quad \hat{K} = \frac{1}{2}(\hat{L} - \hat{A}) \tag{2-136}$$

则

$$[\hat{I}_\alpha, \hat{K}_\beta] = 0 \tag{2-137a}$$

$$[\hat{I}_\alpha, \hat{I}_\beta] = i\hbar\, \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{I}_\gamma \tag{2-137b}$$

$$[\hat{K}_\alpha, \hat{K}_\beta] = i\hbar\, \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{K}_\gamma \tag{2-137c}$$

$$\hat{I}^2 = \hat{K}^2 \tag{2-138}$$

故$\hat{I}_\alpha$和$\hat{K}_\beta$分别组成$su_I(2)$和$su_K(2)$代数，有如下的同构关系：

$$so(4) \approx su_I(2) \otimes su_K(2)$$

它们的 Casimir 算子的本征值为

$$\hat{I}^2 \to I(I+1)\hbar^2, \quad \hat{K}^2 \to K(K+1)\hbar^2 \tag{2-139}$$

$$I = K = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots \quad I \text{ 取整数或半整数值} \tag{2-140}$$

因 $I = \frac{1}{2}(L + A) = \frac{\text{整数}}{2}$，故可以证明

$$\hat{A}^2 = -(\hat{L}^2 + \hbar^2) - \frac{\mu\kappa^2}{2\hat{H}} \tag{2-141}$$

因为 $L \cdot R = R \cdot L = 0$，上式可写成

$$(\hat{A}+\hat{L})^2 = 4\hat{I}^2 = -\frac{\mu\kappa^2}{2\hat{H}} - \hbar^2 \tag{2-142}$$

所以有

$$\hat{H} = \frac{\mu\kappa^2}{2}/(4\hat{I}^2+\hbar^2) \tag{2-143}$$

可见$\hat{H}$是$SO(4)$的 Casimir 算子$\hat{I}^2=\hat{K}^2$ 的函数，很容易求得能量的本征值：

$$\begin{aligned} E(I) &= \frac{-\mu\kappa^2}{2[4(I(I+1)+1)]\hbar^2} \\ &= -\frac{\mu\kappa^2}{2(2I+1)^2\hbar} \\ &= -\frac{\mu\kappa^2}{2n^2\hbar^2}, \quad n = 2I+1 \end{aligned} \tag{2-144}$$

从$\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{I}}+\hat{\vec{K}}$知，$\hat{L}$是两个长度相等的矢量$\vec{I}$与$\vec{K}$的矢量和，其取值为

$$\begin{aligned} l &= |I-K|, |I-K|+1, \cdots, (I+K) \\ &= 0,1,2,\cdots,2I = n-1, \quad |\vec{I}| = |\vec{K}| \end{aligned} \tag{2-145}$$

由于$\hat{L}$与$\hat{H}$对易，l 和 m 也是守恒量，系统的状态可用（n，l，m）标志，因此 $\psi=\psi_{nlm}$. 又由于$\hat{H}$只是$SO(4)$的 Casimir 算子的函数，并与$\hat{L}$对易，故 E_n 对 lm 简并. 由于 L 是长度相同的$\vec{I}$与$\vec{K}$的矢量和，故 L 的取值有一范围为 $l=0, 1, \cdots, 2I$.

从上述计算可见，用动力学对称性理论和群论方法，比较容易求得氢原子的能级，但波函数的计算却比较复杂. 径向波函数$R_{nl}(r)$是 Casimir 算子$\hat{I}^2=\hat{K}^2$的本征函数，首先需要求得$\hat{I}^2=\hat{K}^2$ 的用径向坐标及其微分的表示，然后求解其本征方程. 这是一个复杂的任务.

2.5.3.4 三维各向同性谐振子的$SU(3)$对称性

三维各向同性谐振子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2) \tag{2-146}$$

其能级也对角动量简并，这表明它有一个比转动群$SO(3)$更大的对称群，把不同 l 的状态混合起来以形成能级对不同l 的状态简并. 由于$\hat{H}$的结构不同于氢原子，因此动力学群不是$SO(4)$而是$SU(3)$. 从下面的分析可以确认这点.

引进产生、消灭算子：

$$a_i = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_i + \mathrm{i}\frac{\hat{p}_i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right)$$

$$a_i^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x_i - \mathrm{i}\frac{\hat{p}_i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right), \quad i = x,y,z \tag{2-147}$$

从 $[x_i,\ p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ 可得

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}, \quad [a_i^+, a_j^+] = [a_i, a_j] = 0 \tag{2-148}$$

引进二阶张量算子：

$$\hat{T}_{ij} = \frac{1}{2}(a_i^+ a_j + a_j a_i^+) \tag{2-149}$$

易证

$$[\hat{T}_{ij}, \hat{T}_{rs}] = \delta_{jr}\hat{T}_{is} - \delta_{is}\hat{T}_{jr} \tag{2-150}$$

这正是$U(3)$的代数，其 Cartan 算子为

$$\hat{H}_i = \hat{T}_{ii} = a_i^+ a_i + \frac{1}{2}, \quad i = x,y,z \tag{2-151}$$

而$\hat{N} = \sum_i \hat{H}_i = \sum_i \left(\hat{n}_i + \frac{1}{2}\right)$ $(\hat{n}_i = a_i^+ a_i)$，是$U(3)$的一阶 Casimir 算子.

在二次量子化表象中（参见本书第 4 章），

$$\hat{H} = \left(\hat{n}_x + \hat{n}_y + \hat{n}_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\,\omega = \hat{N}\hbar\,\omega \tag{2-152}$$

可见系统的哈密顿量是$U(3)$群一阶 Casimir 算子的函数，其本征能量为

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\,\omega, \quad n = n_x + n_y + n_z = \text{声子数} \tag{2-153}$$

由于各向同性谐振子的$\hat{H}$只是$U(3)$Casimir 算子的函数，故 E_n 对 lm 简并. 事实上，从$\hat{T}_{ij}$可以构成角动量算子：

$$\begin{cases} \hat{L}_x = -i\hbar\,(\hat{T}_{yz} - \hat{T}_{zy}) \\ \hat{L}_y = -i\hbar\,(\hat{T}_{zx} - \hat{T}_{xz}) \\ \hat{L}_z = -i\hbar\,(\hat{T}_{xy} - \hat{T}_{yx}) \end{cases} \tag{2-154}$$

从对易子

$$[\hat{L}_i, \hat{H}] = 0 \rightarrow [\hat{L}_i, \hat{N}] = 0 \tag{2-155}$$

可知，$\hat{N}$的简并子空间由$\hat{L}^2$的不可约表示空间组成．由于$\hat{N}$的简并子空间的维数必须等于它所包含的各种$\hat{L}^2$的不可约表示空间的维数之和，因此，$\hat{N}$的量子数$(n+3/2)$既限定了$\hat{N}$的简并子空间的维数，又限定了l的取值范围：

$$n = \text{奇}, \quad l = 1,3,5,\cdots,n; \quad n = \text{偶}, l = 0,2,4,\cdots,n \tag{2-156}$$

E_n对lm的简并度为

$$M_n = \frac{1}{2}(n^2 + 3n + 2) \tag{2-157}$$

2.5.3.5 其 他

(1) 原子核集体运动的互作用玻色子模型（Interacting Boson Model - IBM)[10-11].

研究表明，原子核的低激发态集体运动的振动和转动能谱可以理解为与原子核的平均场的变化相对应的原子核的运动形态．因为平均场的变化会带动大量核子随之运动，所以与平均场的变化相对应的原子核的运动是集体运动．把原子核看作液滴的几何模型认为，原子核的低激发态集体运动由平均场几何形状的变化产生，特别着重研究平均场的四极形变所导致的原子核的四极振动和轴对称转动．

从微观上理解，核子随平均场的运动是核子的某种相干激发，与四极振动相对应的是角动量量子数为2的核子的相干激发．集体运动量子数应当与核子相干激发的量子数一致．因此，可以从核子－空穴或核子对的相干激发算子出发，理解原子核的集体运动，而这些激发算子常常又构成代数，所以把这种模型理论叫做集体运动的代数模型．

从上述观点出发，Arima和Iachello认为，低能原子核的集体运动是由核子对的相干激发引起的：角动量耦合成0和2的核子对相互作用和相互转化，造成原子核的集体振动和转动．由于角动量耦合成0和2的核子对象玻色子，作为初级近似，略去这些玻色子的费米子结构，用理想的角动量为0的s玻色子和角动量为2的d玻色子来代表这些核子对，并引进它们的产生和湮灭算符$|s^+, s; d_\mu^+, d_\mu|$，从而得到满足下述关系的对易：

$$[s,s^+] = 1, [d_\mu, d_v^+] = \delta_{\mu v} \tag{2-158}$$

s玻色子和d玻色子彼此对易．由上述6种玻色子的产生和湮灭算符可以构成36个双线性的，保持s和d玻色子总数守恒（费米子数守恒要求）的$SO(3)$

不可约张量算子：

$$
\begin{aligned}
&G_0^{(0)}(ss) = [s^+ \times s]_0^{(0)} && 1\text{个}\\
&G_0^{(0)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(0)} && 1\text{个}\\
&G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} && 3\text{个}\\
&G_\kappa^{(2)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(2)} && 5\text{个}\\
&G_\kappa^{(3)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(3)} && 7\text{个}\\
&G_\kappa^{(4)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(4)} && 9\text{个}\\
&G_\kappa^{(2)}(sd) = [s^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(2)} && 5\text{个}\\
&G_\kappa^{(2)}(ds) = [d^+ \times s]_\kappa^{(2)} && 5\text{个}\\
&\tilde{d}_\mu = (-1)^\mu d_{-\mu}
\end{aligned}
\qquad (2-159)
$$

可以证明，上述 36 个不可约张量算子构成 U（6）群的生成元，满足 u（6）代数．加上 s 和 d 玻色子总数守恒（费米子数守恒的要求）的约束条件：

$$s^+ s + \sum_\mu d_\mu^+ d_\mu = N \qquad (2-160)$$

独立的 35 个生成元构成 $su(6)$ 代数．按假定，上述 $su(6)$ 代数生成的所有不等价不可约表示空间代表了所有 s 和 d 玻色子激发生成的希尔伯特空间，自然包括了原子核低能集体运动子空间．这些集体运动物理子空间应当满足 s 和 d 玻色子数守恒和玻色子的全同性原理．由于原子集体运动具有确定的角动量（JM），这些集体运动物理子空间应当具有 $SO(3)$ 和 $SO(2)$ 量子数，因此，原子核集体运动子空间应当存在于一些特定的不变子空间的约化系列中．这些约化系列的起点是 $SU(6)$，而终点是 $SO(3)$ 及其子群 $SO(2)$．令人吃惊的是，大自然通过群论的数学的严格性，限定这样的约化系列只有三种，它们由下列三个群链来实现：

群链Ⅰ：$SU(6) \supset U(5) \supset O(5) \supset SO(3) \supset SO(2)$

$U(5)$的 25 个生成元：

$$
\begin{aligned}
&G_0^{(0)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(0)} && 1\text{个}\\
&G_\kappa^{(2)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(2)} && 5\text{个}\\
&G_\kappa^{(4)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(4)} && 9\text{个}\\
&G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} && 3\text{个}\\
&G_\kappa^{(3)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(3)} && 7\text{个}
\end{aligned}
\qquad (2-161a)
$$

$O(5)$的 10 个生成元：

$$G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \qquad 3\text{个}$$
$$G_\kappa^{(3)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(3)} \qquad 7\text{个} \qquad (2-161b)$$

$SO(3)$的3个生成元：

$$G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \qquad 3\text{个} \qquad (2-161c)$$

$SO(2)$的1个生成元：

$$G_0^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(1)} \qquad 1\text{个} \qquad (2-161d)$$

与这一群链相应的 Casimir 算子是：

$$C_1[U(5)] = G_0^{(0)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(0)} = \vec{d}^+ \cdot \vec{d} = \hat{n}_d$$

$$C_2[U(5)] = \frac{4}{5}(\vec{d}^+ \cdot \vec{d})(\vec{d}^+ \cdot \vec{d}) + (\vec{d}^+ \cdot \vec{d})$$

$$C_2[O(5)] = -\frac{1}{4}\sum_{\mu v}(-1)^{\mu+v}(d_\mu^+ \tilde{d}_v - d_v^+ \tilde{d}_\mu)(d_{-\mu}^+ \tilde{d}_{-v} - d_{-v}^+ \tilde{d}_{-\mu})$$

$$C_2[SO(3)] = \vec{L} \cdot \vec{L}, L_\kappa = \sqrt{10} G_\kappa^{(1)}(dd)$$

$$(2-162)$$

对应的量子数是 $|N, n_d, v, n_\Delta, L, M|$，其中 N 是$SU(6)$的量子数，v是$O(5)$的量子数，n_Δ是从$O(5)$向 $SO(3)$约化所需的附加量子数. 不可约基矢(集体运动波函数) 为：$|N, n_d, v, n_\Delta, L, M\rangle$.

群链Ⅱ：　$SU(6) \supset U(3) \supset SO(3) \supset SO(2)$

$U(3)$的9个生成元：

$$G_0^{(0)}(ss) + \sqrt{5} G_0^{(0)}(dd) = [s^+ \times s]_0^{(0)} + [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(0)} \qquad 1\text{个}$$
$$G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \qquad 3\text{个}$$

$$(2-163a)$$

$$Q_\kappa = G_\kappa^{(2)}(sd) + G_\kappa^{(2)}(ds) - \frac{\sqrt{7}}{2} \quad G_\kappa^{(2)}(dd) \qquad 5\text{个}$$

$SO(3)$的3个生成元：

$$G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_\kappa^{(1)} \qquad 3\text{个}$$

$$(2-163b)$$

$SO(2)$的1个生成元：

$$G_0^{(1)}(dd) = [d^+ \times \tilde{d}]_0^{(1)} \qquad 1\text{个}$$

$$(2-163c)$$

与这一群链相应的 Casimir 算子是

$$C_2[U(3)] = \vec{Q}\cdot\vec{Q} + \frac{3}{8}\vec{L}\cdot\vec{L} \qquad (2-164)$$

对应的量子数是 $|N, \lambda, \mu, x(K), L, M|$，其中 N 是$SU(6)$的量子数，(λ, μ) 是U(3)的量子数，$x(K)$是从$U(3)$向 $SO(3)$约化所需的附加量子数.

不可约基矢（集体运动波函数）为：$|N, \lambda, \mu, x(K), L, M\rangle$，代表一种特定的集体运动.

群链Ⅲ： $SU(6)\supset O(6)\supset O(5)\supset SO(3)\supset SO(2)$

$O(6)$的 15 个生成元：

$$\begin{aligned} &G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+\times\tilde{d}]_\kappa^{(1)} && 3\text{个} \\ &G_\kappa^{(3)}(dd) = [d^+\times\tilde{d}]_\kappa^{(3)} && 7\text{个} \\ &G_\kappa^{(2)}(sd) + G_\kappa^{(2)}(ds) && 5\text{个} \end{aligned} \qquad (2-165a)$$

$O(5)$的 10 个生成元：

$$\begin{aligned} &G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+\times\tilde{d}]_\kappa^{(1)} && 3\text{个} \\ &G_\kappa^{(3)}(dd) = [d^+\times\tilde{d}]_\kappa^{(3)} && 7\text{个} \end{aligned} \qquad (2-165b)$$

$SO(3)$的 3 个生成元：

$$G_\kappa^{(1)}(dd) = [d^+\times\tilde{d}]_\kappa^{(1)} \qquad 3\text{个} \qquad (2-165c)$$

$SO(2)$的 1 个生成元：

$$G_0^{(1)}(dd) = [d^+\times\tilde{d}]_0^{(1)} \qquad 1\text{个} \qquad (2-165d)$$

与这一群链相应的 Casimir 算子是

$$C_2[O(6)] = 2\sum_\mu (-1)^\mu (d_\mu^+ s - s^+\tilde{d}_\mu)(d_{-\mu}^+ s - s^+\tilde{d}_{-\mu}) - C_2[O(5)] \qquad (2-166a)$$

$$C_2[O(5)] = -\frac{1}{4}\sum_{\mu\upsilon}(-1)^{\mu+\upsilon}(d_\mu^+\tilde{d}_\upsilon - d_\upsilon^+\tilde{d}_\mu)(d_{-\mu}^+\tilde{d}_{-\upsilon} - d_{-\upsilon}^+\tilde{d}_{-\mu}) \qquad (2-166b)$$

对应的量子数是 $|N, \sigma, \upsilon, n_\Delta, L, M|$，其中 N 是$SU(6)$的量子数，σ 是O(6)的量子数，υ 是O(5)的量子数，n_Δ是从$O(5)$向 $SO(3)$约化所需的附加量子数. 不可约基矢（集体运动波函数）为：$|N, \sigma, \upsilon, n_\Delta, L, M\rangle$.

上述 6 个 Casimir 算子都是$SO(3)$群的标量. $C_1[U(5)]$是 d 玻色子数算符，其他 5 个穷尽了二玻色子相互作用标量算符的一切可能形式. 因此，包含玻色能量和二体相互作用的哈密顿量可写成它们的线性组合：

$$H_{IBM} = E_0 + \varepsilon C_1[U(5)] + \alpha C_2[U(5)] + \beta C_2[O(5)] +$$

$$\gamma C_2[O(3)] + \delta C_2[U(3)] + \eta C_2[O(6)] \qquad (2-167)$$

由于三条群链的 Casimir 算子一般不对易，因此它们的量子数是不能同时确定的，也就是说，上述三个群链对应的集体运动是混杂的．然而，核物理实验告诉人们，在一定场合，上述三条群链可分别单独实现：

①满壳外有少数核子（质子或中子）的原子核，其低能集体运动由第一条群链描述：

$$H^{\mathrm{I}}_{IBM} = E_0 + \epsilon C_1[U(5)] + \alpha C_2[U(5)] + \beta C_2[O(5)] + \gamma C_2[O(3)] \qquad (2-168)$$

其本征能谱为：

$$E^{\mathrm{I}}_{IBM} = E_0 + \epsilon n_d + \alpha \frac{4}{5} n_d(n_d+1) + \beta \frac{1}{2} v(v+3) + \gamma L(L+1) \qquad (2-169)$$

集体运动本征波函数为：

$$|N, n_d, v, n_\Delta, L, M\rangle \qquad (2-170)$$

代表四极集体振动．

②满壳外有较多核子（质子或中子）的原子核，其低能集体运动由第二条群链描述：

$$H^{\mathrm{II}}_{IBM} = E_0 + \gamma C_2[O(3)] + \delta C_2[U(3)] \qquad (2-171)$$

其本征能谱为：

$$E^{\mathrm{II}}_{IBM} = E_0 + \delta \frac{1}{2}(\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3\lambda + 3\mu) + \gamma L(L+1) \qquad (2-172)$$

集体运动本征波函数为：

$$|N, \lambda, \mu, x(K), L, M\rangle \qquad (2-173)$$

代表形变核的集体转动．

③满壳内有少数空穴（质子或中子空穴）的原子核，其低能集体运动由第三条群链描述：

$$H^{\mathrm{III}}_{IBM} = E_0 + \beta C_2[O(5)] + \gamma C_2[O(3)] + \eta C_2[O(6)] \qquad (2-174)$$

其本征能谱为：

$$E^{\mathrm{III}}_{IBM} = E_0 + \eta 2\sigma(\sigma+4) + \beta \frac{1}{2} v(v+3) + \gamma L(L+1) \qquad (2-175)$$

集体运动本征波函数为：

$$|N,\sigma,v,n_{\Delta},L,M\rangle \qquad (2-176)$$

代表较软的 γ - 集体振动.

(2) 高温超导体的$SU(4)$和 $SO(5)$动力学对称性[12-13].

近来，有人提出高温超导可用$U(4)\supset SU(4)$动力学对称性来描述，它的三个群链为

$$\begin{array}{lll} & (\mathrm{I})\ SO\ (4)\otimes U\ (1) & \text{反铁磁相}\ (AF) \\ U(4)\supset SU(4)\supset & (\mathrm{II})SO(5)\ \supset SU_s(2)\otimes U(1) & \text{自旋玻璃相}\ (SG) \\ & (\mathrm{III})SU_p(2)\times SU_s(2) & \text{角动量和电荷守恒}\quad \text{超导相}\ (SC) \end{array}$$

分别描述高温超导体的（Ⅰ）反铁磁相、（Ⅱ）自旋玻璃相（临界动力学对称性）和（Ⅲ）超导相.

2.6 对称性与群论[1-7]

2.6.1 对称性导致对称群

研究系统的对称性必须引进对称变换，而对称变换的全体构成一个群，称对称群. 这样，系统对称性的研究在数学上就变成一个群论问题. 量子系统$\hat{H}$的求解问题就可以借助群论方法加以解决. 因此，群论是研究物理系统的对称性的最有力的数学工具. 作为物理学工作者，最重要是把群论语言与物理内涵紧密联系起来.

2.6.2 连续的对称变换导致李群——连续可微群

李群的发展最为完善，因而称为经典群. 我们研究的$SU(2)$、$SU(3)$、$SU(4)$、$SO(3)$，$SO(4)$、$SO(5)$，还有$SP(6)$等，都属于经典李群.

2.6.3 不连续的对称变换导致离散群

空间反射变换、时间反演变换、置换变换都属于离散变换，离散变换导致离散群.

2.6.4 晶体的平移群是一般空间平移变换群的离散子群，而晶体的点群是$O(3)$群的离散子群

平移群＋点群，构成晶体点阵空间的空间群（费德罗夫群），它决定了自

然界的晶体只能有230种结构. 这再一次表明了时空和背景的对称性在一定程度上决定了自然界事物的某些普通而基本的属性. 量子力学的对称性理论正是研究量子系统的外部和内部对称性与量子运动形态和守恒定律之间的联系. 这是一门形式非常优美、内涵极其深刻的学问.

【参考文献】

Ⅰ 群论与量子力学

1 H. Weyl. The Theory of Groups and Quantum Mechanics. New York: Dover, 1950

2 W·顾莱纳,B·缪勒. 量子力学:对称性. 北京大学出版社,2002

3 B. G. Wybourne. Classical Groups for Physicists. New York: Wiley, 1974

4 J. Q. Chen. Group Representation Theory for Physicists. Singapore: World Scientific, 1989

5 陈金全. 群表示论的新途径. 上海科技出版社, 1984

6 马中骐. 物理学中的群论. 科学出版社, 1998

7 韩其智, 孙洪洲. 群论. 北京大学出版社, 1987

Ⅱ 动力学对称性理论

8 A. Bohm, Y. Ne'eman & A. Barut eds. Dynamical Groups and Spectrum Generating Algebras. Singapore: World Scientific, 1988

9 王顺金. 人造量子系统的理论研究与代数动力学. 物理学进展,1999,19(4):331~373

Ⅲ 互作用玻色子模型

10 A. Arima & F. Iachello. Ann. Phys. 1976,99:253;1978,111:201;1978,115:325;1979,123:468

11 徐躬耦,杨亚天. 原子核理论——核结构与核衰变部分. 高等教育出版社, 1987

Ⅳ 高温超导体中的动力学对称性理论

12 S. C. Zhang. Science. 1997,275:1089

13 L. A. Wu, M. Guidry, Y. Sun & C. L. Wu, arXiv: cond-mat/9905436, 9903150;
Y. Sun, M. Guidry, L. A. Wu & C. L. Wu, arXiv: cond-mat/9912072.

第3章　多体理论（Ⅰ）：平均场理论

平均场理论是量子多体理论的零级近似，是进一步近似的出发点，也是最重要、最流行的量子多体理论，因而成为量子多体理论的基础. 平均场理论所包含的物理概念是量子多体理论的精华，是微观多体世界最重要的属性的深刻反映.

3.1　量子力学多体问题[1]

3.1.1　量子多体系统与量子多体问题

量子力学问题，绝大多数是量子多体系统的问题，包括：①量子多体系统结构的研究，如原子、分子、原子核的结构，固体的结构及其电磁性质. ②量子多体系统碰撞与反应过程的研究，如原子、分子碰撞、原子核碰撞与反应截面的计算. ③量子多体系统衰变性质的研究，如原子、分子的发光，原子核的 α、β、γ 衰变与裂变.

多体系统的分类：

(1) 按照粒子的种类，量子多体系统分为：①费米子系统；②玻色子系统；③费米子－玻色子混杂系统. 上述系统各自对应的例子：①如原子、分子中的电子系统，原子核系统，固体中的电子系统；②如固体中的声子系统，光子系统；③如固体中的电子－声子系统，激光与原子相互作用系统.

(2) 按照微观粒子相互作用的强弱，多体系统可分为：①弱作用或弱耦合系统，如电磁作用与弱作用系统；②强作用或强耦合系统，如原子核系统，电子强耦合系统.

非相对论量子多体理论的任务是从多体相互作用和多体薛定格方程出发，计算多体系统的各种性质.

3.1.2　量子多体理论：微观理论和等效理论

量子多体理论可分为从第一原理出发的微观多体理论和从等效相互作用出

发的唯象或半唯象理论.

由于量子多体问题的复杂性，除少数量子多体问题（如氢原子问题）外，绝大多数量子多体系统很难从第一原理出发求解，合理的近似成为求解量子多体问题的关键，其中平均场理论是最成功的近似理论，已成为处理量子多体问题的其他各种理论方法的出发点，也是建立各种等效相互作用理论的基础.

3.1.3 微扰理论和非微扰理论

平均场理论本身就是非微扰的. 在平均场近似的基础上，可以得到零级近似的哈密顿量$\hat{H}_0$. 系统的$\hat{H}$可以写成

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_{\text{res}} \tag{3-1}$$

平均场近似是最简单的非微扰理论，它通过自洽场方法把相互作用的主要部分包括到 平均场之中，使得剩余相互作用 V_{res}变得比较微弱，因而可以用微扰论方法求解. 基于平均场的微扰论在原子物理和原子核物理中对某些问题的处理相当成功.

但是，对于另一些问题，特别是核物理中的问题和固体物理中的强关联问题，对 V_{res}作微扰处理仍不能得到好的结果，这就需要发展处理 V_{res}的非微扰理论，这是第 4、第 5 两章要研究的问题.

3.2 平均场理论：最简单的非微扰理论和处理多体问题的出发点[2-3]

3.2.1 平均场理论的基本思想

存在相互作用的多粒子系统，每个粒子都受到周围其他粒子的作用，这些周围粒子的相互作用的叠加并对其粒子密度分布（粒子云）的平均，在零级近似下，将产生一个平均势场. 这个平均势场是一个单体算符，只依赖于受作用的这个粒子的坐标，但不是外界施加的外场，而是其他粒子对这个粒子相互作用叠加平均的结果. 这个平均场一般随时间变化，但在定态极限下，它是静态的. 对于全同粒子系统，特别是费米子系统，由于多体系统波函数或密度矩阵中存在着交换项，因此平均场相应地也包含一个非定域的交换项，它与动量相关势场等效. 对于带自旋的粒子，平均场还包含自旋－轨道力.

对于二体相互作用的多体系统，哈密顿量$\hat{H}$包含一体算符（只依赖一个粒子的坐标）的动能项和二体算符（只依赖两个粒子的坐标）的相互作用项. 而平均场是单体算符，它虽然可以包含二体相互作用的主要效应，但不能完全代替二体相互作用项，只能是对二体相互作用的单体近似. 这些不能用平均场概括的二体相互作用，称为剩余相互作用 V_{res}. 因此，考虑了平均场以后，系统有一个由平均场单体算子组成的哈密顿量$\hat{H}_0$（又称独立粒子近似下的哈密顿量），还有一个平均场不能包括的二体剩余相互作用 V_{res}. 系统总的哈密顿量应为二者之和，$\hat{H}=\hat{H}_0+V_{\text{res}}$. $\hat{H}_0$ 产生平均场支配下的系统的独立粒子运动，类似于外场作用下产生的独立粒子运动；而剩余相互作用$\hat{V}_{\text{res}}$破坏独立粒子运动，把这些独立粒子运动耦合起来，产生各种各样的多体关联，以至于集体运动.

多体系统中粒子－粒子相互作用产生平均场的过程，对于定态问题，是一个非线性的自洽反馈的过程：具有确定量子态的各个粒子对某个粒子相互作用的叠加并对这些粒子的密度分布求平均后，产生了一个单体平均场；这个单体平均场反过来又产生出各个粒子的确定的量子运动，即所有粒子的量子状态决定了平均场，而平均场又产生出各个粒子的量子运动，这样就形成一个非线性的反馈过程. 对于定态，这个过程必须达到自洽：产生平均场 U 的各粒子的量子态 ψ_α 应当是平均场产生的量子态，产生各量子态的平均场应当是各量子态生成的平均场，即 $\psi_\alpha \to U \to \psi_\alpha$ 或 $U \to \psi_\alpha \to U$.

总之，平均场理论的基本思想是：①多体系统各粒子对某一粒子相互作用的叠加和平均，产生一个平均场. ②这个平均是单体算符，包括非定域（动量有关）项和自旋轨道力. ③产生平均场的过程是一个非线性反馈的过程；对定态问题，还要求自洽. ④平均场是对多体系统相互作用的非微扰的零级近似，对多体系统的正确描述应当是平均场加剩余相互作用. ⑤平均场产生多体系统的独立粒子运动，而剩余相互作用破坏这种独立粒子运动，引起量子态跃迁，产生粒子之间的多体关联，导致集团运动和集体运动.

3.2.2 平均场近似：时间有关的 Hartree－Fock 理论（TDHF）与 Hartree－Fock 理论（HF）

如上所述，在平均场近似下，剩余相互作用被略去，系统的哈密顿量成为单体算符，各个粒子在平均场中彼此独立地运动，粒子之间通过平均场相互联

系，互通信息．因此，平均场近似又称独立粒子近似．与外场中的独立粒子运动不同，平均场近似下的独立粒子运动的量子态和产生这些量子态的平均场必须有互为因果的反馈关系．因此，自洽平均场是随多粒子系统各粒子的量子态的变化而变化的，不像外场是固定不变的．

3.2.2.1 时间有关的平均场近似：TDHF

在时间有关的平均场近似下，每个粒子有随时间变化的独立的量子态，因此可以假定系统中 A 个粒子占据 A 个时间有关的单粒子态 $\varphi_\alpha(\vec{r}, t)$，满足正交归一化条件

$$\langle \varphi_\alpha \mid \varphi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \tag{3-2}$$

对于费米子系统，多体系统的波函数应当是反对称化的．在独立粒子近似下，它应当是 A 个粒子的波函数的乘积的完全反对称化组合，即应是一个 Slater 行列式：

$$\begin{aligned}\Phi_A(1\cdots A) &= \frac{1}{\sqrt{A!}}\sum_p (-1)^p P[\varphi_{\alpha_1}(1)\varphi_{\alpha_2}(2)\cdots\varphi_{\alpha_A}(A)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{A!}}\det\begin{vmatrix} \varphi_{\alpha_1}(1) & \varphi_{\alpha_1}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_1}(A) \\ \varphi_{\alpha_2}(1) & \varphi_{\alpha_2}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_2}(A) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \varphi_{\alpha_A}(1) & \varphi_{\alpha_A}(2) & \cdots & \varphi_{\alpha_A}(A) \end{vmatrix}\end{aligned} \tag{3-3}$$

例 3－1　2 粒子系统

$$\Phi_2(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(1)\varphi_2(2) - \varphi_1(2)\varphi_2(1)]$$

在独立粒子近似（即平均场近似）下，时间有关的薛定格方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi_A}{\partial t} = \hat{H}\psi_A \tag{3-4}$$

应当限制在独立粒子近似波函数 Φ_A 这个子空间内求解：

$$\psi_A \cong \Phi_A \tag{3-5}$$

$$i\hbar\frac{\partial\Phi_A}{\partial t} \cong \hat{H}\Phi_A \tag{3-6}$$

在二体相互作用情况下

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{A}\frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{A}V(ij) \tag{3-7}$$

时间有关薛定格方程的推导：

(1) 严格解：时间有关的薛定格方程 (3-4) 可用作用量变分极小原理得到. 定义作用量

$$I[\psi_A] = \int dt \langle \psi_A \mid i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \mid \psi_A \rangle$$

$$= \int \psi_A^* (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) \psi_A dx dt$$

考虑 ψ_A^* 在整个 Hilbert 空间的变分，由作用量变分极小得

$$\delta_{\psi_A^*} I[\psi_A] = 0 \tag{3-8}$$

$$\int \delta\psi_A^* (i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) \psi_A dx dt = 0$$

由于 $\delta\psi_A^*$ 任意，被积函数必为零，因此得时间有关的薛定格方程

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) \psi_A = 0 \tag{3-9}$$

(2) 近似解：若把变分限制在独立粒子近似确定的子空间 (Slater 行列式 Φ_A) 内进行，则得到 TDHF 方程. 步骤如下：

限制变分子空间到 Φ_A：

$$\psi_A \cong \Phi_A(1, \cdots, A) \tag{3-10}$$

在这个子空间计算作用量：

$$I[\Phi_A] = \int dt \langle \Phi_A \mid i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \mid \Phi_A \rangle$$

$$= \int dt \{ \sum_{\alpha'} \int \varphi_{\alpha'}^*(1t) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_{\alpha'}(1t) d1 - \sum_{\alpha'} \int \varphi_{\alpha'}^*(1t) \frac{\hat{p}_1^2}{2m} \varphi_{\alpha'}(1t) d1$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\alpha'\beta'} \int \varphi_{\alpha'}^*(1t) \varphi_{\beta'}^*(2t) V(12) [\varphi_{\alpha'}(1t)\varphi_{\beta'}(2t) - \varphi_{\alpha'}(2t)\varphi_{\beta'}(1t)] d1 d2 \} \tag{3-11}$$

其中 $di = dx_i$, $(it) = (x_i, t)$. 在这个子空间对作用量变分：

$$\delta_{\varphi_\alpha^*} I[\Phi_A] = 0 \tag{3-12}$$

$$\int \delta\varphi_\alpha^*(1t) i\hbar \frac{\partial \varphi_\alpha(1t)}{\partial t} d1 dt - \int \delta\varphi_\alpha^*(1t) \frac{p_1^2}{2m} \varphi_\alpha(1+t) d1 dt$$

$$- \sum_\beta \int \delta\varphi_\alpha^*(1t) \varphi_\beta^*(2t) U(12) (\varphi_\beta(2t)\varphi_\alpha(1t)$$

$$- \varphi_\beta(1t)\varphi_\alpha(2t)) d2 d1 dt = 0$$

由于 $\delta\varphi_\alpha^*$ 任意，得到 TDHF 方程：

$$i\hbar\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial t}-\frac{\hat{p}^2}{2m}\varphi_\alpha-\sum_\beta\int\varphi_\beta^*(2t)U(12)[\varphi_\beta(2t)\varphi_\alpha(1t)-\varphi_\beta(1t)\varphi_\alpha(2t)]\mathrm{d}2=0$$

$$i\hbar\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial t}=\frac{\hat{p}^2}{2m}\varphi_\alpha+\hat{U}_{\mathrm{HF}}(1t)\varphi_\alpha(1t)=h_{\mathrm{TDHF}}\varphi_\alpha \qquad (3-13a)$$

TDHF 的单粒子哈密顿量为

$$h_{\mathrm{TDHF}}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{U}_{\mathrm{TDHF}} \qquad (3-13b)$$

时间有关的平均场为

$$\hat{U}_{\mathrm{TDHF}}\varphi_\alpha=\sum_\beta\int\varphi_\beta^*(2t)U(12)[\varphi_\beta(2t)\varphi_\alpha(1t)-\varphi_\beta(1t)\varphi_\alpha(2t)]\mathrm{d}2 \qquad (3-13c)$$

$\hat{U}_{\mathrm{TDHF}}$中的第一项是平均场的直接项，为定域势；第二项是交换项，为非定域势.

上述方程称为时间有关的 Hartree－Fock 方程（TDHF），是一组时间有关的平均场方程. 求解这一方程是初值问题（而非本征值问题），通常用迭代的方法求解，即给出 $t=t_0$ 的初始条件 $\varphi_\alpha(t_0)$（对所有 $\alpha=1\to A$），通过上式计算 $\hat{U}_{\mathrm{TDHF}}(t_0)$，然后从 TDHF 方程计算 $\varphi_\alpha(t_0+\Delta t)$，如此迭代下去，得到任意时刻 t 的解 $\varphi_\alpha(t)$.

由 TDHF 方程可以证明（用迭代法证明），若初始时刻的 φ_α 正交归一，即

$$\langle\varphi_\alpha(t_0)\mid\varphi_\beta(t_0)\rangle=\delta_{\alpha\beta} \qquad (3-14a)$$

则任意时刻的解也正交归一：

$$\langle\varphi_\alpha(t)\mid\varphi_\beta(t)\rangle=\delta_{\alpha\beta} \qquad (3-14b)$$

即 TDHF 方程保持单粒子态的正交归一性不变.

3.2.2.2 定态极限：HF 方程

在定态极限下，令

$$\varphi_\alpha(\vec{r},t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_\alpha t/\hbar}\varphi_\alpha(\vec{r}) \qquad (3-15)$$

代入 TDHF 方程（3－13a），左边为

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon_\alpha t/\hbar}\varepsilon_\alpha\varphi_\alpha(\vec{r})$$

右边动能项为

$$e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}\varphi_\alpha(\vec{r})$$

势能项中的时间因子 $\exp[i\varepsilon_\beta t/\hbar]$ 与 $\exp[-i(\varepsilon_\alpha+\varepsilon_\beta)t/\hbar]$ 抵消后剩下 $\exp[i\varepsilon_\alpha t/\hbar]$，两边消去这个时间公因子后，得到

$$\hat{h}_{HF}\varphi_\alpha=(\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{U}_{HF})\varphi_\alpha=\varepsilon_\alpha\varphi_\alpha \tag{3-16a}$$

$$\hat{U}_{HF}\varphi_\alpha=\sum_\beta\int\varphi_\beta^*(2)U(12)[\varphi_\beta(2)\varphi_\alpha(1)-\varphi_\beta(1)\varphi_\alpha(2)]d2 \tag{3-16b}$$

这就是著名的 Hartree－Fock 方程．这是一组 A 个粒子的本征态 φ_α 和本征能量 ε_α 的非线性的自洽场方程，是本征值问题（而非初值问题）；φ_α，ε_α 和 U_{HF} 三者要自洽确定，即 $(\varphi_\alpha,\ \varepsilon_\alpha)\rightarrow U_{HF}\rightarrow(\varphi_\alpha,\ \varepsilon_\alpha)$.

HF 方程也可以从能量泛函（把函数的自变量换成函数，函数就变成泛函，因此泛函就是函数的函数）定态变分得到．设多体系统的定态波函数 Φ_A 由 A 个粒子的时间无关的量子态的 Slater 行列式组成，这 A 个粒子的波函数 $\varphi_\alpha(\vec{r})$ 是待定的．计算 $\hat{H}$ 对 Φ_A 的能量平均值泛函：

$$\begin{aligned}E[\varphi_\alpha]&=\langle\Phi_A|\hat{H}|\Phi_A\rangle\\&=\sum_\alpha\int\varphi_\alpha(1)^*\frac{\hat{p}^2}{2m}\varphi_\alpha(1)d1+\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\int d1d2\varphi_\alpha^*(1)\varphi_\beta^*(2)U(12)[\varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2)-\varphi_\alpha(2)\varphi_\beta(1)]\end{aligned} \tag{3-17}$$

考虑归一化条件：

$$\langle\Phi_A\mid\Phi_A\rangle=\sum_\alpha\int\varphi_\alpha^*(1)\varphi_\alpha(1)d1=A \tag{3-18}$$

(3－17) 式是 A 个待定波函数 φ_α 的泛函（称能量泛函），求 $E[\varphi_\alpha]$ 在 (3－18) 式条件下的变分极值问题，即 $\delta_{\varphi_\alpha^*}E[\varphi_\alpha]=0$，$\delta_{\varphi_\alpha^*}\langle\varphi_\alpha|\varphi_\alpha\rangle=0$．或按拉格朗日乘子方法，可把约束条件 (3－18) 式纳入泛函变分：

$$\delta_{\varphi_\alpha^*}I[\varphi,\varepsilon]=0,\quad I[\varphi,\varepsilon]=E[\varphi]-\varepsilon\langle\Phi_A\mid\Phi_A\rangle \tag{3-19}$$

可得 HF 方程：

$$\hat{h}_{HF}\varphi_\alpha=(\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{U}_{HF})\varphi_\alpha=\varepsilon_\alpha\varphi_\alpha$$

这时，ϵ_α 是作为拉氏乘子出现的.

从 HF 方程也可以证明，HF 方程在迭代求解中，保持单粒子态 φ_α 的正交归一性，即

$$\langle \varphi_\alpha \mid \varphi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$$

在迭代的每一步都应保持.

此外，TDHF 和 HF 方程还保持系统的某些对称性：如系统开始时，自洽场是球对称的，则自洽过程中始终是球对称的.

3.2.2.3 TDHF 和 HF 方程的数值求解

TDHF 和 HF 方程是非线性的偏微分方程，比较复杂，一般只能数值求解. 对各类典型的物理问题，都有比较成熟的求解程序. 现把数值求解的主要问题和基本步骤作一简要的介绍，以有助于大家学习与使用有关程序.

对 TDHF 和 HF 方程求解：

(1) 首先要选取适当的单粒子态表象 $\{\eta_\alpha\}$，这一表象能用有限数目的基矢很好地模拟（逼近）有关物理问题中平均场中的单粒子态，使得表象 $\{\eta_\alpha\}$ 的基矢数目尽可能少，这样既能减少计算量，又能得到足够精确的结果. $\{\eta_\alpha\}$ 表象的基矢最好是解析的，以简化许多积分计算. 在原子物理中，通常选取类氢原子表象；在原子核物理中，通常选取谐振子表象；在固体物理中，情况比较复杂，有各种表象的选取以适合不同的情况. 应当指出，任何完备因而基矢数目无限的单粒子态表象都是平等的（等价的），然而计算只能在有限数目的因而是不完备的单粒子态表象中进行，这就产生了前面阐述的工作表象的选择问题.

(2) 表象选定以后，就要把待求的单粒子态按表象的基矢展开，把关于 φ_α 的微分（积分）方程化为展开式系数的代数方程求解. 近年来，随着有限元方法的发展，人们也在坐标空间求解平均场方程；把时空离散化分成网格，然后把微分方程化为网格上的差分方程求解. 无论哪种解法，都要处理计算量（基矢数目）与精度之间的矛盾，巧妙的计算方法在于用尽可能少的基矢（或网格）得到尽可能精确的结果，这就需要物理洞察力和计算经验.

求解 TDHF 方程的步骤：

(1) 给定单粒子态的初始条件 $\varphi_\alpha(t_0)$.

(2) 计算自洽场 $U_{\mathrm{TDHF}}(t_0)$.

(3) 用 TDHF 方程计算下一时刻 $t_0+\Delta t$ 的单粒子态 $\varphi_\alpha(t_0+\Delta t)$.

(4) 重复 (2)、(3) 两步，直到所需要的时刻 $t = t_0 + n\Delta t$，求得$\varphi_\alpha(t)$.

(5) 上述计算过程或在一定表象的基矢中进行，或在时空网格上进行.

求解 HF 方程的步骤：

(1) 从物理考虑设定一组合理的单粒子本征态初值 $\{\varphi_\alpha^0, \epsilon_\alpha^0\}$.

(2) 计算 $U_{\mathrm{HF}}[\varphi_\alpha^0]$.

(3) 从自洽场方程计算出下一轮的 $\{\varphi_\alpha^1, \epsilon_\alpha^1\}$，与 $\{\varphi_\alpha^0, \epsilon_\alpha^0\}$ 比较后，对 $\{\varphi_\alpha^1, \epsilon_\alpha^1\}$ 向收敛方向作适当调整.

(4) 用调整后的 $\{\varphi_\alpha^1, \epsilon_\alpha^1\}$ 重复 (2)、(3) 两步计算，直到 $\{\varphi_\alpha^n, \epsilon_\alpha^n\}$ 与 $\{\varphi_\alpha^{n-1}, \epsilon_\alpha^{n-1}\}$ 自洽并达到所要求的精度.

上述计算可以在选定表象下进行，也可以在空间网格上进行.

3.2.3 玻色子系统的平均场理论

相互作用的玻色子系统的平均场理论，可以仿照费米子系统那样建立. 这时，多体系统的波函数应当是 A 个粒子的波函数的乘积的对称化组合. 由于波函数的完全对称性，与费米子系统不同，同一单粒子态 φ_α，可以填充一个以上的粒子，因而单粒子量子态 φ_α 的数目可以小于粒子的数目（对费米子系统，二者必须相等）. 从平均场理论求得的玻色子系统的状态一般不是系统的基态，处于较高能级的玻色子可以向低能级状态跃迁，不管这些状态是否填充有粒子. 因此，在平均场近似下，玻色子系统的基态是所有粒子都填充最低能级的玻色－爱因斯坦凝聚态. 由于这个最低能级粒子数很多，可以达到宏观可观察的程度，因此，玻色－爱因斯坦凝聚是宏观可观测的量子现象——宏观量子现象，超导、超流都是这类现象.

由于玻色子不遵守 Pauli 原理，即使平均场产生了单粒子能级，玻色子多体系统也不会产生稳定的壳层结构，因此，壳层结构是费米子系统所特有的.

3.2.4 平均场理论的意义

平均场理论是相互作用的多粒子系统的非微扰理论，是独立粒子运动模型的微观理论基础，是进一步处理量子力学多体问题的出发点.

对于费米子多体系统，平均场理论的物理后果是：

(1) 原子中电子运动出现壳层结构，从而导致原子化学性质的周期性.

(2) 原子核中的质子与中子的运动，由于平均场存在而出现壳层结构，原

子核的基态性质出现由幻数表征的周期性与稳定性.

(3) 对于具有规则晶体结构的固体，电子所感受到的周期性的平均场使固体中的电子的运动具有能带结构，导致固体的导电与绝缘.

因此，费米子系统的平均场理论是原子和原子核壳层结构模型的微观理论基础，也是固体能带论的微观理论基础. 下面将介绍这方面的内容.

3.3 原子的平均场理论：原子的壳层结构[4]

3.3.1 原子中电子的运动，类氢原子和电子－电子之间库仑相互作用修正

从核电荷为 Z 的类氢原子，可以计算出电子运动的能级与波函数的关系式

$$E_n(Z) = -\frac{E_0(Z)}{n^2}, \psi_{nlm} \tag{3-20}$$

其中：E_n (Z) 是氢原子的 E_0 中把核电荷从 1 变为 Z 的结果，玻尔半径作相应的改变；ψ_{nlm}是氢原子波函数，但用与 Z 有关的玻尔半径 (变小).

对于主量子数 n，l 取值为 $l=0$，1，…，$n-1$，每个 l 有 $(2l+1)$ 个 m 值，每个 ψ_{nlm}有两个自旋态. 所以对能级 E_n，简并的状态数为

$$D_n = 2\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2n^2$$

由此可以计算出每个能级所能填充的电子数.

$$n = 1,2,3,4,5,6,\cdots$$

$$D_n = 2,8,18,32,50,72,\cdots$$

因此，略去电子－电子之间库仑相互作用以后，电子在原子中的填充按照上表形成不同的能壳，每个能壳的能量为 E_n，电子数为 D_n，这就是从类氢原子得出的原子的壳层结构图像. 这纯粹是类氢原子中原子核的库仑外场对电子作用的量子力学结果，壳层结构的出现与单体势场中的独立粒子运动有关. 然而，实际上电子－电子之间存在着库仑相互作用，它是二体相互作用，会破坏类氢原子中电子的独立粒子运动，有可能导致壳层结构的破坏. 事实表明，原子的壳层结构和由此产生的化学周期性并没有被破坏，只是有若干修改. 这就暗示，考虑电子－电子相互作用以后，原子中电子的单体平均场仍然近似地存

在，只不过需要对类氢原子的单体势场作某些修改，加入电子产生的自洽平均场.

原子中存在着平均场有以下的原因：

(1) 原子核（特别是 Z 大的原子核）提供了一个很强的外在的势场中心，即核的库仑场.

(2) 电子之间的相互作用是长程的、不很强的库仑相互作用，它们的叠加和平均能产生一个相当光滑的平均场，叠加在核势场之上.

(3) 对基态和低激发态原子，特别是满壳外只有一两个电子的原子，由于 Pauli 原理的限制，电子之间的剩余相互作用只能导致电子向满壳外的能级上跃迁，满壳以下能级之间的跃迁由于 Pauli 原理受到完全抑制. 由于不同壳层之间能级差比剩余相互作用强度大，向满壳外的电子态的跃迁也受到部分抑制(能量标度原理). 因此，在基态和低激发态，Pauli 原理和大的壳层能级差抑制了二体剩余相互作用对平均场和壳层结构的破坏作用，使平均场仍是好的近似，壳层结构得以保持（见图 3－1).

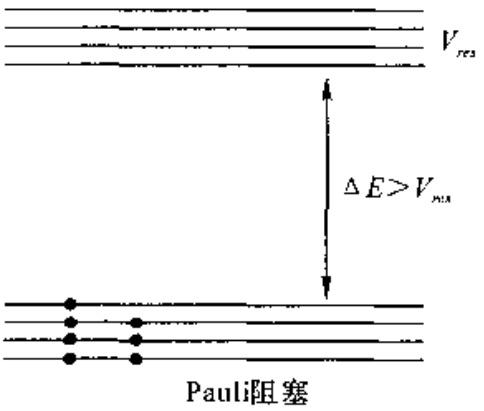


图 3－1　Pauli 阻塞效应和壳层之间大的能级差抑制了剩余相互作用，导致平均场的有效性

总之，考虑电子－电子之间库仑相互作用以后，原子中电子的运动仍具有较好的自洽平均场，它叠加在核的库仑外场之上，产生了适当修正的壳层结构.

3.3.2　原子的平均场理论[4]

从历史上看，量子多体系统的平均场理论和壳层模型是发源于原子物理的，HF 理论也是根据原子物理的需要发展起来的.

原子物理的平均场理论的特点：

(1) 原子核与电子相比，其巨大的质量提供了一个天然的势场中心.

(2) 核电荷（特别是 Z 大的核电荷）提供了一个很强的外场（库仑场）.

(3) 电子－电子之间的库仑相互作用是精确知道的、长程的，它们产生的自洽平均场是对类氢原子势场的修正，壳层结构不会发生根本性的变化.

上述特点使得原子物理的自洽平均场仅对类氢原子势场作一定的修正，壳层结构不会发生根本性的变化. 因此，原子物理的自洽平均场理论特别成功. 下面建立原子物理的自洽平均场的 HF 方程.

原子系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{Z}\left(\frac{\hat{p}_i^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r_i}\right) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{Z}\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{3-21}$$

按照上一节的一般理论，可以得到原子中电子运动的自洽场（HF）方程，

$$\hat{h}_{HF}\varphi_\alpha = \varepsilon_\alpha\varphi_\alpha \tag{3-22a}$$

其中单电子的哈密顿 $\hat{h}$ 为

$$\hat{h} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} + \hat{U}_{HF} \tag{3-22b}$$

$$\hat{U}_{HF}(1)\varphi_\alpha(1) = \sum_\beta\int\varphi_\beta^*(2)\frac{e^2}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|}[\varphi_\beta(2)\varphi_\alpha(1) - \varphi_\beta(1)\varphi_\alpha(2)]\mathrm{d}2 \tag{3-22c}$$

显然，$\hat{U}_{HF}$是电子－电子之间库仑相互作用产生的自洽场对核势场 $-Ze^2/r$ 的修正. 求解上述自洽场方程，可以得到比类氢原子的解更接近实际的解.

3.3.3 原子平均场理论的改进，能量密度泛函方法

随着原子光谱数据精度的提高，对原子平均场理论的要求越来越高. 近代的原子平均场理论已经超越了 HF 近似，通过能量密度泛函或平均场密度泛函的方法，不但较简便地包括了平均场的交换势，而且在不同程度上包括了 HF 平均场近似所忽略的多体关联效应. 为了说明能量密度泛函方法，考虑平均场对密度的积分（平均场所对应的势能）：

$$\int\sum_\alpha \hat{U}_{HF}(\vec{r})\varphi_\alpha^*(\vec{r})\varphi_\alpha(\vec{r})\mathrm{d}\vec{r}$$

$$= \int \hat{U}_{HF}(\vec{r})\rho(\vec{r}) = \sum_{\alpha\beta}\iint \mathrm{d}\vec{r}\,\mathrm{d}\vec{r}\,'\frac{e^2}{|\vec{r}\,' - \vec{r}|}\cdot$$

$$[\varphi_\alpha^*(\vec{r})\varphi_\beta^*(\vec{r}\,')\varphi_\alpha(\vec{r})\varphi_\beta(\vec{r}\,') - \varphi_\alpha^*(\vec{r})\varphi_\beta^*(\vec{r}\,')\varphi_\alpha(\vec{r}\,')\varphi_\beta(\vec{r})]$$

$$=\iint \mathrm{d}\vec{r}\,\mathrm{d}\vec{r}\,' \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}[\rho(\vec{r},\vec{r})\rho(\vec{r}\,',\vec{r}\,') - \rho(\vec{r},\vec{r}\,')\rho(\vec{r}\,',\vec{r})] \qquad (3-23)$$

其中，电子密度矩阵 $\rho(\vec{r},\vec{r}\,')$ 为

$$\rho(\vec{r},\vec{r}\,') = \sum_\alpha \varphi_\alpha^*(\vec{r})\varphi_\alpha(\vec{r}\,'), \rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r},\vec{r}) \qquad (3-24)$$

这表明平均场对应的能量 $\int \mathrm{d}\vec{r}\ \hat{U}_{\mathrm{HF}}(\vec{r})\rho(\vec{r})$ 可以表示成单粒子密度矩阵的泛函. 更一般的理论证明，多体系统基态的能量是单粒子密度的泛函，3.6 节将详细介绍这一理论.

从 $U=U[\rho]$ 出发，从多体理论一般考虑和具体物理考虑，假定 $U[\rho]$ 的特定形式，不但可以模拟平均场的交换势，而且可以包括一些多体关联效应，使平均场近似更臻完善.

3.4 原子核的平均场理论：原子核的壳层结构[5]

3.4.1 原子核中核子的独立粒子运动与幻数的存在

在量子核子动力学（QND）的理论框架内，原子核是由质子、中子组成的多体系统，质子中子统称核子；质子之间存在着长程的库仑斥力，核子之间存在着短程的核力. 核力是强相互作用，总体表现为很强的吸引力，但在极小距离也表现出斥力.

与原子系统不同，原子核系统不存在大质量的势场中心. 然而，令人惊奇的是，原子核存在着类似于原子壳层结构那样的幻数：当质子数 Z 或中子数 N 等于 2、8、20、28、50、82、126 等幻数时，原子核表现得特别稳定，类似于原子中的惰性气体. 这暗示，当质子数或中子数等于幻数时，它们刚好填满一个壳层，原子核特别稳定. 在幻数上加一个核子，它的运动表现出很好的独立粒子特征，其状态可以用一个具有很好量子数的波函数来描述. 按原子物理的经验，幻数、壳层结构和独立粒子运动的存在，表明原子核中也存在平均场，正是这种平均场导致独立粒子运动和壳层（幻数）的出现.

3.4.2 原子核的平均场理论：TDHT 和 HF 近似

对于不存在大质量势场中心的原子核，核子－核子相互作用能产生平均场

的主要原因是 Pauli 原理和能量标度原理对剩余相互作用的抑制作用. 核子是费米子，在平均场近似下，对基态原子核，核子从最低能级逐一往上填充至某一最高能级 ϵ_F，这一最高能级称费米能级. 质子和中子填充各自的能级，它们的费米能级一般是不同的. 由费米能级确定的动量空间（或其他量子数空间）的表面称费米面. 对于基态原子核，费米面以下的能级全部被核子填满，对于幻数原子核，费米面以上的能级处于下一壳层，其间的能量差较大. 剩余相互作用会破坏核子的独立粒子运动，引起核子从一个量子态向另一个量子态的跃迁. 费米面以下的状态全部被填满，由于 Pauli 原理，向这些已被填充的量子态的跃迁是被禁止的；唯一可能的是向费米面以上空着的能级跃迁. 对于幻数核，这种跃迁需要较高的能量，如果剩余相互作用的强度小于两个壳层之间的能量差，这种跃迁也将被大大地削弱. 因此，Pauli 原理抑制了费米面以下核子在不同量子态之间的跃迁，而壳层之间的能量差大和剩余作用强度小造成的能量标度不同，削弱了核子向费米面以上的量子态的跃迁. 剩余作用在两个方面受到抑制，导致原子核，特别是幻数核有较好的平均场和独立粒子运动.

在量子核子动力学（Quantum Nucleon Dynamics，QND）的框架内，对于二体相互作用，原子核系统的哈密顿量可写成

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{A} \frac{\hat{p}_i^2}{2M} + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j}^{A} v(ij) \qquad (3-25)$$

这里我们已引进了同位旋 $\hat{\tau}_i$，其第三分量 $\hat{\tau}_3$ 像自旋算符 σ_z 那样，具有两个不同的本征态. 我们用本征值为“+”的状态描述中子，为“−”的状态描述质子，这样就把质子和中子看作同一种粒子（核子）的两种不同状态，正像电子有自旋向上、向下两种状态一样. 当然，把质子与中子看作同一种粒子的两种状态只是一种近似，略去了它们某些性质（如质量）的微小差别. 事实上，这种处理在许多场合是方便的、很好的近似. 在这种近似下，核子的坐标包括空间坐标 $\vec{r}$、自旋坐标 s_z 和同位旋坐标 τ_3 $[x = (\vec{r}, s_z, \tau_3)]$.

与电子系统不同，核子之间的相互作用（核力）是十分复杂的，目前还没有精确的表达式. 因此，核力不清楚是原子核多体问题的基本困难之一. 为了解决这一困难，人们有两种做法：

（1）根据自由空间（真空）中核子－核子散射的数据，构造出自由空间的唯象核力，然后运用多体理论（如 Brueckner 理论）考虑核介质对核子－核子相互作用的修正.

(2) 基于核子－核子相互作用的一般性质和多体理论的一般结论，假定与密度有关的等效的核子－核子相互作用，其中包括若干参数，用大量的原子核的基态性质去确定这组参数. 这类核力中最著名的叫 Skyrme 力，其局域相互作用为

$$v_{\text{skyrme}} = t_1\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') + t_2\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\delta(\vec{r}-\vec{r}\,'') \qquad (3-26)$$

此外，Skyrme 力还包括长程 Yukawa 势 $v_{\text{Yukawa}} = v_0 \dfrac{e^{-\mu|\vec{r}-\vec{r}'|}}{\mu|\vec{r}-\vec{r}'|}$ 和库仑相互作用.

有了核力 $v(ij)$ 之后，就可以进行原子核的 TDHF 或 HF 计算. 基于 Skyrme 力的 HF 计算相当成功，可以再现大部分原子核的基态性质.

在 HF 近似的基础上，进一步考虑剩余相互作用中的短程对力，在准粒子近似下，可以建立起准粒子的平均场理论，即 HFB 理论.

3.4.3 原子核平均场理论的唯象形式——壳层模型

基于等效核力的 HF 近似，仍可以看作是微观的平均场理论. 这一理论计算量大，一般只能得到数值结果，物理图像不够直观. 为了简明直观地表现平均场理论的物理图像，人们通常选用简单的单粒子势场去模拟自洽平均场. 最常用的是带自旋－轨道力的谐振子势. 对球形核，平均场单粒子哈密顿量可选为

$$h = \frac{\hat{p}^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 r^2 + C\vec{l}\cdot\vec{s} + D\vec{l}^2 \qquad (3-27)$$

从这种单粒子哈密顿量，可以求得核子能级的解析结果. 适当选取 ω，C，D 等参数，可以给出原子核的幻数. 这种基于唯象平均场的理论，称为原子核的壳层模型，是 Mayor－Jensen 首先采用的核结构模型，他们因此获得诺贝尔物理学奖.

3.4.4 原子核的相对论性平均场理论

上述基于 QND 的原子核的平均场理论是非相对论性的，可以推广到相对论情况. 因为在相对论性能量，核子－核子碰撞会产生各种介子，核子也会发生内部激发而成为一般的重子，所以相对论性原子核多体理论是必须包含介子和一般重子自由度的量子多体理论. 参与强作用的介子和重子统称强子，所以描述相对论性原子核多体问题的理论框架应当是量子强子动力学（Quantum

Hadron Dynamics，QHD)．QHD 比较成熟而常用的理论是 Walecka 模型．当前在 Walecka 模型的框架内，已建立起相对论性的原子核的平均场理论．在这个理论中，核子按照包含自洽平均场的 Dirac 方程运动，平均场是由介子场产生的，而产生介子场的源又是核子的各种密度和流．这样，核子与介子场就成为一个耦合的自洽系统．

原子核的相对论性平均场理论比非相对论平均场理论取得了更大的成就，不但能解释非相对论平均场理论已解释了的所有现象，而且还能说明一些前者不能说明的问题．由于相对论性平均场理论基于 QHD，它使原子核平均场理论向 QCD 靠近了一步，成为当前原子核平均场理论研究和发展的主流．

3.5 晶体的平均场理论：固体的能带结构[6-7]

3.5.1 固体的量子力学多体问题

具有晶体结构的固体由点阵上的离子和在离子之间运动的电子组成．中性晶体的点阵离子的电荷总量等于其间运动的电子的电荷总量．晶体的哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{H}_e + \hat{H}_N + \hat{V}_{eN} \tag{3-28a}$$

其中电子的哈密顿量为

$$\hat{H}_e = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_{r_i}^2 + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \tag{3-28b}$$

其中第一项是电子的动能，第二项是电子－电子之间的库仑相互作用势能．原子核（离子）的哈密顿量为

$$\hat{H}_N = \hat{T}_N + \hat{V}_N = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2M_i}\vec{\nabla}_{R_i}^2 + \frac{1}{2}\sum_{i,j}V_N(\vec{R}_i - \vec{R}_j) \tag{3-28c}$$

其中第一项是原子核（离子）的动能，第二项是离子－离子之间的相互作用势能．离子与电子相互作用的势能为

$$\hat{V}_{eN} = \sum_{i,j}V_{eN}(\vec{R}_i - \vec{r}_j) \tag{3-28d}$$

式（3－28c，3－28d）中对离子的处理存在着复杂性和技巧：通常把晶体上原子核外的电子分为内壳电子和外壳电子，这种划分有一定的物理考虑和人为性；把内壳电子和原子核作为一个整体看作离子，仅对外壳电子进行能带论计

算，这样就可以减少计算中电子的自由度，减少计算量，但却增加了计算离子－离子之间和离子－电子之间的相互作用势能的复杂性．当然，也可以对原子核外所有的电子进行能带论计算，这时离子就是原子核，离子－离子之间和离子－电子之间的相互作用变得十分简单——都是库仑相互作用，但却增加了计算中电子的自由度，使计算量大大增加．能带论计算的物理技巧就在于恰当地定义离子和准确地计算离子－离子之间和离子－电子之间的等效相互作用．

晶体的定态薛定格方程为

$$\hat{H}\Psi_\alpha(\vec{r},\vec{R}) = E_\alpha\Psi_\alpha(\vec{r},\vec{R}) \tag{3-29}$$

$\vec{r}$表示所有电子的坐标的集合，$\vec{R}$ 表示所有原子核的坐标的集合．

3.5.2 电子运动与原子核运动的分离：Born－Oppenheimer 近似

由于在晶体中原子核运动极为缓慢（慢变量），而电子运动极为迅速（快变量），因此在考察电子运动时，可以对原子核运动取绝热近似：在原子核坐标不变（$\dot{\vec{R}}\to 0$）的情况下，求解电子运动的本征方程：

$$\hat{H}_0(\vec{r},\vec{R})\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) = \varepsilon_n(\vec{R})\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) \tag{3-30a}$$

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_e(\vec{r}) + \hat{V}_{eN}(\vec{r},\vec{R}) \tag{3-30b}$$

其中原子核的坐标 $\vec{R}$ 被看作参数．由于$\hat{H}_0$ 厄密，其本征矢组成正交完备系：

$$\langle\Phi_n \mid \Phi_m\rangle = \delta_{nm} \tag{3-30c}$$

固体系统的总体波函数 Ψ（$\vec{r}$，$\vec{R}$）可以按 Φ_n（$\vec{r}$，$\vec{R}$）展开：

$$\Psi_\alpha(\vec{r},\vec{R}) = \sum_n \chi_n^\alpha(\vec{R})\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) \tag{3-31}$$

展开式系数 χ_n^α（$\vec{R}$）是原子核坐标的函数，描述离子的运动．把（3－31）式代入（3－29）式，从左边乘以〈Φ_n|，得 χ_n^α（$\vec{R}$）的运动方程：

$$[\sum_i -\frac{\hbar^2}{2M_i}\vec{\nabla}_{R_i}^2 + \varepsilon_n(\vec{R}) + C_n(\vec{R})]\chi_n^\alpha(\vec{R}) - \sum_{n'\neq n} C_{nn'}(\vec{R})\chi_{n'}^\alpha(\vec{R}) = E_\alpha\chi_n^\alpha(\vec{R}) \tag{3-32a}$$

其中

$$C_n(\vec{R}) = \langle\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) \mid -\sum\frac{\hbar^2}{2M_i}\vec{\nabla}_{R_i}^2 \mid \Phi_n(\vec{r},\vec{R})\rangle_r + \hat{V}_N(\vec{R}) \tag{3-32b}$$

$$C_{nn'}(\vec{R}) = \langle \Phi_n(\vec{r},\vec{R}) \mid \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \mid 2\vec{\nabla}_{R_i}\Phi_{n'}\rangle_r \cdot \vec{\nabla}_{R_i}$$

$$+ \langle \Phi_n(\vec{r},\vec{R}) \mid \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \vec{\nabla}^2_{R_i} \mid \Phi_{n'}(\vec{r},\vec{R})\rangle_r \quad (3-32c)$$

上面的积分是对电子的坐标$\vec{r}$进行. C_n, $C_{nn'}$是原子核运动（用动能算符$\vec{\nabla}_R$表示）引起的电子运动波函数的变化［见（3－32b）式］以及运动状态的跃迁［见（3－32c）式］对离子势能的贡献. 在绝热近似下，电子运动状态跃迁项$C_{nn'}$可以忽略，原子核的运动方程化为

$$[\sum_i -\frac{\hbar^2}{2M_i}\vec{\nabla}^2_{R_i} + \varepsilon_n(\vec{R}) + C_n(\vec{R})]\chi^{\alpha}_{n\mu}(\vec{R}) = E_{\alpha n\mu}\chi^{\alpha}_{n\mu}(\vec{R}) \quad (3-33)$$

其中μ表示原子核运动中不同于量子数（α, n）的其他量子数. （3－33）式就是晶体中离子运动的晶格动力学方程，在谐振近似下简化为晶体点阵绕平衡点振动的声子的运动方程.

电子的运动方程（3－30a）明显写出后为

$$[\sum_i -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2_{r_i} + \sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \sum_{i,j}V_{eN}(\vec{r}_i - \vec{R}_j)]\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) = \varepsilon_n(\vec{R})\Phi_n(\vec{r},\vec{R}) \quad (3-34)$$

这一方程可以进一步简化为束缚在原子核周围的电子的运动方程（局域电子的运动方程）和在点阵之间运动的电子（非局域电子或巡游电子）的运动方程.

3.5.3 巡游电子运动方程的平均场近似：能带结构

对于束缚在原子核周围的电子的运动，可以像处理原子问题那样，运用原子的平均场近似，但要考虑周围电子环境和离子环境的影响. 对于晶体点阵共有的巡游电子运动的处理，是一个新问题，也是本小节研究的对象. 在绝热近似下，把电子运动与原子核运动分离之后，电子运动的方程仍然是很复杂的. 电子受原子核的电磁作用，彼此之间又存在库仑相互作用. 对于具有晶体结构一类的固体，原子核（或由它形成的离子）是作为晶体点阵骨架而周期性规则排列的. 在低温情况下，它们基本上处于点阵的平衡位置而发生偏离平衡位置的微小振动. 在零级近似下，可以认为原子核处于由晶体结构决定的点阵的平衡位置. 它们对电子产生一个由晶体结构决定的周期性势场，这个势场原则上

可以从晶体结构和点阵离子的电子结构给出．这样一来，晶体中巡游电子的运动就成为周期性外场中的库仑电子气体的量子多体问题．对这一问题的零级近似，自然是把电子看成是在周期性外场和电子自身的自洽平均场中运动的独立粒子，这就是周期性外场中库仑电子气体的 HF 近似，其运动方程为

$$\hat{h}\psi_{kn}(\vec{r}) = [-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_r^2 + U(\vec{r})]\psi_{kn}(\vec{r}) = E_{\vec{k}n}\psi_{kn} \qquad (3-35)$$

其中 $U(\vec{r})$ 包含周期性外场和电子的自洽场，而周期性外场由晶体点阵离子产生，其空间周期矢量 $\vec{R}_l$ 由晶体结构决定．在晶体周期外场影响的诱导下，电子的自洽场也具有相同的周期结构，因此

$$U(\vec{r}+\vec{R}_l) = U(\vec{r}), \quad \vec{R}_l = \sum_{i=1}^{3} R_{li}\vec{a}_i \qquad (3-36)$$

$\vec{a}_i$ 为基本晶格矢量．设相应于 $\vec{R}_l$ 的离散平移群元为

$$\hat{P}_{\vec{R}_l} = \mathrm{e}^{\vec{R}_l\cdot\vec{\nabla}_r}$$

考虑晶体的周期性有

$$[\hat{P}_{\vec{R}_l}, \hat{h}] = 0 \qquad (3-37)$$

这表示晶体中电子的平均场哈密顿量具有由晶格矢量所决定的离散的平移不变性．离散平移群是一般平移群的子群，自然也为阿贝尔群，只有一维不可约表示．

现求 $\hat{P}_{\vec{R}_l}$ 的本征矢．设 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ 为其本征矢，令

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varphi_{\vec{r}}(\vec{r})u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

其中 $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$ 描述非局域性，$u_{\vec{k}}(\vec{r})$（主要）描述局域性和周期性，则

$$\hat{P}_{\vec{R}_l}\psi_k(\vec{r}) = \hat{P}_{\vec{R}_l}\varphi_k(\vec{r})\,\hat{P}_{\vec{R}_l}u_k(\vec{r}) = p(k)\varphi_k(\vec{r})u_k(\vec{r}) \qquad (3-38a)$$

由此有

$$\hat{P}_{\vec{R}_l}\varphi_k(\vec{r}) = \varphi_k(\vec{r}+\vec{R}_l) = p(k)\varphi_k(\vec{r}) \qquad (3-38b)$$

$$\hat{P}_{\vec{R}_l}u_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r}+\vec{R}_l) = u_k(\vec{r}) \qquad (3-38c)$$

$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$ 的解为

$$\varphi_k(\vec{r}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad p(k) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_l} \qquad (3-39a)$$

因此有

$$\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_k(\vec{r}), \quad u_k(\vec{r}+\vec{R}_l) = u_k(\vec{r}) \tag{3-39b}$$

把布洛赫波函数 $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ 代入电子的本征方程（3－35），考虑到电子还有其他激发能级与量子数，故有

$$\hat{H}_k u_{nk}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}} u_{nk}(\vec{r}) \tag{3-40a}$$

$$\hat{H}_k = \frac{-\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + U(\vec{r}) - \frac{i\hbar^2}{m}\vec{k}\cdot\vec{\nabla} + \frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{3-40b}$$

由于周期条件：

$$u_{nk}(\vec{r}+\vec{R}_l) = u_{nk}(\vec{r})$$
$$U(\vec{r}+\vec{R}_l) = U(\vec{r})$$

故对于一个$\vec{k}$，电子有很多能级 $E_{n\vec{k}}$.

考虑与 $\vec{R}_l$ 正交的波矢$\vec{K}_m$（倒格矢）：

$$\vec{K}_m \cdot \vec{R}_l = 2\pi\delta_{ml} \tag{3-41}$$

易证 $\psi_{\vec{k}+\vec{K}_m}$也是$\hat{P}_{\vec{R}_l}$的本征矢，其本征值相同. 因为

$$\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} = e^{i(\vec{k}+\vec{K}_m)\cdot\vec{r}}\, u_{nk+K_m}$$

所以，由（3－39b）式有

$$\hat{P}_{\vec{R}_l}\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} = e^{i(\vec{k}+\vec{K}_m)\cdot\vec{R}_l}\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_l}\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} \tag{3-42}$$

由（3－42）式可证，$\hat{P}_{\vec{R}_l}$的简并态$\psi_{\vec{k}+\vec{K}_m}$的任意线性叠加

$$\psi_{n\vec{k}} = \sum_{K_m} C_{K_m}\psi_{n\vec{k}+K_m} \tag{3-43}$$

也是 $\hat{P}_{\vec{R}_l}$的本征矢：

$$\hat{P}_{\vec{R}_l}\psi_{n\vec{k}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_l}\psi_{n\vec{k}} \tag{3-44}$$

把（3－43）式代入电子的本征方程（3－35），有

$$E_{nk}\psi_{n\vec{k}} = \sum_{K_m} C_{K_m}E_{n\vec{k}+K_m}\psi_{n\vec{k}+\vec{K}_m} = E_{n\vec{k}}\sum_{K_m} C_{K_m}\psi_{\vec{k}+\vec{K}_m} \tag{3-45}$$

由于 C_{K_m}的任意性，必有

$$E_{n\vec{k}} = E_{n\vec{k}+\vec{K}_m} \tag{3-46}$$

因此，$E_{n\vec{k}}$是以 $\vec{K}_n$ 为周期的连续函数. 由函数论可知，以 $\vec{K}_n$ 为周期的连续函数$E_{n\vec{k}}$必有极大、极小值，从而形成能带（见图3－2）.

由（3－43）式可知，$\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ 可有下述两种分解：

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\, u_{nk}(\vec{r}) = e^{i(\vec{k}+\vec{K}_m)\cdot\vec{r}}u_{nk+K_m}(\vec{r}) \tag{3-47}$$

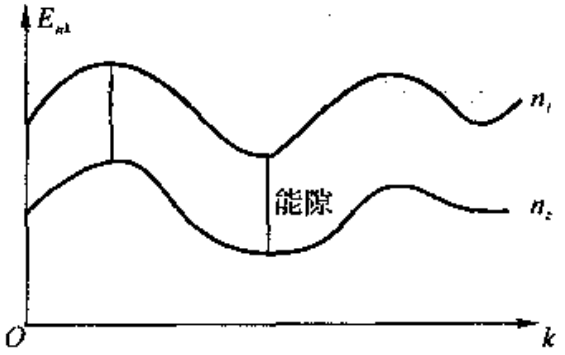


图 3－2　固体中巡游电子的能带结构

代入电子的本征方程（3－35），同样得 $E_{\vec{k}} = E_{\vec{k}+\vec{K}_n}$.

计算电子的平均场时，要用 $\psi_{n\vec{k}}$ 或 $u_{n\vec{k}}$ 去计算 HF 的自洽场，故关于 $u_{n\vec{k}}$ 和 $E_{n\vec{k}}$ 的本征方程是 HF 的自洽场方程.

上述理论分析表明，晶体的能带结构和布洛赫波的产生，是巡游电子在晶体的周期性自洽平均场中运动的结果. 巡游电子为整个晶体所共有，它们既受离子的局域电场的控制，又受晶体共同平均场的控制，其运动包含局域性和非局域性两个分量，这两个分量的竞争决定了能带的宽、窄等性质：局域性强导致窄能带，而非局域性强导致宽能带.

3.5.4　固体平均场理论的改进

固体平均场理论的改进在两方面进行，一是选择尽可能好的表象基矢对 $u_{n\vec{k}}$ 展开，以期在尽可能小的子空间内求得尽可能精确的解. 由此，发展出各种解法，如正交平面波法（OPW）、赝势法、元胞法、缀加平面波法（APW）、瓦尼尔表象，以及线性丸盒轨道法（Linear Muffe－Tin Orbit，LMTO）等. 这方面的改进成为固体能带论专著的主要内容. 二是改进平均场势场，以期更好地反映交换势并包括某些多体关联效应. 基于能量密度泛函的各种近似就属于此类.

3.6　平均场理论的改进：密度泛函理论与局域密度近似[8－9]

本节介绍平均场理论改进的第二个方面：平均场理论中自洽平均场的改进，其目标是在平均场中尽可能多地包括非定域交换势和多体关联效应，这是

通过密度泛函理论与局域密度近似来实现的. 下面介绍这方面的内容.

3.6.1 量子多体系统基态的性质：能量最低、能量泛函对波函数变分极小

设量子多体系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} \tag{3-48a}$$

其中动能 $\hat{T}$，库仑相互作用 $\hat{U}$ 和外场 $\hat{V}$ 分别为

$$\hat{T} = \sum_i \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_{\vec{r}_i}^2, \quad \hat{U} = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad \hat{V} = \sum_i v(\vec{r}_i) \tag{3-48b}$$

系统的本征方程为

$$\hat{H}\Phi_n = E_n\Phi_n \tag{3-49}$$

其中本征波函数 Φ_n 是正交完备的，而本征能量从小到大排列：

$$E_0 < E_1 < E_2 \cdots < E_{n-1} < E_n < E_{n+1} < \cdots$$

$\{E_0, \Phi_0\}$ 是基态，假定它是非简并的（即 $E_0 \leftrightarrow \Phi_0$ 一一对应）. 任一状态 Φ' 可以按 $\{\Phi_n\}$ 展开：

$$\Phi' = \sum_{n=0} c_n\Phi_n, \quad \sum_n |c_n|^2 = 1 \tag{3-50}$$

Φ'对应的能量泛函为

$$E[\Phi'] = \langle\Phi'|\hat{H}|\Phi'\rangle = \langle\Phi'|\hat{T} + \hat{U}|\Phi'\rangle + \int\rho'(\vec{r})v(\vec{r})\mathrm{d}\vec{r}$$

$$= \sum_n |c_n|^2 E_n \tag{3-51a}$$

其中，单粒子密度

$$\rho'(\vec{r}) = A\int\Phi'^*(\vec{r},\vec{r}_2,\vec{r}_3\cdots\vec{r}_N)\Phi'(\vec{r},\vec{r}_2,\vec{r}_3\cdots\vec{r}_N)\mathrm{d}\vec{r}_2\mathrm{d}\vec{r}_3\cdots\mathrm{d}\vec{r}_N \tag{3-51b}$$

$$\langle\Phi'|\hat{V}|\Phi'\rangle = \int\rho'(\vec{r})v(\vec{r})\mathrm{d}\vec{r} \tag{3-51c}$$

显然，因为基态能量 E_0 最低，其能量泛函的变分应为极小. 事实上，设

$$\Phi' = \Phi_0 + \delta\Phi', \quad \delta\Phi' = \delta\sum_{n=1} c_n\Phi_n \quad \delta \text{ 为无限小量} \tag{3-52}$$

$$E_0[\Phi'] = E_0[\Phi_0] + \delta^2\sum_{n=1}|c_n|^2E_n, \tag{3-53}$$

$$\delta E_0[\Phi'] = E_0[\Phi'] - E_0[\Phi_0] = \langle \delta \sum_{n=1} c_n^* E_n \Phi_n^* \delta \Phi' \rangle \qquad (3-54)$$

得

$$\left.\frac{\delta E_0[\Phi']}{\delta \Phi'}\right|_{\Phi'=\Phi_0} = \delta \sum_{n=1} c_n^* E_n \Phi_n^* \Big|_{\delta=0} = 0 \qquad (3-55)$$

由于 Φ_0 可产生唯一的 $\rho_0(\vec{r})$，而基态 Φ_0 又是非简并、唯一的，故对一个确定的系统，$\rho_0(\vec{r})$ 与 Φ_0 之间是一一对应的：

$$\rho_0(\vec{r}) \leftrightarrow \Phi_0$$

3.6.2 Hohenberg－Kohn 定理

定理 1：不计自旋的全同费米子系统的基态能量是单粒子密度 $\rho'(\vec{r})$ 的唯一泛函.

用反证法证明. 设不同的外场 $v(\vec{r})$，$v'(\vec{r})$ 对应的哈密顿量为 $\hat{H}$，$\hat{H}'$，其基态波函数为 Φ_0，Φ'_0，相应的单粒子密度为 $\rho_0(\vec{r})$，$\rho_0'(\vec{r})$，其能量泛函为

$$E_0 = \langle \Phi_0 \mid \hat{H} \mid \Phi_0 \rangle, \quad E_0' = \langle \Phi_0' \mid \hat{H}' \mid \Phi_0' \rangle \qquad (3-56)$$

且 $\hat{H}$，$\hat{H}'$ 有下列关系：

$$\hat{H} - \hat{H}' = \hat{V} - \hat{V}' \qquad (3-57)$$

倘若

$$\rho_0(\vec{r}) = \rho_0'(\vec{r}) \qquad (3-58)$$

则由真正基态波函数对应的能量最小可知

$$\begin{aligned}\langle \Phi_0' \mid \hat{H} \mid \Phi_0' \rangle &= \langle \Phi_0' \mid \hat{H}' + \hat{V} - \hat{V}' \mid \Phi_0' \rangle \\ &= E_0' + \int \rho_0(\vec{r})[v(\vec{r}) - v'(\vec{r})]\mathrm{d}\vec{r} > E_0 \end{aligned} \qquad (3-59)$$

$$\begin{aligned}\langle \Phi_0 \mid \hat{H}' \mid \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 \mid \hat{H} + \hat{V}' - \hat{V} \mid \Phi_0 \rangle \\ &= E_0 + \int \rho_0(\vec{r})[v'(\vec{r}) - v(\vec{r})]\mathrm{d}\vec{r} > E_0' \end{aligned}$$

上两式相加得

$$E_0 + E_0' > E_0 + E_0' \qquad (3-60)$$

这显然是矛盾的. 因此，不同的外场 $v(\vec{r})$，$v'(\vec{r})$ 对应的单粒子密度 $\rho_0(\vec{r})$，

$\rho_0'(\vec{r})$ 必定不同，$v(\vec{r})$ 与 $\rho_0(\vec{r})$ 是一一对应的：

$$v(\vec{r}) \leftrightarrow \rho_0(\vec{r}) \tag{3-61}$$

由于 $\rho_0(\vec{r})$ 与 Φ_0 之间是一一对应的，而 Φ_0 决定了基态的全部性质，因此，单粒子密度 $\rho_0(\vec{r})$ 是系统的基本变量，决定系统基态的全部性质.

定理2：基态能量 $E_0[\rho]$ 当单粒子密度 $\rho(\vec{r}) = \rho_0(\vec{r})$ 时取极小值，即

$$\left.\frac{\delta E_0[\rho]}{\delta\rho}\right|_{\rho=\rho_0} = 0 \tag{3-62}$$

证明　由 $\rho_0(\vec{r}) \leftrightarrow \Phi_0$ 可知，Φ_0 是$\rho_0(\vec{r})$的泛函：

$$\Phi_0 = \Phi_0[\rho_0(\vec{r})] \tag{3-63}$$

由（3-55）式知

$$\left.\frac{\delta E_0[\Phi]}{\delta\Phi}\right|_{\Phi=\Phi_0} = 0 \tag{3-64}$$

可得

$$\left.\frac{\delta E_0[\rho]}{\delta\rho}\right|_{\rho=\rho_0} = \left\{\frac{\delta E_0[\Phi]}{\delta\Phi}\frac{\delta\Phi[\rho]}{\delta\rho}\right\}\Bigg|_{\rho=\rho_0} = 0 \tag{3-65}$$

因此，定理2给出计算基态单粒子密度$\rho_0(\vec{r})$的途径.

3.6.3　Kohn－Sham 方程

根据上述定理，多体费米系统的基态能量泛函可表为

$$E_0[\rho] = T[\rho] + \int v(\vec{r})\rho(\vec{r})\mathrm{d}\vec{r} + \frac{e^2}{2}\iint\frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}\,')}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\mathrm{d}\vec{r}\,\mathrm{d}\vec{r}\,' + E_{xc}[\rho] \tag{3-66}$$

其中，第一项是动能泛函，第二项是外场项，第三项是库仑相互作用的平均场近似下的直接项，$E_{xc}[\rho]$ 包含库仑相互作用的平均场近似下的交换项和平均场近似下忽略了的多体关联项，它包含非定域（或动量相关）成分. 剩下的问题是：①如何确定 ρ；②如何确定 $T[\rho]$；③如何确定 $E_{xc}[\rho]$.

第一、第二两个问题由 Kohn－Sham 解决：他们假定 $T[\rho]$ 可用无相互作用系统的动能泛函 $T_s[\rho]$ 表示，而把修正项（包含非定域或动量相关成分）放到 $E_{xc}[\rho]$ 中去. 其中

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i \psi_i(\vec{r})\psi_i^*(\vec{r}) \tag{3-67}$$

$$T_s[\rho(\vec{r})] = \sum_i \psi_i^*(\vec{r}) \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 \psi_i(\vec{r}) \qquad (3-68)$$

这样一来，基态能量泛函 $E_0[\rho]$ 对 ρ 的变分极值问题就变成对$\psi_i(\vec{r})$在归一化条件

$$\langle \psi_i \mid \psi_i \rangle = 1$$

下的变分极值问题：

$$\delta_{\psi_i^*}(E_0[\psi_i, \psi_i^*] - \sum_i \epsilon_i \langle \psi_i \mid \psi_i \rangle) = 0 \qquad (3-69)$$

由此得

$$\frac{\delta E_0[\psi_i, \psi_i^*]}{\delta \psi_i^*} - \epsilon_i \psi_i = 0 \qquad (3-70)$$

或

$$(\frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V_{KS}[\rho])\psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \qquad (3-71)$$

其中

$$V_{KS}[\rho] = v(\vec{r}) + e^2 \frac{\rho(\vec{r}\,')}{|\vec{r} - \vec{r}\,'|} \int dr' + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho} \qquad (3-72)$$

方程（3－67），（3－71）和（3－72）是著名的 Kohn－Sham 方程，是 HF 平均场方程的改进，在原子物理和凝聚态物理领域中有广泛的应用，Kohn 因此获得诺贝尔物理学奖.

剩下的问题是找出合理的 $E_{xc}[\rho]$.

3.6.4 $E_{xc}[\rho]$的局域密度近似

知道$E_{xc}[\rho]$才能求解 $K-S$ 方程. $E_{xc}[\rho]$是非定域的，这给寻找它带来困难. 为此，Kohn－Sham 对$E_{xc}[\rho]$作了局域假定：假设$E_{xc}[\rho]$是$\rho(\vec{r})$的局域泛函.

在局域泛函的范围内找出合理的 $E_{xc}[\rho]$，需要理论的探索和经验的启示，这是运用密度泛函处理实际问题的关键. 通常最简单的做法是：对于均匀电子系统，电子密度是常数，容易求得其能量泛函，然后取其泛函形式，只是把电子密度变成随坐标变化的局域密度. 密度泛函理论在凝聚态问题的应用和发展，都与 $E_{xc}[\rho]$ 的寻找和改进有关. 这里有大量的工作成果，详细情况可参考有关文献.

3.6.5 Car－Parrinello 的从头算分子动力学（Ab Initio Molecular Dynamics）（CP－AIMD）[10]

Car－Parrinello 的从头算分子动力学是一种巧妙设计的赝动力学，它把定态本征值问题变成趋向平衡态极小值的与时间有关的动力学问题．首先大胆构造下述赝动力学的拉格朗日泛函：

$$L = \sum_i \frac{\mu}{2}\int_\Omega |\dot{\psi}_i|^2 \mathrm{d}\vec{r}^3 + \sum_l \frac{M_l}{2}\dot{R}_l^2 + \sum_\nu \frac{\mu_\nu}{2}\dot{\alpha}_\nu^2 - E_0[\{\psi_i\},\{R_l\},\{\alpha_l\}] \tag{3-73}$$

其中，把单电子波函数 $\{\psi_i\}$、形状－应力－体积等约束变量 $\{\alpha_\nu\}$ 看作广义赝坐标，$\{\mu, \mu_\nu\}$ 是相应的赝惯性参数，系统的能量 E_0 由在一定的形状－应力－体积变量 $\{\alpha_\nu\}$ 的约束条件下的（3－66）式给出．C－P 运动方程由 L 的变分极小给出．分别对 ψ_i^*，$\vec{R}_l$，α_ν 变分，就可得

（1）电子运动方程：

$$\delta_{\psi_i^*} L = 0 \rightarrow \mu\ddot{\psi}_i(\vec{r},t) = -\frac{\delta E_0}{\delta\psi_i^*(\vec{r},t)} + \sum_k \Lambda_{ik}\psi_k(\vec{r},t) \tag{3-74a}$$

（2）离子运动方程：

$$\delta_{R_l} L = 0 \rightarrow M_l\ddot{R}_l = -\nabla_{R_l} E_0 \tag{3-74b}$$

（3）约束方程：

$$\delta_{\psi_i^*} L = 0 \rightarrow \mu_\nu\ddot{\alpha}_\nu = -\frac{\delta E_0}{\delta\alpha_\nu} \tag{3-74c}$$

因为（3－74）式是二阶微分方程，需要坐标和速度的初始条件 $\{\psi_i, R_l, \alpha_\nu\}$ 和 $\{\dot{\psi}_i, \dot{R}_l, \dot{\alpha}_\nu\}$．通过改变速度初始条件 $\{\dot{\psi}_i, \dot{R}_l, \dot{\alpha}_\nu\}$，可以降低系统的温度 T，使得加速度 $(\ddot{\psi}_i, \ddot{\vec{R}}_l, \ddot{\alpha}_\nu)$ 趋于零，因而得到电子在约束条件下的定态本征方程（即带约束的电子的 K－S 方程和离子的平衡方程）：

（1）电子定态方程：

$$-\frac{\delta E_0}{\delta\psi_i^*(\vec{r},t)} + \sum_k \Lambda_{ik}\psi_k(\vec{r},t) = 0 \tag{3-75a}$$

（2）离子平衡方程：

$$\nabla_{R_l} E_0 = 0 \tag{3-75b}$$

（3）约束平衡方程：

$$\frac{\delta E_0}{\delta \alpha_\nu} = 0 \tag{3-75c}$$

在实际计算中，不会完全趋于平衡．对平衡态的偏离可以用赝动能 K 来度量：

$$K = \sum_i \frac{\mu}{2}\int_\Omega |\dot{\psi}_i|^2 \mathrm{d}^3\vec{r} + \sum_l \frac{M_l}{2}\dot{R}_l^2 + \sum_\nu \frac{\mu_\nu}{2}\dot{\alpha}_\nu^2 \tag{3-76}$$

当 $K\to 0$ 时，得 K－S 方程的精确解．

3.6.6 时间有关的 Kohn－Sham 方程[11]

在高压凝聚态物理研究中，在高速原子碰撞中，在超强激光脉冲与团簇相互作用中，电子和离子的组态会发生剧烈的变化，描述这种动力学变化的过程最可行的近似是与时间有关的平均场近似及其改进——时间有关的 Kohn－Sham 方程．

首先，要把 K－S 静态能量泛函推广为时间有关的作用量泛函，假定作用量泛函为

$$I[\rho] = I\{\psi_{i\sigma}\} = \sum_{i\sigma}\int \psi_{i\sigma}^*(\vec{r},t)[i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2m}\vec{\nabla}^2]\psi_{i\sigma}(\vec{r},t)\mathrm{d}^3\vec{r}\,\mathrm{d}t - V[\rho\{\psi_{i\sigma}\}] \tag{3-77}$$

作用量变分极小得到时间有关的 Kohn－Sham 方程：

$$\delta_{\psi_{i\sigma}^*} I = 0 \to \quad i\frac{\partial \psi_{i\sigma}}{\partial t} = \{-\frac{\vec{\nabla}^2}{2m} + U_\sigma[\rho](\vec{r},t)\}\psi_{i\sigma}(\vec{r},t) \tag{3-78}$$

时间有关的 Kohn－Sham 势包括离子势，外电磁（激光）场，HF 平均场和交换－关联势：

$$U_\sigma[\rho] = \frac{\delta V[\rho_\sigma]}{\delta \rho_\sigma(\vec{r},t)} = v_{ion}(\vec{r},t) + v_{ext}(\vec{r},t) + v_{\mathrm{HF}}(\vec{r},t) + v_{xc\sigma}[\rho_\sigma](\vec{r},t) \tag{3-79}$$

其中

$$\rho = \sum_\sigma \rho_\sigma = \sum_\sigma \sum_i \psi_{i\sigma}^*(\vec{r},t)\psi_{i\sigma}(\vec{r},t) \tag{3-80}$$

$$v_{\mathrm{HF}} = e^2\int \frac{\rho(\vec{r}\,',t)}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\mathrm{d}^3\vec{r}\,' \tag{3-81}$$

$$v_{xc\sigma} = \frac{\delta E_{exc}}{\delta \rho_\sigma} \tag{3-82}$$

$E_{exc}[\rho_\sigma(\vec{r},t)]$ 是把定态的关联－交换势推广到时间有关的情况．上述时

间有关的K－S方程被成功地用于描述强激光场与团簇相互作用的非线性电子动力学现象.

3.7 散射与反应问题的平均场理论——光学模型[12]

前面讲述的是结合态问题的平均场理论，给出的单粒子态的本征能量是负的，不连续的（对晶体是不同能带的间断性）. 粒子是束缚在原子、原子核或晶体中的. 对于两个多体系统的碰撞，可能发生散射或反应. 这是另一类更为复杂的量子多体问题，其特征是能量为正而且可连续变化. 对这类问题的处理，也可以建立平均场理论，作为更精确处理问题的出发点.

3.7.1 原子碰撞和原子核碰撞问题

两个原子或两个原子核发生碰撞，入射粒子（炮弹）和靶粒子都是量子多体系统，有内部结构，可以发生不交换能量的弹性散射，引起内部激发的非弹性散射，以及炮弹和靶粒子交换粒子或发射粒子、内部结构发生重组变化的反应过程. 随着碰撞能量的增加，弹性散射代之以非弹性散射和反应过程，变得越来越重要. 在许多情况下，上述几类过程同时存在并且相互耦合. 这是一个非常复杂的过程，必须借助合理近似以简化问题，才能得到一些定量的结果. 幸好无论是原子，还是原子核，其内部不同的运动模式都有各自的能标，即特征能量尺度. 不同的运动模式其特征能量尺度常常相差很大，例如分子和原子核的转动、振动以及单粒子激发，它们的能标从小到大依次排列，彼此差别很大. 因此，对于一定的碰撞能量 E，其激发能比 E 大很多的运动模式就不可能激发，因而被冻结起来. 因此，随着碰撞能量从小到大逐步增加，内部运动的（相应的自由度的）解冻是逐步进行的. 在低能碰撞中，弹性散射和少数内部自由度（粒子）参与的反应过程是主要的，这时，平均场理论就是一个很好的近似，这就是碰撞问题中的光学模型.

3.7.2 光学模型

光学模型是建立在低能碰撞的平均场理论的基础之上的，它是基于粒子作为物质波与光波的类比而引入的. 入射粒子德布洛依波在靶粒子附近的传播，类似于光波在一块不均匀介质中的传播；粒子的弹性散射类似于光的折射；反应过程中入射粒子（或其特性）的消失类似于光在介质中被吸收. 光学模型中

的势场有实部、虚部，$U(\vec{r}) = V(\vec{r}) + iW(\vec{r})$；与之对应的光学介质的折射系数也有实部与虚部，$n(\vec{r}) = n_r(\vec{r}) + in_i(\vec{r})$. 实部决定散射与折射过程，虚部决定吸收过程. 这一直观的物理模型能得到十分有用的结果，这一问题将在第6章中详细介绍.

【参考文献】

Ⅰ 量子多体理论

1 A. L. Fetter & J. D. Walecka. Quantum Theory of Many－Particle System. New York: McGraw－Hill, 1971

Ⅱ Hartree－Fock 理论

2 D. R. Hartree. Proc. Cam. Phil. Soc. 1928, 24: 89

3 V. Fock. Z. Phys. 1930, 61: 209

Ⅲ 原子结构理论

4 P. O. Loewdin. Quantum Theory of Atoms, Molecules and the Solid State. New York: Academic Press, 1966

Ⅳ 原子核结构理论

5 徐躬耦,杨亚天. 原子核理论－核结构与核衰变部分. 高等教育出版社, 1987

Ⅴ 固体能带论

6 谢希德,陆栋. 固体能带论. 复旦大学出版社, 1998

7 李正中. 固体理论. 第2版. 高等教育出版社, 2002

Ⅵ 密度泛函理论

8 P. Hohenberg & W. Kohn. Phys. Rev. 1964, B136: 864

9 W. Kohn & L. J. Sham. Phys. Rev. 1965, A140: 1133

Ⅶ C－P理论和时间有关的密度泛函理论

10 K. Car & M. Parrinello. Phys. Rev. Lett. 1985, 55(22): 2471

11 F. Calvayrac, P. G. Reinhard, E. Suraud, C. A. Ullrich. Phys. Reps. 2000, 337: 493～578;
F. Calvayrac, P. G. Reinhard, E. Suraud. Phys. Rev. 1995, B52: R17506;
K. Yabana & G. F. Bertsch. Phys. Rev. 1996, B54: 4484;
F. Calvayrac, P. G. Reinhard, E. Suraud. Ann. Phys. 1997, 255: 125

12 徐躬耦,王顺金. 原子核理论－核反应部分. 高等教育出版社,1992

第4章　多体理论（Ⅱ）：剩余相互作用与二次量子化表象

4.1　多粒子系统量子态的单粒子态描述[1-2]

本章从处理剩余相互作用的物理需要出发，引进二次量子化表象，阐述了二次量子化表象的物理实质.

4.1.1　多粒子系统中的单粒子状态：剩余相互作用与单粒子态量子跃迁

上一章介绍的平均场近似是相互作用多体系统的零级近似. 在这个近似下，二体相互作用用单体平均场代替，每个粒子在整个系统的平均场中运动，具有确定的量子态，称作独立粒子运动. 平均场近似导致独立粒子运动. 在平均场近似（或独立粒子近似）下，对于费米子系统，多体系统的总的波函数是每个粒子的波函数的完全反对称化组合（Slater 行列式）；对于玻色子系统，则是完全对称化组合.

Fermion：

$$\begin{aligned}&\Phi_F(1\cdots A)\\&=N_A\sum_p(-1)^pP(\varphi_1(1)\varphi_2(2)\cdots\varphi_A(A))\\&=\frac{1}{\sqrt{A!}}\det\mid\varphi_1(1)\varphi_2(2)\cdots\varphi_A(A)\mid\end{aligned}\tag{4-1}$$

Boson：

$$\Phi_B(1\cdots A)=N_A\sum_pP(\varphi_1(1)\varphi_2(2)\cdots\varphi_A(A))\tag{4-2}$$

其中
$$N_A=\sqrt{\frac{\Pi n_i!}{A!}},\quad\sum_i n_i=A$$

P 是一切可能的置换算符，n_i 是填充 φ_i 态的玻色子数目.

然而，对于多体系统的正确描述，应当包括平均场和剩余相互作用两个部

分：

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_{\text{res}} \tag{4-3}$$

剩余相互作用的效应是引起单粒子从一个量子态向另一个量子态的跃迁. 考虑剩余相互作用后，对于费米子系统，系统总的波函数将不是一个 Slater 行列式，而是由许多不同的单粒子量子态组态 $|\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_A|$（一个组态，即一组单粒子状态的简称）构成的 Slater 行列式的线性叠加（称为组态混合——许多单粒子量子组态的混合）：

$$\psi(1\cdots A) = \sum_{|\alpha_1\cdots\alpha_A|} C|\alpha_1\cdots\alpha_A|\Phi(\alpha_1\cdots\alpha_A) \tag{4-3}$$

对玻色子系统也一样，剩余相互作用也引起单粒子态量子跃迁和系统总的波函数的组态混合.

因此，考虑剩余相互作用以后，量子多体理论就必须描述多体系统中单粒子从一个量子态向另一个量子态的跃迁，以及计算力学量算符在两个不同的组态 $\Phi(\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_A)$ 和 $\Phi(\beta_1\beta_2\cdots\beta_A)$ 之间的矩阵元. 在坐标表象中描述这一问题是可能的，但是非常繁杂. 为了简化问题，人们发展了二次量子化表象或粒子填充数表象，引进粒子的量子态的产生和消灭算符去描述多体系统中粒子从一个量子态向另一个量子态的跃迁.

小结 平均场是单体算符，使得多体系统中每个粒子有确定的量子态，造成多体系统用一个组态描述的独立粒子运动；剩余相互作用是二体算符，造成多体系统中每个粒子从一个量子态向另一个量子态跃迁，以及多体系统许多组态的混合. 简言之，平均场 $\hat{H}_0$ 确定单粒子量子状态，剩余相互作用 V_{res} 引起单粒子量子态跃迁.

4.1.2 单粒子量子态跃迁与单粒子量子态产生、消灭算符

考虑多体系统的两个组态的跃迁

$$\Phi(\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha\cdots\alpha_A) \to \Phi(\alpha_1\alpha_2\cdots\beta\cdots\alpha_A) \tag{4-4}$$

两个组态的跃迁引起的差别是有一个单粒子量子态从 φ_α 变为 φ_β. 这一跃迁过程可以分两步进行：①量子态 $|\alpha\rangle = |\varphi_\alpha\rangle$ 的消失，②量子态 $|\beta\rangle = |\varphi_\beta\rangle$ 的产生. 对于这两步过程可以引进单粒子量子态 $|\alpha\rangle$ 的消灭算符 a_α 和单粒子量子态 $|\beta\rangle$ 的产生算符 a_β^+. 简单的逻辑思考和数学运算的需要告诉人们，在这两步过程的中间，一定存在③一个无量子态的状态，称之为量子态真空或无粒子

的状态$|0\rangle$.

4.2 二次量子化表象[1-2]

4.2.1 二次量子化表象的基本精神

如上所述，在量子力学多体问题中，二次量子化表象是针对坐标表象处理剩余相互作用的繁杂性而提出的简化方案. 其主要精神是：

(1) 省去单粒子量子态波函数 φ_α 的具体形式，只保留表征这个量子态的量子数 α.

(2) 由于全同性原理，只有单粒子填充的量子态$|\alpha\rangle$是重要的，哪个粒子填充这个态是不可观测的，因而粒子坐标的编号是不重要的，可以省去. 其结果是，A 个量子态被填充而不能区分哪个粒子填充哪个态，这正是全同性原理的恰当体现. 因此，在二次量子化表象中，粒子坐标消失了，只剩下被粒子填充的那些量子态的量子数.

(3) 用单粒子量子态的产生和消灭算符 a_β^+ 和 a_α 去描述粒子从一个态 $|\alpha\rangle = |\varphi_\alpha\rangle$向另一个态 $|\beta\rangle = |\varphi_\beta\rangle$的跃迁；运算的需要要求，其间必须存在一个没有粒子的真空态$|0\rangle$.

(4) 用许多单粒子态的产生算符作用于真空态去描述一个多体系统的组态：

$$\Phi(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_A) \to a_{\alpha_1}^+ a_{\alpha_2}^+ \cdots a_{\alpha_A}^+ \mid 0\rangle \tag{4-5}$$

(5) 相应地，把力学量算符用量子态的产生和消灭算符表示出来，单粒子态波函数的信息包含在力学量的矩阵元中，这些矩阵元由客观性（表象无关性）原则，即力学量算符在坐标表象和在二次量子化表象中矩阵元应当相等去确定.

4.2.2 玻色系统

二次量子化表示法在一维谐振子问题中已经碰到过，一般的二次量子化表象只不过是它的推广. 考虑一维谐振子的二次量子化表象，其哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{4-6}$$

当引进声子产生和消灭算子

$$b^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right) \tag{4-7a}$$

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right) \tag{4-7b}$$

由 $[x, \hat{p}]$ 的对易子 $[x, \hat{p}] = i\hbar$，可得 $[b, b^+]$ 的对易关系

$$[b, b^+] = 1, \quad [b, b] = [b^+, b^+] = 0 \tag{4-8}$$

其逆变换为

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(b^+ + b), \quad \hat{p} = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}i(b^+ - b) \tag{4-9}$$

在声子表象中

$$\hat{H} = (b^+ b + \frac{1}{2})\hbar\omega \tag{4-10}$$

谐振子基态

$$\varphi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\alpha^2x^2/2}, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{4-11}$$

对应于声子真空态$|0\rangle$：

$$|0\rangle = |\varphi_0(x)\rangle \tag{4-12a}$$

用 b 的表达式，易证

$$b|0\rangle = 0 \tag{4-12b}$$

这表明 b 是声子消灭算子，$|0\rangle$ 是没有声子的状态.

不难证明

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}}e^{\frac{-\alpha^2x^2}{2}}H_n(\alpha x) \tag{4-13}$$

对应于 n 个声子的状态$|n\rangle$：

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(b^+)^n|0\rangle \tag{4-14}$$

运用 b，b^+的对易关系，可证$\hat{n} = b^+ b$ 是声子数算子

$$[\hat{n}, b] = -b$$

$$[\hat{n}, b^+] = +b^+ \tag{4-15}$$

且

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

$$b^+ \mid n\rangle = \sqrt{n+1} \mid n+1\rangle \tag{4-16}$$
$$b \mid n\rangle = \sqrt{n} \mid n-1\rangle$$

这样，我们完成了一维谐振子问题的二次量子化表示．现总结如下：

$$\varphi_0(x) \rightarrow \mid 0\rangle$$
$$\varphi_n(x) \rightarrow \mid n\rangle$$
$$\mid x, \hat{p}\mid \rightarrow \mid b, b^+\mid \tag{4-17}$$
$$[x, \hat{p}] = i\hbar \rightarrow [b, b^+] = 1$$
$$\hat{O}(x, \hat{p}) \rightarrow \hat{O}(b, b^+)$$

推广到三维谐振子：

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{1}{2} m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \tag{4-18}$$

$$\varphi_0(x,y,z) = \varphi_0(x)\varphi_0(y)\varphi_0(z) \rightarrow \mid 0\rangle = \mid 0,0,0\rangle = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{3/2} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2(x^2+y^2+z^2)}$$

$$\varphi_{n_x n_y n_z} \rightarrow \mid n_x n_y n_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y! n_z!}} (b_x^+)^{n_x} (b_y^+)^{n_y} (b_z^+)^{n_z} \mid 0\rangle \tag{4-19}$$

$$[x_i, \hat{p}_j] = i\hbar\, \delta_{ij} \rightarrow [b_i, b_j^+] = \delta_{ij}$$
$$\hat{O}(x_i, \hat{p}_i) \rightarrow \hat{O}(b_i, b_i^+) \tag{4-20}$$

由于

$$\langle n_x + 1, n_y - 1, n_z \mid b_x^+ b_y \mid n_x n_y n_z\rangle = \sqrt{n_x + 1}\sqrt{n_y} \tag{4-21}$$

可见，$b_x^+ b_y$ 是从量子态$\mid n_x n_y n_z\rangle$ 向量子态$\mid n_x + 1,\ n_y - 1,\ n_z\rangle$ 跃迁的算子，它是通过消灭一个 y－声子，产生一个 x－声子来实现的．

在一般玻色子系统中，对于单粒子量子态 φ_α，可以引进单粒子态产生算符 b_α^+ 和消灭算符b_α，作用于真空$\mid 0\rangle$ 态后，有对应：

$$\varphi_\alpha = \mid \varphi_\alpha\rangle \rightarrow b_\alpha^+ \mid 0\rangle \tag{4-22}$$
$$\varphi_\alpha^* = \langle \varphi_\alpha \mid \rightarrow \langle 0 \mid b_\alpha$$

b_α，b_β^+ 满足下列对易关系

$$[b_\alpha, b_\beta^+] = \delta_{\alpha\beta},\quad [b_\alpha, b_\beta] = [b_\alpha^+, b_\beta^+] = 0 \tag{4-23}$$

上述对易关系（4－23）规定了两项内容：①b_α^+ 是产生算符，b_α 是消灭算符；②玻色子多体系统对于两个量子态（等价于两个粒子坐标）的交换是对称的（因 $b_\alpha^+ b_\beta^+ = b_\beta^+ b_\alpha^+$），即把玻色子系统的统计法则纳入了对易关系．简言之，

(4－23) 式的第一个式子规定了 b_α^+ 是产生算符，b_α 是消灭算符，而第二个式子规定了统计法则：状态交换的对称性.

对于多体系统的状态，可以用相应单粒子量子态的产生算符作用于真空态而获得

$$\Phi_S(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)\rangle \rightarrow b_\alpha^+ b_\beta^+ b_\gamma^+ b_\delta^+ \cdots \mid 0\rangle$$
$$\langle \Phi_S(\alpha\beta\gamma\delta\cdots) \mid \rightarrow \langle 0 \mid \cdots b_\delta b_\gamma b_\beta b_\alpha \qquad (4-24)$$

S 表示对称化. 上述二次量子化表象的波函数显然对任意两个单粒子量子态的交换是对称的.

若同一量子态 α_i 填充了 n_i 个粒子，则多体系统的状态也可以用填充数 n_i 的集合来表示：

$$\mid n_1 n_2 \cdots n_i \cdots n_A\rangle, n_i = 0,1,2,\cdots$$
$$= (b_1^+)^{n_1}(b_2^+)^{n_2}\cdots(b_i^+)^{n_i}\cdots(b_A^+)^{n_A} \mid 0\rangle \qquad (4-25)$$

可以证明，$\hat{n}_i = b_i^+ b_i$ 是粒子数算子：

$$[\hat{n}_i, b_j] = -b_i\delta_{ij}, \quad [\hat{n}_i, b_j^+] = b_i^+\delta_{ij} \qquad (4-27)$$

且

$$\hat{n}_i \mid n_1 n_2 \cdots n_i \cdots n_A\rangle = n_i \mid n_1 n_2 \cdots n_i \cdots n_A\rangle \qquad (4-28)$$

而产生算子 b_i^+ 和消灭算子 b_i 的作用规则如下：

$$b_i^+ \mid n_1 n_2 \cdots n_i \cdots n_A\rangle = \sqrt{n_i+1} \mid n_1 n_2 \cdots n_i + 1 \cdots n_A\rangle \quad (4-26a)$$

$$b_i \mid n_1 n_2 \cdots n_i \cdots n_A\rangle = \sqrt{n_i} \mid n_1 n_2 \cdots n_i - 1 \cdots n_A\rangle \quad (4-26b)$$

力学量算子的二次量子化表示：

因为一元型力学量 $\hat{O}^{(1)}(\vec{r})$ 只涉及一个粒子的坐标，因而只能引起一个粒子从任意一个量子态向另一个量子态的跃迁，故其二次量子化表示应为单粒子量子态的跃迁算符 $b_\alpha^+ b_\beta$ 的线性叠加：

$$\hat{O}^{(1)}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{A} h(i) \rightarrow \hat{O}(1) = \sum_{\alpha\beta} O_{\alpha\beta}^{(1)} b_\alpha^+ b_\beta \qquad (4-27)$$

二元型力学量 $\hat{O}^{(2)}(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ 涉及两个粒子的坐标，要引起两个粒子的量子态的跃迁，故应是两个粒子的量子态的跃迁算符 $b_\alpha^+ b_\beta^+ b_\delta b_\gamma$ 的线性叠加：

$$\hat{O}^{(2)}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{A} v(ij) \rightarrow \hat{O}(2) = \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} O_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(2)} b_\alpha^+ b_\beta^+ b_\delta b_\gamma \quad (4-28)$$

线性叠加系数即表示的矩阵元 $O_{\alpha\beta}^{(1)}$ 和 $O_{\alpha\beta\gamma\delta}^{(2)}$ 要由力学量的矩阵元与表象无关

(客观性) 来确定：在坐标表象的矩阵元应等于在相应的二次量子化表象的矩阵元. 因为二次量子化表象实用于任意多个粒子的系统，自然包括一个和两个粒子的系统. 对于一元型力学量，比较一个粒子的系统中一元型力学量在两种表象中的矩阵元，就可以确定二次量子表象的矩阵元 $O^{(1)}_{\alpha\beta}$；对于二元型力学量，比较两个粒子的系统中二元型力学量在两种表象中的矩阵元，就可以确定二次量子表象的矩阵元 $O^{(2)}_{\alpha\beta\gamma\delta}$. 对于一个粒子的系统，两种表象中状态基矢的对应为

$$| \varphi_\alpha(\vec{r})\rangle \leftrightarrow | \alpha\rangle$$

一元型力学量 $\hat{O}^{(1)}(\vec{r}) = h(\vec{r})$ 在两种表象的状态基矢中的矩阵元相等，给出 $O^{(1)}_{\alpha\beta}$ 的表示：

$$\langle \varphi_\alpha | h(\vec{r}) | \varphi_\beta = \langle \alpha | \hat{O}(1) | \beta\rangle = O^{(1)}_{\alpha\beta} \tag{4-29}$$

对于两个粒子的系统，两种表象中状态基矢的对应为

$$| \Phi_{\alpha\beta}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\rangle \leftrightarrow | \alpha\beta\rangle$$

其中

$$\Phi(\alpha\beta) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_\alpha(1)\varphi_\beta(2) + \varphi_\alpha(2)\varphi_\beta(1)]$$

二元型力学量 $\hat{O}^{(2)}(\vec{r}_1\ \vec{r}_2) = v(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ 在两种表象的状态基矢中的矩阵元相等，给出 $O^{(2)}_{\alpha\beta\gamma\delta}$ 的表示：由

$$\left\langle \Phi(\alpha\beta) | \hat{O}^{(2)}(r_1 r_2) | \Phi(\alpha'\beta') \right\rangle = \left\langle \alpha\beta | \hat{O}(2) | \alpha'\beta' \right\rangle \tag{4-30}$$

得

$$\frac{1}{2}[\langle \varphi_\alpha\varphi_\beta | \hat{v} | \varphi_\delta\varphi_\gamma\rangle + \langle \varphi_\alpha\varphi_\beta | \hat{v} | \varphi_\gamma\varphi_\delta\rangle] = \frac{1}{2}O^{(2)}_{\alpha\beta\gamma\delta} \tag{4-31}$$

因此

$$\hat{O}(1) = \sum_{\alpha\beta}\langle \varphi_\alpha | \hat{h} | \varphi_\beta\rangle b^+_\alpha b_\beta \tag{4-32a}$$

$$\hat{O}(2) = \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}(\langle \varphi_\alpha\varphi_\beta | \hat{v} | \varphi_\delta\varphi_\gamma\rangle + \langle \varphi_\alpha\varphi_\beta | \hat{v} | \varphi_\gamma\varphi_\delta\rangle) b^+_\alpha b^+_\beta b_\delta b_\gamma \tag{4-32b}$$

上述表示也保证算符对 A 个玻色子的波函数的矩阵元相等：假定系统的波函数 $\Phi_s = \Phi_s(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)$ 有 A 个不同的单粒子状态，则在坐标表象的矩阵元为

$$\left\langle \Phi_s(\alpha\beta\gamma\delta\cdots) | \hat{O}^{(1)}(r) | \Phi_s(\alpha'\beta\gamma\delta\cdots) \right\rangle$$

$$= \frac{1}{A!}(A-1)! \sum_i \langle \varphi_\alpha \mid \hat{h} \mid \varphi_{\alpha'} \rangle$$

$$= \langle \varphi_\alpha \mid \hat{h} \mid \varphi_{\alpha'} \rangle$$

$$\langle \Phi_s(\alpha\beta\gamma\delta\cdots) \mid \hat{O}^{(2)}(rr) \mid \Phi_s(\alpha'\beta'\gamma\delta\cdots) \rangle$$

$$= \frac{1}{A!}(A-2)! \sum_{i \neq j} \langle \varphi_\alpha\varphi_\beta \mid v(ij) \mid \varphi_{\alpha'}\varphi_{\beta'} \rangle + \langle \varphi_\alpha\varphi_\beta \mid v(ij) \mid \varphi_{\beta'}\varphi_{\alpha'} \rangle$$

$$= \langle \varphi_\alpha\varphi_\beta \mid v \mid \varphi_{\alpha'}\varphi_{\beta'} \rangle + \langle \varphi_\alpha\varphi_\beta \mid v \mid \varphi_{\beta'}\varphi_{\alpha'} \rangle \qquad (4-33a)$$

在二次量子化表象的矩阵元为

$$\langle \alpha\beta\gamma\delta\cdots \mid \hat{O}(1) \mid \alpha'\beta\gamma\delta\cdots \rangle = O^{(1)}_{\alpha\beta} = \langle \varphi_\alpha \mid \hat{h} \mid \varphi_{\alpha'} \rangle$$

$$\langle (\alpha\beta\gamma\delta\cdots) \mid \hat{O}(2) \mid (\alpha'\beta'\gamma\delta\cdots) \rangle = O^{(2)}_{\alpha\beta\alpha'\beta'}$$

$$= \langle \varphi_\alpha\varphi_\beta \mid v \mid \varphi_{\alpha'}\varphi_{\beta'} \rangle + \langle \varphi_\alpha\varphi_\beta \mid v \mid \varphi_{\beta'}\varphi_{\alpha'} \rangle \qquad (4-33b)$$

它们显然相等.

从算子的坐标表象到二次量子化表象的变换表明：

(1) 在坐标表象中对粒子坐标的求和，在二次量子化表象中相应于对单粒子量子态的求和.

(2) 计算矩阵元时，由于全同性原理，在坐标空间无论哪个粒子，只要它占据的量子态相同，都给出相同的矩阵元（粒子坐标不过是矩阵元积分计算中的哑变量），因此，建立在矩阵元相等基础上的二次量子化表象不计粒子坐标而只计粒子的量子态，对粒子坐标求和变成了对粒子量子态求和.

求得一元型和二元型力学量算符的二次量子化表示之后，就可得哈密顿量的二次量子化表象：

$$\hat{H}(r) = \sum_{i=1}^{k} \hat{h}(i) + \frac{1}{2} \sum_{ij} v(ij) \rightarrow$$

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha \mid \hat{h} \mid \beta \rangle b^+_\alpha b_\beta + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta \mid v \mid \gamma\delta + \delta\gamma \rangle b^+_\alpha b^+_\beta b_\delta b_\gamma \qquad (4-34a)$$

$$\langle \alpha\beta \mid v \mid \gamma\delta + \delta\gamma \rangle = \langle \varphi_\alpha\varphi_\beta \mid v \mid \varphi_\delta\varphi_\gamma + \varphi_\gamma\varphi_\delta \rangle \qquad (4-34b)$$

应当指出，对于谐振子，我们在坐标与动量算子的层次上引进了 b^+，b；对于一般情况，我们在量子态 φ_α 的层次引进 b^+，b.

这样一来，我们从剩余相互作用要引起单粒子量子态跃迁出发，为了简化

问题，引进了单粒子量子态的产生和消灭算符以及逻辑上所要求的真空态，通过规定产生、消灭算子的对易关系，赋予了这些算子以下的性质：①b_α^+，b_α具有产生、消灭 φ_α 态的性质；②对玻色子系统，b_α^+（b_α）具有交换对称的性质．从而把玻色子多体系统完全对称的状态波函数和力学量算符，用产生、消灭算子表示出来．二次量子化表象对坐标表象而言，不仅是表象变换，而且把多体系统的全同性和统计法则通过对易关系式纳入到产生、消灭算子的性质之中，b^+，b 不仅是粒子量子态的产生、消灭算子，而且是具有交换对称性的 Bose 子的产生、消灭算子．因此，这是描述量子多体系统的有力工具．

4.2.3 费米子系统

对于费米子系统，可以类似地建立起二次量子化表象：单粒子态矢对应如下

$$\begin{aligned} &|\text{真空无粒子态}\rangle \rightarrow |0\rangle \\ &\psi_\alpha = |\psi_\alpha\rangle \rightarrow a_\alpha^+ |0\rangle \\ &\psi_\alpha^* = \langle\psi_\alpha| \rightarrow \langle 0| a_\alpha \end{aligned} \tag{4-35}$$

因为对于全同费米子系统，交换任意两个粒子的坐标，波函数是反对称的，所以规定 a_α，a_α^+ 的算子关系必须是反对易关系，由此规定 a_α，a_α^+ 的运算性质和统计性质如下：

$$\begin{aligned} &\{a_\alpha, a_\beta^+\} = a_\alpha a_\beta^+ + a_\beta^+ a_\alpha = \delta_{\alpha\beta} \\ &\{a_\alpha, a_\beta\} = \{a_\alpha^+, a_\beta^+\} = 0 \end{aligned} \tag{4-36}$$

(4－36) 式的第一排式子规定了 $\{a_\alpha, a_\alpha^+\}$ 分别是消灭算符和产生算符，而第二排式子规定了统计法则：状态交换的反对称性．

多体系统的状态对应为：

$$\begin{aligned} &\Phi_A = |\Phi_A(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)\rangle \rightarrow a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\gamma^+ a_\delta^+ \cdots |0\rangle \\ &\Phi_A^* = \langle\Phi_A(\alpha\beta\gamma\delta\cdots)| \rightarrow \langle 0| \cdots a_\delta a_\gamma a_\beta a_\alpha \end{aligned} \tag{4-37}$$

A 表示反对称化．多体系统的哈密顿量在两种表象中的对应为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{A} h(i) + \frac{1}{2}\sum_{i=j} v(ij) \rightarrow$$

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\beta} \langle\alpha | \hat{h} | \beta\rangle a_\alpha^+ a_\beta + \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle\alpha\beta | v | \gamma\delta - \delta\gamma\rangle a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\delta a_\gamma \tag{4-38a}$$

其中

$$\langle \alpha \mid \hat{h} \mid \beta \rangle = \langle \psi_\alpha \mid \hat{h} \mid \psi_\beta \rangle,$$

$$\langle \alpha\beta \mid v \mid \gamma\delta - \delta\gamma \rangle = \langle \psi_\alpha\psi_\beta \mid v \mid \psi_\gamma\psi_\delta - \psi_\delta\psi_\gamma \rangle \qquad (4-38b)$$

同样可以证明，力学量算符的矩阵元在坐标表象和在二次量子化表象中计算的结果是相同的（表象无关性或客观性原理）.

由 a_α^+，a_α 的对易关系可知

$$(a_\alpha^+)^n = 0 \quad n \geqslant 2 \qquad (4-39)$$

这表明，一个量子态 α 不能填充 1 个以上的粒子（Pauli 原理）. 由 $a_\alpha^+ a_\beta^+ = -a_\beta^+ a_\alpha^+$ 可知

$$\mid \alpha\beta\gamma\delta\cdots \rangle = -\mid \beta\alpha\gamma\delta\cdots \rangle \qquad (4-40)$$

即多体系统的波函数是完全反对称化的，因此，$\{a_\alpha^+, a_\beta^+\} = 0$ 表现了费米子系统的统计法则. 多体系统波函数也可以用填充数 n_α 表示.

$$\mid \alpha\beta\gamma\delta\cdots \rangle = \mid n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots n_\Lambda \rangle \qquad (4-41)$$

由于 Pauli 原理

$$n_\alpha = 0 \quad 或 \quad 1 \qquad (4-42)$$

粒子数算子

$$\hat{n}_\alpha = a_\alpha^+ a_\alpha \qquad (4-43)$$

满足

$$[\hat{n}_\alpha, a_\beta] = -a_\alpha \delta_{\alpha\beta}$$

$$[\hat{n}_\alpha, a_\beta^+] = +a_\alpha^+ \delta_{\alpha\beta} \qquad (4-44)$$

$$\hat{n}_\alpha \mid n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots \rangle = n_\alpha \mid n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots n_A \rangle$$

$$a_\alpha^+ \mid n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots \rangle = \sqrt{1 - n_\alpha} \mid n_\alpha + 1, n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots \rangle \qquad (4-45)$$

$$a_\alpha \mid n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots \rangle = \sqrt{n_\alpha} \mid n_\alpha - 1, n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots \rangle$$

$$a_\alpha^+ a_\alpha \mid n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots \rangle = \sqrt{1 - (n_\alpha - 1)}\sqrt{n_\alpha} \mid n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots \rangle$$

$$= \sqrt{(2 - n_\alpha) n_\alpha} \mid n_\alpha n_\beta \cdots \rangle = n_\alpha \mid n_\alpha n_\beta n_\gamma n_\delta \cdots \rangle \qquad (4-46)$$

这样，我们得到费米子系统的二次量子化表象，给出了状态和力学量之间的一个完全对应.

小结 建立二次量子化表象的思路：

①剩余作用引起单粒子量子态跃迁→②用单粒子量子态的产生、消灭算符

和真空态描述这种跃迁→③产生、消灭算符 a_α^+，a_β 的对易关系不但规定了它们作为粒子的量子态的产生、消灭算符的性质，而且反映了全同性原理和统计法则. 因此，二次量子化表象是包含了全同性原理和统计法则这一普遍物理规律的表象变换.

4.2.4 量子多体系统二次量子化表象的场论形式

上述二次量子化表象是量子多体系统坐标空间表示的简化，通过产生和消灭算子的对易关系把全同性原理和统计法则包括了进去. 简化所抽掉的最重要的信息是单粒子量子态在坐标空间的波函数. 如果把这个抽掉的信息恢复起来，则得到对量子多体系统的完全描述.

4.2.4.1 费米子系统的场论表示

引进费米子量子态振幅算子（费米子场算子）：

$$\hat{\psi}(x)^+ = \sum_\alpha a_\alpha^+ \psi_\alpha^*(x) \tag{4-47a}$$

$$\hat{\psi}(x) = \sum_\alpha a_\alpha \psi_\alpha(x) \tag{4-47b}$$

通过 a_α，a_α^+ 的反对易关系和 ψ_α 的正交归一完备性，可得 $\hat{\psi}(x)$，$\hat{\psi}^+(x')$ 的反对易关系.

$$\begin{aligned}\{\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^+(x')\} &= \sum \{a_\alpha, a_\beta^+\} \psi_\alpha^*(x')\psi_\beta(x) \\ &= \sum_\alpha \psi_\alpha(x)\psi_\alpha^*(x') \\ &= \delta(x - x') \end{aligned} \tag{4-48}$$

$$\{\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')\} = \{\hat{\psi}^+(x), \hat{\psi}^+(x')\} = 0$$

在这个表示中，系统的哈密顿量算子的表示为

$$\begin{aligned}\hat{H} = &\sum_{\alpha\beta}\int \psi_\alpha^*(x)\,\hat{h}(x)\psi_\beta(x)\mathrm{d}x a_\alpha^+ a_\beta + \\ &\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\iint \psi_\alpha^*(x_1)\psi_\beta^*(x_2)v(x_1 - x_2)\psi_\delta(x_2)\psi_\gamma(x_1)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\delta a_\lambda \\ = &\int \hat{\psi}^+(x)\,\hat{h}(x)\,\hat{\psi}(x)\mathrm{d}x + \\ &\frac{1}{2}\int \hat{\psi}^+(x_1)\,\hat{\psi}^+(x_2)v(x_1 - x_2)\,\hat{\psi}(x_2)\,\hat{\psi}(x_1)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\end{aligned} \tag{4-49}$$

其他物理量算符有类似的表示：对动量算符和粒子数算符，有

$$\begin{aligned}\hat{P} &= \int \hat{\psi}^{+}(x)(-i\hbar\vec{\nabla})\hat{\psi}(x)\mathrm{d}x \\ \hat{N} &= \int \hat{\psi}^{+}(x)\hat{\psi}(x)\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{4-50}$$

4.2.4.2 玻色子系统的场论表示

引进玻色子量子态振幅算子（玻色子场算符）：

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}^{+}(x) &= \sum_{\alpha} b_{\alpha}^{+}\varphi_{\alpha}^{*}(x) \\ \hat{\varphi}(x) &= \sum_{\alpha} b_{\alpha}\varphi_{\alpha}(x)\end{aligned} \tag{4-51}$$

通过 b_α，b_α^+ 的对易关系和 φ_α 的正交、归一、完备性，可得

$$\begin{aligned}[\hat{\varphi}(x),\hat{\varphi}^{+}(x')] &= \sum_{\alpha\beta}[b_{\alpha},b_{\beta}^{+}]\varphi_{\alpha}(x)\varphi_{\beta}^{*}(x') \\ &= \sum_{\alpha}\varphi_{\alpha}(x)\varphi_{\alpha}^{*}(x') \\ &= \delta(x-x') \qquad (4-52a)\end{aligned}$$

$$[\hat{\varphi}(x),\hat{\varphi}(x')] = [\hat{\varphi}^{+}(x),\hat{\varphi}^{+}(x')] = 0 \qquad (4-52b)$$

$$\begin{aligned}\hat{H} = &\sum_{\alpha\beta}\int \varphi_{\alpha}^{*}(x)\hat{h}(x)\varphi_{\beta}(x)\mathrm{d}x b_{\alpha}^{+}b_{\beta} + \\ &\frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta}\iint \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\varphi_{\alpha}^{*}(x_1)\varphi_{\beta}^{*}(x_2)v(x_1-x_2)\varphi_{\delta}(x_2)\varphi_{\gamma}(x_1)b_{\alpha}^{+}b_{\beta}^{+}b_{\delta}b_{\gamma}\end{aligned} \tag{4-53}$$

$$\begin{aligned}= &\int \hat{\varphi}^{+}(x)\hat{h}(x)\hat{\varphi}(x)\mathrm{d}x + \\ &\frac{1}{2}\iint \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\,\hat{\varphi}^{+}(x_1)\hat{\varphi}^{+}(x_2)v(x_1-x_2)\hat{\varphi}(x_2)\hat{\varphi}(x_1)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{P} &= \int \mathrm{d}x\,\hat{\varphi}^{+}(x)(-i\hbar\vec{\nabla})\hat{\varphi}(x) \\ \hat{N} &= \int \hat{\varphi}^{+}(x)\hat{\varphi}(x)\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{4-54}$$

在场论表示中，波函数的表达式仍为

$$\begin{aligned}|\alpha\beta\gamma\delta\cdots\rangle_F &= a_{\alpha}^{+}a_{\beta}^{+}a_{\gamma}^{+}a_{\delta}^{+}\cdots|0\rangle \\ |\alpha\beta\gamma\delta\cdots\rangle_B &= b_{\alpha}^{+}b_{\beta}^{+}b_{\gamma}^{+}b_{\delta}^{+}\cdots|0\rangle\end{aligned} \tag{4-55}$$

显然，场算符与波函数有下述关系：

$$
\begin{aligned}
{}_F\langle 0 \mid \hat{\psi}(x) \mid \alpha \rangle_F &= \psi_\alpha(x) \\
{}_B\langle 0 \mid \hat{\varphi}(x) \mid \alpha \rangle_B &= \varphi_\alpha(x)
\end{aligned}
\tag{4-56}
$$

即单粒子态波函数是一个粒子态$|\alpha>$与真空态$|0>$之间的跃迁振幅. 进而有

$$
\begin{aligned}
\langle \alpha \mid \hat{\psi}^+(x)\,\hat{\psi}(x) \mid \alpha \rangle &= \psi_\alpha^*(x)\psi_\alpha(x) = \rho_\alpha^F(x) \\
\langle n_\alpha \mid \hat{\varphi}^+(x)\,\hat{\varphi}(x) \mid n_\alpha \rangle &= n_\alpha \varphi_\alpha^*(x)\varphi(x) = \rho_\alpha^B(x)
\end{aligned}
\tag{4-57}
$$

由此可知，$\hat{\psi}^+(x)\hat{\psi}(x)$是费米子场的密度算符，$\hat{\varphi}^+(x)\hat{\varphi}(x)$是玻色子场的密度算符.

4.2.4.3 量子多体系统二次量子化表象场论形式的特点

(1) 引进了场算符，它们由粒子的量子态产生或消灭算子乘以相应的量子态波函数或其复共轭的线性叠加组成，是粒子态 Hilbert 空间的矢量算子，满足对易或反对易关系式.

(2) $\hat{H}$和力学量算子用场算符表达出来后，对粒子坐标编号和求和消失了，代之以场算符展开式中对粒子的量子态完备基矢求和. 这样的表达式包含了全同粒子的统计法则，适合描述粒子总数不同、可变，以及粒子量子态之间可以跃迁的多体系统. 这正体现出场论系统中粒子产生、湮灭和粒子数可变的特点.

(3) 系统的态矢仍用粒子量子态产生算符作用于真空态生成.

(4) 场算符是单粒子态 Hilbert 空间的矢量算符，它的展开虽然与完备的单粒子量子态基矢的选择无关，但应当选择尽可能接近物理真实的单粒子态. 通常选用各种近似程度下的平均场单粒子态表象.

4.2.4.4 与量子场论的一致性和差别

(1) 一致性：量子多体系统的场论形式表明，量子多体问题与量子场论是一致的，都是基于多体系统粒子数的可变性，粒子的量子态的跃迁与转变的可能性，以及全同性原理和统计法则.

(2) 差别：二者的差别在于，本章所讲的量子多体系统是非相对论性的，而量子场论是相对论性的，具有罗仑兹不变性，涉及粒子－反粒子从真空中的产生和湮灭，以及相对论效应和真空效应.

(3) 回答一个问题：现在可以回答一个困难的问题，即二次量子化是表象

变换还是物理原理？对谐振子问题，二次量子化是一个表象变换（在 x，$\hat{p}$层次上的表象变换），不涉及真实意义上的多粒子系统问题；但对同一类声子，已表现出多粒子系统的许多特点，如声子的全同性和波函数对声子交换的对称性．在一般多体系统中，对描述粒子的量子态跃迁来说，是表象变换；但就包含全同性原理和统计法则而言，又是物理原理．因此，它是一个把全同性原理和统计法则概括进去的表象变换．

（4）场论的二次量子化包含物理原理．把 Dirac 方程看作单电子运动的波动方程，是一次量子化；考虑多电子系统，把波函数变成场函数算符，引进场函数算符的反对易关系，纳入全同性原理和统计法则，Dirac 方程变成场函数的算符方程，多电子系统成为量子场，这是二次量子化．

4.3 原子核的组态混合模型[3]

原子核多体系统的 HF 平均场理论以及相应的壳层模型是很好的零级近似，它的改进则需要考虑剩余相互作用以及由它引起的不同组态的混合．

设平均场近似下核子的量子态为 ψ_α，相应的量子态的产生、消灭算符为 a_α^+，a_α，则原子核哈密顿量可以写成

$$\hat{H} = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha + \frac{1}{4}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\left\langle \alpha\beta \mid v_{\text{res}} \mid r\delta - \delta\gamma \right\rangle a_\alpha^+ a_\beta^+ a_\delta a_\gamma \tag{4-58}$$

$$= \int \hat{\psi}^+(x)\, h(x)\, \hat{\psi}(x)\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\iint \hat{\psi}^+(x_1)\, \hat{\psi}^+(x_2) v_{\text{res}}(x_1 - x_2)\, \hat{\psi}(x_2)\, \hat{\psi}(x_1)\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2$$

v_{res}是剩余相互作用，h（x）为平均场单粒子哈密顿量，$\{\varepsilon_\alpha, \psi_\alpha\}$ 为h的本征解：

$$h\psi_\alpha = \varepsilon_\alpha \psi_\alpha \tag{4-59}$$

场算符在此表象中展开：

$$\hat{\psi}(x) = \sum_\alpha a_\alpha \psi_\alpha(x) \tag{4-60a}$$

$$\hat{\psi}^+(x) = \sum_\alpha a_\alpha^+ \psi_\alpha^*(x) \tag{4-60b}$$

$\hat{H}$的本征态一般形式为

$$\Psi_n(1,\cdots,A)=\sum_{[\alpha_1\cdots\alpha_A]}C^n_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_A}\Phi(\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_A) \qquad (4-62)$$

$\Phi(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_A)=|\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_A\rangle$ 是由一组单粒子态 $\varphi_{\alpha_1}\varphi_{\alpha_2}\cdots\varphi_{\alpha_A}$ 组成的完全反对称态，每一个 $\Phi(\alpha_1,\alpha,\cdots,\alpha_A)$ 称为一个组态，Ψ_n 是各种不同的 $\Phi(\alpha_1,\alpha,\cdots,\alpha_A)$ 线性叠加，称为组态混合.

组态混合壳模型的任务就是选定物理上合理的单粒子态子空间，把上述 $\hat{H}$ 对角化，从而可求得剩余相互作用存在时原子核的本征解（本征能量及其本征态）. 组态混合壳模型计算时的组态空间的维数是非常大的，常常超出计算机的处理能力. 为了简化问题，通常把原子核的满壳层看作不参与内部激发的核心（核实），即把满壳层内的核子的自由度冻结起来，只考虑满壳层外少数几个核子的运动，这些参与相互作用和量子跃迁的核子称为价核子. 选择一个适当的单粒子量子态的 Hilbert 子空间，然后在这个子空间内构造价核子的多体波函数的组态空间，并在这个组态空间内求解（把 $\hat{H}$ 对角化）.

如果在剩余相互作用中只考虑极短程，如 $\delta(r_1-r_2)$ 力，则可以简化成对力. 引进从粒子表象到准粒子表象的幺正变换，在准粒子表象再做一次平均场近似，就可把对力的大部分效应包括进去，得到独立准粒子表象中的解.

顺便指出，当代的原子结构理论，在精密实验的推动下，已超越了平均场近似，采取上述核结构组态混合壳模型的思路，在很大的组态空间处理剩余相互作用，得到十分精确的结果. 原子结构超越平均场的理论，叫做组态相互作用理论.

4.4 固体物理中的几个模型[4-13]

把固体看作理想晶体，求解电子在晶格周期场和电子之间的库仑相互作用产生的自洽平均场中的独立粒子运动，从而得到能带论的解以后，可以进一步考虑在平均场近似中略去的剩余相互作用的影响. 对剩余相互作用的简化处理，产生了超越固体能带论（超越平均场近似）的几个重要模型理论. 下面给予简要的介绍.

4.4.1 固体的磁性与 Heisenberg 模型[5-7]

考虑相邻两个格点上的离子各有一个 d 电子，计算它们之间的库仑相互作

用能. 这个两电子系统的波函数为

$$\psi(12) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \hat{P}_r(12)\,\hat{P}_\sigma(12))\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2)\chi(12) \qquad (4-63)$$

其中 φ_1，φ_2 为电子的空间坐标波函数，χ (12) 是两个电子的自旋波函数，$\hat{P}_r$ (12)，$\hat{P}_\sigma$ (12) 分别是空间坐标和自旋坐标的交换算符：

$$\begin{aligned}&\hat{P}_r(12)[\varphi_1(\vec{r}_1)\varphi_2(\vec{r}_2)] = \varphi_1(\vec{r}_2)\varphi_2(\vec{r}_1)\\&\hat{P}_\sigma(12)\chi(12) = \chi(21)\end{aligned} \qquad (4-64)$$

显然 ψ (12) 是反对称化的($\hat{P}(12)=\hat{P}_r(12)\hat{P}_\sigma(12)$)：

$$\begin{aligned}\hat{P}(12)\psi(12) &= \hat{P}_r(12)\,\hat{P}_\sigma(12)\psi(12)\\&= \psi(21) = -\psi(12)\end{aligned} \qquad (4-65)$$

计算这两个电子的库仑能：

$$\begin{aligned}E_{12} &= \langle\psi(12) \mid \frac{\varepsilon \cdot e^2}{r_{12}} \mid \psi(12)\rangle\\&= \int\varphi_1^*(1)\varphi_2^*(2)\frac{\varepsilon \cdot e^2}{r_{12}}\varphi_1(1)\varphi_2(2)\mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2\langle\chi(12) \mid \chi(12)\rangle -\\&\quad \int\varphi_1^*(1)\varphi_2^*(2)\frac{\varepsilon \cdot e^2}{r_{12}}\varphi_1(2)\varphi_2(1)\mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2\langle\chi(12) \mid \hat{P}_\sigma(12) \mid \chi(12)\rangle\\&= E_{\text{direct}} + E_{\text{ex}}\end{aligned} \qquad (4-66)$$

式中，ε 表示屏蔽效应，E_{direct}为势能的直接项，E_{ex}为交换项. 如果我们在交换项中暂时不对自旋波函数求平均，则交换能在自旋波函数空间变成一个算符：

$$\hat{v}_{\text{ex}} = -J_{12}\,\hat{p}_\sigma, \quad J_{12} = \int\varphi_1^*(1)\varphi_2(2)\frac{\varepsilon \cdot e^2}{r_{12}}\varphi_1(2)\varphi_2(1)\mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2 \qquad (4-67)$$

下面证明交换项中的自旋交换算符可表为

$$\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + 1) = \frac{1}{2}(4\,\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 + 1) \qquad (4-68)$$

考虑自旋$\hat{S}^2 = (\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2$ 和$\hat{S}_z$ 的本征态 χ_μ^{2s+1}：

对自旋三态：当 $S=1$ 时，

$$\hat{S}^2\chi_\mu^3 = S(S+1)\chi_\mu^3 = 2\chi_\mu^3$$

$$\hat{S}_z\chi_\mu^3 = \mu\chi_\mu^3 \tag{4-69}$$

对自旋单态：当 $S=0$ 时，

$$\begin{aligned}\hat{S}^2\chi_0^1 &= 0(0+1)\chi_0^1\\ \hat{S}_z\chi_0^1 &= 0\chi_0^1\end{aligned} \tag{4-70}$$

其中，对 $S=1$，有

$$\chi_{+1}^3 = \chi_{1/2}(1)\chi_{1/2}(2)$$

$$\chi_0^3 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1/2}(1)\chi_{-1/2}(2) + \chi_{1/2}(2)\chi_{-1/2}(1)]$$

$$\chi_{-1}^3 = \chi_{-1/2}(1)\chi_{-1/2}(2)$$

对 $S=0$，有

$$\chi_0^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\chi_{1/2}(1)\chi_{-1/2}(2) - \chi_{1/2}(2)\chi_{-1/2}(1)] \tag{4-71}$$

$$\chi_{1/2} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \quad \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{4-72}$$

$\chi_{\pm 1/2}$是一个电子的自旋 S_z 的本征函数，本征值为 $\pm\frac{1}{2}$.

显然自旋 3－态对电子自旋交换是对称的，即

$$P_\sigma\chi_\mu^3 = \chi_\mu^3 \tag{4-73a}$$

而自旋单态是反对称的，即

$$P_\sigma\chi_0^1 = -\chi_0^1 \tag{4-73b}$$

另一方面

$$\hat{S}^2 = (\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2 = \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\hat{s}_1\cdot\hat{s}_2 = \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2 = \frac{1}{2}(3 + \vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2) \tag{4-74}$$

由 (4－74) 知，$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2$ 可用$\hat{S}^2$ 表示：

$$\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2 = 2\hat{S}^2 - 3 \tag{4-75}$$

对三态 χ_μ^3，$S=1$，有

$$\begin{aligned}&\hat{S}^2 = 1(1+1) = 2 \rightarrow \vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2 = 1\\ &\vec{\sigma}_1\cdot\vec{\sigma}_2\chi_\mu^3 = +1\chi_\mu^3\end{aligned} \tag{4-76}$$

$$\hat{P}_\sigma \chi_\mu^3 = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + 1)\chi_\mu^3 = +1\chi_\mu^3$$

对单态 χ_0^1，$S=0$，$\hat{S}^2=0 \rightarrow \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 = -3$，有

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \chi_0^1 = -3\chi_0^1 \tag{4-77}$$

$$\hat{P}_0 \chi_0^1(12) = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + 1)\chi_0^1 = -1\chi_0^1$$

上述计算表明，对 χ_μ^3 (12) 和 χ_0^1 (12) 都有

$$\hat{P}_\sigma(12) = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + 1) \tag{4-78}$$

因 χ_μ^3 和 χ_0^1 构成两电子系统自旋波函数的完全集，所以，对一般 χ (12)，也有

$$\hat{P}_\sigma = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + 1)$$

这样一来，交换势能算符 $\hat{v}_{ex}$ 化为

$$\hat{v}_{ex} = -\frac{J_{12}}{2}(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 + 1) = -\frac{J_{12}}{2}(4\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + 1) \tag{4-79a}$$

略去常数项后，得

$$\hat{v}_{ex} = -2J_{12}\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \tag{4-79b}$$

考虑晶体所有邻近电子之间的库仑交换项后，有 ($J_0 = 2J_{12}$)

$$\hat{H} = -J_0 \sum_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j = -J_0 \sum_{i\delta} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+\delta} \tag{4-80}$$

这就是著名的 Heisenberg 模型，是在平均场近似的基础上考虑近邻电子之间的库仑相互作用势能的交换项产生的，是描述固体磁性的简化模型.

4.4.2 电子窄带关联与 Hubbard 模型：金属－绝缘相变[8-9]

固体能带论对过渡区金属化合物的电性解释失败，与它略去电子－电子之间的库仑相互作用和关联有关. 考虑电子－电子之间的库仑相互作用后，周期场中电子系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_i h(i) + \frac{1}{2}\sum_{ij} v(ij), \quad v(ij) = \frac{xe^2}{|r_i - r_j|} \tag{4-81}$$

取能带论单电子哈密顿量 h 的本征态表象

$$h\psi_{k\sigma} = E_k \psi_{k\sigma}, \quad \psi_{k\sigma} = \psi_k x_\sigma \tag{4-82}$$

相应的二次量子化表象为（$\psi_{k\sigma}\to C^{+}_{k\sigma}$，$C_{k\sigma}$）

$$\hat{H}=\sum_{k\sigma}E_kC^{+}_{k\sigma}C_{k\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{k_1k_2k_1'k_2'\sigma\sigma'}\langle k_1k_2\mid v\mid k_1'k_2'\rangle C^{+}_{k_1\sigma}C^{+}_{k_2\sigma'}C_{k_2'\sigma'}C_{k_1'\sigma}$$

$$\langle k_1k_2\mid v\mid k_1'k_2'\rangle=\int \mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2\psi^{*}_{k_1}(\vec{r}_1)\psi^{*}_{k_2}(\vec{r}_2)v(12)\psi_{k_2'}(\vec{r}_2)\psi_{k_1'}(\vec{r}_1) \tag{4-83}$$

在瓦尼尔表象中

$$\psi_k(\vec{r})=N^{-1/2}\sum_i \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_i}a(\vec{r}-\vec{R}_i) \tag{4-84}$$

瓦尼尔表象波函数$a(\vec{r}-\vec{R}_i)$是以点阵$\vec{R}_i$为中心的电子的定域性波函数．离散的逆傅氏变换为

$$a(\vec{r}-\vec{R}_i)=N^{-1/2}\sum_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_i}\psi_k(\vec{r}) \tag{4-85}$$

N为点阵数．相应的二次量子化表象也作一傅氏变换

$$C^{+}_{i\sigma}=N^{-1/2}\sum_k \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_i}C^{+}_{k\sigma}$$

$$C_{i\sigma}=N^{-1/2}\sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{R}_i}C_{k\sigma} \tag{4-86}$$

$$\hat{H}=\sum_{ij\sigma}T_{ij}C^{+}_{i\sigma}C_{j\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{ijkl\sigma\sigma'}\langle ij\mid v\mid kl\rangle C^{+}_{i\sigma}C^{+}_{j\sigma'}C_{l\sigma'}C_{k\sigma} \tag{4-87a}$$

$$T_{ij}=N^{-1/2}\sum_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{R}_i-\vec{R}_j)}E_k \tag{4-87b}$$

$$\langle ij\mid v\mid kl\rangle=\int \mathrm{d}\vec{r}\,\mathrm{d}\vec{r}\,'a^{*}(\vec{r}-\vec{R}_i)a^{*}(\vec{r}\,'-\vec{R}_j)v(\vec{r}-\vec{r}\,')a(\vec{r}\,'-\vec{R}_l)a(\vec{r}-\vec{R}_k) \tag{4-87c}$$

用瓦尼尔波函数计算的矩阵元为四中心（$\vec{R}_i\vec{R}_j\vec{R}_k\vec{R}_l$）积分，其中单中心积分，即同一原子（离子）中的两个电子的相互作用最为重要．略去其他多中心积分，则有

$\langle ij\mid v\mid kl\rangle\approx\langle ii\mid v\mid ii\rangle=U$ （由于晶体离散平移不变性，故 U 与 i 无关）

$$\hat{H}=\sum_{ij\sigma}T_{ij}C^{+}_{i\sigma}C_{j\sigma}+\frac{U}{2}\sum_{i\sigma}\hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{i\bar{\sigma}}\quad(\bar{\sigma}=-\sigma) \tag{4-88}$$

$$\hat{n}_{i\sigma}=C^{+}_{i\sigma}C_{i\sigma} \tag{4-89}$$

由于 Pauli 原理，两个处于 i 点的电子，自旋必相反．这就是著名的 Hubbard 模型：除能带论（平均场理论）描述的巡游电子项（第一项）外，它还考虑了两个电子处于同一点阵原子时的库仑排斥能．这一项对金属－绝缘相变起关键

作用：当它很大时，会阻碍电子在固体中的传播，金属就变成绝缘体. 求解 Hubbard 模型是凝聚态物理的主要课题之一. 近年来的研究表明，Hubbard 模型有可能用于描述高温超导，因此，求解 Hubbard 模型更成为凝聚态物理的热点课题.

4.4.3 杂质磁性与 Anderson 模型[10]

设金属中存在一个杂质原子，其中电子处于 d－态时能级为 $E_{d\sigma}$，巡游电子的能级为 $E_{k\sigma}$. 当杂质原子 d－态填充两个电子时，存在库仑相互作用（第三项），其哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} E_k \hat{n}_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_{d\sigma} \hat{n}_{d\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma} \hat{n}_{d\sigma} \hat{n}_{d\bar{\sigma}} + \sum_{k\sigma} V_{kd} (C_{k\sigma}^{+} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{+} C_{k\sigma})$$

式中：

$$\hat{n}_{k\sigma} = C_{k\sigma}^{+} C_{k\sigma}, \quad \hat{n}_{d\sigma} = d_{\sigma}^{+} d_{\sigma} \tag{4-99}$$

(4－99) 式最后一项表示杂质中的 d－态电子与巡游电子可以相互转化，U 与 V_{kd} 的竞争决定了杂质中电子的填充情况，因而决定了杂质的磁性（$n_{d\sigma} = n_{d\bar{\sigma}}$ 时，磁性为零）. 巡游电子与杂质相互作用会出现共振现象（称 Kondo 共振），这是近年来研究的热点. 当金属中杂质原子较多但分布稀疏时，则可以先对一个杂质原子的情况求解，然后对稀疏分布的众多杂质原子做统计平均.

4.4.4 金属的超导电性与 Bardeen-Cooper-Schrieffer（BCS）模型[11－13]

电子－声子相互作用（电子与点阵离子相互作用）：点阵离子的振动会影响电子运动，这是能带论略去了的. 这种相互作用可以导致一对电子之间产生吸引力，形成所谓的 Cooper 对（一对动量和自旋相反的电子，由于上述吸引力而结合成一个稳定的电子对）. Cooper 对的形成导致电子能谱出现能隙，是产生超导电性的原因.

为了描述这一现象，Bardeen-Cooper-Schrieffer 在等效的电子－电子剩余相互作用中，突出了形成 Cooper 对的相互作用（称对力），而略去其他相互作用，提出一个超导模型（BCS 模型），其哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k \hat{n}_{k\sigma} - G \sum_{kk'} a_{k'\uparrow}^{+} a_{-k'\downarrow}^{+} a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow} \tag{4-91}$$

式中：

$$\hat{n}_{k\sigma} = a_{k\sigma}^{+} a_{k\sigma}$$

Cooper 对力是二体相互作用，它要破坏电子的独立粒子运动，使电子运动状

态不确定. 但是，如果作下述保持反对易关系不变的幺正变换：

$$\alpha_{k\sigma}^{+} = U_k a_{k\sigma}^{+} - V_k a_{-k\bar{\sigma}}$$
$$a_{k\sigma} = U_k a_{k\bar{\sigma}} - V_k a_{-k\sigma}^{+} \qquad (4-92)$$

其逆变换：

$$a_{k\sigma}^{+} = U_k \alpha_{k\sigma}^{+} + V_k \alpha_{-k\bar{\sigma}}$$
$$a_{k\sigma} = U_k \alpha_{k\bar{\sigma}} + V_k \alpha_{-k\sigma}^{+} \qquad (4-93)$$
$$U_k^2 + V_k^2 = 1 \qquad (4-94)$$

可证

$$\{a_{k\sigma}, a_{k'\sigma'}^{+}\} = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'} \rightarrow \{\alpha_{k\sigma}, \alpha_{k'\sigma'}^{+}\} = \delta_{kk'}\delta_{\sigma\sigma'} \qquad (4-95)$$

以 $\{\alpha_{k\sigma}, \alpha_{k\sigma}^{+}\}$ 表示的粒子称为准粒子. 在准粒子表象中，电子填充的几率为 U_k^2. 如果准粒子数 $\sum_{k\sigma}\alpha_{k\sigma}^{+}\alpha_{k\sigma}$ 守恒，则粒子数 $\hat{N} = \sum_{k\sigma} a_{k\sigma}^{+} a_{k\sigma}$ 就不守恒. 因此，在准粒子表象中，电子数不守恒. 为了解决这一问题，可以要求电子数 N 的平均值守恒. 并可以用拉氏乘子方法，构造一个 $\hat{H}_\lambda$，把粒子数平均守恒的约束条件纳入进去：

$$\hat{H}_\lambda = \hat{H} - \lambda \hat{N} \qquad (4-96)$$

求解 $\hat{H}_\lambda$ 的基态解 Ψ，要求

$$\langle \Psi \mid \hat{N} \mid \Psi \rangle = N \qquad (4-97)$$

即可定出 λ（费米能）. 把 $\hat{H}_\lambda$ 在 $[a_{k\sigma}, \alpha_{k\sigma}^{+}]$ 表象中表示出来，其中包含：

常数项 $E_0(\lambda)$

正比于 $(\alpha_{k\sigma}^{+}\alpha_{k\sigma})$ 的项 $\hat{H}_{11}$

正比于 $(a_{k\sigma}\alpha_{-k\bar{\sigma}} + \alpha_{k\sigma}^{+}\alpha_{-k\bar{\sigma}}^{+})$ 的项 $\hat{H}_{20}$

正比于 $\alpha_{k\sigma}^{+}\alpha_{-k\bar{\sigma}}^{+}\alpha_{-k'\bar{\sigma}}\alpha_{k'\sigma'}$ 的项 $\hat{H}_{22}$

$$\hat{H}_\lambda = E_0(\lambda) + \hat{H}_{11} + \hat{H}_{20} + \hat{H}_{22} \qquad (4-98)$$

略去 $\hat{H}_{22}$，让 $\hat{H}_{20}$ 的系数为 0，得 (U_k, V_k) 满足的方程，其解使 $\hat{H}_\lambda$ 对角化：

$$\hat{H}_\lambda = E_0(\lambda) + \sum_{k\sigma} E_k \alpha_{k\sigma}^{+}\alpha_{k\sigma} \qquad (4-99)$$

其中准粒子能量为

$$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + \Delta^2} \qquad (4-100)$$

能隙为

$$\Delta = G\sum_k U_k V_k \tag{4-101}$$

幺正变换系数为

$$\begin{cases} U_k^2 = \frac{1}{2}[1 + \frac{\varepsilon_k - \lambda}{E_k}] \\ V_k^2 = \frac{1}{2}[1 - \frac{\varepsilon_k - \lambda}{E_k}] \end{cases} \tag{4-102}$$

这是一组关于 Δ 的自洽场方程，可自洽定出 U_k，V_k，E_k，Δ. 超导基态解电子对能级的填充几率如图 4－1 所示.

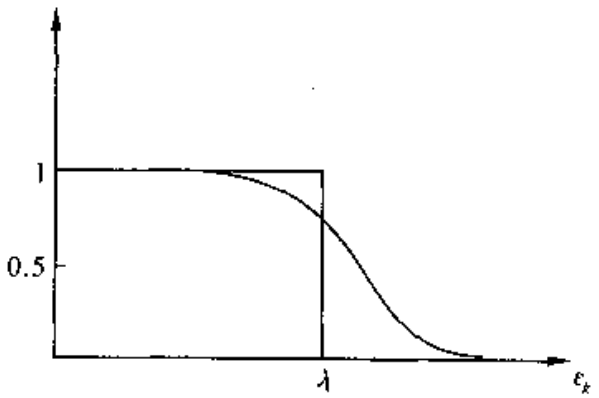


图 4－1　超导基态解电子对能级的填充几率

以上是温度 $T=0$ 的解. 当 $T>0$ 时，要运用包含温度的平均场理论. 这时求出的能隙与温度有关：$\Delta=\Delta(T)$. 从 $\Delta(T)=0$ 可以定出 T_C，即超导的临界温度.

能隙 Δ 的存在，使低温下准粒子不易被激发，电子的集体流动不会引起内部激发，因而不会损失能量，故出现超导（超流）现象. 但当温度升高，热运动平均动能超过能隙 Δ 时，准粒子被激发，电子的集体流动能量转化为内部热运动能，电子流动出现电阻，超导现象消失.

【参考文献】

I　二次量子化

1　N. N. 波格留玻夫. 量子统计学. 科学出版社，1959

2　A. L. Fetter and J. D. Walecka. Quantum Theory of Many-Particle System.

New York: McGraw－Hill, 1971

Ⅱ 核结构模型

3 徐躬耦，杨亚天. 原子核理论－核结构与核衰变部分. 高等教育出版社，1987

Ⅲ 凝聚态模型

4 李正中. 固体理论. 第二版. 高等教育出版社，2002

Ⅳ 海森堡模型

5 A. C. Hewson. The Kodon Problem to Heavy Fermions. Cambridge: Cambridge University Press, 1993

6 W. Heisenberg. Z. Phys. 1928, 49: 619

7 P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc. (London). 1929(A123): 714

Ⅴ 哈伯德模型

8 J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. (London), 1963, A276: 238

9 J. Hubbard. Proc. Roy. Soc. (London), 1964, A281: 401

Ⅵ 安德森模型

10 P. W. Anderson. Phys. Rev. 1961(124): 41

Ⅶ BCS 理论

11 J Bardeen, I. N. Cooper and J. R. Schrieffer. Phys. Rev. 1957(103): 1175

12 J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. Benjamin, New York, 1964

13 G. D. Mahan: Many-Particle Physics. 2nd Edition. New York and London: Plunum Press, 1990

第 5 章　多体理论（Ⅲ）：超越平均场近似的非微扰理论：密度矩阵理论和Green函数理论

5.1　纯态与混合态、多体系统的关联等级描述[1-3]

前面两章介绍的以平均场近似为中心的量子多体理论，都是基于多体系统的状态用一个波函数来描述的，而这个波函数服从薛定格方程．这种以波函数和薛定格方程为基础的、对多体系统的描述是量子力学的描述．本章要介绍超越量子力学描述的量子统计力学的描述．

5.1.1　纯态与混合态

从量子统计力学的观点看，用一个波函数描述系统的状态称为纯态，这样的系统称为纯粹系综．在一般情况下，一个量子系统需要用几个或一系列波函数 ψ_1，ψ_2，…，ψ_n，…来描述，每一个状态以一定的几率 w_1，w_2，…，w_n，…出现，但它们不能叠加产生一个新的量子态，这样的量子状态称为混合态，这样的系统称为混合系综．如把一个量子系统放在一个热槽中，由于受热槽的影响，这个系统的本征态 $\{E_n, \psi_n\}$ 会以 $w_n \approx e^{-E_n/kT}$ 的几率出现．这些几率 w_n 不是由量子力学定律决定的几率，而是由统计热力学定律（所谓正则系综）决定的几率，因而是经典性的几率．

对于混合系综，前面两章描述纯粹系综的量子力学方法显然是不够的，必须寻求新的描述方法．本章介绍的密度矩阵理论和 Green 函数理论正好适合对混合系综的描述．因为纯粹系综是混合系综的特例（$w_0 = 1$，其他 $w_n = 0$），密度矩阵描述和 Green 函数描述自然也适合描述纯粹系综，所以与使用波函数的量子力学描述是等价的．

5.1.2　多体系统的关联等级理论[3]

除了适应描述混合系综，即量子统计力学的需要外，发展密度矩阵理论和

Green 函数理论还有别的原因. 其中之一是，这两种理论都蕴含着按粒子数从少到多的关联等级描述的可能性. 前面已指出，剩余相互作用要破坏粒子的独立量子运动，造成粒子间的关联. 这种关联按粒子数多少有二体关联、三体关联直至 n 体关联等不同等级的多体关联. 密度矩阵理论和 Green 函数理论能很好地描述粒子之间因相互作用、相互影响而形成的多体关联，而且能发展成为描述各个不同等级的多体关联的关联等级理论. 在适当的等级截断之下，它不仅包含平均理论，而且还包含各种高阶关联的非微扰理论. 这正是处理强耦合系统所特别需要的，因而具有特殊的吸引力.

5.2 密度矩阵理论：多体关联密度矩阵动力学[2,3]

5.2.1 密度矩阵与冯·诺意曼方程

考虑具有二体相互作用的费米子系统，其哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{A} \hat{h}(i) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{A} v(ij), \quad \hat{H}^{+} = \hat{H} \tag{5-1}$$

$$\hat{h} = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r) \tag{5-2}$$

而与时间有关的多体薛定格方程为

$$i\hbar \frac{\partial \psi_A(x)}{\partial t} = \hat{H}\psi_A(x) \tag{5-3a}$$

其共轭方程为

$$-i\hbar \frac{\partial \psi(x')^*}{\partial t} = \hat{H}(x')\psi_A(x')^* \tag{5-3b}$$

由 $\psi_A\ (x)^* \times$ (5−3a) − (5−3b) $\times \psi_A\ (x')$ 得

$$i\hbar \frac{\partial \rho_A(x,x')}{\partial t} = \hat{H}(x)\rho_A(x,x') - \rho_A(x,x')\,\hat{H}(x') \tag{5-4}$$

式 (5−4) 称为冯·诺意曼方程，是 A 个粒子的量子系统的密度矩阵

$$\rho_A(x,x',t) = \psi_A(xt)\psi_A^*(x't) \tag{5-5}$$

所满足的运动方程. $\rho_A\ (x,\ x',\ t)$ 是密度矩阵算符（统计算符）$\hat{\rho}_A$ 在坐标表象的矩阵元，其中 $(x,\ x')$ 矩阵的行列指标与通常矩阵的行列指标不同的是，它们取连续值. 写成算符形式后，冯·诺意曼方程可简练地写为

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_A}{\partial t} = [\hat{H}\hat{\rho}_A - \hat{\rho}_A \hat{H}] = \hat{L}_H \hat{\rho}_A \tag{5-6}$$

$\hat{L}_H$ 是对应于$\hat{H}$的冯·诺意曼算符（或量子刘维算符），$\hat{\rho}_A$ 用 Dirac 符号的抽象表示为

$$\hat{\rho}_A = |\psi_A\rangle\langle\psi_A| \tag{5-7}$$

在 X～表象中的矩阵元为

$$\rho_A(x,x',t) = \langle x | \hat{\rho}_A | x' \rangle = \langle x | \psi_A \rangle \langle \psi_A | x' \rangle = \psi_A(x)\psi_A^*(x') \tag{5-8}$$

可证冯·诺意曼方程（5－6）与薛定格方程（5－3）等价：以 $\psi_A(x')$ 右乘（5－6）式，并对 dx'积分得（用到归一化条件不变，$\frac{d}{dt}\langle\psi_A|\psi_A\rangle = 0$）

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})\psi_A(x,t)$$

$$= \left[\langle \psi_A | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi_A \rangle - \langle \psi_A | H | \psi_A \rangle\right]\psi_A(x,t)$$

由于 $\psi_A(x, t)$ 的任意性，算子 $(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})$ 作用在任意的 $\psi_A(x, t)$ 上还等于 $\psi_A(x, t)$ 是不可能的，因此，必有 $(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})\psi_A(x, t) = 0$，方程才能成立．这就从冯·诺意曼方程得到薛定格方程．

冯·诺意曼方程可以推广到混合系综的情况，这时，

$$\hat{\rho}_A = \sum_n w_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n |, \sum_n w_n = 1, \dot{w}_n = 0 \tag{5-9}$$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}_A}{\partial t} = (\hat{H}\hat{\rho}_A - \hat{\rho}_A \hat{H}) = \hat{L}_H \hat{\rho}_A \tag{5-10}$$

其中

$$\hat{H} | \psi_n \rangle = E_n | \psi_n \rangle, \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm} \tag{5-11}$$

冯·诺意曼方程（5－10）右乘$|\psi_n\rangle$ 消去公因子 w_n 后，得

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}) | \psi_n \rangle$$

$$= \left[\sum_m \frac{w_m}{w_n} | \psi_m \rangle \langle \psi_m | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi_n \rangle - \langle \psi_n | \hat{H} | \psi_n \rangle | \psi_n \rangle\right]$$

同样的理由导致

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H})\mid\psi_n\rangle=0$$

由于混合态的分布几率 w_n 是外部引进的、与时间无关的，因此，冯·诺意曼方程描述的是混合系综的动力学演化，即由 ψ_n（x，t）的量子动力学演化引起的$\hat{\rho}_A$（t）的动力学演化. 在$\hat{\rho}_A$ 中，ψ_n（x，t）是量子力学动力学量，而 w_n 是外来的统计量.

5.2.2 约化密度矩阵及其运动方程

引进 n－体约化密度矩阵

$$\rho_n(12\cdots n;\,1'2'\cdots n')$$

$$=\frac{1}{(A-n)!}\operatorname*{tr}_{(n+1\cdots A)}\rho_A(1,2,\cdots,n,n+1,\cdots,A;\,1',2',\cdots,n',n+1,\cdots,A)$$

$$=\frac{1}{(A-n)!}\int\rho_A(x_1\cdots x_n x_{n+1}\cdots x_A;x_1'\cdots x_n' x_{n+1}\cdots x_A)\mathrm{d}x_{n+1}\cdots\mathrm{d}x_A \qquad (5-12)$$

其中 $Sp=\mathrm{tr}$ 为求迹运算. 令单粒子（一体）密度矩阵

$$\rho_1(x,x')=\rho(x,x'),$$

其对角元素 ρ（x，x）表示多体系统在 x 点的粒子密度；二体密度矩阵 ρ_2 的对角元 ρ_2（x_1x_2；x_1x_2）表示在 x_1 和 x_2 点各有粒子的联合密度，其余以此类推. 从（5－9）式可见，$\hat{\rho}_n$ 的对角元出现的量子力学波函数的相位角由于波函数复共轭运算正好相消，只有$\hat{\rho}_n$ 的非对角元体现出多粒子系统的量子力学波函数的全部信息：相位和振幅，包含着物质波的相干性信息. 因此，量子力学波函数作为物质波的动力学信息主要包含在$\hat{\rho}_n$ 的非对角元之中，它们真正体现出量子力学关联.

对 ρ_A 的运动方程求迹，可以得到 ρ_n 的运动方程，即

一体密度矩阵：

$$i\hbar\frac{\partial\rho(11')}{\partial t}=[\hat{h}(1)\rho(11')-\rho(11')\hat{h}(1')]$$
$$+\operatorname*{tr}_{(2)}[v(12)\rho_2(12,1'2')-\rho_2(12,1'2')v(1'2')]$$
$$=[\hat{h},\rho]+\operatorname*{tr}_{(2)}[v,\rho_2] \qquad (5-13)$$

二体密度矩阵：

$$i\hbar\frac{\partial\rho_2}{\partial t}=[\hat{h}(1)+\hat{h}(2),\rho_2]+\operatorname*{tr}_{(3)}[v(13)+v(23),\rho_3] \qquad (5-14)$$

$$\vdots$$

n – 体密度矩阵：

$$i\hbar\frac{\partial\rho_n}{\partial t}=\cdots \tag{5-15}$$

上述 ρ_n 的运动方程叫做 BBGKY 系列，它是链条式的、耦合的、非线性的运动方程组系列，与冯·诺意曼方程等价. 它的优点是，把描述多体系统总体性质 ρ_A 的运动方程分解成描述 ρ_1，ρ_2，…，ρ_n 等一系列部分粒子集团的性质的运动方程，ρ_n 所描述的 n 个粒子集团子结构正好包含量子多体系统的 n – 体关联. BBGKY 系列的缺点是，没有提供一个合理而系统的截断方案，因而这个众多（几乎无限）的运动方程组系列不能截断求解. 克服这一缺点的努力导致关联密度矩阵动力学的建立.

5.2.3 多体关联密度矩阵动力学[3-5]

对约化密度矩阵 ρ_n 作集团展开得

$$\rho_n=AS\sum_{p=1}^{n-1}\rho_{n-p}\rho_p+C_n\quad(c_1=\rho_1=\rho) \tag{5-16}$$

其中 C_n 是 n – 体关联，A 是反对称化运算，S 是对称化运算. 以 ρ_2 为例，有

$$\begin{aligned}\rho_2(12,1'2')&=AS\rho(11')\rho(22')+C_2(12,1'2')\\&=\rho(11')\rho(22')-\rho(12')\rho(21')+C_2(12,1'2')\end{aligned} \tag{5-17}$$

通过集团展开，ρ_n 的运动方程就变成 C_n 的运动方程（其中 $c_1=\rho$）：

$$i\hbar\dot{\rho}=[h,\rho]+\mathrm{tr}[v,AS\rho\rho+C_2] \tag{5-18}$$

$$\begin{aligned}i\hbar\dot{C}_2=&[h(1)+h(2),C_2]+[v,AS\rho\rho+C_2]\\&+\mathrm{tr}[v(13)+v(23),AS(\rho\rho\rho+\rho C_2)+C_3]_L\end{aligned} \tag{5-19}$$

$$\vdots$$

$$i\hbar\dot{C}_n=\cdots \tag{5-20}$$

其中 $[\cdots\cdots]_L$ 表示连接项，该项中每个函数因子中的变量是重复相联的（对应于场论中连接的 Feynman 图形）.

上述方程构成了关联密度矩阵动力学的基本方程，其特点是：

(1) 从 ρ_n 中分离出连接的不可约的部分，像场论中的不可约连接图形一样，避免了信息的重复；

(2) 是非线性的耦合的运动方程，既体现出各阶多体关联的相对独立性，又体现出它们之间的耦合与关联；

(3) 因为多体关联 C_n 随 n 的增加而迅速减小，所以上述方程组本身提供了一个自然而合理的截断方案；

(4) 对每一种截断近似，都导致一组封闭的非线性非微扰的耦合的运动方程.

5.2.4 二体关联密度矩阵动力学及其应用

二体关联密度矩阵动力学方程组由假定三体以上的关联为零而得到，它们是

$$i\hbar\dot{\rho} = [h,\rho] + \mathrm{tr}[v(12), AS\rho\rho + C_2] \tag{5-21a}$$

$$i\hbar\dot{C}_2 = [h(1)+h(2), C_2] + [v(12), AS\rho\rho + C_2] + \mathrm{tr}[v(13)+v(23), AS(\rho\rho\rho + \rho C_2)]_L \tag{5-21b}$$

这是耦合的、非线性的、非微扰的、包含 ρ 和 C_2 的、封闭的运动方程组，是超越平均场近似（TDHF）的运动方程，已获得广泛的应用.

5.2.4.1 平均场近似：TDHF 和 HF

令 $C_2=0$，从二体关联密度矩阵动力学方程得到平均场近似的方程：

$$i\hbar\dot{\rho} = [h,\rho] + \mathrm{tr}[v(12), AS\rho\rho] \tag{5-22}$$

这是密度矩阵形式的 TDHF 理论.

因为$\hat{\rho}$是厄密的，所以可以通过幺正变换对角化. 在其本征表象中，

$$\hat{\rho} = \sum_\alpha n_\alpha |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha| \tag{5-23}$$

填充状态$|\psi_\alpha\rangle$ 的几率 n_α 满足

$$\sum_\alpha n_\alpha = A, \quad 0 \leqslant n_\alpha \leqslant 1 \tag{5-24}$$

$|\psi_\alpha\rangle$ 是正交归一完备的单粒子态：

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}, \quad \sum_\alpha |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha| = I \tag{5-25}$$

显然$|\psi_\alpha\rangle$ 是$\hat{\rho}$的本征态，其本征值为 n_α：

$$\hat{\rho}|\psi_\alpha\rangle = \sum_{\alpha'} n_{\alpha'}|\psi_{\alpha'}\rangle\langle\psi_{\alpha'}|\psi_\alpha\rangle = \sum_{\alpha'} n_{\alpha'}\delta_{\alpha\alpha'}|\psi_{\alpha'}\rangle = n_\alpha|\psi_\alpha\rangle \tag{5-26}$$

一般情况下，$0\leqslant n_\alpha\leqslant 1$，因此

$$|\hat{\rho}^2| = \left|\sum_\alpha n_\alpha^2 |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_x|\right| \leqslant |\hat{\rho}| \tag{5-27}$$

TDHF 近似为独立粒子近似，每个粒子有确定的量子态，即填充几率必须为 $n_\alpha=1$ 或 0. 这样，

$$\hat{\rho}^2=\hat{\rho}\to n_\alpha=\begin{cases}1, & \text{填充}\\ 0, & \text{不填充}\end{cases} \tag{5-28}$$

因此，TDHF 的 $\hat{\rho}_{\mathrm{TDHF}}$ 为

$$\hat{\rho}_{\mathrm{TDHF}}=\sum_\alpha |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha| \tag{5-29}$$

把 $\hat{\rho}_{\mathrm{TDHF}}$ 代入 $\hat{\rho}$ 的运动方程，按照从冯·诺意曼方程到薛定格方程类似的推导，可得

$$i\hbar\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t}=(\hat{h}+\hat{U}_{\mathrm{TDHF}})\psi_\alpha \tag{5-30a}$$

其中平均场 $\hat{U}_{\mathrm{TDHF}}$ 与 t 有关，定义为

$$\hat{U}_{\mathrm{TDHF}}\psi_\alpha(x)=\sum_\beta\int\psi_\beta^*(1')v(1'1)[\psi_\beta(1')\psi_\alpha(1)-\psi_\beta(1)\psi_\alpha(1')]\mathrm{d}1' \tag{5-30b}$$

这正是 TDHF 方程. 在定态极限下，$\psi_\alpha(x,t)=\mathrm{e}^{-i\epsilon_\alpha t/\hbar}\psi_\alpha(x)$，导致 HF 方程

$$(\hat{h}+\hat{U}_{\mathrm{HF}})\psi_\alpha(x)=\epsilon_\alpha\psi_\alpha(x) \tag{5-31}$$

其中 $U_{\mathrm{HF}}(x)$ 与 t 无关. 等式（5－31）是单粒子在平均场中的本征方程（见第 3 章）.

5.2.4.2 应用：原子的表面振动、巨共振和重离子核反应

二体关联密度矩阵动力学方程在原子核的表面振动、巨共振和重离子核反应等方面获得了成功的应用. 现在简单介绍一下这方面的情况.

对于原子核的表面振动和巨共振，量子运动的振幅较小，因此可以选取 TDHF 的单粒子态解作为表象的基矢. 设 TDHF 的解为 $\psi_\alpha(x,t)$，满足

$$i\hbar\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial t}=(\hat{h}+\hat{U}_{\mathrm{TDHF}})\psi_\alpha$$

原则上，这样的解是正交完备归一的：

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle=\delta_{\alpha\beta}$$

为了使二体关联能发展起来，要求基矢 ψ_α 的数目 N 比核子的数目 A 大很多，即 $N\gg A$. 把 ρ 和 C_2 在 ψ_α 基矢上展开，得

$$\rho(x,x';t)=\sum_{\alpha\beta}n_{\alpha\beta}\psi_\alpha(x,t)\psi_\beta^*(x',t) \tag{5-32a}$$

$$C_2(x_1x_2,x_1'x_2';t)=\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}C_{\alpha\beta\gamma\delta}\psi_\alpha^*(x_1,t)\psi_\beta^*(x_2,t)\psi_\delta(x_2',t)\psi_\gamma(x_1',t) \tag{5-32b}$$

把等式（5－32a）、（5－32b）代入 ρ 和 C_2 的运动方程（5－21），可以得到 ρ 和 C_2 的展开式系数 $n_{\alpha\beta}$ 和 $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ 的运动方程，这是二体关联密度矩阵动力学中 ρ 和 C_2 的运动方程在 $|\psi_\alpha|$ 所张的子空间内的近似方程．子空间越大，越接近原来的运动方程．求解了 ψ_α，$n_{\alpha\beta}$ 和 $C_{\alpha\beta\gamma\delta}$ 的运动方程之后，就可以构造出 ρ 和 C_2，从而计算一元型力学量和二元型力学量的平均值：

动量：　$\langle\hat{P}\rangle=\mathrm{tr}\rho\hat{P}$

粒子数：　$\langle\hat{n}\rangle=\mathrm{tr}\,\hat{\rho}$

能量：　$\langle\hat{H}\rangle=\mathrm{tr}\rho\hat{h}+\frac{1}{2}\mathrm{tr}(A\rho(1)\rho(2)+C_2)v(12)$ (5－33)

求解二体关联动力学方程组所用的 TDHF 方程的解与通常的 TDHF 方程的解是不同的，通常的 TDHF 方程的解的数目 N 与系统的粒子数目 A 是相等的，即 $N=A$．由这样的基矢构造的 ρ，其对角化后的本征值 n_α 只能取 0 或 1（$n_\alpha=0$ 或 $n_\alpha=1$）．在这样的表象中，可以证明 C_2 不可能发展起来，而且 $C_2=0$．其证明如下：

因

$$\begin{aligned}&\rho_2(x_1x_2,x'_1x'_2;t)\\&=\rho(x_1x_1't)\rho(x_2x_2't)-\rho(x_1x_2't)\rho(x_2x_1't)+C_2(x_1x_2,x_1'x_2't)\end{aligned} \tag{5-34}$$

从

$$\rho(x_1x_1't)=\frac{1}{(A-1)}\operatorname*{tr}_{(x_2)}\rho_2(x_1x_2,x_1'x_2';t) \tag{5-35}$$

及 ρ 和 C_2 在 ρ 的本征表象的展开式

$$\rho(x,x';t)=\sum_a n_a\psi_a(x,t)\psi_a^*(x',t) \tag{5-36}$$

$$C_2(x_1x_2,x_1'x_2';t)=\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}C_{\alpha\beta\gamma\delta}\psi_\alpha^*(x_1,t)\psi_\beta^*(x_2,t)\psi_\delta(x_2',t)\psi_\gamma(x_1',t) \tag{5-37}$$

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle=\delta_{\alpha\beta},$$

可得

$$n_\alpha^2 - n_\alpha - C_\alpha = 0, \quad C_\alpha = \sum_\beta C_{\alpha\beta\alpha\beta} \tag{5-38}$$

$$n_\alpha = (1 \pm \sqrt{1 + 4C_\alpha})/2 \tag{5-39}$$

如果 $n_\alpha = 0$ 或 $n_\alpha = 1$，那么必有 $C_\alpha = 0$. 因此，$C_2 = 0$. 上述分析表明，要使二体关联 C_2 充分发展起来，基矢 ψ_α 的数目必须很大，这就使计算量增加. 实际计算要求计算时间与计算精度的平衡，需选择适当大的单粒子态子空间.

重离子核反应属于大振幅运动，若仍用 TDHF 表象，则基矢 ψ_α 的数目必须非常大，才能较好地描述大振幅运动，这在计算上是难于实现的，必须寻找另外的更合适的表象. 研究表明，与时间有关的高斯波包表象（或与时间有关的相干态表象），对于描述重离子核反应这样的大振幅量子运动是方便的. 把二体关联密度矩阵动力学方程在运动的高斯波包表象中求解，这就是重离子核反应的二体关联输运理论（TBCTT）[8].

5.2.5 两类不同自由度的约化密度矩阵

考虑一个量子体系有两类不同的自由度，人们关心的相关自由度是 $\{X_i\}$，不大关心的非相关自由度是 $\{\xi_j\}$. 系统的哈密顿量为

$$\hat{H}(X,\xi) = \hat{H}_0(X) + \hat{H}_1(\xi) + \hat{H}_{\text{int}}(X,\xi) \tag{5-40}$$

从与时间有关的薛定格方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi(X,\xi,t)}{\partial t} = \hat{H}(X,\xi)\psi(X,\xi,t) \tag{5-41}$$

可得冯·诺意曼方程

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho(X,\xi,X',\xi',t)}{\partial t} &= [\hat{H},\rho] \\ &= \hat{H}(X,\xi)\rho(X,\xi,X',\xi',t) - \rho(X,\xi,X',\xi',t)\,\hat{H}(X'\xi') \end{aligned} \tag{5-42}$$

若只对子系统 $\{X_i\}$ 感兴趣，则可以把 $\{\xi_i\}$ 自由度积分掉，得 $\{X_i\}$ 空间的约化密度矩阵

$$\rho(X,X',t) = \operatorname{tr}_{(\xi)} \rho(X_i\xi_i, X'_i\xi_i', t) \tag{5-43}$$

及其运动方程

$$i\hbar \frac{\partial \rho(X,X',t)}{\partial t} = \operatorname{tr}_{(\xi)} [\hat{H}(X\xi)\rho(X\xi,X'\xi',t) - \rho(X\xi,X'\xi',t)\,\hat{H}(X'\xi')] \tag{5-44}$$

进而计算 $\{X_i\}$ 空间的力学量$\hat{O}(X,\hat{P})$. 反之，可得 $\{\xi_i\}$ 空间的约化密度矩阵

$$\rho(\xi,\xi',t)=\operatorname*{tr}_{(X)}\rho(X_i\xi_i,X'_i\xi_i',t) \tag{5-45}$$

及其运动方程，并计算相应的力学量$\hat{O}(\xi,\hat{P}_\xi)$的平均值.

例如，一个谐振子在热槽的影响下运动，则振子自由度 $\{X_i\}$ 是我们关心的自由度，热槽分子的自由度 $\{\xi_i\}$ 是我们不大关心的，对 $\{\xi_i\}$ 积分求迹相当于只考虑热槽对振子的总体平均影响而不考虑其细节.

下面介绍一个具体而重要的例子，看看如何获得约化密度矩阵的运动方程. 考虑二能级原子与环境热辐射场相互作用的系统[9]，其哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2}\hbar\,\omega_0\sigma_z+\sum_k\hbar\,\omega_k b_k^+b_k+[\sum_k g_k b_k\sigma_+ + \text{H.C.}] \tag{5-40a}$$

上式第一项是二能级原子的哈密顿量，第二项是环境热辐射场（光子）的哈密顿量，第三项是二者的相互作用. 整个系统包括二能级原子中电子的自由度（用泡利矩阵 σ_ν（$\nu=+,-,z$）表示）和环境热辐射场光子的自由度（用光子产生消灭算符 b_k^+，b_k 表示）. 在相互作用表象中，考虑相互作用的二级微扰，在马尔柯夫近似下，得到原子的约化密度矩阵的运动方程：

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\rho_I(t)}{\mathrm{d}t}=&\frac{\gamma}{2}(\bar{n}_0+1)(\sigma_+\sigma_-\rho_I+\rho_I\sigma_+\sigma_--2\sigma_-\rho_I\sigma_+)\\&-\frac{\gamma}{2}\bar{n}_0(\sigma_-\sigma_+\rho_I+\rho_I\sigma_-\sigma_+-2\sigma_+\rho_I\sigma_-)\end{aligned} \tag{5-44a}$$

$$\bar{n}_0=1/(\mathrm{e}^{\hbar\omega_0/kT}-1),\quad \gamma=2\pi\sum_k|g_k|^2\delta(\omega_k-\omega_0) \tag{5-44b}$$

在量子通讯与量子计算中，二能级原子可以用作一个量子比特，环境辐射与原子相互作用引起的耗散和退相干是必须考虑的问题. 对于一个原子，这一过程可以用方程（5－44a）、（5－44b）来描述. 我们在第 10 章将介绍如何用代数动力学对方程（5－44a）求解.

5.3 Green 函数理论：多体关联 Green 函数动力学[1,3,6,7]

先通过一个粒子系统的 Green 函数，获得对 Green 函数的物理内涵和计算方法的清晰了解，然后再转入多体系统 Green 函数理论介绍.

5.3.1 一个粒子系统的 Green 函数

考虑一个粒子的波动方程（定态薛定格方程）：

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2+U(\vec{r})]\Psi(\vec{r})=E\Psi(\vec{r}) \tag{5-46a}$$

把它改写成适合用 Green 函数方法求解的形式：

$$\begin{aligned}(-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2-E)\Psi(\vec{r})&=-U(\vec{r})\Psi(\vec{r})\\&=-Q(\vec{r})\\&=-\int\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')Q(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,'\end{aligned} \tag{5-46b}$$

式（5－46b）可以看作存在分布源 $Q(\vec{r})$ 时，一个能量为 E 的粒子波的传播．其形式解为

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r})&=-\frac{1}{(-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2-E)}\int\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')Q(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,'\\&=\int G(\vec{r}-\vec{r}\,')Q(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,'\end{aligned} \tag{5-47}$$

其中 $G(\vec{r}-\vec{r}')$ 是存在点源时波动方程的解，满足

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2-E)G(\vec{r}-\vec{r}\,')=-\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \tag{5-48}$$

它描述一个能量为 E 的粒子波从$\vec{r}'$向$\vec{r}$处的传播，其形式解为

$$G(\vec{r}-\vec{r}\,')=-\frac{1}{(-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2-E)}\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \tag{5-49}$$

$G(\vec{r}-\vec{r}')$ 正是描述这个传播过程的传播子，又称 Green 函数．

Green 函数的谱分解．考虑 $(-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2)$ 的本征解：

$$\begin{aligned}&(-\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\nabla}^2)\psi_k(\vec{r})=E_k\psi_k(\vec{r})\\&\psi_k(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\\&E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\end{aligned} \tag{5-50}$$

ψ_k 的完备性可表示为

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}\,')=\int\psi_k(\vec{r})\psi_k^*(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{k}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\mathrm{d}\vec{k} \quad (5-51)$$

这正是 δ－函数的公式．把式（5－51）代入 Green 函数的表达式（5－49），得

$$G(\vec{r}-\vec{r}\,')=\frac{-1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}\vec{k}\,\mathrm{e}^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}\frac{1}{E_k-E}\mathrm{e}^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}$$

$$=\frac{-1}{(2\pi)^3}\frac{2\pi}{i\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid}\int k\mathrm{d}k\frac{1}{E_k-E}[\mathrm{e}^{ik\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid}-\mathrm{e}^{-ik\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid}]$$

设 $E=\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$，则可算出 $G(\vec{r}-\vec{r}')$：依赖边界条件，有两个独立的解（这也正是二阶偏微分方程所要求的），可用留数定理求得．

$$G(\vec{r}-\vec{r}\,')=\frac{-2m}{\hbar^2(2\pi)^2 i\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid}\int k\mathrm{d}k\frac{\mathrm{e}^{ik\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid}-\mathrm{e}^{-ik\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid}}{(k+\kappa\pm i\varepsilon)(k-\kappa\mp i\varepsilon)}$$

$$=\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{i\kappa\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid}}{\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid},\quad k\to\kappa+i\varepsilon$$

$$=\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{\mathrm{e}^{-i\kappa\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid}}{\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid},\quad k\to-\kappa+i\varepsilon \quad (5-52)$$

第一个解是向外扩展传播的球面波，第二个解是向内汇聚传播的球面波．如果只要求向外球面波，则须让 $k\to\kappa+i\varepsilon$．因此，边界条件可以通过 k 向复平面上的解析延拓来实现．

Green 函数是有点源的波动方程的传播子．对于有分布的源，波动方程可以用 Green 函数来求解．由式（5－47）、（5－49）有

$$\psi(\vec{r})=\int G(\vec{r}-\vec{r}\,')Q(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,'$$

即有分布源的解是各点源的 Green 函数解的对源的分布叠加．对粒子在势场 $U(\vec{r})$ 中的运动，则 $Q(\vec{r})=U(\vec{r})\psi(\vec{r})$，故有

$$\psi(\vec{r})=\int G(\vec{r}-\vec{r}\,')Q(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,'=\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int\frac{\mathrm{e}^{ik\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid}}{\mid\vec{r}-\vec{r}\,'\mid}U(\vec{r}\,')\psi(\vec{r}\,')\mathrm{d}\vec{r}\,' \quad (5-53)$$

对势场散射问题，若（5－53）式右边积分中的 ψ 取作势场为零时的零级近似的入射平面波，$\psi(\vec{r})\approx\mathrm{e}^{ikz}$，则（5－53）式左边计算的$\psi(\vec{r})$是向外散射的球面波，从中可以提取出散射振幅，正好是 Born 近似的结果．

（5－53）式给出的$\psi(\vec{r})$是非齐次方程的特解，薛定格方程的一般解应当是齐次方程($Q(\vec{r})=0$ 的方程)的通解加上非齐次方程的特解．对散射问题，

齐次方程的通解被用来满足无穷远入射条件，而特解是由散射（出射）条件确定的向外球面波．第6章还要详细讨论这类边界条件问题的处理．

对于一般的波动方程：

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \tag{5-54}$$

考虑相应的 Green 函数的运动方程及其算符形式的解：

$$(\hat{H} - E)\,\hat{G} = -I \tag{5-55}$$

$$\hat{G} = \frac{1}{E - \hat{H}}I \tag{5-56}$$

其谱分解可计算如下：

考虑$\hat{H}$的本征解有：

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \tag{5-57}$$

ψ_n 满足正交、归一、完备性条件：

$$\begin{aligned} &\langle \psi_n \mid \psi_m \rangle = \delta_{nm} \\ &\sum_n \mid \psi_n\rangle\langle \psi_n \mid = I \end{aligned} \tag{5-58}$$

由此得 Green 函数的谱分解（即 Green 函数按$\hat{H}$本征解的展开式）：

$$\hat{G} = \sum \mid \psi_n\rangle \frac{1}{E - E_n}\langle \psi_n \mid \tag{5-59}$$

在坐标表象中，波函数为

$$\langle x \mid \psi_n\rangle = \psi_n(x),\ \langle \psi_n \mid x\rangle = \psi_n^*(x) \tag{5-60}$$

$\hat{G}$在坐标表象中的矩阵元为

$$\langle x \mid \hat{G} \mid x'\rangle = G(x - x') = \sum_n \frac{\psi_n(x)\psi_n^*(x')}{E - E_n} \tag{5-61}$$

对于自由粒子，

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2,\quad \psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

由求和的连续过渡得

$$\sum_n \to \int \mathrm{d}\vec{k},\quad \langle \vec{r} \mid I \mid \vec{r}\,'\rangle = \int \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\mathrm{d}\vec{k} = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')$$

这样又回到以前的结果．

5.3.2 多粒子系统的 Green 函数

5.3.2.1 时间有关的薛定格方程及其 Green 函数

考虑时间有关的薛定格方程的 Green 函数，其运动方程为

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H})G(x-x',t-t')=-i\hbar\,\delta(x-x')\delta(t-t') \quad (5-62)$$

其形式解为

$$G(x-x',t-t')=-\frac{i\hbar}{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}}\delta(x-x')\delta(t-t') \quad (5-63)$$

在$\hat{H}$的本征表象中，

$$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$$

$$\delta(x-x')=\sum_n\psi_n(x)\psi_n^*(x') \quad (5-64)$$

$$\delta(t-t')=\frac{1}{2\pi}\int e^{-i\omega(t-t')}d\omega \quad (5-65)$$

$\hat{G}$的谱分解为

$$\begin{aligned}G(x-x',t-t')&=-\frac{i\hbar}{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}}\int\frac{d\omega}{2\pi}\sum_n e^{-i\omega(t-t')}\psi_n(x)\psi_n^*(x')\\&=-i\hbar\int\frac{d\omega}{2\pi}\sum_n e^{-i\omega(t-t')}\frac{1}{\hbar\omega-E_n}\psi_n(x)\psi_n^*(x')\\&=\sum_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x)\psi_n^*(x')e^{iE_nt'/\hbar} \quad (5-66)\end{aligned}$$

从（5－66）式可知，Green 函数只依赖于时间差（$t-t'$），这是系统时间平移不变性的结果．可以证明，上述 Green 函数是时间演化算子在坐标空间的矩阵元，即

$$\hat{G}(t-t')=e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar} \quad (5-67)$$

$$\begin{aligned}\langle x\mid\hat{G}(t-t')\mid x'\rangle&=\langle x\mid e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar}\sum_n\mid\psi_n\rangle\langle\psi_n\mid x'\rangle\\&=\sum_n\langle x\mid\psi_n\rangle e^{-iE_n(t-t')/\hbar}\langle\psi_n\mid x'\rangle\end{aligned}$$

$$= \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x) \psi_n^*(x') e^{iE_n t'/\hbar}$$

$$= G(x - x', t - t') \tag{5-68}$$

这表示由$\hat{H}$支配的物质波从点（x'，t'）向点（x，t）的传播. 如初始时刻$t' = t_0$时不是点源，而是一分布源ψ（x'，t_0），则从 Green 函数的方程可得（两边乘以ψ（x'，t_0）并对x'积分）

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right) \int dx' G(x - x', t - t_0) \psi(x', t_0)$$

$$= -i\hbar \int dx' \delta(x - x') \delta(t - t_0) \psi(x', t_0)$$

$$= -\psi(x, t_0) \delta(t - t_0) = 0, \quad t - t_0 > 0$$

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right) \psi(x, t - t_0) = 0 \tag{5-69}$$

$$\psi(x, t - t_0) = \int G(x - x', t - t') \psi(x', t_0) dx'$$

$$= \int \langle x | e^{-i\hat{H}(t - t_0)/\hbar} | x' \rangle \psi(x', t_0) dx'$$

$$= \int \delta(x - x') e^{-i\hat{H}(t - t_0)/\hbar} \psi(x', t_0) dx'$$

$$= e^{-i\hat{H}(t - t_0)/\hbar} \psi(x, t_0) \tag{5-70}$$

这正是初值为$\psi(x, t_0)$的薛定格方程的解. 因此，对时间有关的薛定格方程，Green 函数解法与通常解法是一致的.

考虑 G（$x - x'$，$t - t_0$）对时间差（$t - t'$）的傅立叶变换：

$$G(x - x', \omega) = \int e^{i\omega\tau} G(x - x', \tau) d\tau$$

$$= \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') \int d\tau e^{i(\hbar\omega - E_n)\tau/\hbar}$$

$$= -i\hbar \sum_n \frac{\psi_n(x) \psi_n^*(x')}{\hbar\omega - E_n} \tag{5-71}$$

上式表明，与时间有关 Green 函数的傅立叶变换包含了系统的全部定态信息：①极点的位置给出本征能量；②极点处的留数函数给出本征波函数 ψ_n（x），ψ_n^*（x'）.

5.3.2.2 多体系统的 Green 函数：场论形式（费米子系统）

在场论形式下，多体系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \int \hat{\psi}^+(x)\,\hat{t}\,\hat{\psi}(x)\mathrm{d}x + \frac{1}{2}\int \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\,\hat{\psi}^+(x_1)\,\hat{\psi}^+(x_2)v(12)\,\hat{\psi}(x_2)\,\hat{\psi}(x_1)$$

$$\{\hat{\psi}(x),\hat{\psi}^+(x')\} = \delta(x-x')$$

$$\{\hat{\psi}(x),\hat{\psi}(x')\} = \{\hat{\psi}^+(x),\hat{\psi}^+(x')\} = 0 \qquad (5-72)$$

由上式可得场算符$\hat{\psi}(x)$，$\hat{\psi}^+(x)$ 的运动方程（海森堡方程）：

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(x,t)}{\partial t} = [\hat{\psi}(x,t),\hat{H}]$$

$$= \hat{t}\,\hat{\psi}(x,t) + \int \hat{\psi}^+(x')v(x-x')\,\hat{\psi}(x')\,\hat{\psi}(x)\mathrm{d}^4x' \qquad (5-73)$$

式中 $v(x-x') = v(\vec{r}-\vec{r}\,')\delta(t-t')$，$\mathrm{d}^4x' = \mathrm{d}^3\vec{r}\,'\mathrm{d}t'$

其解为

$$\hat{\psi}(x,t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,\hat{\psi}(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar} \qquad (5-74)$$

其共轭方程及其解为

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}^+(x,t)}{\partial t} = [\hat{\psi}^+(x,t),\hat{H}]$$

$$= \hat{t}\,\hat{\psi}^+(x,t) + \int \mathrm{d}^4x'\,\hat{\psi}^+(x)\,\hat{\psi}^+(x')v(x-x')\,\hat{\psi}(x')$$

$$\hat{\psi}^+(x,t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\,\hat{\psi}^+(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar} \qquad (5-75)$$

设系统的状态为 ψ，则在海森堡表象中，单粒子 Green 函数的定义为

$$G(xt,x',t') = (-i)\langle\Psi|\hat{T}(\hat{\Psi}(xt)\,\hat{\psi}^+(x't'))|\Psi\rangle \qquad (5-76)$$

二粒子……直至 n －粒子 Green 函数的定义为

$$\begin{aligned}
&G_2(x_1t_1x_2t_2,x_1't_1',x_2't_2')\\
&=(-i)^2\langle\Psi|\hat{T}(\hat{\psi}(x_1t_1)\,\hat{\psi}(x_2t_2)\,\hat{\psi}^+(x_2't_2')\,\hat{\psi}^+(x_1't_1'))|\Psi\rangle\\
&\quad\vdots\\
&G_n(x_1t_1x_2t_2\cdots x_nt_n,x_1't_1',x_2't_2',\cdots,x_n't_n')\\
&=(-i)^n\langle\Psi|\hat{T}(\hat{\psi}(x_1t_1)\,\hat{\psi}(x_2t_2)
\end{aligned} \qquad (5-77)$$

$$\cdots \hat{\psi}(x_n t_n)\ \hat{\psi}^{+}(x_n' t_n')$$

$$\cdots \hat{\psi}^{+}(x_2' t_2')\ \hat{\psi}^{+}(x_1' t_1'))\mid \Psi\rangle$$

$\hat{T}$为编时乘积：按时间从小到大从右向左排列，场算符交换时，需考虑场算符的统计性：玻色子场算符的对称性和费米子场算符的反对性. 单粒子 Green 函数$G(xt, x't')$代表一个粒子从(x, t)点传播到(x', t')的过程. n－粒子 Green 函数 G_n 则代表 n 个粒子在时空中的传播.

若系统的状态是混合系综，处于 Ψ_n 态的几率为 w_n，则定义 Green 函数时，要用对统计算符$\hat{\rho}$的平均代替对 Ψ_n 的平均. 统计算符$\hat{\rho}$为

$$\hat{\rho} = \sum_n w_n \mid \Psi_n\rangle\langle \Psi_n \mid \tag{5-78}$$

对于正则分布，

$$w_n = \mathrm{e}^{\xi - E_n/kT}, \quad \sum_n w_n = 1 \tag{5-79}$$

这时 Green 函数定义为

$$\begin{aligned} & G_n(x_1 t_1 x_2 t_2 \cdots x_n t_n, x_1' t_1', x_2' t_2', \cdots, x_n' t_n') \\ = & (-i)^n \mathrm{tr}\,\hat{\rho}\hat{T}(\hat{\psi}(x_1 t_1)\ \hat{\psi}(x_2 t_2)\cdots \hat{\psi}(x_n t_n) \\ & \hat{\psi}^{+}(x_n' t_n')\cdots \hat{\psi}^{+}(x_2' t_2')\ \hat{\psi}^{+}(x_1' t_1'))/\mathrm{tr}\,\hat{\rho} \\ = & (-i)^n \sum_m w_m \langle \Psi_m \mid \hat{T}(\hat{\psi}(x_1 t_1)\ \hat{\psi}(x_2 t_2)\cdots \hat{\psi}(x_n t_n) \\ & \hat{\psi}^{+}(x_n' t_n')\cdots \hat{\psi}^{+}(x_2' t_2')\ \hat{\psi}^{+}(x_1' t_1'))\mid \Psi_m\rangle \end{aligned} \tag{5-80}$$

n－粒子 Green 函数与 n－粒子约化密度矩阵有如下关系：

$$\rho_n(12\cdots n; 1'2'\cdots n') = (-i)^n G_n(12\cdots n; 1'2'\cdots n')\big|_{\text{normal-equal-time-limit}} \tag{5-81}$$

Normal-equal-time-limit（正规等时极限）定义为下列时序下的等时极限：

$$t_n' \geqslant t_{n-1}' \geqslant \cdots \geqslant t_1' \geqslant t_1 \geqslant t_2 \geqslant \cdots \geqslant t_n$$

对单粒子情况，

$$\rho(x, x'; t) = -iG(xt, x't+\varepsilon) = \mathrm{tr}\,\hat{\rho}(\hat{\psi}^{+}(x't)\ \hat{\psi}(x, t)) \tag{5-82}$$

5.3.3 Green 函数的运动方程：多体关联 Green 动力学[3,6,7]

从$\hat{\psi}(x)$, $\hat{\psi}^{+}(x)$的运动方程可以得 G_n 的运动方程组. 对单粒子和二粒

子，Green 函数运动方程组的显式为

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}-\hat{t}(1)\right]G(1,1')$$

$$=\delta^{(4)}(11')-i\int \mathrm{d}^4x_2 v(12)G_2(12;1'2^+) \tag{5-83}$$

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}-\hat{t}(1)\right]G_2(12;1'2')$$

$$=\delta^{(4)}(11')G(22')-\delta^{(4)}(12')G(21')-i\int \mathrm{d}^4x_3 v(13)G_3(123;1'2'3^+)$$

$$\vdots \tag{5-84}$$

其中，引进了四维 δ－函数和四维坐标记号：

$$\delta^{(4)}(12)=\delta^{(3)}(\vec{x}_1-\vec{x}_2)\delta(t_1-t_2) \tag{5-85}$$

$$2^+=(x_2,t_2+\varepsilon)$$

上述 Green 函数 G_n 的运动方程称为 Martin－Schwinger 系列（与 BBGKY 系列对应），它们是从一个粒子的 Green 函数到 A 个粒子的 Green 函数的耦合的方程组，完全等价于多体薛定格方程．与 BBGKY 系列一样，其缺点是缺乏一个自然而合理的截断方案．类似于密度矩阵情况的做法，可以通过集团展开，从 G_n 中分离出关联成分 G_{nc}，建立起关联 Green 函数 G_{nc} 的运动方程．

进行 G_n 的集团展开，分离出关联成分 G_{nc}：

$$\begin{aligned}G_2(12,1'2') &= G_{2c}(12,1'2')+\underset{(2)}{AS}G(11')G(22')\\ &\approx G_{2c}(12,1'2')+G_{20}(12,1'2')\\ G_3(123,1'2'3') &= G_{3c}(123,1'2'3')\\ &\quad+\underset{(3)}{AS}[G(11')G_{20}(23,2'3')+G_{2c}(12,1'2')G(3,3')]\\ &\quad\vdots\end{aligned} \tag{5-86}$$

把（5－86）式代入 G_n 的运动方程组（5－83），（5－84），可以得到 G_{nc} 的运动方程组

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}-\hat{t}(1)\right]G(11')$$

$$=\delta^{(4)}(11')-i\int \mathrm{d}2 v(12)[G_{2c}(12,1'2^+)+G(11')G(22^+)-G(12)G(21')]$$

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}-\hat{t}(1)\right]G_{2c}(121'2')$$

$$
\begin{aligned}
&= -i\int \mathrm{d}3\, v(13)[-G_2(13,1'2')G(23) + G_{3c}(123,1'2'3^+) \\
&\quad + G_{2c}(12,1'2')G(33^+) - G_{2c}(32,1'2')G(13) \\
&\quad + G_{2c}(23,2'3^+)G(11') - G_{2c}(23,1'3^+)G(12') \\
&\quad + G_{2c}(12,2'3)G(31') - G_{2c}(12,1'3)G(32')] \\
&\quad \cdots\cdots \quad \cdots\cdots \quad \cdots\cdots
\end{aligned} \tag{5-87}
$$

由于 G_{nc} 随 n 增加而迅速减小，因此上述方程组可以截断. 在截断近似下，当 $G_{nc}=0$ （$n\geqslant 2$）时，得到平均场理论的全部结果，如 TDHF 和 HF. 当 $G_{nc}=0$（$n\geqslant 3$）时，得二体关联 Green 函数（G 与 G_{2c}）的运动方程组，它们包括梯形图展开和环形图展开的全部结果. 在正规等时极限下，上述方程化为二体关联密度矩阵的运动方程组.

5.3.4 基态单粒子 Green 函数的 Lehmann 谱分解

设多体系统 $\hat{H}$ 的本征解为

$$
\hat{H}\Psi_n = E_n\Psi_n \tag{5-88}
$$

现计算 A 粒子系统的基态的单粒子 Green 函数：

$$
\begin{aligned}
&G(xt,x',t') \\
&=(-i)\langle\Psi_0 \mid \hat{T}(\hat{\psi}(xt)\,\hat{\psi}^+(x't'))\mid\Psi_0\rangle \\
&=(-i)\langle\Psi_0 \mid \hat{T}(\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\,\hat{\psi}(x0)\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{i\hat{H}t'/\hbar}\,\hat{\psi}^+(x'0)\mathrm{e}^{-i\hat{H}t'/\hbar})\mid\Psi_0\rangle
\end{aligned} \tag{5-89}
$$

在（5－89）式最右边一等式中插入本征函数完备集构成的恒等算子

$$
I = \sum_n \mid\Psi_n\rangle\langle\Psi_n\mid \tag{5-90}
$$

得到

$$
\begin{aligned}
&G(xt,x',t') \\
&=(-i)\sum_n[\mathrm{e}^{-i(E_n^{A+1}-E_0^A)(t-t')/\hbar}\langle\Psi_0\mid\hat{\psi}(x0)\mid\Psi_n\rangle\langle\Psi_n\mid\hat{\psi}^+(x'0)\mid\Psi_0\rangle\theta(t-t') \\
&\quad -\mathrm{e}^{-i(E_n^{A-1}-E_0^A)(t'-t)/\hbar}\langle\Psi_0\mid\hat{\psi}(x0)\mid\Psi_n\rangle\langle\Psi_n\mid\hat{\psi}^+(x'0)\mid\Psi_0\rangle\theta(t'-t)]
\end{aligned}
$$

其中，阶梯函数

$$
\theta(\tau) = \begin{cases} 1, (\tau\geqslant 0) \\ 0. (\tau<0) \end{cases} \tag{5-91}
$$

对上述 Green 函数的时间坐标做傅立叶变换，可得

$$
\begin{aligned}
& G(x,x';\omega) \\
&= \int e^{i\omega\tau} d\tau G(x,x';\tau) \\
&= \sum_n \{ {}_A\langle \Psi_0 \mid \hat{\psi}(x0) \mid \Psi_n \rangle_{A+1} {}_{A+1}\langle \Psi_n \mid \hat{\psi}^+(x'0) \mid \Psi_0 \rangle_A \\
&\quad / [\hbar\omega - (E_n^{A+1} - E_0^A) - i\varepsilon] \\
&\quad + {}_A\langle \psi_0 \mid \hat{\psi}^+(x'0) \mid \psi_n \rangle_{A-1} {}_{A-1}\langle \psi_n \mid \hat{\psi}(x0) \mid \psi_0 \rangle_A \\
&\quad / [\hbar\omega + (E_n^{A-1} - E_0^A) + i\varepsilon] \} \\
&= \sum_n \{ \psi_{pn}(x)\psi_{pn}^*(x') / [\hbar\omega - \hbar\omega_{pn} - i\varepsilon] + \psi_{hn}(x)\psi_{hn}^*(x') \\
&\quad / [\hbar\omega - \hbar\omega_{hn} + i\varepsilon] \}
\end{aligned}
\tag{5-92}
$$

其中单粒子激发态的波函数与激发能量为

$$
\psi_{pn}(x) = {}_A\langle \Psi_0 \mid \hat{\psi}(x0) \mid \Psi_n \rangle_{A+1}, \quad \hbar\omega_{pn} = E_n^{A+1} - E_0^A \tag{5-93a}
$$

而单空穴激发态的波函数与激发能量为

$$
\psi_{hn}(x) = {}_{A-1}\langle \Psi_n \mid \hat{\psi}(x0) \mid \Psi_0 \rangle_A, \quad \hbar\omega_{hn} = E_0^A - E_n^{A-1} \tag{5-93b}
$$

$\{E_n^A, |\Psi_n\rangle_A\}$ 表示粒子数为 A 的系统的本征能量与本征波函数. 因此，多体系统的单粒子 Green 函数 $G(x, x'; \omega)$ 的极点给出费米面以上的单粒子激发能级和费米面以下的单空穴激发能级（实际上是粒子性和空穴性的激子的能谱），其留数函数给出相应的单粒子激发态和单空穴激发态的波函数（激子的波函数）.

5.3.5 多体系统的 Green 函数，二次量子化表象形式[13-17]

上述场论形式的 Green 函数，与量子场论中的 Green 函数在形式上是一样的. 但是，在固体物理中，人们还用二次量子化表象中的产生和消灭算子来定义 Green 函数. 以 Anderson 模型为例，其哈密顿量为

$$
\hat{H} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k \hat{n}_{k\sigma} + \sum_\sigma \epsilon_{d\sigma} \hat{n}_{d\sigma} + \frac{U}{2} \sum_\sigma \hat{n}_{d\sigma} \hat{n}_{d\bar{\sigma}} + \sum_{k\sigma} V_{kd} (C_{k\sigma}^+ d_\sigma + C_{k\sigma} d_\sigma^+)
$$

式中 $\hat{n}_{k\sigma} = C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma}, \hat{n}_{d\sigma} = d_\sigma^+ d_\sigma$

(5-94)

在海森堡表象，由产生、消灭算子组成的算子$\hat{O}(C^+,C,d^+,d)$的时间演化由海森堡方程决定：

$$i\hbar\frac{\partial\hat{O}}{\partial t}=[\hat{O},\hat{H}] \tag{5-95}$$

其解为

$$\hat{O}(t)=e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}(0)e^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{5-96}$$

在海森堡表象，两个算子$\hat{A}(t)$和$\hat{B}(t')$的 Green 函数定义为

$$\ll\hat{A}(t);\hat{B}(t')\gg=-i\theta(t-t')\langle[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]_{\pm}\rangle \tag{5-97}$$

对费米型算子$\hat{A}(t)$，$\hat{B}(t')$取反对易子$[,]_+$，对玻色型算子，取对易子$[,]_-$. 平均值定义为量子统计力学的平均，即

$$\langle\hat{O}\rangle=\mathrm{tr}\,\hat{\rho}\hat{O} \tag{5-98}$$

$\langle\cdots\rangle$表示双重平均：统计平均和量子力学平均.

由$\hat{A}(t)$，$\hat{B}(t')$的运动方程可以求得它们的 Green 函数的运动方程：

$$\begin{aligned}&i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\ll\hat{A}(t),\hat{B}(t')\gg\\&=\delta(t-t')\hbar\langle[\hat{A}(t),\hat{B}(t')]_{\pm}\rangle\\&+\theta(t-t')\langle[[\hat{A}(t),\hat{H}]_-,\hat{B}(t')]_{\pm}\rangle\end{aligned} \tag{5-99}$$

对时间差$(t-t')$做傅立叶变换，可得

$$\omega\ll\hat{A};\hat{B}\gg_\omega=\langle[\hat{A},\hat{B}]_{\pm}\rangle+\ll[[\hat{A},\hat{H}]_-;\hat{B}]\gg_\omega \tag{5-100}$$

同样可以建立起$\ll[[\hat{A},\hat{H}]_-;\hat{B}]\gg_\omega$的运动方程，它涉及新的 Green 函数，从而形成各种 Green 函数的耦合的运动方程组. 像坐标空间的 Green 函数一样，对高阶 Green 函数也可以做集团展开，分离出关联成分，得到关联 Green 函数的运动方程组. 然后对高阶关联 Green 函数做截断近似，得到一个有限数目的、封闭的方程组，可以进行求解.

例 5－1　对 Anderson 模型（5－94）式，设$\hat{A}=d_\sigma$，$\hat{B}=d_\sigma^+$，则有

$$(\omega-\varepsilon_{d\sigma})\ll d_\sigma;d_\sigma^+\gg=1+\sum_k V_{kd}\ll C_{k\sigma};d_\sigma^+\gg+U\ll\hat{n}_{d\bar{\sigma}}d_\sigma;d_\sigma^+\gg$$

$$(\omega-\varepsilon_{k\sigma})\ll C_{k\sigma};d_\sigma^+\gg=V_{kd}\ll d_\sigma;d_\sigma^+\gg$$

(5－101)

$$\ll \hat{n}_{d\bar{\sigma}} d_\sigma ; d_\sigma^+ \gg = n_{d\bar{\sigma}} + U \ll \hat{n}_{d\bar{\sigma}} d_\sigma ; d_\sigma^+ \gg + \sum_k V_{kd} \ll \hat{n}_{d\bar{\sigma}} C_{k\sigma} ; d_\sigma^+ \gg$$

$$+ \sum_k V_{kd} (\ll d_{\bar{\sigma}}^+ C_{k\bar{\sigma}} d_\sigma ; d_\sigma^+ \gg - \ll C_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_\sigma ; d_\sigma^+ \gg)$$

对右边出现的新的 Green 函数，也可建立其运动方程，然后对各个高阶 Green 函数做集团展开，得到各阶关联 Green 函数的运动方程组．在所希望的阶截断它们，就可求解封闭的方程组．在求得 $G_d(\omega) = \ll d_\sigma ; d_\sigma^+ \gg$之后，就可以用它计算各种物理量[13]．

5.4 量子统计力学初步[10－12]

本章介绍的密度矩阵理论和 Green 函数理论，特别适合于处理混合系综．如果多体系统的统计算符$\hat{\rho}$取成统计热力学系综，如正则系综

$$\hat{\rho} = e^{\xi - \hat{H}/kT} \tag{5－102}$$

或巨正则系综

$$\hat{\rho} = e^{\xi - \hat{H}/kT - \mu\hat{N}} \quad (\hat{N} \text{ 是粒子数算符}) \tag{5－103}$$

则所得结果就是量子统计力学平衡态的结果．

量子统计力学分为非平衡态统计力学与平衡态统计力学两大类．本章的内容为二者准备了必要的量子力学和量子统计力学理论基础知识，在此基础上不难深入学习和掌握量子统计力学更高深的内容．下面对量子统计力学的最重要的内容作一简要介绍．

5.4.1 非平衡态统计力学

5.4.1.1 主方程（Master Equation）[10]

非平衡态量子统计力学研究一个量子多体系统从非平衡态趋向平衡态的时间演化过程．因为这一演化是由量子动力学规律驱动的，所以它可以用冯·诺意曼方程来描述．又因为量子统计力学的任务是从微观量计算宏观统计热力学量，所以必须对系统的力学量及其平均值，如能量、动量等，同时对时间、空间坐标选择一个微观大，宏观小的区间．这个区间（ΔE，ΔP，t，$\Delta r \cdots$）在微观上必须足够大，以至于包含成千上万个粒子的贡献，因而可以做统计平

均；而这个区间在宏观上又必须足够小，因而可以进行宏观意义上的微分运算，从而建立起用微分方程表示的宏观统计热力学定律.

从多体系统的冯·诺意曼方程出发，用我们要研究的物理量 ν 来标志多体系统的状态 Ψ_ν，把这些物理量的空间分成微观大，宏观小的格子，然后把冯·诺意曼方程按这些格子离散化，并对每个格子内的微观状态求平均，就可以得到宏观量在 $\nu\to\nu+\Delta\nu$ 区间内的分布几率 $P_\nu\Delta\nu$ 随时间演化的方程：

$$\frac{\mathrm{d}P_\nu}{\mathrm{d}t}=\sum_\mu w_{\nu\mu}P_\mu-\sum_\mu w_{\mu\nu}P_\nu \tag{5-104}$$

这是有名的主方程，其中 $w_{\nu\mu}$ 是从 $\nu\to\mu$ 的转移几率. 从主方程可以得到在矩展开近似下的输运方程，如 Fokker－Planck 方程. 主方程描述宏观量 ν 的分布几率密度 P_ν 趋于平衡的过程，它蕴含熵增加定理：$S=-k\sum_\nu P_\nu\ln P_\nu$. S 极大$\to P_\nu=1/N\to S=k\ln N$（$N$－状态数），这就是微正则分布的结果.

主方程从系统的总体性质出发，去描述系统整体性质趋于平衡的过程，这是非平衡态量子统计力学的一端. 下面介绍的 BUU 方程则是从系统的单粒子密度在相空间的分布出发，去描述系统的单粒子密度相空间分布函数趋于平衡的过程，这是非平衡态量子统计力学的另一端.

5.4.1.2 Boltzman－Uehling－Uhlenbeck（BUU）方程[11]

另一方面，多体系统在相空间的单粒子密度分布函数 $f(\vec{r},\vec{p};t)$ 对描述系统的非平衡过程也是非常有用的. 而 $f(\vec{r},\vec{p};t)$ 随时间演化的非平衡态方程，可以从二体关联动力学方程得到. 从 ρ 和 C_2 的方程出发，在 Born 近似（或 G 矩阵近似）下求得 C_2 作为 ρ 的泛函的解 $C_2=C_2[\rho]$，代入 ρ 的运动方程，得到

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}=[h,\rho]+\mathrm{tr}[v(12),A\rho\rho+C_2[\rho]] \tag{5-105}$$

对 $\rho(\vec{r},\vec{r}';t)$ 做 Winger 变换：

$$f(\vec{R},\vec{P},t)=\frac{1}{(2\pi)^3}\int\rho(\vec{R}+\frac{\vec{r}}{2},\vec{R}-\frac{\vec{r}}{2},t)\mathrm{e}^{\vec{P}\cdot\vec{r}/\hbar}\mathrm{d}\vec{r} \tag{5-106}$$

在半经典近似和局域碰撞近似下，就可以得到包括平均场和碰撞项的输运方程（BUU 方程）：

$$\frac{\partial f(\vec{R},\vec{P},t)}{\partial t}-\frac{\vec{P}}{m}\vec{\nabla}_R f(\vec{R},\vec{P},t)+\vec{\nabla}_R U(R)\cdot\vec{\nabla}_P f(\vec{R},\vec{P},t)=I_{coll} \tag{5-107}$$

$$I_{coll} \approx \frac{1}{(2\pi)^9}\int \mathrm{d}\vec{P}'d\vec{P}_1 d\vec{P}_2 \mid \langle PP' \mid v \mid P_1P_2\rangle \mid^2 \qquad (5-108)$$

$$[f(RP_1)f(RP_2)(1-f(RP))(1-f(RP')) - (1-f(RP_1))$$

$$(1-f(RP_2))f(RP)f(RP')]\delta(\vec{P}+\vec{P}'-\vec{P}_1-\vec{P}_2)$$

其中，(5－108) 式右边第一项是$f(\vec{R},\vec{P},t)$的获得项 (gain term)，第二项是$f(\vec{R},\vec{P},t)$的丢失项 (loss term)，碰撞矩阵元$|\langle PP'|v|P_1P_2\rangle|^2$可以用碰撞截面来表示，$\delta(\vec{P}+\vec{P}'-\vec{P}_1-\vec{P}_2)$表示局域碰撞近似下的动量守恒．碰撞项的泡利阻塞效应如图 5－1 所示．

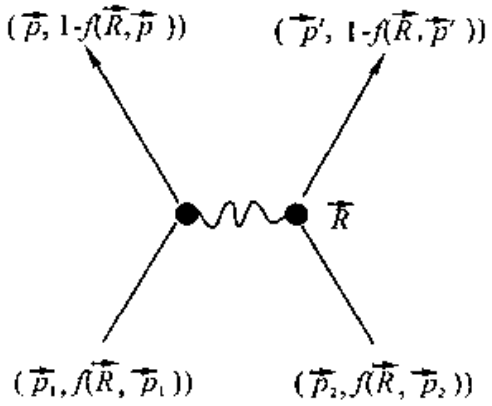


图 5－1　碰撞项的泡利阻塞效应

BUU 方程能很好地描述费米子的相空间密度分布函数$f(\vec{R},\vec{P},t)$趋于平衡的过程，它的平衡态解是 Fermi－Dirac 分布．用 BUU 方程描述重离子核反应过程相当成功．

5.4.2　平衡态统计力学

对平衡态统计力学，我们也介绍它的重要的两端：对描述整个系统有用的统计热力学微扰论和对系统中的单粒子态描述有用的温度有关的平均场理论．

5.4.2.1　统计热力学微扰论

设多体系统的$\hat{H}$可分解成两部分：$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_1$，$\hat{H}_0$是容易求解的部分，或包含自洽平均场的独立粒子系统的哈密顿量；$\hat{H}_1$是微扰项，如剩余相互作用．系统的平衡态统计算符为

$$\hat{\rho} = \mathrm{e}^{\xi-\hat{H}\beta}, \beta = 1/kT \qquad (5-109)$$

对$\hat{\rho}$可以建立起虚时（$t\to -it$）的薛定格方程：

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = -\hat{H}\hat{\rho} \to \mathrm{d}\hat{\rho}/\hat{\rho} = -\hat{H}\mathrm{d}t \tag{5-110}$$

其解为

$$\ln \hat{\rho} = \xi - \hat{H}t, \quad \hat{\rho} = \mathrm{e}^{\xi - \hat{H}t} \tag{5-111}$$

统计算符

$$\hat{\rho}(\beta) = \mathrm{e}^{\xi - \hat{H}\beta} \tag{5-112}$$

是虚时为 β 的解. 设

$$\hat{\rho}(t) = \mathrm{e}^{\xi - \hat{H}_0 t}\hat{\rho}_{\mathrm{int}}(t)$$

可得$\hat{\rho}_{\mathrm{int}}$的运动方程：

$$\frac{\partial \hat{\rho}_{\mathrm{int}}}{\partial t} = -\hat{H}_1(t)\hat{\rho}_{\mathrm{int}}(t), \quad \hat{H}_1(t) = \mathrm{e}^{\hat{H}_0 t}\hat{H}_1\mathrm{e}^{-\hat{H}_0 t} \tag{5-113}$$

由

$$\hat{\rho}(0) = \mathrm{e}^{\xi} = \mathrm{e}^{\xi}\hat{\rho}_{\mathrm{int}}(0) \tag{5-114}$$

知

$$\hat{\rho}_{\mathrm{int}}(0) = 1 \tag{5-115}$$

用迭代法求得

$$\hat{\rho}_{\mathrm{int}}(t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2\cdots\int_0^{t_{n-1}}\hat{H}_1(t_1)\hat{H}_1(t_2)\cdots\hat{H}_1(t_n)\mathrm{d}t_n \tag{5-116}$$

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(\beta) &= \mathrm{e}^{\xi - \hat{H}_0\beta}\hat{\rho}_{\mathrm{int}}(\beta)\\ &= \mathrm{e}^{\xi - \hat{H}_0\beta}\left[1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\int_0^\beta \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2\cdots\int_0^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\hat{H}_1(t_1)\hat{H}_1(t_2)\cdots\hat{H}_1(t_n)\right]\end{aligned} \tag{5-117}$$

热力学函数 Ω 定义为

$$\mathrm{e}^{-\beta\Omega} = \mathrm{tr}(\mathrm{e}^{-\hat{H}\beta}) \tag{5-118}$$

其微扰论表示为

$$\Omega = -\frac{1}{\beta}\ln Sp(\mathrm{e}^{-\hat{H}_0\beta}\left[1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\int_0^\beta \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2\right.$$

$$\cdots\int_0^{t_{n-1}} \mathrm{d}t_n \hat{H}_1(t_1)\,\hat{H}_1(t_2)\cdots\hat{H}_1(t_n)]]$$

$$= -\frac{1}{\beta}\{\ln Sp(\mathrm{e}^{-\hat{H}_0\beta} + \ln[1 + \sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\int_0^{\beta}\mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2$$

$$\cdots\int_0^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\,\hat{u}_n(t_1t_2\cdots t_n)]]\} \tag{5-119}$$

$$\hat{u}_n(t_1t_2\cdots t_n) = Sp(\mathrm{e}^{-\hat{H}_0\beta}\hat{H}_1(t_1)\,\hat{H}_1(t_2)\cdots\hat{H}_1(t_n))/Sp(\mathrm{e}^{-\hat{H}_0\beta}) \tag{5-120}$$

$$\hat{H}_1(t) = \mathrm{e}^{H_0t}\hat{H}_1\mathrm{e}^{-H_0t} \tag{5-121}$$

由 Ω 的各级微扰近似，可以计算各种统计热力学量.

5.4.2.2 温度有关的平均场理论[12]

设系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \sum_{ij}t_{ij}a_i^+a_j + \frac{1}{4}\sum_{ijkl}v_{ijkl}a_i^+a_j^+a_la_k \tag{5-122}$$

其中动能和势能的矩阵元为

$$\begin{cases} t_{ij} = \langle i \mid \hat{t} \mid j\rangle, \\ v_{ijkl} = \langle ij \mid v \mid kl\rangle - \langle ij \mid v \mid lk\rangle \end{cases} \tag{5-123}$$

把 $\hat{H}$ 分成两部分，$\hat{H}_0$ 为平均场部分，$\hat{H}_1$ 为剩余相互作用：

$$\hat{H} = \hat{H}_0(x) + \hat{H}_1(x) \tag{5-124}$$

x 是引进的平均场变分参数，以后由平均近似确定，而 $\hat{H}$ 与 x 无关. 其中，

$$\hat{H}_0(x) = \frac{1}{4}\sum_{ijkl}v_{ijkl}2x_{il}x_{jk} + \sum_{ij}t_{ij}a_i^+a_j$$

$$+ \frac{1}{2}\sum_{ijkl}v_{ijkl}[a_i^+a_lx_{jk} + a_j^+a_kx_{il}] \tag{5-125a}$$

$$\hat{H}_1(x) = -\frac{1}{4}\sum_{ijkl}v_{ijkl}(a_i^+a_l + x_{il})(a_j^+a_k + x_{jk}) - \frac{1}{4}\sum_{ijkl}v_{ijkl}a_i^+a_la_j^+a_k$$

$$- \frac{1}{4}\sum_{ijkl}v_{ijkl}[a_i^+a_lx_{jk} + a_j^+a_kx_{il}] - \frac{1}{4}\sum_{ijkl}v_{ijkl}x_{il}x_{jk} \tag{5-125b}$$

做变换：

$$a_i^+ = \sum_{\alpha}u_{i\alpha}^*b_\alpha^+,\ a_i = \sum_{\alpha}u_{i\alpha}b_\alpha \tag{5-126a}$$

其逆变换为：

$$b_\alpha^+ = \sum_a u_{ia} a_i^+,\ b_\alpha = \sum_a u_{ia}^* a_i \qquad (5-126b)$$

在幺正变换条件下，

$$\sum_i u_{i\alpha}^* u_{i\beta} = \delta_{\alpha\beta},\ \sum_\alpha u_{i\alpha}^* u_{j\alpha} = \delta_{ij} \qquad (5-126c)$$

有

$$\{a_i, a_j^+\} = \delta_{ij} \to \{b_\alpha, b_\alpha^+\} = \delta_{\alpha\beta} \qquad (5-127)$$

统计热力学自洽平均场条件是零温自洽平均场条件的统计热力学推广：

（1）相应于零温时，基态波函数的归一化的变分为零，热力学势$\Omega_0(x)$（相当于系统所有本征态波函数归一化条件的统计平均）也应对变分参数 $x=\{x_{il}\}$ 的变分为零：

$$\frac{\partial \Omega_0}{\partial x_{il}} = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial}{\partial x_{il}} \ln Sp(e^{-\hat{H}_0'\beta}) = \frac{Sp(e^{-\hat{H}_0'\beta}\dfrac{\partial \hat{H}_1}{\partial x_{il}})}{Sp(e^{-\hat{H}_0'\beta})} = 0 \qquad (5-128a)$$

（2）相应于零温时，基态能量变分极小，因而基态波函数的一级微扰$\hat{H}_1$的平均为零，一级微扰$\hat{H}_1$的热力学平均也应为零：

$$\langle \hat{H}_1 \rangle = Sp(e^{-\hat{H}_0'\beta}\hat{H}_1) = 0 \qquad (5-128b)$$

由于二次量子化表象中粒子数可变，故需用条件变分的能量泛函对应的哈密顿量：

$$\hat{H}_0' = \hat{H}_0 - \lambda \hat{N} \quad (\hat{N} = \sum_i a_i^+ a_i) \qquad (5-129)$$

由此可得，统计热力学自洽场方程．由粒子数条件定出费米能，有

$$\langle \hat{N} \rangle = \sum_{i\alpha} u_{i\alpha}^* u_{i\alpha} \frac{e^{-E_\alpha\beta}}{1+e^{-E_\alpha\beta}} = A \to \lambda = \epsilon_f \qquad (5-130)$$

由变分条件（5－128a）、（5－128b）两式得到

$$\sum_j [t_{ij} + \sum_{klm} v_{ikjl} u_{k\gamma}^* u_{l\gamma} \frac{e^{-E_\gamma\beta}}{1+e^{-E_\gamma\beta}}] u_{j\alpha} = \epsilon_\alpha u_{i\alpha} \to \{\epsilon_\alpha, u_{i\alpha}\} \qquad (5-131)$$

$$\epsilon_\alpha = E_\alpha + \lambda,\quad E_\alpha = \epsilon_\alpha - \lambda \qquad (5-132)$$

其中 $\epsilon_f(\beta)$，$\epsilon_\alpha(\beta)$，$u_{i\alpha}(\beta)$ 与 $\beta=\frac{1}{kT}$有关．等式（5－130）～（5－132）就是温度有关的自洽平均场方程组，应联立自洽求解，获得 $\epsilon_f(\beta)$，$\epsilon_\alpha(\beta)$，

$u_{ia}(\beta)$.

温度有关的平均场方程也可从密度矩阵理论的 HF 近似推得，只需在单粒子密度矩阵中使用温度不为零的单粒子态的费米－狄拉克分布．所得温度不为零的 HF 方程为

$$\begin{cases} \hat{h}\psi_a = \epsilon_a\psi_a \\ \hat{h} = \hat{t} + U_{\mathrm{HF}} \\ U_{\mathrm{HF}}\rho = \int v(12)[\rho(11)\rho(22) - \rho(12)\rho(21)]\mathrm{d}2 \\ \rho = \sum_a n_a\psi_a\psi_a^* \\ n_a = \dfrac{1}{1 + \mathrm{e}^{(\epsilon_a-\lambda)\beta}} \end{cases} \tag{5-133}$$

费米能级 ϵ_f 用粒子数方程确定：

$$\sum_a \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{(\epsilon_a-\lambda)\beta}} = A \to \lambda = \epsilon_f \tag{5-134}$$

其中$\epsilon_f(\beta), \epsilon_a(\beta), \psi_a(\beta)$与 $\beta = \dfrac{1}{kT}$有关，n_a 是单粒子密度矩阵ρ 中包含的单粒子的费米－狄拉克分布．等式（5－133）和（5－134）必须联立自洽求解，获得$\epsilon_f(\beta), \epsilon_a(\beta), \psi_a(\beta)$.

固体的物理量都是在有限温度下测得的，因此严格说来，能带论应当建立在与温度有关的平均场理论之上才是合理的.

【参考文献】

Ⅰ　量子多体理论与统计力学

1　A. L. Fetter & J. D. Walecka. Quantum Theory of Many-Particle System. New York: McGraw－Hill, 1971

2　普里戈京．非平衡态统计力学．上海科学技术出版社，1984

Ⅱ　多体关联动力学

3　王顺金，左维，郭华．原子核多体关联动力学——量子多体理论的一种非微扰途径．物理学进展．1996, 16(1): 99

4　S. J. Wang & W. Cassing. Explicit Treatment of N-body Correlations within a Density Matrix Formalism. Ann. Phys. 1985, 159: 328

5 S. J. Wang, B. A. Li, W. Bauer & J. Randrup. Relativistic Transport Theory for Hadronic Matter. Ann. Phys. 1991,209:251

6 S. J. Wang, W. Zuo & W. Cassing. Correlation Dynamics of Green's Functions. Nucl. Phys. 1994,A573:245

7 S. J. Wang, W. Cassing, J. M. Haeuser, A. Peter & M. H. Thoma. Constrained Correlation Dynamics of SU(N) Gauge Theories. Ann. Phys. 1995,242:235

8 J. Y. Liu, S. J. wang, M. Di Toro, H. Liu, X. G. Li & W. Zuo. Two-body Correlation Transport Theory for Heavy-ion Collisions. Nucl. Phys. 1996,A604:341

Ⅲ 量子主方程

9 Shun-Jin Wang, Jun-Hong An, Hong-Gang Luo & Cheng-Long Jia. Dynamical Symmetry and Analytical Solutions of the Nonautonomous Quantum Master Equation of the Dissipative two-level System—Decoherence of Quantum Register. J. Phys. A 2003,36:829～840

Ⅳ 非平衡态统计力学

10 徐躬耦. 高能物理与核物理. 1978, Vol.2(no.4):359～367

11 W. Cassing, V. Metag, U. Mosel & K. Niita. Phys. Reps. 1990,188:363

12 王顺金. 温度不为零的自洽场方程——HFB方程的推广. 高能物理与核物理. 1981,5(1):92

Ⅴ 二次量子化形式的关联 Green 函数的应用

13 H. G. Luo, Z. J. Ying & S. J. Wang. Equation of Motion Approach to the Solution of Anderson Model. Phys. Rev. 1999,B59:9710

14 H. G. Luo & S. J. Wang. Specific Heat of the Periodic Anderson Model at Finite U. Phys. Rev. 2000,B62:1485～1488

15 H. G. Luo & S. J. Wang. Moment Conserving Decoupling Approach for Many-body Systems. Phys. Rev. 1999－I,B60(23):15, 480～483

16 H. G. Luo & S. J. Wang. Higher Order Correlation Effects to the Solution of the Hubbard Model. Phys. Rev. 2000－II,B61(8):5158～5168

17 H. G. Luo & S. J. Wang. Equation of Motion Approach to Two-dimensional Hubbard Model. Phys. Rev. 2000,B61:13418～13423

第 6 章　碰撞、散射和反应问题：光学模型与S－矩阵

6.1　碰撞、散射和反应问题[1-4]

前面几章讲的是结合态本征值问题或结合态系综问题. 这是量子多体系统的负能态、间断能谱的问题. 本章要讨论原子系统或原子核系统的碰撞问题，这是一个多体系统的正能态、连续能谱问题，是一个非结合态问题，比负能结合态问题要复杂得多.

6.1.1　结合态问题与非结合态碰撞问题：结构问题与碰撞问题

我们现在研究两个粒子的碰撞问题. 入射粒子（叫做炮弹，如电子、质子、中子等基本粒子或原子、原子核等复杂粒子）与靶粒子（多数是复杂粒子）相互碰撞，可以发生复杂的过程. 以质子 P 与原子核碰撞为例，当质子在质心系中的动能 E_p 低于库仑位垒 V_c 时，质子在靶核的库仑场中运动，不能进入原子核，只能发生卢瑟福弹性散射或通过库仑场引起原子核内部激发（叫做库仑激发）. 当 $E_p > V_c$ 时，质子可以进入靶核内部，核力开始发挥作用. 这时，除了发生不损失能量、只改变动量方向的弹性散射（p，p）外，还可以发生损失能量的非弹性散射（p，p'），发射氘核的拾取反应（p，d）或打出中子的电荷交换反应（p，n）等直接反应过程；还可以与靶核内的众核子发生多次碰撞，直至损失足够多的能量而停留在靶核中（被靶核吸收）并形成复合核；然后发生复合核衰变，发射 γ，p，p'，d，n，α，…及重粒子等，其示意见图 6－1.

6.1.2　势场散射与光学模型

我们把不经过复合核阶段而在核外发生的弹性散射叫做形状弹性散射或势场散射，其特点是靶核内部的自由度被冻结，而靶核作为一个整体只给质子提供一个散射势场 $U_0(\vec{r})$，质子在这个势场中运动而发生偏折，其动量方向改

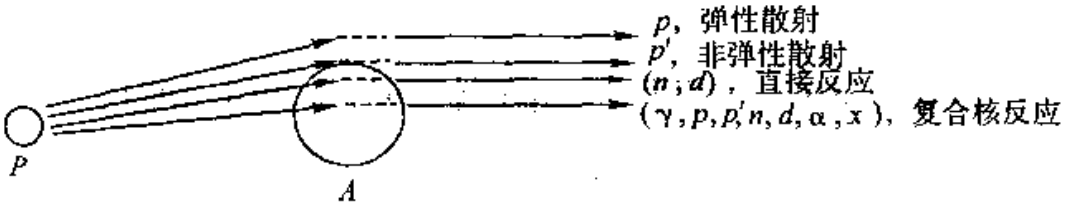


图 6－1　质子与原子核碰撞时发生的各种过程

变而相对运动动能却不改变．核子具有波动性，质子在势场$U_0(\vec{r})$中的散射正像光波在不均匀介质中的折射一样．势场$U_0(\vec{r})$起着折射系数$n_0(\vec{r})$的作用．除势场散射外，质子引起的其他反应过程的共同特点是，入射质子 P 在反应过程中或者其原有特性消失，或者变成别的什么东西，或者入射质子被靶核吸收．这一过程正像光波在不均匀介质中被折射的同时还被介质吸收．在光学中，折射用折射系数的实部$n_0(\vec{r})$来描述，而吸收则用折射系数的虚部$n_i\ (\vec{r})$来描述，总的折射系数包括折射和吸收两种成分，故为复函数：

$$n(\vec{r}) = n_0(\vec{r}) + \mathrm{i}n_i(\vec{r}).$$

类似地，质子的非弹性过程（类似被吸收的过程）也可以用势场的虚部$W(\vec{r})$来描述，而总的势场 $U = U_0 + \mathrm{i}W$ 也是复的，称为光学势．这样，通过与光学的类比，我们达到了质子在靶核介质中散射与吸收过程的光学模型描述．

通过上述分析可以看出，光学模型对质子的势场弹性散射作了精确细致的描述，而对势场弹性散射以外的复杂过程只当作吸收过程处理而作了笼统粗略的描述．质子在原子核上的弹性散射和非弹性过程的光学类比见表 6－1．

表 6－1　质子在原子核上的弹性散射和非弹性过程的光学类比

入射粒子	介　　质	控制过程的物理量	运动方程	过程结果
质子－德布洛依波	原子核	光学势	薛定格方程	散射与吸收
光子－电磁波	电磁介质	折射系数	马克斯威尔方程	折射与吸收

应当指出，上述质子与原子核碰撞的光学模型描述具有更为普遍的意义．任何微观粒子与复杂靶的碰撞，在平均场近似下，都会导致光学模型的描述，只不过因光学势的复杂程度不同而导致不同复杂程度的光学模型描述而已．在下面讨论关于光学模型的微观多体理论基础时，可以清楚地了解这一点．因此，光学模型的基本概念超出了核物理的范围，会在其他相关领域找到用途．

6.1.3 反应过程及其特点

仔细分析质子被吸收的过程，就会发现它包含各种复杂的反应过程，如入射质子通过与靶内的质子的库仑相互作用使靶核内部发生激发（库仑激发），质子与靶核内核子碰撞而打出质子或中子的（p，p'）反应和（p，n）反应，从靶核拾取一个中子而形成氘核的（p，d）反应，以及与靶核内众核子多次碰撞而被靶核吸收，最后形成复合核等过程.

上述反应过程的特点是，随着碰撞能量的增加，碰撞涉及的粒子数或自由度数目也相应地增加. 势场散射时，入射粒子和靶粒子的内部自由度都冻结了，涉及的自由度最少. 反应过程必然涉及内部自由度的参与，我们把涉及很少内部自由度的反应过程称为直接反应过程，如（p，p'），（p，n），（p，d）等都是直接反应过程. 形成复合核时，几乎所有内部自由度都参与了. 在直接反应与形成复合核之间，涉及中等数目的内部自由度，称之为中间过程反应.

上述对反应过程及其特点的分析具有普遍意义，任何微观复杂粒子之间的碰撞都在不同形式上存在上述过程及其相应的特点.

6.1.4 处理碰撞问题的任务

量子力学处理碰撞问题的任务，就是从多体薛定格方程出发，计算从势场散射，经直接反应和中间过程反应，到形成复合系统的各种截面. 这是一个非常复杂的量子力学多体问题. 在本章，我们只限于势场散射理论的详细介绍和直接反应理论的简介，详细全面的了解应参阅有关专著.

6.2 Lippmann－Schwinger 方程[3-4]

6.2.1 碰撞问题的描述：反应道——内部运动与相对运动的联合描述

考虑二体碰撞过程，即一个入射粒子（炮弹）a 与一个靶粒子 A 相碰撞，碰撞后观测到类弹粒子 b 和类靶粒子 B：

$$a + A \to b + B$$

碰撞系统的哈密顿量可以写成

$$\hat{H} = H_{a_1} + H_{a_2} + V_a(\alpha_1\alpha_2) + T_a = H_{\beta_1} + H_{\beta_2} + V_\beta(\beta_1\beta_2) + T_\beta \tag{6-1}$$

$$= H_a + V_a + T_a \qquad = H_\beta + V_\beta + T_\beta$$

$$T_a = \frac{-\hbar^2}{2\mu_a}\nabla^2_{r_a} \qquad T_\beta = \frac{-\hbar^2}{2\mu_\beta}\nabla^2_{r_\beta} \tag{6-2}$$

其中，μ_a 为 $a+A$ 的折合质量，μ_β 为 $b+B$ 的折合质量，H_a 描述内部运动，T_a 描述相对运动，V_a 描述 $a-A$ 之间的相互作用.

二体反应示意图见图 6-2.

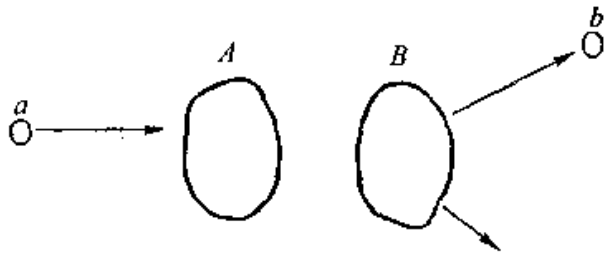


图 6-2 二体反应示意图

我们把入射粒子和靶粒子的量子数称为入射道量子数 $\alpha=(\alpha_1\alpha_2)$，把出射粒子和类靶粒子的量子数称为出射道量子数 $\beta=(\beta_1\beta_2)$，把从入射道 α 向出射道 β 的转变叫做反应道 $(\alpha\to\beta)$.

6.2.2 Lippmann-Schwinger 方程

这是包括边界条件的散射问题的解的积分形式.

相应于入射道的薛定格方程为

$$(E - H_a - T_a)\psi = V_a\Psi \tag{6-3}$$

其形式解为

$$\Psi = \frac{1}{E - H_a - T_a}V_a\Psi \tag{6-4}$$

相应的齐次方程（$V_a=0$）为

$$(E - H_a - T_a)\Phi_a = 0 \tag{6-5}$$

齐次方程的解的坐标表象为

$$\langle \vec{r}_a \mid \Phi_a \rangle = e^{i\vec{K}_a\cdot\vec{r}_a}\phi(\xi_a) \tag{6-6}$$

包含相对运动的平面波解和内部运动结合态解：

$$T_\alpha e^{i\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha} = \frac{\hbar^2K_\alpha^2}{2\mu_\alpha}e^{i\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha} = E_\alpha e^{i\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha},\ E = E_\alpha + \varepsilon_\alpha \qquad (6-7)$$

$$H_\alpha(\xi_\alpha)\phi_\alpha(\xi_\alpha) = \varepsilon_\alpha\phi_\alpha(\xi_\alpha)$$

非齐次方程的一般解应是齐次方程的通解加非齐次方程的特解，然后用边界条件确定通解的系数. 考虑入射条件后，

$$\Psi_\alpha = \Phi_\alpha + \frac{1}{E - H_\alpha - T_\alpha}V_\alpha\Psi_\alpha \qquad (6-8)$$

(6－8) 式表示的解已在齐次方程的通解中考虑了散射问题中的入射条件：渐进地存在着入射的平面波 $e^{i\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha}$和内部量子态$\Phi_\alpha(\xi_\alpha)$，因此只取一项 Φ_α，但还没有考虑散射波的边界条件. 如果要求在无限远处还存在着向外散射的球面波，则可得到完全满足散射的边界条件（包括入射条件和散射条件二者）的一个特解：

$$\Psi_\alpha^{(+)} = \Phi_\alpha + \frac{1}{E - H_\alpha - T_\alpha + i\varepsilon}V_\alpha\Psi_\alpha^{(+)} \qquad (6-9)$$

下面会看到，包含 $i\varepsilon$ 的 Green 函数在 $r_\alpha\to\infty$时导致向外的球面波. 上述方程称作 Lippmann－Schwinger 方程，是用 Green 算子写出的一个积分方程，也是散射问题的薛定格方程的一个特解，它已把散射问题的入射条件和散射条件等边界条件放到积分方程的解中. 因此，L－S方程是考虑了边界条件的散射问题的薛定格方程的积分形式的解.

现来计算 Green 函数 $G = \frac{1}{E - H_\alpha - T_\alpha + i\varepsilon}$在坐标空间的矩阵元 $G_{\alpha\alpha'}(\vec{r},\ \vec{r}')$.

利用

$$H_\alpha \mid \phi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha \mid \phi_\alpha\rangle,\quad T_\alpha \mid K_\alpha\rangle = \frac{\hbar^2K_\alpha^2}{2\mu_\alpha} \mid K_\alpha\rangle \qquad (6-10a)$$

$$\langle\phi_\alpha \mid \phi_{\alpha'}\rangle = \delta_{\alpha\alpha'},\quad \langle K \mid K'\rangle = (2\pi)^3\delta(K - K') \qquad (6-10b)$$

$$\langle r \mid K\rangle = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}},\ (2\pi)^{-3}\int \mid\vec{K}\rangle\langle\vec{K}\mid d\vec{K} = I \qquad (6-10c)$$

$$\mid\vec{r}\,'\rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,'),\quad \int \mid\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'\mid d\vec{r}\,' = I \qquad (6-10d)$$

可得

$$G_{\alpha\alpha'}(\vec{r},\vec{r}\,')$$

$$= \langle\vec{r}\ \phi_\alpha \mid \frac{1}{E - H_\alpha - T_\alpha + i\varepsilon} \mid \vec{r}\,'\phi_{\alpha'}\rangle$$

$$= \langle \vec{r} \mid \frac{1}{E_\alpha - T_\alpha + i\varepsilon} \mid \vec{r}\,' \rangle \delta_{\alpha\alpha'}$$

$$= \delta_{\alpha\alpha'}(2\pi)^{-6} \iint \langle \vec{r} \mid K \rangle \langle K \mid \frac{1}{E_\alpha - T_\alpha + i\varepsilon} \mid K' \rangle \langle K' \mid r' \rangle \mathrm{d}\vec{K}\, \mathrm{d}\vec{K}\,'$$

$$= \delta_{\alpha\alpha'} \frac{2M_\alpha}{\hbar^2}(2\pi)^{-3} \iint \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}\cdot\vec{r} - \mathrm{i}\vec{K}'\cdot\vec{r}'} \frac{1}{K_\alpha^2 - K^2 + i\varepsilon} \delta(\vec{K} - \vec{K}\,')\mathrm{d}\vec{K}\, \mathrm{d}\vec{K}\,'$$

$$= \delta_{\alpha\alpha'} \frac{2M_\alpha}{\hbar^2}(2\pi)^{-3} \frac{2\pi}{iR} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\mathrm{i}KR} K \mathrm{d}K}{[K_\alpha - (K - i\lambda)][K_\alpha + (K + i\lambda)]}$$

$$= -\delta_{\alpha\alpha'} \frac{2M_\alpha}{\hbar^2}(2\pi)^{-3} \frac{2\pi}{iR} 2\pi i \frac{K_\alpha}{2K_\alpha} \mathrm{e}^{\mathrm{i}K_\alpha R}$$

$$= -\delta_{\alpha\alpha'} \frac{M_\alpha}{2\pi\hbar^2} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K_\alpha R}}{R}$$

$$= -\delta_{\alpha\alpha'} \frac{M_\alpha}{2\pi\hbar^2} \cdot \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K_\alpha \mid \vec{r} - \vec{r}\,' \mid}}{\mid \vec{r} - \vec{r}\,' \mid} \tag{6-11a}$$

$$\rightarrow -\delta_{\alpha\alpha'} \frac{M_\alpha}{2\pi\hbar^2} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K_\alpha r}}{r} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}'} \tag{6-11b}$$

因此，带 $i\varepsilon$ 的 Green 函数渐进地产生一个向外的球面波.

6.2.3 跃迁振幅

从散射方程的特解 $\Psi_\alpha^{(+)}$，可以求得从 α 道向 α' 道跃迁的振幅，它正好是 $\Psi_\alpha^{(+)}$ 在 $|\vec{r}_\alpha \phi_\alpha\rangle$ 上的投影.

$$\langle \vec{r}_\alpha \phi_{\alpha'} \mid \Psi_\alpha^{(+)} \rangle$$

$$= \delta_{\alpha\alpha'} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha}$$

$$+ \sum_{\alpha''} \int \mathrm{d}\vec{r}_{\alpha''} \langle \vec{r}_\alpha \phi_{\alpha'} \mid \frac{1}{E - H_\alpha - T_\alpha + i\varepsilon} \mid \vec{r}_{\alpha''} \phi_{\alpha''} \rangle \langle \phi_{\alpha''} \vec{r}_{\alpha''} \mid V_\alpha \Psi_\alpha^{(+)} \rangle$$

$$= \delta_{\alpha'\alpha} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha} - \frac{M_\alpha}{2\pi\hbar^2} \int \mathrm{d}\vec{r}_{\alpha''} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_{\alpha''}\mid \vec{r}_\alpha - \vec{r}_{\alpha''} \mid}}{\mid \vec{r}_\alpha - \vec{r}_{\alpha''} \mid} \langle \vec{r}_{\alpha''} \phi_{\alpha'} \mid V_\alpha \Psi_\alpha^{(+)} \rangle \tag{6-12a}$$

$$\xrightarrow{r_\alpha \to \infty} \delta_{\alpha'\alpha} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha} - \frac{M_\alpha}{2\pi\hbar^2} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}K_{\alpha'} r_\alpha}}{r_\alpha} \int \mathrm{d}\vec{r}_{\alpha'} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{K}_{\alpha'}\cdot\vec{r}_{\alpha'}} \langle \vec{r}_{\alpha'} \phi_{\alpha'} \mid V_\alpha \Psi_\alpha(+) \rangle \tag{6-12b}$$

$$K_\alpha = \sqrt{\frac{2M_\alpha E_\alpha}{\hbar^2}}, \quad E_\alpha = E - \varepsilon_\alpha$$

跃迁振幅为

$$f_{\alpha'\alpha} = \frac{\mu_\beta}{2\pi\hbar^2} A_{\alpha'\alpha}$$

$$A_{\alpha'\alpha} = \int \mathrm{d}\vec{r}_{\alpha'} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{K}_{\alpha'}\cdot\vec{r}_{\alpha'}} \langle \vec{r}_{\alpha'}\phi_{\alpha'} \mid V_\alpha \mid \Psi_\alpha^{(+)} \rangle$$

$$= \langle \mathrm{e}^{+i\vec{K}_{\alpha'}\cdot\vec{r}_\alpha}\phi_{\alpha'} \mid V_\alpha \mid \Psi_\alpha^{(+)} \rangle$$

$$= \langle \Phi_{\alpha'} \mid V_\alpha \mid \Psi_\alpha^{(+)} \rangle \qquad (6-13a)$$

$$\Phi_{\alpha'} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_{\alpha'}\cdot\vec{r}_\alpha}\phi_{\alpha'} \qquad (6-13b)$$

如果对 $\Psi_\alpha^{(+)}$ 取零级近似：$\Psi_\alpha^{(+)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\vec{K}_{\alpha'}\cdot\vec{r}_\alpha}\phi_\alpha$，则有

$$A_{\alpha'\alpha}^{(0)} = \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{K}_{\alpha'}\cdot\vec{r}_\alpha} \mathrm{e}^{+\mathrm{i}\vec{K}_\alpha\cdot\vec{r}_\alpha} \mathrm{d}\vec{r}_\alpha \langle \phi_{\alpha'} \mid V_\alpha(\vec{r}_\alpha) \mid \phi_\alpha \rangle_\xi \qquad (6-14)$$

这就是 Born 近似下的跃迁振幅.

6.2.4 反应过程的跃迁振幅

上述公式只适合于描述弹性碰撞和非弹性碰撞，对于改变内部结构的反应过程，即 $\alpha \to \beta$（$\beta \neq \alpha$）的跃迁需要另行考虑. 反应振幅的计算如下.

改写 L－S 方程，以适合反应过程：

$$\Psi_\alpha^{(+)} = \Phi_\alpha + \frac{1}{E - H_\alpha - T_\alpha + i\varepsilon} V_\alpha \Psi_\alpha^{(+)}$$

$$= \Phi_\alpha + \frac{1}{E - H_\beta - T_\beta + i\varepsilon} [V_\alpha + (V_\beta - V_\alpha) \frac{1}{E - H_\alpha - T_\alpha + i\varepsilon} V_\alpha] \Psi_\alpha^{(+)}$$

$$= \Phi_\alpha + \frac{1}{E - H_\beta - T_\beta + i\varepsilon} [V_\alpha \Psi_\alpha^{(+)} + (V_\beta - V_\alpha)(\Psi_\alpha^{(+)} - \Phi_\alpha)]$$

$$= [1 - \frac{1}{E - H_\beta - T_\beta + i\varepsilon}(V_\beta - V_\alpha)] \Phi_\alpha + \frac{1}{E - H_\beta - T_\beta + i\varepsilon} V_\beta \Psi_\alpha^{(+)}$$

$$= \frac{i\varepsilon}{E - H_\beta - T_\beta + i\varepsilon} \Phi_\alpha + \frac{1}{E - H_\beta - T_\beta + i\varepsilon} V_\beta \Psi_\alpha^{(+)}$$

$$= \frac{1}{E - H_\beta - T_\beta + i\varepsilon} V_\beta \Psi_\alpha^{(+)} \quad (\varepsilon \to 0, \beta \neq \alpha) \qquad (6-15)$$

这表示在反应过程中，薛定格方程的解只有向外的 β 道的球面波，α 入射道的波已经消失而不复存在. 同样，可求出 β 道的 Green 函数 $\frac{1}{E - H_\beta - T_\beta + i\varepsilon}$ 的表达式，计算如下：

$$\langle \vec{r}_\beta \phi_\beta \mid \frac{1}{E - H_\beta - T_\beta + i\varepsilon} \mid V_\beta \Psi_\alpha^{(+)} \rangle$$

$$= -\frac{M_\beta}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{iK_\beta |\vec{r}_\beta - \vec{r}_\beta'|}}{|\vec{r}_\beta - \vec{r}_\beta'|} d\vec{r}_\beta' \langle \vec{r}_\beta' \phi_\beta \mid V_\beta \Psi_\alpha^{(+)} \rangle$$

$$\xrightarrow{r \to \infty} -\frac{M_\beta}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{iK_\beta r_\beta}}{r_\beta} \int e^{-i\vec{K}_\beta \vec{r}_\beta'} d\vec{r}_\beta' \langle \vec{r}_\beta' \phi_\beta \mid V_\beta \Psi_\alpha^{(+)} \rangle \quad (6-16)$$

$$f_{\beta\alpha} = \frac{\mu_\beta}{2\pi\hbar^2} A_{\beta\alpha}$$

$$A_{\beta\alpha} = \int e^{-iK_\beta' \vec{r}_\beta'} d\vec{r}_\beta' \langle \vec{r}_\beta' \phi_\beta \mid V_\beta \Psi_\alpha^{(+)} \rangle$$

$$= \langle e^{i\vec{K}_\beta \cdot \vec{r}_\beta} \phi_\beta \mid V_\beta \mid \Psi_\alpha^{(+)} \rangle \quad (6-17)$$

当做近似 $\Psi_\alpha^{(+)} \approx e^{i\vec{K}_\alpha \cdot \vec{r}_\alpha} \Phi_\alpha$ 时，得到 Born 近似的结果.

这样，我们从碰撞问题的薛定格方程的积分解（L－S方程）出发，通过 Green 函数的具体计算，给出了散射过程和直接反应过程的跃迁振幅的公式. 只要求得 Φ_α，Φ_β 和 $\Psi_\alpha^{(+)}$，$A_{\alpha\alpha'}$（$A_{\beta\alpha}$）的计算就归结为一个多重积分的计算. 本节的 Φ_α，Φ_β 的相对运动波函数是平面波，更进一步应考虑在光学势场中的相对运动的扭曲波以及相应的扭曲波 Born 近似（DWBA）.

例 6－1　卢瑟福散射：由于卢瑟福散射是势场散射，因此粒子内部自由度冻结，在 Born 近似下有

$$\begin{cases} \phi_\alpha = \phi_{\alpha'} = 1 \\ V_\alpha = \dfrac{e^2}{r} \end{cases} \quad (6-18a)$$

势场散射振幅为

$$f_{\alpha\alpha}(\theta) = -\frac{M}{2\pi\hbar^2} A_{\alpha\alpha}$$

$$A_{\alpha\alpha} = \langle e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \phi_\alpha' \mid V_\alpha \mid e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \phi_\alpha' \rangle$$

$$= \int e^{-i(\vec{K}'-\vec{K})\cdot\vec{r}} \frac{e^2}{r} d\vec{r}$$

$$= \int e^{-i\Delta\vec{K}\cdot\vec{r}} \frac{e^2}{r} d\vec{r}$$

$$= 2\pi \int_0^\infty r^2 dr \frac{e^2}{r} \int_\pi^0 d\cos\theta e^{-i\Delta K r \cos\theta}$$

$$= 4\pi e^2 \int_0^{\infty} \sin \Delta K r \frac{\mathrm{d}r}{\Delta K}$$

$$= \frac{4\pi e^2}{(\Delta K)^2} = \frac{\pi}{k^2} \frac{e^2}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} \tag{6-18b}$$

$$\Delta K = \sqrt{(\vec{K}' - \vec{K})^2} = 2K \sin \frac{\theta}{2} \tag{6-18c}$$

$$f_{\alpha\alpha}(\theta) = \frac{Me^2}{2\hbar^2 k^2} \frac{1}{\sin^2 \frac{\theta}{2}} = \frac{1}{2Mv^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \tag{6-18d}$$

θ 是$\vec{K}$和$\vec{K}'$的夹角. 截面为

$$\sigma(\theta) = (f_{\alpha\alpha}(\theta))^2 = \frac{e^4}{4M^2 v^4 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \tag{6-19}$$

这就是著名的 Rutherford 公式.

6.3 光学模型和势场散射[3,5,6]

6.3.1 光学模型

前面我们从质子与原子核碰撞过程的光学类比中提出了光学模型的概念. 光学模型的提出还有另一个理由. 在第 3～第 5 章中已指出，平均场理论在原子结构、原子核结构和固体能带结构问题的应用中相当成功，没有理由认为它在原子碰撞和原子核碰撞问题上会完全失去效力. 而光学模型正是把平均场理论从负能结合态问题（结构问题）推广到正能连续谱问题（碰撞、散射和反应问题）的一个成功尝试. 研究表明，光学模型在复杂粒子低能碰撞问题的应用中相当成功，基于扭曲波玻恩近似（DWBA）对原子核直接反应的成功应用就是一个很好的例子.

(1) 结构的平均场理论和碰撞的平均场理论的共同点：

结构问题的平均场理论和碰撞问题的平均场理论的共同点是，作为零级近似，必须考虑粒子在平均场中的独立运动.

(2) 结构的平均场理论和碰撞的平均场理论的不同点：

在结构问题上，由于是负能态间断能谱，因此 Pauli 原理的限制较强，平均场以外的剩余作用较弱，平均场概念和独立粒子近似在更大的程度上成立；而在反应问题上，由于是正能态连续能谱，因此 Pauli 原理的限制较弱，平均场以外的剩余作用较强，不同反应道之间的耦合变得十分重要. 在壳模型中，人们考虑的是原子核的稳定的壳层结构，稳定能级的能量是实数，所对应的平均场是实的. 在反应中，如果计及残余作用引起的所有的反应道之间的耦合，那么平均场仍然是实的；但如果消去次要的反应道而只保留重要的反应道，作为补偿，则必须引进虚的势场去描述粒子从被保留的反应道向被消去的反应道的衰变.

(3) 下面我们对于复数势场如何导致吸收，给出一个定量的概念. 设粒子在复势

$$U(r) = U_0(r) + iW(r) \tag{6-20}$$

中运动，满足与时间有关的薛定格方程：

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_0 + iW)\psi \tag{6-21}$$

由上述方程及其复共轭，可得连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div\vec{j} = \frac{2}{\hbar}\psi^* W\psi \tag{6-22}$$

其中几率密度 ρ 和几率流密度 $\vec{j}$ 定义为

$$\begin{cases} \rho = \psi^*\psi, \\ \vec{j} = \dfrac{i\hbar}{2m}(\psi \overleftrightarrow{\nabla} \psi^* - \psi^* \overleftrightarrow{\nabla} \psi) \end{cases} \tag{6-23}$$

对于定态有 $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$，因而

$$div\vec{j} = \frac{2}{\hbar}\psi^* W\psi \tag{6-24}$$

上式的右边是表示源（$W\rangle 0$）或漏（$W\langle 0$）的项目，W 为负，表示入射粒子流可以消失. 吸收截面等于在某一球面上总的向内流量除以入射粒子流密度：

$$\sigma_A = -\oint_\sigma \vec{j}\cdot\frac{d\vec{\sigma}}{v} = -\iiint \frac{div\vec{j}}{v}dV = -\frac{2}{\hbar}\iiint \frac{\psi^* W\psi}{v}dV$$

$$= \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\frac{i\hbar}{2mv}(\psi^*\frac{\partial \psi}{\partial r} - \psi\frac{\partial \psi^*}{\partial r})r^2\sin\theta d\theta d\varphi \tag{6-25}$$

上式的计算中用到 $r\to\infty$ 时的球面上的积分和 $\vec{j}\cdot \mathrm{d}\vec{\sigma}=j_r r^2\sin\theta\cdot \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi$. 对于沿 z 轴的入射平面波，其散射波的渐进式（见下一节）为

$$\psi=-\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2ikr}P_l(\cos\theta)(s_l e^{ikr}-e^{-ikr}) \tag{6-26}$$

ε_l 表示散射 l 分波的振幅，散射 l 分波被部分吸收时，$|s_l|^2<1$. 把（6－26）式代入 σ_A 的式子，得

$$\sigma_A=\frac{\pi}{k^2}\sum_l(2l+1)(1-|s_l|^2) \tag{6-27}$$

若势场为实，则为弹性散射，散射 l 分波无损耗，$|s_l|^2=1\to\sigma_A=0$. 若势场虚部为负，则散射 l 分波被部分吸收，$|s_l|^2<1\to\sigma_A\neq 0$.

综上所述，光学模型的提出有两个根据：一是粒子碰撞过程与光学过程的类比，二是结合态平均场理论的推广. 光学模型对弹性散射作了详细的描述，而把弹性散射以外的复杂过程当作吸收过程而用势场的虚部加以笼统地描述. 光学模型在核反应理论中的作用有些像壳层模型在核结构理论中所起的作用，二者都基于平均势场概念. 光学模型虽然是在核反应理论中提出的，但其基本概念对其他量子多体碰撞问题也有参考价值.

6.3.2 微观光学势与唯象光学势

上一节讲述了提出光学模型的两个根据：碰撞过程的光学类比和平均场理论的有效性. 这一节转向讨论光学模型本身的问题. 光学模型的基本问题是确定光学势和计算粒子在光学势中的散射与吸收. 本节讨论光学势的确定问题，下一节讲述光学模型的求解问题.

6.3.2.1 光学模型的基本问题

光学模型的基本问题包括：①确定光学势；②计算粒子在光学势中的运动（散射与吸收）.

前面讲到，光学势的提出是基于平均场概念. 入射粒子与靶核中众多核子发生相互作用，这些核内的核子对入射粒子的相互作用，经过对核内核子的状态的平均，对每个核子的贡献叠加之后，将产生一个总的单体平均势场. 在这个平均势场以外，还存在剩余的二体相互作用引起的涨落. 在入射粒子能量不太高（每个核子 20MeV 以下）的情况下，相互碰撞的两个原子核的内禀激发可资利用的组态不多，由于泡利原理的限制，剩余作用引起的涨落还不会达到

从根本上瓦解平均势场和独立粒子运动的地步. 因此，平均场仍可以作为处理核反应问题的出发点，而把剩余作用当作微扰处理. 这就是基于平均场概念对光学模型所作的微观分析. 从这种分析可以看出，光学势的确定，应当从多体散射理论出发，运用平均场的方法，从多体相互作用中提取出核反应中的平均势场——光学势. 这样确定的光学势叫做微观光学势. 目前，推导微观光学势有三个主要的途径：①多体散射途径；②Green 函数途径；③路径积分途径. 下面分别予以简单介绍.

6.3.2.2 *微观光学势*

作为平均场的光学势应当由量子多体理论推导出来.

(1) 多体散射途径的基本想法是，从多体薛定格方程出发，运用投射算子，投射出弹性道的方程，消去其余的反应道.

设系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{H}_1(\xi_1) + \hat{H}_2(\xi_2) + \hat{T}(\vec{\nabla}_R) + V(\vec{R}, \xi_1, \xi_2) \tag{6-28}$$

设两个碰撞核的内禀波函数 ψ_i (ξ_1)，φ_i (ξ_2) 满足

$$\begin{aligned}(\hat{H}_1(\xi_1) - \varepsilon_{1i})\psi_i(\xi_1) = 0, \langle \psi_i \mid \psi_j \rangle = \delta_{ij} \\ (\hat{H}_2(\xi_2) - \varepsilon_{2i})\varphi_i(\xi_2) = 0, \langle \varphi_i \mid \varphi_j \rangle = \delta_{ij}\end{aligned} \tag{6-29}$$

则系统总的散射波函数 $\Psi^{(+)}$可写成

$$\Psi^{(+)}(R, \xi_1, \xi_2) = \sum_{kl} \chi_{kl}(R)\psi_k(\xi_1)\varphi_l(\xi_2) \tag{6-30}$$

其中 χ_{00}为弹性道相对运动波函数，对应的两个碰撞核处于基态$|\psi_0\varphi_0\rangle$.

对系统总体的薛定格方程

$$(\hat{H} - E)\Psi^{(+)} = 0 \tag{6-31}$$

引进向两个碰撞核基态$|\psi_0\varphi_0\rangle$ 投影的算子$\hat{P}$（即向弹性道子空间的投射算子）和与之正交互补的投影算子$\hat{Q}$（即向弹性道以外的道空间的投射算子）：

(6-32)

$$\hat{P} = |\psi_0\varphi_0\rangle\langle\varphi_0\psi_0| \tag{6-33a}$$

$$\hat{Q} = \hat{I} - \hat{P} = \sum_{i,j\neq 0} |\psi_i\varphi_j\rangle\langle\varphi_j\psi_i| \tag{6-33b}$$

由本征函数的正交性，可证：

$$\hat{P}^2 = \hat{P}, \quad \hat{Q}^2 = \hat{Q}, \quad \hat{P}\hat{Q} = \hat{Q}\hat{P} = 0 \tag{6-34}$$

对波函数和运动方程可做相应的分解：

$$\Psi^{(+)} = (\hat{P} + \hat{Q})\Psi^{(+)} = \hat{P}\Psi^{(+)} + \hat{Q}\Psi^{(+)} \tag{6-35a}$$

$$(\hat{H} - E)(\hat{P}\Psi^{(+)} + \hat{Q}\Psi^{(+)}) = 0 \tag{6-35b}$$

$$(\hat{P}\hat{H}\hat{P} - E)(\hat{P}\Psi^{(+)}) = -\hat{P}\hat{H}\hat{Q}(\hat{Q}\Psi^{(+)}) \tag{6-35c}$$

$$(\hat{Q}\hat{H}\hat{Q} - E)(\hat{Q}\Psi^{(+)}) = -\hat{Q}\hat{H}\hat{P}(\hat{P}\Psi^{(+)}) \tag{6-35d}$$

在上述耦合方程中，消去弹性道以外的解$\hat{Q}\Psi^{(+)}$，可得到弹性道的相对运动的方程.

由

$$\hat{Q}\Psi^{(+)} = -\frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q} + i\varepsilon}\hat{Q}\hat{H}\hat{P}(\hat{P}\Psi^{(+)}) \tag{6-36}$$

得

$$(\hat{P}\hat{H}\hat{P} + \hat{P}\hat{H}\hat{Q}\frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q} + i\varepsilon}\hat{Q}\hat{H}\hat{P} - E)(\hat{P}\Psi^{(+)}) = 0 \tag{6-37}$$

因

$$(\hat{P}\hat{H}\hat{P})(\hat{P}\Psi^{(+)}) = \hat{P}(\hat{T} + \varepsilon_{10} + \varepsilon_{20} + \langle\psi_0\varphi_0 \mid \hat{V} \mid \psi_0\varphi_0\rangle)(\hat{P}\Psi^{(+)})$$

$$\hat{P}\hat{H}\hat{Q} = \hat{P}(\hat{H}_1(\xi_1) + \hat{H}_2(\xi_2) + \hat{V}(R, \xi_1, \xi_2) + \hat{T}(R))\hat{Q}$$

$$= \hat{P}\hat{V}\hat{Q}, \hat{Q}\hat{H}\hat{P} = \hat{Q}\hat{V}\hat{P} \tag{6-38}$$

故

$$\hat{P}[\hat{T} + \langle\psi_0\varphi_0 \mid V \mid \psi_0\varphi_0\rangle + \langle\psi_0\varphi_0 \mid \hat{V}\hat{Q}\frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q} + i\varepsilon}\hat{Q}\hat{V} \mid \psi_0\varphi_0\rangle - E_{00}]\hat{P}\Psi^{(+)} = 0 \tag{6-39a}$$

其中

$$E_{00} = E - \varepsilon_{10} - \varepsilon_{20} \tag{6-39b}$$

用$\langle\psi_0\varphi_0|$乘上式，并注意到

$$\hat{P}\Psi^{(+)} = |\psi_0\varphi_0\rangle\chi_{00} \tag{6-40a}$$

得到相对运动波函数$\chi_{00}(R)$满足的运动方程：

$$(\hat{T}(R) + \hat{U}_{op}(R) - E_{00})\chi_{00}(R) = 0 \qquad (6-40b)$$

其中微观光学势为

$$\hat{U}_{op}(R) = \langle \psi_0\varphi_0 \mid \hat{V}(R,\xi) \mid \psi_0\varphi_0\rangle_{(\xi)} + \langle \psi_0\varphi_0 \mid \hat{V}\hat{Q}\frac{1}{E - \hat{Q}\hat{H}\hat{Q} + i\varepsilon}\hat{Q}\hat{V} \mid \psi_0\varphi_0\rangle_{(\xi)}$$

$$= \hat{U}_F + \Delta\hat{U} \qquad (6-40c)$$

$\hat{U}_F$ 是光滑的双折叠势，$\Delta\hat{U}$是与能量有关的、非厄密的复势，是非弹性道对弹性道的贡献，与两个碰撞核的内部激发的共振结构有关. 双折叠势可进一步写成

$$\hat{U}_F = \int \mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2\rho_1(\vec{r}_1)\rho_2(\vec{r}_2)V(\vec{r}_{12}) \quad (\vec{r}_{12} = \vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1) \qquad (6-41a)$$

$\rho(\vec{r}_i)$ 是第 i 个核内核子的密度分布，如定义第一个核内的核子感受到的第二个核的光学势 U_{n2}为

$$U_{n2}(\vec{R} - \vec{r}_1) = \int \mathrm{d}\vec{r}_2\rho_2(\vec{r}_2)V(\vec{r}_{12}) \qquad (6-41b)$$

则 U_F 可改写成单折叠势的形式：

$$\hat{U}_F(\vec{R}) = \int \mathrm{d}\vec{r}_1\rho_1(\vec{r}_1)U_{n2}(\vec{R} - \vec{r}_1) \qquad (6-41c)$$

近年来的计算表明，对于 $E/A \sim 10\mathrm{MeV}$，$A \geqslant 10$ 的核，用核反应的 G-矩阵所作的双折叠光学势的计算是相当成功的. 从$\hat{U}_{op}$的表达式可知，用折叠势近似表示光学势，略去了原子核的内部激发对光学势的贡献.

(2) 多体 Green 函数途经，是用单粒子 Green 函数的积分方程中的质量算子的傅立叶分量去定义单粒子光学势：

$$G(x,x') = G_0(x,x') - \int G_0(x,x'')M(x'',x''')G_0(x''',x')\mathrm{d}x''\mathrm{d}x'''$$

$$U_{op}(\vec{r},\vec{r}',E) \equiv M(\vec{r},\vec{r}',E) = \int \mathrm{d}(t-t')\mathrm{e}^{\mathrm{i}E(t-t')/\hbar}M(x,x') \qquad (6-42)$$

其中质量算子 M (x, x') 可以从多体 Green 函数的方程中计算. 对于结合态问题，在独立粒子近似下，质量算子就是通常的 Hartree-Fock 自洽场. 这一途径的优点是，在二次量子化表象中工作，便于考虑 Pauli 原理，便于分析核

结构对于光学势的影响，便于讨论光学势的解析性质.

(3) 近年有人用路径积分方法研究重离子碰撞中的光学势. 其基本想法是，用路径积分的形式写出光学势产生的散射振幅和微观二体相互作用给出的散射振幅，把二者加以比较，即可得到光学势的微观表达式，这方面的研究尚不成熟.

近年来，核子与原子核相互作用的微观光学势的研究取得了很大的进展. 无可调参数的微观光学势对实验数据的拟合的精度已达到唯象光学势的水平.

应当指出，人们常常把微观光学势区分为广义光学势与光学模型势，后者是前者对一定能量区域的平均. 由于入射粒子的能量有一分布宽度，光学模型所分析的实验数据实际上是对入射粒子能量分布的平均，核的内部激发的尖锐振动能级对光学势的贡献经能量平均而被平滑掉，因而光学模型只给出截面随能量变化的平滑部分.

6.3.2.3 唯象光学势

在光学模型发展的早期，由于计算条件的限制，微观光学势的研究还停留在形式理论的阶段，而唯象光学势的研究则发展很快. 从核力的性质和核结构的知识以及微观光学势的定性和半定量的结论，人们可以获得光学势的某些知识. 由于核力是短程力，光学势强度的分布应紧密地与原子核密度分布相联系. 从核力和核的壳层结构理论知道，光学势是与同位旋有关的，还应包含自旋－轨道相互作用. 从微观光学势的形式理论知道，光学势是与能量有关的、非定域的，包含表示吸收的虚数部分. 依据这些半定量的知识，人们首先写出光学势的某种函数形式，其中包含若干可调参数，通过与实验数据的最佳拟合去确定这些参数. 这样确定的光学势叫做唯象光学势.

如果假定原子核是球对称的，则核子与原子核的平均作用势（光学势）一般写成

$$U(\vec{r}) = V_c - Vf(x_0) + (\frac{\hbar}{\mu_\pi c})^2 V_{sl}(\vec{s}\cdot\vec{l})\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}f(x_{sl}) + i[Wf(x_W) - 4W_D\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_D}f(x_D)] \qquad (6-43)$$

其中 V_c 为库仑势. 通常假定原子核具有均匀电荷分布，则

$$V_c(r)=\begin{cases}\dfrac{z_1z_2e^2}{2R_c}\left[3-\left(\dfrac{r}{R_c}\right)^2\right], & r\leqslant R_c\\ \dfrac{z_1z_2e^2}{r}, & r>R_c\end{cases}\tag{6-44}$$

R_c 是原子核的电荷分布半径，势场的形状因子 $f(x_i)$ 通常取 Woods－Saxon 型（见图 6－3），它与原子核内核子密度分布一致：

$$\begin{cases}f(x_i)=1/(1+e^{x_i})\\ x_i=(r-r_iA^{1/3})/a_i\end{cases}\tag{6-45}$$

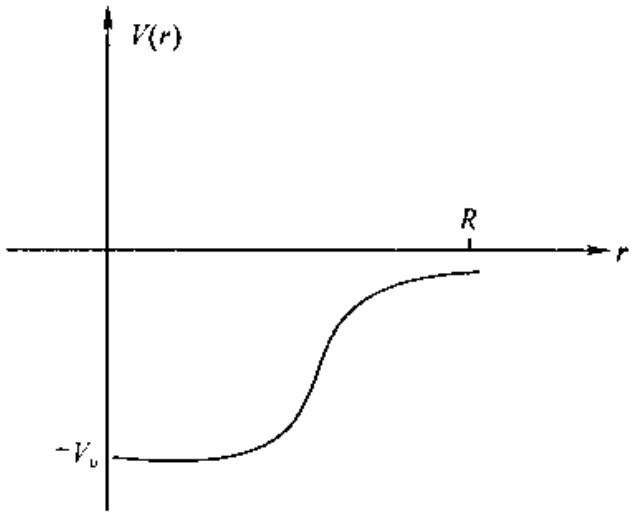


图 6－3　Woods－Saxon 型光学势示意图

势场的实数部分的第二项代表中心力，第三项是自旋－轨道力，由于包含 $f(x_i)$的梯度，只在核子密度变化剧烈的表面区域有较强的作用．虚部第一项表示体吸收，第二项表示面吸收．作用强度 V，V_d，W，W_D 以及作用半径参数 r_i 和表面厚度 a_i 是靶核质量数 A_T，电荷数 Z_T 以及入射粒子类型及其能量的函数．$\dfrac{\hbar}{\mu_\pi c}$ 是 π 介子的 Compton 波长．对于质子和中子，Bechitte 和 Greenless 给出下列光学势参数：

（1）对质子：

$$\begin{cases} V = 54 - 0.32E + 24\dfrac{N-Z}{A} + 0.4\dfrac{Z}{A^{1/3}},\ (r_0 = 1.17, a_0 = 0.75) \\ W = 0.22E - 2.7 \text{ 或 } 0 \\ W_D = 11.8 - 0.25E + 12\dfrac{N-Z}{A} \text{ 或 } 0(W_D \geqslant 0) \\ r_W = r_D = 1.32, \\ a_W = a_D = 0.51 + 0.7\dfrac{N-Z}{A} \\ V_{sl} = 6.2, r_{sl} = 1.01, a_{sl} = 0.75 \end{cases} \tag{6-46a}$$

(2) 中子：

$$\begin{cases} V = 56.3 - 0.32E + 24\dfrac{N-Z}{A},\ (r_0 = 1.17, a_0 = 0.75) \\ W = 0.22E - 1.56 \text{ 或 } 0(W \geqslant 0) \\ W_D = 11.8 - 0.25E - 12\dfrac{N-Z}{A} \text{ 或 } 0(W_D \geqslant 0) \\ r_W = r_D = 1.26 \\ a_W = a_D = 0.58 \\ V_{sl} = 6.2,\ r_{sl} = 1.1,\ a_{sl} = 0.75 \end{cases} \tag{6-46b}$$

上述参数中能量以 MeV 为单位，长度以 fm 为单位. 参数的适应范围是 $E<50\text{MeV}$，$A_T>40$. 近年来运用曲线拟合技术，唯象光学势能达到与实验数据的精确符合.

把光学势的微观理论与唯象理论结合起来使用，导致光学势的半唯象理论. 近年来，折叠势模型获得成功，可望使光学模型的微观理论和唯象理论的统一变得容易.

最后应当指出，无论是微观光学势，还是唯象光学势，在拟合实验数据方面均具有不确定性. 微观光学势虽然没有可调参数，但计算具有一定的误差. 而唯象光学势就具有更大的不确定性，同一组实验数据，常常可以用不同的唯象势去拟合.

6.3.3 粒子在光学势场中的散射与吸收

上节我们讨论了光学势的确定问题，这一节我们讲述光学模型的另一个基

本问题：求解粒子在光学势中的散射与吸收．我们知道，给定了光学势，求解薛定格方程，我们就能得到在一定边界条件下的散射解，并进而计算散射截面，吸收截面，以及等于二者之和的总截面．我们着重讨论截面的计算，总的思路是：先求出弹性散射截面，然后利用光学定理，由弹性散射截面导出总截面，再从总截面减去弹性散射截面，得到反应（吸收）截面．

6.3.3.1 截面公式的推导

(1) 无自旋－轨道耦合的情况（$s=0$).

为了简单起见，先不考虑库仑场.

①实数势场的情况.

计算弹性散射截面，归结为求解下述散射问题，即求薛定格方程

$$[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + U(\vec{r})]\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \qquad (6-47a)$$

在满足边界条件

$$\Psi \xrightarrow{r\to\infty} e^{ikz} + \frac{e^{ikr}}{r}f(\theta) \qquad (6-47b)$$

下的解．等式（6－47a)、(6－47b）可化为

$$[\nabla^2 + k^2 - v(\vec{r})]\Psi(\vec{r}) = 0 \qquad (6-48)$$

$$v(\vec{r}) = \frac{2M}{\hbar}U(\vec{r}), \quad k^2 = \frac{2ME}{\hbar}, \quad e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}$$

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_l \frac{w_l(r)}{kr}P_l(\cos\theta) \qquad (6-49)$$

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} - \frac{\hat{L}^2}{r^2} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} - \frac{\hat{L}}{r^2} \qquad (6-50a)$$

$$\nabla^2\Psi(\vec{r}) = \sum_l [\frac{w_l''(r)}{kr} - \frac{l(l+1)}{r^2}\frac{w_l(r)}{kr}]P_l(\cos\theta) \qquad (6-50b)$$

从而可得分波方程：

$$w_l''(r) - [\frac{l(l+1)}{r^2} + v(r) - k^2]W_l(r) = 0 \qquad (6-51a)$$

边界条件变成径向渐进条件：

$$w_l(r) \xrightarrow{r\to 0} 0$$

$$w_l(r) \xrightarrow{r\to\infty} A_l\sin(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l) = A_l[e^{i(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)} - e^{-i(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)}]/2i \tag{6-51b}$$

作为散射问题的薛定格方程的解，整个波函数的边界渐进条件为

$$\Psi(\vec{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \sum_l A_l \frac{[e^{i(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)} - e^{-i(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l)}]}{2ikr} \cdot P_l(\cos\theta) \tag{6-51c}$$

另一方面，由于

$$e^{ikz} = \sum_l (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \tag{6-52a}$$

而且

$$j_l(kr) \xrightarrow{r\to\infty} \frac{\sin(kr - \frac{l\pi}{2})}{kr} = \frac{[e^{i(kr-\frac{l\pi}{2})} - e^{-i(kr-\frac{l\pi}{2})}]}{2ikr} \tag{6-52b}$$

故问题设置的边界条件为：入射的平面波加散射的球面波的渐进条件

$$\Psi(\vec{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \sum_l (2l+1) i^l \frac{[e^{i(kr-\frac{l\pi}{2})} - e^{-i(kr-\frac{l\pi}{2})}]}{2ikr} \cdot P_l(\cos\theta) + \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) \tag{6-53}$$

比较同一边界条件的两种表示（6－51c）和（6－53）中的向内球面波的系数，得到

$$A_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l} \tag{6-54}$$

再由（6－51c）和（6－53）并运用条件（6－54），得到

$$\sum_l [A_l e^{i\delta_l} - (2l+1) i^l] \frac{e^{i(kr-\frac{l\pi}{2})}}{2ikr} P_l(\cos\theta) - \frac{e^{ikr}}{r} f(\theta) = 0$$

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1)[e^{i2\delta_l} - 1] P_l(\cos\theta)$$

$$= \frac{1}{k} \sum_l (2l+1) e^{i\delta_l} \sin\delta_l P_l(\cos\theta) \tag{6-55}$$

微分截面

$$\frac{d\sigma_{el}(\theta)}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \tag{6-56}$$

总截面

$$\sigma_{el} = \int \mathrm{d}\sigma_{el} = 2\pi\int_{-1}^{1} |f(\theta)|^2 \mathrm{d}\cos\theta = \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l \quad (6-57)$$

计算（6－57）式时用到 $P_l(\cos\theta)$ 的正交性：

$$\int_{-1}^{1} P_l(x)P_{l'}(x)\mathrm{d}x = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'} \quad (6-58)$$

②光学定理.

反应中的总截面与向前弹性散射振幅之间存在下述关系：

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) \quad (6-59)$$

光学定理是普遍的，这里暂不证明，仅用上节的结果验证这一定理. 在势场散射的情况下，总截面就是弹性散射截面，因此应有 $\sigma_t = \sigma_{el}$. 计算

$$\mathrm{Im}f(0) = \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l P_l(1)$$

$$= \frac{1}{k}\sum_l (2l+1)\sin^2\delta_l \quad (6-60)$$

由（6－57）式知

$$\frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) = \sigma_{el} = \sigma_t$$

故（6－59）式得证.

③复数势场的情况.

对于复数势场，求散射振幅 $f(\theta)$ 的步骤与实数势场一样，$f(\theta)$ 仍用（6－55）式表示，但此时的相移 δ_e 应是复数：

$$\delta_l = \xi_c + \mathrm{i}\eta_l \quad (6-61)$$

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik}\sum_l (2l+1)[\mathrm{e}^{2i(\xi_l+\mathrm{i}\eta_l)} - 1]P_l(\cos\theta)$$

$$= \frac{1}{2k}\sum_l (2l+1)[\mathrm{e}^{-2\eta_l}\sin 2\xi_l + \mathrm{i}(1 - \mathrm{e}^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l)]P_l(\cos\theta) \quad (6-62)$$

由 $f(\theta)$ 及光学定理求得弹性散射截面为

$$\sigma_{el} = \int |f(\theta)|^2 \mathrm{d}\Omega$$

$$= \frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)[\mathrm{e}^{-4\eta_l}\sin^2 2\xi_l + (1 - \mathrm{e}^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l)^2] \quad (6-63)$$

总截面为

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) = \frac{2\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)(1-e^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l) \qquad (6-64)$$

反应截面为

$$\sigma_r = \sigma_t - \sigma_{el}$$

$$= \frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)[2 - 2e^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l - e^{-4\eta_l}\sin^2 2\xi_l - (1-e^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l)^2]$$

$$= \frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)(1-e^{-4\eta_l}) \qquad (6-65)$$

(2) 有自旋－轨道耦合的情况.

设

$$V(\vec{r}) = V_0(\vec{r}) + V_1(\vec{r})\,\vec{l}\cdot\vec{s} \qquad (6-66)$$

这时入射粒子有内禀自旋$S(S\neq 0)$，由于自旋－轨道力，(J, M) 才是好量子数.

①实数势场的情况.

令

$$\Psi_M(\vec{r}) = \sum_l (w_{lJ}(r)/kr)\varphi_{lsJM}(\theta,\phi,s_z) \qquad (6-67)$$

$$\varphi_{lsJM} = \sum_{m,m_s} \langle lmsm_s \mid JM\rangle Y_{lm}(\theta,\phi)\chi_{sm_s}(s_z) \qquad (6-68)$$

把 (6－67) 式代入 (6－48) 式，并计算

$$\langle \varphi_{lsJM} \mid [\vec{\nabla}^2 + k^2 - V] \mid \Psi_M\rangle = 0$$

考虑到

$$\vec{\nabla}^2\Psi_M = \sum_{lJ}[w''_{lJ}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}w_{lJ}(r)]/kr\cdot\varphi_{lsJM} \qquad (6-69a)$$

$$\langle \varphi_{lsJM} \mid V \mid \Psi_M\rangle = (w_{lJ}/kr)V_{lJ}(r) \qquad (6-69b)$$

$$V_{lJ}(r) = V_0(r) + \frac{1}{2}[J(J+1) - l(l+1) - s(s+1)]V_1(r) \qquad (6-69c)$$

$$\langle \varphi_{lsJM} \mid \varphi_{l's'J'M'}\rangle = \delta_{ll'}\delta_{ss'}\delta_{JJ'}\delta_{MM'} \qquad (6-70)$$

得

$$w''_{lJ} - [\frac{l(l+1)}{r^2} + V_{lJ} - k^2]w_{lJ} = 0 \qquad (6-71)$$

考虑方程的解 Ψ_M 的渐近式. 因为 $V_{lJ}(r) \xrightarrow{r\to\infty} 0$，故

$$w_{lJ} \xrightarrow{r\to\infty} A_{lJ}\sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_{lJ}\right) \tag{6-72a}$$

$$\Psi_M \xrightarrow{r\to\infty} \sum_{lJ} A_{lJ}\left[e^{i(kr-l\pi/2+\delta_{lJ})} - e^{-i(kr-l\pi/2+\delta_{lJ})}\right]/2ikr \cdot \varphi_{lsJM} \tag{6-72b}$$

另一方面，由设置的边界条件有

$$\Psi_M(\vec{r}) \xrightarrow{r\to\infty} e^{ikz}\chi_{sm_s} + \frac{e^{ikr}}{r} f_{m_s}(\theta,\phi,s_z)$$

$$= \sum_l (2l+1) i^l \left[e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}\right]/2ikr \cdot P_l(\cos\theta)\chi_{sm_s} + \frac{e^{ikr}}{r} f_{m_s}(\theta,\phi,s_z)$$

$$= \frac{e^{ikr}}{r} f_{m_s}(\theta,\phi,s_z) + \sum_{lJ} \sqrt{4\pi(2l+1)}\, i^l \cdot$$

$$\left[e^{i(kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-l\pi/2)}\right]/2ikr \cdot \langle l0sm_s \mid JM\rangle \varphi_{lsJM} \tag{6-73}$$

计算（6－73）式时用到

$$P_l(\cos\theta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\, Y_{l0}(\theta,\phi)$$

$$Y_{l0}(\theta,\phi)\chi_{sm_s}(s_z) = \sum_J \langle l0sm_s \mid JM\rangle \varphi_{lsJM} \tag{6-74}$$

比较（6－72b）式和（6－73）式中向内球面波的系数，得到

$$A_{lJ} = \sqrt{4\pi(2l+1)}\, i^l e^{i\delta_l} \langle l0sm_s \mid JM\rangle \tag{6-75}$$

由（6－73）式减去（6－72b）式并考虑条件（6－75），得到

$$\begin{aligned} & f_{m_s}(\theta,\phi,s_z) \\ &= \frac{1}{2ik}\sum_{lJ}\left[e^{2i\delta_l} - 1\right]\sqrt{4\pi(2l+1)}\langle l0sm_s \mid JM\rangle \varphi_{lsJM} \\ &= \frac{i}{2ik}\sum_{lJm'm_s'}\left[e^{2i\delta_l} - 1\right]\sqrt{4\pi(2l+1)}\langle l0sm_s \mid JM\rangle \\ & \quad \langle lm'sm_s' \mid JM\rangle Y_{lm'}(\theta,\varphi)\chi_{sm_s'}(s_z) \end{aligned} \tag{6-76}$$

用 f_{m_s} 可计算各种截面：

当 $s=1/2$ 时，因

$$\langle l0sm_s \mid JM\rangle = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{l+1}{2l+1}}, & J = l + \dfrac{1}{2} \\ -2m_s\sqrt{\dfrac{l}{2l+1}}, & J = l - \dfrac{1}{2} \end{cases}$$

故

$$\sigma_{el} = \sum_{s_z}\int \mathrm{d}\Omega \mid f_{m_s}(\theta,\phi,s_z) \mid^2$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{lJ} \mid \frac{e^{2i\delta_{lJ}}-1}{2i} \mid^2 (2l+1) \mid \langle l0sm_s \mid JM\rangle \mid^2$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l}\left[(l+1) \mid \frac{e^{2i\delta_{l+}}-1}{2i} \mid^2 + l \mid \frac{e^{2i\delta_{l-}}-1}{2i} \mid^2\right]$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l}\left[(l+1)\sin^2\delta_{l+} + l\sin^2\delta_{l-}\right] \qquad (6-77)$$

此处 $\delta_{l+} = \delta_{l,J=l+1}$，$\delta_{l-} = \delta_{l,J=l-1}$. 容易验证光学定理的正确性：

因

$$Y_{l0}(0,0) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}$$

$$f(0) = \langle \chi_{sm_s} \mid f_{m_s}(0,0,s_z)\rangle$$

$$= \frac{1}{k}\sum_{lJ}(2l+1)e^{i\delta_{lJ}}\sin\delta_{lJ}\langle l0sm_s \mid JM\rangle^2 \qquad (6-78a)$$

故

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im}f(0) = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{lJ}(2l+1)\sin^2\delta_{lJ}\langle l0sm_s \mid JM\rangle^2$$

$$= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l}\left[(l+1)\sin^2\delta_{l+} + l\sin^2\delta_{l-}\right] = \sigma_{el} \qquad (6-78b)$$

即总截面等于弹性散射截面. 对于势场散射，这是正确的结论.

当 $s=1$ 时，$\langle l0sm_s \mid JM\rangle$ 的取值如下表：

m_s	1	0	−1
$J=l+1$	$\left[\frac{(l+1)\ (l+2)}{(2l+1)\ (2l+2)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(l+1)\ (l+1)}{(2l+1)\ (l+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{(l+1)\ (l+2)}{(2l+1)\ (2l+2)}\right]^{1/2}$
$J=l$	$-\left[\frac{(l+1)\ l}{2l\ (l+1)}\right]^{1/2}$	0	$\left[\frac{(l+1)\ l}{2l\ (l+1)}\right]^{1/2}$
$J=l-1$	$\left[\frac{(l-1)\ l}{2l\ (2l+1)}\right]^{1/2}$	$-\left[\frac{l\cdot l}{l\ (2l+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\frac{l\ (l-1)}{2l\ (2l+1)}\right]^{1/2}$

将 $s=1$ 对应的 (6－77) 式对 m_s 求平均，得

$$\sigma_{el} = \frac{4\pi}{3k^2}\sum_l \{(2l+3)\sin^2\delta_{l+} + (2l+1)\sin^2\delta_{l0} + (2l-1)\sin^2\delta_{l-}\} \tag{6-79}$$

计算上式用到

$$\sum_{m_s}\langle l01m_s \mid l+1, m_s\rangle^2 = \frac{2l+3}{2l+1},\quad \sum_{m_s}\langle l01m_s \mid l, m_s\rangle^2 = 1,$$

$$\sum_{m_s}\langle l01m_s \mid l-1, m_s\rangle^2 = \frac{2l-1}{2l+1}$$

其中 $\delta_{l+} = \delta_{l,J=l+1}$，$\delta_{l0} = \delta_{l,J=l}$，$\delta_{l-} = \delta_{l,J=l-1}$. 同样可以验证光学定理，即 $\sigma_t = \sigma_{el}$.

②复数势场的情况.

复势要产生复的相移，故需作代换 $\delta_{lJ} = \xi_{lJ} + i\eta_{lJ}$.

当 $s=1/2$ 时，

$$\begin{aligned}\sigma_{el} &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_l \{(l+1)\left|\frac{e^{2i(\xi_{l+}+i\eta_{l+})}-1}{2i}\right|^2 + l\left|\frac{e^{2i(\xi_{l-}+i\eta_{l-})}-1}{2i}\right|^2\} \\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_l \{(l+1)[e^{-4\eta_{l+}}\sin^2 2\xi_{l+} + (1-e^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+})^2] \\ &\quad + l[e^{-4\eta_{l-}}\sin^2 2\xi_{l-} + (1-e^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})^2]\}\end{aligned} \tag{6-80}$$

用光学定理求得

$$\sigma_t = \frac{2\pi}{k^2}\sum_l \{(l+1)(1-e^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+}) + l(1-e^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})\} \tag{6-81}$$

$$\begin{aligned}\sigma_r &= \sigma_t - \sigma_{el} \\ &= \frac{\pi}{k^2}\sum_l \{(l+1)(1-e^{-4\eta_{l+}}) + l(1-e^{-4\eta_{l-}})\}\end{aligned} \tag{6-82}$$

当 $s=1$ 时，

$$\begin{aligned}\sigma_{el} &= \frac{\pi}{3k^2}\sum_l \{(2l+3)[e^{-4\eta_{l+}}\sin^2 2\xi_{l+} + (1-e^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+})^2] \\ &\quad + (2l+1)[e^{-4\eta_{l0}}\sin^2 2\xi_{l0} + (1-e^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l0})^2]\end{aligned} \tag{6-83}$$

$$+(2l-1)[e^{-4\eta_l}\sin^2 2\xi_{l-}+(1-e^{-2\eta_l}\cos 2\xi_{l-})^2]\}$$

$$\sigma_t=\frac{2\pi}{3k^2}\sum_l\{(2l+3)(1-e^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+})+(2l+1)(1-e^{-2\eta_{l0}}\cos 2\xi_{l0})+$$
$$(2l-1)(1-e^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})\} \tag{6-84}$$

$$\sigma_r=\frac{\pi}{3k^2}\sum_l\{(2l+3)(1-e^{-4\eta_{l+}})+(2l+1)(1-e^{-4\eta_{l0}})+$$
$$(2l-1)(1-e^{-4\eta_{l-}})\} \tag{6-85}$$

(3) 存在库仑场的情况.

库仑场是长程力，影响波函数的渐进形式. 设薛定格散射方程的解为

$$\Psi_M=\sum_{lJ}\frac{w_{lJ}(r)}{kr}\varphi_{lsJM}$$

因有库仑场时，薛定格散射方程的径向波函数的解的渐进波函数中包含库仑场对相位的贡献 σ_l 和待求的核力的贡献 δ_{lJ}，故其渐进式为：

当 $r\to\infty$ 时，

$$w_{lJ}\xrightarrow{r\to\infty}A_{lJ}\sin(kr-\eta\ln 2kr-\frac{l\pi}{2}+\sigma_l+\delta_{lJ})$$
$$=A_{lJ}[e^{i(kr-\eta\ln 2kr-l\pi/2+\sigma_l+\delta_{lJ})}-e^{-i(kr-\eta\ln 2kr-l\pi/2+\sigma_l+\delta_{lJ})}]/2i \tag{6-86}$$

其中索末菲系数 $\eta=\dfrac{Z_1Z_2e^2}{\hbar v}$，是库仑相互作用参数. σ_l 是纯库仑力引起的相移，已由卢瑟福散射的分波法求解得到. δ_{lJ} 是核力引起的相对于库仑散射波函数的相移，是本节要计算的. 另一方面，存在库仑场时，人们设置的波函数的边界条件是入射的库仑平面波函数加上散射的球面波，即

$$\Psi_M(\vec{r})\xrightarrow{r\to\infty}e^{i[kz+\eta\ln k(r-z)]}\chi_{sm_s}+\frac{e^{i(kr-\eta\ln 2kr)}}{r}f_{m_s}(\theta,\phi,s_z)$$
$$=\sum_l(2l+1)i^l[e^{i(kr-\eta\ln 2kr l\pi/2)}-$$
$$e^{-i(kr-\eta\ln 2kr-l\pi/2)}]/2ikr\cdot P_l(\cos\theta)\chi_{sm_s}+\frac{e^{i(kr-\eta\ln 2kr)}}{r}f_{m_s}(\theta,\phi,s_z)$$
$$=\frac{e^{ikr}}{r}f_{m_s}(\theta,\phi,s_z)+\sum_{lJ}\sqrt{4\pi(2l+1)}i^l$$
$$\frac{[e^{i(kr-l\pi/2)}-e^{-i(kr-l\pi/2)}]}{2ikr}\cdot\langle l0sm_s\mid JM\rangle\varphi_{lsJM}$$

$$= \frac{e^{i(kr-\eta\ln 2kr)}}{r} f_{m_s}(\theta,\phi,s_z) + \sum_{lJ} \sqrt{4\pi(2l+1)}\, i^l \frac{\left[e^{i(kr-\eta\ln 2kr-l\pi/2)} - e^{-i(kr-\eta\ln 2kr-l\pi/2)}\right]}{2ikr} \cdot \langle l0sm_s \mid JM\rangle \varphi_{lsJM} \tag{6-87}$$

比较同一边界条件的表达式（6－86）、（6－87）中向内球面波的系数，得

$$A_{lJ} = \sqrt{4\pi(2l+1)}\, i^l \langle l0sm_s \mid JM\rangle e^{i(\sigma_l+\delta_{lJ})}$$

再比较向外球面波的系数，得

$$f_{m_s}(\theta,\phi,s_z) = \frac{1}{2ik}\sum_{lJ}\left[e^{2i(\sigma_L+\delta_{lJ})} - 1\right]\sqrt{4\pi(2l+1)}\langle l0sm_s \mid JM\rangle \varphi_{lsJM} \tag{6-88}$$

由此可见，存在库仑力时，散射振幅公式与无库仑力时形式一样，差别在于以 $(\sigma_l + \delta_{lJ})$ 代替 δ_{lJ}. 因此截面公式的形式也一样，只需作上述替换.

设

$$(\sigma_l + \delta_{lJ}) = \xi_{lJ} + i\eta_{lJ} \tag{6-89}$$

则可求得各种场合下的截面公式.

当 $s=0$ 时，弹性散射截面

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\left[e^{-4\eta_l}\sin^2 2\xi_l + (1 - e^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l)^2\right] \tag{6-90a}$$

总截面

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k}\mathrm{Im} f(0) = \frac{2\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)(1 - e^{-2\eta_l}\cos 2\xi_l) \tag{6-90b}$$

反应截面

$$\sigma_r = \sigma_t - \sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)(1 - e^{-4\eta_l}) \tag{6-90c}$$

当 $s=1/2$ 时：

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2}\sum_l \{(l+1)\left[e^{-4\eta_{l+}}\sin^2 2\xi_{l+} + (1 - e^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+})^2\right] + l\left[e^{-4\eta_{l-}}\sin^2 2\xi_{l-} + (1 - e^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})^2\right]\} \tag{6-91a}$$

$$\sigma_t = \frac{2\pi}{k^2}\sum_l \{(l+1)(1 - e^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+}) + l(1 - e^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})\} \tag{6-91b}$$

$$\sigma_r = \sigma_t - \sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2}\sum_l \{(l+1)(1 - e^{-4\eta_{l+}}) + l(1 - e^{-4\eta_{l-}})\} \tag{6-91c}$$

当 $s=1$ 时，

$$\sigma_{el}=\frac{\pi}{3k^2}\sum_l\{(2l+3)[e^{-4\eta_{l+}}\sin^2 2\xi_{l+}+(1-e^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+})^2]+$$
$$(2l+1)[e^{-4\eta_{l0}}\sin^2 2\xi_{l0}+(1-e^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l0})^2]+$$
$$(2l-1)[e^{-4\eta_{l-}}\sin^2 2\xi_{l-}+(1-e^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})^2]\} \tag{6-92a}$$

$$\sigma_t=\frac{2\pi}{3k^2}\sum_l\{(2l+3)(1-e^{-2\eta_{l+}}\cos 2\xi_{l+})+$$
$$(2l+1)(1-e^{-2\eta_{l0}}\cos 2\xi_{l0})+(2l-1)(1-e^{-2\eta_{l-}}\cos 2\xi_{l-})\} \tag{6-92b}$$

$$\sigma_r=\frac{\pi}{3k^2}\sum_l\{(2l+3)(1-e^{-4\eta_{l+}})+$$
$$(2l+1)(1-e^{-4\eta_{l0}})+(2l-1)(1-e^{-4\eta_{l-}})\} \tag{6-92c}$$

6.3.3.2 相移的计算

从前面的截面公式可知，只要知道各个分波的相移（$\sigma_l+\delta_{lJ}$），就可以计算各种截面．按定义，相移是通过比较波函数的严格解的渐进式（可以数值计算）与核力力程以外的波函数的形式（有解析式）来确定的．所以计算相移的基本思路是：①求波函数的严格数值解；②求核力力程以外的波函数的解析式；③在核力力程以外某一点把两种波函数光滑地连接起来（对数微商相等），从而确定相移．

前面已指出，散射解可写成

$$\Psi_M=\sum_{lJ}A_{lJ}\frac{w_{lJ}(r)}{kr}\varphi_{lsJM} \tag{6-93}$$

其中径向波函数 w_{lJ} 满足

$$w_{lJ}''-[\frac{l(l+1)}{r^2}+V_{lJ}-k^2]w_{lJ}=0 \tag{6-94}$$

其中 V_{lJ} 包括核力与库仑力，一般是复势．方程（6－94）可用数值方法求解，并假定 w_{lJ} 的数值解已求得．在核力力程以外，V_{lJ} 中只剩库仑力，（6－94）式化为库仑场中的散射方程（$r\to$ 很大时）：

$$w_{lJ}''-[\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2\eta k}{r}-k^2]w_{lJ}=0 \tag{6-95}$$

等式（6－95）是著名的库仑场中的径向波函数的方程，由于是二阶方程，它

有两个独立的特解：规则解 F_l（r）与不规则解 G_l（r），通解是它们的线性叠加：

$$\Psi_M \xrightarrow{r\to\infty} \sum_{lj} \frac{A_{lj}}{kr}[F_l\cos(\sigma_l+\delta_{lj})+G_l\sin(\sigma_l+\delta_{lj})]\varphi_{lsJM}$$

对于纯库仑（无核力）散射，其解早已求出：

$$\Psi_C=\sum_{lj}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l\langle l0sm_s\mid JM\rangle\frac{e^{i\sigma_l}}{kr}[F_l\cos\sigma_l+G_l\sin\sigma_l]\varphi_{lsJM}$$

核力存在时，极限过渡要求在纯库仑散射相移之外加上核力的贡献：$\sigma_l\to\sigma_l+\delta_{lj}$，故当 $r\to\infty$时，Ψ_M 趋于

$$\sum_{lj}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l\langle l0sm_s\mid JM\rangle\frac{e^{i(\sigma_l+\delta_{lj})}}{kr}[F_l\cos(\sigma_l+\delta_{lj})+G_l\sin(\sigma_l+\delta_{lj})]\varphi_{lsJM}$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{lj}\sqrt{4\pi(2l+1)}\,i^l\langle l0sm_s\mid JM\rangle\frac{1}{kr}[(F_l+iG_l)+e^{2i(\sigma_l+\delta_{lj})}(F_l-iG_l)]\varphi_{lsJM} \tag{6-96}$$

考虑每一分波的内外函数在 R_C 点的连续性条件（对数微商相等）

$$\frac{d}{dr}\ln(w_{lj})\Big|_{R_C}=\frac{d}{dr}\ln|(F_l+iG_l)+e^{2i(\sigma_l+\delta_{lj})}(F_l-iG_l)|\Big|_{R_C}$$

得

$$\frac{F_l'(\rho)+iG_l'(\rho)+e^{2i(\sigma_l+\delta_{lj})}[F_l'(\rho)-iG_l'(\rho)]}{[F_l(\rho)+iG_l(\rho)]+e^{2i(\sigma_l+\delta_{lj})}[F_l(\rho)-iG_l(\rho)]}\Big|_{\rho_C}=\frac{w_{lj}'}{w_{lj}}\Big|_{\rho_C}=D_{lj} \tag{6-97}$$

由此求解得

$$e^{2i(\sigma_l+\delta_{lj})}=\frac{F_l'(\rho)+iG_l'(\rho)-D_{lj}[F_l(\rho)+iG_l(\rho)]}{[F_l(\rho)-iG_l(\rho)]D_{lj}-[F_l'(\rho)-iG_l'(\rho)]}\Big|_{\rho_C} \tag{6-98}$$

其中 $\rho=kr$，$\rho_C=kR_C$，R_C 是连接点的半径，须选在核力力程之外．在求得内部区域的数值解 w_{lj}后，即可计算 D_{lj}．而库仑波函数 F_l（r）和 G_l（r）是已知的，有表可查．利用（6－98）式即可计算相移（$\sigma_l+\delta_{lj}$）．

对于中性粒子散射，$\eta=0$，$\sigma_l=0$，$F_l/kr\to j_l$（ρ），$G_l/kr\to -n_l$（ρ），故

$$e^{2i\delta_{lj}}=\frac{(j_l(\rho)+\rho j_l')-i(n_l+\rho n_l')-D_{lj}[j_l(\rho)-in_l(\rho)]\rho}{\rho[j_l(\rho)+in_l(\rho)]D_{lj}-[(j_l(\rho)+\rho j_l')+i(n_l(\rho)+\rho n_l')]}\Big|_{\rho_C} \tag{6-99}$$

其中 $j_l(r)$ 和 $n_l(r)$ 是球贝塞尔函数和球诺莫尔函数，也有表可查.

至此，我们介绍了计算散射振幅和散射截面的两种方法：振幅的 Green 函数积分计算法和分波相移的微分方程计算法，前者比较简练，后者比较精密，可以根据需要选用.

6.4 S－矩阵[7-8]

前面几节介绍的是散射和反应问题的定态理论，是碰撞问题的与时间无关的定态描述，基于定态薛定格方程，相应的实验条件是有稳定的入射粒子流，从而能够形成散射或反应问题的定态解. 本节介绍的是散射问题的与时间有关的非定态处理，基于与时间有关的薛定格方程，相应的实验条件是短脉冲的入射粒子流，不能够形成散射或反应问题的定态解. 这两种处理方法得到的结果是相同的，而后一种处理方法与量子场论中的 S－矩阵处理方法是一致的.

散射问题的定态和非定态图像示意见图 6－4.

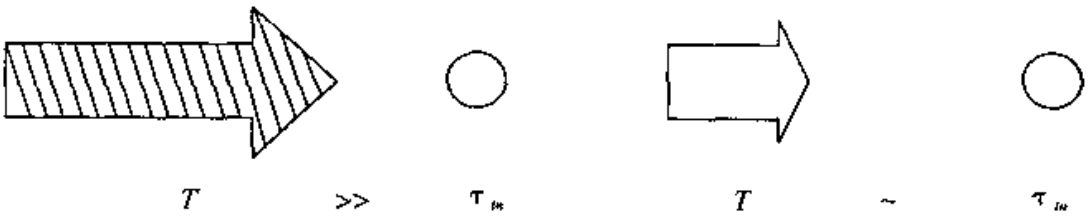


图 6－4 散射问题的定态（左）和非定态（右）图像

6.4.1 量子力学处理问题的三种绘景

量子力学处理问题的三种绘景类似于三种表象.

6.4.1.1 薛定格绘景

薛定格绘景的特点：

(1) 状态波函数随时间变化，由薛定格方程决定，即

$$i\hbar \frac{\partial \psi_s}{\partial t} = \hat{H}\psi_s \tag{6-100}$$

其解为

$$\psi_s(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi_s(0) \tag{6-101}$$

(2) 力学量不随时间变化，即

$$\hat{O}_s = \hat{O}(0), \langle \hat{O}_s \rangle = \langle \psi_s(t) | \hat{O}(0) | \psi_s(t) \rangle$$

在薛定格绘景中，全部动力学演化的信息都包含在状态波函数之中.

6.4.1.2 海森堡绘景

海森堡绘景的特点：

(1) 力学量随时间变化，由海森堡方程决定，即

$$i\hbar \frac{d\hat{O}_H(t)}{dt} = [\hat{O}_H(t), \hat{H}] \tag{6-102}$$

其解为

$$\hat{O}_H(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}(0)e^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{6-103}$$

(2) 状态波函数不随时间变化，即

$$\psi_H(t) = \psi_H(0) = \psi_s(0) \tag{6-104}$$

显然

$$\hat{H}_H(t) = \hat{H}(0) = \hat{H} \tag{6-105}$$

在海森堡绘景中，全部动力学演化的信息都包含在力学量算符之中. 由力学量的平均值

$$\begin{aligned}\langle \hat{O}(t) \rangle &= \langle \psi_H(0) | \hat{O}_H(t) | \psi_H(0) \rangle \\ &= \langle \psi_s(0) | e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{O}_s(0)e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \psi_s(0) \rangle \\ &= \langle \psi_s(t) | \hat{O}_s(0) | \psi_s(t) \rangle\end{aligned} \tag{6-106}$$

可见，两种不同的绘景只不过是时间演化算子 $e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ 的不同放置而已. 放在波函数上，就是薛定格绘景；放在力学量算子上，就是海森堡绘景.

6.4.1.3 相互作用绘景

设系统的哈密顿量可以分成两部分：可以求解的 $\hat{H}_0$（如平均场部分）和微扰项 $\hat{V}$：

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{6-107}$$

相互作用绘景的特点：

(1) 力学量随时间的变化由$\hat{H}_0$决定，即

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{O}_{in}(t)}{\mathrm{d}t}=[\hat{O}_{in}(t),\hat{H}_0] \tag{6-108}$$

其解为

$$\hat{O}_{in}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}\,\hat{O}_s(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar} \tag{6-109}$$

$$\hat{V}_{in}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}\,\hat{V}_s(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}$$

显然，

$$\hat{H}_{0in}(t)=\hat{H}_{0s}(0) \tag{6-110}$$

(2) 状态波函数的变化由微扰$\hat{V}_{in}(t)$决定. 令

$$\psi_{in}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}\psi_s(t),\ \psi_s(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}\psi_{in}(t) \tag{6-111}$$

代入$\psi_s(t)$的薛定格方程 (6-100)

$$i\hbar\frac{\partial\psi_s}{\partial t}=\hat{H}\psi_s=(\hat{H}_0+\hat{V})\psi_s \tag{6-112}$$

得到$\psi_{in}(t)$的运动方程：

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{in}(t)}{\partial t}=\hat{V}_{in}(t)\psi_{in}(t) \tag{6-113}$$

6.4.2 相互作用表象中状态随时间的演化

假设散射问题中的哈密顿量可表示为

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V} \tag{6-107}$$

其中H_0包括自由状态下的入射粒子的哈密顿量和靶粒子的哈密顿量，V表示入射粒子与靶粒子的相互作用. 设V具有有限力程而且比较弱. 处理散射问题，采用相互作用表象在计算上是方便的. 在此表象中，波函数随时间的演化完全归之于V的影响，即

$$i\hbar\frac{\partial\psi_{in}(t)}{\partial t}=\hat{V}_{in}(t)\psi_{in}(t) \tag{6-113}$$

其中

$$\hat{V}_{in}(t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}\,\hat{V}_s(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar} \tag{6-114}$$

$$|\psi_{in}(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)\,|\psi_{in}(t_0)\rangle \qquad (6-115)$$

$\hat{U}(t,t_0)$ 是描述状态随时间演化的算符. 把式 (6－115) 代入式(6－113), 得到

$$i\hbar\frac{\partial\,\hat{U}(t,t_0)\psi_{in}(t_0)}{\partial t} = \hat{V}_{in}(t)\,\hat{U}(t,t_0)\psi_{in}(t_0)$$

由于初态$\psi_{in}(t_0)$是任意的，可得出$\hat{U}(t,t_0)$满足的微分方程为

$$i\hbar\frac{\partial\,\hat{U}(t,t_0)}{\partial t} = \hat{V}_{in}(t)\,\hat{U}(t,t_0) \qquad (6-116)$$

并满足初始条件

$$\hat{U}(t_0,t_0) = 1 \qquad (6-117)$$

显然,

$$|\psi_{in}(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)\,|\psi_{in}(t_0)\rangle = \hat{U}(t,t')\,\hat{U}(t',t_0)\,|\psi_{in}(t_0)\rangle$$

与式 (6－115) 式比较，有

$$\hat{U}(t,t_0) = \hat{U}(t,t')\,\hat{U}(t',t_0) \qquad (6-118)$$

即$\hat{U}(t,t')$有传递性. 假设 V 是厄密算符，$V^+ = V$，则式 (6－116) 取厄密共轭为

$$-i\hbar\frac{\partial\,\hat{U}(t,t_0)^+}{\partial t} = \hat{U}(t,t_0)^+\,\hat{V}_{in}(t) \qquad (6-119)$$

由式 (6－116) 和 (6－119)，易于得出

$$\frac{\partial}{\partial t}[U(t,t_0)U(t,t_0)] = 0 \qquad (6-120)$$

即$U(t,t)^+U(t,t_0)$=常数 (不依赖于时间 t)，但$U(t_0,t_0)$=1，由此得出

$$U(t,t_0)^+\,U(t,t_0) = 1(幺正性) \qquad (6-121)$$

它是几率守恒的反映. 考虑到初始条件 (6－117)，方程 (6－116) 可表示成积分方程形式

$$U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' V_{in}(t')U(t',t_0) \qquad (6-122)$$

6.4.2.1 微扰论展开

当相互作用 V 可看成微扰时，可用微扰论逐级迭代近似地求解积分方程

(6－122)，有如下级数解：

$$U(t,t_0)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1 V_{in}(t_1)+\left(\frac{-i^2}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2(V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)+\cdots)$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)\cdots V_{in}(t_n)\mathrm{d}t_n \tag{6-123}$$

为使解的形式对称化，引进编时乘积算符（chronological ordering operator）$\hat{T}$，定义如下：

$$\hat{T}[V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)\cdots V_{in}(t_n)]=V_{in}(t_i)V_{in}(t_j)\cdots V_{in}(t_n) \tag{6-124}$$

其中 $$t_1\rangle t_2\rangle\cdots\rangle t_n$$

即按时间先后从右到左排列．利用此算符，可把微扰论展开式（6－123）表示成简洁而对称的形式．例如 $n=2$ 的项（二级微扰）可用 J_2 表示出来：

$$J_2=\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_2\ \hat{T}[V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)]$$

因为利用

$$\hat{T}[V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)]=\begin{cases}V_{in}(t_1)V_{in}(t_2), & t_1>t_2\\ V_{in}(t_2)V_{in}(t_1), & t_1<t_2\end{cases}$$

可以把 J_2 分成两部分（见图 6－5）：

$$J_2=\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2 V_{in}(t_1)V_{in}(t_2),\qquad (t_1>t_2)$$

$$+\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_2\int_{t_0}^{t_2}\mathrm{d}t_1 V_{in}(t_2)V_{in}(t_1),\quad (t_2>t_1)$$

第二项积分变量互换后（$t_1\leftrightarrow t_2$）与第一项相同，所以

$$J_2=2!\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2 V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)$$

以上分析可以推广到微扰论任意 n 阶项，最后可得

$$\hat{U}(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_n\ \hat{T}(V_{in}(t_1)V_{in}(t_2)\cdots V_{in}(t_n)) \tag{6-125}$$

其形式上还可简记为

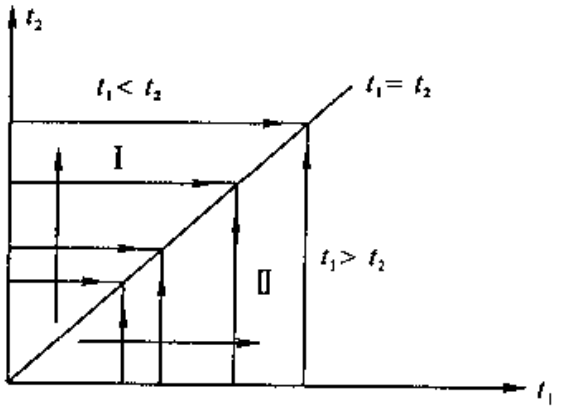


图 6－5　两个积分区间

$$\hat{U}(t,t_0) = \hat{T}\exp[-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{V}_{in}(t')dt'] \qquad (6-126)$$

6.4.2.2　散射矩阵

在有限力程假定下，入射前入射粒子与靶粒子相距很远，相互作用可不必考虑，体系状态用$|\psi(-\infty)\rangle$描述（包括相对运动以及它们的内部状态）. 同样，两粒子碰撞之后，彼此将远远离开，相互作用也不必考虑，体系状态用$|\psi(+\infty)\rangle$描述. 定义散射算符 S：

$$S|\psi(-\infty)\rangle = |\psi(+\infty)\rangle \rightarrow S = \hat{U}(+\infty,-\infty) \qquad (6-127)$$

S－矩阵把初态$|\psi(-\infty)\rangle$转化为末态$|\psi(+\infty)\rangle$. 考虑到几率守恒：

$$\langle|\psi(+\infty)|\psi(+\infty)\rangle = \langle\psi(-\infty)|\psi(-\infty)\rangle$$

要求

$$S^+S = SS^+ = 1 \rightarrow S^+ = S^{-1} \qquad (6-128)$$

与（6－121）式一致.

设$|\varphi_a\rangle$表示包括$\hat{H}_0$在内的一组力学量完全集的共同本征态

$$\hat{H}_0|\varphi_a\rangle = E_a|\varphi_a\rangle \qquad (6-129)$$

所有$|\varphi_a\rangle$构成体系的一组正交完备的状态集，E_a一般包括连续谱与分立谱. 考虑到相互作用 V 的力程是短程的，当两粒子相距很远时，不必考虑 V，因此$|\psi(-\infty)\rangle$与$|\psi(+\infty)\rangle$均可用$|\varphi_a\rangle$展开：

$$\begin{cases} |\psi(-\infty)\rangle = \sum_{\alpha} a_{\alpha} |\varphi_{\alpha}\rangle \\ |\psi(+\infty)\rangle = \sum_{\beta} b_{\beta} |\varphi_{\beta}\rangle \end{cases} \tag{6-130}$$

于是式（6－127）可表示成

$$\sum_{\beta} b_{\beta} |\varphi_{\beta}\rangle = \sum_{\alpha} a_{\alpha} S |\varphi_{\alpha}\rangle$$

$$= \sum_{\alpha\beta} a_{\alpha} |\varphi_{\beta}\rangle\langle\varphi_{\beta}| S |\varphi_{\alpha}\rangle = \sum_{\alpha\beta} a_{\alpha} S_{\beta\alpha} |\varphi_{\beta}\rangle$$

式中

$$S_{\beta\alpha} = \langle\varphi_{\beta}| S |\varphi_{\alpha}\rangle \tag{6-131}$$

由此得

$$b_{\beta} = \sum_{\alpha} S_{\beta\alpha} a_{\alpha} \tag{6-132}$$

$S_{\beta\alpha}$即散射算符 S 在$\hat{H}_0$ 表象中的表示，称为散射矩阵（scattering matrix）. $|b_{\beta}|^2$代表测得末态处于 φ_{β} 态的几率. 设初态$|\varphi(-\infty)\rangle = |\varphi_{\alpha_0}\rangle$，即式(6－130)中 $a_{\alpha} = \delta_{\alpha\alpha_0}$，此时，式（6－132）给出 $b_{\beta} = S_{\beta\alpha_0}$，$|S_{\beta\alpha_0}|^2$ 代表从初态 φ_{α_0}跃迁到末态 φ_{β} 的几率. 按几率守恒，有

$$\sum_{\beta} |b_{\beta}|^2 = \sum_{\beta} |S_{\beta\alpha_0}|^2 = 1$$

上式中 α_0 是任意指定的. 所以几率守恒的一般表示为

$$\sum_{\beta} |S_{\beta\alpha}|^2 = 1 \tag{6-133}$$

$|S_{\beta\alpha}|^2$ 表示从$|\varphi_{\alpha}\rangle$ 态到$|\varphi_{\beta}\rangle$ 态的跃迁几率. 式（6－133）是幺正性(6－128)在$\hat{H}_0$ 表象中的表示式.

通常所说的跃迁几率，是指末态不同于初态的情况. 为此，定义跃迁算符

$$T = S - I \tag{6-134}$$

当 $\beta \neq \alpha$ 时，$S_{\beta\alpha} = T_{\beta\alpha}$. 所以跃迁几率也可以表示成

$$W_{\beta\alpha} = |S_{\beta\alpha}|^2 = |T_{\beta\alpha}|^2 \qquad (\beta \neq \alpha) \tag{6-135}$$

T－矩阵表示散射矩阵中发生了变化的部分，不发生变化的部分所对应的单位矩阵已被减除.

6.4.2.3 S 矩阵的微扰论展开

形式上，可以把散射算符 S 表示为

$$\psi_{int}(\infty) = S\psi_{in}(-\infty) = U(\infty, -\infty)\psi_{int}(-\infty) \qquad (6-136)$$

$$S = U(+\infty, -\infty) = \lim_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t \to +\infty}} U(t, t_0) = \hat{T}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dt V_{in}(t)\right] \qquad (6-137)$$

式中

$$V_{in}(t) = e^{iH_0 t/\hbar} V e^{-iH_0 t/\hbar}$$

用式 (6－123) 代入式 (6－137)，得

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} S^{(n)}$$

而

$$S^{(n)} = (-\frac{i}{\hbar})^n \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n V_{in}(t_1) V_{in}(t_2) \cdots V_{in}(t_n) \qquad (6-138)$$

在 $\hat{H}_0$ 表象中表示出来，即

$$S_{\beta\alpha} = \sum_{n=0}^{\infty} S_{\beta\alpha}^{(n)} \qquad (6-139)$$

下面按微扰论精神逐级求出散射矩阵.

(1) 零级近似，显然 $S^{(0)}=1$，即

$$S_{\beta\alpha}^{(0)} = \langle \varphi_\beta \mid \varphi_\alpha \rangle = \delta_{\beta\alpha}$$

(2) 一级近似，由式 (6－138) 和 (6－114)，可得

$$S_{\beta\alpha}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp[\frac{i}{\hbar}(E_\beta - E_\alpha)t]\langle \beta \mid V \mid \alpha \rangle$$

$$= (-\frac{i}{\hbar})2\pi\hbar\,\delta(E_\beta - E_\alpha)\langle \beta \mid V \mid \alpha \rangle$$

(3) 二级近似：

$$S_{\beta\alpha}^{(2)} = (-\frac{i}{\hbar})^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \langle \beta \mid V_{in}(t_1) V_{in}(t_2) \mid \alpha \rangle$$

$$= (-\frac{i}{\hbar})^2 \sum_r \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \langle \beta \mid V_{in}(t_1) \mid \gamma \rangle \langle \gamma \mid V_{in}(t_2) \mid \alpha \rangle$$

其中 $\int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \langle \gamma \mid V_{in}(t_2) \mid \alpha \rangle$ 可以表示为

$$\int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \exp[\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t_2 - \varepsilon \mid t_2 \mid /\hbar] \langle \gamma \mid V \mid \alpha \rangle$$

$$= \frac{\hbar \exp[i(E_\gamma - E_\alpha)t_1/\hbar]}{i(E_\gamma - E_\alpha - i\varepsilon)} \langle \gamma \mid V \mid \alpha \rangle$$

$$S_{\beta\alpha}^{(2)} = \frac{i}{\hbar} \sum_\gamma \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \exp[\frac{i}{\hbar}(E_\beta - E_\gamma)t_1] \times$$

$$\frac{\exp[\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t_1]}{E_\gamma - E_\alpha - i\varepsilon} \langle \beta \mid V \mid \gamma \rangle \langle \gamma \mid V \mid \alpha \rangle$$

$$= \frac{i}{\hbar} \sum_\gamma \frac{1}{E_\gamma - E_\alpha - i\varepsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \times$$

$$\exp[i(E_\beta - E_\alpha)t_1/\hbar] \langle \beta \mid V \mid \gamma \rangle \langle \gamma \mid V \mid \alpha \rangle$$

$$= i \sum_\gamma \frac{1}{E_\gamma - E_\alpha - i\varepsilon} \langle \beta \mid V \mid \gamma \rangle \langle \gamma \mid V \mid \alpha \rangle 2\pi\delta(E_\beta - E_\alpha)$$

【参考文献】

Ⅰ 碰撞、散射、反应的量子理论

1 R. G. Newton. Scatering Theory of Waves and Particles. McGraw－Hill, Inc., 1966

2 C. J. Joachain. Quantum Collision Theory. North-Holland: Publishing Company, 1975

3 徐躬耦,王顺金. 原子核理论(核反应部分). 高等教育出版社,1992

4 N. K. Glendenning. Direct Nuclear Reactions. Academic Press, 1983

Ⅱ 光学模型

5 P. E. Hodgson. The Optical Model of Elastic Scatering. Oxford University Press, 1963

6 H. V. V. Geramb, Ed., Microscopic Optical Potential, Lecture Notes in Physics, 89, Springer Verlag, 1979

7 J. D. Bjorken and S. D. Drell. Relativistic Quantum Fields. New York: McGraw－Hill Book Company, 1964 and 1965

8 C. Itzykson and J. －B. Zuber. Quantum Field Theory. New York: McGraw －Hill Book Company, 1980

第 7 章　相对论性量子力学

7.1　微观粒子的相对论性动力学[1-3]

前面各章介绍的内容属于非相对论性量子力学，本章则介绍相对论性量子力学的基本内容. 虽然二者都是量子论，都研究微观粒子的量子运动的动力学规律，即微观粒子在真空背景的量子涨落的影响下的动力学规律，但是由于相对论深刻地揭示了平稳真空的时空（尺钟）效应，使得相对论性量子力学，特别是相对论性量子场论，比非相对论性量子力学更深刻、更充分地刻画了真空背景的量子涨落及其对微观粒子的影响.

7.1.1　非相对论性量子力学的特点

7.1.1.1　时－空和 E（p）－p 关系的不对称性

微观粒子的动力学是量子力学. 前面介绍的量子力学是建立在非相对论时空和非相对论运动学的基础之上的，称为非相对论性量子力学. 非相对论时空是伽利略时空，其特点是空间与时间的分离，这一点从伽利略变换可以清楚地看出. 非相对论运动学的特点是自由粒子的能量－动量关系

$$E(p)=\frac{p^2}{2m} \tag{7-1}$$

表现出的 E（p）－p 的不对称性（能量一次方与动量二次方相对应的不对称性）.

7.1.1.2　力学量算符恢复了对称性

非相对论量子力学揭示出量子论最基本的特点与规律，即基本力学量能量 E 与动量 $\vec{p}$ 和算符的对应关系：

$$E\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \tag{7-2a}$$

$$\vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla} \tag{7-2b}$$

从上述基本力学与算符的对应关系可以看出，在经典力学水平上，非相对论时空的不对称性造成的运动学上能量 E 与动量 p 之间的不对称性，在量子力学的运动学（量子化）的层次上得到了恢复. 上述（E，p）与（$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$，$-i\hbar\vec{\nabla}$）的对应表现出时空与基本力学量之间的对称性. 然而非相对论经典力学的 $E-p$关系（色散关系）破坏了这种对称性，使得它对应的量子动力学方程——薛定格方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = (-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U)\psi \tag{7-3}$$

是时间的一次、坐标的二次偏微分方程，不具有相对论协变性（时空对称性），因而不是微观粒子的相对论性量子力学运动方程，只能是其非相对论极限.

7.1.2 相对论性量子力学的特点

7.1.2.1 时空和 $E-p$ 关系的对称性

相对论性量子力学的第一个特征是：时空是对称的罗仑兹时空，相应的自由粒子的运动学关系——能量与动量的关系也必然是对称的和相对论协变的，由此建立的运动方程也应当是罗仑兹协变的.

7.1.2.2 相对论性量子理论的本质是粒子数可变的多粒子体系的理论

非相对论性量子多体理论，虽然引进了粒子的量子态的产生、消灭算符和二次量子化表象，但它们描述的是粒子从一个量子态向另一个量子态的跃迁与转变，并没有真正涉及粒子的产生和消灭. 按照非相对论性量子力学，可以以任意精度把一个粒子定域在时间或空间的一个点上，只要与其共轭的量满足测不准关系：

$$\Delta t \geqslant \hbar/\Delta E, \quad \Delta\vec{r} \geqslant \hbar/\Delta\vec{p} \tag{7-4}$$

在相对论的情形下，这样做不可能保持粒子数不变的表象. 一旦 ΔE 超过粒子的静止质量对应的能量，粒子在能量和动量上的不确定性必然导致粒子从真空中产生. 一个粒子在时空上的定域必然导致在它附近从真空中产生出众多的粒子，因而形成一个由粒子－反粒子组成的量子场. 因此，在相对论框架内，一个粒子的量子理论由于真空量子涨落，必须代之以众多粒子的量子场

论.

相对论性量子力学的第二个特点是：粒子在时空上的定域造成的能量、动量的量子涨落必然导致粒子对在真空中的产生与湮没，一个粒子在时空上的定域必然伴随着其附近众多粒子的量子场的形成. 因此，相对论性量子力学在本质上是量子场论.

7.2 Klein－Gordon 方程[1-3]

7.2.1 薛定格方程的建立

薛定格方程是把非相对论性的能量－动量关系算符化后得到的波动方程：

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r) \tag{7-5a}$$

$$E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \to -i\hbar \vec{\nabla} \tag{7-5b}$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [\frac{\hbar^2}{2m}(-i\vec{\nabla})^2 + V(r)]\Psi \tag{7-5c}$$

因此，它是非相对论性的，时－空坐标是不对称的. 但它保持能量和质量（几率）守恒，由它可得保持几率守恒的连续性方程：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \tag{7-6}$$

式中

$$\rho = \psi^*(1)\psi(1), \quad \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^* \nabla\psi - \psi \nabla\psi^*)$$

7.2.2 相对论性量子力学方程 Klein－Gordon 的建立

把自由粒子的相对论性能量－动量关系算符化，得到相对论性协变的波动方程：

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4 \tag{7-7a}$$

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t})^2\psi = [c^2(-i\hbar \vec{\nabla})^2 + m^2c^4]\psi \tag{7-7b}$$

称为 Klein－Gordon 方程. 但是，由它得到的几率守恒的连续性方程为

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \tag{7-8a}$$

而

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - \psi \frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right) \tag{7-8b}$$

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{m}\left(\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*\right) \tag{7-8c}$$

由于 Klein－Gordon 方程是时间的二阶微分方程，因此初始条件 $\psi(x, t_0)$ 和 $\left.\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t}\right|_{t_0}$ 的选取是独立的．一般情况下，ρ 会变成负的，这就是 Klein－Gordon 方程的第一个困难——负几率问题．

Klein－Gordon 方程的第二个困难是负能量问题．把自由粒子运动方程的解 $\psi(x, t) \sim e^{-iEt/\hbar} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$ 代入 K－G 方程，得到

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$$

$$E = \pm\sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} \tag{7-9}$$

即 K－G 方程可能有负能解（必须有负能解，数学上才是完备的）．

分析表明，上述两个困难都与 K－G 方程是时间的二阶微分方程有关．因此，K－G 方程不能作为单粒子的相对论性量子力学方程．寻找单粒子的相对论性量子力学方程，必须消除造成 K－G 方程困难的原因，即必须把方程对时间的微分线性化．对此，有两条路可走：

(1) 作变换 $\psi(r, t) = \Psi(r, t) e^{-imc^2 t/\hbar}$，代入 K－G 方程，考虑到

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \approx E_{\text{动能}} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi(r,t) \rightarrow \left(E_{\text{动能}} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} + m^2 c^4 \Psi + 2mc^2 i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}\right) e^{-imc^2 t/\hbar} \tag{7-10}$$

在非相对论情况下，由于 $mc^2 \gg E_{\text{动能}}$，所以略去包含动能系数的项，就得到时间一阶的 $\Psi(\vec{r}, t)$ 的波动方程，它正好是薛定格方程．显然，这并没有解决问题，只是回到了非相对论性的结果．

(2) 大胆采取新颖的数学工具把 K－G 方程严格线性化（而不做非相对论近似），这就是 Dirac 所走的创新路线．

7.3 自由粒子的 Dirac 方程[1-3]

7.3.1 线性化

寻找自洽而合理的自由粒子的相对论性量子力学方程，归结为把时间的二阶的 K－G 方程线性化为时间的一阶的偏微分方程，并且要保证：①几率正定 $\rho \geqslant 0$，②方程具有罗仑兹协变性.

K－G 方程的线性化归结为相对性能量

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4 \tag{7-11a}$$

或其对应的算子

$$(i\hbar \frac{\partial}{\partial t})^2 - c^2(-i\hbar \vec{\nabla})^2 - m^2 c^4 \tag{7-11b}$$

的线性化. 这是通常的运算不能完成的，必须引进新的算子.

$$\text{设 } E = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta \quad \text{或} \quad \hat{H} = c\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}} + mc^2\beta, \quad \vec{\alpha} = \{\alpha_i\} \tag{7-12}$$

对上两式平方

$$\begin{aligned} E^2 &= c^2(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})^2 + m^2c^4\beta^2 + c^3 m\sum(\beta\alpha_i + \alpha_i\beta)p_i \\ &= c^2\frac{1}{2}\sum_{ij}(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i)p_ip_j + m^2c^4\beta^2 + c^3m\sum_i(\beta\alpha_i + \alpha_i\beta)p_i \\ \hat{H}^2 &= c^2(\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}})^2 + m^2c^4\beta^2 + c^3m\sum_i(\beta\alpha_i + \alpha_i\beta)\hat{p}_i \\ &= c^2\frac{1}{2}\sum_{ij}(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i)\hat{p}_i\hat{p}_j + m^2c^4\beta^2 + c^3m\sum_i(\beta\alpha_i + \alpha_i\beta)\hat{p}_i \end{aligned}$$

若 α_i，β 满足下列关系：

$$\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = 2\delta_{ij}, \qquad \beta\alpha_i + \alpha_i\beta = 0, \tag{7-13a}$$

$$\beta^2 = 1 \tag{7-13b}$$

则

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4, \qquad \hat{H}^2 = c^2\hat{\vec{p}}^2 + m^2c^4$$

K－G 方程就线性化为 Dirac 方程：

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi = (c\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}} + mc^2\beta)\psi \tag{7-14}$$

在$\hat{H}$，α_i，β为厄密的条件下，得连续性方程：

$$\alpha^+ = \alpha,\ \beta^+ = \beta,\quad H^+ = H \rightarrow \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot j = 0 \tag{7-15a}$$

$$\rho = \psi^+ \psi \tag{7-15b}$$

$$\vec{j} = \psi^+ c\vec{\alpha}\psi \tag{7-15c}$$

即几率守恒要求$\hat{H}$，α_i，β为厄密算子.

$\vec{j}$的表达式表明$c\vec{\alpha}$具有速度算子的性质. 事实上，由

$$[\hat{p}, \hat{H}] = 0$$

知$\hat{\vec{p}}$守恒，由速度算子满足的海森堡方程：

$$\frac{\mathrm{d}\hat{x}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_i, \hat{H}] = c\alpha_i (\neq \frac{\hat{p}_i}{m}) \tag{7-16}$$

证明$c\vec{\alpha}$是速度算子. 值得注意的是：$\hat{\vec{p}}$作用于外部空间，α_i，β为矩阵，作用于内部自由度空间.

7.3.2 α_i，β的表示

考虑α_i，β的矩阵表示. 一般地，设α_i，β为$N\times N$矩阵. 由(7-13a)式

$$\beta\alpha_i = -\alpha_i\beta \tag{7-17a}$$

有

$$\det(\beta\alpha_i) = \det\beta\det\alpha_i = \det(-\alpha_i\beta) = (-1)^N \det\alpha_i \det\beta$$

$$(-1)^N = 1 \tag{7-17b}$$

故N必为偶数. 下面从低阶到高阶逐级考虑.

(1) $N=2$. 2×2矩阵只有4个独立的基，可选为σ_x，σ_y，σ_z，I，任何2×2矩阵均可表示为它们的线性组合. 显然

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\sigma_{ij} \tag{7-18a}$$

但是，I与σ_i对易：

$$I\sigma_i - \sigma_i I = 0 \tag{7-18b}$$

故

$$\beta \neq I \tag{7-18c}$$

因此，α_i，β不可能为2×2矩阵，至少应为4×4矩阵.

(2) $N=4$. 其表示有多种，其间差一个幺正变换. 现取 Pauli－Dirac 表示：

$$\beta=\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},\quad \vec{\alpha}=\begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix},\quad I=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{7-19a}$$

$$\sigma_1=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_2=\begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7-19b}$$

易证

$$\alpha_i\alpha_j+\alpha_j\alpha_i=\begin{pmatrix} \sigma_i\sigma_j+\sigma_j\sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i\sigma_j+\sigma_j\sigma_i \end{pmatrix}=2\delta_{ij}\begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}=2\delta_{ij}$$

$$\beta\alpha_i+\alpha_i\beta=0 \tag{7-20}$$

令

$$\gamma_k=-i\beta\alpha_k,\quad \gamma_4=\beta \tag{7-21}$$

得

$$\gamma_\mu\gamma_\upsilon+\gamma_\upsilon\gamma_\mu=2\delta_{\mu\upsilon},\quad \gamma_\mu^+=\gamma_\mu\quad(\mu=1,2,3,4) \tag{7-22}$$

Dirac 方程（$c=1$，$\hbar=1$）化为

$$\left(\gamma_\mu\frac{\partial}{\partial x_\mu}+m\right)\psi=0 \tag{7-23}$$

因 γ_μ 为 4×4 矩阵，故 ψ 必为 4 分量列矢量－旋量：

$$\psi(x)=\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{bmatrix} \tag{7-24}$$

7.3.3 罗仑兹协变性

在罗仑兹变换下，$\psi(x)$的函数形式和变量均发生变化：

$$\psi(x)\to\psi'(x')=\Lambda\psi(x),\ \psi(x)=\Lambda^{-1}\psi'(x') \tag{7-25}$$

其中 ψ'对 ψ 而言表示旋量函数形式（分量）的变化，由 4×4 矩阵 Λ 来实现. x_υ'对 x_υ 而言表示坐标变换，由罗仑兹坐标变换来实现：

$$x_\upsilon\to x_\upsilon'=\alpha_{\upsilon\mu}x_\mu,\quad \frac{\partial}{\partial x_\mu}=\frac{\partial x_\upsilon'}{\partial x_\mu}\frac{\partial}{\partial x_\upsilon'}=\alpha_{\upsilon\mu}\frac{\partial}{\partial x_\upsilon'} \tag{7-26}$$

二者一起造成方程形式的变换为

$$(\gamma_\mu a_{\nu\mu}\frac{\partial}{\partial x_\nu'}+m)\Lambda^{-1}\psi'(x')=0,$$

$$(\Lambda\gamma_\mu\Lambda^{-1}a_{\nu\mu}\frac{\partial}{\partial x_\nu'}+m)\psi'(x')=0 \qquad (7-27)$$

若 γ_μ - 矩阵满足罗仑兹矢量变换规则

$$\Lambda\gamma_\mu\Lambda^{-1}=a_{\lambda\mu}\gamma_\lambda \qquad (7-28)$$

由正交性条件 $a_{\lambda\mu}a_{\nu\mu}=\delta_{\lambda\nu}$，得到在新的罗仑兹坐标系中的 Dirac 方程：

$$(\gamma_\nu\frac{\partial}{\partial x_\nu'}+m)\psi'(x')=0 \qquad (7-29)$$

与原来坐标系中的方程 (7-23) 比较可知，变换后的旋量波函数$\psi'(x')$在新的罗仑兹坐标系中服从同一形式的 Dirac 方程，这叫做 Dirac 方程对罗仑兹变换协变.

γ_μ 的变换性质和 Λ 的形式：以下由 γ_μ 的变换性质来计算 Λ 的具体形式.

(1) 空间反射的 Λ：

由

$$a_{ij}=-\delta_{ij},\quad a_{4\mu}=a_{\mu4}=\delta_{4\mu},\quad x_4'=x_4,\ x_i'=-x_i$$

$$\Lambda\gamma_i\Lambda^{-1}=a_{\mu i}\gamma_\mu=-\gamma_i,\quad \Lambda\gamma_4\Lambda^{-1}=a_{\mu4}\gamma_\mu=\gamma_4 \qquad (7-30a)$$

求得

$$\Lambda=-i\gamma_4,\quad \Lambda^{-1}=i\gamma_4 \qquad (7-30b)$$

(2) 时间反演的 Λ：

由

$$a_{ij}=\delta_{ij},\quad a_{4\mu}=a_{\mu4}=-\delta_{4\mu},\quad x_4'=-x_4,\ x_i'=x_i$$

$$\Lambda\gamma_i\Lambda^{-1}=a_{\mu i}\gamma_\mu=r_i,\quad \Lambda\gamma_4\Lambda^{-1}=a_{\mu4}\gamma_\mu=-\gamma_4 \qquad (7-31a)$$

求得

$$\Lambda=\gamma_1\gamma_2\gamma_3,\quad \Lambda^{-1}=\gamma_3\gamma_2\gamma_1 \qquad (7-32)$$

(3) 真罗仑兹变换的 Λ：

真罗仑兹变换要求坐标变换行列式为正一，即

$$\det(a_{\mu\nu})=+1$$

真罗仑兹变换下的 Λ 的具体形式可以从 γ_λ 的变换性质得到. 先考虑无穷小坐标变换：

$$a_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \varepsilon_{\mu\nu}, \quad \varepsilon_{\mu\nu} = -\varepsilon_{\nu\mu} \tag{7-33}$$

设相应的无穷小 Λ 变换为

$$\Lambda = I + \frac{i}{4}\varepsilon_{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}, \quad \Lambda^{-1} = I - \frac{i}{4}\varepsilon_{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}, \tag{7-34a}$$

$$\sigma_{\mu\nu} = -\frac{i}{2}(\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma_\nu\gamma_\mu) = \sigma^+_{\mu\nu} \tag{7-34b}$$

易证

$$\begin{aligned} i[\sigma_{\mu\nu}, \gamma_\lambda] &= [\gamma_\mu\gamma_\nu, \gamma_\lambda] \\ &= \gamma_\mu[\gamma_\nu, \gamma_\lambda] - [\gamma_\mu, \gamma_\lambda]\gamma_\nu \\ &= 2(\gamma_\mu\delta_{\nu\lambda} - \gamma_\nu\delta_{\mu\lambda}) \\ \Lambda\gamma_\lambda\Lambda^{-1} &= \gamma_\lambda + \frac{i}{4}\varepsilon_{\mu\nu}[\sigma_{\mu\nu}, \gamma_\lambda] \\ &= \gamma_\lambda + \frac{1}{2}\varepsilon_{\mu\nu}(\gamma_\mu\delta_{\nu\lambda} - \gamma_\nu\delta_{\mu\lambda}) \\ &= (\delta_{\mu\lambda} + \varepsilon_{\mu\lambda})\gamma_\mu = a_{\mu\lambda}\gamma_\lambda \end{aligned} \tag{7-35}$$

即 γ_λ 和 Λ 满足其变换性质式 (7－28)，故 (7－34a)、(7－34b) 式的确是所需要的无穷小 Λ 变换．有限的 Λ 变换可以从对无穷小 Λ 变换积分得到．

7.3.4 从角动量守恒导出 Dirac 粒子内禀自旋为 1/2

可以证明，Dirac 方程必须引进粒子的内禀自旋为 1/2，才能满足角动量守恒的要求．

由于

$$[\vec{l}, \hat{H}] = i\hbar\, c\vec{\alpha} \times \vec{p} \neq 0$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}\vec{l}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\vec{l}, \hat{H}] = c\vec{\alpha} \times \vec{p} \neq 0 \tag{7-36}$$

即轨道角动量 $\vec{l}$ 不守恒，但若假设粒子具有内禀自旋 $\vec{s} = \frac{1}{2}\vec{\sigma}$，则总角动量 $\vec{j}$ 守恒：

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}, \quad \vec{s} = \begin{bmatrix} \frac{\vec{\sigma}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\vec{\sigma}}{2} \end{bmatrix} \tag{7-37}$$

因为

$$[\vec{s},\hat{H}] = -c\vec{\alpha}\times\vec{p}$$

由（7－36）式和（7－37）式可知，

$$[\vec{j},\hat{H}] = 0 \tag{7-38}$$

即总角动量$\vec{j}$守恒．由于

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 &= \frac{1}{4}\begin{pmatrix}\sigma^2 & 0\\ 0 & \sigma^2\end{pmatrix} = \frac{3}{4}\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & I\end{pmatrix}\\ &= \frac{3}{4}I = S(S+1)I \to S(S+1)\\ &= \frac{3}{4}\end{aligned} \tag{7-39}$$

所以

$$S = \frac{1}{2}$$

即角动量守恒要求 Dirac 方程描述的粒子具有内禀自旋 $S=1/2$.

7.3.5 中微子的运动方程

中微子质量为零，当 $m=0$ 时，Dirac 方程不出现 β 项，因此，α_i 有 2×2 种表示，可以用 σ_i 来实现：

$$\alpha_i = -\sigma_i, \qquad (\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i) = 2\delta_{ij} \tag{7-40}$$

这时，Dirac 方程变为二分量的方程：

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\,\psi = \hat{H}\psi \tag{7-41a}$$

$$\hat{H} = -c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \tag{7-41b}$$

显然

$$[\hat{p},\hat{H}] = 0,$$

$$[\vec{\sigma}\cdot\vec{p},\hat{H}] = 0, \qquad [\hat{p},\vec{\sigma}\cdot\vec{p}] = 0 \tag{7-42}$$

故动量$\vec{p}$和螺旋性算子 $(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})/p$ 为互易的守恒量，它们的共同本征函数为 ψ_{pv}，满足

$$\hat{p}\psi_{pv}(r) = \hat{p}\psi_{pv}(r) \tag{7-43a}$$

$$\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{p}\psi_{pv}(r)=v\psi_{pv} \tag{7-43b}$$

若选自旋沿$\vec{p}$的投影，即螺旋性算子的形式为$(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})/p=\sigma_{\parallel}=\sigma_z$，即

$$\frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{p}=\sigma_{\parallel}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{7-43c}$$

则$v=\pm1$，ψ_{pv}的显式为

$$\begin{cases}\psi_{\vec{p}+}(\vec{r})=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\\ \psi_{\vec{p}-}(\vec{r})=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\end{cases} \tag{7-44}$$

$$\sigma_{\parallel}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=+1\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \sigma_{\parallel}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=-1\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{7-45}$$

ψ_{p+}表示自旋沿$\vec{p}$的投影为$+1/2$（螺旋性为+）的状态，描述右旋反中微子；

ψ_{p-}表示自旋沿$\vec{p}$的投影为$-\frac{1}{2}$（螺旋性为-）的状态，描述左旋中微子.

在空间反射变换下，

$$\begin{aligned}&\hat{\Pi}\vec{P}\,\hat{\Pi}=-\vec{P},\quad \hat{\Pi}\vec{\sigma}\,\hat{\Pi}=\vec{\sigma}\\ &\hat{\Pi}\hat{P}\cdot\vec{\sigma}\,\hat{\Pi}=-\vec{P}\cdot\vec{\sigma}\\ &\hat{\Pi}\hat{H}\,\hat{\Pi}=-\hat{H}\end{aligned} \tag{7-46}$$

哈密顿量发生变化，系统的宇称不守恒. 中微子虽然螺旋性守恒，但宇称不守恒，即螺旋性守恒与宇称守恒是不相容的. 中微子参与的过程（弱作用过程）宇称不守恒，与其螺旋性守恒有关.

7.3.6 Dirac方程的自由平面波解

自由Dirac粒子的$\hat{H}$为

$$\hat{H}=c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}+mc^2\beta \tag{7-47}$$

$$\vec{\alpha}=\begin{pmatrix}0 & \vec{\sigma}\\ \vec{\sigma} & 0\end{pmatrix}=\vec{\sigma}\otimes\tau_1 \tag{7-48a}$$

$$\beta=\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix}=I\otimes\tau_3 \tag{7-48b}$$

此处引进新的算子 τ_i（对应于粒子－反粒子自由度）：

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7-49}$$

把 γ_μ－矩阵分裂为自旋空间算子（σ_i，I）和粒子－反粒子空间算子（τ_i，I）后，哈密顿量

$$\hat{H} = c\,\vec{p}\cdot\vec{\sigma}\otimes\tau_1 + mc^2 I\otimes\tau_3 \tag{7-50}$$

具有明显的 su_s（2）$\otimes su_\tau$（2）动力学对称群．上述两个 su（2）代数的直积的约定是，把自旋空间的算子（σ_i，I）放在粒子－反粒子空间的算子（τ_i，I）的矩阵元中．

上述系统在普通空间和自旋空间的守恒量为：

$$\vec{p}:[\hat{\vec{p}},\hat{H}] = 0 \tag{7-51a}$$

$$\sigma_\parallel = \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{p}:[\sigma_\parallel,\hat{H}] = 0 \tag{7-51b}$$

设

$$\sigma_\parallel = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7-52}$$

则 $\{\hat{\vec{p}},\ \sigma_\parallel\}$ 的共同本征函数可计算如下：

$$\psi_{\vec{p}\nu}(\vec{r}) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}x_\nu(s) \quad (\nu = \pm 1) \tag{7-53}$$

$$x_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad x_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7-54}$$

$$\hat{\vec{p}}\psi_{\vec{p}\nu} = \vec{p}\ \psi_{\vec{p}\nu} \tag{7-55a}$$

$$\sigma_\parallel\psi_{\vec{p}\nu} = \nu\psi_{\vec{p}\nu}, \quad \nu = \pm 1 \tag{7-55b}$$

$\hat{H}$还有粒子－反粒子的 τ－空间的自由度和相应的守恒量．因此，总的本征函数应包括$\vec{r}$－空间量子数$\vec{p}$，s－空间量子数 ν 和 τ－空间量子数 α．故总的波函数为

$$\psi_{\vec{p}\nu\alpha}(\vec{r},s,\tau) = e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}x_\nu(s)\tilde{v}_\alpha(\tau) \tag{7-56}$$

代入 Dirac 方程：

$$\hat{H}_\tau\tilde{v}_\alpha = E_\alpha\tilde{v}_\alpha \tag{7-58a}$$

得 τ－空间的哈密顿量

$$\tilde{H}_r = \nu cp\tau_1 + mc^2\tau_3 = \begin{pmatrix} mc^2 & \nu \cdot cp \\ \nu \cdot cp & -mc^2 \end{pmatrix}$$

$$= E\tilde{\tau}_3 = E\begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \nu \cdot \sin\frac{\theta}{2} \\ \nu \cdot \sin\frac{\theta}{2} & -\cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \qquad (7-58b)$$

其中

$$E = \sqrt{c^2p^2 + m^2c^4}, \quad \tilde{\tau}_3 = e^{-\frac{i}{2}\nu\theta\tau_2}\tau_3 e^{+\frac{i}{2}\nu\theta\tau_2} \qquad (7-59a)$$

$$\cos\theta = \frac{mc^2}{E}, \quad \sin\theta = \frac{cp}{E} \qquad (7-59b)$$

先求 τ_3 的本征态 v_α. 因 $\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, 故其本征态 v_α 为

$$v_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad v_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad (7-60a)$$

$$\tau_3 v_\alpha = \alpha v_\alpha \quad (\alpha = \pm 1) \qquad (7-60b)$$

通过幺正变换可求得 $\tilde{\tau}_3$ 的本征解 $\tilde{v}_\alpha$:

由式 (7-60b) 可得

$$e^{i\frac{\theta}{2}\nu\tau_2}\tau_3 e^{-i\frac{\theta}{2}\nu\tau_2} \cdot e^{i\frac{\theta}{2}\nu\tau_2}v_\alpha = \alpha e^{i\frac{\theta}{2}\nu\tau_2}v_\alpha$$

$$\tilde{\tau}_3\tilde{v}_\alpha = \alpha\tilde{v}_\alpha \quad (\alpha = \pm 1) \qquad (7-61a)$$

其中

$$\tilde{v}_\alpha = e^{i\frac{\theta}{2}\nu\tau_2}v_\alpha$$

$$e^{-i\frac{\theta}{2}\nu\tau_2} = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\nu \cdot \sin\frac{\theta}{2} \\ +\nu \cdot \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \qquad (7-61b)$$

$$= \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}\begin{bmatrix} 1 & -\frac{\nu cp}{E+mc^2} \\ +\frac{\nu cp}{E+mc^2} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\tilde{v}_+ = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}\begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\nu cp}{E+mc^2} \end{bmatrix}, \quad \tilde{v}_- = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}\begin{bmatrix} -\frac{\nu cp}{E+mc^2} \\ 1 \end{bmatrix} \qquad (7-61c)$$

在式（7－61c）中，小分量与大分量之比约等于$\frac{v}{c}$（$p=mv$）

易证
$$\hat{H}_\tau \tilde{v}_\alpha = \alpha E \tilde{v}_\alpha \quad (\alpha = \pm 1) \tag{7-62a}$$

即
$$\hat{H}_\tau \tilde{v}_+ = E\tilde{v}_+, \quad \hat{H}_\tau \tilde{v}_- = -E\tilde{v}_- \tag{7-62b}$$

正能态（$\alpha=+1$）的解为
$$\psi_{\boldsymbol{p}\nu+} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar+\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\chi_\nu(s)\tilde{v}_+(\tau) \tag{7-63}$$

按照算子直积规则，应把自旋波函数放到正反粒子波函数的列矢元素上，因而有
$$\psi_{\boldsymbol{p}++} = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}\begin{bmatrix}1\\0\\\dfrac{cp}{E+mc^2}\\0\end{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar+\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \tag{7-64a}$$

描述右旋电子；
$$\psi_{\boldsymbol{p}-+} = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}\begin{bmatrix}0\\1\\0\\\dfrac{-cp}{E+mc^2}\end{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Et/\hbar+\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \tag{7-64b}$$

描述左旋电子.

负能态（$\alpha=-1$）的解为
$$\psi_{\boldsymbol{p}\nu-} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar+\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\chi_\nu(s)\tilde{v}_-(\tau) \tag{7-65}$$
$$\psi_{\boldsymbol{p}+-} = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}\begin{bmatrix}\dfrac{-cp}{E+m^2}\\0\\1\\0\end{bmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar+\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \tag{7-66a}$$

描述右旋正电子；
$$\psi_{\boldsymbol{p}--} = \sqrt{\frac{E+mc^2}{2E}}\begin{bmatrix}0\\\dfrac{cp}{E+mc^2}\\0\\1\end{bmatrix}\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar+\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \tag{7-66b}$$

描述左旋正电子. 负能量的来源是 τ - 空间的自由度，$\tilde{\tau}_3$ 的量子数为 -1，因而对应于反粒子，而 $\hat{H}_\tau$ 在 τ - 空间有一个转动，把 τ 空间的两个态混合起来了. 因此，物理的正反粒子是 τ - 空间正反粒子态的组合，这是粒子的静质量不为零的必然结果. Dirac 方程的正能解的 $\tilde{\tau}_3$ 的量子数为 $+1$，描述粒子（电子）；而负能解 $\tilde{\tau}_3$ 的量子数为 -1，描述反粒子（正电子）. 因此，Dirac 方程预言了正电子（反粒子）的存在.

上述对自由粒子 Dirac 方程的处理的基本观点是：γ - 矩阵对应的内部自由度，是自旋自由度（I_σ，σ_i）和正 - 反粒子自由度（I_τ，τ_i）在真空背景中按特定方式相干组合的结果. 当存在相互作用时，γ - 矩阵对应的内部自由度就分解成自旋自由度（I_σ，σ_i）和正 - 反粒子自由度（I_τ，τ_i），或进入 γ - 矩阵的非线性的 Clifford 代数（Dirac 环）的领域. 因此，这种分解所必然引进的正 - 反粒子自由度（I_τ，τ_i）对描述基本粒子的相互作用是必需的. 引进正 - 反粒子自由度有以下结果：对自由 Dirac 粒子平面波解有 5 个量子数而不是通常的 4 个量子数，负能量来自正 - 反粒子量子数 $\tau_3 = -1$. 这一观点和相应的处理方式可以推广到中心力场的情况.

7.4 电磁场中电子的 Dirac 方程[1-3]

7.4.1 电磁场中电子的 Dirac 方程

自由电子的 Dirac 方程为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi \tag{7-67a}$$

$$H = c\alpha \cdot p + mc^2\beta = -i\hbar\, c\alpha \cdot \nabla + mc^2\beta \tag{7-67b}$$

电子（电荷为 $-e$）在电磁势（$\vec{A}$，ϕ）中的 Dirac 方程，可在方程（7-67）中做如下替换（把普通微商替换为规范协变微商）而得出：

$$-i\hbar\,\vec{\nabla} \to \left(-i\hbar\,\vec{\nabla} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)$$

$$= \left(\vec{P} + \frac{e}{c}\vec{A}\right) \quad [\vec{P} = -i\hbar\,\vec{\nabla}] \tag{7-68a}$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial ct} \to i\hbar\frac{\partial}{\partial ct} + \frac{e}{c}\phi\right)$$

$$\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\to(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\phi) \tag{7-68b}$$

这时，电磁场（$\vec{A}$，ϕ）中电子的 Dirac 方程变为

$$[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\phi-c\vec{\alpha}\cdot\left(\vec{P}+\frac{e}{c}\vec{A}\right)-mc^2\beta]\psi=0 \tag{7-69}$$

或表示成

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=H\psi \tag{7-70a}$$

$$H=c\vec{\alpha}\cdot(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A})-e\phi+mc^2\beta \tag{7-70b}$$

若（$\vec{A}$，ϕ）与时间 t 无关，则 ψ 的定态解为

$$\psi(r,t)=\psi(r)\exp[-iEt/\hbar] \tag{7-71}$$

四分量旋量波函数 ψ（$\vec{r}$）满足定态 Dirac 方程：

$$H\psi(r)=[c\vec{\alpha}\cdot(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A})-e\phi+mc^2\beta]\psi(r)=E\psi(r) \tag{7-72}$$

7.4.2 非相对论极限与电子磁矩

把$\psi(\vec{r})$写成大小分量的形式，并取出与电子静止质量相应的能量所对应的高频因子：

$$\psi=\begin{bmatrix}\varphi\\ \chi\end{bmatrix}\exp[-imc^2t/\hbar] \tag{7-73}$$

其目的是把与电子静质量相应的能量剔除，剩下动能以便于讨论非相对论极限. 把式（7-73）代入方程（7-70a），得到大小分量的耦合方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=c\vec{\sigma}\cdot(\vec{P}+\frac{e}{c}\vec{A})\chi-e\phi\varphi \tag{7-74a}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi=c\vec{\sigma}\cdot(\vec{P}+\frac{e}{c}\vec{A})\varphi-e\phi\chi-2mc^2\chi \tag{7-74b}$$

(7-74b) 式中，$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi$ 正比于动能乘以 χ，和 $e\phi\chi$ 一样，比起 $2mc^2\chi$ 是高阶小量，在非相对论极限下，可以略去，因而可得

$$\chi\approx\frac{1}{2mc}\vec{\sigma}\cdot(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A})\varphi \tag{7-75}$$

χ 为小分量（因 $\chi/\phi=v/c\ll1$）. 把式（7-75）代入式（7-74a），得大分量的方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=\frac{1}{2m}[\vec{\sigma}\cdot(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A})]^2\varphi-e\phi\varphi \tag{7-76}$$

利用恒等式：

$$\begin{aligned}[\vec{\sigma}\cdot(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A})]^2&=\sigma_i\sigma_j(\hat{P}_i+\frac{e}{c}A_i)(\hat{P}_j+\frac{e}{c}A_j)\\&=(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A})^2+i\varepsilon_{ijk}\sigma_k(\hat{P}_i+\frac{e}{c}A_i)(\hat{P}_j+\frac{e}{c}A_j)\\&=(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A})^2+i\varepsilon_{ijk}\sigma_k\frac{e}{c}(\hat{P}_iA_j)+i\varepsilon_{ijk}\sigma_k\frac{e}{c}(A_j\hat{P}_i+A_i\hat{P}_j)\\&=(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A})^2+\frac{e\hbar}{c}\vec{\sigma}\cdot(\vec{\nabla}\times\vec{A})\\&=(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A})^2+\frac{e\hbar}{c}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}\end{aligned} \tag{7-77}$$

（上式推导中用到反对称张量 ε_{ijk} 与二阶对称张量的收缩为零），方程（7－76）可化为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi=[\frac{1}{2m}(\hat{\vec{P}}+\frac{e}{c}\vec{A})^2+\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}\cdot\vec{B}-e\phi]\varphi \tag{7-78}$$

（7－78）式右边第二项为 $-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$，其中

$$\vec{\mu}=-\frac{e\hbar}{2mc}\vec{\sigma}=-\frac{e}{mc}\vec{s} \tag{7-79}$$

表示电子内禀磁矩，$-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$ 表示电子内禀磁矩与外磁场 B 的相互作用能．电子内禀磁矩的值为一个 Bohr 磁子：

$$\mu_B=\frac{e\hbar}{2mc} \tag{7-80}$$

这是 Dirac 方程得出的一个重要结论：电子内禀磁矩的值等于 Bohr 磁子．然而，电子磁矩的观测值为

$$\mu=1.00116\mu_B$$

所以，Dirac 的相对论波动方程一方面能够对观测到的电子磁矩给予较满意的说明，但另一方面观测值与 Bohr 磁子还有微小差异（$\sim10^{-3}$），这一差异称为电子的反常磁矩．作为单电子理论的 Dirac 方程对此无法解释，只有量子电动力学才对电子的反常磁矩作出了满意的解释．

7.4.3 中心力场下的非相对论极限：自旋轨道耦合力

考虑电子在中心力场中的运动，例如电子在原子核的 Coulomb 吸引势场

$\phi(r)$中的运动，此时$\vec{A}=0$，中心力场标量势为

$$V(r) = -e\phi(r) \tag{7-81}$$

定态 Dirac 方程（7－72）可表示为

$$[c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta + V(r)]\psi = E\psi \quad (\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}) \tag{7-82}$$

为便于过渡到非相对论情况，把静能量分出来，故令

$$E = E' + mc^2 \tag{7-83}$$

（在非相对性论近似下，$E' = E - mc^2 \ll mc^2$），并把 ψ 表示成大小分量：

$$\psi = \begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} \tag{7-84}$$

采用 Pauli－Dirac 表象，式（7－82）化为大小分量的耦合方程：

$$c(\sigma\cdot p)\chi = (E' - V(r))\varphi \tag{7-85a}$$

$$c(\sigma\cdot p)\varphi = (2mc^2 + E' - V(r))\chi \tag{7-85b}$$

由式（7－85a）可得

$$\chi = \frac{c\sigma\cdot p}{2mc^2 + (E' - V)}\varphi = \frac{1}{2mc}(1 + \frac{E' - V}{2mc^2})^{-1}\sigma\cdot p\varphi$$

在非相对论极限下，取上式按$\frac{E' - V}{2mc^2}$展开的最低次项得到

$$\chi \approx \frac{1}{2mc}(1 - \frac{E' - V}{2mc^2})\sigma\cdot p\varphi \tag{7-86}$$

并将其代入式（7－85a），得到大分量波函数 φ 满足的方程：

$$\frac{1}{2m}\sigma\cdot p(1 - \frac{E' - V}{2mc^2})\sigma\cdot p\varphi = (E' - V)\varphi \tag{7-87a}$$

对此化简后，得

$$[\frac{1}{2m}p^2 - \frac{p^2}{4m^2c^2}E' + \frac{1}{4m^2c^2}(\sigma\cdot p)V(r)(\sigma\cdot p)]\varphi = (E' - V)\varphi \tag{7-87b}$$

再利用恒等式：

$$V(\sigma\cdot p) = (\sigma\cdot p)V + i\hbar\,\sigma\cdot\nabla V$$

$$\begin{aligned}(\sigma\cdot p)V(r)(\sigma\cdot p) &= (\sigma\cdot p)^2V + i\hbar\,(\sigma\cdot p)(\sigma\cdot\nabla V)\\ &= p^2V + i\hbar\{p\cdot(\nabla V) + i\sigma\cdot[p\times\nabla V(r)]\}\\ &= p^2V + i\hbar\{p\cdot(\nabla V) +\\ &\quad i\sigma\cdot[-i\hbar\,(\nabla\times\nabla)V(r) - \nabla V\times p]\}\end{aligned}$$

$$= p^2 V + i\hbar\,(\nabla V)\cdot p - i\hbar\,\nabla^2 V -$$
$$i[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\vec{\sigma}\cdot(\vec{r}\times\vec{p})]\}$$
$$= p^2 V + \hbar^2(\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r} + \nabla^2 V) +$$
$$\hbar\,\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}(\vec{\sigma}\cdot\vec{l}) \qquad (7-88)$$

(7－88) 式的推导中用到

$$(\nabla V)\cdot p = -i\hbar\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\vec{r}\cdot\vec{\nabla}}{r}$$
$$= -i\hbar\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}$$

把 (7－88) 式代入 (7－87) 式，得

$$(\frac{p^2}{2m} + V - E')\varphi + \frac{1}{4m^2c^2}p^2(V-E')\varphi$$
$$+\frac{1}{4m^2c^2}[\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\hbar\,\sigma\cdot l + \hbar^2\nabla^2 V + \hbar^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}]\varphi = 0 \qquad (7-89)$$

上式左边第二项与第三项均系相对论修正项. 利用式 (7－86)，略去高级修正项，可得 $(E' - V)\varphi \sim \frac{1}{2m}p^2\varphi$，于是式 (7－89) 左边第二项化为 $\frac{1}{8m^3c^2}p^4\varphi$，可改写成

$$\{\frac{p^2}{2m} + V - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}s\cdot l + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\nabla^2 V + \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r})\}\varphi = E'\varphi \qquad (7-90)$$

(7－90) 式左边第三项 $-\frac{p^4}{8m^3c^2}$ 为动能的相对论修正项，第四项为自旋－轨道耦合项 (Thomas 项)，可记为 $\xi(r)\,\vec{s}\cdot\vec{l}$，而

$$\xi(r) = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} \qquad (7-91)$$

左边最后两项无经典含义. 还应指出，最后一项不是厄密算符. 问题出在：把 Dirac 波函数的大分量直接当成非相对论近似下的二分量波函数，导致了几率不守恒和随之而来的 $\hat{H}$ 的非厄密性. 挽救的办法是在取非相对论极限时要保证总几率守恒 (波函数归一化保持不变)，即要求几率守恒的波函数 Ψ 满足

$$(\Psi,\Psi)=(\psi,\psi)=(\varphi,\varphi)+(\chi,\chi) \tag{7-92}$$

在准确到 $O(v^2/c^2)$ 下，由（7－86）式得

$$(\chi,\chi)\approx(\varphi,(\frac{\sigma\cdot p}{2mc})^2\varphi)=(\varphi,\frac{p^2}{4m^2c^2}\varphi)$$

所以

$$(\psi,\psi)=(\varphi,(1+\frac{p^2}{4m^2c^2})\varphi)=(\Psi,\Psi) \tag{7-93}$$

即

$$\Psi\approx(1+\frac{p^2}{8m^2c^2})\varphi \quad 或 \quad \varphi\approx(1-\frac{p^2}{8m^2c^2})\Psi \tag{7-94}$$

把（7－94）式代入（7－90）式，略去 $O(v^4/c^4)$ 项，得出 Ψ 满足的方程

$$\{\frac{p^2}{2m}+V-(\frac{1}{8}+\frac{1}{16})\frac{p^4}{m^3c^2}+\frac{(E'-V)}{8m^2c^2}p^2$$

$$+\frac{\hbar}{4m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\sigma\cdot l+\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\nabla^2V+\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r})\}\Psi=E'\Psi \tag{7-95}$$

利用

$$\begin{aligned}[V,p^2]&=[V,p]\cdot p+p\cdot[V,p]\\&=i\hbar\nabla V\cdot p+i\hbar\, p\cdot\nabla V\\&=\hbar^2\nabla^2V+2\hbar^2\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}\end{aligned}$$

即

$$Vp^2=p^2V+\hbar^2\nabla^2V+2\hbar\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r} \tag{7-96}$$

代入式（7－95），并利用

$$E'-V\approx\frac{p^2}{2m} \quad 和 \quad \frac{p^2}{8m^2c^2}(E'-V)\Psi\approx\frac{p^4}{16m^3c^2}\Psi$$

则式（7－95）化为

$$\{\frac{p^2}{2m}+V-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}s\cdot l+\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2V\}\Psi=E'\Psi \tag{7-97}$$

这就是在中心力场 $V(r)$ 中运动的粒子的 Dirac 方程的非相对论极限，其左边的哈密顿量算符是厄密的．左边花括号 $\{\cdots\}$ 内的后三项为最低级的相对论修

正项［$O\ (v^2/c^2)$ 项］，它们将导致能级的精细结构.

对于类氢原子，$V\ (r) = -Ze^2/r$，所以

$$\xi(r) = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r} = \frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3} \tag{7-98}$$

$$\frac{\hbar^2}{8m^2c^2}\nabla^2 V = \frac{-Z\hbar^2e^2}{8m^2c^2}\nabla^2\frac{1}{r} = \frac{\pi Z\hbar^2e^2}{2m^2c^2}\delta(r) \tag{7-99}$$

后一项（Darwin 项）亦称为接触势（contact potential），它只对 s 态（$l=0$）有影响. 与此相反，自旋轨道耦合势 $\xi\ (r)\ \vec{s}\cdot\vec{l}$ 只对 $l\neq 0$ 的态有影响.

7.4.4 中心力场中电子运动的守恒量

(1) 非相对论情况.

在非相对论情况下，在中心力场 $V(r)$ 中运动的粒子，哈密顿量为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} + V(r) \tag{7-100}$$

容易证明

$$[\hat{l},\hat{H}] = 0 \tag{7-101}$$

即轨道角动量 $\vec{l}$ 为守恒量，因而 $\vec{l}^2$ 也是守恒量. 所以常常选 $\{\hat{H},\ \hat{l}^2,\ \hat{l}_z\}$ 为守恒量完全集，它们的共同本征态记为 ψ_{nlm}.

对于电子，还需考虑自旋轨道耦合作用

$$\xi(r)s\cdot l, \xi(r) = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}$$

此时，轨道角动量 $\vec{l}$ 与自旋 $\vec{s}$ 分别不再是守恒量，但总角动量 $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ 是守恒量，因为

$$[\hat{j},\hat{H}] = 0,\quad [\hat{j},\hat{\vec{s}}\cdot\hat{\vec{l}}] = 0 \tag{7-102}$$

还可以证明

$$[\hat{l}^2,\hat{\vec{s}}\cdot\hat{\vec{l}}] = 0 \tag{7-103}$$

即 $\vec{l}^2$ 仍是守恒量，所以习惯选 $\{\hat{H},\ \hat{l}^2,\ \hat{j}^2,\ j_z\}$ 为守恒量完全集，相应的本征函数记为 ψ_{nljm_j}. 对于给定的 (j)，可以取 $l = j \pm 1/2$，而 $m_j = j,\ j-1,\ \cdots,\ -j$，能级为 $(2j+1)$ 重简并. 我们还注意到，在非相对论情况下，体系

的宇称 $\pi=(-)^l$，由角动量量子数 l 的奇偶性完全确定. 因此也可以选 $\{\hat{H},\ j^2,\ j_z,\ \Pi\}$ 为守恒量完全集，Π 为空间反射算符，其本征值为 $\pi=\pm1$.

(2) 相对论情况.

考虑电子在 Coulomb 势 $\phi(r)$ 中运动，令 $V(r)=-e\phi(r)$，则哈密顿量可表示为

$$H=c\alpha\cdot p+mc^2\beta+V(r) \tag{7-104}$$

与自由电子情况相似，可证明

$$[l,H]=i\hbar\, c\alpha\times p\neq 0 \tag{7-105}$$

即 l 不是守恒量. 但

$$j=l+\frac{\hbar}{2}\sum,\quad \sum=\begin{pmatrix}\sigma & 0\\ 0 & \sigma\end{pmatrix} \tag{7-106}$$

是守恒量. 与非相对论情况不同之处是：l^2 不再守恒，因为

$$\begin{aligned}[l^2,H]&=c[l^2,\alpha\cdot p]=cl\cdot[l,(\alpha\cdot p)]+c[l,(\alpha\cdot p)]\cdot l\\&=i\hbar\, c\{l\cdot(\alpha\times p)+(\alpha\times p)\cdot l\}\neq 0\end{aligned} \tag{7-107}$$

另外，由 (7-106) 式平方可得

$$\hbar\sum\cdot l=j^2-l^2-\frac{3}{4}\hbar^2 \tag{7-108}$$

$\vec{\sum}\cdot\vec{l}$ 也不再是守恒量，但可以证明

$$\hbar\hat{K}=\beta(\sum\cdot l+\hbar) \tag{7-109}$$

是守恒量，即

$$[\hat{K},H]=0 \tag{7-110}$$

还可以证明

$$[\hat{K},j]=0 \tag{7-111}$$

因此，代替非相对论情况下的守恒量完全集 $\{\hat{H},\ l^2,\ j^2,\ j_z\}$，相对论情况下的守恒量完全集可以取为 $\{\hat{H},\ \hat{K},\ j^2,\ j_z\}$.

$\hbar\hat{K}$ 的本征值可按如下方法求出：

利用 $[\beta,\ \vec{\sum}]=0$，$\beta^2=1$，可得

$$\hbar^2\hat{K}^2=(\sum\cdot l)^2+2\hbar\sum\cdot l+\hbar^2$$

但

$$(\sum \cdot l)^2 = l^2 + i\sum \cdot (l \times l) = l^2 - \hbar \sum \cdot l$$

所以

$$\hbar^2 \hat{K}^2 = l^2 + \hbar \sum \cdot l + \hbar^2 = j^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 \qquad (7-112)$$

可以看出，虽然 l^2 与 $\sum \cdot l$ 分别不再为守恒量，但它们的线性组合 $(\hbar \hat{K})^2$ 却是守恒量（因 j^2 守恒）. 把 j^2 的本征值代入式 (7－112)，可求出 $(\hbar \hat{K})^2$ 的本征值为

$$[j(j+1) + \frac{1}{4}]\hbar^2 = (j + \frac{1}{2})^2 \hbar^2 \qquad (7-113)$$

所以 $\hat{K}$ 的本征值为

$$\pm (j + \frac{1}{2}) = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots \qquad (7-114)$$

对给定的 j，$\hat{K}$ 可以取两个值. $(\hbar \hat{K})^2$ 的角色与非相对论情形下的 l^2 相当.

$\hat{K}$ 的物理意义：$\hat{K}$ 是直角坐标系中的螺旋性算子在球坐标系中的类比. $\hat{H}^2 = m^2c^4 - (c\hbar)^2 \nabla^2$ 在直角坐标系中线性化，导致螺旋性算子——代表自旋沿动量的投影；$(\hat{H} - V_s)^2 = m^2c^4 - (c\hbar)^2 \nabla^2$（$V_s$ 是中心力标量势）在球坐标系中线性化，导致 $\hat{K}$ 算子——代表自旋沿轨道角动量的投影.

7.4.5 $(\hat{K}, j^2, j_z)$ 的共同本征态

构造 (j^2, j_z) 的共同本征态

$$\phi^A_{jm_j} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{bmatrix} \sqrt{l+m+1} & Y_{lm} \\ \sqrt{l-m} & Y_{lm+1} \end{bmatrix} \quad (l = j - 1/2) \qquad (7-115)$$

$$\phi^B_{jm_j} = \frac{1}{\sqrt{2l+3}} \begin{bmatrix} -\sqrt{l+1-m} & Y_{l+1m} \\ \sqrt{l+1+m+1} & Y_{l+1m+1} \end{bmatrix} \quad (l+1 = j + 1/2) \qquad (7-116)$$

(j^2, j_z) 的本征值为 $j(j+1)\hbar^2$ 和 $m_j = (m + 1/2)\hbar$. ϕ^A 与 ϕ^B 都有确定的宇称，但前者的宇称为 $\pi = (-)^l = (-)^{j-1/2}$，后者的宇称为

$$\pi = (-)^{l+1} = (-)^{j+1/2}$$

利用

$$\hbar\,\sigma\cdot l = j^2 - l^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 \tag{7-117}$$

容易得出

$$\begin{cases} \sigma\cdot l\phi^A_{jm_j} = (j-\frac{1}{2})\hbar\,\phi^A_{jm_j} \\ \sigma\cdot l\phi^B_{jm_j} = -(j+\frac{3}{2})\hbar\,\phi^B_{jm_j} \end{cases} \tag{7-118}$$

即 ϕ^A 与 ϕ^B 均为$\vec{\sigma}\cdot\vec{l}$的本征态. 考虑到

$$\hbar\,\hat{K} = \begin{pmatrix} \sigma\cdot l+\hbar & 0 \\ 0 & -(\sigma\cdot l+\hbar) \end{pmatrix} \tag{7-119}$$

容易证明

$$\phi_1 = \begin{bmatrix} c_1\phi^A_{jm_j} \\ c_2\phi^B_{jm_j} \end{bmatrix}, \quad \phi_2 = \begin{bmatrix} c_1\phi^B_{jm_j} \\ c_2\phi^A_{jm_j} \end{bmatrix} \tag{7-120}$$

是$\hat{K}$的本征态（其中 c_1，c_2 是任意常系数）：

$$\hat{K}\phi_1 = (j+\frac{1}{2})\phi_1, \quad \hat{K}\phi_2 = -(j+\frac{1}{2})\phi_2 \tag{7-121}$$

所以 ϕ_1 与 ϕ_2 都是（$\hat{K}$，j^2，j_z）的共同本征函数.（j^2，j_z）的本征值分别为 $j(j+1)\hbar^2$ 和 $m_j = (m+1/2)\hbar$，但 $\hat{K}$ 的本征值对于 ϕ_1 与 ϕ_2 分别为 $\pm(j+1/2)$. 请注意，四分量波函数 ϕ_1 与 ϕ_2 中，包含有空间波函数宇称相反的两个二分量波函数，而这两个二分量波函数的内禀宇称也相反，正好匹配给出具有确定宇称的 ϕ_1 与 ϕ_2.

7.4.6 径向方程

从前面的讨论可知，氢原子的 Dirac 方程的定态本征解必须是守恒量完全集 $\{\hat{H}, \hat{K}, j^2, j_z\}$ 的共同本征态，即角度与自旋的波函数应组合成为 $(\hat{K}, j^2, j_z)$的本征函数，而径向本征解由哈密顿量$\hat{H}$确定. 在上一小节已得到（$\hat{K}$，j^2，j_z）的本征函数，并由（7－120）式给出，剩下的任务就是求解在一定边界条件下的径向方程组. 为找出此径向方程组，先对$\hat{H}$做一些变化，使之用守恒量$\hat{K}$表示出来. 在

$$H = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta + V(r) \tag{7-122}$$

中，只有$\vec{\alpha}\cdot\vec{p}$与$\hat{K}$有关. 为找出它们的关系，定义算符

$$\alpha_r = \vec{\alpha}\cdot\vec{r}/r \tag{7-123}$$

显然，$\alpha_r^2=1$，所以 α_r 的本征值为±1. 利用

$$\begin{aligned}\alpha_r(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) &= \frac{1}{r}(\vec{\alpha}\cdot\vec{r})(\vec{\alpha}\cdot\vec{p})\\ &= \frac{1}{r}\{\vec{r}\cdot\vec{p} + i\sum\cdot(\vec{r}\times\vec{p})\}\\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{r}\sum\cdot l\\ &= p_r + \frac{i\hbar}{r}\beta\hat{K}\end{aligned} \tag{7-124}$$

其中，径向动量算符 p_r（在径向积分测度 $r^2\mathrm{d}r$ 下）是厄密的，且

$$p_r = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) = p_r^+ \tag{7-125}$$

这样一来，

$$\vec{\alpha}\cdot\vec{p} = \alpha_r^2(\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) = \alpha_r\left(p_r + \frac{i\hbar}{r}\beta\hat{K}\right) \tag{7-126}$$

因而

$$H = c\alpha_r p_r + \frac{i\hbar c}{r}\alpha_r\beta\hat{K} + mc^2\beta + V(r) \tag{7-127}$$

由此可见，$\{\hat{H},\ \hat{K},\ j^2,\ j_z\}$ 的共同本征函数只需把 ϕ_1 与 ϕ_2 中的系数 c_1 和 c_2 换成待定的径向函数$f(r)$和 $ig(r)$，它们可表示成下列两种类型：

$$\begin{aligned}K &= j + 1/2,\quad \psi = \begin{bmatrix}\phi^A_{jm_j}f(r)\\ \phi^B_{jm_j}ig(r)\end{bmatrix}\\ K &= -(j+1/2),\quad \psi = \begin{bmatrix}\phi^B_{jm_j}f(r)\\ \phi^A_{jm_j}ig(r)\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{7-128}$$

式中$f(r)$与 $g(r)$由下述径向本征方程确定.

在 Pauli－Dirac 表象中，

$$\alpha_r = \begin{pmatrix}0 & \sigma_r\\ \sigma_r & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_r = \frac{1}{r}\vec{r}\cdot\vec{\sigma} \tag{7-129}$$

利用

$$\sigma_r\phi^A_{jm_j} = -\phi^B_{jm_j}, \quad \sigma_r\phi^B_{jm_j} = -\phi^A_{jm_j} \tag{7-130}$$

可得

$$\begin{aligned}
\alpha_r\begin{bmatrix}\phi^A_{jm_j}f(r)\\ \phi^B_{jm_j}ig(r)\end{bmatrix} &= \begin{bmatrix}-i\phi^A_{jm_j}g(r)\\ -\phi^B_{jm_j}f(r)\end{bmatrix}\\
\alpha_r\begin{bmatrix}\phi^B_{jm_j}f(r)\\ \phi^A_{jm_j}ig(r)\end{bmatrix} &= \begin{bmatrix}-i\phi^B_{jm_j}g(r)\\ -\phi^A_{jm_j}f(r)\end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{7-131}$$

类似有

$$\alpha_r\beta = \begin{pmatrix}0 & \sigma_r\\ \sigma_r & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}I & 0\\ 0 & -I\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & -\sigma_r\\ \sigma_r & 0\end{pmatrix} \tag{7-132}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_r\beta\begin{bmatrix}\phi^A_{jm_j}f(r)\\ \phi^B_{jm_j}ig(r)\end{bmatrix} &= \begin{bmatrix}i\phi^A_{jm_j}g(r)\\ -\phi^B_{jm_j}f(r)\end{bmatrix}\\
\alpha_r\beta\begin{bmatrix}\phi^B_{jm_j}f(r)\\ \phi^A_{jm_j}ig(r)\end{bmatrix} &= \begin{bmatrix}i\phi^B_{jm_j}g(r)\\ -\phi^A_{jm_j}f(r)\end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{7-133}$$

从上式可以看出，α_r 和 $\alpha_r\beta$ 的作用不改变波函数的角度和自旋部分，只改变径向波函数，其运算规则为

α_r 的作用：$\begin{pmatrix}f\\ g\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}-ig\\ if\end{pmatrix}$

$\alpha_r\beta$ 的作用：$\begin{pmatrix}f\\ g\end{pmatrix}\to\begin{pmatrix}ig\\ if\end{pmatrix}$

亦即对径向波函数的运算可表示为

$$\alpha_r \sim \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \tag{7-134a}$$

$$\alpha_r\beta \sim \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0 & i\\ i & 0\end{pmatrix} \tag{7-134b}$$

把式（7－128）形式的波函数代入 Dirac 方程，可得出 $f(r)$ 与 $g(r)$ 满足的径向方程

$$\left[c\alpha_r p_r + \frac{i\hbar\, cK}{r}\alpha_r\beta + mc^2\beta + V(r) - E\right]\begin{pmatrix}f(r)\\ g(r)\end{pmatrix} = 0 \tag{7-135}$$

其中$K=\pm(j+1/2)$，α_r与α,β如（7－134）式所示．在上式中如令

$$f(r)=\frac{F(r)}{r},\qquad g(r)=\frac{G(r)}{r} \tag{7-136}$$

利用

$$p_r\frac{F(r)}{r}=-i\hbar\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}r},\quad p_r\frac{G(r)}{r}=-i\hbar\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r} \tag{7-137}$$

则可得出$F(r)$和$G(r)$满足的方程组：

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}r}-\frac{K}{r}F&=\left[\frac{mc^2+E}{\hbar c}-\frac{V(r)}{\hbar c}\right]G(r)\\ \frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r}-\frac{K}{r}G&=\left[\frac{mc^2-E}{\hbar c}+\frac{V(r)}{\hbar c}\right]F(r)\end{aligned} \tag{7-138}$$

对于氢原子，$V(r)=-e^2/r$，则方程组（7－138）化为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}r}-\frac{K}{r}F&=\left(\frac{mc^2+E}{\hbar c}+\frac{\alpha}{r}\right)G\\ \frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}r}-\frac{K}{r}G&=\left(\frac{mc^2-E}{\hbar c}-\frac{\alpha}{r}\right)F\end{aligned} \tag{7-139}$$

式中，$\alpha=e^2/\hbar c\approx 1/137$，是精细结构常数．

7.4.7 氢原子光谱的精细结构

在束缚态边界条件下求解氢原子的Dirac方程的径向方程（7－139），发现只有当能量本征值取下列分立值时，才能得到物理上合理的解：

$$E=E_{n'K}=mc^2\left[1+\frac{\alpha^2}{(\sqrt{K^2-\alpha^2}+n')^2}\right]^{-1/2} \tag{7-140}$$

其中，　　$n'=0,1,2,\cdots$　　$|K|=(j+1/2)=1,2,3,\cdots$

对（7－140）式中的精细结构常数$\alpha=e^2/\hbar c\approx 1/137\ll 1$做幂级数展开，并取近似得

$$(\sqrt{K^2-\alpha^2}+n')^{-2}\approx\left(n'+|k|-\frac{\alpha^2}{2|K|}\right)^{-2}\approx\frac{1}{n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n|K|}\right]$$

式中

$$n=n'+|K|=1,2,3,\cdots \tag{7-141}$$

故（7－140）式可表示为

$$\begin{aligned}E=E_{nK}&=mc^2\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(1+\frac{\alpha^2}{n|K|}\right)\right]^{-1/2}\\ &=mc^2\left[1-\frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{n^2}-\frac{\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{|K|}-\frac{3}{4}\right)+\cdots\right]\end{aligned} \tag{7-142}$$

(7－142) 式还可改写成

$$E_{nK}-mc^2=-\frac{mc^2\alpha^2}{2n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{|K|}-\frac{3}{4}\right)+\cdots\right]$$

$$=-\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{|K|}-\frac{3}{4}\right)+\cdots\right] \qquad (7-143)$$

其中，$a=\hbar^2/me^2$，是 Bohr 半径. 若用量子数 j 代替 $|K|$，得

$$E_{nj}-mc^2=-\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2}-\frac{3}{4}\right)+\cdots\right] \qquad (7-144)$$

可以看出，能级不仅与主量子数 n 有关，而且依赖于 j（或 $|K|$）. 式 (7－143)或（7－144）中右边第二项远小于第一项，这是相对论最低级修正项. 当忽略此项时，就回到 Bohr 氢原子能级公式（除去一个常数项外）：

$$E_n=-\frac{e^2}{2a}\frac{1}{n^2},\quad n=1,2,3,\cdots \qquad (7-145)$$

由于相对论修正，n 相同 j 不同的 Bohr 能级将发生分裂，但此修正很小 [$O(\alpha^2)$]，能级分裂是很微小的，这是氢原子能级精细结构的来源. 在式 (7－142) ～ (7－144) 中，对于给定的 n，

$$\begin{aligned}&|K|=1,2,3,\cdots,n\\&j=|K|-1/2=1/2,3/2,5/2,\cdots,n-1/2\\&K=(j+1/2)\quad(>0),\qquad l=j-1/2\\&K=-(j+1/2)\quad(<0),\qquad l=j+1/2\end{aligned} \qquad (7-146)$$

这里 l 是波函数 [见式 (7－128)，(7－115)，(7－116)] 的大分量中的球谐函数的阶，在非相对论极限下是好量子数.

以 $n=4$ 为例，各能级为

K	$+1$	-1	$+2$	-2	$+3$	-3	$+4$
$(n'$	3		2		1		0)
j	1/2		3/2		5/2		7/2
l	0	1	1	2	2	3	3

光谱符号：$4s_{1/2}$　$4p_{1/2}$　$4p_{3/2}$　$4d_{3/2}$　$4d_{5/2}$　$4f_{5/2}$　$4f_{7/2}$

其中，在非相对论近似下，简并的能级分裂为 $(4s_{1/2}\,4p_{1/2})$，$(4p_{3/2}\,4d_{3/2})$，$(4d_{5/2}\,4f_{5/2})$，$(4f_{7/2})$ 四条能级，但 (nj) 相同的能级仍然简并.

氢原子光谱理论的发展，是量子力学理论发展的一个重要侧面. 氢原子是最简单的原子，数学处理比较容易，可以找出其解析解. 但氢原子光谱的精密

观测却并不是一件容易的事．实验观测肯定了 Dirac 理论给出的相对论修正．然而早在 20 世纪 30 年代，就有人发现 Dirac 理论与氢原子光谱的精细结构的观测还有一定的微小差异．但由于当时实验的精确度不够，没有引起人们的重视．直到 1945 年，Lamb 与 Rutherford 利用微波技术精确地测定了氢原子光谱的精细结构，肯定了同一个（nj）的能级按照宇称不同还有微小的分裂．例如，$2s_{1/2}-2p_{1/2}$能级发生分裂，$2s_{1/2}$能级略高（$\Delta E=\hbar\Delta\omega$，$\Delta\omega=1057.8\pm 0.1\text{MHz}$）．这就是有名的 Lamb 移动（shift）．它与精细结构分裂 $\Delta\omega$（$2p_{3/2}-2p_{1/2}$）$=10950\,\text{MHz}$ 相比，小一个数量级．类似的分裂还有 $3s_{1/2}$能级略高于 $3p_{1/2}$，$3p_{3/2}$能级略高于 $3d_{3/2}$等．

与电子的反常磁矩一样，Lamb 移动是作为单电子理论的 Dirac 相对论性量子力学所不能解释的．为了说明它们，需要把 Dirac 方程看成一个多粒子系统的场方程，并对场进行量子化（所谓的二次量子化），把 Dirac 方程变成量子化的电子场与光子场相互作用的算符方程，再与光子场的方程耦合起来，就成为量子电动力学的基本方程组，这是当时量子场论的主要内容．在量子电动力学的量子场论中，计及辐射修正之后，可以满意地解释 Lamb 移动和电子的反常磁矩．这是 20 世纪 40 年代末量子电动力学取得的重大成果，由此促进了量子场论重整化理论的发展，把量子电动力学推进到一个新的阶段．

7.4.8 电子与电磁场相互作用系统的拉格朗日

前面是把电磁场（$\vec{A}$，ϕ）看作固定的外场来讨论电子在外界给定的电磁场中的运动．若把电磁场也看作另一种物质场的动力学变量，它们与电子相互作用时也会发生变化．这样一来，电子场与电磁场二者构成一个更复杂的动力学系统，其拉氏量密度为

$$L=\bar{\psi}\left[\gamma_\mu\left(p_\mu+\frac{e}{c}A_\mu\right)+m\right]\psi-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu} \tag{7-147}$$

$$I=\int L(x)\mathrm{d}^4x \tag{7-148}$$

其中电磁场张量

$$F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu \tag{7-149}$$

从最小作用量原理 $\delta I_{\bar{\psi}}=0$，可得与电磁场耦合的电子场的 Dirac 方程；从 $\delta_{A_\mu}I=0$可得有电流密度源的电磁场的 Maxwell 方程．对 ψ，$\bar{\psi}$，A_μ 量子化后就过渡到量子电动力学（QED）．

7.5 量子场论初步：量子电动力学（QED）、量子强子动力学（QHD）与 Walecka 模型

7.5.1 量子电动力学（QED）初步[2-3]

上一节介绍的电磁场中的 Dirac 方程，是一个电子在外加电磁场中的运动方程，电子的运动虽然是量子力学的，但仅是一个电子的问题，而不是多电子系统的问题. 对于电磁势 $(\vec{A}, \phi)$，它不仅是经典的，而且是固定的.

如果把电子的波函数 $\psi(x)$ 看作多电子系统的场算符，把电磁场 A_μ 看作动力学变量，即另一类矢量粒子（光子）的场算符，则我们得到包括电子场和电磁场及其相互作用的动力系统，其拉格朗日为

$$L = \bar{\psi}\gamma_\mu\left(\partial_\mu + i\frac{e}{c}A_\mu\right)\psi + m\bar{\psi}\psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu} \quad (x_4 = ict) \tag{7-147}$$

式中

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \tag{7-149}$$

从二次量子化理论可知，作为 Fermi 场 $\psi(x)$，应满足反对易关系. 由于 $\psi(x)$ 对应的广义动量为

$$\Pi_\psi(x) = \frac{\delta L}{\delta\dot{\psi}} = i\psi^+ \tag{7-150}$$

所以反对易关系为

$$\{\psi(x,t), \psi^+(x',t)\} = \delta(x - x') \tag{7-151}$$

$$\{\psi(x,t), \psi'(x',t)\} = \{\psi^+(x,t), \psi^+(x',t)\} = 0$$

而 A_μ 为玻色场，其广义动量为

$$\Pi_{A_\mu} = \frac{\delta L}{\delta\dot{A}_\mu} = \dot{A}_\mu \tag{7-152}$$

所以有对易关系

$$[A_\mu(x,t), \dot{A}_\nu(x',t)] = i\delta_{\mu\nu}\delta(x - x') \tag{7-153}$$

$$[A_\mu(x,t), A_\nu(x',t)] = [\dot{A}_\mu(x,t), \dot{A}_\nu(x',t)] = 0$$

上述对易式和反对易式是玻色场 $A_\mu(\vec{r},t)$ 和 Fermi 场 $\psi(\vec{r},t)$ 的量子化条件. 这时，电子场和电磁场已变成了量子场；对电子而言，从 Dirac 方程描述的单个粒子的问题，变成了由无数电子和正电子组成的多体问题；对电磁场而言，从经典电磁场变成了量子光子场. 这时，$\psi(x)$，$\psi^+(x)$，$A_\mu(x)$ 已成为场算

符，包含了电子（正电子）和光子的产生、消灭算符，正如我们在二次量子化表象中所讲的那样. 如果在某一正交完备的单粒子态表象中把它们展开，其形式与前面讲的二次量子化的形式一样，只不过时空坐标应是罗仑兹时空的坐标，整个理论是相对论协变的.

上述由电子场$\psi(x)$和电磁场$A_\mu(x)$构成的量子化的拉格朗日，是量子电动力学的出发点，它描述电子（正电子）场与电磁场的相互作用，交换光子、光子产生正负电子对和正负电子对湮灭成光子的量子场论过程.

L 还可以写成自由场拉氏量L_0与相互作用拉氏量 L_{in}之和：

$$L = L_0 + L_{in} \tag{7-154}$$

其中

$$L_0 = \bar{\psi}\gamma_\mu\partial_\mu\psi + mc\bar{\psi}\psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F_{\mu\nu} \tag{7-156}$$

$$L_{in} = i\frac{e}{c}\bar{\psi}\gamma_\mu\psi A_\mu \tag{7-157}$$

L_0包括自由电子场和自由电磁场的拉格朗日，L_{in}是规范协变性确定的相互作用的拉格朗日. 由此可以得到系统的哈密顿量，它包括自由场部分和相互作用部分：

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{in} \tag{7-158}$$

量子电动力学的求解步骤如下：

(1) 在相互作用绘景中求解状态的薛定格方程的时间演化算子，把$\hat{H}_{in}$当作微扰，由时间演化算子求出 $S-$矩阵.

(2) 把$\psi(x)$，$A_\mu(x)$按$\hat{H}_0$的自由平面波的本征解展开，把 $S-$矩阵用自由粒子的产生、消灭算符表示，并通过傅立叶变换过渡到动量－能量表象.

(3) 算出自由场 ψ 和A_μ 的单粒子传播子.

(4) 用 Wick 定理计算 $S-$矩阵对一定物理过程的初态和末态的矩阵元.

(5) 用 Feynman 图和 Feynman 规则简化碰撞和散射过程的矩阵元的计算.

(6) 对于圈图发散问题，运用重整化方案.

量子电动力学已成为量子场论的经典，它对微观世界的电磁相互作用过程作出了极为精确的描述. 20 世纪 60 年代以来，人们把电磁相互作用与弱相互作用统一起来，发展了弱电统一的规范场理论（QWED），成为量子场论发展的又一个里程碑.

从20世纪70年代以来，人们把相互作用的规范场理论推广到强相互作用，发展了强作用的 SU（3）色规范场理论——量子色动力学（QCD），对强相互作用过程的描述十分成功.

弱电统一理论和量子色动力学，对自然界的相互作用（除引力之外）作出了全面的描述，是物理学的辉煌成就. QWED与QCD二者称作基本粒子的标准模型（the Standard Model of Particle Physics），它们代表了物理学对微观世界认识的最高水平.

人们正进一步追求把引力也包括在内的统一理论，这是极其艰巨而伟大的目标.

量子论的发展过程如下[4-7]：

$$\text{量子力学}\rightarrow\text{量子场论（包括）}\begin{matrix}\text{QED}\\ \text{QWED}\\ \text{QCD}\end{matrix}\text{（统称）标准模型（Standard Model）}\rightarrow$$

$$\rightarrow\text{大统一（Grand Unification）}\rightarrow$$

$$\rightarrow\text{包括量子引力理论的统一理论（Theory of Superstring?）}$$

7.5.2 量子强子动力学（Quantum Hadron Dynamics，QHD）[8-10]

在从QED向QCD发展的30年之中，人们探索了各种描述强相互作用的理论. 在20世纪60年代末、70年代初，Walecka集其大成，发展了描述强子相互作用的等效的量子理论——量子强子动力学（QHD）.

发展QHD的另一个动机是核物理学的需要. 经典核物理把原子核看作由质子和中子组成，其间存在强相互作用与库仑相互作用. 这种理论叫做量子核子动力学（Quantum Nucleon Dynamics，QND）. 实验发现，核内还存在介子（如 π 介子等），核子还有激发态（如 Δ 粒子等），核内还可能存在超子. 这些参与强相互作用的粒子，统称强子（Hadron），描述它们相互作用的等效理论叫做量子强子动力学. 现在发现，QHD是QCD在低能极限下的等效理论. 目前，基于QHD的原子核的相对论性平均场理论相当成功，有必要对QHD作一简要介绍.

Walecka的QHD的拉格朗日可写成

$$L_{\text{QHD}} = L_N + L_M + L_A + L_{\text{int}} \tag{7-159}$$

其中，L_N 为核子自由场的拉格朗日：

$$L_N = \bar{\psi}(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi \tag{7-160}$$

核子场 ψ 为罗仑兹空间的旋量（四分量），同位旋空间的旋量（二分量：中子与质子分量）. 自由介子场的 L_M 为

$$L_M = -\left(\frac{1}{2}\partial_\mu\sigma\partial^\mu\sigma - U(\sigma)\right) - \left(\frac{1}{2}\partial_\mu\vec{\pi}\partial^\mu\vec{\pi} - \frac{1}{2}m_\pi\vec{\pi}^2\right) - \frac{1}{4}\Omega_{\mu\nu}\Omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\omega^2\vec{\omega}^2 - \frac{1}{4}\vec{R}_{\mu\nu}\vec{R}^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\rho^2\vec{\rho}^2 \tag{7-161}$$

自由电磁场的拉格朗日为

$$L_A = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \tag{7-162}$$

其中，各种强子在罗仑兹空间和同位旋空间的张量性质见表 7－1：

表 7－1　各种强子在罗仑兹空间和同位旋空间的张量性质

强子名称	罗仑兹空间的张量性质	同位旋空间的张量性质
核子	旋量（4 分量）	旋量（2 分量）
σ－介子	标量（1 分量）	标量（1 分量）
π－介子	赝标量（1 分量）	矢量（3 分量）
Ω－介子	矢量（4 分量）	标量（1 分量）
$\vec{\rho}$－介子	矢量（4 分量）	矢量（3 分量）

介子场与核子场的相互作用拉格朗日 L_{int} 为

$$L_{\text{int}} = -g_\sigma\bar{\psi}\sigma\psi - \frac{f_{\vec{\pi}}}{m_\pi}\bar{\psi}\gamma^5\gamma_\mu\partial^\mu\vec{\pi}\cdot\vec{\tau}\,\psi - g_\varpi\bar{\psi}\gamma_\mu\omega^\mu\psi - g_\rho\bar{\psi}\gamma_\mu\vec{\rho}^\mu\cdot\vec{\tau}\,\psi - e\bar{\psi}\gamma_\mu A^\mu\frac{(1-\tau_3)}{2}\psi \tag{7-163}$$

其中

$$U(\sigma) = \frac{1}{2}m_\sigma^2\sigma^2 + \frac{1}{3}g_2\sigma^3 + \frac{1}{4}g_3\sigma^4 \tag{7-164}$$

是 σ－介子场的非线性自相互作用势能，其他矢量介子场的反对称张量为

$$\begin{aligned}\Omega^{\mu\nu} &= \partial^\mu\omega^\mu - \partial^\mu\omega^\mu \\ \vec{R}^{\mu\nu} &= \partial^\mu\vec{\rho}^\nu - \partial^\nu\vec{\rho}^\mu \\ F^{\mu\nu} &= \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu\end{aligned} \tag{7-165}$$

从 Euler－Lagrange 方程

$$\frac{\partial L}{\partial q_j} - \partial_\mu \frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu q_j)} = 0 \qquad (7-166)$$

可得各种场的运动方程，其中广义坐标 $q_j = \{\psi, \vec{\pi}, \sigma, \vec{\rho}^\mu, \omega^\mu, A_\mu\}$，广义动量为

$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \qquad (7-167)$$

由此可构造哈密顿量密度：

$$H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L, \quad \hat{H} = \int H(x) \mathrm{d}\vec{r} \qquad (7-168)$$

各种场的量子化，可通过费米场 ψ 的反对易子和介子场$\{\sigma, \vec{\pi}, \vec{\rho}^\mu, \omega^\mu, A_\mu\}$的对易子来实现．相互作用的 S－矩阵可以仿照 QED 进行计算．

目前，QHD 主要用于核子（有时还包括某些重子）的相对论平均场理论的计算，已有比较完善的计算程序，大量的计算结果与实验符合得很好．这方面的进展可参阅参考文献[8－10]．

【参考文献】

Ⅰ　相对论性量子力学与 Dirac 方程

1　P. A. M. Dirac. The Principle of Quantum Mechanics. Oxford University Press, 1958

P. A. M.　狄拉克．量子力学原理．科学出版社，1965

2　J. D. Bjorken and S. D. Drell. Relativistic Quantum Mechanics (1964) and Relativistic Quantum Fields(1965). New York: McGraw－Hill Book Company

Ⅱ　量子场论与标准模型

3　C. Itzykson and J. －B. Zuber. Quantum Field Theory. New York: McGraw－Hill Book Company, 1980

4　S. Weinberg. The Quantum Theory of Fields. Vol. Ⅰ(1995), Vol. Ⅱ(1996), Vol. Ⅲ(2000). Cambridge University Press

5　J. F. Donoghue E. Goloeich and B. R. Holstein. Dynamics of the Standard Model. Cambridge University Press, 1992

Ⅲ　大统一理论与超弦理论

6　G. G. Ross. Grand Unifield Theories. The Benjamin/Cummings Publishing

Company, INC. 1985
7 J. Polchinski. String Theory. Vol. I and Vol. II. Cambridge University Press, 1998

Ⅳ 量子强子动力学与 Walecka 模型

8 B.D. Serot and J.D. Walecka. Adv. Nucl Phys, 1986, 16:1
9 B.D. Serot. Rep. Prog. Phys, 1992, 55:1855
10 P. Ring. Progr. Part. Nucl. Phys, 1996, 37:193

第 8 章　量子力学的积分形式与路径积分

8.1　量子力学的路径积分形式[1,2,6]

量子力学的薛定格形式是建立在力学量算符（动量算符）的微分表示的基础之上的，因此，是量子力学的微分形式. 正像马克斯威尔方程是电磁场理论的微分形式，而高斯定律、安培定律、法拉第定律是电磁场理论的积分形式一样，量子力学也有积分形式，这就是费曼的路径积分形式.

8.1.1　从薛定格微分形式到费曼的路径积分形式

从薛定格微分形式向费曼的路径积分形式过渡的关键是传播子，以它作桥梁把二者联系起来.

8.1.1.1　传播子

(1) 传播子的定义.

与时间有关的薛定格方程

$$i\hbar \frac{\partial \mid \psi(t) >}{\partial t} = \hat{H} \mid \psi(t) > \tag{8-1}$$

的解可写成

$$\mid \psi(t) > = \hat{U}(t, t_0) \mid \psi(t_0) >, \quad t > t_0 \tag{8-2}$$

其中包含全部动力学信息. 确定状态时间演化规律的时间演化算子为

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \tag{8-3}$$

把粒子从 $(x,\ t)$ 到 $(x',\ t')$ 的传播子定义为 $\hat{U}$ 在坐标空间的矩阵元，即

$$K(x', t'; x, t) = < x' \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t'-t)/\hbar} \mid x > \tag{8-4}$$

(2) 传播子的性质.

从 (8-2) 式的 x - 表象可得

$$\psi(x,t) = < x \mid \psi(t) > = \int < x \mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \mid x' >< x' \mid \psi(t_0) > \mathrm{d}x'$$

$$= \int K(x,t;x',t')\psi(x',t_0)\mathrm{d}x' \qquad (8-5)$$

上式用到基矢$|x'>$的正交完备性条件

$$< x' \mid x'' >= \delta(x'-x'') \qquad (8-6a)$$

$$\int |x'>< x'|\,\mathrm{d}x' = I \qquad (8-6b)$$

由

$$\psi(x,t) = \int K(x,t;x',t)\psi(x',t)\mathrm{d}x' \qquad (8-7)$$

可知

$$K(x,t;x',t) = \delta(x-x') \qquad (8-8)$$

从时间演化算子作为单参数群的性质

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t''-t)/\hbar} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t''-t')} \cdot \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t'-t)} \qquad (8-9)$$

可得其矩阵元形式，即传播子的传递性质

$$K(x'',t'';x,t) = \int K(x'',t'';x',t')K(x',t';x,t)\mathrm{d}x' \qquad (8-10)$$

(3) 传播子的运动方程及其解的谱分解

把 (8-7) 式代入薛定格方程 (8-1)，可得传播子 K $(x',\ t';\ x,\ t)$ 的运动方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\int K(x,t;x',t')\psi(x',t')\mathrm{d}x' = \int \hat{H}(x)K(x,t;x',t')\psi(x',t')\mathrm{d}x'$$

由于 ψ $(x',\ t')$ 的任意性，故得 K $(x,\ t;\ x',\ t')$ 的运动方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}K(x,t;x',t') = \hat{H}(x)K(x,t;x',t'),\ t-t'>0 \qquad (8-11)$$

其初始条件为 (8-8) 式：

$$K(x,t;x',t) = \delta(x-x')$$

因此有

$$\int K(x,t;x',t)\mathrm{d}x' = 1$$

若设

$$K(x,t;x',t') = 0,\quad t-t' < 0 \qquad (8-12)$$

则传播子 K $(x',\ t';\ x,\ t)$ 的运动方程 (8-11) 可改写为

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H})K(x,t;x',t') = i\hbar\delta(x-x')\delta(t-t') \qquad (8-13)$$

这正是时间有关的薛定格方程的格林函数 $G(x, t; x', t')$ 的运动方程，其解的谱分解为

$$K(x,t;x',t') = G(x,t;x',t') = \frac{i\hbar}{i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}}\delta(x-x')\delta(t-t')$$

$$= \frac{i\hbar}{2\pi}\sum_n \int \frac{1}{i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}(x)}\psi_n(x)\psi_n^*(x')e^{-i\omega(t-t')}d\omega$$

$$= \frac{i\hbar}{2\pi}\sum_n \int \frac{1}{\hbar\omega - E_n}\psi_n(x)\psi_n^*(x')e^{-i\omega(t-t')}d\omega$$

$$= \sum_n \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n^*(x')e^{iE_n t'/\hbar} \qquad (8-14a)$$

直接计算也给出同一结果：

$$K(x,t;x',t') = < x \mid e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar} \mid x' >$$

$$= \sum_n < x \mid e^{-i\hat{H}t/\hbar} \mid \psi_n >< \psi_n \mid e^{i\hat{H}t'/\hbar} \mid x' >$$

$$= \sum_n \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n^*(x')e^{iE_n t'/\hbar} \qquad (8-14b)$$

$K(x, t; x', t')$ 的对时间变量的傅立叶变换为

$$K(x,x';\omega) = G(x,x';\omega) = \int K(x,t;x',t')e^{i\omega(t-t')}d(t-t')$$

$$= -i\hbar\sum_n \frac{\psi_n(x)\psi_n^*(x')}{\hbar\omega - E_n} \qquad (8-15)$$

由式（8－5）和（8－15）可知，传播子 $K(x, t; x', t')$ 包含了量子系统的全部信息：

① $\hat{H}$的本征值由 $K(x, x'; \omega)$ 的极点位置决定；

② $\hat{H}$的本征矢由 $K(x, x'; \omega)$ 的留数函数决定；

③ 波函数的时间演化由 $K(x, t; x', t')$ 决定.

因此，计算传播子与求解薛定格方程是等价的.

8.1.1.2 计算传播子的路径积分方法

传播子的计算有多种方法. 事实上，(8－14) 式给出的是用$\hat{H}$的本征解计算传播子的方法，即传播子的谱分解法. 对$\hat{H}$的本征解已知的系统，这种方法

很方便. 如自由粒子，其本征解为

$$\psi_p(x,t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{ipx/\hbar} e^{\frac{p^2}{2m}t/\hbar} \tag{8-16a}$$

把上式代入 (8-14) 式，易得

$$\begin{aligned} K(x,t;x',t') &= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dp \psi_p(x,t) \psi_p^*(x',t') \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dp e^{ip(x-x')/\hbar - i\frac{p^2}{2m}(t-t')} \\ &= \left[\frac{m}{2\pi\hbar i(t-t')}\right]^{1/2} e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t')}} \end{aligned} \tag{8-16b}$$

此处用到

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iax^2} dx = \left(\frac{\pi}{ai}\right)^{1/2} \tag{8-16c}$$

当 $(t-t') = \varepsilon \to 0$ 时，得到以后经常用到的无限小传播子，它是计算有限时间间隔的传播子的基础：

$$\begin{aligned} K(x,x';\varepsilon) &= \left[\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right]^{1/2} e^{i\frac{m(x-x')^2}{2\hbar\varepsilon}} = \left[\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right]^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}(\frac{1}{2}mv^2)\varepsilon}, \\ &= \left[\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right]^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}L\varepsilon} = \left[\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right]^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}\delta_\varepsilon S} \quad v = (x-x')/\varepsilon \end{aligned} \tag{8-17}$$

(8-17) 式的重要性在于，它给出用无限小经典作用量 $\delta_\varepsilon S$ 表达无限小传播子的公式，而且具有普遍性：无限小经典作用量 $\delta_\varepsilon S$ 决定了粒子沿无限小经典轨道上的无限小传播子，而有限长轨道上的传播子是这些无限小传播子的叠加. 这样一来，就把经典力学作用量与量子力学传播子联系了起来，这正是下面要介绍的费曼路径积分的基本思想和创新之处.

现在，用另一种方法，即路径积分法计算传播子，它基于无限小经典作用量 $\delta_\varepsilon S$，决定了粒子沿无限小经典轨道上的无限小传播子. 考虑一个粒子的一般情况，设

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{8-18}$$

为了利用上述 (8-17) 式的结果，计算每条轨道对传播子的贡献，把时间细分为很小的间隔：

$$\begin{aligned} &t_0, \quad t_0+\varepsilon, \quad t_0+2\varepsilon, \quad \cdots \quad t_0+N\varepsilon = t, \\ &t_0, \quad t_1, \quad t_2, \quad \cdots \quad t_N = t \end{aligned} \tag{8-19a}$$

相应地利用传播子的传递性，把（8－4）式改写为

$$K(x,t;x_0,t_0)=<x\mid e^{-i\hat{H}(t-t_{N-1})/\hbar}\cdots e^{-i\hat{H}(t_3-t_2)/\hbar}\cdot e^{-i\hat{H}(t_2-t_1)/\hbar}\cdot e^{-iH(t_1-t_0)/\hbar}\mid x_0>$$

$$=\int dx_1dx_2\cdots dx_{n-1}<x\mid e^{-i\hat{H}(t-t_{N-1})/\hbar}\mid x_{N-1}>\cdots$$

$$<x_2\mid e^{-i\hat{H}(t_2-t_1)/\hbar}\mid x_1><x_1\mid e^{-iH(t_1-t_0)/\hbar}\mid x_0>$$

$$=\int\cdots\int dx_1dx_2\cdots dx_{N-1}K(x,t;x_{N-1},t_{N-1})\cdots K(x_2,t_2;x_1,t_1)K(x_1,t_1;x_0,t_0) \qquad (8-19b)$$

其中

$$K(x_{n+1},t_{n+1};x_n,t_n)=<x_{n+1}\mid e^{-i\hat{H}(x_n)\epsilon/\hbar}\mid x_n>$$

$$=e^{-i\hat{H}(x_n)\epsilon/\hbar}\delta(x_{n+1}-x_n)$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d\vec{p}\,e^{-i(\frac{-\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}_n^2+V(x_n))\epsilon/\hbar}e^{i\vec{p}(\vec{x}_{n+1}-\vec{x}_n)/\hbar}$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int d\vec{p}\,e^{-i(\frac{p^2}{2m}+V(x_n))\epsilon/\hbar}e^{i\vec{p}(\vec{x}_{n+1}-\vec{x}_n)/\hbar}$$

$$=\left[\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right]^{3/2}e^{\frac{i}{\hbar}(\frac{m}{2}(\frac{x_{n+1}-x_n}{\epsilon})^2-V(x_n))\epsilon}$$

$$=\left[\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right]^{3/2}e^{\frac{i}{\hbar}L(x_n,\dot{x}_n)\epsilon} \qquad (8-19c)$$

$$L(x_n,\dot{x}_n)=\frac{m}{2}\dot{x}_n^2-V(x_n),\quad \dot{x}=\frac{x_{n+1}-x_n}{\epsilon},\quad \epsilon\to 0 \qquad (8-19d)$$

把（8－19c）式代入（8－19b）式得

$$K(x,t;x_0,t_0)=C\int\prod_{n=1}^{N-1}dx_n e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{n=1}^{N-1}L(x_n,\dot{x}_n)\epsilon} \qquad (8-20a)$$

C 是归一化因子．当 $\epsilon\to 0$ 时，沿轨道 $\{x_n(t_n)\}$ 的作用量为

$$\sum_{n=1}^{N-1}L(x_n,\dot{x}_n)\epsilon=\int_{t_0}^{t}L(x,\dot{x})dt=S[x(t),x_0(t_0)] \qquad (8-21)$$

其中积分

$$\int\prod_{n=1}^{N-1}dx_n$$

意味着对端点为$\{x(t),x_0(t_0)\}$的所有轨道求和. 因此，(8－20a) 式可写为

$$K(x,t;x_0,t_0)=C\sum_{\text{all-paths}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t),x_0(t_0)]}$$
$$=\int\mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t),x_0(t_0)]} \tag{8－20b}$$

式 (8－20a)， (8－20b) 是计算传播子的路径积分表达式，它是端点为$\{x(t),x_0(t_0)\}$的所有轨道的贡献的叠加，每条轨道对应于一列哈密顿－雅可比波. 该轨道的作用量给出这列波的等相位$\frac{S}{\hbar}$波阵面，真空量子效应的体现之一是普朗克常数$\hbar$成为作用量的最小度量单位. 经典轨道只是作用量的变分极小 $\delta S\left[x\left(t\right),\ x_0\left(t_0\right)\right]=0$ 的保持能量守恒因而真空涨落不与粒子交换能量、动量的轨道，其他所有能量不守恒的非经典轨道也做出贡献. 这是真空量子效应的体现之二——真空涨落在测不准关系的控制下与粒子交换能量、动量的结果. 因此，量子力学可以看作是拉格朗日经典力学考虑了真空量子涨落与粒子交换能量、动量以后，粒子沿一切可能的轨道对应的一系列哈密顿－雅可比波传播叠加的结果. 因此，真空量子涨落效应表现在两个方面：①量子涨落提供了一个作用量的最小的普适的度量单位；②这个最小的作用量的普适的度量单位$\hbar$是真空量子涨落的特征量，它控制着与粒子交换能量、动量的过程. 简言之，量子力学可以看作是考虑了真空涨落效应的微观粒子的动力学，而真空涨落效应在量子力学中表现出的特征量是普朗克常数$\hbar$. 在宏观世界，$S/\hbar$很大，只有 $\delta S=0$ 附近的轨道的相位相近，因而发生建设性相干叠加，成为加强了的粒子的运行轨道，其余的轨道由于相位差很大而导致相干性抵消，不做出贡献. 这类似于光波的干涉和衍射现象：粒子的经典轨道对应于光波的干涉和衍射的明纹. 这样，量子力学从波动相干的观点解释了经典轨道出现的原因，统一了粒子运动和波的运动的表观矛盾：经典轨道是波动相干导致的高度定域化的结果. 由于在经典轨道附近，真空涨落效应对粒子的影响很小，因此，平均说来，可以把经典力学看作是忽略了真空涨落效应的动力学，或平稳真空内的动力学；相反，量子力学是涨落真空内的动力学. 总之，路径积分形式揭示了量子力学与经典拉格朗日力学的深刻联系，揭示了经典运动与量子运动的区别和联系，并引导人们对真空量子涨落的性质有了更为深刻的认识.

8.1.2 从费曼形式到薛定格形式

前面我们从薛定格方程出发，引进了传播子，讨论了它的性质，论证了传

播子包含量 子系统的全部信息（定态的本征能谱和非定态的时间演化），同时给出了传播子的路径积分表达式．既然传播子包含量子系统的全部信息，它又可以用路径积分表示，那就有可能重新表述量子力学，把它建立在传播子的路径积分的形式之上．这正是费曼的基本思想．

8.1.2.1 费曼的量子力学原理

费曼的量子力学基本原理有三条：

(1) 量子态用几率幅 ψ （x，t）描述；

(2) 几率幅的时间演化由传播子决定

$$\psi(x,t)=\int K(x,t;x_0,t_0)\psi(x_0,t_0)\mathrm{d}x_0; \tag{8-21a}$$

(3) 传播子由路径积分给出：

$$K(x,t;x_0,t_0)=C\sum_{\text{all paths}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t),x_0(t_0)]} \tag{8-21b}$$

路径积分可由经典作用量计算：

$$S[x(t),x_0(t_0)]=\int_{x_0(t_0)}^{x(t)}L(x,\dot{x})\mathrm{d}t \tag{8-21c}$$

$$L(x,\dot{x})=\frac{m}{2}\dot{x}^2-V(x) \tag{8-21d}$$

8.1.2.2 与薛定格形式的等价性

量子力学的费曼形式与薛定格形式的等价性应从两方面证明：

(1) 从薛定格形式可以推导出费曼形式，这在前面已经做到了．

(2) 从费曼形式推导出薛定格形式，这是下面要做的．

薛定格方程的推导．

由（8－21a）式有

$$\psi(x,t+\epsilon)=\int K(x,t+\epsilon,x_0,t)\psi(x_0,t)\mathrm{d}x_0,\quad \epsilon\to 0 \tag{8-22}$$

先证明下面的等式：

由

$$\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}L(x,\dot{x})\epsilon}=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\frac{1}{2}m(\frac{x-x_0}{\epsilon})^2-V(x)]\epsilon}$$

$$=(\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\epsilon})^{-3/2}(\frac{1}{2\pi\hbar})^3\int\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\frac{p^2}{2m}+V(x)]\epsilon}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-x_0)/\hbar}\mathrm{d}p$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{-3/2}\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3} e^{-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla_x^2+V(x)\right]\epsilon}\int e^{ip(x-x_0)/\hbar}d\vec{p}$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{-3/2} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}\delta(x-x_0)$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{-3/2}\langle x \mid e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon} \mid x_0\rangle$$

$$= \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{-3/2} K(x, t+\epsilon; x_0, t) \tag{8-23a}$$

得到等式

$$K(x, t+\epsilon; x_0, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}\delta(x-x_0) \tag{8-23b}$$

$$K(x, t+\epsilon; x_0, t) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i\epsilon}\right)^{3/2} e^{\frac{i}{\hbar}L(x,x)\epsilon} \tag{8-23c}$$

把（8－23b）式代入（8－22）式有

$$\psi(x, t+\epsilon) = \int (e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}\delta(x-x_0))\psi(x_0, t)dx_0$$

$$= \int \delta(x-x_0) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}\psi(x_0, t)dx_0$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon}\psi(x, t)$$

$$= \left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\epsilon\right)\psi(x, t)$$

$$i\hbar\left(\frac{\psi(x, t+\epsilon) - \psi(x, t)}{\epsilon}\right) = \hat{H}\psi(x, t)$$

当 $\epsilon \to 0$ 时，我们便得到薛定格方程：

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(x, t) \tag{8-24}$$

至此，我们完成了从费曼形式到薛定格形式的推导，并建立起两种形式的对应（见表 8－1）.

在费曼形式下，波函数按传播子方程（8－21a）演化，而传播子用包含经典拉格朗日和作用量的等式（8－21b）～（8－21d）及（8－23c）来计算. 在薛定格形式下，波函数按薛定格方程（8－24）演化，而传播子用包含哈密顿算子的（8－3）、（8－4）和（8－23b）来计算. 哈密顿量算符化是坐标和动量算符化的结果，正如上述对应所示，这是微分形式所要求的. 从数学的角度看，量子力学的费曼形式和薛定格形式反映了物理理论的积分形式和微分形式的特点：对整体路径的积分，应用的是通常的经典物理量；当变成了对局域坐

标的微分后，需要引进相应的量子物理量的算符．从物理学角度看，从整体的积分形式看，用基于经典拉格朗日的路径积分去包括真空涨落的量子效应，实现粒子力学的量子化，表现为对所有的真空量子涨落产生的轨道的求和．从局域的微分形式看，量子化是通过对粒子坐标和动量附加量子化条件，使其算符化来实现的．二者是等价的．这样一来，费曼路径积分提供了一种新的量子化方法，成为规范场量子化的有力工具（见图 8－1）．

表 8－1　费曼形式与薛定格形式的对应

费曼形式	薛定格形式
$L\ (x,\ t)\ =\frac{1}{2}mx^2-V\ (x)$	
$H=\frac{p^2}{2m}+V\ (x)$ 经典量（c－量）	$\hat{H}=\frac{p^2}{2m}+V\ (x)$ 算符（q－量）
$\vec{x}$	$\vec{x}$
$\vec{p}$	$\hat{\vec{p}}=-i\hbar\vec{\nabla}$
$K\ (x,\ t+\varepsilon;\ x_0,\ t)\ =\ (\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon})^{3/2}e^{\frac{i}{\hbar}L(x,t)\varepsilon}$	$K\ (x,\ t+\varepsilon;\ x_0,\ t)\ =e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\varepsilon}\delta\ (x-x_0)$

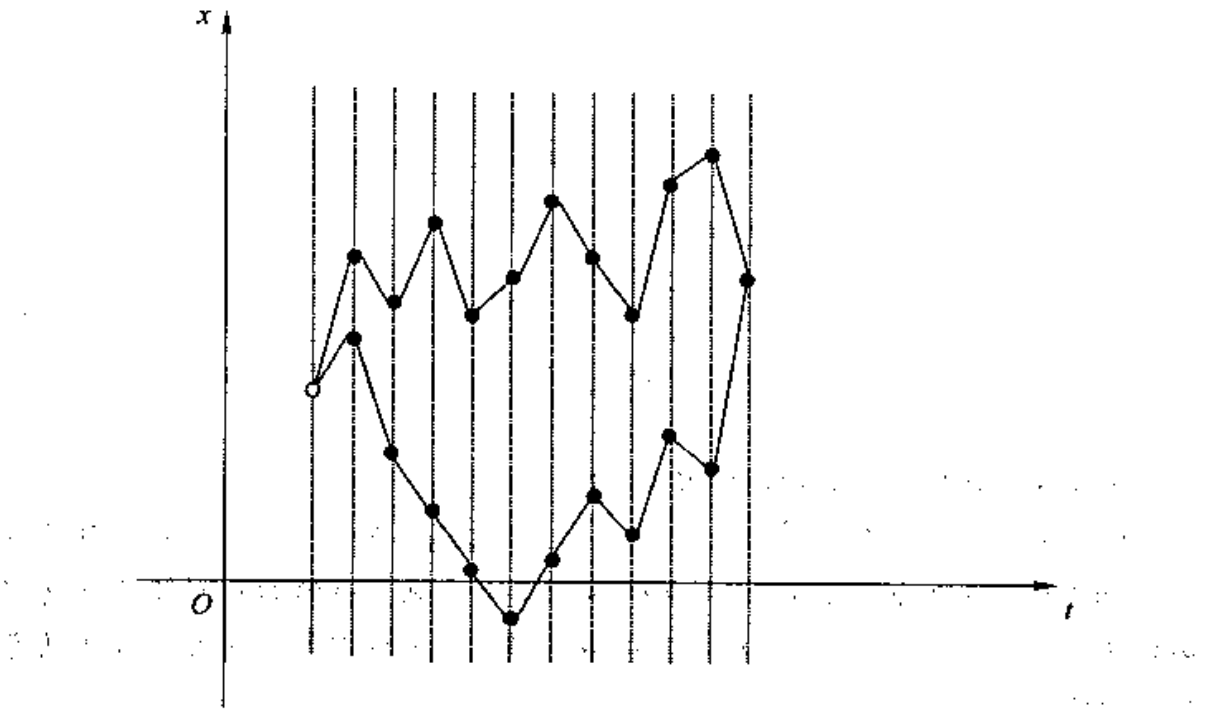


图 8－1　路径积分示意图

8.1.3 相空间的路径积分形式

上面讲的是量子力学在坐标空间的路径积分形式，它很容易变成相空间的路径积分形式. 为此，我们从无限小传播子入手，由（8－23a）式的推导过程可知：

$$\begin{aligned} K(x,t+\varepsilon;x',t) &= <x\mid \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}/\hbar}\mid x'> \\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}\varepsilon}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}L(x,x)\varepsilon} \\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\hat{H}/\hbar}\delta(x-x') \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varepsilon\left(\frac{p^2}{2m}+V(x)\right)/\hbar}\cdot \mathrm{e}^{\mathrm{i}p(x-x')/\hbar}\mathrm{d}\vec{p} \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon\left[p\frac{x-x'}{\varepsilon}-H(x,p)\right]/\hbar}\mathrm{d}\vec{p} \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon L(x,x,p)/\hbar}\mathrm{d}\vec{p} \end{aligned} \tag{8-25}$$

把上式代入（8－20a）式得到

$$\begin{aligned} K(x,t;x_0,t_0) &= C\int \Pi \mathrm{d}x_n\,\mathrm{d}p_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon L(x_n,x_n,p_n)/\hbar} \\ &= C\sum_{\text{all-paths}} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t),x_0(t_0),x(t),p(t)]} \\ &= \int \mathrm{D}x(t)\mathrm{D}p(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x(t),x_0(t_0),x(t),p(t)]} \end{aligned} \tag{8-26a}$$

其中

$$S[x(t),x_0(t_0),x(t),p(t)] = \int_{x_0(t_0)}^{x(t)}[p(t)x(t)-H(x(t),p(t))]\mathrm{d}t \tag{8-26b}$$

这就是传播子在相空间的路径积分表示.

K 的相干态路径积分表示与相空间的路径积分表示十分相似，把相干态 $|\alpha>$ 的完备性条件插入到相干态路径的每一个片断，计算 $\hat{H}$ 在相干态表象的矩阵元，即可得到 K 的相干态路径积分表示：α 的实部与 x 对应，α 的虚部与 p 对应.

8.1.4 费曼的路径积分形式的意义

(1) 费曼的路径积分是整体积分形式. 其表现为:

①波函数的时间演化用积分表达:

$$\psi(x,t)=\int K(x,t;x_0,t_0)\psi(x_0,t_0)\mathrm{d}x_0$$

②积分核 $K(x,t;x_0,t_0)$ 是由 $\{x(t),x_0(t_0)\}$ 两点间的所有路径的整体行为决定的. 量子力学的微分形式——薛定格形式是局域形式,它描述量子态在时空局域的因果联系;而积分形式则是整体形式,它描述量子态的时空整体行为. 物理时空的整体性质(如拓扑性质)对量子态的影响只有用积分形式才便于研究(如 Aharonov-Bohm 效应、Berry 相位等,见第 9 章).

微分形式与积分形式的直接联系是:微分形式的时间演化算子在坐标空间的矩阵元或微分形式的 Green 函数在时空坐标空间的矩阵元给出传播子:

$$K(x',t';x,t)=<x'\mid\hat{U}(t',t)\mid x>=<x',t'\mid\hat{G}\mid x,t> \tag{8-27a}$$

$$\hat{U}(t',t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t'-t)/\hbar} \tag{8-27b}$$

$$\hat{G}=\frac{1}{i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}-\hat{H}} \tag{8-27c}$$

(2) 可以推广到量子场论. 由于拉格朗日 L 可以表述场论系统,并可写成相对论不变形式,因此费曼路径积分可以用于场的量子化,成为规范场理论量子化的有力工具.

(3) 有利于研究系统的对称性. 由于 L 的变换不变性体现了系统的对称性和守恒律,因此费曼路径积分形式对研究系统的对称性和守恒律特别有效,成为研究规范场约束条件的有力工具.

(4) 揭示量子过程的随机性. 量子力学路径积分形式不但揭示了量子过程的波动属性,而且揭示出这是一种量子涨落产生的随机波的传播. 除能量守恒的经典轨道外,其他轨道的能量是不守恒的. 因此,量子过程是量子涨落产生的各种能量的随机波传播、叠加,与历史无关的马尔科夫过程,正如式子(8-21a)这一典型的马尔科夫过程所示的那样. 然而,这里是在波动层次上的随机性[4-5],而 Nelson 形式则是在粒子坐标层次上把量子力学表述为随机的粒子的动力学过程[3].

(5) 计算传播子的 Monte－Carlo 方法. 现代计算机的快速发展，使路径积分的数值计算成为可能. 用 Monte－Carlo 方法计算传播子，大大扩大了量子论的运用范围.

8.2 量子场论的路径积分方法[7-8]

从粒子的量子力学可知，在用路径积分计算传播子的同时，实现了对粒子力学的量子化. 因此，推广到场，我们可以用它来实现场的量子化并计算场的传播子. 现以自由标量场为例作一简单介绍.

为了定义路径积分，对粒子，我们要把粒子的坐标在时空上离散化；对场，我们也需把场的广义坐标——场函数在时空上离散化：

粒子坐标在时空上离散化　　场的广义坐标 —— 场函数在时空上离散化

$$x_i(t_i) \qquad\qquad \varphi(x_i,t_i) \tag{8-28a}$$

由于场在空间的离散点是无穷的，所以场可看成是无穷多粒子（自由度）的系统. 用路径积分表示传播子，可以类似地写出：

粒子的传播子　　场的传播子

$$\begin{aligned} K(x',t';x,t) &= \int \Pi \mathrm{d}x_i \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum L(x_i,x_i)\varepsilon} \quad K(\varphi(x',t');\varphi(x,t)) = \int \Pi_i \mathrm{d}\varphi(x_i,t_i)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_i L(\varphi_i,\varphi_i)\Delta x\Delta t} \\ &= \int \mathrm{D}x(t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[x'(t'),x(t)]} \qquad\qquad = \int \mathrm{D}\varphi(x,t)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S[\varphi(x',t'),\varphi(x,t)]} \end{aligned} \tag{8-28b}$$

其中：

$$\text{粒子} S[x'(t'),x(t)] = \int_{x(t)}^{x'(t')} L(x(t),\dot{x}(t))\mathrm{d}t \tag{8-28c}$$

$$\text{场：} S[\varphi(x',t'),\varphi(x,t)] = \int_{\varphi(x,t)}^{\varphi(x',t')} L(\varphi(x,t),\dot{\varphi}(x,t))\mathrm{d}x\mathrm{d}t \tag{8-28d}$$

状态的时空演化：

$$\text{粒子：}\quad \psi(x',t') = \int K(x',t';x,t)\psi(x,t)\mathrm{d}x \tag{8-29a}$$

$$\text{场：}\quad \Psi(\varphi(x',t')) = \int K(\varphi(x',t'),\varphi(x,t))\Psi(\varphi(x,t))\mathrm{d}\varphi(x,t) \tag{8-29b}$$

用路径积分计算生成泛函和用生成泛函计算单（多）粒子格林函数，在量子场论中要详细讨论，这里从略.

8.3 统计物理中的路径积分[9]

统计物理中配分函数的计算涉及

$$Z = Tr(e^{-\hat{H}\beta}) = \int dx < x \mid e^{-\hat{H}\beta} \mid x > \qquad (8-30)$$

其中，$\hat{H}$是多体系统的哈密顿量，$\beta = \frac{1}{kT}$. 如对 β 作解析延拓：

$$\beta = it \qquad (8-31)$$

即把它看成虚时间，则 Z 可以用路径积分方法计算，但需对所有闭合路径求和. 反之，在 L 中令 $t \to -it$，则

$$L = \frac{p^2}{2m} - V(x) \quad \to \quad -\frac{p^2}{2m} - V(x) = -H \qquad (8-32)$$

因此，虚时路径积分给出温度配分函数的路径积分表示.

【参考文献】

Ⅰ 量子力学路径积分形式

1 R.P. Feynman. Rev.Mod.Phys. 1948,20:367

2 R.P. Feynman and A. Ribbs. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York:McGraw Hill,1965

Ⅱ 量子力学与量子场论的量子化的随机形式

3 E.Nelson. Phys.Rev. 1966,110(4):1079

4 G. Parisi and Wu Yongshi, Scientia Sinica. 1981,24(4):35~48

5 Stochastic Quantization, edited by P. H. Damgaard and H. Hueffel. World Scientific Publishing,1988

Ⅲ 经典分析力学

6 H. Goldstein. Classical Mechanics. second edition. Addison - Welsley Publishing Co,1980

Ⅳ 量子场论的路径积分量子化

7 C. Itzykson and J - B Zuber. Quantum Field Theory. Vol. I &II. McGraw Hill Inc.,1980

8 戴元本. 相互作用的规范理论. 科学出版社，1987

9 郝柏林，于渌. 统计物理学进展. 科学出版社，1981

第 9 章　量子力学的几何相位

9.1　引　言

量子力学波函数中的相位，在理论描述中是必不可少的，因为任何波动一般必须包含振幅和相位两个要素，量子力学的几率波也不能例外．这种必要性也表现在，量子力学波函数一般必须是复函数，因为复函数的三角表示正好包含振幅和相位两个要素．然而，长期以来，人们对量子力学波函数中相位的重要性及其客观意义缺乏深刻的认识，甚至有时予以忽视．

Aharonov－Bohm（AB）效应（1959）和 Berry 相位（1984）的发现，是物理学的重要成就，它促使人们对物理学基本问题，特别是量子力学几何相位问题开展深入的研究．AB 效应和 Berry 相位提出了下列基本问题：

(1) 电磁理论的基本问题是，电磁场强度（$\vec{E}$，$\vec{B}$）基本，还是电磁势 A_μ 基本？A_μ 是客观的吗？可观测吗？

(2) 量子力学的基本问题是，波函数的相位是客观的吗？可观测吗？

(3) 电磁势 A_μ 与波函数的相位有什么关系？

(4) 电磁势 A_μ 和波函数的相位与物理空间的性质有什么关系？

(5) 物理空间的几何效应，除了引力效应外，还有哪些？可观测吗？如何描述？

对上述问题的研究，构成了现代理论物理学的研究前沿之一，它加深了人们对物理学基本问题的了解，促进了对物理空间整体性质的认识和拓扑量子力学的发展．

9.2 AB效应、AS效应与磁通量子化

9.2.1 AB效应[1]

1959年，Y. Aharonov 和 D. Bohm 从理论上预言了 AB 效应（Phys. Rev. 1959，115：485），R. G. Chambers 在1960年做实验证实了该效应的存在（Phys. Rev. 1960，5：3）.

考虑电子通过双缝的干涉实验，双缝后面有一细长的螺线管，如图 9－1 所示.

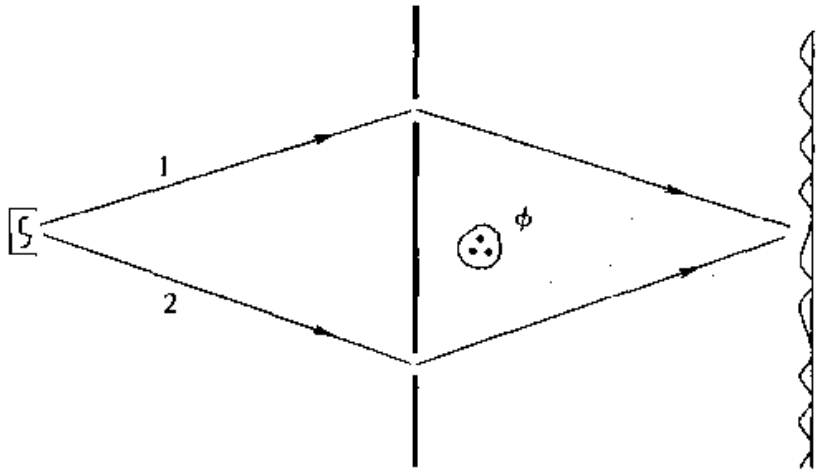


图 9－1 AB效应实验示意图

电子的哈密顿量和定态薛定格方程为

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(-i\hbar\vec{\nabla}-\frac{q}{c}\vec{A}(\vec{r}))^2 \tag{9-1}$$

$$\hat{H}\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}) \tag{9-2}$$

当$\vec{A}=0$时，其解为

$$\psi_0(\vec{r})\sim e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{9-3a}$$

当$\vec{A}\neq 0$时，其解为

$$\psi(\vec{r})=e^{iS(\vec{r})/\hbar}\psi_0(\vec{r}) \tag{9-3b}$$

$$S(\vec{r})=\frac{q}{c}\int_0^{\vec{r}}\vec{A}(\vec{r})\cdot d\vec{l} \tag{9-3c}$$

其中，式（9－3c）中$S(\vec{r})$是沿起点和终点为（0，$\vec{r}$）的某一路径的积分. 对

不同路径，波函数获得的相位不同，它们是：

沿轨道 1：
$$\psi_1(\vec{r}) = e^{iS_1(\vec{r})/\hbar}\psi_0(\vec{r}_1) \tag{9-4a}$$

沿轨道 2：
$$\psi_2(\vec{r}) = e^{iS_2(\vec{r})/\hbar}\psi_0(\vec{r}_2) \tag{9-4b}$$

ψ_1 与 ψ_2 的相位差为

$$\begin{aligned}\gamma &= (S_1 - S_2)/\hbar \\ &= \frac{q}{c\hbar}\oint \vec{A}(\vec{r})\cdot \mathrm{d}\vec{l} \\ &= \frac{q}{c\hbar}\iint \vec{B}\cdot \mathrm{d}\vec{\sigma} = \frac{q\phi}{c\hbar}\end{aligned} \tag{9-5}$$

ϕ 为轨道 1 与 2 所包围区域内的磁通，即螺线管内的磁通．请注意，γ 具有规范不变性．事实上，在规范变换下，γ 的确不变：

$$\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\alpha \tag{9-6a}$$

$$\gamma \to \gamma' = \frac{q}{c\hbar}\oint \vec{A}'\cdot \mathrm{d}\vec{l} = \frac{q}{c\hbar}\iint [\vec{B} + \vec{\nabla}\times\vec{\nabla}\alpha]\cdot \mathrm{d}\vec{\sigma} = \gamma \tag{9-6b}$$

电子波在屏上的干涉图样由两列波 ψ_1 与 ψ_2 的相干强度决定：

$$\begin{aligned}I(\vec{p},\gamma) &= (\psi_1 + \psi_2)^2/2 \\ &= |\psi_0(\vec{r}_1)e^{i\gamma} + \psi_0(\vec{r}_2)|^2/2 \\ &= 1 + \frac{1}{2}(e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)/\hbar + i\gamma} + C.C) \\ &= 1 + \cos[\vec{p}\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)/\hbar + \gamma]\end{aligned} \tag{9-7}$$

从（9－7）式可知，螺线管内磁通的变化通过改变 γ 可使干涉条纹发生移动．实验证实了上述理论的推断．这表明，螺线管外虽然不存在磁场 $\vec{B}$，但却存在电磁势 $\vec{A}$，其大小由于规范变换而不确定，但沿一路径的积分之差却是确定的，对波函数贡献一相位，能产生物理效应．因此，在微观世界，$\vec{A}$ 比 $\vec{B}$ 更基本，与波函数相位一样，具有可观测的物理效应．应当指出，γ 是两列波相位之差，不是电子绕一个闭合回路相位的变化，不存在波函数单值性的要求对磁通变化的限制（磁通量子化）问题，磁通可连续变化．

9.2.2 AS 效应[2]

1967 年，Y. Aharonov 和 L. S. Susskind 从理论上推断，中子经过磁场时，其自旋波函数产生进动，相位发生的变化会产生可观测的物理效应；而且由于中子自旋为 1/2，当中子进动绕回路一周时，相位变化为 π，这使波函数

改变一符号（Phys. Rev. 1967，158：1237）. 这一推断在70年代也被实验证实，叫做AS效应.

如图9－2所示，把图9－1中的螺线管换成一对磁极，并置于轨道1中.

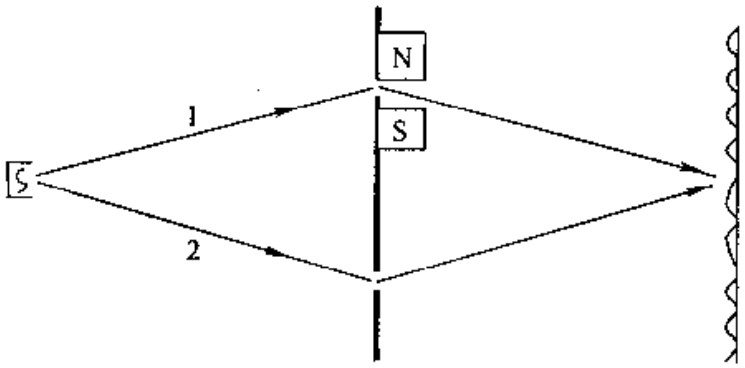


图9－2　AS效应实验示意图

沿轨道1的中子在磁场中会进动，若磁场沿 y 方向，则自旋波函数满足的运动方程为

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t}=\hat{H}\chi \tag{9-8a}$$

$$\hat{H}=\mu_n\vec{B}\cdot\vec{\sigma}=\mu_nB\sigma_y=\hbar\,\omega\frac{\sigma_y}{2},\text{或}\,\omega=2\mu_nB/\hbar \tag{9-8b}$$

其中 μ_n 为中子的磁矩. 考虑 σ_z 的本征态：

$$\sigma_z\mid m\rangle=m\mid m\rangle,m=\pm1 \tag{9-9}$$

初态为$\mid m\rangle$ 态的时间演化为

$$\begin{aligned}\chi_m(t)&=\mathrm{e}^{-i\frac{1}{2}\sigma_y\omega t}\mid m\rangle\\&=\sum_{m'}d^{1/2}_{m'm}(\omega t)\mid m'\rangle\end{aligned} \tag{9-10}$$

其中 d 函数$d^{1/2}_{m'm}(\omega t)=\langle m\mid\mathrm{e}^{-\frac{i}{2}\sigma_y\omega t}\mid m'\rangle$可从函数表查到. 中子的总体波函数为空间部分与自旋部分之乘积，即

$$\psi(\vec{r},m)=\psi_0(\vec{r})\chi_m \tag{9-11a}$$

因为均匀磁场只引起中子自旋进动，不影响中子在坐标空间的运动，故空间部分波函数为平面波：

$$\psi_0(\vec{r})=\mathrm{e}^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} \tag{9-11b}$$

控制沿轨道1的中子穿过磁场的时间 Δt，使

$$\gamma=\omega\Delta t=2\pi \tag{9-12}$$

则

$$d^{1/2}_{m'm}(2\pi) = -\delta_{m'm} \tag{9-13a}$$

$$\chi_m(\omega\Delta t = 2\pi) = -|m\rangle \tag{9-13b}$$

沿轨道2的中子不穿过磁场，自旋波函数无进动，因而不变，仍为$|m\rangle$. 中子在屏上的干涉图样由两列波的相干强度决定：

$$I_m(\gamma = 2\pi) = \frac{1}{2}\| m\rangle\psi_0(\vec{r}_1) - |m\rangle\psi_0(\vec{r}_2)|^2$$

$$= 1 + \sin\vec{p}\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)/\hbar \tag{9-14a}$$

当无磁场时，$\omega = 2B = 0$，$\gamma = 0$，

$$I_m(\gamma = 0) = \frac{1}{2}\| m\rangle\psi_0(\vec{r}_1) + |m\rangle\psi_0(\vec{r}_2)|^2$$

$$= 1 + \cos\vec{p}\cdot(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)/\hbar \tag{9-14b}$$

两种情况下，干涉条纹的峰谷发生移动，能清楚显示出AS效应. AS效应表明，自旋波函数的相位也具有物理意义. 在普通空间中转动一周，自旋波函数并不回到原值，而是改变一符号，绕两周才回到原值，自旋空间的角周期为4π.

9.2.3 磁通量子化[3]

设电子（或超导体中的电子对）在一个介观圆环中运动，其电荷为q. 在圆环内置一个细长的螺线管，通电流后，螺线管内有磁场$\vec{B}$；管外虽无磁场，但有电磁势$\vec{A}$，如图9-3所示. 与AB效应类似地考虑，设$\vec{B} = 0$，$\vec{A} = 0$时，

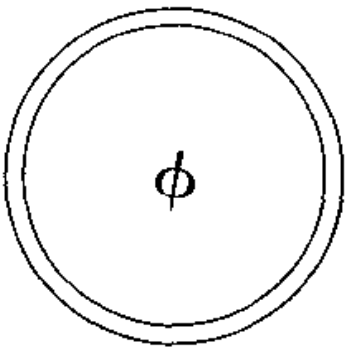


图9-3 磁通量子化实验示意图

电子（电子对）的波函数为$\psi_0(\vec{r})$. 当$\vec{B} \neq 0$，$\vec{A} \neq 0$时，

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r})e^{iS(r)/\hbar} \tag{9-15a}$$

$$S(\vec{r}) = \frac{q}{c}\int_0^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}) \cdot \mathrm{d}\vec{l} \tag{9-15b}$$

计算一个电子（对）绕圆环一圈后其波函数相位的变化，得到

$$\gamma = \frac{q\phi}{c\hbar} \tag{9-16}$$

其中 ϕ 为磁通. 由于电子（对）绕圆环一圈时，自旋波函数 χ 未变（因为 $B=0$，自旋无进动），空间波函数 $\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r})\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}$，总波函数的单值性要求

$$\psi(\varphi = 0) = \psi_0\chi = \psi_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}\chi = \psi(\varphi = 2\pi) \tag{9-17a}$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma} = 1,\ \gamma = 2n\pi \tag{9-17b}$$

这就导致磁通量子化：

$$\phi = \frac{c\hbar}{q}2n\pi = n\frac{ch}{q} \tag{9-18}$$

(9-18) 式表示，磁通以其量子$\frac{ch}{q}$的整倍数改变，即磁通是量子化的. 因此，磁通量子化是电磁势$\vec{A}$与电子（电子对）的量子运动相互作用、相互耦合的结果，密切依赖于电子（电子对）的运动状态. 在 AB 效应中，涉及两列电子波的相干，磁通可以连续变化，并不量子化；而在此处，涉及电子（电子对）稳定的定态运动，电子（电子对）波函数的单值性导致磁通量子化.

以上讨论的是物理空间存在电磁势（场）时，使带电粒子或具有磁矩的中性粒子的波函数在坐标空间或自旋空间产生了一个附加的相位，导致可观测的物理效应. 这表明：①A_μ 更基本；②A_μ 与带电粒子耦合产生的波函数的相位具有可观测的物理效应.

接下来要讨论的是，当哈密顿量包含与时间有关的参数时，其本征态仿射的希伯特空间以参数空间为底空间，态矢沿弯曲的参数底空间平移时也会产生附加的相位，导致可观测的物理效应.

一般地，当与量子系统及其态矢耦合的物理因素周期性变化时，都有可能使波函数产生附加相位，导致可观测的物理效应.

9.3 Berry 相位[4-8]

9.3.1 含时哈密顿量的瞬时本征值问题

量子系统与外界相互作用可以用包含若干含时参数的哈密顿量来描述：

$$\begin{cases}\hat{H}(\vec{r},t)=\hat{H}(\vec{r},\vec{R}(t)),\\ \vec{R}(t)=\{R_i(t),\ i=1,2,\cdots,n\}\end{cases}\tag{9-19}$$

其中$\vec{r}$是粒子坐标，$\vec{R}(t)$是参数空间的矢量，与时间有关．这样的系统称为非自治量子系统．

该系统的瞬时本征态方程为

$$\hat{H}(\vec{R}(t))\mid n(\vec{R})\rangle=E_n(\vec{R})\mid n(\vec{R})\rangle \tag{9-20a}$$

其解$E_n(\vec{R})$，$\mid n(\vec{R})\rangle$依赖于参数$\vec{R}$，$\mid n(\vec{R})\rangle$满足正交、归一、完备性条件：

$$\langle m(\vec{R})\mid n(\vec{R})\rangle=\delta_{mn} \tag{9-20b}$$

$$\sum_n \mid n(\vec{R})\rangle\langle n(\vec{R})\mid=I \tag{9-20c}$$

对(9-20a)和(9-20b)施行$\vec{R}$空间的梯度运算可得

$$E_m\langle m\mid\vec{\nabla}\ n\rangle+\langle m\mid\vec{\nabla}\hat{H}\mid n\rangle=E_n\langle m\mid\vec{\nabla}\ n\rangle \tag{9-21a}$$

$$\langle m\mid\vec{\nabla}\ n\rangle=\langle m\mid\vec{\nabla}\hat{H}\mid n\rangle/(E_n-E_m) \tag{9-21b}$$

$$\langle\vec{\nabla}\ m\mid n\rangle+\langle m\mid\vec{\nabla}\ n\rangle=0 \tag{9-22a}$$

$$\langle\vec{\nabla}\ m\mid n\rangle=-\langle m\mid\vec{\nabla}\ n\rangle \tag{9-22b}$$

上述各种量都是$\vec{R}(t)$的函数，$\langle m\mid\vec{\nabla}n\rangle$等是$\vec{R}$空间的矢量．

9.3.2 含时量子系统的时间演化

该系统的与时间有关的薛定格方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mid\psi(t)\rangle=\hat{H}(\vec{R}(t))\mid\psi(t)\rangle \tag{9-23}$$

可在瞬时本征态$\mid n(\vec{R}(t))\rangle$表象中求解．

令
$$\mid\psi(t)\rangle=\sum_n a_n(t)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_n(\vec{R}(\tau))d\tau}\mid n(\vec{R}(t))\rangle \tag{9-24a}$$

代入(9-23)式，左乘$\langle n(\vec{R}(t))\mid$并利用正交、归一性条件(9-20b)式可得

$$\dot{a}_n(t)=-a_n(t)\langle n(\vec{R}(t))\mid\frac{\partial}{\partial t}n(\vec{R}(t))\rangle$$

$$-\sum_{m\neq n}a_m(t)e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t[E_n(\tau)-E_m(\tau)]d\tau}\langle n(\vec{R}(t))\mid\frac{\partial}{\partial t}m(\vec{R}(t))\rangle$$

$$= - a_n(t)\langle n(\vec{R}(t)) \mid \frac{\partial}{\partial t} n(\vec{R}(t))\rangle$$

$$- \sum_{m \neq n} a_m(t) e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t [E_n(\tau) - E_m(\tau)]d\tau} \dot{\vec{R}} \cdot \langle n(\vec{R}(t)) \mid \vec{\nabla} m(\vec{R}(t))\rangle$$

$$= - a_n(t)\langle n(\vec{R}(t)) \mid \frac{\partial}{\partial t} n(\vec{R}(t))\rangle$$

$$- \sum_{m \neq n} a_m(t) e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t [E_n(\tau) - E_m(\tau)]d\tau} \frac{\dot{\vec{R}} \cdot \langle n(\vec{R}(t)) \mid \vec{\nabla} \hat{H} \mid m(\vec{R}(t))\rangle}{E_n(\vec{R}(t)) - E_m(\vec{R}(t))} \tag{9-24b}$$

上式的推导中用到（9－21b）式和下式表示的复合函数的微商：

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{\vec{R}} \cdot \vec{\nabla} \tag{9-24c}$$

（9－24b）式仍是严格的，与（9－23）式等价.

9.3.3 绝热近似

（9－24b）式的第二项代表参数变化（$\dot{\vec{R}} \neq 0$）导致的绝热能级 $|m\rangle \to |n\rangle$ 跃迁的贡献，正比于参数变化率 $\dot{\vec{R}}$ 和哈密顿量在参数空间的梯度 $\vec{\nabla}\hat{H}(\vec{r},\vec{R})$ 的内积. 当参数变化率与绝热能级跃迁频率相比十分缓慢，且满足

$$\left| \frac{\dot{\vec{R}} \cdot \langle n(\vec{R}(t)) \mid \vec{\nabla} \hat{H} \mid m(\vec{R}(t))\rangle}{E_n(\vec{R}(t)) - E_m(\vec{R}(t))} \right| \ll \left| \langle n(\vec{R}(t)) \mid \frac{\partial}{\partial t} n(\vec{R}(t))\rangle \right|$$

或

$$|\dot{\vec{R}}| / |\vec{R}| \ll \omega_{nm} = |E_n(\vec{R}) - E_m(\vec{R})| / \hbar \tag{9-25}$$

（因 $|\langle \vec{\nabla}\hat{H}\rangle| \sim |\langle \hat{H}\rangle| / |\vec{R}| \sim |\langle |\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\rangle| / |\vec{R}|$）时，第二项绝热能级 $|m\rangle \to |n\rangle$ 的跃迁可以略去，因而有绝热近似：

$$\dot{a}_n(t) = - a_n(t)\langle n(\vec{R}(t)) \mid \frac{\partial}{\partial t} n(\vec{R}(t))\rangle \tag{9-26}$$

上式的解为

$$a_n(t) = e^{i\gamma_n(t)} a_n(0) \tag{9-27a}$$

$$\gamma_n(t) = i\int_0^t \mathrm{d}t' \langle n(\vec{R}(t')) \mid \frac{\partial}{\partial t} n(\vec{R}(t')) \rangle \qquad (9-27b)$$

当初始时刻系统处于绝热能级$|n\rangle$时，相应的初始条件$a_n(0)=1$的解为

$$\begin{aligned} \psi_n(t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma_n(t)} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}\tau E_n(R(\tau))} \mid n(\vec{R}(t)) \rangle \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\gamma_n(t)-\gamma_n^d(t))} \mid n(\vec{R}(t)) \rangle \end{aligned} \qquad (9-28a)$$

$$\gamma_n^d(t) = \frac{1}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}\tau E_n(\vec{R}(\tau)) \qquad (9-28b)$$

从 (9－22b) 式知$\langle n(\vec{R}(t)) \mid \frac{\partial}{\partial t} n(\vec{R}(t)) \rangle$为纯虚数，故$\gamma_n(t)$为实，称为 Berry 相位或几何相位；而$\gamma_n^d(t)$称为动力学相位. 二者之差为$\phi_n(t)$，且

$$\phi_n(t) = \gamma_n(t) - \gamma_n^d(t) \qquad (9-28c)$$

称为总相位.

9.3.4 绝热 Berry 相位

Berry 考虑$\vec{R}(t)$是 t 的周期函数的情况：$\vec{R}(T)=\vec{R}(0)$. 在一个周期内，$\vec{R}(t)$在参数空间沿闭合轨道 C 走一圈，Berry 相位为

$$\gamma_n(C) = i\int_0^T \mathrm{d}t \frac{\mathrm{d}\vec{R}(t)}{\mathrm{d}t} \langle n(\vec{R}(t)) \mid \vec{\nabla}_R n(\vec{R}(t)) \rangle \qquad (9-29a)$$

$$= i\oint \mathrm{d}\vec{R} \cdot \langle n(\vec{R}) \mid \vec{\nabla}_R n(\vec{R}) \rangle$$

$$= \oint \mathrm{d}\vec{R} \cdot \vec{A}_n(\vec{R}) \qquad (9-29b)$$

其中$\vec{A}_n(\vec{R})$为波函数在$\vec{R}$空间变化时诱导出的规范势，其定义为

$$\vec{A}_n(\vec{R}) = i\langle n(\vec{R}) \mid \vec{\nabla}_R n(\vec{R}) \rangle \qquad (9-29c)$$

若$\vec{R}$空间是三维的，则利用 Stokes 定理有

$$\gamma_n(C) = \iint_S \mathrm{d}\vec{S} \cdot \vec{B}_n(\vec{R}) \qquad (9-30a)$$

S 是 C 所包围的曲面，$\vec{B}_n(\vec{R})$是诱导的$\vec{R}$空间中的规范场，定义为

$$\vec{B}_n(\vec{R}) = \vec{\nabla}_R \times \vec{A}_n(\vec{R}) \qquad (9-30b)$$

$\vec{A}_n(\vec{R})$像电磁场的矢量势，$\vec{B}_n(\vec{R})$像磁场强度，$\gamma_n(C)$由 C 所包围的曲面 S 的“磁通”决定. 下面将看到，当$\vec{R}$空间存在“磁单极”或 C 包围着像螺线管一样的“磁力线”时，曲面 S 的“磁通”因而 Berry 相位$\gamma_n(C)$才不为零.

另一方面，磁场强度$\vec{B}_n(\vec{R})$与能级交叉有关．为此，进一步计算$\vec{B}_n(\vec{R})$：

$$
\begin{aligned}
(\vec{B}_n(\vec{R}))_i &= (\vec{\nabla}_R \times \vec{A}_n(\vec{R}))_i \\
&= i\varepsilon_{ijk}\partial_j \langle n(\vec{R}) \mid \partial_k n(\vec{R})\rangle \\
&= i\varepsilon_{ijk}\langle \partial_j n(\vec{R}) \mid \partial_k n(\vec{R})\rangle \\
&= i\varepsilon_{ijk}\sum_m \langle \partial_j n(\vec{R}) \mid m(\vec{R})\rangle\langle m(\vec{R}) \mid \partial_k n(\vec{R})\rangle \\
&= i\varepsilon_{ijk}\sum_{m\neq n} \frac{\langle n(\vec{R}) \mid \partial_j H(\vec{R}) \mid m(\vec{R})\rangle\langle m(\vec{R}) \mid \partial_k H(\vec{R}) \mid n(\vec{R})\rangle}{(E_n(\vec{R}) - E_m(\vec{R}))^2} \\
&= -\operatorname{Im}\sum_{m\neq n} \frac{(\langle n(\vec{R}) \mid \vec{\nabla}_R H(\vec{R}) \mid m(\vec{R})\rangle \times \langle m(\vec{R}) \mid \vec{\nabla}_R H(\vec{R}) \mid n(\vec{R})\rangle)_i}{(E_n(\vec{R}) - E_m(\vec{R}))^2}
\end{aligned}
\tag{9-31}
$$

$$
\vec{B}_n(\vec{R}) = -\operatorname{Im}\sum_{m\neq n} \frac{\langle n(\vec{R}) \mid \vec{\nabla}_R H(\vec{R}) \mid m(\vec{R})\rangle \times \langle m(\vec{R}) \mid \vec{\nabla}_R H(\vec{R}) \mid n(\vec{R})\rangle}{(E_n(\vec{R}) - E_m(\vec{R}))^2}
\tag{9-32}
$$

上式的推导用到ϵ_{ijk}的反对称性以及等式 (9－21b)、(9－22b)．该式表现了能级交叉的奇异性对应的“磁荷”产生“磁场”的过程．

9.3.5 一个例子：自旋为 1/2 的粒子在转动磁场中的运动

该系统的哈密顿量为

$$
H(\vec{R}(t)) = -\mu\vec{\sigma}\cdot\vec{R}(t) = -\mu[\sigma_x X(t) + \sigma_y Y(t) + \sigma_z Z(t)]
\tag{9-33a}
$$

三维空间的转动磁场为

$$
\begin{aligned}
\vec{R}(t) &= R(\sin\theta\cos\phi(t), \sin\theta\sin\phi(t), \cos\theta) \\
&= (X(t), Y(t), Z(t)) \qquad (9-33b)
\end{aligned}
$$

$$
R = (X^2 + Y^2 + Z^2)^{1/2} \qquad (9-33c)
$$

瞬时绝热本征能量为

$$
|-\mu\vec{\sigma}\cdot\vec{R} - E| = 0 \qquad (9-34a)
$$

$$
\begin{vmatrix} Z - E & X - iY \\ X + iY & -Z - E \end{vmatrix} = 0 \qquad (9-34b)
$$

$$
E_m(\vec{R}) = m\mu R \quad (m = \pm 1) \qquad (9-34c)
$$

下面计算 Berry 相位. 由于

$$\vec{\nabla}_R H(\vec{R}) = -\mu\vec{\sigma} \tag{9-35}$$

计算矩阵元时，若令$\vec{R}$为 z 方向，则

$$\sigma_z|\pm\rangle = \pm|\pm\rangle,\ \sigma_x|\pm\rangle = |\mp\rangle,$$

$$\sigma_y|\pm\rangle = \pm i|\mp\rangle, \tag{9-36a}$$

$$\langle m|m'\rangle = \delta_{mm'}, \tag{9-36b}$$

$$\begin{aligned}\langle +|\vec{\nabla}_R H|-\rangle \times \langle -|\vec{\nabla}_R H|+\rangle &= \mu^2[\langle +|\vec{\sigma}|-\rangle \times \langle -|\vec{\sigma}|+\rangle] \\ &= \mu^2[\vec{e}_x(\langle +|\sigma_y|-\rangle\langle -|\sigma_z|+\rangle - \\ &\quad \langle +|\sigma_z|-\rangle\langle -|\sigma_y|+\rangle) + \\ &\quad \vec{e}_y(\langle +|\sigma_z|-\rangle\langle -|\sigma_x|+\rangle - \\ &\quad \langle +|\sigma_x|-\rangle\langle -|\sigma_z|-\rangle) + \\ &\quad \vec{e}_z(\langle +|\sigma_x|-\rangle\langle -|\sigma_y|+\rangle - \\ &\quad \langle +|\sigma_y|-\rangle\langle -|\sigma_x|+\rangle)] \\ &= \mu^2(0\vec{e}_x + 0\vec{e}_y + 2i\vec{e}_z) \\ &= 2i\mu^2\frac{\vec{R}}{R}\end{aligned} \tag{9-37a}$$

$$\begin{aligned}\langle -|\vec{\nabla}_R H|+\rangle \times \langle +|\vec{\nabla}_R H|-\rangle &= \mu^2[\langle -|\vec{\sigma}|+\rangle \times \langle +|\vec{\sigma}|-\rangle] \\ &= \mu^2(0\vec{e}_x + 0\vec{e}_y - 2i\vec{e}_z) \\ &= -2i\mu^2\frac{\vec{R}}{R}\end{aligned} \tag{9-37b}$$

$$(E_+(\vec{R}) - E_-(\vec{R}))^2 = 4\mu^2R^2 \tag{9-38}$$

从（9－32）式得到两个能级对应的“磁单极”产生的“磁场”：

$$\vec{B}_+ = -\frac{\vec{R}}{2R^3} \tag{9-39a}$$

$$\vec{B}_- = +\frac{\vec{R}}{2R^3} \tag{9-39b}$$

式子（9－39a）、（9－39b）像位于原点（$R=0$）的磁单极产生的磁场，由此可得

$$\gamma_\pm(C) = \oint_S \mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{B}_\pm(\vec{R}) = \mp\frac{1}{2}\Omega(C) \tag{9-40a}$$

式中，$\Omega(C)$为从 $R=0$ 看曲线 C 所张的立体角．容易算出

$$\Omega(C)=2\oint\!\!\!\oint_S |\mathrm{d}\vec{S}\cdot\vec{B}|=\oint\!\!\!\oint_S \mathrm{d}\Omega R\vec{R}\cdot\frac{\vec{R}}{R^3}$$

$$=\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\int_0^{\theta}\sin\theta\mathrm{d}\theta=2\pi(1-\cos\theta) \qquad (9-40\mathrm{b})$$

计算哈密顿量（9－33）式的绝热（瞬时）本征解后，再用（9－27b）式计算 $\gamma_{\pm}$，给出同样的结果．

9.3.6 非绝热 Berry 相位[9－11]

从（9－28c）式可知，Berry 相位可从总相位和动力学相位计算：

$$\gamma_n(t)=\phi_n(t)+\gamma_n^d \qquad (9-41\mathrm{a})$$

$$\gamma_n^d(t)=\frac{1}{\hbar}\int_0^t\mathrm{d}\tau E_n(\vec{R}(\tau)) \qquad (9-41\mathrm{b})$$

（9－41）式便于推广到非绝热情况，计算非绝热 Berry 相位．此时，$|n(t)\rangle$应是时间有关薛定格方程的精确解（而非绝热解），而$E_n(t)$是 $H(t)$在该态上的平均值：

$$E_n(t)=\int_0^t\langle n(\tau)|H(\tau)|n(\tau)\rangle\mathrm{d}\tau \qquad (9-41\mathrm{c})$$

对周期性变化的哈密顿量$H(t)$，容易计算一个周期的$\phi_n(T)$和 $\gamma_n^d(T)$，由（9－41a）式得非绝热 Berry 相位．具体例子见第 10 章．

9.3.7 非绝热非周期性几何相位——Pancharatnam 几何相位[12－13]

Pancharatnam 定义了非绝热非周期性光路中光波的相位比较．推广到量子力学，设系统的初态波函数为$\psi(t_0)$，按照薛定格方程演化到时刻 t 的波函数为$\psi(t)$．对初态波函数的相位增量定义为

$$\phi_{pan}(t_0\to t)=\arg\langle\psi(t)|\psi(t_0)\rangle \qquad (9-42\mathrm{a})$$

从哈密顿量对该波函数的平均值可计算动力学相位

$$\gamma^d(t_0\to t)=\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^t\langle\psi(\tau)|H(\tau)|\psi(\tau)\rangle\mathrm{d}\tau \qquad (9-42\mathrm{b})$$

Pancharatnam 几何相位为

$$\gamma_{pan}(t_0\to t)=\phi_{pan}(t_0\to t)+\gamma^d(t_0\to t) \qquad (9-42\mathrm{c})$$

研究表明，Pancharatnam几何相位比Berry相位更一般，除了按（9－27b）式计算的贡献外，还有额外的部分.

9.3.8 几何相位的量子经典对应——Hannay角[14－15]

如果一个非自治量子系统有经典对应，则量子系统的几何相位有经典对应. 对于绝热的周期性演化，量子系统的几何相位的经典对应是Hannay角：在经典非自治系统的绝热动力学演化中，系统参数随时间的变化也会在作用量对应的角变量中产生一个附加的几何增量——Hannay角 θ_H，它与Berry相位 $\gamma(I)$的关系是

$$\theta_H = \frac{\partial \gamma(I)}{\partial I} \tag{9-43}$$

其中 I 是作用量运动常数（量子数）.

对量子系统的几何相位的研究已成为物理学的一个重要前沿. 在原子分子物理、量子光学、凝聚态物理和核物理等学科的研究中，量子几何相位的存在已获得实验的证实，并开始获得应用. 特别是近年来，人们正在研究如何利用量子几何相位做成具有抗环境辐射退相干效应的量子逻辑门.

9.4 物理空间的几何效应与规范场[5,6,17,18]

9.4.1 物理空间

物理空间是存在电磁场、引力场、其他物理场或物理介质的空间，是真空加上局部区域存在的物理场或物理介质. 这种物理空间的性质不同于真空. AB效应、AS效应、Berry相位等是由于物理空间在局部区域存在物理场或物理介质，造成波函数（Hilbert空间）的参数底空间弯曲，当波函数在参数空间强迫平移一周时，产生了几何效应.

9.4.2 诱导规范场

物理空间的几何效应是通过哈密顿量的参数的绝热变化，使其本征矢仿射的Hilbert空间的参数空间弯曲，又通过式（9－29c）、（9－30b）诱导出规范势和规范场，这一规范场使波函数产生一几何相位，其数值由波函数在参数空间经历的曲线所张的立体角决定.

9.4.3 Hilbert 空间的参数空间的弯曲及其几何效应的描述

波函数的参数空间弯曲及其几何效应可以用纤维丛理论描述：参数空间是底空间，波函数或其相位是纤维丛．例如：

AB 效应：U（1）主丛（线丛），γ 为 0～2π；　　(9－44)

AS 效应：Z_2 主丛，　　$\gamma=2\pi$，4π；$e^{i\frac{\gamma}{2}}=\mp 1$　　(9－45)

9.4.4 经验与教训

量子力学几何相位的物理效应的发现表明，我们对量子力学本质的认识仍然是不深的，量子现象还蕴藏着许多宝藏等待我们去发掘．物理空间的几何效应除引力外，还有许多别的现象．

【参考文献】

Ⅰ　AB 效应

1　Y. Aharonov and D. Bohm. Phys. Rev. 1959, 115: 485, R. G. Chambers, Phys. Rev. 1960, 5: 3

Ⅱ　AS 效应

2　Y. Aharonov & L. S. Susskind. Phys. Rev. 1967, 158: 1237

Ⅲ　磁通量子化

3　张礼，葛墨林．量子力学的前沿问题．清华大学出版社，2000 年，第 278 页

Ⅳ　Berry 相位

4　M. V. Berry. Roy. Soc. (London) 1984, A392: 45

5　B. Simon. Phys. Rev. Lett. 1983, 51: 2167

6　F. Wilczeck and A. Zee. Phys. Rev. Lett. 1984, 52: 2111

7　E. Y. Chiao and Y. S. Wu. Phys. Rev. Lett. 1986, 57: 933

8　A. Tomita and R. Y. Chiao. Phys. Rev. Lett. 1986, 57: 937

Ⅴ　非绝热 Berry 相位

9　Y. Aharonov and J. Anandan. Phys. Rev. 1987, 58: 1593

10　S. J. Wang. Phys. Rev. 1990, A42: 5103

11　S. J. Wang. Phys. Rev. 1990, A42: 5107

Ⅵ Pancharatnam 几何相位

12 J. Samuel and R. Bhandari. Phys. Rev. Lett. 1988, 60: 2339

13 S. Pancharatnam. Proc. Indian Acad. Sci. 1956, A44: 247

Ⅶ 几何相位的量子经典对应与 Hannay 角

14 J. H. Hannay. J. Phys. 1985, A18

15 J. Anandan. Phys. Lett. 1988, A129: 201

Ⅷ 物理学几何相位

16 A. Shapere and F. Wilczek (Ed). Geometric Phase in Physics, Advances Series in Mathematics Vol. 5. Singapore: World Scientific, 1989

17 李华钟. 简单物理系统的整体性. 上海科学技术出版社, 1998

Ⅸ 拓扑量子力学

18 J. David and J. Thouless. Topological Quantum Numbers in Non-relativistic Physics. Singapore: World Scientific, 1988

第 10 章　非自治系统量子力学

10.1　人造量子系统与非自治量子系统[1-2]

10.1.1　人造量子系统与量子光学系统

人类已进入控制单个原子、电子等微观粒子的时代. 目前，人类能够做到：①用隧道扫描电镜探针搬动单个原子（1986 年诺贝尔奖）；②用电磁陷阱（Paul trap）捕捉单个电子、离子，甚至原子（1989 年诺贝尔奖）；③用激光束捕捉与冷却原子，产生 Bose－Einstein 凝聚（1997 年诺贝尔奖）；④用腔场量子电动力学技术控制原子状态和光子的统计性质；⑤在介观尺度设置人造势场和人造边界条件以控制微观粒子的运动. 将来，人类可能做到：用双能级原子作记忆和开关元件，用量子动力学演化进行信息传输、信息加工和量子计算，实现量子通讯与量子计算机.

上述事实表明，人类已从控制与利用大量微观粒子系综的时代进入控制与利用单个微观粒子的时代. 人类应当自觉地认识到这一新的形势与机遇，及时地为自己提出新的战略性的研究课题，即“人类控制与利用微观系统（量子工程）的基本物理与技术问题”.

这一课题的研究将直接影响与促进本世纪下列新科技领域的发展，并可能开辟新的前沿领域：

(1) 介观电路与半经典计算机. 计算机进一步集成化与小型化将要求其基本元件进入介观领域，这种计算机的硬件设计必须考虑介观电路中的量子效应. 以介观元件为基础的计算机将是一种半经典计算机，它基本上是宏观的，但考虑了介观元件中的量子效应.

(2) 非经典激光通讯. 以非经典激光（如压缩态激光）为载体的激光通讯将大大提高通讯密度与信噪比.

(3) 量子通讯与量子计算机. 以（双能级）原子量子态为记忆单元、开关电路和信息储存形式，以量子动力学演化为信息传递与信息加工的物理基础的

量子通讯与量子计算机将成为现实.

(4) 单原子事件的碰撞、反应动力学. 对微观粒子进行的单一碰撞、反应过程的追踪和控制的研究将提供微观世界新的更精确的信息，改变原子、分子物理学和化学的面貌，为原子组装和分子裁剪提供物理化学原理，使材料科学发生革命性的变化.

(5) 单个量子事件和过程的其他应用.

人们通过设置人工势场和人工边界条件的办法去控制微观粒子的量子运动，这种在人工势场和人工边界条件下运动的微观粒子系统称为人造量子系统. 按照人工势场和边界条件是否依赖于时间，人造量子系统可分为自治的和非自治的两大类：若人造势场和边界条件不依赖于时间，则系统称为自治的；反之，则称为非自治的.

10.1.2 非自治量子系统

非自治系统的哈密顿量或边界条件通过某些参数依赖于时间. 这些随时间变化的参数体现了人类对系统的控制或环境对系统的影响. 非自治系统可以是经典的，也可以是量子的.

非自治量子系统的研究是量子力学研究的一大前沿，它反映出人类对量子系统认识的深化和人类控制微观系统的能力的增强. 非自治量子系统的种类很多，下面列举几个典型而重要的非自治量子系统. 有趣的是，这些非自治量子系统都具有某种动力学代数结构，它们的名称及其哈密顿量的代数结构列于表 10－1，图 10－1 则是这些系统的梗概示意.

表 10－1 几种重要的非自治量子系统及其代数结构

系统名称	H 的代数结构	系统的示意图
Paul 阱中粒子的量子运动	$H\ (su\ (1,1),\ a\ (t))$	图 10－1 (a)
束流动力学中粒子的极化	$H\ (su\ (2),\ a\ (t))$	图 10－1 (b)
原子与腔场的作用	$H\ (su\ (N),\ a\ (t))$	图 10－1 (c)
螺旋光纤中激光的贝利相位	$H\ (su\ (2),\ a\ (t))$	图 10－1 (d)
与时间有关的 Landau 系统	$H\ (sp\ (4)\oplus h\ (3),\ a\ (t))$	图 10－1 (e)
核子在变化的四极平均场中的运动	$H\ (sp\ (6),\ a\ (t))$	图 10－1 (f)

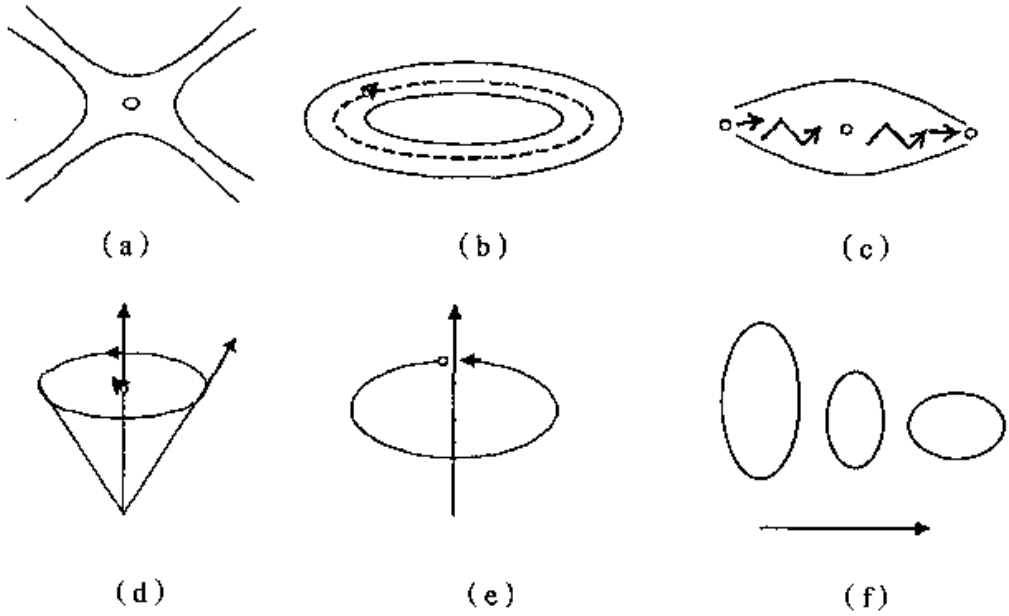


图 10－1

图 10－1 中：(a) 为 Paul 阱中粒子的量子运动；(b) 为回旋加速器中粒子的极化；(c) 为 N 能级原子与腔场的相互作用；(d) 为螺旋光纤中激光的贝利相位；(e) 为带电粒子在与时间有关的均匀磁场中的量子运动；(f) 为核子在变化的四极平均场中的运动.

一维 Paul 阱中粒子的量子运动构成 su (1, 1) 动力系统；加速器中带自旋粒子的极化是 su (2) 动力系统；N 能级原子与腔场交换光子的过程是非线性系统，但可以线性化为 su (N) 动力系统；带自旋粒子在转动磁场中和螺旋光纤中激光的贝利相位是 su (2) 动力系统；带电粒子在均匀可变的磁场和电场中的运动（推广的时间有关的 Landau 系统）是 sp (4) $\oplus h$ (3) 动力系统；核子在变化的四极平均场中的运动是 sp (6) 动力系统……在代数动力学的应用一节中，我们将研究更多的人造量子系统，它们是线性的或非线性的，但具有动力学代数结构，成为美妙的代数动力学系统.

大多数人造量子系统是非自治的，这就要求发展非自治系统量子力学. 研究非自治量子系统的重要性在于，人们可以通过时间有关的势场或边界条件，实现对微观粒子的控制，达到为人类所用的目的.

10.1.3 代数动力学

随着人类控制微观粒子实践的深入，人造量子系统的量子力学问题，特别

是非自治系统的量子力学问题，成为量子论的一大研究前沿．量子物理的另一发展前沿是动力学对称性理论．这一理论发源于原子核物理学的Elliott *su*（3）转动模型和粒子物理中的Gell－Mann *su*（3）夸克模型，在20世纪70～80年代的核物理学中获得了大发展，出现了原子核集体运动的互作用玻色子模型（IBM）．20世纪80年代以来，动力学对称性理论又在原子、分子物理和量子光学中获得成功应用，近年来又用于非自治量子系统和凝聚态物理的研究．

动力学对称性理论，是在群论和李代数的范围内研究量子系统的守恒律和相应的动力学对称性，即在李代数范围内研究量子系统的可积性问题．它的进一步发展则是在非线性李代数，即包络代数的范围内研究量子系统的可积性，也就是所谓的量子群和量子代数．

动力学对称性理论原来的研究对象是自治的量子系统，即哈密顿量不依赖于时间但具有代数结构的量子系统，研究这类系统的定态（静态）动力学对称性、守恒律及可积性问题．然而许多非自治量子系统也具有代数结构，要研究其守恒律、动力学对称性以及可积性问题，就必须把动力学对称性理论加以改造和推广．代数动力学正是在这种需要的激励下产生的．

代数动力学把动力学对称性理论与非自治系统量子力学完美地结合起来，把原子核物理学中的自治系统的定态动力学对称性理论推广到人造量子系统中的非自治系统的时间有关的动力学对称性理论．代数动力学把时间之矢放入静态的运动学代数之中，使之按动力学规律随时间演化．它用代数和群论的方法去揭示系统的守恒律和与之相应的对称性，使非自治量子系统的求解变得容易，并突出解的最重要的物理内容，即守恒量子数和动力学对称性．总之，代数动力学强调动力学的代数结构和代数系统的动力学演化．

10.2 代数动力学[1－2]

10.2.1 动力学的诸要素

为了理解代数动力学的内涵及它与经典力学和量子力学的关系，有必要从动力学的诸要素入手对代数动力学加以剖析，并把它与经典力学和量子力学做个比较，见表10－2．

表 10－2　动力学诸要素的比较

动力学之要素	动力学		代数动力学	
	经典的	量子的	经典的	量子的
(1) 运动之舞台(时空)	$X=(r,t)$		$X=(r,t)$	
(2) 运动之描述(运动学)：	c 数泊松代数	q 数海森堡代数	经典李代数	量子李代数
a. 运动学变量	$q_i,p_i,$	$\hat{q}_i,\hat{p}_i$	$x_i(q,p),$	$\hat{x}_i(\hat{q},\hat{p})$
b. 运动学代数	$\{q_i,p_i\}=\delta_{ij},$	$[\hat{q}_i,\hat{p}_i]=i\hbar\delta_{ij}$	$\{x_i,x_j\}=c_{ij}^k x_k,$	$[\hat{x}_i,\hat{x}_j]=ic_{ij}^k\hat{x}_k$
(3) 运动之定律(动力学)：	q_ip_i 的泊松方程	$\hat{q}_i\hat{p}_i$ 的海森堡方程	x_i 的泊松方程	$\hat{x}_i$ 的海森堡方程
a. 惯性律； b. 力律；	$\left.\begin{matrix}m\\v(q)\end{matrix}\right\}H(q,p),$	$\hat{H}(\hat{q},\hat{p})$	$H(x_i,a(t)),$	$\hat{H}(\hat{x}_i,a(t))$
c. 守恒律.能量守恒之微分形式	$q_i=\{q_i,H\},$	$\frac{\mathrm{d}\hat{q}_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{q}_i,\hat{H}]$		
	$p_i=\{p_i,H\},$	$\frac{\mathrm{d}\hat{p}_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{p}_i,\hat{H}]$	$x_i=\{x_i,H\},$	$\frac{\mathrm{d}\hat{x}_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{x}_i,\hat{H}]$

从表 10－2 可知：

(1) 代数动力学是把通常的动力学从泊松－海森堡代数动力学形式推广到一般的李代数动力学形式. 这是因为，通常的经典动力学的运动学代数为泊松代数，通常的量子力学的运动学代数为海森堡代数，而代数动力学的运动学代数则为一般的李代数.

(2) 在通常的动力学中，把哈密顿量区分为动能与势能两部分是重要的，代数动力学则不强调这种划分，而强调哈密顿量的代数结构.

10.2.2 代数动力学及其内涵

10.2.2.1 量子运动学代数

如表 10－2 所示，运动学代数是动力学的基本要素，它有两方面的内涵：①规定运动学变量；②确定这些变量之间的代数关系．同时，运动学代数规定了动力系统运动的内涵，即什么东西在运动，它们的相互关系如何．运动学代数规定了运动的模式或类型，正是在这一点上把动力学系统区分为不同的代数动力学——不同运动模式的代数动力学．

运动学代数规定了各种可能的运动模式以及如何描述这些运动模式．对于经典力学，是粒子的共轭的正则坐标与正则动量在运动，它们之间满足泊松代数关系．对于量子力学，运动模式的描述更加广义一些，可以叙述如下：量子运动模式用可互易算子集 $\hat{H}_\nu$ 和它们的本征值 n_ν 描述．这些运动模式的激发、退激发和相互转化，用升算子 $\hat{E}_\alpha$、降算子 $\hat{E}_{-\alpha}$，及其乘积描述．所有可能的量子运动模式，它们的激发和退激发组成量子运动学算子集 $\{\hat{H}_\nu, \hat{E}_\alpha, \hat{E}_{-\alpha}\}$，它们的集合及其扩充在李代数对易子运算之下构成一个封闭的代数，称为量子运动学代数．

对于坐标空间的量子力学，基本的运动学代数对一维而言是海森堡代数 $h(3)(\hbar=1)$：

$$h(3) = \{\hat{q}, \hat{p}, 1 \mid [\hat{q}, \hat{p}] = i\} \tag{10-1}$$

对 f 维而言是 f 个 $h(3)$ 的直和 $\sum_{i=1}^{f} h_i(3)$．应当指出，基本运动学代数描述一切可能的运动，生成整个 Hilbert 空间；而复合的运动学代数（其生成元是 $h(3)$ 的函数）：

$$g = \{\hat{x}_i(\hat{q}, \hat{p}) \mid [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = ic_{ij}^k \hat{x}_k\} \tag{10-2}$$

常常生成一个子空间，描述某种特殊类型的运动．对于一维情况，最简单的复合代数是

$$su(1,1) = \left\{\hat{k}_+ = \frac{\hat{p}^2}{2},\ \hat{k}_- = \frac{\hat{q}^2}{2},\ \hat{k}_0 = -\frac{i}{4}(\hat{q}\hat{p} + \hat{p}\hat{q})\right\} \tag{10-3}$$

对于 f 维情况，二次型的复合代数是

$$sp(2f) = \left\{\hat{q}_i\hat{q}_j,\ \hat{p}_i\hat{p}_j, \frac{1}{2}(\hat{q}_i\hat{p}_j + \hat{p}_j\hat{q}_i)\right\} \tag{10-4}$$

显然，无论是代数$su(1,1)$还是代数 $sp(2f)$，都只能生成 Hilbert 空间的一个子空间.

10.2.2.2 代数动力学的定义

定义了运动学代数之后，应当转向动力学. 运动学代数是静态的代数，它刻画了各种可能的运动模式，并未描述这些运动学变量如何随时间演化. 运动学代数随时间的演化，是代数动力学的基本内容. 为了使静态的运动学代数随时间演化，我们需要一个时间平移算子；而运动学要变成动力学，则需要一个哈密顿量. 能量守恒律要求时间平移算子应当是系统的哈密顿量（差一个量纲常数）. 对于代数动力学，因运动变量是运动学代数的生成元，故系统的哈密顿量必须是运动学变量，即运动学代数生成元的函数：$\hat{H} = \hat{H}\ (\hat{x}_i,\ \alpha\ (t))$. 有了哈密顿量之后，代数动力学定义为

$$\left\{\frac{\mathrm{d}\hat{x}_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i}[\hat{x}_i, \hat{H}] \mid [\hat{x}_i, \hat{x}_j] = ic_{ij}^k\hat{x}_k, \hat{H} = \hat{H}(\hat{x}_i, \alpha(t))\right\} \tag{10-5}$$

(10－5) 式表明，代数动力学就是在系统的哈密顿量驱动下的随时间演化的运动学代数. 应当指出，运动学代数只描述运动的可能模式，它比较普遍，适用的范围比较宽；而代数动力学则描述某种特定运动模式的实现，它由哈密顿量的结构决定，比较具体和特殊. 对同一种运动学代数，由于系统不同，因而相应的哈密顿量结构不同，动力学也就不同.

10.2.2.3 与时间有关的动力学对称性

为了理解非自治系统的与时间有关的动力学对称性，需要介绍一些预备知识.

运动学群：群 G 称为运动学群，如果它的生成元组成一个运动学代数.

考虑李群 G，其阶为 n，秩为 l，相应的李代数为

$$g = \{\hat{x}_i, i = 1,2,\cdots,n\} = \left\{\hat{H}_v, \hat{E}_{\pm\alpha} \mid v = 1,2,\cdots,l, \alpha = 1,2,\cdots,\frac{n-l}{2}\right\} \tag{10-6}$$

考虑群 G 的一个群链（如正则群链）及其相应的 Casimir 算子：

$$G \supset G_{s_1} \supset G_{s_2} \supset \cdots \tag{10-7}$$

$$\hat{C}_r \quad \hat{C}_{s_1} \quad \hat{C}_{s_2} \cdots \hat{H}_v \tag{10-8}$$

从一个群链，可以构造一组第二类完备算子集（*CSCOII*）：

$$CSCOII = \{\hat{C}_r, \hat{C}_s, \hat{H}_v\} \tag{10-9}$$

从群论知道，*CSCOII* 的共同本征函数组成了该群的不可约表示空间的基矢，而所有不可约表示空间的总和仿射了整个 Hilbert 空间.

例 10-1 $SU(2)$群：$su(2)=\{J_0, J_+, J_-\}$，$n=3$，$l=1$.

群链是 $SU(2)\supset U(1)$，$CSCOII = \{\hat{J}^2, \hat{J}_0\}$，它们的共同本征函数 $\{Y_{jm}\}$是整个 Hilbert 空间的基矢.

例 10-2 $SU(3)$群：$su(3)=\{\hat{Y}, \hat{T}_3, \hat{E}_{\pm\alpha} | \alpha=1,2,3\}$，$n=8, l=2$.

从群链$SU(3)\supset U(2)\supset SU(2)\supset U(1)$，可得

$$CSCOII = \{\hat{C}_3, \hat{C}_2, \hat{Y}, \hat{T}^2, \hat{T}_3\}$$

它们的共同本征函数 $\{Y_{\lambda v Y T T_3}\}$ 仿射了整个 Hilbert 空间.

动力学群：一个运动学群要成为动力学群，则它的运动学代数的生成元应是一个哈密顿系统的动力学变量，即$\hat{H}$是 $\{\hat{x}_i\}$ 的函数$\hat{H}=\hat{H}(\hat{x}_i, \alpha(t))$.

定态动力学对称性：一个系统具有定态动力学对称性的条件是，则它的哈密顿量是动力学群的 *CSCOII* 的函数，即

$$\hat{H}(\hat{x}_i, \alpha(t)) = \hat{H}(\hat{C}_r, \hat{C}_s, \hat{H}_v, \alpha(t)) \tag{10-10}$$

应当指出，一个系统具有动力学群，只表明其动力学变量为$\{\hat{x}_i\}$，$\hat{H}=(\hat{x}_i, \alpha(t))$. 若一个系统具有定态动力学对称性，则对系统的哈密顿量$\hat{H}$的结构施加了更严格的限制，$\hat{H}$必须通过*CSCOII* 依赖于 $\{\hat{x}_i\}$. 正因为如此，具有定态动力学对称性的量子系统是具有完备的守恒量子数的可积系统；而具有动力学群，不具有定态动力学对称性的系统（一般为非线性系统）则一般不具有完备的守恒量子数，因而一般是不可积的.

与时间有关的动力学对称性：一个非自治量子系统具有与时间有关的动力学对称性，如果：

（1）存在一组与时间有关的第二类完备算子集

$$CSCOII = \{\hat{C}_r, \hat{O}_s(t), \hat{I}_v(t)\}, \text{满足}(\hbar=1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}\hat{C}_r\\ \hat{C}_s(t)\\ \hat{I}_v(t)\end{bmatrix}+i\left[\hat{H}(\hat{x}_i,\alpha(t)),\begin{bmatrix}\hat{C}_r\\ \hat{O}_s(t)\\ \hat{I}_v(t)\end{bmatrix}\right]=0 \qquad (10-11)$$

(2) 存在一个规范变换$\hat{U}_g(\hat{x}_i,t)$，使得

$$\hat{\tilde{C}}_r = U_g^{-1}\hat{C}_rU_g = \hat{C}_r \qquad (10-12)$$

$$\hat{\tilde{O}}_s = U_g^{-1}\hat{O}_sU_g \qquad (10-13)$$

$$\hat{\tilde{I}}_v = U_g^{-1}\hat{I}_vU_g \qquad (10-14)$$

$$\hat{\tilde{H}} = U_g^{-1}\hat{H}U_g - iU_g^{-1}\frac{\partial}{\partial t}U_g = \hat{\tilde{H}}(\hat{C}_r,\hat{\tilde{O}}_s,\hat{\tilde{I}}_v;\alpha(t)) \qquad (10-15)$$

显然，在规范变换（10－12）～（10－15）下，方程（10－11）是协变的，即

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}\hat{C}_r\\ \hat{\tilde{O}}_s(t)\\ \hat{\tilde{I}}_v(t)\end{bmatrix}+i\left[\hat{\tilde{H}}(\hat{C}_r,\hat{\tilde{O}}_s,\hat{\tilde{I}}_v;\alpha(t)),\begin{bmatrix}\hat{C}_r\\ \hat{\tilde{O}}_s\\ \hat{\tilde{I}}_v\end{bmatrix}\right]=0 \qquad (10-16)$$

从（10－15）和（10－16）式可知

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}\hat{C}_r\\ \hat{\tilde{O}}_s(t)\\ \hat{\tilde{I}}_v(t)\end{bmatrix}=0 \qquad (10-17)$$

即变换后的 *CSCOH* 不显含时间．具有性质（10－15）式或（10－17）式的规范变换称为最佳规范变换．（10－15）式表明，时间有关的动力学对称性在最佳规范变换下成为定态动力学对称性．因此，时间有关的动力学对称性对非自治量子系统的哈密顿量的结构作出了更加严格的限制．

10.2.2.4 动力学非绝热基矢

与时间有关的 *CSCOH* 的共同本征函数$\varphi_{n_rn_sn_v}(t)$满足

$$\begin{bmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{O}_s(t) \\ \hat{I}_v(t) \end{bmatrix} \varphi_{n_r n_s n_v}(t) = \begin{bmatrix} n_r \\ n_s \\ n_v \end{bmatrix} \varphi_{n_r n_s n_v}(t) \tag{10-18}$$

乘以相位因子后，

$$\Psi_{n_r n_s n_v}(t) = \exp[\mathrm{i}\theta_{n_r n_s n_v}(t)]\varphi_{n_r n_s n_v}(t) \tag{10-19}$$

构成了动力学非绝热基矢．“动力学”一词表明该基矢包含动力学信息，不是人为任意选取的表象的基矢，而是随动力学过程演化的活动标架，就像微分几何中随几何体变动的活动标架一样．“非绝热”一词表示该基矢是在完全的动力学演化中生成的，不是在绝热过程（近似）中生成的．非绝热基矢这一名称在核物理中使用过，用以描述与时间有关的壳模型基矢的非绝热特征．（10－19）式中的相位定义为

$$\theta_{n_r n_s n_v}(t) = \int_0^t \langle \varphi_{n_r n_s n_v}(\tau) \left| i\frac{\partial}{2\tau} - \hat{H}(\tau) \right| \varphi_{n_r n_s n_v}(\tau) \rangle \mathrm{d}\tau \tag{10-20}$$

它包含贝利相位和动力学相位，称为总相位．不难证明，动力学非绝热基矢$\Psi_{n_r n_s n_v}$满足与时间有关的薛定格方程（$\hbar=1$）

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = \hat{H}(t)\Psi \tag{10-21}$$

因此，我们说它包含了系统的全部动力学信息．由于这种基矢是随着动力学演化而运动的活动标架（而非固定标架），所以用它们作表象基矢就显得特别方便和具有优越性．薛定格方程（10－21）的一般解可按动力学非绝热基矢展开：

$$\Psi(t) = \sum C_{n_r n_s n_v}(0)\Psi_{n_r n_s n_v}(t) \tag{10-22}$$

其展开式系数$C_{n_r n_s n_v}(0)$不随时间变化而完全由初始条件决定．这再一次表明，全部动力学信息已包含在$\Psi_{n_r n_s n_v}(t)$之中．因此，$\Psi_{n_r n_s n_v}(t)$十分类似于自治系统$\hat{H}$的本征矢（乘以时间因子），是自治系统动力学基矢（$\hat{H}$的本征函数）的自然推广（但是它们不是$\hat{H}(t)$的本征函数）．

非绝热能级定义为

$$E_{n_r n_s n_v}(t) = \langle \Psi_{n_r n_s n_v}(t) | \hat{H}(t) | \Psi_{n_r n_s n_v}(t) \rangle \tag{10-23}$$

在一定条件下，它们会出现能级交叉. *CSCOH* 算子的平均值

$$\left\langle \Psi(t) \mid \hat{C}_r \mid \Psi(t) \right\rangle = \sum_{n_r n_s n_v} \mid C_{n_r n_s n_v}(0) \mid^2 n_r \qquad (10-24)$$

$$\left\langle \Psi(t) \mid \hat{O}_s \mid \Psi(t) \right\rangle = \sum_{n_r n_s n_v} \mid C_{n_r n_s n_v}(0) \mid^2 n_s \qquad (10-25)$$

$$\left\langle \Psi(t) \mid \hat{I}_v \mid \Psi(t) \right\rangle = \sum_{n_r n_s n_v} \mid C_{n_r n_s n_v}(0) \mid^2 n_v \qquad (10-26)$$

显然是运动常数.

10.2.2.5 规范不变性与规范自由度

由于$\hat{H}(t)$显含时间，因此系统与外界有能量交换，系统的能量不再守恒，而且是不确定的. 对于这样的非自治量子系统，存在着规范变换和规范不变性，在规范变换下，波函数和物理量的变换为

$$\begin{bmatrix} \Psi(t) \\ \hat{H}(t) \\ \hat{C}_r \\ \hat{O}_s(t) \\ \hat{I}_v(t) \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \overline{\Psi}(t) = U_g^{-1}\Psi(t) \\ \hat{\overline{H}}(t) = U_g^{-1}\hat{H}(t)U_g - iU_g^{-1}\dfrac{\partial U_g}{\partial t} \\ \hat{\overline{C}}_r = U_g^{-1}\hat{C}_r U_g = \hat{C}_r \\ \hat{\overline{O}}_s = U_g^{-1}\hat{O}_s U_g \\ \hat{\overline{I}}_v = U_g^{-1}\hat{I}_v U_g \end{bmatrix} \qquad (10-27)$$

其运动方程是协变的，即

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \rightarrow i\frac{\partial \overline{\Psi}}{\partial t} = \hat{\overline{H}}\,\overline{\Psi} \qquad (10-28)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{O}_s \\ \hat{I}_v \end{bmatrix} + i\left[\hat{H}, \begin{bmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{O}_s \\ \hat{I}_v \end{bmatrix}\right] = 0 \rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{\overline{O}}_s \\ \hat{\overline{I}}_v \end{bmatrix} + i\left[\hat{\overline{H}}, \begin{bmatrix} \hat{C}_r \\ \hat{\overline{O}}_s \\ \hat{\overline{I}}_v \end{bmatrix}\right] = 0 \qquad (10-29)$$

上述规范不变性，允许我们选择物理上有意义的、方便的规范去求解动力学问题，这与规范场论中的规范变换在形式上相似，但物理内涵有所不同. 在规范场论中，规范不变性除了预示非物理自由度外，还包含了物理上真实的规范场，规范不变性规定了物质场与规范场相互作用的形式，因而是一个物理原

理. 在代数动力学中，我们只在时间变量上对物质场及其算子引进了规范变换，并没有引进规范场，因而规范不变性和规范选取的自由度更具有表象变换下运动方程的协变性和选择表象的自由的意味. 然而，代数动力学的框架允许引进规范场：$\hat{H}$随参数$\alpha(t)$的变化，的确可以在形式上诱导出一个规范场. 代数动力学中的贝利相位，就是与这种规范场的曲率有关，或者与 Hilbert 空间的底空间的弯曲有关.

10.2.2.6 线性系统和量子－经典对应

线性系统及其定理：一个动力系统称为线性的，如果它的哈密顿量是动力学代数生成元的线性函数，即

$$\hat{H}(\hat{x}_i,t) = \sum_i h_i(t)\,\hat{x}_i \tag{10-30}$$

对于线性系统，存在下述定理：每个具有半单李代数的线性非自治量子系统都具有与时间有关的动力学对称性.

实际经验（例子）表明，上述定理对于一般李代数也成立.

量子－经典对应：对于线性系统，可以建立漂亮的量子－经典对应. 线性系统的不变算子可以表示为

$$I_\nu(\hat{x}_i,t) = \sum_i \alpha_i^\nu(t)\,\hat{x}_i, \quad \nu = 1,2,\cdots,l \tag{10-31}$$

从不变算子的运动方程

$$\frac{\partial \hat{I}_\nu}{\partial t} + i[\hat{H},\hat{I}_\nu] = 0 \tag{10-32}$$

可得系数 α_i^ν 的运动方程

$$\dot{\alpha}_i^\nu - \sum_{jk} h_j(t) C_{jk}^i \alpha_k^\nu = 0 \tag{10-33}$$

考虑相应的经典代数动力学方程

$$\left\{\frac{\mathrm{d}x_i(q,p)}{\mathrm{d}t} = \{x_i(q,p),H(x_i(q,p),t)\} \,\middle|\, \{x_i,x_j\} = C_{ij}^k x_k,\ H = \sum_k h_k(t)x_k\right\} \tag{10-34}$$

具体写出为

$$\dot{x}_i + \sum_{jk} h_j(t) C_{jk}^i x_k = 0 \tag{10-35}$$

在经典代数动力学方程中，生成元$x_i(q,p)$是经典坐标$\{q,p\}$的函数，量子对易子[ ]用泊松括号{ }代替. 再考虑（10－34）式和（10－35）式的复

共轭经典代数动力学方程

$$\left\{\frac{\mathrm{d}x_i^*}{\mathrm{d}t} = \{x_i^*, H^*\} \mid \{x_i^*, x_j^*\} = -C_{ik}^j x_k^*;\ H^* = \sum_k h_k(t) x_k^*\right\} \tag{10-36}$$

具体写出为

$$\dot{x}_i^* - \sum_{jk} h_j(t) C_{jk}^i x_k^* = 0 \tag{10-37}$$

其解为 $x_i^{*\nu}(t)$.

比较（10－33）与（10－37）式，我们有下述量子－经典对应

$$a_i^\nu(t) = x_i^{*\nu}(t) \tag{10-38}$$

$$\hat{I}_\nu(t) = \sum_i x_i^{*\nu}(t)\,\hat{x}_i = \langle x^\nu \mid \hat{x}\rangle \tag{10-39}$$

即不变算子 $\hat{I}_\nu$ 的解，是经典解矢量 x^ν 与生成元矢量 $\hat{x}$ 的内积. 通过计算经典动力学解，我们可以构造出量子力学解 $\hat{I}_\nu$，这与通常 $\hbar\to 0$ 的量子－经典对应不同. 在 10.3 节代数动力学的应用中，我们将给出几个量子－经典对应的具体例子.

10.3 人造量子系统与量子光学系统的理论研究：代数动力学的应用[1]

10.3.1 可积系统与规则运动

我们先研究具有规则运动的量子系统，这类系统具有完备的好量子数，因而是可积系统. 我们分两种情况研究，即线性系统和非线性可积系统.

10.3.1.1 线性系统

(1) 粒子在 Paul 阱中的量子运动和广义的与时间有关的谐振子——$su(1,1)$线性动力系统[3].

粒子在一维 Paul 阱中的量子运动可以用具有 $su(1,1)$运动学代数的时间有关的谐振子来描述，其哈密顿量为

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}k(t)\,\hat{q}^2 = \hat{k}_+ + k(t)\,\hat{k}_- \tag{10-40}$$

其中，$su(1,1)$代数定义为

$$\hat{k}_+ = \frac{\hat{p}^2}{2},\ \hat{k}_0 = -\frac{i}{4}(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p}),\ \hat{k}_- = \frac{\hat{q}^2}{2} \tag{10-41}$$

$$[\hat{k}_+, \hat{k}_-] = 2\hat{k}_0,\ [\hat{k}_0, \hat{k}_\pm] = \pm \hat{k}_\pm \tag{10-42}$$

把（10－40）式推广到最一般的$su(1,1)$线性系统，即

$$\hat{H}(t) = Z(t)\hat{k}_+ + iY(t)\hat{k}_0 + X(t)\hat{k}_- \tag{10-43}$$

该系统称为与时间有关的广义谐振子，具有一定的典型性，已成为许多物理学家研究的对象．哈密顿量（10－43）式是厄密的，但却不是时间反演不变的．薛定格方程

$$i\frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\Psi(t) \tag{10-44}$$

的解可用代数动力学方法方便地求出．设其规范变换为

$$U_g(t) = \exp[iv_-(t)\hat{k}_-]\exp[v_0(t)\hat{k}_0] \tag{10-45}$$

在最佳规范条件下，

$$2v_- Z(t) + Y(t) - v_0 = 0 \tag{10-46a}$$

$$\frac{\exp[2v_0]}{Z(t)}[v_-^2 Z(t) + v_- Y(t) + X(t) + v_-] = \kappa \tag{10-46b}$$

规范变换后的薛定格方程变为

$$i\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} = \hat{\bar{H}}(t)\bar{\Psi} \tag{10-47a}$$

$$\bar{\Psi}(t) = U_g^{-1}\Psi(t) \tag{10-47b}$$

$$\hat{\bar{H}}(t) = U_g^{-1}\hat{H}(t)U_g - iU_g^{-1}\frac{\partial U_g}{\partial t} = f(t)\hat{I}(0) \tag{10-47c}$$

$$\hat{I}(0) = \hat{k}_+ + \kappa\hat{k}_- = \frac{1}{2}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}\kappa\hat{q}^2 \tag{10-47d}$$

$$f(t) = Z(t)\exp[-v_0(t)] \tag{10-47e}$$

容易求得（10－47a）式的解：

$$\bar{\Psi}_n(t) = N_n(\alpha)e^{i\theta_n(t)}e^{-(\alpha q)^2/2}H_n(\alpha q) \tag{10-48a}$$

其中，

$$N_n(\alpha) = [\alpha/\sqrt{\pi 2^n n!}]^{\frac{1}{2}},\ \alpha^2 = \omega_0 = \sqrt{\kappa}$$

$H_n(\alpha q)$为 n 阶厄密特多项式，$\theta_n(t) = -(n+\frac{1}{2})\omega_0\int_0^t f(\tau)d\tau$．动力学非绝

热基矢，即方程（10－44）式的严格解为

$$\Psi_n(t) = U_g\overline{\Psi}_n(t) = N_n(\chi\alpha)\exp[i\theta_n(t) + i\frac{v_-}{2}q^2]$$
$$\exp[-(\chi\alpha q)^2/2]H_n(\chi\alpha q) \qquad (10-48b)$$

其中，$\chi(t) = \exp[-v_0(t)/2]$，$v_0(t)$和 $v_-(t)$可由运动方程(10－46a)、(10－46b)求得（或由下面的经典运动方程求得）．式(10－48b)描述一个尺度随时间变化的谐振子，但有一个与状态量子数 n 无关的集体运动速度势$\frac{v_-}{2}q^2$和一个总相位 θ_n（t）．

非绝热能级为

$$E_n(t) = \langle \Psi_n \mid \hat{H}(t) \mid \Psi_n(t)\rangle = \frac{(\omega_0 f(t) - \dot{v}_- e^{v_0(t)})}{2\alpha}(n+\frac{1}{2}) \qquad (10-49)$$

贝利相位（对周期为 T 的哈密顿量）为

$$\phi_B = -(n+\frac{1}{2})\int_0^T \frac{v_-(t)\exp[v_0(t)]}{2\alpha^2}dt \qquad (10-50)$$

很容易求得不变 Cartan 算子：

$$\hat{I}(t) = U_g\hat{I}(0)U_g^{-1} = \alpha_+ k_+ + \alpha_0 k_0 + \alpha_- k_- \qquad (10-51a)$$

其中

$$\alpha_+ = e^{v_0},\ \alpha_0 = -2iv_- e^{v_0},\ \alpha_- = v_-^2 e^{v_0} + \kappa e^{-v_0} \qquad (10-51b)$$

它们满足的运动方程可从（10－11）式求得：

$$\left.\begin{aligned} &\dot{\alpha}_+ - Y(t)\alpha_+ - iZ(t)\alpha_0 = 0 \\ &\dot{\alpha}_0 - 2iX(t)\alpha_+ + 2iZ(t)\alpha_- = 0 \\ &\dot{\alpha}_-(t) + Y(t)\alpha_- + iX(t)\alpha_0 = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (10-51c)$$

与非线性运动方程（10－46a）、（10－46b）相比，方程（10－51c）实现了线性化．这是通过非线性变换（10－51b）达到的．

相应的经典运动方程

$$\frac{dk_\nu(q,p)}{dt} = \{k_\nu(q,p), H(k_\nu,t)\},\quad \nu = -,0,+ \qquad (10-52)$$

具体写出为

$$\begin{cases} \dfrac{dk_+}{dt} + Y(t)k_+ + 2iX(t)k_0 = 0 \\ \dfrac{dk_0}{dt} + iZ(t)k_+ - iX(t)k_- = 0 \\ \dfrac{dk_-}{dt} - 2iZ(t)k_0 - Y(t)k_- = 0 \end{cases} \tag{10-53}$$

其中，$k_+ = \frac{1}{2}p^2$，$k_0 = -\frac{i}{2}qp$，$k_- = \frac{1}{2}q^2$.

比较（10－51c）式和（10－53）式，可得量子解与经典解之间的对应关系：

$$\alpha_+ = k_-,\ \alpha_0 = 2k_0,\ \alpha_- = k_+ \tag{10-54a}$$

$$\hat{I}(t) = k_-\hat{K}_+ + 2k_0\hat{K}_0 + k_+\hat{K}_- \tag{10-54b}$$

式（10－54a）、（10－54b）表明，量子解可以从经典解构成. 上述对应可写成更对称的形式，有兴趣的读者可参看原文.

从（10－53）式可得 q，p 的运动方程：

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= Z(t)p + \frac{1}{2}Y(t)q \\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{1}{2}Y(t)p - X(t)q \end{aligned} \tag{10-55}$$

设（10－55）式两组独立的解为（q_1，p_1）和（q_2，p_2），引进复解

$$q = q_1 + iq_2,\ p = p_1 + ip_2 \tag{10-56}$$

不难验证：

$$k_+ = \frac{1}{2}pp^*,\ k_0 = -\frac{i}{4}(qp^* + q^*p),\ k_- = \frac{1}{2}qq^* \tag{10-57a}$$

$$v_0 = \ln\alpha_+ = \ln k_-,\ v_- = \frac{i}{2}\frac{\alpha_0}{\alpha_+} = i\frac{k_0}{k_-},\ k_+k_- + k_0^2 = \kappa \tag{10-57b}$$

现考虑初始条件的对应. 对于量子解，设初条件为

$$v_0(0) = 0,\ v_-(0) = 0,\ U_g(0) = 1 \tag{10-58a}$$

相应的经典解的初条件可从式（10－57b）求得：

$$\left.\begin{aligned} k_-(0) &= \frac{1}{2}q(0)q^*(0) = 1 \\ k_0(0) &= -\frac{i}{4}[q(0)p^*(0) + q^*(0)p(0)] = 0 \end{aligned}\right\} \tag{10-58b}$$

满足条件式（10－57b）和（10－58b）的解为

$$\left.\begin{aligned} q(0) &= \sqrt{2}(\cos\theta + i\sin\theta) \\ p(0) &= \sqrt{2}\omega_0[\cos(\theta \pm \frac{1}{2}) + i\sin(\theta \pm \frac{1}{2})] \end{aligned}\right\} \quad (10-59)$$

其中，θ 是一个连续取值的自由参数. 式（10－58a）和（10－59）表明，一组连续的经典轨道 $[q(t,\theta), p(t,\theta)]$ 对应于一个初始条件为 $[v_0(0)=0, v_-(0)=0]$ 的量子解 $[v_0(t), v_-(t)]$，即无穷多个连成一片的经典轨道对应于一个量子运动. 这是一个引人注目的结果.

上面我们以与时间有关的广义谐振子对应的 $su(1,1)$ 线性系统为例，详细阐明了运用代数动力学方法求解非自治系统量子力学问题的步骤，显示出这一理论方法的特点和优点. 下面，我们讨论一下这种解的应用价值. 首先，对 Paul 阱中粒子的量子运动而言，一旦求得系统的严格解，就可以通过调节参数实现对阱中粒子运动的控制（如坐标或动量的控制）. 第二，变频谐振子可以描述变频的激光，其严格解可以用于构造具有非经典性质的激光含时相干态. 第三，谐振子是一切振动问题的零级近似，考虑环境影响之后，系统可能是非自治的. 因此，含时广义谐振子的严格解可以用作非线性振动的很好的零级近似表象的基矢，它已包含了全部谐振运动的动力学效应，叠加在谐振运动上面的非谐效应有可能被当作微扰处理.

(2) 加速器中粒子的极化、转动磁场中带自旋粒子的进动、在螺旋光纤中传播的激光的偏振方向转动——$su(2)$ 线性动力系统[4-6].

加速器中的粒子相对于变化的磁场而运动，如何控制其极化？带自旋粒子在转动磁场中运动，如何预测其自旋取向？激光在螺旋光纤中传播时，如何计算其极化或偏振方向的变化？如果假定中微子存在小的磁矩，在太阳强磁场中，中微子会转变成反中微子，如何计算反转几率？上述问题都可以变成非自治的 $su(2)$ 线性系统问题，其哈密顿量可以写成

$$\hat{H}(t) = \vec{X}(t)\cdot\hat{\vec{j}} = X_1(t)\hat{j}_1 + X_2(t)\hat{j}_2 + X_3(t)\hat{j}_3 \quad (10-60)$$

其中角动量算子 $\hat{j}_i$ 满足 $su(2)$ 代数关系：

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{j}_k \quad (10-61)$$

与时间有关的薛定格方程（10－21）可在下述规范变换下求解：

$$U_g = \exp[iv_3(t)\hat{j}_3]\exp[iv_2(t)\hat{j}_2] \quad (10-62)$$

最佳规范的参数方程为

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}v_3}{\mathrm{d}t}\sin v_2 + X_1\cos v_2\cos v_3 - X_2\cos v_2\sin v_3 + X_3\sin v_2 = 0\\&\frac{\mathrm{d}v_2}{\mathrm{d}t} + X_1\sin v_3 + X_2\cos v_3 = 0\end{aligned}\right\}\quad(10-63)$$

规范变换后的哈密顿量简化为

$$\hat{\bar{H}}(t) = f(t)\,\hat{I}(0) \qquad (10-64a)$$

$$\hat{I}(0) = j_3 \qquad (10-64b)$$

$$f(t) = [X_2(t)\sin v_3 - X_1(t)\cos v_3]/\sin v_2 \qquad (10-64c)$$

容易求得不变 Cartan 算子为

$$\hat{I}(t) = U_g\,\hat{I}(0)\,U_g^{-1} = \alpha_1(t)\,\hat{j}_1 + \alpha_2(t)\,\hat{j}_2 + \alpha_3(t)\,\hat{j}_3 \qquad (10-65a)$$

$$\alpha_1 = -\sin v_2\cos v_3, \alpha_2 = \sin v_2\sin v_3, \alpha_3 = \cos v_2 \qquad (10-65b)$$

α_i 的运动方程可以从（10－11）式求得：

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}\alpha_1}{\mathrm{d}t} + X_3\alpha_2 - X_2\alpha_3 = 0\\&\frac{\mathrm{d}\alpha_2}{\mathrm{d}t} + X_1\alpha_3 - X_3\alpha_1 = 0\\&\frac{\mathrm{d}\alpha_3}{\mathrm{d}t} + X_2\alpha_1 - X_1\alpha_2 = 0\end{aligned}\right\}\qquad(10-66)$$

与非线性方程（10－63）相比，运动方程（10－66）实现了线性化.

从复共轭的经典代数动力学方程

$$\left\{\frac{\mathrm{d}j_i^*}{\mathrm{d}t} = \{j_i^*, H^*\} \mid \{j_i^*, j_j^*\} = \epsilon_{ijk}j_k^*, H^* = \sum_i X_i(t)j_i^*\right\}$$

$$(10-67a)$$

可求得 j_i^* 的运动方程：

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}j_1^*}{\mathrm{d}t} + X_3j_2^* - X_2j_3^* = 0\\&\frac{\mathrm{d}j_2^*}{\mathrm{d}t} + X_1j_3^* - X_3j_1^* = 0\\&\frac{\mathrm{d}j_3^*}{\mathrm{d}t} + X_2j_1^* - X_1j_2^* = 0\end{aligned}\right\}\qquad(10-67b)$$

比较方程（10－66）和（10－67b），可得量子解与经典解之间的对应关系：

$$\hat{I}(t) = \langle \vec{j}(t) \mid \vec{j} \rangle = \sum_i j_i^*(t)\, j_i \qquad (10-68)$$

按照代数动力学求解步骤，容易求得满足薛定格方程（10－21）的动力学非绝热基矢：

$$\psi_{jm}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta_m(t)} \sum_{m'} D^j_{m'm}(0, -v_2, 0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m'v_3} \mid jm' \rangle \qquad (10-69)$$

$$\theta_m(t) = m\int_0^t f(\tau)\mathrm{d}\tau \qquad (10-70)$$

其中，$|jm\rangle$ 为 $\hat{j}^2$，$\hat{j}_3$ 的本征态，D^j_{mn} 为 Wigner D 函数.

运用严格解 $\psi_{jm}(t)$ 可以计算粒子的极化、中微子的反转几率、激光在螺旋光纤中的贝利相位等物理量，有兴趣的读者可参看原文.

（3）与时间有关的广义谐振子与外场的相互作用——$su(1,1)\oplus h(3)$ 线性动力系统[7].

前面我们用代数动力学方法处理的量子系统具有半单的李代数. 按照 10.2 节关于线性半单李代数系统的一条定理，这样的非自治系统一定具有动力学对称性. 前面用最佳规范变换具体找到了动力学不变算子，把规范变换后的哈密顿量变成了具有定态动力学对称性的形式（即 $\hat{\bar{H}}$ 是 *CSCOII* 的函数），因而从计算上证明了上述定理的正确性. 本节的例子表明，那条定理对一般李代数也成立，代数动力学方法对一般的李代数系统也适用.

当把与时间有关的广义谐振子置于外场中时，在线性耦合近似下，系统的哈密顿量可写成

$$\hat{H}(t) = X_+(t)\, k_+ + iX_0(t)\, k_0 + X_-(t)\, k_- + X_1(t)\, k_1 + X_2(t)\, k_2 + X(t) \qquad (10-71)$$

这样的系统具有 $su(1,1)\oplus h(3)$ 代数结构，其中

$$su(1,1) = \{k_+, k_0, k_-\} \qquad (10-72a)$$

k_a 的定义由（10－41）式给出，满足（10－42）式. 而 $k_1 = \hat{p}$，$k_2 = \hat{q}$ 与单位 1 构成 Heisenberg 代数：

$$h(3) = \{k_1, k_2, 1\} \qquad (10-72b)$$

补充的对易关系为

$$\left.\begin{aligned}&[\hat{k}_1,\hat{k}_2]=-i\\&[\hat{k}_+,\hat{k}_1]=0,\ [\hat{k}_0,\hat{k}_1]=\frac{1}{2}\hat{k}_1,\ [\hat{k}_-,\hat{k}_1]=i\hat{k}_2\\&[\hat{k}_+,\hat{k}_2]=-i\hat{k}_1,\ [\hat{k}_0,\hat{k}_2]=-\frac{1}{2}\hat{k}_1,[\hat{k}_-,\hat{k}_2]=0\end{aligned}\right\}\quad(10-73)$$

由于$su(1,1)$是单纯的，而$h(3)$是根（Radical），所以该系统的代数结构具有一般李代数的形式：一般李代数＝单纯李代数⊕根＝$S\oplus R$.

(10－71）式除了描述与时间有关的广义谐振子与外场的相互作用外，还可用于讨论激光等离子体相互作用中的非泊松效应．薛定格方程（10－21）可以在下述规范变换下求解：

$$U_g(t)=e^{iv(t)}\cdot e^{iv_2(t)\hat{k}_2}\cdot e^{-iv_1(t)\hat{k}_1}\cdot e^{iv_-(t)\hat{k}_-}\cdot e^{iv_0(t)\hat{k}_0}\quad(10-74)$$

规范变换参数$v_i(t)$满足一组非线性常微分方程，规范变换后的哈密顿量变为

$$\left.\begin{aligned}&\hat{\tilde{H}}(t)=f(t)\,\hat{I}(0)\\&\hat{I}(0)=\hat{k}_++\kappa\hat{k}_-=\frac{1}{2}(\hat{p}^2+\kappa\hat{q}^2)\\&f(t)=X_+(t)e^{-v_0(t)}\end{aligned}\right\}\quad(10-75)$$

由此容易求得系统的动力学非绝热基矢：

$$\begin{aligned}\Psi_n(t)=&N_n(\chi\alpha)e^{i[\theta_n(t)+v(t)]}e^{i[\frac{1}{2}v_-(q-v_1)^2+v_2q]}\\&\cdot e^{-\frac{1}{2}[\chi\alpha(q-v_1)]^2}H_n(\chi\alpha(q-v_1))\end{aligned}\quad(10-76)$$

其中，χ，α，θ_n，H_n的意义与（10－48b）式中一样．这里的$\Psi_n(t)$描述一个振动尺度和原点都随时间变化的振子；外场的耦合不仅改变了振子的原点，也改变了集体运动速度势的形式．

从$\Psi_n(t)$可以计算非绝热能级$E_n(t)$和贝利相位ϕ_n^B，这里从略．

为了讨论量子－经典对应，应算出 Cartan 不变算子：

$$\hat{I}(t)=U_g\hat{I}(0)U_g^{-1}=\alpha_+\hat{k}_++\alpha_0\hat{k}_0+\alpha_0\hat{k}_0+\alpha_-\hat{k}_-+\alpha_1\hat{k}_1+\alpha_2\hat{k}_2+\delta\quad(10-77)$$

其中$\alpha(t)$和$\delta(t)$可用$v_i(t)$非线性地表示出来．然而从（10－11）式求得$\alpha_i(t)$和$\delta(t)$的运动方程却是线性的，这再一次表现出代数动力学的优点：可以自动给出非线性变换，实现运动方程的线性化．

由于这里的代数结构不再是半单的，而不变算子的运动方程中涉及的结构

常数矩阵不能全部厄密化，所以$\alpha_\nu(t)$与$k_\nu(t)$之间失去了直接的对应．然而，它们之间存在着一种明确的间接的对应，即$k_\nu(t)$的经典运动方程的无穷多个连续的连成一片的齐次解对应一个量子解中的$\{\alpha_+(t),\alpha_0(t),\alpha_-(t)\}$，而$k_\nu(t)$的经典运动方程的非齐次解对应于量子解中的$\{\alpha_1(t),\alpha_2(t)\}$．

(4) 变频辐射场与经典流的相互作用——$hw(4)$动力系统[8]．

变频辐射场与经典流相互作用的哈密顿量为

$$\hat{H}(t) = \omega(t)\,\hat{a}^+\,\hat{a} + \Omega^*(t)\,\hat{a}^+ + \Omega(t)\,\hat{a} \qquad (10-78a)$$

它也可以描述变频振子与外电场的相互作用：

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2}\omega(t)(\hat{p}^2 + \hat{q}^2) + eE(t)\,\hat{q} \qquad (10-78b)$$

这是另一个具有一般李代数结构的系统，因为它具有$hw(4)$代数结构，而

$$hw(4) = \{\hat{n} = \hat{a}^+\,\hat{a};\ \hat{a}^+,\ \hat{a},1\} = U(1) \oplus h(3) = S \oplus R \qquad (10-79)$$

对易关系为

$$[\hat{a},\hat{a}^+] = 1,[\hat{n},\hat{a}^+] = \hat{a}^+,\ [\hat{n},\hat{a}] = -\hat{a} \qquad (10-80)$$

与时间有关的薛定格方程（10－21）可以在两种规范（表象）中求解．

先考虑谐振子表象，其规范变换为

$$U_g(t) = e^{v_1(t)\hat{a}} \cdot e^{v_2(t)\hat{a}^+} \cdot e^{v_3(t)\hat{n}} \cdot e^{v_4(t)} \qquad (10-81)$$

v_i满足

$$\left.\begin{aligned} & v_3 = 0 \\ & \frac{dv_1}{dt} - i\omega(t)v_1 + i\Omega(t) = 0 \\ & \frac{dv_2}{dt} + i\omega(t)v_2 + i\Omega^*(t) = 0 \\ & \frac{dv_4}{dt} + \frac{dv_1}{dt}v_2 + i\Omega(t)v_2 - i\Omega^*(t)v_1 - i\omega(t)v_1v_2 = 0 \end{aligned}\right\} \qquad (10-82)$$

在$U_g(0)=1$的初始条件下，容易求得上式的解析解．

变换后的哈密顿量为

$$\tilde{H}(t) = \omega(t)\,\hat{I}(0) \qquad (10-83a)$$

$$\hat{I}(0) = \hat{n} \qquad (10-83b)$$

动力学不变算子为

$$\hat{I}(t) = U_g \hat{I}(0) U_g^{-1} = \hat{n} + \alpha(t)\,\hat{a} + \alpha^*(t)\,\hat{a}^+ + \delta(t) \quad (10-84)$$

由于不变算子在$\hat{n}$子空间的自由度被冻结了，对$\hat{I}(t)$而言，$h\omega(4)$约化为$h(3)$，因而导致很好的量子经典对应.

动力学非绝热基矢为

$$\Psi_n(t) = \sum_{m=0}^{\infty} e^{-im\int_0^t \omega(\tau)d\tau + iRe\int_0^t \gamma(\tau)\chi(\tau)d\tau - \frac{1}{2}|\chi(t)|^2} \cdot$$

$$\sqrt{\frac{n!}{m!}}\,|\chi(t)|^{m-n} L_n^{m-n}(|\chi(t)|^2)\,|m\rangle \quad (10-85a)$$

其中$L_n^m(x)$为拉盖尔多项式，$|m\rangle$为谐振子波函数，

$$\gamma(t) = \Omega(t) e^{-i\int_0^t \omega(\tau)d\tau} \quad (10-85b)$$

$$\chi(t) = -i\int_0^t \gamma^*(\tau)d\tau \quad (10-85c)$$

再考虑相干态表象，这时v_i满足

$$\left.\begin{aligned} &v_1 = 0 \\ &\frac{dv_2}{dt} + i\omega(t)v_2 + i\Omega^*(t) = 0 \\ &\frac{dv_3}{dt} + i\omega(t) = 0 \\ &\frac{dv_4}{dt} + i\Omega(t)v_2 = 0 \end{aligned}\right\} \quad (10-86)$$

初始条件$U_g(0)=1$的解很容易算出. 这时

$$\hat{\tilde{H}} = f(t)\,\hat{I}(0) \quad (10-87a)$$

$$\hat{I}(0) = \hat{a} \quad (10-87b)$$

$$f(t) = \gamma(t) \quad (10-87c)$$

满足与时间有关的薛定格方程（10－21）的动力学非绝热基矢为含时相干态：

$$\Psi_\lambda(t) = e^{i\theta_\lambda(t)}\phi_\lambda(t) \quad (10-88a)$$

$$\phi_\lambda(t) = e^{\frac{1}{2}[|\Lambda(t)|^2 - |\lambda|^2] - i\int_0^t \gamma(\tau)\chi(\tau)d\tau}\,|\Lambda(t)\rangle \quad (10-88b)$$

$$|\Lambda(t)\rangle = e^{\Lambda(t)\hat{a}^+ - \Lambda^*(t)\hat{a}}\,|0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\Lambda(t)|^2}\sum_{n=0}^{a}\frac{|\Lambda(t)|^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle \quad (10-88c)$$

$$\theta_\lambda(t) = -\lambda\chi^*(t) \tag{10-88d}$$

$$\Lambda(t) = v_2(t) + \lambda e^{v_3(t)} = \frac{\chi(t)}{\Omega(t)}(\lambda + \chi(t)) \tag{10-88e}$$

由于同样的理由（$\hat{I}(t)$在$\hat{n}$子空间的分量被冻结了），在这种情况下，也有很好的量子经典对应.

本实例具体显示了规范自由度，即表象选取的自由度的含义. 对于一个比较复杂的代数，由于 *CSCOII* 可以有不同选法，这就导致不同的最佳规范，因而导致求解问题时不同的表象. 究竟选取哪个表象，视物理问题而定. 例如，在本例中，如果问题的初始条件为相干态，则选用相干态表象最为恰当；如果问题的初始条件为谐振子态，则选用谐振子表象最为恰当.

(5) 一般线性半单李代数系统和坐标与动量的二次型的哈密顿系统[9-10].

前面讨论的线性代数动力系统的阶都比较低，代数动力学解法也比较简单. 对于阶数比较高的线性代数系统，求解就比较复杂，需要运用一些群论技巧，使问题尽可能简化.

对于一般的半单李代数线性系统[9]，我们给出一种简便的解法. 半单李代数 g 在 Cartan 标准形式下，

$$g = \{\hat{H}_i, \hat{E}_\alpha, \hat{E}_{-\alpha} \mid i = 1,2,\cdots,l; \alpha = 1,2,\cdots,m = \frac{n-l}{2}\}$$

（n 为李代数的阶，l 为其秩），代数关系为

$$\left.\begin{aligned} &[\hat{H}_i, \hat{H}_j] = 0 \\ &[\hat{H}_i, \hat{E}_\alpha] = a_i \hat{E}_\alpha \\ &[\hat{E}_\alpha, \hat{E}_{-\alpha}] = \sum_{i=1}^{l} a_i \hat{H}_i \\ &[\hat{E}_\alpha, \hat{E}_\beta] = N_{\alpha\beta}\hat{E}_{\alpha+\beta} \end{aligned}\right\} \tag{10-89}$$

其中，$(\alpha+\beta)$ 是根.

g 的线性动力系统的哈密顿量为

$$\hat{H}(t) = \sum_{i=1}^{l} a_i \hat{H}_i + \sum_{\alpha=1}^{m}(b_\alpha \hat{E}_\alpha + c_\alpha \hat{E}_{-\alpha}) \tag{10-90}$$

与时间有关的薛定格方程（10-21）可以通过两次规范变换求解. 第一次规范变换的目的是消去$\hat{H}$中的$\hat{E}_\alpha$项.

设
$$U_1 = e^{if_m\hat{E}_m}e^{if_{m-1}\hat{E}_{m-1}}\cdots e^{if_1\hat{E}_1} \tag{10-91}$$

令变换后的哈密顿量中$\hat{E}_\alpha$的系数为零，可得f_i的常微分方程：

$$\frac{df_i}{dt} = F_i(a_i, b_\alpha, c_\alpha, f_1, \cdots, f_m) \tag{10-92}$$

其中F_i为f_i的多项式，而变换后的$\hat{H}^{(1)}$为

$$\hat{H}^{(1)}(t) = \sum_{i=1}^{l} a_i'(t)\,\hat{H}_i + \sum_{\alpha=1}^{m} c_\alpha'(t)\,\hat{E}_{-\alpha} \tag{10-93}$$

再实施第二次规范变换，目的在于消去$\hat{H}^{(1)}$中的$\hat{E}_{-\alpha}$项.

设
$$U_2(t) = e^{ig_m\hat{E}_{-m}}e^{ig_{m-1}\hat{E}_{-m+1}}\cdots e^{ig_1\hat{E}_{-1}} \tag{10-94}$$

要求变换后$\hat{H}^{(2)}$中$\hat{E}_{-\alpha}$的系数为零，得g_i的常微分方程：

$$\frac{dg_i}{dt} = G_i(a_i', c_\alpha'; g_1, \cdots, g_m) \tag{10-95}$$

其中，G_i是g_i的多项式. 这时变换后的$\hat{H}^{(2)}$为

$$\hat{H}^{(2)} = \sum_{i=1}^{l} d_i\hat{H}_i \quad (d_i = a_i') \tag{10-96}$$

$\hat{H}^{(2)}$是Cartan算子的线性函数，对应的薛定格方程很容易求解：

$$\left.\begin{aligned} \psi_n^{(2)}(t) &= e^{-i\theta_n(t)} \mid \phi_n\rangle \\ \hat{H}_i \mid \phi_n\rangle &= n_i \mid \phi_n\rangle \\ \theta_n(t) &= \sum n_i\int_0^t d_i(\tau)d\tau \end{aligned}\right\} \tag{10-97}$$

通过逆变换可求得$\hat{H}$（t）的动力学非绝热基矢：

$$\begin{aligned} \psi_n(t) &= e^{-i\theta_n(t)}(U_2U_1)^{-1}\psi_n^{(2)}(t) \\ &= \sum_{|m_i|} e^{-i\theta_n(t)}D_{mn} \mid \phi_m\rangle \end{aligned} \tag{10-98}$$

其中广义D函数定义为

$$D_{mn}(t) = \langle\phi_m \mid U_1^{-1}(t)U_2^{-1}(t) \mid \phi_n\rangle \tag{10-99}$$

对于坐标和动量二次型的哈密顿系统[10]，其哈密顿量一般可写为

$$\hat{H}(t) = \sum_{ij=1}^{N}[A_{ij}(t)\,\hat{p}_i\hat{p}_j + B_{ij}(t)\,\hat{q}_i\hat{q}_j + C_{ij}(t)(\hat{p}_i\hat{q}_j + \hat{q}_j\hat{p}_i)]$$

$$= \sum_{ij=1}^{N} [a_{ij}(t)(\hat{a}_i^+ \hat{a}_j + \frac{1}{2}\delta_{ij}) + b_{ij}(t)\ \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ + b_{ij}^*\ \hat{a}_i \hat{a}_j] \tag{10-100}$$

该系统具有$sp(2n)$代数结构，可按前面类似的步骤求解：先进行只含生成元$\{\hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+\}$的规范变换，消去$\hat{H}$中$\{\hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+\}$项的系数；再进行只含生成元$\hat{a}_i \hat{a}_j$的变换，消去$\hat{H}$中的$\{\hat{a}_i \hat{a}_j\}$项；剩下的项$\{\hat{a}_i^+ \hat{a}_j\}$是$su(N)$群的生成元，再分别对其进行其升算子陪集空间和降算子陪集空间的规范变换，得到只含 Cartan 算子$\{\hat{a}_i^+ \hat{a}_i\}$的$\hat{H}$，从而完成了最佳规范变换．到此薛定格方程就容易求解了．

10.3.1.2 非线性可积系统

上一小节研究的是非自治线性系统是可积的，系统的状态具有好的量子数，描述了规则的量子运动．非线性量子系统是更为真实而有趣的系统，大多数非线性系统是不可积的，系统的守恒量受到破坏，描述的是不规则的量子运动．但也有一些非线性系统，具有动力学对称性和相应的守恒的量子数，仍用来描述某种规则的量子运动．本小节就要研究这类非线性代数动力系统．

(1) 腔场量子电动力学中 J－C 模型的推广——$su(N)$非线性动力系统[11-12]．

考虑一个 N－能级原子与单模腔场的相互作用，系统的哈密顿量可以写成

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_a(t) + \hat{H}_f(t) + \hat{H}_i(t) \tag{10-101}$$

N 能级原子的哈密顿量为

$$\hat{H}_a(t) = \sum_{i=1}^{N} \omega_i(t) b_i^+ b_i \tag{10-102}$$

单模腔场的哈密顿量为

$$\hat{H}_f(t) = \omega(t) a^+ a + \rho(a^+ a, t) \tag{10-103}$$

其中$\rho(a^+ a, t)$为描写单腔背景的能量．原子和辐射场交换 K 个光子的相互作用有三种类型，如图 10－2 所示：

$$\hat{H}_i(t) = \sum_{i=2}^{N} \rho_i(a^+ a, t) a^k b_i^+ b_{i-1} + h.c(\Xi\text{－型}) \tag{10-104a}$$

$$\hat{H}_i(t) = \sum_{i=2}^{N} \rho_i(a^+ a, t) a^k b_i^+ b_1 + h.c(\text{V－型}) \tag{10-104b}$$

$$\hat{H}_i(t) = \sum_{i=2}^{N} \rho_i(a^+ a, t) a^{+k} b_i^+ b_N + h.c(\Lambda - 型) \quad (10-104c)$$

其中 ρ，ρ_i 表示辐射场的非线性效应．上述哈密顿量是高度非线性的，但是有两个不变量：

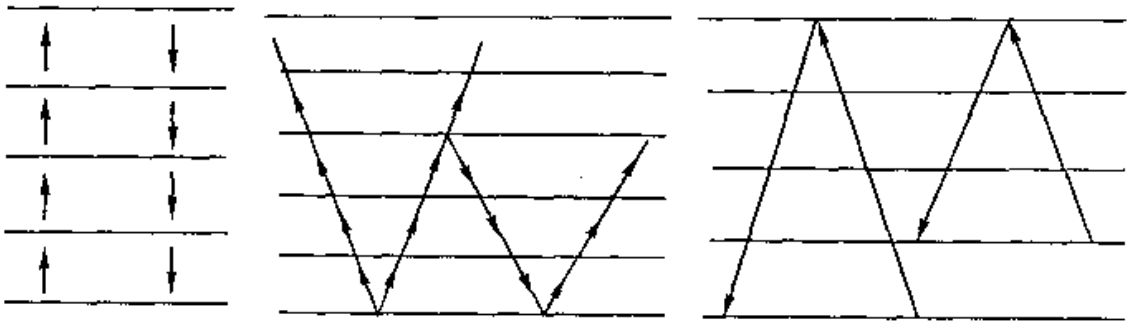


图 10－2　三种类型相互作用的能级示意图

①总电子数算子守恒

$$N_e = \sum_{i=1}^{N} b_i^+ b_i \quad (10-105)$$

②激发数算子守恒

$$\Delta = a^+ a + k \sum_{i=1}^{N} i b_i^+ b_i \quad (Ξ - 型) \quad (10-106a)$$

$$\Delta = a^+ a + k \sum_{i=1}^{N} b_i^+ b_i \quad (V - 型) \quad (10-106b)$$

$$\Delta = a^+ a - k \sum_{i=1}^{N-1} b_i^+ b_i \quad (\Lambda - 型) \quad (10-106c)$$

现在考虑单电子情况．对Ξ－型，引进$U(N)$生成元：

$$A_{ij} = \sqrt{\frac{(\Delta - ki)!(\Delta - kj)!}{\Delta!\Delta!}} a^{ki} a^{+ki} b_i^+ b_j \quad (10-107)$$

则$\hat{H}$可写成$U(N)$生成元 A_{ij}的线性函数，但系数是不变算子 Δ 的函数：

$$\hat{H} = \omega\Delta + \sum_{i=1}^{N} \omega_i'(\Delta) A_{ii} + \sum_{i=2}^{N} (f_i(\Delta) A_{i,i-1} + h.c) \quad (10-108a)$$

其中

$$\omega_i'(\Delta) = \omega_i - ki + \rho(\Delta - ki) \quad (10-108b)$$

$$f_i(\Delta) = \rho_i(\Delta - ki)\sqrt{\frac{(\Delta - k(i-1))!}{(\Delta - ki)!}} \qquad (10-108c)$$

很容易证明，A_{ij}满足$u(N)$代数，Δ 为不变算子：

$$[\Delta, A_{ij}] = 0, \quad [A_{ij}, A_{kl}] = \delta_{jk}A_{il} - \delta_{il}A_{kj} \qquad (10-109)$$

电子数守恒要求

$$\sum_{i=1}^{N} A_{ii} = \sum_{i=1}^{N} b_i^{\dagger} b_i = 1 \qquad (10-110)$$

使得$u(N)$代数变成 $su(N)$代数.

类似地，对 V－型，$U(N)$生成元为

$$A_{i1} = \sqrt{\frac{(\Delta - k)!}{\Delta!}}\, a^k b_i^{\dagger} b_1 = A_{1i}^{+}, \quad i \neq 1 \qquad (10-111a)$$

$$A_{11} = b_1^{\dagger} b_1, \; A_{ij} = b_i^{\dagger} b_j = A_{ji}^{+}, \quad i, j \neq 1 \qquad (10-111b)$$

而$\hat{H}$线性化为

$$\hat{H} = \omega\Delta + \sum_{i=1}^{N} \omega_i'(\Delta) A_{ii} + \sum_{i=2}^{N} (f_i(\Delta) A_{i1} + h.c) \qquad (10-112a)$$

其中

$$f_i(\Delta) = \rho_i(\Delta - k)\sqrt{\frac{\Delta!}{(\Delta - k)!}} \qquad (10-112b)$$

$$\omega_1'(\Delta) = \omega_1 + \rho(\Delta), \; \omega_i'(\Delta) = \omega_i - k + \rho(\Delta - k), \quad i \neq 1 \qquad (10-112c)$$

对 Λ－型：

$$A_{iN} = \sqrt{\frac{\Delta!}{(\Delta + k)!}}\, a^{+k} b_i^{\dagger} b_N = A_{Ni}^{+}, \quad i \neq N \qquad (10-113a)$$

$$A_{NN} = b_N^{\dagger} b_N, \; A_{ij} = b_i^{\dagger} b_j = A_{ji}^{+}, \quad i, j \neq N \qquad (10-113b)$$

$$\hat{H} = \omega\Delta + \sum_{i=1}^{N} \omega_i'(\Delta) A_{ii} + \sum_{i=1}^{N-1} (f_i(\Delta) A_{iN} + h.c) \qquad (10-114a)$$

$$\omega_i'(\Delta) = \omega_i + k + \rho(\Delta + k) \; (i \neq N), \; \omega_N'(\Delta) = \omega_N + \rho(\Delta) \qquad (10-114b)$$

$$f_i(\Delta) = \rho_i(\Delta - k)\sqrt{\frac{(\Delta + k)!}{\Delta!}} \qquad (10-114c)$$

这样，通过非线性变换，实现了非线性广义 J－C 模型的线性化. 在 Δ 的本征值（激发数或光子数 m）标志的不可约表示空间中，哈密顿量$\hat{H}$是$su(N)$

生成元的线性函数，可以按前面介绍的方法实现求解. 因为$su(N)$是半单李代数，按照 10.2 节的定理，时间有关的广义 J－C 模型具有时间有关的动力学对称性，所以是可积系统，其状态具有好的守恒量子数. 应当指出，我们所考虑的是单电子系统，$su(N)$的不可约表示是 N 维基础表示，用$\Gamma(m,k,N)$标志，其中 m 是Δ 的本征值（与光子数相联系），k 是交换的光子数，N 是原子能级数. $\hat{H}$的本征态，是被光子包围着的电子，即“穿了衣服”的电子，是处于不同能级的叠加态；而光子态也是与电子态相伴随，处于 N 个不同光子数状态的叠加，二者构成一个复杂的纠缠态. 对于三能级Ξ－型哈密顿量的本征解，能级可以用简单的代数公式解析地表示出来，有兴趣的读者可参看原文.

(2) 其他非线性可积系统.

① 核四极共振——非线性$su(2)$动力系统[13].

核四极共振的哈密顿量为

$$\hat{H}(t) = [\vec{\Omega}(t)\cdot\vec{J}]^2 \tag{10-115a}$$

$$\vec{\Omega}(t) = \Omega[\sin\theta\cos\omega t,\ \sin\theta\sin\omega t,\ \cos\theta] \tag{10-115b}$$

$$\vec{J} = \{J_x, J_y, J_z\} \tag{10-115c}$$

J_i 表示核的自旋算子，$\vec{\Omega}(t)$ 描述绕 z 轴转动的磁场，ω 是转动频率，Ω 表示四级共振的强度. 经规范变换为

$$U_g(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t J_z} \tag{10-116}$$

$\hat{\tilde{H}}(t)$可变为

$$\hat{\tilde{H}} = (\vec{\Omega}\cdot\vec{J})^2 - \omega J_z \tag{10-117a}$$

$$\vec{\Omega} = \Omega(\sin\theta, 0, \cos\theta) \tag{10-117b}$$

这时$\hat{\tilde{H}}$是非线性的，它的本征值问题很容易进行数值研究.

② 与时间有关的氢原子问题[14].

考虑一类特殊的与时间有关的氢原子问题，其哈密顿量为

$$\hat{H}(t) = \frac{\hat{p}^2}{2m(t)} - \frac{e^2(t)}{r} \tag{10-118}$$

即电子质量、电荷都与时间有关. 如果$m(t)$，$e(t)$满足

$$m(t)e^2(t) = m_0 e_0^2 e^{c\int_0^t e^2(\tau)\mathrm{d}\tau} \tag{10-119}$$

则经两次规范变换

$$U_1(t) = e^{i\alpha(t)r^2} \tag{10-120a}$$

$$U_2(t) = e^{\beta(r\frac{d}{dr}+\frac{d}{dr}r)} \tag{10-120b}$$

$\hat{H}$变为

$$\hat{\bar{H}}(t) = f(t)\,\hat{H}_0 \tag{10-121a}$$

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e_0^2}{r} \tag{10-121b}$$

$\hat{H}_0$为静态氢原子的哈密顿量. 其中,

$$f(t) = \frac{m_0\eta(t)}{m(t)} \tag{10-121c}$$

求得的动力学非绝热基矢，是径向做呼吸运动的氢原子波函数，而且径向呼吸运动产生了一个径向的与所有量子数无关的集体运动速度势$\alpha(t)\eta(t)r^2$:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi,t) \sim \frac{e^{i\alpha(t)\eta(t)r^2}}{r} G_{nl}(\eta(t)r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{10-122}$$

其中 $$\eta(t) = \exp\left[c\int_0^t e^2(\tau)d\tau\right]$$

G_{ne}是氢原子的径向波函数.

如果$m(t)$, $e(t)$不满足上述特殊关系，则很难求得一般解. 但若初始时刻电子处于基态，则可以求得与时间有关的薛定格方程的解.

最近，代数动力学用于量子逻辑门研究[15]和自旋开关研究[16]也取得成功. 还有一些其他的有趣的非线性动力系统问题，有可能用代数动力学方法求解，这里就不详述了.

10.3.2 不可积系统与量子无规运动

上一节我们用代数动力学方法研究了具有动力学对称性的规则运动的量子体系，包括线性代数动力学系统和可以线性化的非线性的代数动力学系统. 这一节我们将用代数动力学方法研究不具有动力学对称性的非线性代数动力学系统，这类系统描述的是不规则的量子运动.

10.3.2.1 原子核中规则运动与无规运动的并存[1,17]

从核结构与核反应的实验和理论研究可以发现，在原子核这个量子系统

中，既存在量子规则运动，又存在量子无规运动，而且这两类运动有时是并存的．在核结构中，壳模型所描述的单粒子运动和集体运动模型所描述的低能核谱中的集体运动，是典型的量子规则运动，它们的特点是系统的状态具有守恒的好量子数，波函数和能级是这些好量子数的规则函数．这种量子规则运动的动力学根源是系统的哈密顿量具有动力学对称性，这类系统自然是可积的．上一节研究的正是这类非自治系统．与之相反，复合核的能谱，玻尔－莫特逊指出的各态历经的集体态是原子核中量子无规运动的代表．这类运动的特点是，除能量、角动量、宇称等基本守恒量外，系统不再具有其他好的量子数；波函数和能级，由于众多复杂状态的混杂而表现得极不规则，在极端情况下表现出GOE（高斯正交系综）的统计特征．量子无规运动的动力学根源在于粒子间的相互作用严重地破坏了系统的动力学对称性及其相应的守恒量子数．在核反应中，光学模型和直接反应模型所描述的核反应过程是量子规则运动的代表，而复合核反应则是量子无规运动的例子．它们的特点和动力学根源与核结构的情况类似．核结构对应于系统的哈密顿量的负能间断谱问题，而反应则对应于正能连续谱问题；由于连续谱，反应问题就更为复杂．

对于核物理，量子规则运动和量子无规运动并存的典型例子，在核结构中是热原子核的巨共振，在核反应中是耗散的重离子核反应．热原子核中核子运动是极其无规的，以至于需要引进温度，而建筑在它上面的巨共振则是高度相干的规则的集体运动态．因此，热原子核的巨共振生动地体现出原子核中无规运动与规则运动的并存．在耗散的重离子核反应中，入射离子与靶核之间规则的相对运动的能量，由于核子－核子之间的碰撞，不断地转化为核子无规运动的能量，使得原子核系统从冷变热，规则的相对运动能量就耗散为内部核子的热运动能量．在这里，量子规则运动和量子无规运动，不仅是并存的，而且是转化的．因此，在原子核中，量子规则运动和无规运动的并存与交织是一个事实，问题是如何统一地描述它们．

既然量子规则运动与系统的动力学对称性的保持相联系，而量子无规则运动与系统的动力学对称性的严重丧失相联系，而动力对称性又可以用群论或代数的语言加以描述；那么，无论是量子规则运动，还是量子无规运动，只要系统的代数结构知道了，就可以用代数动力学的方法加以研究．下面，我们就原子核量子系统，对量子规则运动和无规运动的统一描述提出一些初步的想法．

10.3.2.2 描述原子核的规则运动和无规运动的基本思路[1]

讨论限于原子核多体系统的结合态，即核结构问题. 对于核结构问题，自洽平均场表象是研究问题的很好的出发点. 如果核子－核子之间存在二体相互作用，则原子核的哈密顿量可以写成

$$\hat{H} = \sum_{j}\epsilon_{j}a^{+}_{jm}a_{jm} + \frac{1}{4}\sum_{\{j_i m_i\}}\langle j_1 m_1 j_2 m_2 \mid V \mid j_3 m_3 j_4 m_4\rangle a^{+}_{j_1 m_1}a^{+}_{j_2 m_2}a_{j_3 m_3}a_{j_4 m_4} \tag{10-123}$$

其中 a^{+}_{jm}（a_{jm}）是自洽平均场中独立粒子态 $|jm\rangle$ 的产生（湮灭）算符. (10－123)式第一项表示独立核子系统的哈密顿量，第二项代表平均场以外的剩余相互作用. 显然，原子核系统的哈密顿量，在二体相互作用近似下，是自洽平均场产生的独立粒子态的产生、湮灭算符 a^{+}_{jm}，a_{jm} 的二次型 $\{a^{+}_{jm}a^{+}_{j'm'}$，$a^{+}_{jm}a_{j'm'}$，$a_{jm}a_{j'm'}\}$ 的函数. 上述二次型生成 Hilbert 空间的无穷维李代数，从而决定了原子核多体系统结合态的一切可能的运动模式，因而构成了系统的运动学代数.

众所周知，原子核的平均场产生的单粒子态具有壳层结构，把无穷维 Hilbert 空间分解成一系列有限维的壳层子空间和相应的壳层运动学群的子代数，对第 i 壳层而言为 $so(4\Omega_i)$，且

$$so(4\Omega_i) = \{a^{+}_{j_i m_i}a^{+}_{j_i m'_i}, a_{j_i m_i}a_{j_i m'_i}, a^{+}_{j_i m_i}a_{j_i m'_i}\} \tag{10-124}$$

其中 $2\Omega_i$ 是第 i 个大壳层内的状态数. 大壳内状态的分布情况完全依赖于平均场的性质. 因此，自洽平均场决定了大壳运动群和大壳代数的类型和性质，通过壳代数的一切可能的子代数，又决定了壳内各种可能的运动模式.

同时，自洽平均场还决定了剩余相互作用的性质. 正是这种剩余相互作用使壳代数分化成确定的子代数链，从可能的运动模式中挑选出物理上可实现的运动模式，即从运动学群中挑选出动力学对称群.

上述把无穷维 Hilbert 空间约化为有限维壳层子空间的做法在物理上是很好的近似. 对低能核谱问题，一个大壳代数就是合适的近似. 如果处理的问题激发能较高，则可以把几个大壳合并成一个超大壳加以处理. 当然，对于原子核多体问题，一个大壳或超大壳内多体系统的 Hilbert 空间的维数常常是很大的，往往超出现代计算机的处理能力. 因此，需要额外的简化近似去减少 Hilbert 空间的维数. 幸好，自然界自身把其运动模式从低能到高能划分为界

限鲜明的量子层次，而在每个层次又把运动划分为不同的模式，这就使人们可以分别加以研究．让我们看看运动模式是如何分化的．

设运动学群 G 的生成元为$\hat{x}_\alpha$，且

$$\hat{x}_\alpha = \{a^+_{jm}a^+_{j'm'},\ a_{jm}a_{j'm'},\ a^+_{jm}a_{j'm'}\} \tag{10-125}$$

则系统的哈密顿量可以写成

$$\hat{H}(\hat{x}_\alpha) = \hat{H}_0 + V \tag{10-126a}$$

$$\hat{H}_0 = \sum_\alpha c_\alpha \hat{x}_\alpha,\ \hat{V} = \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta}\hat{x}_\alpha\hat{x}_\beta \tag{10-126b}$$

其中$\hat{H}_0$是一体算子，代表平均场；$\hat{V}$是二体算子，代表剩余相互作用．设 G 的群链为$G\supset G_s$，其 *CSCOII* 为 $\{C,\ C_s,\ H_i\}$，其中 C 为G 的 Casimir 算子，C_s 为 G_s 的 Casimir 算子．

$\hat{H}(\hat{x}_\alpha)$可以具有下述三类结构：

(1) $\hat{H}\ (\hat{x}_\alpha)$ 是群 G 的某一个群链的 *CSCOII* 的函数：

$$\hat{H}(\hat{x}_\alpha) = \hat{H}[\{C, C_s, H_i\}] \tag{10-127}$$

相应地，该系统具有这种动力学对称性和相应的运动模式．这种情况比较特殊，各种纯净的集体运动模型即属此类．

(2) $\hat{H}(\hat{x}_\alpha)$是 G 的两条以上群链的 *CSCOII* 的函数：

$$\hat{H}(\hat{x}_\alpha) = H[\{C, C_{s_1}, H_{i_1}\}, \{C, C_{s_2}, H_{i_2}\}, \cdots] \tag{10-128}$$

这时系统出现几种运动模式的混杂．若一个群链占支配地位，则系统的运动模式由它决定，别的模式产生微扰．这是较普遍的情况，相互作用玻色子模型和费米子动力学对称性模型都是从这种情况出发的．

十分有趣的发现是，当两种差别很大的动力学对称性确定的运动模式出现在同一个哈密顿量中，而且彼此强度相当时，系统的量子运动是极其无规的[18,19]：两种差别很大的运动模式的势均力敌的抗争会导致无规运动甚至混沌．

(3) $\hat{H}(\hat{x}_\alpha)$不能表示成任何群链的 *CSCOII* 的函数：

$$\hat{H}(\hat{x}_\alpha) \neq \hat{H}[C, C_s] \tag{10-129}$$

相应于高度不可积的系统和量子无规运动．

上述用群论和代数动力学的观点对原子核的运动模式进行的分析，使得我

们可以用代数动力学方法统一研究量子规则和量子无规运动. 在 10.3.1 节中仔细研究了可积系统和规则运动，下面将介绍几种研究量子无规运动的代数动力学方法.

10.3.2.3 *能级动力学——研究规则运动向无规运动转化的方法*[17,20]

一个具有动力学对称性的可积的量子系统，当加上破坏动力学对称性的相互作用之后，原来具有不同量子数相互交叉的能级会出现准交叉. 如果把一条能级看作一个粒子，则破坏动力学对称性的相互作用产生的能级准交叉就像粒子－粒子碰撞一样，正是这些众多的能级准交叉或粒子－粒子碰撞，使得具有动力学对称性的规则的能级系统变得很不规则. 就像分子之间的碰撞导致分子混沌运动一样，破坏动力学对称性的相互作用也会使能级分布产生混沌. 这种量子系统的能级分布转变的过程，可以用能级动力学（Level dynamics）来描述. 设系统的哈密顿量由具有动力学对称性的$\hat{H}(0)$和破坏动力学对称性的$\hat{V}$组成：

$$\hat{H}(t) = \hat{H}(0) + \hat{V}t \tag{10-130}$$

t 是像时间一样的可变参数，表示微扰$\hat{V}$的强度. 运用$\hat{H}(0)$的本征表象

$$\hat{H}(0) = x_n(0) \mid n(0)\rangle \tag{10-131}$$

$\hat{H}(t)$ 可以写成

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0(t) + \hat{V}^{off}t \tag{10-132}$$

其中

$$\hat{H}_0(t) = \hat{H}(0) + \hat{V}^{dia}t \tag{10-133a}$$

$$\hat{V}^{dia} = (\hat{V}^{dia}_{nm} = \langle n(0) \mid \hat{V} \mid m(0)\rangle\delta_{nm}) \tag{10-133b}$$

$$\hat{V}^{off} = (\hat{V}^{off}_{nm} = \langle n(0) \mid \hat{V} \mid m(0)\rangle, n \neq m) \tag{10-133c}$$

显然$\hat{V}^{dia}$与$\hat{H}(0)$对易，仍保持原有的动力学对称性.

考虑$\hat{H}(t)$的本征值问题，有

$$\hat{H}(t) \mid n(t)\rangle = X_n(t) \mid n(t)\rangle \tag{10-134a}$$

$$\mid n(t)\rangle = \sum_m C_{nm}(t) \mid m(0)\rangle \tag{10-134b}$$

设

$$P_n(t) = \langle n(t) \mid \hat{V} \mid n(t) \rangle \qquad (10-135)$$

则从（10－134a）式，（10－134b）式和（10－135）式可得$X_n(t)$，$P_n(t)$和$C_{nm}(t)$的运动方程：

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}X_n}{\mathrm{d}t} = P_n \\ \dfrac{\mathrm{d}P_n}{\mathrm{d}t} = 2\sum\limits_{m(\neq n)} \dfrac{V_{nm}V_{nn}}{X_n - X_m} \\ \dfrac{\mathrm{d}C_{nm}}{\mathrm{d}t} = \sum\limits_{l\neq n} \dfrac{C_{lm}X_{ln}}{X_n - X_l} \end{cases}$$

其中

$$\begin{aligned} V_{nm}(t) &= \langle m(t) \mid \hat{V} \mid n(t) \rangle \\ &= \sum_{ll'} C_{ml}(t) C_{nl'}(t) \langle l(0) \mid \hat{V} \mid l'(0) \rangle \end{aligned} \qquad (10-137)$$

方程（10－136）、（10－137）是能级动力学的基本方程组，它描述具有动力学对称性的量子系统在破坏这种对称性的相互作用影响下，能级和波函数如何随微扰强度 t 的变化而演化．该方程十分类似于具有坐标$X_n(t)$和动量$P_n(t)$的多粒子系统的运动方程，其等效哈密顿量可写成

$$H_{eff} = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N} P_n^2 - \sum_{m\neq n} V_{nm}V_{mn}\ln \mid X_n - X_m \mid \qquad (10-138)$$

其中 V_{nm}是粒子 n 与 m 之间的相互作用，这是具有内禀状态的一维库仑气体的哈密顿量，不过相互作用与状态有关而且依赖于时间．因此，可以把多体系统的一些重要概念与方法用于分析能级动力学系统．研究表明，长程相互作用（$|n-m|$较大的 V_{nm}）产生一个平滑变化的平均场，使能级产生光滑的变形；而短程相互作用（$|n-m|$小的 V_{nm}）产生能级和波函数的不规则的涨落．正如分子之间短程碰撞是分子混沌的主要原因，能级的短程准交叉是产生能级无规分布的根源．用简单的$su(2)$非线性模型的计算机实验很好地证实了上述论断．

运用能级动力学还可以估计出现量子无规运动所需要的临界微扰强度，研究无规运动基矢和规则运动基矢的一些特点．研究表明，当微扰强度等于$H(0)$的平均能级间隔，每条能级平均发生4～5次准交叉，能级混杂宽度达到16～32条时，系统的能级出现 GOE 所标志的混沌行为，无规运动基矢和规则

运动基矢具有十分不同的特点，能级和波函数的敏感性也是通过能级准交叉实现的.

10.3.2.4 规则运动和无规运动的本征值逆问题[21]

量子规则运动和无规运动的本征能谱和本征波函数的行为特征与系统的哈密顿量结构之间的联系，是本节研究的主题. 这对于认识量子规则运动和无规运动的区别是十分重要的.

量子论的求解有两类问题，即结合态本征值问题和散射与反应问题. 量子力学的直接问题是：给定系统的哈密顿量，计算出本征值问题和散射与反应问题的所有数据. 上述问题的逆问题是：给出一组充分和必要的数据，构造出一个哈密顿量能产生这些数据. 在本征值问题的逆问题中，输入的数据是本征能量 $\{E_n\}$ 和本征波函数 $\{\phi_n\}$，它们代表问题的现象学方面，包含的信息量是非常大的. 相反，由上述数据求出的哈密顿量却代表问题的本质方面，即自然定律方面，它支配着其现象，而包含的信息量却比较少. 直接问题求解的思路是演绎的，从哈密顿量出发推导出各种数据，这是一个信息量扩张的过程. 而逆问题的思路则相反，是归纳的，从大量的现象学数据抽取出自然定律，即哈密顿量，这是一个信息量压缩的过程.

对一个具有半单李代数结构的量子系统的本征值逆问题的研究表明，只有能谱的信息，不足以判定一个量子系统是可积的还是不可积的. 因为从任何分布形式的能谱（GOE 分布、泊松分布或其他分布）出发，都可以构造一个可积系统的哈密顿量. 由该论点不难理解在一维 $su(2)$ 系统中发现的与通常观点相左的现象：它的能谱可以显示 GOE 统计或泊松统计. 而通常的观点认为，一维可积系统不应当显示 GOE 统计，而守恒系统能谱的泊松统计至少应出现在二维系统. 与能谱的信息不同，波函数的信息对于判断一个量子系统的不可积性更为重要，因为破坏动力学对称性（可积性）的相互作用会产生一个相似变换（或幺正变换），使得一个量子态可以不受守恒量子数限制而在更大的 Hilbert 空间漫游，使波函数产生出非常奇异而不规则的结构. 这正好类似于经典混沌运动的轨道：破坏守恒量的相互作用会产生一个正则变换，使运动轨道突破守恒量所确定的运动环面，而在更大的相空间漫游，产生出十分不规则的运动轨道. 在这里，人们看到了量子－经典对应：在经典力学中，运动轨道对于判断系统的混沌行为是非常重要的；在量子力学中，波函数对于判断系统的不规则行为也是不可或缺的.

尽管本征值逆问题的代数途径对于理解量子规则运动和无规运动是有助的，但它不能回答这样一个问题：一个结构相对说来比较简单的哈密顿量，为什么在经典水平能产生混沌轨道，而在量子水平能产生复杂的 GOE 统计？对这一难题，上节介绍的能级动力学能给出部分答案，即破坏动力学对称性的相互作用产生的大量能级准交叉，就像分子碰撞一样，是产生能谱无规涨落和 GOE 统计的原因.

10.3.2.5 规则运动系统和无规运动系统对外场的不同响应[22]

量子系统对与时间有关的外场的响应，是物理学许多分支感兴趣的问题. 对这一问题的研究，使人们发现许多有趣的现象. 当一个与时间有关的外场作用到一个量子系统时，其响应可以分为三大类：弹性响应、黏性响应和弹性－塑性响应. 在核物理中，当两个重离子相互碰撞时，产生了一个与时间有关的平均场. 两个重原子核的耗散行为，依赖于平均场和两体剩余相互作用，二者都会破坏核子运动的守恒量子数，促使它们趋向无规运动. 当核子的运动从规则运动向无规运动转化时，集体运动的线动量和角动量将向单粒子运动耗散. 人们用代数动力学方法和简单的模型对这一问题进行了研究，所得的主要结论如下：

①当周期性外场保持系统的动力学对称性时，系统对外场的响应是弹性的；

②当周期性外场破坏系统的动力学对称性时，系统对外场的响应分几种情况：(a) 在绝热极限下，响应仍然是弹性的；(b) 如果系统的初始状态是一个周期的时间演化算子 $U(T)$ 的本征态，则该系统的响应是准弹性的；(c) 如果系统的初始状态不是 $U(T)$ 的本征态，则系统的响应是非弹性的，其细节依赖于系统的绝热本征态的统计特性. 如果绝热能谱极其无规，则响应是强耗散的，非绝热能级的准交叉在耗散中起着关键的作用.

10.3.2.6 量子无规运动与量子统计的关联

原子核系统是一个保守系统. 原子核系统显示出的量子无规运动和量子统计特性，应当具有动力学根源. 研究原子核系统的统计规律的动力学根源，或者推广一些，研究量子统计规律的动力学根源，在物理学中具有基本的重要性. 这有助于在物理学中的两类规律——决定论的动力学规律和随机性的统计规律之间架设一条相互贯通和彼此理解的桥梁. 显然，这一基本问题的解决是

极其重要的，非常诱人的，也是十分困难的.

10.3.2.7 量子统计力学系统的耗散与退相干问题

最近，代数动力学方法被推广应用于量子统计力学系统的耗散与退相干问题，引进了群的左右表示和复合表示，把具有三明治结构的量子主方程转变成薛定格型的方程，发现了玻色－爱因斯坦凝聚体冷却的主方程和二能级原子与环境耦合的主方程的动力学代数结构和守恒量子数，求得了它们的严格解析解，严格证明了这些系统趋于平衡. 代数动力学方法在量子统计力学系统中的应用才刚刚开始，具有广阔的发展前景. 下面具体介绍四个例子，对第一个例子作比较详细的介绍，以阐明用代数动力学方法处理量子统计力学系统的主方程的基本精神与步骤；对其他三个例子只作简要的介绍.

(1) 玻色－爱因斯坦凝聚体的 sympathetic cooling[23].

① sympathetic cooling 模型：当用于产生玻色－爱因斯坦凝聚体的 A 类原子的相互作用很弱，蒸发冷却的效率很低时，就需要用另一种质量较大但温度很低（nK）的 B 类原子气体作冷库与用于产生玻色－爱因斯坦凝聚体的 A 类原子相互作用使之冷却. 这种冷却称 sympathetic cooling. 描述这种冷却过程的模型如下：系统的哈密顿量 H 包括 A 类原子的哈密顿量 H_A，B 类原子的哈密顿量 H_B 和两类原子相互作用的哈密顿量 H_{AB}：

$$H = H_A + H_B + H_{AB} \tag{10-139}$$

其中，

$$H_A = \sum_{\vec{n}} \hbar\,(\omega_x n_x + \omega_y n_y + \omega_z n_z) a^+_{\vec{n}} a_{\vec{n}} \tag{10-140a}$$

$$H_B = \int \mathrm{d}\vec{k}\ \varepsilon(\vec{k}) b^+(\vec{k}) b(\vec{k}) \tag{10-140b}$$

$$H_{AB} = \sum_{\vec{n},\vec{n}'} \int \mathrm{d}\vec{k}\ \mathrm{d}\vec{k}'\, \gamma_{\vec{n},\vec{n}'}(\vec{k},\vec{k}') a^+_{\vec{n}} a_{\vec{n}'} b^+(\vec{k}) b(\vec{k}') \tag{10-140c}$$

$$\gamma_{\vec{n},\vec{n}'}(\vec{k},\vec{k}') = \frac{4\pi\hbar^2 a}{2\mu(2\pi)^3} \int \mathrm{d}\vec{r}\ \psi^*_{\vec{n}}(\vec{r}) \psi_{\vec{n}'}(\vec{r}) \mathrm{e}^{-i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{r}} \tag{10-140d}$$

a 为散射长度，$\mu = \dfrac{m_A m_B}{m_A + m_B}$ 为两种原子碰撞时的折合质量.

②量子主方程及平均场近似

量子主方程：

由总系统的密度矩阵 ρ_{A+B}满足的冯·诺依曼方程

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\rho_{A+B}}{\mathrm{d}t}=[H,\rho_{A+B}] \tag{10-141}$$

可得 A 类原子的约化密度矩阵 $\rho_A=\mathrm{tr}_B\rho_{A+B}$的量子主方程：

$$\frac{\mathrm{d}\rho_A}{\mathrm{d}t}=\frac{i}{\hbar}[H_A,\rho_A]+\hat{L}\rho_A \tag{10-142}$$

其中刘维算子$\hat{L}$定义为

$$\begin{aligned}\hat{L}\rho_A=&\sum_{m\neq n}\Gamma_{nm}^{mn}(2a_m^+a_n\rho_Aa_n^+a_m-\\&a_n^+a_ma_m^+a_n\rho_A-\rho_Aa_n^+a_ma_m^+a_n)\end{aligned} \tag{10-143a}$$

$$\begin{aligned}\Gamma_{nm}^{mn}=&\frac{\pi}{\hbar}\int\mathrm{d}\vec{k}\,\mathrm{d}\vec{k}'\gamma_{nm}(\vec{k},\vec{k}')\gamma_{mn}(\vec{k}',\vec{k})n(\vec{k})\\&[n(\vec{k})+1]\delta(\varepsilon(\vec{k})-\varepsilon(\vec{k}')+\alpha h\nu)\end{aligned}$$

$$\alpha=\sum_{i=x,y,z}(n_i-m_i) \tag{10-143b}$$

推导（10－142）式时作了下述近似：二级微扰、ρ_B 处于热平衡、Markov 近似、ρ_{A+B}的非对角元退相干.

平均场近似：

在平均场近似下，(10－143a) 式变为

$$\begin{aligned}\hat{L}\rho_A=&\sum_m\Gamma_m(2a_m^+\rho_Aa_m-a_m^+a_m\rho_A-\rho_Aa_m^+a_m-\rho_A)+\\&\sum_m\Gamma^m(2a_m^+\rho_Aa_m-a_m^+a_m\rho_A-\rho_Aa_m^+a_m+\rho_A)\end{aligned} \tag{10-144}$$

其中

$$\begin{cases}\Gamma_m=\sum_n\Gamma_{nm}^{mn}N_n,\\\Gamma^m=\sum_n\Gamma_{nm}^{mn}(N_n+1)\end{cases} \tag{10-145}$$

填充 ψ_n态的平均原子数 N_n定义为

$$N_n=\mathrm{tr}\rho_Aa_n^+a_n \tag{10-146}$$

③ 平均场近似下主方程的动力学代数结构与动力学对称性.

在平均场近似下，

$$\rho_A=\prod_m\rho_m \tag{10-147}$$

$\rho_{\pi t}$满足下述主方程：

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{\pi t}}{\mathrm{d}t} = \hat{\Gamma}_{\pi t}\rho_{\pi t} \tag{10-148}$$

这是在 ψ_{π} 态空间的主方程，它很像时间有关的 Hartree－Fock 方程（TDHF），是耦合的非线性的平均场方程. $\hat{\Gamma}_{\pi t}$对应于 TDHF 的哈密顿量，它体现了平均场，而 ψ_{π}态的平均原子数 N_{π}通过（10－145）式进入平均场，把不同轨道的量子态耦合起来. 因此，（10－148）式是量子多体问题中的（TDHF）平均场理论从量子力学向量子统计力学的推广.

耗散算子（或衰变率算子）

$$\hat{\Gamma}_{\pi t} = 2\Gamma_{\pi t}K_{\pi t}^{+} + 2\Gamma^{\pi t}K_{\pi t}^{-} - 2(\Gamma_{\pi t} + \Gamma^{\pi t})K_{\pi t}^{0} - (\Gamma_{\pi t} - \Gamma^{\pi t}) \tag{10-149}$$

具有$su(1,1)$动力学代数结构：

$$[K_{\pi t}^{0}, K_{\pi t}^{+}] = \pm K_{\pi t}^{+},\ [K_{\pi t}^{-},\ K_{\pi t}^{+}] = 2K_{\pi t}^{0} \tag{10-150}$$

按照代数动力学，主方程具有$su(1,1)$动力学对称性（有守恒量子数），方程（10－148）可以解析求解.

④ 平均场近似下量子主方程的代数动力学求解.

静态稳定解——耗散算子的本征解：

为了简便，略去（10－148）、（10－149）、（10－150）等式中表示状态的下标. 用代数动力学方法可求得（10－148）式（略去下标 m）

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \hat{\Gamma}\rho$$

的稳态解，它们是下述本征方程的解：

$$\hat{\Gamma}\rho^{n} = \gamma_{n}\rho^{n},\ \hat{\Gamma} = aK^{+} + bK^{-} - (a+b)K^{0} - (a-b)/2 \tag{10-151}$$

$$\rho^{n} = C_{n}\mathrm{e}^{a_{+}K^{+}}\mathrm{e}^{a_{-}K^{-}} \mid n\rangle\langle n \mid \tag{10-152}$$

$$\gamma_{n} = n(a-b) \leqslant 0,\ n = 0,1,2,\cdots, \tag{10-153}$$

$$a_{+} = a/b,\ a_{-} = \frac{b}{a-b},\ a = 2\Gamma_{\pi t},\ b = 2\Gamma^{\pi t},\ a \leqslant b \tag{10-154}$$

上述零本征值解是唯一的、非简并的，对应于平衡态，本征值非正保证了系统长时间趋于平衡态. 应当指出，上述本征解是完备的，它们与耗散算子的厄密共轭$\hat{\Gamma}^{+}$的本征解组成双正交系.

与时间有关的解：

(2－14) 式描述的量子系统的非平衡演化过程，可以用代数动力学方法求解，结果如下：

$$\rho(t) = C\exp[\int_0^t d\tau(b(\tau)\alpha_+(\tau) - a(\tau))] \cdot e^{\alpha_+(t)K^+} \sum_{n=0}^{\infty} f^n(t)\rho_n(0)\sum_{m=0}^{n}\binom{n}{m}(\alpha_-(t))^{-m} \mid m\rangle\langle m \mid \tag{10-155}$$

a，b 是时间的函数，α_+，α_- 满足下述微分方程：

$$\frac{d\alpha_+}{dt} = a + b\alpha_+ - (a+b)\alpha_-, \quad \frac{d\alpha_-}{dt} = b(1-2\alpha_+\alpha_-) + (a+b)\alpha_-,$$

$$f(t) = \alpha_- \exp[\int_0^t (2b\alpha_+ - a - b)d\tau] \xrightarrow{t\to\infty} \text{const} \tag{10-156}$$

⑤ 平衡态的唯一性与趋于平衡的必然性.

可以证明，任何统计态 $\rho(t)$ 都趋于唯一的平衡态：

$$\rho(t\to\infty) \to Ce^{\frac{a}{b}K^+} \mid 0\rangle\langle 0 \mid = C\sum_{n=0}\frac{(\frac{a}{b})^n}{n!} \mid n\rangle\langle n \mid \tag{10-157}$$

(2) 二能级原子与环境热辐射场相互作用——1－qubit 的耗散[24].

系统的哈密顿量为

$$H = \underbrace{\frac{1}{2}\hbar\,\omega_0\sigma_z}_{\text{原子}} + \underbrace{\sum_k \hbar\,\omega_k b_k^+ b_k}_{\text{辐射场光子}} + \underbrace{[\sum_k g_k b_k \sigma_+ + H.C]}_{\text{相互作用}} \tag{10-158}$$

上式第一项是二能级原子的哈密顿量，第二项是环境热辐射场（光子）的哈密顿量，第三项是二者的相互作用. 整个系统包括二能级原子中电子的自由度(用泡利矩阵σ_ν ($\nu = +$，$-$，z)表示）和环境热辐射场光子的自由度（用光子产生消灭算符 b_k^+，b_k 表示）. 在相互作用表象中，考虑相互作用的二级微扰，在马尔柯夫近似下，得到原子的约化密度矩阵的主方程为

$$\frac{d\rho(t)}{dt} = -\frac{i}{2}\omega_0[\sigma_z,\rho] - \frac{\gamma}{2}(\bar{n}_0+1)(\sigma_+\sigma_-\rho + \rho\sigma_+\sigma_- - 2\sigma_-\rho\sigma_+) - \frac{\gamma}{2}\bar{n}_0(\sigma_-\sigma_+\rho + \rho\sigma_-\sigma_+ - 2\sigma_+\rho\sigma_-) \tag{10-159}$$

$$\bar{n}_0 = 1/(e^{\hbar\omega_0/kT} - 1), \quad \gamma = 2\pi\sum_k \mid g_k \mid^2 \delta(\omega_k - \omega_0) \tag{10-160}$$

在量子通讯与量子计算中，二能级原子可以用作一个量子比特，环境辐射与原子相互作用引起的耗散和退相干是必须考虑的问题. 对于一个原子，这一过程

可用式（5－44a)、(5－44b）来描述．引进了群的代数的左右表示和复合表示，可把具有三明治结构的量子主方程转变成薛定格型的方程，这时原子的约化密度矩阵的主方程变为

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \hat{\Gamma}(t)\rho \tag{10－161}$$

其中耗散算子

$$\hat{\Gamma}(t) = -i\omega_0(t)\,\hat{U}_0 + \gamma(t)\bar{n}_0(t)\,\hat{J}_+ + \gamma(t)[\bar{n}_0(t)+1]\,\hat{J}_- - \frac{1}{2}\gamma(t)\,\hat{J}_0 - \frac{1}{2}\gamma(t)[2\bar{n}_0(t)+1] \tag{10－162}$$

是$u(2)=\{\hat{U}_0,\hat{J}_0,\hat{J}_+,\hat{J}_-\}$代数的线性函数，其中

$$\hat{U}_0 = \frac{\sigma_z^r - \sigma_z^l}{2},\ \hat{J}_0 = \frac{\sigma_z^r + \sigma_z^l}{2},$$

$$\hat{J}_+ = \sigma_+^r\,\sigma_-^l,\ \hat{J}_- = \sigma_-^r\,\sigma_+^l \tag{10－163}$$

$$[\hat{U}_0,\hat{J}_0] = [\hat{U}_0,\hat{J}_\pm] = 0,$$

$$[\hat{J}_0,\hat{J}\pm] = 2\hat{J}_\pm,\ [\hat{J}_+,\hat{J}_-] = \hat{J}_0 \tag{10－164}$$

其中泡利矩阵的右表示 σ_ν^r 作用于密度矩阵的左边，左表示 σ_ν^l 作用于密度矩阵的右边，$u(2)$代数是它们的复合表示．按照代数动力学，上述主方程具有$u(2)$动力学对称性（有守恒量子数），是可积系统，可以解析求解．文献[24]求得了它的包含唯一平衡态的静态本征解和必然趋于平衡态的与时间有关的非平衡态解，并研究了一个量子比特的耗散问题．

(3) 双微腔场与环境热辐射场相互作用——2－qubit 的耗散与退相干[25]．

系统的哈密顿量为

$$H = \underbrace{\sum_{i=1,2}\hbar\,\omega_i a_i^+ a_i}_{\text{双腔子光子}} + \underbrace{\sum_k \hbar\,\omega_k b_k^+ b_k}_{\text{辐射场光子}} + \underbrace{\kappa\sum(b_k^+ a_k + b_k a_k^+)}_{\text{相互作用}} \tag{10－165}$$

双腔约化密度矩阵的主方程为

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \Gamma(t)\rho \tag{10－166}$$

其中耗散算子

$$\Gamma = 2\begin{bmatrix} \gamma_1 \hat{K}_1^- + \gamma_2 \hat{K}_2^- + \gamma_3 \hat{K}_3^- + \gamma_3 \hat{K}_4^- - \frac{g}{2}(\hat{J}_l^- + \hat{J}_l^+) \\ -\frac{g^*}{2}(\hat{J}_r^- + \hat{J}_r^+) - \gamma_1 \hat{K}_1^0 - \gamma_2 \hat{K}_2^0 + \frac{\gamma_1 + \gamma_2}{2} \end{bmatrix} \tag{10-167}$$

是四个$su(1,1)$和两个$su(2)$代数的线性函数. 按照代数动力学，上述主方程具有动力学对称性，是可积系统，可以解析求解. 文献[25]已求得了它的包含唯一平衡态的静态本征解和与时间有关的非平衡态解，可用于研究两个量子比特的耗散与退相干问题.

(4) 量子主方程的代数动力学解法的普遍性——量子统计系统的代数动力学.

代数动力学是针对人造的非自治量子系统的求解问题而发展起来的，并在这类量子系统中得到了成功的应用. 上面的例子说明，代数动力学方法不仅适用于量子力学系统，而且也适用于量子统计力学的主方程的求解. 上述这种推广，导致量子统计系统的代数动力学的产生. 量子统计系统的这种代数动力学方法的优点是，它能解决量子统计力学中非平衡态统计的一些困难而又重要的问题，如平衡态解的存在与唯一性、任何非平衡态演化均趋于唯一的平衡态等问题. 代数动力学对于它处理的问题，不仅可提供稳定的和与时间有关的统计态的解析解，而且还可提供量子主方程的新信息，如动力学对称性、统计解所具有的守恒量子数等.

量子统计系统的代数动力学特别适合处理量子系统的耗散与退相干. 这种方法具有普遍性，它正被用于处理更多的量子耗散与退相干问题. 上面介绍的二能级原子与热源相互作用，二能级原子与单膜腔场和热源的相互作用（联系于量子位的退相干），腔场与经典场和热源的相互作用等是一些已经解决了的例子.

最近有人把代数动力学用于推广的 Fokker－Planck 方程的求解，以研究股票市场的“羊群效应”与“胖尾分布”，其方法简介如下.

(5) Fokker－Planck 方程的代数结构——$su(1,1)$非平衡耗散动力学[26]. 广义的 Fokker－Planck 方程为

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = [\underbrace{V(t)x\frac{\partial}{\partial x}}_{\text{漂移}} + \underbrace{D(t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}}_{\text{扩散}} + \underbrace{K(t)x^2}_{\text{关联}}]f(x,t) = \hat{\Gamma}(t)f(x,t) \tag{10-168a}$$

以上方程可改写为

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = [-\frac{\partial}{\partial x}A(t)x + B(t)\frac{\partial^2}{\partial x^2} + C(t)x^2]f(x,t) = \hat{\Gamma}(t)f(x,t) \tag{10-168b}$$

引进$su(1,1)$生成元

$$\begin{cases} \hat{k}_+ = \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ \hat{k}_0 = -\frac{1}{4}(\frac{\partial}{\partial x}x + x\frac{\partial}{\partial x}) \\ \hat{k}_- = -\frac{1}{2}x^2 \end{cases} \tag{10-169a}$$

满足

$$[\hat{k}_+, \hat{k}_-] = 2\hat{k}_0, \quad [\hat{k}_0, \hat{k}_\pm] = \pm \hat{k}_\pm \tag{10-169b}$$

耗散算子 $\hat{\Gamma}$可写成$su(1,1)$生成元的线性函数：

$$\hat{\Gamma}(t) = 2B(t)\hat{k}_+ + 2A(t)\hat{k}_0 - 2C(t)\hat{k}_- - \frac{A(t)}{2} \tag{10-170}$$

按照代数动力学，上述主方程具有$su(1,1)$动力学对称性，是可积系统，可以解析求解. 已用代数动力学方法求得了它的解析解，用于描述股票市场收益 x 的概率分布函数$f(x,t)$的时间演化过程，解释股票市场的“羊群效应”和收益 x 的概率密度函数$f(x,t)$的“胖尾分布”，并找出了平衡态存在的条件，证明了系统趋于平衡态的必然性.

10.4 讨论与展望

10.4.1 人造量子系统问题

人造量子系统包括一大类量子系统，而非自治量子系统只是其中的一类. 即使是非自治量子系统，具有明确的动力学代数结构的也只是一小部分；有些非自治量子系统的代数结构不明确或根本没有有限维代数结构. 因此，寻找非自治量子系统的代数结构本身就是一个重要的研究课题. 只有把这一问题解决了，才谈得上用代数动力学方法求解. 对于不具有有限维李代数结构的非自治量子系统的求解问题，是一个有待研究的重要课题.

还有些人造量子系统存在量子点、量子线和人造的奇异边界条件，甚至粒子在弯曲的空间中运动．对这类人造量子系统，存在着奇异和弯曲流形中的量子化问题和量子运动方程求解问题．这对于传统的量子力学是一个挑战，需要进行基本性的研究．

此外，还有一些人造量子系统，实验做出来了，但很难写出系统的哈密顿量和边界条件．对于这类人造量子系统的哈密顿量的构造，求解问题的正确陈述，以及运动方程的数值模拟，是一个密切联系实际的基础理论问题．

10.4.2 代数动力学方法与其他相关方法的比较

求解非自治系统量子力学问题的方法较多，但比较流行的方法除了代数动力学，还有 Lewis－Riesenfeld 的不变算子方法[27]和 Wei－Norman 的时间演化算子方法[28]．为了比较，我们把前者称为 L－R 方法，后者称为 W－N 方法，把代数动力学称为 A－D 方法．我们下面的比较，主要是针对它们对线性系统的处理而言．代数动力学（A－D）方法的优点在于：

（1）能有效地揭示和研究非自治系统的非平凡的与时间有关的动力学对称性，并在求解时充分利用这种对称性；

（2）运用规范变换可以方便地求得系统在各种可能的表象中的解析解；

（3）把量子解所需要的参数函数的数目减到最小（等于代数的阶与秩之差 $n-l$）；

（4）能自动给出非线性变换，把规范变换的参数所满足的非线性运动方程转化成 Cartan 算子的系数所满足的线性运动方程；

（5）对线性系统，能清晰地建立起量子－经典对应，给出从经典解构造量子解的方法与步骤．

与 L－R 方法相比，代数动力学推广了 L－R 方法，使之从一个不变算子的理论推广到多个完备可互易算子集（*CSCOII*）的理论．由于这种推广，使代数动力学成为揭示非自治系统的与时间有关的动力学对称性的理论．而且代数动力学还系统地研究了非自治量子系统的规范不变性和规范自由度问题．对多自由度系统引进了动力学非绝热基矢的概念，对线性系统建立起漂亮的量子－经典对应．上述各点，都是代数动力学超越 L－R 的地方．

与 W－N 方法相比，代数动力学把 W－N 方法作为规范变换后的哈密顿量为零的极限情况包含于其中．在 W－N 方法中，规范变换后的哈密顿量为零，它既失去了规范自由度，又丧失了对非平凡的与时间有关的动力学对称性

的研究的可能性. $W-N$ 方法中时间演化算子包含的参数可以多至李代数的阶n，显然比代数动力学所需的参数（$n-l$）多. 由于 W－N 方法不能讨论动力学对称性和研究 Cartan 算子的运动方程，因此它也失去了把演化算子的参数的非线性运动方程线性化的机会，并丧失了建立起量子－经典对应的可能.

表 10－3 列举出三种方法在处理各项问题上的比较，该方法能处理的问题用“√”表示，处理了一部分用“√?”表示，不能处理用“×”表示，不明确用“?”表示.

表 10－3 代数动力学与 L－R 和 W－N 方法的比较

方法名称	系统		参数方程		不变算子集		动力学	规范不变性与	量子－经典
	线性	非线性	个数	线性化	个数	*CSCOII*	对称性	规范自由度	对应
A－D	√	√?	$n-l$	√	多个	√	√	√	√
L－R	√	×	$\geqslant(n-l)$?		1个	×	?	×	×
W－N	√	×	n	×	×	×	×	×	×

10.4.3 展 望

人造量子系统的问题已在 10.4.1 节中讨论过了，本小节讨论一下代数动力学本身的问题及其发展前景.

目前，代数动力学处理的问题基本上是线性系统和可线性化的非线性系统. 对于一般的非线性系统，如何有效地运用代数动力学方法，是今后要解决的一个问题. 对非线性动力系统，如何把非线性李代数的最新成果，如量子代数和 Yangian 方面的成果[29－31]，运用到代数动力学中去，这是一个很有意义的课题.

另外，目前研究的代数动力系统，其动力学群是整体的. 如何把代数动力学方法推广到局域的代数系统，如场论中的局域代数动力系统以及固体物理中的点阵代数（如 Heisenberg 模型的$su(2)$点阵）动力系统，这是另一个十分有意义的课题.

总之，代数动力学是针对非自治量子系统求解问题的需要而新近发展起来的理论方法. 从理论上说，代数动力学把量子力学理论形式从通常的海森堡代数动力学推广到一般的李代数动力学. 它继承和发展了 Dirac－Heisenberg 关

于量子力学是 Hilbert 空间的算子随时间演化的动力学的思想，明确地把量子力学看成是 Hilbert 空间的量子运动学代数在系统的哈密顿量驱动下的代数动力学．代数动力学吸收和推广了核物理中的动力学对称性理论成果，引进了量子场论中规范变换和规范自由度的思想，把微分几何中的活动标架和核物理中的非绝热基矢的概念发展成为动力学基矢的概念，使之成为非自治系统量子力学的新颖而有效的理论方法．代数动力学还需要发展，以克服自身的局限性，在更广泛的应用中不断完善起来．

【参考文献】

1 王顺金．人造量子系统的理论研究与代数动力学．物理学进展，1999，19 (4)：331～370

2 S. J. Wang, F. L. Li, A. Weiguny. Algebraic Dynamics and Time-dependent Dynamical Symmetry of Nonautonomous Systems. Phys. Lett. 1993, A180: 189

3 S. J. Wang, W. Zuo, A. Weiguny and F. L. Li. Phys. Lett. 1994, A196: 7

4 S. J. Wang. Phys. Rev. 1990, A42: 5107

5 S. J. Wang. Z. Phys. 1994, B96: 97

6 S. J. Wang and W. Zuo. Phys. Lett. 1994, A196: 13

7 W. Zuo and S. J. Wang. J. Phys. I France, 1997, 7: 749
左维，王顺金．物理学报，1995，44 (9)：1353

8 W. Zuo and S. J. Wang, Helv. Phys. Acta 1997, 70: 578
左维，王顺金．物理学报，1995，44 (9)：1363

9 Q. L. Jie, S. J. Wang, and L. F. Wei, J. Phys. 1997, A30: 2077
揭泉林，王顺金，韦联福．高能物理与核物理，1998，22 (2)：111～116

10 Q. L. Jie, S. J. Wang, and L. F. Wei, Commun. Theor. Phys. 1999, 31 (1): 107

11 Q. L. Jie, S. J. Wang and L. F. Wei. J. Phys. 1997, A30: 6147

12 L. X. Cen, S. J. Wang, Z. J. Ying, and C. H. Zhang. Phys. Lett. 1999, A256: 329～333

13 S. J. Wang. Phys. Rev. 1990, A42: 5103

14 张胜利. 私人通讯
15 Li-Xiang Cen, Xin-Qi Li, Yi-Jing Yan, Hou－Zhi Zheng and Shun-Jin Wang. Phys. Rev. Lett. 2003, 90 (14): 147902－1－4
16 Shun-Jin Wang, Cheng-Long Jia, Jun-Hong An and Hong-Gang Luo, Chin. Phys. Lett. 2004, 21 (5): 778～781
17 S. J. Wang and Q. L. Jie. Phys. Rev. 2000, C63: 014309－1－10
18 Zhang W. M., Martin C. C., and Feng D H, et al. Phys. Rev. Lett. 1988, 61: 2167～2170
19 Meredith D. C, Koonin S. E, and Baranger M. R, Phys. Rev. 1988, A37: 3499～3513. 22
20 S. J. Wang and S. Y. Chu. Phys. Rev. 1993, A47: 3546
21 S. J. Wang and S. Y. Chu. J. Phys. 1994, A27: 1～17
22 S. J. Wang, S. Typel, A. Weiguny, and H. Weise. J. Phys. 1998, A31: 5585
23 S. J. Wang, M. C. Nemes, A. N. Salgueiro, and H. A. Weidenmüller. Phys. Rev. 2002, A66: 033608－1－8
24 Shun-Jin Wang, Jun-Hong An, Hong-Gang Luo, and Cheng-Long Jia. J. Phys. 2003, A36: 829～840
25 B. P. Hou, S. J. Wang, W. L. Yu, W. L. Sun. J. Phys. 2004, A37: 8167～8176
26 P. Wang, S. J. Wang and H. Zhang Chin. Phys. Lett. 2005, 12 (1): 5～8
27 Lewis Jr. H R, Phys. Rev. Lett. 1967, 18: 510～512; Lewis H R and Riesenfeld W B, J. Math. Phys. 1969, 10: 1458～1473
28 Wei J and Norman E. J. Math. Phys. 1963, 4: 575～581
29 Drinfel' d V G, Hopf Algebras and the Quantum Yang-Baxter Equation, Soviet Math. Dokl. 1985, Vol. 32, No. 1
Drinfel' d V. G, Quantum Group, in Proc. of the International Conference of Mathematics, 1986, Berkeley, California, USA. 中译本见《数学译林》, 1991, Vol. 10, No. 1－2, pp101, 185
30 葛墨林, 薛康. 量子力学中的杨－巴克斯特方程. 上海科学教育出版社, 1998
31 马中骐. 杨－巴克斯特方程和量子包络代数. 科学出版社, 1993

第 11 章　量子力学前沿问题

作为现代物理学理论支柱之一的量子论，自普朗克 1900 年发现量子论算起，已经有 104 年的历史，而自 1925 年量子力学诞生以来，已经快 80 年了. 这是一门深刻而成熟的学问，又是一门底蕴神秘丰富，不断引发新发现、新发展的科学. 可以说，人们对量子论的应用知之甚多，而对量子论本质的了解却又知之甚少. 量子论的发展表现在两个方面：首先，它在广泛的应用中使自身得到发展；其次，它的神秘的深层本质被逐步揭示出来，使理论本身得到质的飞跃. 第一方面的发展经常展现在人们的面前；而第二方面的发展却是缓慢的，艰苦而罕见的，也是震撼人心的.

前面十章，我们介绍了量子论的基本理论和它在现代物理学几个领域应用中的主要理论方法. 就我们目前的理解水平阐述了量子论作为描述真空涨落效应的若干本质方面，还介绍了量子力学的一些前沿进展. 本章将简要介绍量子力学在广泛的应用中的一些前沿问题和涉及量子论本质的一些领域，作为前十章的补充. 由于量子力学前沿问题的内容十分丰富，已有不少专著介绍这一领域，我们在本章中只提出一些课题并对之作摘要性的介绍，建议有兴趣的读者根据专著文献，自己研读这些问题，作为学习这门课程的重要补充.

本章列出的问题可能挂一漏万，读者可以根据自己的兴趣研究更重要而有趣的课题. 我们对列出的问题只做摘要性的介绍，指出其实质与要点，供读者自学研读时参考.

11.1　量子 Hall 效应[1-3]

电子在（恒定）强磁场中的量子运动；电子运动的 Landau 能级的量子化和简并，加之杂质局域电子态的存在，导致 Hall 电阻的量子化（不连续变化）.

11.2 Bose－Einstein 凝聚（BEC）[1－3]

大量（10^3～10^5 个）束缚在磁光阱中的中性玻色子型的原子在极低温度下（$T=nK$）填充最低量子能态，形成宏观可观测的量子态的凝聚态现象；束缚中性玻色子型原子的阱有磁阱（不均匀磁场对电子磁矩的作用力）与激光阱（不均匀激光场对原子偶极极矩的作用力）；BEC 有各种激发；用 Gross－Pitaevskii（非线性薛定格）方程（或进一步用 Bogoliubov 近似）描述；BEC 可用于精密测量、原子激光、光子信息的储存与加工等.

11.3 Josephson 效应[1－3]

被（外部或内部）位垒分隔开的两部分玻色子凝聚体之间的位垒穿透效应；对超导体中的 Cooper 电子对的这种位垒穿透，会形成振荡的电流；Josephson 效应已用于极精密的电磁测量.

11.4 Van der Waals 力与 Casimir 效应[1－3]

①真空的电磁涨落会诱导出中性原子之间的电偶极矩之间的相互作用，产生 Van der Waals 力；②真空被两块平行金属板分割，导致不同区域内真空的电磁涨落模式的差别：两块平行金属板之间的电磁真空由于受限，其真空电磁涨落模式的数目比起两块平行金属板外部区域要少，因而平行板外部的真空电磁涨落压强大于两块平行金属板之间的真空电磁涨落压强，在金属板之间产生 Casimir 吸引力.

11.5 Bell 定理与实验[1－3]

量子涨落的测不准关系和量子态的非定域性体现了量子力学的本质特征，Bell 考虑到经典力学与量子力学的本质区别，用定理的形式（Bell 不等式）来严格区分两类力学；实验对 Bell 不等式的验证，肯定了量子力学的完备性，不存在比量子论更精细的基于隐参数的非概率的决定论理论.

11.6 量子态纠缠与退相干[1,4-6]

多体系统中粒子之间的相互作用和全同性原理，造成多粒子量子态之间的动力学关联和全同性关联. 与此相应，多粒子系统的量子态不能分解成单粒子量子态的乘积. 多粒子系统的量子态的上述不可分解性叫量子纠缠. 环境的热扰动，会使多粒子量子态之间的纠缠和相干消失，造成退相干. 量子纠缠是非定域的，它是量子通讯和量子计算的物理基础.

11.7 拓扑量子力学[7,9]

存在物质或场的物理空间或其边界的拓扑性质会对粒子的量子运动造成影响，出现与物理空间拓扑性质有关的量子数，叫拓扑量子数. 与依赖于哈密顿量和拉格朗日的对称性的量子数不同，这种量子数是由物理空间的整体几何性质决定的，是抗动力学干扰的.

11.8 量子信息与量子通讯[4-6]

①用二能级量子系统的两个状态作为一个量子比特去存储信息，用量子力学动力学演化进行信息处理、加工与传递，这种基于量子态和量子运动规律的信息论叫做量子信息论；②用非定域的、纠缠的量子态进行信息传递叫做量子通讯.

11.9 量子编码与量子计算[4-6]

①用量子态荷载（记载）信息，把量子信息用符号表示，把量子信息源的符号集与编码符号集一一对应，叫做量子编码；②把数量信息用量子态表示，通过量子动力学演化，在量子态的动力学变化中，实现了量子态所包含的数字信息的运算与加工，再从运算后的量子态中提取运算后的数量信息的结果，叫做量子计算.

【参考文献】

1 张礼,葛墨林. 量子力学的前沿问题. 清华大学出版社,2000

2 曾谨言编. 量子力学前沿问题.第一辑. 科学出版社,2000

3 曾谨言,龙桂鲁,裴寿镛. 量子力学新进展. 清华大学出版社,2003

4 李承祖,黄明球,陈平行,梁林梅. 量子通讯与量子计算. 国防科技大学出版社,2000

5 戴葵,宋辉,刘芸,谭明峰. 量子信息技术引论. 国防科技大学出版社,2001

6 M. A. Nielsen and I. L. Chuang. Quatum Computation and Quantum Information. Cambridge University Press,2000

7 李华钟. 简单物理系统的整体性. 上海科学技术出版社,1998

8 A. Shapere and F. Wilczek(Ed). Geometric Phase in Physics, Advances Series in Mathematics. Vol. 5, Singapore: World Scientific,1989

9 J. David and J. Thouless. Topological Quantum Numbers in Non-relativistic Physics. Singapore: World Scientific,1988

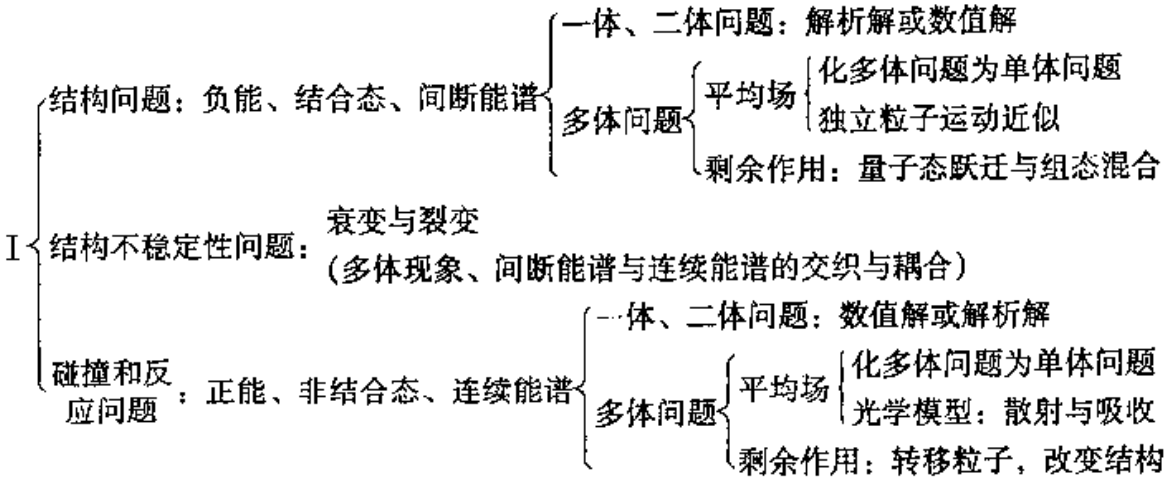
第 12 章　结语：量子力学问题

在学习了高等量子论和量子多体理论的基本内容之后，本章从更广阔的视野来审视量子力学的基本问题，以使读者对量子力学的研究领域有一个全面的了解．量子力学基本问题可以从不同角度去考察，下面从七个方面对这些问题进行分析．

12.1　按照系统的动力学性质进行分类

量子力学的基本问题可分为结构问题、结构不稳定性问题（衰变与裂变问题）以及引起结构变化的碰撞和反应问题．结构问题是负能、结合态、间断能谱问题；碰撞和反应问题是正能、非结合态、连续能谱问题；结构不稳定性问题介于二者之间，其特点是间断能谱与连续能谱的交织与耦合，这是量子多体系统特有的现象．从系统论的观点看，碰撞和反应属于系统的功能，与结构问题的关系是结构决定功能，功能改变结构，即系统的内部结构决定了它对外界作用（碰撞）能产生什么样的反应，而通过碰撞和反应又能够改变系统的结构．无论结构问题还是碰撞和反应问题，理论处理时都有一体问题（二体问题可化为一体问题）和多体问题之分，其间有最难处理的少体问题．一体（二体）问题可以解析或数值求解，多体问题可以通过平均场近似化为单体问题（独立粒子运动近似），然后再进一步处理剩余作用引起的量子态跃迁与组态混合．除了少体问题难于处理外，结构不稳定性问题、强作用下的衰变与裂变问题以及间断能谱与连续能谱的交织与耦合问题，也是极难处理的问题，至今仍缺乏精确的理论方法．上述对量子力学这一问题的阐述可简要地总结于表 12－1.

表 12－1　对量子力学问题的阐述



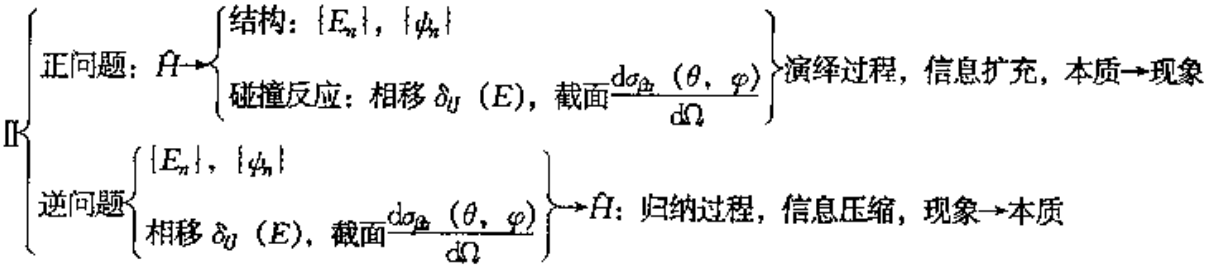
12.2　按照理论认识路线进行分类

量子力学理论问题按认识路线可分为两类，即正问题和逆问题．量子力学的正问题是：给定系统的哈密顿量，计算出本征值问题和散射与反应问题的所有数据．上述问题的逆问题是：给出一组充分和必要的数据，构造出一个哈密顿量，使之能产生这些数据．在本征值问题的逆问题中（只是逆问题的一个部分），输入的数据是本征能量$\{E_n\}$和本征波函数$\{\psi_n\}$，它们代表问题的现象学方面，包含的信息量是非常大的．相反，由上述数据求出的哈密顿量代表着问题的本质方面，即寻找自然定律的方面，自然定律支配着现象，但它包含的信息量却比较少．正问题求解的思路是演绎的，即从哈密顿量出发推导出各种数据，这是一个信息量扩张的过程．而逆问题的思路则相反，它是归纳的，即从大量的现象学数据抽取出自然定律——哈密顿量，这是一个信息量压缩的过程．

量子力学正问题的解答比起逆问题的解答来，要容易得多，人们已发展出许多切实可行的求解方法，包括结合态本征值和碰撞反应问题的求解方法．当然，正问题这一领域还存在一些困难，有待人们去解决，如前面指出的结构不稳定性问题，间断能谱与连续能谱的交织与耦合问题，以及强耦合非微扰处理问题等等．相比之下，求解逆问题的理论方法发展得就不很充分，即使对势场问题的逆问题的求解发展出所谓的反散射方法，它们也多停留在理论阐述阶段，少有对实际问题的精确解答．然而近年来，针对实际逆问题求解的需要，发展了以唯象分析数据为补充的不完全的逆问题求解方法，取得了一些实际的

有意义的成果．正问题与逆问题的求解路线可简要总结于表 12－2.

表 12－2　正问题与逆问题的求解



12.3　按照系统的量子运动方程的可积性进行分类

我们将从物理学而不是纯数学的角度来讨论量子力学运动方程的可积性问题，即把量子运动方程的可积性与量子规则运动和量子无规运动紧密联系起来讨论.

量子运动可分为规则运动和无规运动两大类，其间是两类运动并存的中间形态的广大区域．量子无规运动的极端就是所谓的量子混沌．对这些不同的物理运动状态的数学表述就是量子运动方程的可积性、不可积性和部分可积性问题.

量子规则运动的特点是系统具有完备的好量子数，波函数和能级是这些好量子数的规则函数．这种量子规则运动的动力学根源是系统的哈密顿量具有动力学对称性，这类系统自然是可积的．一般存在两种情况，即线性可积系统和非线性可积系统．线性系统一定是可积的，大多数非线性系统则是不可积的；但也有一些非线性系统可通过非线性变换线性化，从而具有动力学对称性和相应的守恒量子数，因此仍然是可积的，可描述某种规则的量子运动.

量子无规运动的特点是除能量、角动量、宇称等基本守恒量外，系统不再具有其他好量子数；波函数和能级由于众多复杂状态的混杂而表现得极不规则，在极端情况下表现出GOE（高斯正交系综）的统计特征．量子无规运动的动力学根源在于粒子间的相互作用严重地破坏了系统的动力学对称性及其相应的守恒量子数，其数学表现则是运动方程的不可积性.

量子规则运动和无规运动的并存与交织是一个普遍的现象，它构成量子现象中间形态的广大区域.

既然量子规则运动与系统的动力学对称性的保持相联系，而量子无规运动

与系统的动力学对称性的严重丧失相联系，而动力学对称性又可以用群论或代数的语言加以描述；那么，无论是量子规则运动，还是量子无规运动，只要系统的代数结构知道了，就可以用代数动力学的方法对其进行研究.

上述讨论可概括为表 12－3.

表 12－3　量子力学运动方程的可积性问题

Ⅲ
- 可积问题：完备守恒量（量子数）集——规则运动
- 中间形态
  - 部分可积（部分守恒量保持）——规则运动
  - 部分不可积（部分守恒量丧失）与无规则运动的并存
- 不可积问题：守恒量（量子数）的丧失，无规运动（极端无规运动：混沌）

12.4　按照系统的非线性度进行分类

量子力学问题按照系统的非线性度进行分类的意义在于，运动方程的非线性度的不同导致本质上不同的量子运动形态. 非线性一般表示多粒子系统中粒子之间的相互作用、耦合及反馈效应，它导致丰富多彩的结构和运动形态的形成、分化和演变. 线性系统是可积的，与规则运动相联系；而大多数非线性系统是不可积的，与无规运动相联系.

上述讨论可概括为表 12－4.

表 12－4　量子力学问题按系统的非线性度进行分类

Ⅳ
- 线性系统：可积性，规则运动
- 可线性化的系统：通过非线性变换化成线性系统，规则运动
- 非线性可积系统：规则运动
- 非线性不可积系统：无规运动（极端无规运动：混沌）

12.5　按照系统的哈密顿量的时间依赖性进行分类

量子力学系统的全部动力学信息都包含在系统的哈密顿量之中. 哈密顿量包含系统三方面的信息：①系统的动力学变量，即广义坐标和广义动量；②系统中各个粒子（或各个动力学自由度）的惯性参数；③势场和粒子之间的相互作用及其参数. 如果系统是孤立的，与外界环境没有相互作用，则哈密顿量中的参数和势场都不显含时间，这样的系统叫做自治系统，意思是系统内部的相互作用决定系统自身的运动变化，不受外界的干预. 反之，如果系统不是孤立

的，与外界环境有相互作用，环境的运动变化可以使系统的哈密顿量中的参数和势场随时间发生变化，这样的系统就叫做非自治系统．环境通过随时间变化的参数对系统实行控制和干预．非自治量子系统与下节将要讨论的人造量子系统密切相关．在人造量子系统中，人们通过随时间变化的人工势场或边界条件对系统进行控制和影响，体现了人类改造自然的能力的增强．这一分类见表 12－5.

表 12－5　量子力学问题按系统的哈密顿量的时间依赖性进行分类

V	自治系统：$\hat{H}$与t无关，系统自治地运动，不受外界干预
	非自治系统：$\hat{H}=\hat{H}(t)$，体现系统受环境的影响或人工的控制

12.6　按照系统的来源进行分类

随着科学技术的飞速进步，人类对微观系统的研究和利用已经从大自然恩赐的粒子发展到人类自己创造的粒子．在核物理中，天然的原子核同位素只有近 300 种，而目前人类可以通过加速器产生的不稳定的原子核却有6000～7000种．在粒子物理中，数千种非宇宙线基本粒子都是人们在实验室中制造出来的．凝聚态物理和介观物理的情况也是如此，如BEC和许多介观电路、介观器件都是人造的．因此，人类目前已从研究和利用天然量子系统的时代进入了研究和利用人造量子系统的时代，而且即将进入量子工程时代．在这一形势下，量子力学的研究领域也应做相应的扩展与调整．

上述讨论可概括为表 12－6.

表 12－6　量子力学问题按系统的来源进行分类

Ⅵ	自然系统：自然界存在的量子系统
	人造系统：人造的量子系统

12.7　按照系统与环境的关系进行分类

严格说来，任何系统都不能脱离环境．即使是理想的孤立系统，也是在真空中运动．真空也是环境，它是一种最普遍的宇宙环境，只不过就宏观物理学的时空尺度而言，真空是稳定的、均匀的、各向同性的（但对量子尺度而言却是涨落的，真空背景的量子涨落效应的一部分已纳入量子物理的运动学（量子

化）条件之中，见前面的有关章节），平稳真空背景对一切事物的影响是以真空背景几何的Poincare群变换不变性的形式出现的，即以尺钟效应及其运动学共轭效应的形式出现的.

这里讲的环境是狭义的，即真空背景以外的物质和物理场所构成的环境.按照与狭义环境的关系，系统可分为封闭系统与开放系统，它们的特点列于表 12－7.

表 12－7　封闭系统与开放系统的特点

Ⅶ	封闭系统：与环境隔离，无能量、粒子交换，N、E、$\bar{p}$（$\hat{J}$）守恒
	开放系统：与环境相互作用，在动力学方面有能量、粒子交换，N、E、$\bar{p}$（$\hat{J}$）不守恒；在统计力学方面有熵和信息的交换

附　录

一、一般参考书目

Ⅰ　量子力学

1　曾谨言.量子力学.卷Ⅱ.科学出版社,1993

2　喀兴林.高等量子力学.高等教育出版社,1999

3　余寿绵.高等量子力学.山东科学技术出版社,1985

4　杨泽森.高等量子力学.北京大学出版社,1995

5　倪光炯,陈苏卿.高等量子力学.复旦大学出版社,2000

6　张启仁.高等量子力学.科学出版社

7　P. Roman. Advanced Quantum Mechanics. Addison - Wesley Publishing Company, 1965

8　P. A. M. Dirac. The Principle of Quantum Mechanics. Oxford University Press, 1958.
P.A.M. 狄拉克.量子力学原理.科学出版社, 1965

9　R. P. Feynman and A. Ribbs. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York: McGraw Hill, 1965

10　A. Messiah. Quantum Mechanics. Vol. I & II. North Holland: Amsterdam, 1962
A. Messiah(梅西亚).量子力学.第二卷.科学出版社,1986

11　L. D. Landau and . M. E. Lifshitz. Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory. London: Pergamon, 1977
L.D.朗道, M.E.栗弗席茨.量子力学(非相对论理论).上册(1980),下册(1981). 高等教育出版社

12　L. I. Schiff. Quantum Mechanics. 3rd ed. New York: McGraw - Hill Publishing Company, 1967

13　张启仁.量子力学.科学出版社,2002

14　张永德.量子力学.科学出版社,2003

15 苏汝铿.量子力学.复旦大学出版社,1990
16 邹鹏程.量子力学.高等教育出版社,1989

Ⅱ 量子多体理论

17 费特,瓦立克.多粒子系统的量子理论.科学出版社,1987

Ⅲ 量子力学中的对称性

18 Brian G. Wybourne. Classical Group for Physicists. John Wiley & Sons, Inc. 1974
19 W·顾莱纳,B·缪勒.量子力学:对称性.北京大学出版社,2002

Ⅳ 量子力学前沿问题

20 张礼,葛墨林.量子力学的前沿问题.清华大学出版社,2000
21 曾谨言编.量子力学前沿问题.第一辑.科学出版社,2000
22 曾谨言,龙桂鲁,裴寿镛.量子力学新进展.清华大学出版社,2003

Ⅴ 量子场论

23 J. D. Bjorken and S. D. Drell. Relativistic Quantum Mechanics(1964) and Relativistic Quantum Fields (1965). New York: McGraw - Hill Book Company
24 C. Itzykson and J. - B. Zuber. Quantum Field Theory I and II. New York: McGraw - Hill Book Company, 1980
25 S. Weinberg. The Quantum Theory of fields. Vol. I(1995), Vol. II(1996), Vol. III(2000). Cambridge University Press.

Ⅵ 量子力学习题精选

26 钱伯初,曾谨言.量子力学习题精选与剖析.第二版.下册.科学出版社,1999
27 S. Fluegge. Practical Quantum Mechanics. Vol. I, II. Springer Verlag, 1974.

Ⅶ 经典力学

28 H. Goldstein. Classical Mechanics. second edition. Addison - Welsley Publishing Co., 1980

二、关于各专业研究生学习重点的建议

1. 凝聚态物理和材料科学专业的学生：第1章，第2章，第3章，第4章，第5章，第7章，第8章；

2. 理论物理专业的学生：第1章，第2章，第3章，第4章，第5章，第6章，第7章，第8章，第9章，第10章；

3. 粒子物理与核物理专业的学生：第1章，第2章，第3章，第4章，第5章，第6章，第7章，第8章；

4. 光学专业的学生：第1章，第2章，第3章，第4章，第5章，第9章，第10章.

三、关于《高等量子论与量子多体理论》习题的建议

1. 补充完成各章节省略的公式推导.

2. 建议做下列书中各章所列出的习题：钱伯初，曾谨言著《量子力学习题精选与剖析(第二版)》，下册，科学出版社，1999.

第3章：1, 2, 5, 7, 9, 10, 11.

第4章：1, 2, 3, 5, 6, 7.

第5章：1, 2, 3, 8.

第6章：1, 3, 4, 5, 7, 8, 10, 11, 12.

第7章：1, 2, 3, 4, 25.

第9章：1, 2, 3, 4, 5.

第10章：1, 4, 5, 6.