《量子力学 II》知识梳理

第一章 绝热近似

一、绝热近似的思想

1、基本思想：认为外界条件发生显著变化的时间远远长于系统自身变化的本征时间，即弛豫过程可以忽略（类似于准静态近似）。

2、例子

（1）将一个单摆的摆长 l 缓慢变化，可以认为摆球仍然在做圆周运动，周期仍然满足单摆公式：$T=2\pi\sqrt{\dfrac{l(t)}{g}}$。

（2）一个点电荷缓慢运动，可以认为运动效应忽略不计，仍使用静电场的库仑定律：$\vec{E}=\dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{q}{[R(t)]^3}\vec{R}(t).$

二、绝热定理

1、在量子力学中，绝热近似是指哈密顿量随时间缓慢变化。

2、绝热定理的内容：在绝热近似下，若系统一开始处于哈密顿量的第 n 个本征态，那么演化后它仍将处在这个本征态上。

【证明】基本思想是求解组合系数随时间的变化规律，说明初始时为 0 的分量之后将依然是 0。

首先考虑哈密顿量的本征方程。如果没有微扰：$\hat{H}_0\psi_n^{(0)}=E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$，其中本征能量不随时间变化，本征态可以分离变量。如果哈密顿量随时间变化，可以认为 $\psi_n(t)=\phi_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}$。其中 $\hat{H}(t)\phi_n(t)=E_n(t)\phi_n(t)$（原先的定态位置波函数现在将随时间变化，本征能量也随时间变化），而 $\boxed{\theta_n(t)=-\dfrac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\mathrm{d}t'}$ 为动力学相位。

因此，总的状态可以记为 $\Psi(t)=\sum_n C_n\phi_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}$。代入含时薛定谔方程：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\sum_n C_n\phi_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}=\hat{H}\sum_n C_n\phi_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}$$

$$\Rightarrow \mathrm{i}\hbar\sum_n\left[\dot{C}_n\phi_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}+C_n\dot{\phi}_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}+\mathrm{i}C_n\phi_n(t)\dot{\theta}_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}\right]=\sum_n C_n\left[\hat{H}\phi_n(t)\right]e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}$$

$$\Rightarrow \mathrm{i}\hbar\sum_n\left[\dot{C}_n\phi_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}+C_n\dot{\phi}_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}-\mathrm{i}C_n\phi_n(t)\frac{1}{\hbar}E_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}\right]=\sum_n C_n\left[E_n(t)\phi_n(t)\right]e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}$$

$$\Rightarrow \sum_n\dot{C}_n\phi_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}=-\sum_n C_n\dot{\phi}_n(t)e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}.$$

投影到 $\langle\phi_m(t)|$：

$$\Rightarrow \sum_n\dot{C}_n\langle\phi_m(t)|\phi_n(t)\rangle e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}=-\sum_n C_n\langle\phi_m(t)|\dot{\phi}_n(t)\rangle e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}$$

$$\Rightarrow \dot{C}_m=\sum_n C_n\langle\phi_m(t)|\dot{\phi}_n(t)\rangle e^{\mathrm{i}[\theta_n(t)-\theta_m(t)]}.$$

下面考虑 $\langle\phi_m(t)|\dot{\phi}_n(t)\rangle$：

$$\hat{H}(t)\phi_n(t)=E_n(t)\phi_n(t)\Rightarrow\dot{\hat{H}}\phi_n+\hat{H}\dot{\phi}_n=\dot{E}_n\phi_n+E_n\dot{\phi}_n$$
$$\Rightarrow\langle\phi_m|\dot{\hat{H}}|\phi_n\rangle+\langle\phi_m|\hat{H}|\dot{\phi}_n\rangle=\dot{E}_n\langle\phi_m|\phi_n\rangle+E_n\langle\phi_m|\dot{\phi}_n\rangle$$
$$\Rightarrow\langle\phi_m|\dot{\hat{H}}|\phi_n\rangle+E_m\langle\phi_m|\dot{\phi}_n\rangle=\dot{E}_n\langle\phi_m|\phi_n\rangle+E_n\langle\phi_m|\dot{\phi}_n\rangle$$
$$\Rightarrow\langle\phi_m|\dot{\phi}_n\rangle=\frac{\langle\phi_m|\dot{\hat{H}}|\phi_n\rangle-\dot{E}_n\delta_{mn}}{E_n-E_m}.$$

因此：$\dot{C}_m=C_m\langle\phi_m(t)|\dot{\phi}_m(t)\rangle+\sum_{n\neq m}C_n\frac{\langle\phi_m|\dot{\hat{H}}|\phi_n\rangle}{E_n-E_m}e^{\mathrm{i}[\theta_n(t)-\theta_m(t)]}$.

绝热近似：$\dot{\hat{H}}$ 很小，含有它的项可以全部舍去：

$$\dot{C}_m=C_m\langle\phi_m(t)|\dot{\phi}_m(t)\rangle\Rightarrow C_m(t)=C_m(0)e^{\mathrm{i}\gamma_m(t)}$$

其中$\boxed{\gamma_m(t)=\mathrm{i}\int_0^t\langle\psi_m(t')|\dot{\psi}_m(t')\rangle\mathrm{d}t'}$称为几何相位（必为实数）。

最终，在绝热近似下，有

$$\boxed{\Psi(t)=\sum_n C_n(0)e^{\mathrm{i}\gamma_n(t)}e^{\mathrm{i}\theta_n(t)}\phi_n(t)}$$

因此，如果$C_n(0)=\delta_{mn}$（即$C_m(0)=1$，$C_{n\neq m}(0)=0$），则$|C_m(t)|=1$，$|C_{n\neq m}(t)|=0$恒成立，从而初始时在第 *m* 能态上的系统最终还是在第 *m* 能态。

三、Berry 相

1、哈密顿量可以随时间变化，而时间对哈密顿量的作用是通过改变哈密顿量中的参数来间接实现的。因此，在考虑时间对本征函数、本征能量、相位的改变时，不仅要考虑时间的长短，还要考虑这段时间对参数构成了多大的变化。因此，由这一机制导致的几何相位$\gamma_m(t)=\mathrm{i}\int_0^t\langle\psi_m(t')|\dot{\psi}_m(t')\rangle\mathrm{d}t'$虽然是时间的函数，但是和时间长短并没有直接关系。如果时间不能改变哈密顿量中的参数，那么时间再长也不会产生几何相位。

2、既然直接影响哈密顿量的是其中的参数，不如将几何相位写成参数的形式。假设一系列的参数$\vec{R}=(R_1,R_2,...)$都会影响哈密顿量，则

$$\gamma_m(t)=\mathrm{i}\int_0^t\langle\psi_m(t')|\dot{\psi}_m(t')\rangle\mathrm{d}t'=\mathrm{i}\int_0^t\langle\psi_m(t')|\nabla_R\psi_m(t')\rangle\cdot\frac{\mathrm{d}\vec{R}}{\mathrm{d}t'}\mathrm{d}t'=\mathrm{i}\int_{\vec{R}_i}^{\vec{R}_f}\langle\psi_m(\vec{R})|\nabla_R\psi_m(\vec{R})\rangle\cdot\mathrm{d}\vec{R}$$

这是第二类曲线积分，它未必是保守的，即$\mathrm{i}\oint\langle\psi_m(t')|\nabla_R\psi_m(t')\rangle\cdot\mathrm{d}\vec{R}$可能不为0；$\hat{H}$ 恢复时，体系状态可能并没有恢复，称为非完整过程。

（1）称$\boxed{\gamma_{\mathrm{m}}(t)=\mathrm{i}\oint\langle\psi_m(t')|\nabla_R\psi_m(t')\rangle\cdot\mathrm{d}\vec{R}}$为环路上的 Berry 相；

（2）称被积函数$\boxed{\vec{\mathrm{A}}(\vec{R})=\mathrm{i}\langle\psi_m(\vec{R})|\nabla_R\psi_m(\vec{R})\rangle}$为 Berry Connection（或 Berry 矢势）。

四、A—B 效应

1、A—B 效应是纯量子现象，它体现出势函数绝对大小对物体状态的改变。

2、具体内容：考虑一根无限长的通电螺线管，其外部无磁场，但是有磁矢势。让一束电子在遇到螺线管时分成两股，绕过管后再聚拢，则从不同路径走的电子

会带有不同的几何相位（产生干涉条纹）。

3、传统分析方法：电子在磁场中的哈密顿量为 $\hat{H}=\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla-q\vec{A})^2+q\varphi+V(\vec{r})$。相比无磁场时的哈密顿量 $\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r})$，二者之间相差一个幺正变换：

$$\boxed{\hat{H}=\hat{U}^{+}\hat{H}_0\hat{U},\ \ \hat{U}=e^{\mathrm{i}g(\vec{r})},\ \ g(\vec{r})=\frac{q}{\hbar}\int_0^{\vec{r}}\vec{A}(\vec{r}')\cdot\mathrm{d}\vec{r}'.}$$

波函数之间也相差一个幺正变换：$\psi(\vec{r})=\hat{U}(\vec{r})\psi_0(\vec{r})=e^{\mathrm{i}g(\vec{r})}\psi_0(\vec{r})$。与原先的波函数相比多了一个相位因子 $e^{\mathrm{i}g(\vec{r})}$。从螺线管两侧绕过的电子存在相位差：

$$\Delta\varphi=\varphi_2-\varphi_1=\frac{q}{\hbar}\left[\int_2\vec{A}(\vec{r}')\cdot\mathrm{d}\vec{r}'-\int_1\vec{A}(\vec{r}')\cdot\mathrm{d}\vec{r}'\right]=\frac{q}{\hbar}\oint\vec{A}(\vec{r}')\cdot\mathrm{d}\vec{r}'=\frac{q}{\hbar}\iint\vec{B}\cdot\mathrm{d}\vec{S}$$

即 $\boxed{\Delta\varphi=\frac{q}{\hbar}\Phi}$。

4、Berry 相分析：将电子的运动看成波包（势阱）的运动，哈密顿量中隐含的参数是势阱的位置 $\vec{R}$。假设没有磁场时的波函数为 $\psi_0(\vec{r}-\vec{R})$，则加上磁场之后的波函数为 $\psi(\vec{r})=e^{\mathrm{i}g_R(\vec{r})}\psi_0(\vec{r}-\vec{R})$，其中 $g_R(\vec{r})=\frac{q}{\hbar}\int_{\vec{R}}^{\vec{r}}\vec{A}(\vec{r}')\cdot\mathrm{d}\vec{r}'$。

（1）Berry 矢势：

$$\begin{aligned}\vec{\mathrm{A}}(\vec{R})&=\mathrm{i}\left\langle\psi(\vec{R})\middle|\nabla_R\psi(\vec{R})\right\rangle\\&=\mathrm{i}\int\mathrm{d}^3\vec{r}\,e^{-\mathrm{i}g_R(\vec{r})}\psi_0^{*}(\vec{r}-\vec{R})e^{\mathrm{i}g_R(\vec{r})}\left[-\mathrm{i}\frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{R})\psi_0(\vec{r}-\vec{R})+\nabla_R\psi_0(\vec{r}-\vec{R})\right]\\&=\frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{R})+\int\mathrm{d}^3\vec{r}\,\psi_0^{*}(\vec{r}-\vec{R})\nabla_R\psi_0(\vec{r}-\vec{R})\\&=\frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{R})-\int\mathrm{d}^3\vec{r}\,\psi_0^{*}(\vec{r}-\vec{R})\nabla_r\psi_0(\vec{r}-\vec{R})=\frac{q}{\hbar}\vec{A}(\vec{R}).\end{aligned}$$

其中可以证明 $\int\mathrm{d}^3\vec{r}\,\psi_0^{*}(\vec{r}-\vec{R})\nabla_r\psi_0(\vec{r}-\vec{R})=0.$

（2）Berry 相：$\gamma(t)=\frac{q}{\hbar}\oint\vec{A}(\vec{R})\cdot\mathrm{d}\vec{R}=\frac{q}{\hbar}\Phi.$

五、Berry 曲率

1、在 A—B 效应的例子中，Berry 矢势就对应于磁矢势。磁矢势的旋度等于磁感应强度，因此 Berry 矢势也可以在参数空间中做旋度，其结果被称为 Berry 曲率，即 $\boxed{\vec{\Omega}(\vec{R})=\nabla_R\times\vec{\mathrm{A}}(\vec{R})}$。

2、“旋度”是三维空间的概念。在一般空间中，Berry 曲率通过张量形式得到：

$$\boxed{\Omega_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu}\ \text{（反对称张量）}$$

在三维空间中，取直角坐标，即 $\vec{R}=(x,y,z)$，则有矢量化的 Berry 曲率：

$$\boxed{\begin{cases}\Omega_x=\Omega_{yz},\\\Omega_y=\Omega_{zx},\\\Omega_z=\Omega_{xy}.\end{cases}}$$

第二章 传播子与路径积分

一、时间演化算符与传播子

1、时间演化的概念：薛定谔方程关于时间是一阶微分方程，所以只要知道了 0 时刻的初始波函数$|\psi(0)\rangle$，即可知道之后任意时刻的波函数$|\psi(t)\rangle$。我们可以将波函数随时间的变化归结为时间演化算子的作用：$|\psi(t)\rangle=\hat{U}(t,0)|\psi(0)\rangle$。

2、时间演化算子的性质

（1）为保证波函数归一化，要求

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=\langle\psi(0)|\hat{U}^{+}(t,0)\hat{U}(t,0)|\psi(0)\rangle=1=\langle\psi(0)|\psi(0)\rangle$$

所以$\hat{U}^{+}\hat{U}=1$，即$\hat{U}$为幺正算符。

（2）时间演化算符的结合律：$\hat{U}(t,t')=\hat{U}(t,t'')\hat{U}(t'',t')$。

（3）时间平移不变性：$\hat{U}(t,t')=\hat{U}(t-t',0)$。

（4）满足的微分方程：$\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,0)=\hat{H}\hat{U}(t,0)$。

如果哈密顿量不显含时间，那么$\hat{U}(t,t')=e^{-\frac{\mathrm{i}(t-t')}{\hbar}\hat{H}}=\sum\limits_{n=0}^{\infty}\dfrac{1}{n!}\left[-\dfrac{\mathrm{i}(t-t')}{\hbar}\hat{H}\right]^{n}$。如果要强调在$t'$时刻之后的演化，可以添加一个阶跃函数：$\hat{U}(t,t')=\Theta(t-t')e^{-\frac{\mathrm{i}(t-t')}{\hbar}\hat{H}}$。

3、时间演化算子的表象展开——传播子

（1）考虑位置算符的本征态，满足$\langle\vec{r}'|\vec{r}\rangle=\delta(\vec{r}'-\vec{r})$，$\int|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\mathrm{d}^3\vec{r}=1$。

定义$K(\vec{r}',t',\vec{r},t)=\langle\vec{r}'|\hat{U}(t',t)|\vec{r}\rangle=\langle\vec{r}'|e^{-\frac{\mathrm{i}(t'-t)}{\hbar}\hat{H}}|\vec{r}\rangle$，有如下过程：

$$|\psi(t')\rangle=\hat{U}(t',t)|\psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow\psi(\vec{r}',t')=\langle\vec{r}'|\hat{U}(t',t)|\psi(t)\rangle=\int\langle\vec{r}'|\hat{U}(t',t)|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi(t)\rangle\mathrm{d}^3\vec{r}=\int K(\vec{r}',t',\vec{r},t)\psi(\vec{r},t)\mathrm{d}^3\vec{r}$$

上式的形式类似于衍射的菲涅尔公式：光在某一场点处的振幅等于某一波面上所有子波源产生的子波在该处振幅的叠加。在这里，我们认为空间内每一点$\vec{r}$都是子波源，它们产生的振幅在$\vec{r}'$处将以$K(\vec{r}',t',\vec{r},t)$为权重进行叠加。因此，矩阵元$K(\vec{r}',t',\vec{r},t)$反映了t时刻在$\vec{r}$处产生的波在t'时刻传到$\vec{r}'$处的振幅，称为<u>传播子</u>。

（2）传播子的一般计算方法：对于能量本征态$|n\rangle$与本征能量E_n，有

$$K(\vec{r}',t',\vec{r},t)=\langle\vec{r}'|e^{-\frac{\mathrm{i}(t'-t)}{\hbar}\hat{H}}|\vec{r}\rangle=\sum_{n,n'}\langle\vec{r}'|n\rangle\langle n|e^{-\frac{\mathrm{i}(t'-t)}{\hbar}\hat{H}}|n'\rangle\langle n'|\vec{r}\rangle$$

$$=\sum_{n,n'}\phi_n(\vec{r}')\langle n|e^{-\frac{\mathrm{i}(t'-t)}{\hbar}\hat{H}}|n'\rangle\phi_{n'}^{*}(\vec{r}')=\sum_{n,n'}\phi_n(\vec{r}')e^{-\frac{\mathrm{i}(t'-t)}{\hbar}E_n}\delta_{nn'}\phi_{n'}^{*}(\vec{r})=\sum_{n,n'}\phi_n(\vec{r}')e^{-\frac{\mathrm{i}E_nt'}{\hbar}}\phi_n^{*}(\vec{r})e^{\frac{\mathrm{i}E_nt}{\hbar}}$$

$$=\sum_{n,n'}\psi_n^{*}(\vec{r})\psi_n(\vec{r}')$$

（1）对于自由粒子，可以选用动量本征态来计算传播子：

$$K(\vec{r}',t',\vec{r},t)=\int\psi_{\vec{p}}^{*}(\vec{r},t)\psi_{\vec{p}}(\vec{r}',t')\mathrm{d}^3\vec{p}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int e^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot(\vec{r}'-\vec{r})}e^{-\mathrm{i}\frac{p^2}{2m\hbar}(t'-t)}\mathrm{d}^3\vec{p}$$

$$=\left[\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar(t'-t)}\right]^{3/2}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(\vec{r}'-\vec{r})^2}{t'-t}\right]$$

（4）传播子的数学意义：由于$\begin{cases}K(\vec{r}',t^+,\vec{r},t)=\delta(\vec{r}'-\vec{r})\\K(\vec{r}',t^-,\vec{r},t)=0\end{cases}$，因此可以认为传播子在起振时刻 t 附近发生了阶跃，从而$\frac{\partial}{\partial t'}K(\vec{r}',t',\vec{r},t)\big|_{t'=t}=\delta(\vec{r}'-\vec{r})\delta(t'-t)$，于是

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t'}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'^2-V(\vec{r}',t')\right)K(\vec{r}',t',\vec{r},t)\big|_{t'=t}=\mathrm{i}\hbar\delta(\vec{r}'-\vec{r})\delta(t'-t)$$

说明传播子是含时薛定谔方程的格林函数。

二、路径积分

1、利用波函数的菲涅尔公式，可以得出传播子的结合律。

$$\left.\begin{aligned}\psi(\vec{r}'',t'')&=\int K(\vec{r}'',t'',\vec{r}_1,t_1)\psi(\vec{r}_1,t_1)\mathrm{d}^3\vec{r}_1\\\psi(\vec{r}_1,t_1)&=\int K(\vec{r}_1,t_1,\vec{r}',t')\psi(\vec{r}',t')\mathrm{d}^3\vec{r}'\end{aligned}\right\}$$

$$\Rightarrow\psi(\vec{r}'',t'')=\int\psi(\vec{r}',t')\mathrm{d}^3\vec{r}'\int K(\vec{r}'',t'',\vec{r}_1,t_1)K(\vec{r}_1,t_1,\vec{r}',t')\mathrm{d}^3\vec{r}_1$$

$$\Rightarrow K(\vec{r}'',t'',\vec{r}',t')=\int K(\vec{r}'',t'',\vec{r}_1,t_1)K(\vec{r}_1,t_1,\vec{r}',t')\mathrm{d}^3\vec{r}_1$$

2、路径积分：根据传播子的结合律可以知道，从$(\vec{r}',t')$到$(\vec{r}'',t'')$的传播，可以用中间路径$(\vec{r}_1,t_1)$的传播来分类并进行叠加。显然，如果增加过程中的分点，那么这一规律可以推广：

$$K(\vec{r}'',t'',\vec{r}',t')=\int\mathrm{d}^3\vec{r}_N\mathrm{d}^3\vec{r}_{N-1}...\mathrm{d}^3\vec{r}_1K(\vec{r}'',t'',\vec{r}_N,t_N)K(\vec{r}_N,t_N,\vec{r}_{N-1},t_{N-1})...K(\vec{r}_1,t_1,\vec{r}',t')$$

当 $N\to\infty$时，这些分点可以构造出空间中所有可能的路径；<u>起点与终点之间的传播子等于一切可能路径的传播子的叠加。</u>（费恩曼对量子力学的新诠释）

3、与经典力学的联系

（1）无穷小分点：假设分点个数有限，但是相邻两个分点在时间与空间上都非常接近。

（2）在这一情形下，可以做近似：平均速度约等于瞬时速度，$\frac{\vec{r}_i-\vec{r}_{i-1}}{t_i-t_{i-1}}\approx\vec{v}_i$。为书写方便，令$t_i-t_{i-1}=\varepsilon$：

$$K(\vec{r}_i,t_i,\vec{r}_{i-1},t_{i-1})=\left\langle\vec{r}_i\middle|\hat{U}(t_i,t_{i-1})\middle|\vec{r}_{i-1}\right\rangle=\left\langle\vec{r}_i\middle|e^{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\hat{H}}\middle|\vec{r}_{i-1}\right\rangle=\left\langle\vec{r}_i\middle|e^{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\vec{r})\right]}\middle|\vec{r}_{i-1}\right\rangle$$

$$=e^{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(\vec{r})}\left\langle\vec{r}_i\middle|e^{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}}\middle|\vec{r}_{i-1}\right\rangle=e^{-\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}V(\vec{r})}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\varepsilon}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(\vec{r}_i-\vec{r}_{i-1})^2}{\varepsilon}\right]$$

$$=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\varepsilon}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\frac{m}{2}v_i^2-V(\vec{r}_i)\right)\varepsilon\right]=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\varepsilon}\right)^{3/2}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}L(t_i)\varepsilon\right)$$

其中拉格朗日量$L=\frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2-V(\vec{r})$。对于无穷小时间间隔，可以将相位差用作用量表示：$L(t_i)\varepsilon\approx\int_{t_{i-1}}^{t_i}L(t)\mathrm{d}t=S(t_i)-S(t_{i-1})$。故

$$K(\vec{r}_i,t_i,\vec{r}_{i-1},t_{i-1})=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\varepsilon}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(S(t_i)-S(t_{i-1}))\right]$$

所以

$$K(\vec{r}'',t'',\vec{r}_N,t_N)K(\vec{r}_N,t_N,\vec{r}_{N-1},t_{N-1})K(\vec{r}_{N-1},t_{N-1},\vec{r}_{N-2},t_{N-2})...K(\vec{r}_1,t_1,\vec{r}',t')$$

$$=\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3(N+1)}{2}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Delta S\right).$$

即$\boxed{K(\vec{r}'',t'',\vec{r}',t')=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi\mathrm{i}\hbar\varepsilon}\right)^{\frac{3(N+1)}{2}}\int\exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(\vec{r}(t))\right]\mathrm{d}^3\vec{r}_N\mathrm{d}^3\vec{r}_{N-1}...\mathrm{d}^3\vec{r}_1.}$（路径积分的数学表示）

（2）经典力学中，物体的运动轨迹是唯一确定的。这与量子力学似乎是矛盾的，但实际上最小作用量原理就可以从路径积分中得来：如果某条路径不能使作用量取极值，那么附近的路径必然干涉相消；在作用量最小的路径上，两边的路径对应的作用量都更大，从而在相位上体现为一致，也就会干涉相长。由于经典体系中的作用量远大于$\hbar$，所以这一极值非常尖锐，体现为唯一的路径。

（3）利用最小作用量原理得出牛顿第二定律

$$\delta S=S(\vec{r}+\delta\vec{r})-S(\vec{r})=\int\left[L(\vec{r}+\delta\vec{r},\dot{\vec{r}}+\delta\dot{\vec{r}},t)-L(\vec{r},\dot{\vec{r}},t)\right]\mathrm{d}t$$

$$=\int\left[\frac{1}{2}m(\dot{\vec{r}}+\delta\dot{\vec{r}})^2-\frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}^2-V(\vec{r}+\delta\vec{r})+V(\vec{r})\right]\mathrm{d}t$$

$$=\int(m\dot{\vec{r}}\cdot\delta\dot{\vec{r}}-\nabla V\cdot\delta\vec{r})\mathrm{d}t=\int(m\ddot{\vec{r}}\cdot\delta\vec{r}-\nabla V\cdot\delta\vec{r})\mathrm{d}t=\int(-m\ddot{\vec{r}}-\nabla V)\cdot\delta\vec{r}\mathrm{d}t=0$$

$$\Rightarrow m\ddot{\vec{r}}=-\nabla V$$

三、量子力学的三种绘景

1、量子力学研究粒子波函数以及算符，包括它们的性质以及它们如何演化。一般有三种主要的观点来理解：

（1）薛定谔绘景：认为波函数随时间变化，而算符不随时间变化；波函数的变化导致算符均值随时间的变化。

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

（2）海森堡绘景：认为波函数只是取初始的形式，真正变化的是算符。

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_H(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A}_H,\hat{H}]$$

（1）相互作用绘景：认为波函数和算符都在随时间变化，只是主导的哈密顿量不一样。

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V},\ \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle=\hat{V}_I|\psi_I(t)\rangle,\ \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_I(t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A}_I,\hat{H}_0]$$

2、三种绘景的解

（1）薛定谔绘景的解：就是波函数随时间的演化。

$$|\psi(t)\rangle=\hat{U}(t,0)|\psi(0)\rangle,\ \hat{U}(t,0)=e^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\hat{H}}$$

（2）海森堡绘景的解：波函数没有变，时间演化算子的作用被归到算符的演化。

$$\langle\hat{A}_S\rangle=\langle\psi(t)|\hat{A}_S|\psi(t)\rangle=\langle\psi(0)|\hat{U}^+(t,0)\hat{A}_S\hat{U}(t,0)|\psi(0)\rangle\Rightarrow\hat{A}_H(t)=\hat{U}^+(t,0)\hat{A}_S\hat{U}(t,0)$$

（3）相互作用绘景的解：一般认为$\hat{H}_0$简单、$\hat{V}$复杂，因此相互作用表象本质上是将$\hat{H}_0$的作用缩并进了波函数，在“$\hat{H}_0$的参考系下”观察仅由$\hat{V}$导致的演化。在这一情况下，算符和波函数都要进行表象变换，这就是为什么二者都可能随时间变化。

考虑 $\hat{U}_0(t,0)=e^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\hat{H}_0}$，作变换 $\left|\psi_I(t)\right\rangle=\hat{U}_0^+(t,0)\left|\psi(t)\right\rangle=e^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\hat{H}_0}\left|\psi(t)\right\rangle$，可以说明

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi_I(t)\right\rangle=\hat{V}_I\left|\psi_I(t)\right\rangle$$

其中$\hat{V}_I(t)=\hat{U}_0^+(t,0)\hat{V}(t)\hat{U}_0(t,0)=e^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\hat{H}_0}\hat{V}(t)e^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\hat{H}_0}$。相互作用绘景下的所有普通算符都按照这样的方式进行变换；不过，对于时间演化算符，则是

$$\hat{U}(t,t')=\hat{U}_0(t,0)\hat{U}_I(t,t')\hat{U}_0^+(t',0)$$

四、含时微扰

1、根据已学知识，含时微扰主要处理含时哈密顿量所导致的波函数随时间的演化。因此，如果要考虑含时微扰的近似，不如直接对时间演化算子做近似。在这里，我们选择对该算子的傅里叶变换进行近似，因为其形式较为简单。

一般哈密顿量对应的时间演化算子的傅里叶变换为：

$$\hat{U}(\omega)=\int\hat{U}(t,0)e^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t=\int\Theta(t)e^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\hat{H}}e^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}t=\lim_{\varepsilon\to0+}\frac{\mathrm{i}\hbar}{\hbar\omega-\hat{H}+\mathrm{i}\varepsilon}$$

考虑微扰情形：

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V},\ \hat{U}_0(\omega)=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\hbar\omega-\hat{H}_0+\mathrm{i}\varepsilon},\ \hat{U}(\omega)=\frac{\mathrm{i}\hbar}{\hbar\omega-\hat{H}_0-\hat{V}+\mathrm{i}\varepsilon}$$

$$\Rightarrow\hat{U}(\omega)=\hat{U}_0(\omega)+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{U}_0(\omega)\hat{V}\hat{U}_0(\omega)+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\right)^2\hat{U}_0(\omega)\hat{V}\hat{U}_0(\omega)\hat{V}\hat{U}_0(\omega)+\ldots$$

将各阶分别做反傅里叶变换。

（1）0 阶：$\hat{U}^{(0)}(t,0)=\hat{U}_0(t,0)=\frac{1}{2\pi}\int\hat{U}_0(\omega)e^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}\omega$。

（2）1 阶：$\hat{U}^{(1)}(t,0)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}\hbar}\int\hat{U}_0(\omega)\hat{V}\hat{U}_0(\omega)e^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{d}\omega.$ 为了写成时域的演化算子，方便计算，在其中插入一个积分：$1=\frac{1}{2\pi}\int e^{\mathrm{i}(\omega-\omega')t_1}\mathrm{d}\omega'\mathrm{d}t_1$。有

$$\hat{U}^{(1)}(t,0)=\frac{1}{2\pi\mathrm{i}\hbar}\frac{1}{2\pi}\int\hat{U}_0(\omega)\hat{V}\hat{U}_0(\omega)e^{-\mathrm{i}\omega t}e^{\mathrm{i}(\omega-\omega')t_1}\mathrm{d}\omega\mathrm{d}\omega'\mathrm{d}t_1$$

$$=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int\left[\int\frac{1}{2\pi}\hat{U}_0(\omega)e^{-\mathrm{i}\omega(t-t_1)}\mathrm{d}\omega\right]\hat{V}\left[\int\frac{1}{2\pi}\hat{U}_0(\omega)e^{-\mathrm{i}\omega' t_1}\mathrm{d}\omega'\right]\mathrm{d}t_1$$

$$=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int\hat{U}_0(t,t_1)\hat{V}\hat{U}_0(t_1,0)\mathrm{d}t_1$$

（3）2 阶：用类似方法，可以得到

$$\hat{U}^{(2)}(t,0)=\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\right)^2\int\hat{U}_0(t,t_2)\hat{V}\hat{U}_0(t_2,t_1)\hat{V}\hat{U}_0(t_1,0)\mathrm{d}t_1\mathrm{d}t_2$$

物理意义：时间演化算符的微扰与$\hat{V}$的演化有关，而它的 n 阶微扰就相当于

在时间上取 n 个分点来考察 $\hat{V}$ 的变化，相当于时域的路径积分。

2、在相互作用表象下求解含时微扰

（1）如果哈密顿量含时，那么不妨将时间无限分割：

$$\hat{U}(t,t')=\hat{U}(t,t-\Delta t)\hat{U}(t-\Delta t,t-2\Delta t)...\hat{U}(t'+\Delta t,t')=e^{-\frac{\mathrm{i}\Delta t}{\hbar}\hat{H}(t)}e^{-\frac{\mathrm{i}\Delta t}{\hbar}\hat{H}(t-\Delta t)}...e^{-\frac{\mathrm{i}\Delta t}{\hbar}\hat{H}(t')}$$

$$=\hat{T}\left[\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t'}^{t}\mathrm{d}\tau\hat{H}(\tau)\right)\right]$$

其中 $\hat{T}$ 表示时间排序操作，称为“编时算符”，较早的哈密顿量排在右边。

（2）在相互作用表象下，$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi_I(t)\right\rangle=\hat{V}_I\left|\psi_I(t)\right\rangle$，而 $\left|\psi_I(t)\right\rangle=\hat{U}_I(t,t')\left|\psi_I(t')\right\rangle$，因此 $\hat{U}_I(t,t')=\hat{T}\left[\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t'}^{t}\mathrm{d}\tau\hat{V}_I(\tau)\right)\right]$。直接对其泰勒展开：

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

$\hat{U}_I^{(1)}(t,t')=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t_1\hat{V}_I(t_1)$;

$$\hat{U}_I^{(2)}(t,t')=\left[-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t'}^{t}\mathrm{d}\tau\hat{V}_I(\tau)\right]^2=\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\hat{T}\left[\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t_2\hat{V}_I(t_2)\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t_1\hat{V}_I(t_1)\right]$$

$$=\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t_2\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t_1\hat{T}[\hat{V}_I(t_2)\hat{V}_I(t_1)];$$

……

回到薛定谔绘景中：

$$\hat{U}(t,t')=\hat{U}_0(t,0)\hat{U}_I(t,t')\hat{U}_0^{+}(t',0)$$

$$\Rightarrow\hat{U}^{(0)}(t,t')=\hat{U}_0(t,0)\hat{U}_0^{+}(t',0)=e^{-\frac{\mathrm{i}(t-t')}{\hbar}\hat{H}_0};$$

$$\hat{U}^{(1)}(t,t')=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t_1\hat{U}_0(t,0)\hat{V}_I(t_1)\hat{U}_0^{+}(t',0)=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t_1\hat{U}_0(t,0)\hat{U}_0^{+}(t_1,0)\hat{V}(t_1)\hat{U}_0(t_1,0)\hat{U}_0^{+}(t',0)$$

$$=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t_1\hat{U}_0(t,t_1)\hat{V}(t_1)\hat{U}_0(t_1,t');$$

$$\hat{U}^{(2)}(t,t')=\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t_2\int_{t'}^{t_2}\mathrm{d}t_1\hat{U}_0(t,t_2)\hat{V}_I(t_2)\hat{U}_0(t_2,t_1)\hat{V}_I(t_1)\hat{U}_0(t_1,t');$$

……

其中需要用到排序操作以及时间演化算子的结合律和幺正性，从而将不同时间的算子插入进来。（$\hat{U}_0^{+}(\tau_1,\tau_2)\sim\hat{U}_0(\tau_2,\tau_1)$，时间反演）

第三章 二次量子化

一、Fock 空间

1、二次量子化是处理全同粒子问题的有力手段。

以前的量子力学习惯从单粒子波函数出发来表示体系状态，根本上还是从可分辨粒子的角度来分析问题；因此，当处理全同粒子问题时，为了满足交换对称

性或反对称性，需要用叠加态来描述不可分辨的情形（玻色子的积和式与费米子的 Slater 行列式），非常麻烦。

不可分辨的本质是，只有各状态上占据的粒子数会决定体系的状态，而不需要考虑排序问题，不需要考虑是哪些粒子在这个态上。因此，只需要用占据数就可以表示一个状态。在不排序的基础上进行讨论，是二次量子化的重要特征。

2、根据各个状态上的占据数 $n_1,n_2,...,n_k,...$ 得到基矢 $\left|n_1,n_2,...,n_k,...\right\rangle$，张成的空间称为 Fock 空间，相应的表象被称为占据数表象。

（1）不同的占据态相互正交：$\left\langle n_1,n_2,...,n_k,...\right|\left.n_1',n_2',...,n_k',...\right\rangle=\prod_k\delta_{n_kn_k'}$.

（2）真空态：所有状态占据数都是 0 的态矢，即 $\left|0_1,0_2,...,0_k,...\right\rangle$。

二、产生、湮灭算符

1、产生和湮灭算符是二次量子化中最重要的一组概念。它们的存在使得量子力学可以处理粒子数变化的问题，并且一般的算符也可以用它们表示，极大地简化多粒子系统的计算。

2、产生、湮灭算符原本来自于谐振子模型的升降算符：

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

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

它们满足 $\hat{a}^+\left|n\right\rangle=\sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle$，$\hat{a}\left|n\right\rangle=\sqrt{n}\left|n-1\right\rangle$；$[\hat{a},\hat{a}^+]=1$，$[\hat{a},\hat{a}]=[\hat{a}^+,\hat{a}^+]=0$。从单个谐振子的角度看，这两个算符可以让粒子在不同的能态之间进行转化；从声子的角度看，如果认为每个声子拥有 $\hbar\omega$ 的能量，系统有零点能 $\frac{1}{2}\hbar\omega$，则具有能量 $\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ 的第 n 能态可以等效为有 n 个声子的状态。于是，升降算符可以看成产生、湮灭 1 个声子的操作，也就被称为产生（$\hat{a}^+$）、湮灭（$\hat{a}$）算符。

3、多个谐振子的体系也可以定义产生、湮灭算符。

第 k 个状态的产生算符：$\hat{b}_k^+\left|n_1,...,n_k,...\right\rangle=\sqrt{n_k+1}\left|n_1,...,n_k+1,...\right\rangle$.

第 k 个状态的湮灭算符：$\hat{b}_k\left|n_1,...,n_k,...\right\rangle=\sqrt{n_k}\left|n_1,...,n_k-1,...\right\rangle$.

对易关系：$[\hat{b}_k,\hat{b}_{k'}^+]=\delta_{kk'}$，$[\hat{b}_k,\hat{b}_{k'}]=[\hat{b}_k^+,\hat{b}_{k'}^+]=0$。

4、占据数算符：$\hat{n}_k=\hat{b}_k^+\hat{b}_k\Rightarrow\hat{n}_k\left|n_1,...,n_k,...\right\rangle=n_k\left|n_1,...,n_k,...\right\rangle$.

总粒子数算符：$\hat{N}=\sum_k\hat{n}_k=\sum_k\hat{b}_k^+\hat{b}_k\Rightarrow\hat{N}\left|n_1,...,n_k,...\right\rangle=N\left|n_1,...,n_k,...\right\rangle$.

5、单个谐振子：$\left|n\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n\left|0\right\rangle$.

多个谐振子：$\left|n_1,n_2,...\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{\prod_k n_k!}}\prod_k(\hat{b}_k^+)^{n_k}\left|0\right\rangle$.

6、场算符：$\hat{\psi}(\vec{r})=\sum_k\psi_k(\vec{r})\hat{b}_k$.

（1）意义：$\hat{\psi}(\vec{r})$ 在 $\vec{r}$ 处湮灭一个粒子，$\hat{\psi}^+(\vec{r})=\sum_k \psi_k^*(\vec{r})\hat{b}_k^+$ 在 $\vec{r}$ 处产生一个粒子。（位置本征态下的产生、湮灭算符）

【证明】注意使用本征函数的完备性：$\sum_k \psi_k^*(\vec{r})\psi_k(\vec{r}')=\delta(\vec{r}'-\vec{r}).$

$$\langle \vec{r}'|\hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle=\sum_k \psi_k^*(\vec{r})\langle \vec{r}'|\hat{b}_k^+|0_1,...,0_k,...\rangle=\sum_k \psi_k^*(\vec{r})\langle \vec{r}'|0_1,...,1_k,...\rangle=\sum_k \psi_k^*(\vec{r})\psi_k(\vec{r}')$$

$$=\delta(\vec{r}'-\vec{r})=\langle \vec{r}'|\vec{r}\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{\psi}^+(\vec{r})|0\rangle=|\vec{r}\rangle=\sum_k \psi_k^*(\vec{r})|0_1,...,1_k,...\rangle.$$

$$\hat{\psi}(\vec{r})|\vec{r}\rangle=\hat{\psi}(\vec{r})\sum_k \psi_k^*(\vec{r})|0_1,...,1_k,...\rangle=\sum_{k,k'} \psi_k^*(\vec{r})\psi_{k'}(\vec{r})\hat{b}_{k'}|0_1,...,1_k,...\rangle$$

$$=\sum_k \psi_k^*(\vec{r})\psi_k(\vec{r})\hat{b}_k|0_1,...,1_k,...\rangle=\sum_k |\psi_k(\vec{r})|^2|0_1,...,0_k,...\rangle=\sum_k |\psi_k(\vec{r})|^2|0\rangle\propto|0\rangle.$$

（2）对易关系：$[\hat{\psi}(\vec{r}),\hat{\psi}^+(\vec{r}')]=\delta(\vec{r}-\vec{r}')$，$[\hat{\psi}(\vec{r}),\hat{\psi}(\vec{r}')]=[\hat{\psi}^+(\vec{r}),\hat{\psi}^+(\vec{r}')]=0.$

三、单体算符

1、数学上，单体算符是指只和单个粒子的坐标相关的算符：$\hat{f}(q_i)$。物理上，它表示不涉及相互作用（耦合）的物理量，如粒子的动能。对于多个粒子而言，

$$\hat{F}=\sum_i \hat{f}(q_i)$$

被称为这群粒子的总单体算符，同样不涉及粒子间相互作用，例如粒子的总动能。

2、若要讨论 $\hat{F}$ 在占有数表象下的矩阵表示，一般不适合直接计算，因为直接代入占有数本征态的波函数会很麻烦（一次量子化的方法）。如果使用二次量子化的写法，可以用产生、湮灭算符来表示：

$$\boxed{\hat{F}=\sum_{k,k'} f_{kk'}\hat{b}_k^+\hat{b}_{k'}}$$

其中 $f_{kk'}=\langle \phi_k(q)|\hat{f}(q)|\phi_{k'}(q)\rangle$。

求解 $\hat{F}$ 的矩阵元 $\langle n_1,n_2,...|\hat{F}|n_1',n_2',...\rangle$ 时要注意，如果右矢在中间算符的作用下无法变成左矢，那么内积将为 0，对矩阵元没有任何贡献。因此，只有两种矩阵元非零：

$$\langle ...,n_k,...|\hat{F}|...,n_k,...\rangle=\sum_k f_{kk}n_k,$$

$$\langle ...,n_l+1,...,n_k-1,...|\hat{F}|...,n_l,...,n_k,...\rangle=\sqrt{n_k(n_l+1)}f_{lk}.$$

四、两体算符

1、数学上，两体算符是指只和两个粒子的坐标相关的算符：$\hat{g}(q_i,q_j)$。物理上，它表示涉及两体相互作用的物理量，如粒子的静电势能。对于多个粒子而言，

$$\hat{G}=\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\hat{g}(q_i,q_j)$$

被称为这群粒子的总两体算符，同样只涉及两粒子相互作用，例如粒子的总静电势能。

2、用产生、湮灭算符来表示 $\hat{G}$ 的矩阵元：

$$\boxed{\hat{G}=\frac{1}{2}\sum_{k'l',lk}g_{k'l',lk}\hat{b}_{k'}^{+}\hat{b}_{l'}^{+}\hat{b}_{l}\hat{b}_{k}}$$

其中 $g_{k'l',lk}=\langle\phi_{k'}(q_1)\phi_{l'}(q_2)|\hat{g}|\phi_l(q_2)\phi_k(q_1)\rangle$；同样可以通过组合原理来判定求和中哪些项会有贡献。

五、费米子的二次量子化

我们注意到前面定义的产生算符满足对易关系 $[\hat{b}_k^{+},\hat{b}_{k'}^{+}]=0$，也就是说两个粒子的摆放顺序调换不会影响最终状态（交换对称），这正好是玻色子的性质。对于费米子，为了满足交换反对称，必须适当修改定义，但研究思路完全一致。

1、费米子的占据数态矢：仍是 $|n_1,...,n_k,...\rangle$，但是 $n_k=0$或1，原因在于泡利不相容原理。

2、产生、湮灭算符：$\hat{c}_k^{+}$与$\hat{c}_k$。

★反对易子：$\{\hat{A},\hat{B}\}\equiv\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$。

（1）泡利不相容原理：$\hat{c}_k^{+}|...,1_k,...\rangle=0$。

（2）交换反对称性：

$$\hat{c}_k^{+}|...,0_k,...\rangle=(-1)^{\sum_{i=1}^{k-1}n_i}|...,1_k,...\rangle,\ \ \hat{c}_k|...,1_k,...\rangle=(-1)^{\sum_{i=1}^{k-1}n_i}|...,0_k,...\rangle.$$

注意这不是证明，只是为了满足交换反对称性而定义了等号右边的系数。

由此：$\{\hat{c}_k,\hat{c}_l^{+}\}=\delta_{kl},\ \{\hat{c}_k,\hat{c}_l\}=\{\hat{c}_k^{+},\hat{c}_l^{+}\}=0$。

（3）占有数算符：$\hat{n}_k=\hat{c}_k^{+}\hat{c}_k\Rightarrow\hat{n}_k|...,n_k,...\rangle=n_k|...,n_k,...\rangle.$

3、场算符：$\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})=\sum_k\psi_k(\vec{r})\hat{c}_{k\sigma}$。其中$\sigma$表示自旋，对于费米子必须把不同自旋的粒子区分开。

对易关系：$\{\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}),\hat{\psi}_{\sigma'}^{+}(\vec{r}')\}=\delta(\vec{r}-\vec{r}')\delta_{\sigma\sigma'},\ \{\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}),\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}')\}=\{\hat{\psi}_\sigma^{+}(\vec{r}),\hat{\psi}_{\sigma'}^{+}(\vec{r}')\}=0.$

4、单体算符、两体算符的二次量子化形式和玻色子完全一致。

★这门课是大三学的，现在本科毕业，再添点东西。

允文君曾经思考过，为什么 Fock 空间、产生湮灭算符的这套理论要叫做“二次”量子化，而量子力学 I 中用波函数表示全同粒子态的方法为何是“一次”量子化。在修读过更多的凝聚态课程之后，允文君找到了可能的答案。

我们对一次量子化的历史脉络已经非常熟悉：物理学家发现了微观粒子的波动性，因此将经典的牛顿定律改变成了量子的薛定谔方程，用波函数来描述粒子。因此，一次量子化是**将经典力学中的粒子看成波**的过程。

对于二次量子化，我们在这一章已经看到了它的想法。比如，谐振子的升降算符原本只是一份份地在波动中注入能量；现在我们引入“声子”的概念，就把这一份份的能量看成了粒子。对于电子、质子等实物粒子，我们习惯认为它们是粒子，而一次量子化将它们也看成波；至于振动中的声子，则是我们习惯认为它是波，然后才去研究它的粒子性，因此它被称为“准粒子”。我们已经熟知的光子也是对电磁波的同样处理，所以光子也是准粒子。这说明，二次量子化是**将经典力学中的波看成准粒子**的过程；它出现在一次量子化之后，并且有时会出现将实物粒子看成波、再引入准粒子的过程，或许这就是为什么要称为“二次”。

我们明显可以看到，有了二次量子化，不仅可以妥善处理全同粒子不可分辨的问题，还能极大地丰富物理内涵，对一个问题有更多样的认识，甚至可以对准粒子的统计性质进行分析，实现更多学科的融会贯通。因此，在前沿理论中常常会通过准粒子来解释问题、描述图像，例如磁性物质中的电子空穴对（下一章）、超导中的 Cooper 对、拓扑相变中的任意子（anyon）都是准粒子模型。

从另一个方面来讲，这也说明了二次量子化在量子力学课程中的重要性，因为这可以说是理论研究的必备基础。目前本科必修的量子力学 I 课时有限，实在没有时间讲解二次量子化，而量子力学 II 又缺乏教学资源，这导致二次量子化的教学还存在很大的改进空间。虽然很多专业进阶课程会在最开始补充讲解二次量子化，但按照基础知识的标准，往往不够详细、不够生动。在这样的阶段，我们需要自己主动找到高等量子力学的教材并阅读相关章节，以学到日后科研中非常重要的工具和物理理解。

第四章 二次量子化的应用：磁性物质

一、无相互作用电子气（自由电子费米气）

1、哈密顿量：$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\frac{\hbar^2k_i^2}{2m}=\sum_{\vec{k},\sigma}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\hat{c}^{+}_{\vec{k},\sigma}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}=\sum_{\vec{k},\sigma}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\hat{n}_{\vec{k},\sigma}$。只有对角元。

2、基态：根据泡利不相容原理，各电子将从 0 波矢开始逐渐填充至一个最大波矢，记为费米波矢 k_F。

3、波矢密度：根据周期性边界条件，被限制在 L^3 的立方体内的电子满足驻波关系：$\vec{k}=\frac{2\pi}{L}(n_1,n_2,n_3)$，其中 n_1,n_2,n_3 为整数。因此，在波矢空间中，每一个波矢终点占据的体积为 $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3=\frac{(2\pi)^3}{\Omega}$，从而波矢密度为 $\frac{\Omega}{(2\pi)^3}$。一般认为波矢分布趋于连续：$\sum_{\vec{k}}=\int\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\mathrm{d}\vec{k}$。

4、宏观物理量与费米波矢的关系（求和时考虑自旋，要乘以 2）

（1）粒子数：$N=\int_0^{k_F}\frac{2\Omega}{(2\pi)^3}4\pi k^2\mathrm{d}k=\frac{k_F^3}{3\pi^2}\Omega\Rightarrow n=\frac{N}{\Omega}=\frac{k_F^3}{3\pi^2}$，$k_F=(3\pi^2n)^{\frac{1}{3}}$.

二次量子化的证明：设基态为 $|g\rangle=\prod_{0\le k\le k_F}\hat{c}^{+}_{\vec{k},\uparrow}\hat{c}^{+}_{\vec{k},\downarrow}|0\rangle$，则

$$
\begin{aligned}
N=\langle g|\hat{N}|g\rangle&=\left\langle g\left|\sum_{\mathbf{k}',\sigma}\hat{n}_{\mathbf{k}',\sigma}\right|g\right\rangle=\left\langle g\left|\sum_{\mathbf{k}',\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}\right|g\right\rangle\\
&=\sum_{\mathbf{k}',\sigma}\left\langle 0\left|\left(\prod_{|\mathbf{k}|<k_F}\hat{c}_{\mathbf{k},\downarrow}\hat{c}_{\mathbf{k},\uparrow}\right)\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}\left(\prod_{|\mathbf{k}|<k_F}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\downarrow}\right)\right|0\right\rangle\\
&=\sum_{|\mathbf{k}'|<k_F,\sigma}\left\langle 0\left|\hat{c}_{\mathbf{k}',\downarrow}\hat{c}_{\mathbf{k}',\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}',\uparrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}',\downarrow}\right|0\right\rangle\\
&=\sum_{|\mathbf{k}'|<k_F,\sigma}\left\langle 1_{\mathbf{k}',\uparrow}1_{\mathbf{k}',\downarrow}\left|\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}\right|1_{\mathbf{k}',\uparrow}1_{\mathbf{k}',\downarrow}\right\rangle\\
&=\sum_{|\mathbf{k}'|<k_F,\sigma}1=2\sum_{|\mathbf{k}|<k_F}1.
\end{aligned}
$$

（2）总能量：$E=\int_{k_F}^{0}\frac{\hbar^2k^2}{2m}\frac{2\Omega}{(2\pi)^3}4\pi k^2\mathrm{d}k=\frac{\hbar^2}{m}\frac{\Omega}{2\pi^2}\frac{k_F^5}{5}=\frac{3}{5}\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}\frac{k_F^3}{3\pi^2}\Omega=\frac{3}{5}N\varepsilon_F$. 其中，费米能$\varepsilon_F=\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}$，它是能量上限。

二次量子化证明：

$$E=\langle g|\hat{H}|g\rangle=\left\langle g\left|\sum_{\mathbf{k}',\sigma}E(\mathbf{k}')\hat{n}_{\mathbf{k}',\sigma}\right|g\right\rangle=\left\langle g\left|\sum_{\mathbf{k}',\sigma}E(\mathbf{k}')\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}',\sigma}\hat{c}_{\mathbf{k}',\sigma}\right|g\right\rangle$$

$$=\sum_{|\mathbf{k}'|<k_F,\sigma}E(\mathbf{k}')=2\sum_{|\mathbf{k}|<k_F}E(\mathbf{k}).$$

5、能量态密度（三维，并且计及自旋）：

$$\frac{2\Omega}{(2\pi)^3}4\pi k^2\mathrm{d}k=D(E)\mathrm{d}E$$

$$\Rightarrow D(E)=\frac{2\Omega}{(2\pi)^3}4\pi k^2\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E}=\frac{2\Omega}{(2\pi)^3}4\pi\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}E}\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}=\frac{m\Omega}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{2mE}.$$

二、相互作用电子气，磁性

1、若考虑电子之间的相互作用，则自旋向上与向下不等价，因此系统的两种自旋未必有相同的数量。定义磁化强度：$P=\frac{N_\uparrow-N_\downarrow}{N}\Leftrightarrow\begin{cases}N_\uparrow=\frac{N}{2}(1+P),\\N_\downarrow=\frac{N}{2}(1-P).\end{cases}$ 在这种状态下，基态的两种自旋对应不同的波矢上限$k_F^{\uparrow}$和$k_F^{\downarrow}$；体系的基态为

$$|g_{\mathrm{P}}\rangle=\left(\prod_{|\mathbf{k}|<k_F^{\uparrow}}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow}\right)\left(\prod_{|\mathbf{k}|<k_F^{\downarrow}}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k},\downarrow}\right)|0\rangle$$

显然，$-1\leqslant P\leqslant 1$。

2、基态能量

（1）动能：$\hat{H}_0=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$。

$$\langle g_{\mathrm{P}}|\hat{H}_0|g_{\mathrm{P}}\rangle=\sum_{\mathbf{k},\sigma}E(k)n_{\mathbf{k},\sigma}\quad\text{with}\quad n_{\mathbf{k},\sigma}=\Theta(k_F^{\sigma}-|\mathbf{k}|)$$

$$=\frac{3}{5}\left(E_F^{\uparrow}N_\uparrow+E_F^{\downarrow}N_\downarrow\right)=\frac{E_0}{2}\left[\left(\frac{2N_\uparrow}{N}\right)^{\frac{5}{3}}+\left(\frac{2N_\downarrow}{N}\right)^{\frac{5}{3}}\right]$$

$$=\frac{E_0}{2}\left[(1+P)^{\frac{5}{3}}+(1-P)^{\frac{5}{3}}\right],$$

其中$E_0=\frac{3}{5}N\varepsilon_F$是无磁性（$P=0$）时的总能量。

（2）势能：设为刚球势，$\hat{V}=\frac{1}{2}\sum_{ij}\hat{V}_{ij}=\frac{1}{2}\sum_{ij}U\delta(\vec{r}_i-\vec{r}_j)\Rightarrow\tilde{V}(\vec{q})=U$。

利用二次量子化方式计算：

$$\hat{V}=\frac{1}{2\Omega}\sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},\sigma,\sigma'}\widetilde{V}(\vec{q})\hat{c}^{+}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{c}^{+}_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}\hat{c}_{\vec{k}',\sigma'}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}=\frac{U}{2\Omega}\sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},\sigma,\sigma'}\hat{c}^{+}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{c}^{+}_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}\hat{c}_{\vec{k}',\sigma'}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}.$$

Q：为什么可以保证中间两个算符和两边的算符分别有相同自旋？

A：可以加入自旋波函数重新推导。设$\left|\vec{k},\sigma\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\chi(\sigma)$，则

$$\hat{V}=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{k}_1',\vec{k}_2',\vec{k}_1,\vec{k}_2\\ \sigma_1',\sigma_2',\sigma_1,\sigma_2}}V_{\vec{k}_1'\sigma_1'\vec{k}_2'\sigma_2',\vec{k}_2\sigma_2\vec{k}_1\sigma_1}\hat{c}^{+}_{\vec{k}_1',\sigma_1'}\hat{c}^{+}_{\vec{k}_2',\sigma_2'}\hat{c}_{\vec{k}_2,\sigma_2}\hat{c}_{\vec{k}_1,\sigma_1}$$

$$=\frac{1}{2\Omega^2}\sum_{\substack{\vec{k}_1',\vec{k}_2',\vec{k}_1,\vec{k}_2\\ \sigma_1',\sigma_2',\sigma_1,\sigma_2}}\left\langle e^{\mathrm{i}\vec{k}_1'\cdot\vec{r}}\chi(\sigma_1')e^{\mathrm{i}\vec{k}_2'\cdot\vec{r}}\chi(\sigma_2')\middle|\hat{V}\middle|e^{\mathrm{i}\vec{k}_2\cdot\vec{r}}\chi(\sigma_2)e^{\mathrm{i}\vec{k}_1\cdot\vec{r}}\chi(\sigma_1)\right\rangle\hat{c}^{+}_{\vec{k}_1',\sigma_1'}\hat{c}^{+}_{\vec{k}_2',\sigma_2'}\hat{c}_{\vec{k}_2,\sigma_2}\hat{c}_{\vec{k}_1,\sigma_1}$$

$$=\frac{1}{2\Omega^2}\sum_{\substack{\vec{k}_1',\vec{k}_2',\vec{k}_1,\vec{k}_2\\ \sigma_1',\sigma_2',\sigma_1,\sigma_2}}\left\langle\chi(\sigma_2')\middle|\chi(\sigma_2)\right\rangle\left\langle\chi(\sigma_1')\middle|\chi(\sigma_1)\right\rangle\iint e^{\mathrm{i}(\vec{k}_1-\vec{k}_1')\cdot\vec{r}_1}e^{\mathrm{i}(\vec{k}_2-\vec{k}_2')\cdot\vec{r}_2}V(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2\hat{c}^{+}_{\vec{k}_1',\sigma_1'}\hat{c}^{+}_{\vec{k}_2',\sigma_2'}\hat{c}_{\vec{k}_2,\sigma_2}\hat{c}_{\vec{k}_1,\sigma_1}$$

$$=\frac{1}{2\Omega^2}\sum_{\substack{\vec{k}_1',\vec{k}_2',\vec{k}_1,\vec{k}_2\\ \sigma_1',\sigma_2',\sigma_1,\sigma_2}}\delta_{\sigma_2'\sigma_2}\delta_{\sigma_1'\sigma_1}\iint e^{\mathrm{i}(\vec{k}_1-\vec{k}_1')\cdot\vec{r}_2}e^{\mathrm{i}(\vec{k}_2-\vec{k}_2')\cdot\vec{r}_2}e^{\mathrm{i}(\vec{k}_1-\vec{k}_1')\cdot(\vec{r}_1-\vec{r}_2)}V(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2\hat{c}^{+}_{\vec{k}_1',\sigma_1'}\hat{c}^{+}_{\vec{k}_2',\sigma_2'}\hat{c}_{\vec{k}_2,\sigma_2}\hat{c}_{\vec{k}_1,\sigma_1}$$

$$=\frac{1}{2\Omega^2}\sum_{\vec{k}_1',\vec{k}_2',\vec{k}_1,\vec{k}_2}\sum_{\sigma,\sigma'}\iint e^{\mathrm{i}(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_1'-\vec{k}_2')\cdot\vec{r}_2}e^{\mathrm{i}(\vec{k}_1-\vec{k}_1')\cdot\vec{R}}V(\vec{R})\mathrm{d}\vec{r}_2\mathrm{d}\vec{R}\hat{c}^{+}_{\vec{k}_1',\sigma}\hat{c}^{+}_{\vec{k}_2',\sigma'}\hat{c}_{\vec{k}_2,\sigma'}\hat{c}_{\vec{k}_1,\sigma}$$

$$=\frac{1}{2\Omega^2}\sum_{\vec{k}_1',\vec{k}_2',\vec{k}_1,\vec{k}_2}\sum_{\sigma,\sigma'}\Omega\delta(\vec{k}_1+\vec{k}_2-\vec{k}_1'-\vec{k}_2')\cdot\widetilde{V}(\vec{k}_1'-\vec{k}_1)\hat{c}^{+}_{\vec{k}_1',\sigma}\hat{c}^{+}_{\vec{k}_2',\sigma'}\hat{c}_{\vec{k}_2,\sigma'}\hat{c}_{\vec{k}_1,\sigma}$$

$$=\frac{1}{2\Omega}\sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q}}\sum_{\sigma,\sigma'}\widetilde{V}(\vec{q})\hat{c}^{+}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{c}^{+}_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}\hat{c}_{\vec{k}',\sigma'}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}$$

求和项对应两种情形：

①$\begin{cases}\vec{k}+\vec{q}=\vec{k},\\ \vec{k}'-\vec{q}=\vec{k}'\end{cases}$，无动量交换。（Q：既然连动量交换都没有，那么这种情形对应什么物理过程，为什么会对能量有贡献？）

$$\sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},\sigma,\sigma'}\left\langle g_P\middle|\hat{c}^{+}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{c}^{+}_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}\hat{c}_{\vec{k}',\sigma'}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}\middle|g_P\right\rangle=\sum_{\vec{k},\vec{k}',\sigma,\sigma'}\left\langle g_P\middle|\hat{c}^{+}_{\vec{k},\sigma}\hat{c}^{+}_{\vec{k}',\sigma'}\hat{c}_{\vec{k}',\sigma'}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}\middle|g_P\right\rangle$$

$$=\sum_{\vec{k},\vec{k}',\sigma,\sigma'}\left\langle g_P\middle|\hat{c}^{+}_{\vec{k},\sigma}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}\hat{c}^{+}_{\vec{k}',\sigma'}\hat{c}_{\vec{k}',\sigma'}\middle|g_P\right\rangle=\sum_{\vec{k},\vec{k}',\sigma,\sigma'}\left\langle g_P\middle|\hat{n}_{\vec{k},\sigma}\hat{n}_{\vec{k}',\sigma'}\middle|g_P\right\rangle=\sum_{\vec{k},\vec{k}',\sigma,\sigma'}n_{\vec{k},\sigma}n_{\vec{k}',\sigma'}=\left(\sum_{\vec{k},\sigma}n_{\vec{k},\sigma}\right)^2=N^2.$$

对应于 Hatree 能量：$E_H=\frac{U}{2\Omega}N^2=\frac{U}{2}\Omega n^2=\frac{U}{2}Nn.$

②$\begin{cases}\vec{k}+\vec{q}=\vec{k},\\ \vec{k}'-\vec{q}=\vec{k}'\end{cases}$，有动量交换。为保证角动量守恒，必须要求$\sigma=\sigma'$，否则不可能对求和有贡献。

$$\sum_{\vec{k},\vec{k}',\vec{q},\sigma,\sigma'}\left\langle g_P\middle|\hat{c}^{+}_{\vec{k}+\vec{q},\sigma}\hat{c}^{+}_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}\hat{c}_{\vec{k}',\sigma'}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}\middle|g_P\right\rangle=\sum_{\vec{k},\vec{k}',\sigma}\left\langle g_P\middle|\hat{c}^{+}_{\vec{k}',\sigma}\hat{c}^{+}_{\vec{k},\sigma}\hat{c}_{\vec{k}',\sigma}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}\middle|g_P\right\rangle$$

$$=-\sum_{\vec{k},\vec{k}',\sigma}\left\langle g_P\middle|\hat{c}^{+}_{\vec{k}',\sigma}\hat{c}_{\vec{k}',\sigma}\hat{c}^{+}_{\vec{k},\sigma}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}\middle|g_P\right\rangle=-\sum_{\vec{k},\vec{k}',\sigma}\left\langle g_P\middle|\hat{n}_{\vec{k}',\sigma}\hat{n}_{\vec{k},\sigma}\middle|g_P\right\rangle=-\sum_{\vec{k},\vec{k}',\sigma}n_{\vec{k}',\sigma}n_{\vec{k},\sigma}$$

$$=-\sum_{\sigma}\left(\sum_{\vec{k},\vec{k}'}n_{\vec{k}',\sigma}n_{\vec{k},\sigma}\right)^2=-(N_\uparrow^2+N_\downarrow^2).$$

对应于 Fock 能量：

$$E_F=-\frac{U}{2\Omega}(N_\uparrow^2+N_\downarrow^2)=-\frac{U}{2\Omega}N^2\frac{N_\uparrow^2+N_\downarrow^2}{N^2}=-\frac{E_H}{4}[(1+P)^2+(1-P)^2]=-\frac{E_H}{2}(1+P^2).$$

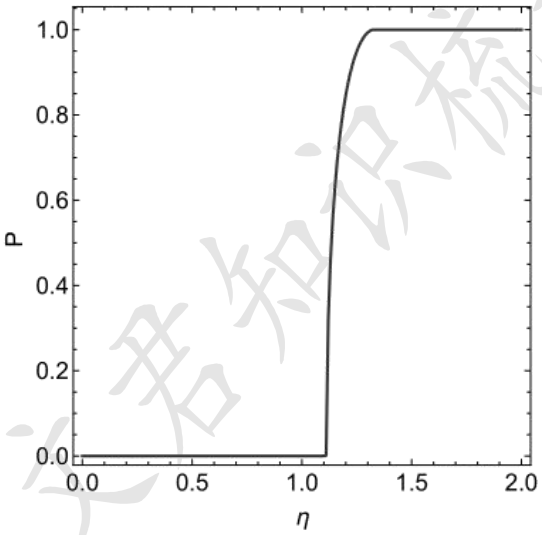
（3）总能量：$E=\frac{E_0}{2}[(1+P)^{5/3}+(1-P)^{5/3}]+\frac{E_H}{2}(1-P^2)$. 它是关于磁化强度 P 的偶函数。能量最低点有三种情形：

①势能较小，极小值点位于 $P=0$ 处，宏观不显磁性。

②势能中等，极小值点有两个，分别位于 $(-1,0)$ 和 $(0,1)$ 之间，左右对称。宏观有磁性。

③势能较大，则在 $-1\leqslant P\leqslant 1$ 之间没有极值点，最小值位于端点 $P=\pm 1$ 处，宏观上完全磁化。

定义相互作用强度 $\eta=\frac{E_H}{E_0}$；通过数值计算可知，当 $\eta>1.1$ 时，体系的能量最低点在 $P=\pm 1$ 处，这是完全磁化的条件；与此同时，物质从非磁性到完全磁化，中间的变动非常迅速，如下图。



三、激发态

1、对于电子气的基态，所有电子都从低到高依次填充各个能态。但是，有时可能会出现激发态，有一些电子处于较高的能态，或者费米球中出现空缺。

2、单粒子激发态

（1）产生一个高能态电子：$\left|e_{\vec{k},\sigma}\right\rangle=\hat{c}^+_{\vec{k},\sigma}\left|g\right\rangle$。要求 $\left|\vec{k}\right|>k_F^\sigma$，否则违反泡利不相容原理。这样会给体系带来 $\hbar\vec{k}$ 的动量和 σ 的自旋。产生的能量：

$$E_e(\vec{k},\sigma)=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\frac{U}{2\Omega}[(N+1)^2-N^2]-\frac{U}{2\Omega}[(N_\sigma+1)^2-N_\sigma^2]\approx\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\frac{U}{2\Omega}2N-\frac{U}{2\Omega}2N_\sigma$$

$$=\frac{\hbar^2k^2}{2m}+Un-Un_\sigma.$$

（2）产生一个空穴：$\left|h_{\vec{k},\sigma}\right\rangle=\hat{c}_{-\vec{k},-\sigma}\left|g\right\rangle$。这里的意思是，系统中湮灭了一个波矢为 $-\vec{k}$、自旋为 $-\sigma$ 的电子，这样会给体系带来 $+\hbar\vec{k}$ 的动量和 $+\sigma$ 的自旋。因此，要求 $\left|\vec{k}\right|<k_F^{-\sigma}$。（存疑）

空穴产生的能量为：

$$E_h(\vec{k},\sigma)=-\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\frac{U}{2\Omega}[(N-1)^2-N^2]-\frac{U}{2\Omega}[(N_{-\sigma}-1)^2-N_{-\sigma}^2]\approx-\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\frac{U}{2\Omega}2N+\frac{U}{2\Omega}2N_{-\sigma}$$

$$=-\frac{\hbar^2k^2}{2m}-Un+Un_{-\sigma}.$$

3、电子空穴对：如果要保证粒子数守恒，那么激发电子数显然应等于空穴数。电子与空穴可以配对，认为是将一个地方的电子激发到别的地方，在原处留下一个空穴。算符表示：

$$\left|eh_{\vec{k},\vec{q};\sigma,\sigma'}\right\rangle=\hat{c}^+_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2},\sigma}\hat{c}_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2},\sigma'}\left|g\right\rangle,\ \text{其中}\left|\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2}\right|>k_F^{\sigma},\ \left|\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}\right|<k_F^{\sigma'}.$$

这一操作产生的总动量为$\hbar\vec{q}$，产生的总自旋为$\sigma-\sigma'=0,\pm1$；产生的能量为

$$E_{eh}(\vec{k},\vec{q};\sigma,\sigma')=E_e(\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2},\sigma)+E_h(-\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2},\sigma')$$

$$=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2}\right)^2-\left(\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}\right)^2\right]+Un-Un-Un_{\sigma}+Un_{-\sigma'}$$

$$=\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}\cdot\vec{q}+UnP(\sigma'-\sigma).$$

四、磁子（Magnon）

1、在均匀体系中，各粒子的自旋只有朝上、朝下两种情形，具有旋转对称性。例如，将系统绕 x 轴转动α角得到的状态$\left|g'\right\rangle=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha\hat{S}_x\right)\left|g\right\rangle$与$\left|g\right\rangle$是简并的；但是，有些情况下，粒子自旋的取向在空间内有（准）连续变化，它来自于一种对各处自旋不等同的旋转操作：

$$\left|g'\right\rangle=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\alpha(\vec{r})\hat{S}_x(\vec{r})\mathrm{d}\vec{r}\right)\left|g\right\rangle$$

考虑一个特殊情况，即角度α是简谐变化的：$\alpha(\vec{r})=\alpha_0e^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}$，如下图。



设α_0很小，则

$$\left|g'\right\rangle-\left|g\right\rangle\approx-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\alpha(\vec{r})\hat{S}_x(\vec{r})\mathrm{d}\vec{r}\left|g\right\rangle=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha_0\int e^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\hat{S}_x(\vec{r})\mathrm{d}\vec{r}\left|g\right\rangle$$

$$=-\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha_0\int e^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\left[\hat{c}^+_{\uparrow}(\vec{r})\hat{c}_{\downarrow}(\vec{r})+\hat{c}^+_{\downarrow}(\vec{r})\hat{c}_{\uparrow}(\vec{r})\right]\mathrm{d}\vec{r}\left|g\right\rangle=-\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha_0\sum_{\vec{k},\vec{k}'}\int e^{\mathrm{i}(\vec{k}+\vec{k}'-\vec{q})\cdot\vec{r}}\mathrm{d}\vec{r}(\hat{c}^+_{\vec{k},\uparrow}\hat{c}_{\vec{k}',\downarrow}+\hat{c}^+_{\vec{k},\downarrow}\hat{c}_{\vec{k}',\uparrow})\left|g\right\rangle$$

$$=-\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha_0\sum_{\vec{k},\vec{k}'}\delta(\vec{k}'-\vec{k}-\vec{q})(\hat{c}^+_{\vec{k},\uparrow}\hat{c}_{\vec{k}',\downarrow}+\hat{c}^+_{\vec{k},\downarrow}\hat{c}_{\vec{k}',\uparrow})\left|g\right\rangle$$

$$=-\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha_0\sum_{\vec{k}}(\hat{c}^+_{\vec{k},\uparrow}\hat{c}_{\vec{k}+\vec{q},\downarrow}+\hat{c}^+_{\vec{k},\downarrow}\hat{c}_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow})\left|g\right\rangle=-\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha_0\sum_{\vec{k}}(\hat{c}^+_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2},\uparrow}\hat{c}_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2},\downarrow}+\hat{c}^+_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2},\downarrow}\hat{c}_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2},\uparrow})\left|g\right\rangle$$

这里利用傅里叶变换：$\hat{c}_{\sigma}(\vec{r})=\sum_{\vec{k}}\hat{c}_{\vec{k},\sigma}e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$，$\hat{c}^+_{\sigma}(\vec{r})=\sum_{\vec{k}}\hat{c}^+_{\vec{k},\sigma}e^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}$。

如果假定↑比↓的电子更多，那么↑对应的费米球更大，往往无法使$\left|\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2}\right|>k_F^{\uparrow}$成立，导致$\hat{c}^{+}_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2},\uparrow}\hat{c}_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2},\downarrow}$对结果无贡献。因此

$$\left|g'\right\rangle-\left|g\right\rangle\equiv\left|m_{\vec{q}}\right\rangle\approx-\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha_0\sum_{\vec{k}}\hat{c}^{+}_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2},\downarrow}\hat{c}_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2},\uparrow}\left|g\right\rangle=-\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha_0\sum_{\vec{k}}\left|eh_{\vec{k},\vec{q};\downarrow,\uparrow}\right\rangle$$

称这一过程产生了一个磁子：$\left|m_{\vec{q}}\right\rangle=\hat{m}^{+}_{\vec{q}}\left|g\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{N_\uparrow-N_\downarrow}}\sum_{\vec{k}}\hat{c}^{+}_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2},\downarrow}\hat{c}_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2},\uparrow}\left|g\right\rangle$。

2、磁子产生算符：$\hat{m}^{+}_{\vec{q}}=\frac{1}{\sqrt{N_\uparrow-N_\downarrow}}\sum_{\vec{k}}\hat{c}^{+}_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2},\downarrow}\hat{c}_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2},\uparrow}$。其满足玻色子的对易关系：

$$[\hat{m}^{+}_{\vec{q}},\hat{m}_{\vec{q}'}]=\frac{\delta_{\vec{q}\vec{q}'}}{N_\uparrow-N_\downarrow}\sum_{\vec{k}}(\hat{c}^{+}_{\vec{k},\uparrow}\hat{c}_{\vec{k},\uparrow}-\hat{c}^{+}_{\vec{k},\downarrow}\hat{c}_{\vec{k},\downarrow})\approx\delta_{\vec{q}\vec{q}'}.$$

3、磁子色散关系

（1）单个电子空穴对可以表示成磁子的线性叠加：$\left|\psi\right\rangle=\sum_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}\left|eh_{\vec{k},\vec{q};\downarrow,\uparrow}\right\rangle$。

（2）寻找电子空穴对的本征能量。

$$(\hat{H}_0+\hat{V})\left|\psi\right\rangle=E\left|\psi\right\rangle$$

投影到$\left\langle eh_{\vec{k}',\vec{q};\downarrow,\uparrow}\right|$：

$$E\psi_{\vec{k}'}=\sum_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}\left\langle eh_{\vec{k}',\vec{q};\downarrow,\uparrow}\left|\hat{H}_0\right|eh_{\vec{k},\vec{q};\downarrow,\uparrow}\right\rangle+\psi_{\vec{k}}\left\langle eh_{\vec{k}',\vec{q};\downarrow,\uparrow}\left|\hat{V}\right|eh_{\vec{k},\vec{q};\downarrow,\uparrow}\right\rangle=E_{eh}(\vec{k}',\vec{q};\downarrow,\uparrow)\psi_{\vec{k}'}+\sum_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}V_{\vec{k}'\vec{k}}.$$

①仍取势能为δ函数势，即$\hat{V}=U\delta(\vec{r})$，则有$V_{\vec{k}'\vec{k}}=-\frac{U}{V}$. 此时，设$\sum_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}=C$，则

$$E\psi_{\vec{k}}=E_{eh}(\vec{k},\vec{q};\downarrow,\uparrow)\psi_{\vec{k}}-\frac{U}{V}C\Rightarrow\psi_{\vec{k}}=-\frac{U}{V}\frac{C}{E-E_{eh}(\vec{k},\vec{q};\downarrow,\uparrow)}$$

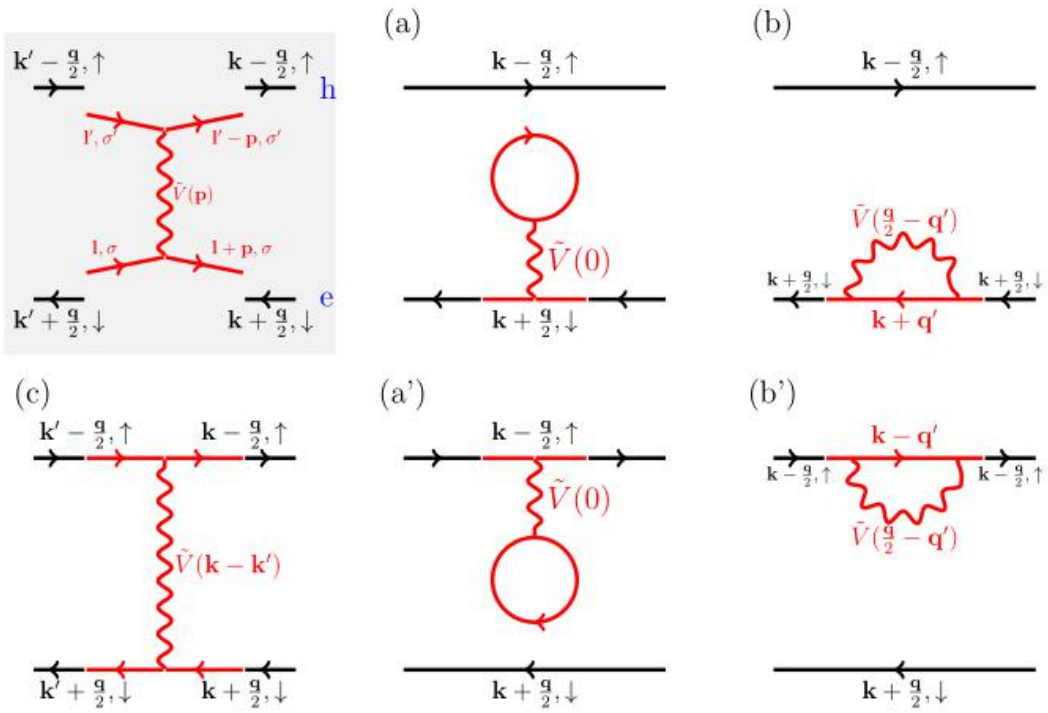
$$\Rightarrow\sum_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}=C=-\frac{U}{V}\sum_{\vec{k}}\frac{C}{E-E_{eh}(\vec{k},\vec{q};\downarrow,\uparrow)}\Rightarrow1=-\frac{U}{V}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{E-E_{eh}(\vec{k},\vec{q};\downarrow,\uparrow)}$$

利用这一式可以解析或数值地计算 E 的值。

②一般情形下的势能：根据两体算符的表达式，有

$$\begin{aligned}V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}&=\left\langle eh_{\mathbf{k}',\mathbf{q};\downarrow,\uparrow}\left|\hat{V}\right|eh_{\mathbf{k},\mathbf{q};\downarrow\uparrow}\right\rangle\\&=\frac{1}{2\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{l}'\mathbf{l},\mathbf{p}}\sum_{\sigma',\sigma}\tilde{V}(\mathbf{p})\left\langle eh_{\mathbf{k}',\mathbf{q};\downarrow,\uparrow}\left|\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{l}+\mathbf{p},\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{l}'-\mathbf{p},\sigma'}\hat{c}_{\mathbf{l}',\sigma'}\hat{c}_{\mathbf{l},\sigma}\right|eh_{\mathbf{k},\mathbf{q};\downarrow\uparrow}\right\rangle\\&=\frac{1}{2\mathcal{V}}\sum_{\mathbf{l}'\mathbf{l},\mathbf{p}}\sum_{\sigma',\sigma}\tilde{V}(\mathbf{p})\left\langle g\left|\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2},\uparrow}\hat{c}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{l}+\mathbf{p},\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{l}'-\mathbf{p},\sigma'}\hat{c}_{\mathbf{l}',\sigma'}\hat{c}_{\mathbf{l},\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\uparrow}\right|g\right\rangle\end{aligned}$$

对矩阵元有贡献的情形有 5 种，这里用费曼图表示：



对应于 3 种项：

(a): $\frac{1}{2\mathcal{V}}\tilde{V}(0)\left\langle g\left|\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\uparrow}\hat{c}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{l}',\sigma'}\hat{c}_{\mathbf{l}',\sigma'}\hat{c}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\uparrow}\right|g\right\rangle$,

(b): $\frac{1}{2\mathcal{V}}\tilde{V}(\frac{\mathbf{q}}{2}-\mathbf{q}')\left\langle g\left|\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\uparrow}\hat{c}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}',\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}',\downarrow}\hat{c}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\uparrow}\right|g\right\rangle$,

(c): $\frac{1}{2\mathcal{V}}\tilde{V}(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\left\langle g\left|\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2},\uparrow}\hat{c}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\uparrow}\hat{c}_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}^{\dagger}_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2},\downarrow}\hat{c}_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2},\uparrow}\right|g\right\rangle$.

前两种是对角的，属于 Hatree 能量，而后一种非对角，属于 Fock 能量。

第五章 场的量子化

一、经典力学场

经典力学中，场的典型例子就是弹性介质中的位移场。以一维单原子链为例，可以说明经典场总是可以等效成一系列谐振子。

1、体系的拉格朗日量：

$$L=\sum_i\frac{1}{2}m_i\dot{u}_i^2-\frac{1}{2}k(u_{i+1}-u_i)^2=\frac{a}{2}\sum_i\frac{m_i}{a}\dot{u}_i^2-ka\left(\frac{u_{i+1}-u_i}{a}\right)^2$$

对于准连续情形，即晶格常数 a 很小，可以近似将求和转化为积分：

$$L=\frac{1}{2}\int\left[\rho\dot{u}^2(x,t)-Ku'^2\right]\mathrm{d}x$$

其中 $\rho=\frac{m}{a}$ 为质量线密度， $K=ka$ 为杨氏模量， $u'=\frac{\partial u}{\partial x}$ 为应变。

2、体系的拉格朗日方程： $\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial L}{\partial u'}+\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial L}{\partial \dot{u}}-\frac{\partial L}{\partial u}=0$ ，即

$$\boxed{\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}-\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}=0}$$

此为波动方程，波速 $v=\sqrt{\frac{K}{\rho}}$ 。

3、位移场试解：$u=\sum_k u_k e^{\mathrm{i}(kx-\omega_k t)}+u_k^* e^{-\mathrm{i}(kx-\omega_k t)}$ 。加上共轭项是为了让位移为实数。

（1）若将此式代回波动方程，可知色散关系：$\omega_k=v|k|$ 。

（2）将此式代回体系的哈密顿量，有

$$H=-\frac{1}{2}\sum_{k,k'}\int\rho\omega_k\omega_{k'}\left(u_k e^{\mathrm{i}(kx-\omega_k t)}-u_k^* e^{-\mathrm{i}(kx-\omega_k t)}\right)\left(u_{k'} e^{\mathrm{i}(k'x-\omega_{k'} t)}-u_{k'}^* e^{-\mathrm{i}(k'x-\omega_{k'} t)}\right)\mathrm{d}x$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{k,k'}\int Kkk'\left(u_k e^{\mathrm{i}(kx-\omega_k t)}-u_k^* e^{-\mathrm{i}(kx-\omega_k t)}\right)\left(u_{k'} e^{\mathrm{i}(k'x-\omega_{k'} t)}-u_{k'}^* e^{-\mathrm{i}(k'x-\omega_{k'} t)}\right)\mathrm{d}x$$

每个求和中会出现四项，前两项与后两项互为共轭。可以说明，动能与势能的第一项会抵消：

$$\sum_{k,k'}\int(\rho\omega_k\omega_{k'}+Kkk')u_k e^{\mathrm{i}(kx-\omega_k t)}u_{k'}e^{\mathrm{i}(k'x-\omega_{k'}t)}\mathrm{d}x=\sum_{k,k'}(\rho\omega_k\omega_{k'}+Kkk')u_k u_{k'}e^{-\mathrm{i}(\omega_k+\omega_{k'})t}l\delta_{k,-k'}$$

$$=l\sum_k[\rho v^2|k\cdot(-k)|+Kk\cdot(-k)]u_k u_{-k}=l\sum_k(\rho v^2-K)k^2u_k u_{-k}=0$$

其中 l 为原子链总长度。同理，动能和势能的第四项也相互抵消。从而

$$H=\frac{1}{2}\sum_{k,k'}\int\rho\omega_k\omega_{k'}\left(u_k^* e^{-\mathrm{i}(kx-\omega_k t)}u_{k'}e^{\mathrm{i}(k'x-\omega_{k'}t)}+\text{c.c.}\right)\mathrm{d}x+\frac{1}{2}\sum_{k,k'}\int Kkk'\left(u_k^* e^{-\mathrm{i}(kx-\omega_k t)}u_{k'}e^{\mathrm{i}(k'x-\omega_{k'}t)}+\text{c.c.}\right)\mathrm{d}x$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{k,k'}(\rho\omega_k\omega_{k'}+Kkk')\left(u_k^*u_{k'}e^{-\mathrm{i}(\omega_{k'}-\omega_k)t}+\text{c.c.}\right)l\delta_{k,k'}=\frac{l}{2}\sum_k(\rho\omega_k^2+Kk^2)\left(u_k^*u_k+\text{c.c.}\right)$$

$$=l\sum_k\left(\rho\omega_k^2+K\frac{\omega_k^2}{v^2}\right)u_k^*u_k=2\rho l\sum_k\omega_k^2u_k^*u_k=\sum_k\omega_k d_k^*d_k$$

其中 $d_k=u_k\sqrt{2\rho l\omega_k}$ 为重整化傅里叶分量。我们知道量子力学中谐振子的哈密顿量为 $\hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a}+1/2)$，所以 d_k 的地位与产生、湮灭算符是等同的。同理，如果令 $Q_k=\frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}(d_k+d_k^*)$，$P_k=-\mathrm{i}\sqrt{\frac{\omega_k}{2}}(d_k-d_k^*)$，则 $H=\sum_k\frac{1}{2}\left(P_k^2+\omega_k^2Q_k^2\right)$，从而将一维单原子链转化为若干个解耦的谐振子。

二、经典电磁场

1、经典电磁场满足的基本方程为麦克斯韦方程组。以真空为例：

$$\begin{cases}\nabla\cdot E=\dfrac{\rho}{\varepsilon_0}\\ \nabla\times E=-\dfrac{\partial\vec{B}}{\partial t}\\ \nabla\cdot\vec{B}=0\\ \nabla\times\vec{B}=\mu_0\left(\vec{j}+\varepsilon_0\dfrac{\partial\vec{E}}{\partial t}\right)\end{cases}$$

一般而言，直接求解电场和磁场不方便，可以引入电标势和磁矢势并求解这

两个物理量。利用上述方程组中的第二与第三式，定义$\begin{cases}\vec{B}=\nabla\times\vec{A},\\ \vec{E}=-\nabla\varphi-\dfrac{\partial\vec{A}}{\partial t}\end{cases}$，则第一与第四式可以化为势函数的方程：

$$\begin{cases}\nabla^2\varphi+\dfrac{\partial}{\partial t}(\nabla\cdot\vec{A})=-\dfrac{\rho}{\varepsilon_0}\\ \nabla^2\vec{A}-\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2}-\nabla\left(\nabla\cdot\vec{A}+\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial\varphi}{\partial t}\right)=-\mu_0\vec{j}\end{cases}$$

由这两式得到的势函数并不确定，还可以有一个规范自由度：

$$\vec{A}\sim\vec{A}+\nabla\chi,\quad \varphi\sim\varphi-\frac{\partial\chi}{\partial t}$$

电动力学中一般有两种典型的规范。

（1）库仑规范：$\nabla\cdot\vec{A}=0\Rightarrow\begin{cases}\nabla^2\varphi=-\dfrac{\rho}{\varepsilon_0}\\ \nabla^2\vec{A}-\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2}=-\mu_0\vec{j}+\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial}{\partial t}\nabla\varphi\end{cases}$

这一规范适合用于静场问题。

（2）洛伦兹规范：$\nabla\cdot\vec{A}+\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial\varphi}{\partial t}=0\Rightarrow\begin{cases}\nabla^2\varphi-\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}=-\dfrac{\rho}{\varepsilon_0}\\ \nabla^2\vec{A}-\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2}=-\mu_0\vec{j}\end{cases}$

定义达朗贝尔算符$\Box=\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2}{\partial t^2}-\nabla^2$，则有$\begin{cases}\Box\varphi=-\dfrac{\rho}{\varepsilon_0}\\ \Box\vec{A}=-\mu_0\vec{j}\end{cases}$。这一规范可以使电标势与磁矢势地位等同，处理电磁波问题。

2、在洛伦兹规范下，如果空间内无自由电荷，则磁矢势满足波动方程：

$$\nabla^2\vec{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\vec{A}}{\partial t^2}=0$$

实数试解可以定义为如下的横波解：

$$\vec{A}=\sum_{\vec{k},\alpha}\vec{e}_\alpha[a_{\vec{k}\alpha}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}+a^*_{\vec{k}\alpha}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}],\quad \omega_{\vec{k}}=c\left|\vec{k}\right|,\quad \alpha=1,2$$

（1）在自由空间，规定电势为0，则电磁场可以由磁矢势得出：

$$\vec{B}=\nabla\times\vec{A}=\mathrm{i}\sum_{\vec{k},\alpha}\vec{k}\times\vec{e}_\alpha[a_{\vec{k}\alpha}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}-a^*_{\vec{k}\alpha}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}]$$

$$\vec{E}=-\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}=\mathrm{i}\sum_{\vec{k},\alpha}\omega_{\vec{k}}\vec{e}_\alpha[a_{\vec{k}\alpha}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}-a^*_{\vec{k}\alpha}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}]$$

（2）电磁能量：$H=\dfrac{1}{2}\varepsilon_0(E^2+c^2B^2)=\sum_{\vec{k},\alpha}\omega_{\vec{k}}d^*_{\vec{k}\alpha}d_{\vec{k}\alpha}$。

能流密度：$\vec{S}=\frac{1}{\mu_0}\vec{E}\times\vec{B}=\sum_{\vec{k},\alpha}c^2\vec{k}d^*_{\vec{k}\alpha}d_{\vec{k}\alpha}$。

其中，重整化傅里叶分量$d_{\vec{k}\alpha}=a_{\vec{k}\alpha}\sqrt{2\varepsilon_0\omega_{\vec{k}}V}$，$V$为总体积。

若定义$Q_{\vec{k}\alpha}=\frac{1}{\sqrt{2\omega_{\vec{k}}}}(d_{\vec{k}\alpha}+d^*_{\vec{k}\alpha})$，$P_{\vec{k}\alpha}=-\mathrm{i}\sqrt{\frac{\omega_{\vec{k}}}{2}}(d_{\vec{k}\alpha}-d^*_{\vec{k}\alpha})$，则$H=\sum_{\vec{k}\alpha}\frac{1}{2}\left(P^2_{\vec{k}\alpha}+\omega^2_{\vec{k}\alpha}Q^2_{\vec{k}\alpha}\right)$

可见经典电磁场也是一系列谐振子的组合。

三、场的量子力学描述

1、对于谐振子，其经典与量子描述为：

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

2、弹性位移场的量子力学描述：以声子为准粒子。

$$H=\sum_k\omega_k d^*_k d_k\Rightarrow\hat{H}=\sum_k\hbar\omega_k\left(\hat{a}^+_k\hat{a}_k+\frac{1}{2}\right)$$

声子湮灭算符$\hat{a}_k=\frac{d_k}{\sqrt{\hbar}}=\sqrt{\frac{2\rho l\omega_k}{\hbar}}\hat{u}_k$，产生算符$\hat{a}^+_k=\frac{d^*_k}{\sqrt{\hbar}}=\sqrt{\frac{2\rho l\omega_k}{\hbar}}\hat{u}^+_k$。

场算符$\hat{u}(x,t)=\sum_k\sqrt{\frac{\hbar}{2\rho l\omega_k}}\left[\hat{a}_k e^{\mathrm{i}(kx-\omega_k t)}+\hat{a}^+_k e^{-\mathrm{i}(kx-\omega_k t)}\right]$。

3、电磁场的量子力学描述：以光子为准粒子。将偏振记为α，则

$$H=\sum_{\vec{k},\alpha}\omega_{\vec{k}\alpha}d^*_{\vec{k}\alpha}d_{\vec{k}\alpha}\Rightarrow\hat{H}=\sum_{\vec{k},\alpha}\hbar\omega_{\vec{k}}\left(\hat{b}^+_{\vec{k}\alpha}\hat{b}_{\vec{k}\alpha}+\frac{1}{2}\right)$$

光子湮灭算符$\hat{b}_{\vec{k}\alpha}=\frac{d_{\vec{k}\alpha}}{\sqrt{\hbar}}=\sqrt{\frac{2\varepsilon_0\omega_{\vec{k}}V}{\hbar}}\hat{a}_{\vec{k}\alpha}$，产生算符$\hat{b}^+_{\vec{k}\alpha}=\frac{d^*_{\vec{k}\alpha}}{\sqrt{\hbar}}=\sqrt{\frac{2\varepsilon_0\omega_{\vec{k}}V}{\hbar}}\hat{a}^+_{\vec{k}\alpha}$。

磁矢势算符$\hat{\vec{A}}(\vec{r},t)=\sum_{\vec{k},\alpha}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{\vec{k}}V}}\vec{e}_\alpha[\hat{b}_{\vec{k}\alpha}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}+\hat{b}^+_{\vec{k}\alpha}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}]$。

磁场算符$\hat{\vec{B}}(\vec{r},t)=\mathrm{i}\sum_{\vec{k},\alpha}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{\vec{k}}V}}\vec{k}\times\vec{e}_\alpha[\hat{b}_{\vec{k}\alpha}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}-\hat{b}^+_{\vec{k}\alpha}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}]$。

电场算符$\hat{\vec{E}}(\vec{r},t)=\mathrm{i}\sum_{\vec{k},\alpha}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\vec{k}}}{2\varepsilon_0 V}}\vec{e}_\alpha[\hat{b}_{\vec{k}\alpha}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}-\hat{b}^+_{\vec{k}\alpha}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}]$。

4、电场和磁场算符存在不对易。取$i,j=x,y,z$，则

$$[\hat{E}_i(\vec{r},t),\hat{B}_j(\vec{r}',t)]$$

$$=-\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\sum_{\vec{k}}\left[[\hat{b}_{\vec{k}i}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}-\hat{b}^+_{\vec{k}i}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}],\sum_\alpha(\vec{k}\times\vec{e}_\alpha)\cdot\vec{e}_j[\hat{b}_{\vec{k}\alpha}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}-\hat{b}^+_{\vec{k}\alpha}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}]\right]$$

由于

$$\vec{e}_j\cdot(\vec{k}\times\vec{e}_\alpha)=\sum_{mnp}\varepsilon_{mnp}\delta_{jm}k_n\delta_{\alpha p}=\sum_n\varepsilon_{jn\alpha}k_n$$

其中只有$j\neq n\neq\alpha$的项才有贡献。因此，

$$[\hat{E}_i(\vec{r},t),\hat{B}_j(\vec{r}',t)]$$
$$=-\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\sum_{\vec{k}}\left[[\hat{b}_{\vec{k}i}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}-\hat{b}^{+}_{\vec{k}i}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}],\sum_{\alpha n}\varepsilon_{jn\alpha}k_n[\hat{b}_{\vec{k}\alpha}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}'-\omega_{\vec{k}}t)}-\hat{b}^{+}_{\vec{k}\alpha}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}'-\omega_{\vec{k}}t)}]\right]$$
$$=-\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\sum_{\vec{k}\alpha n}\varepsilon_{jn\alpha}k_n\left[[\hat{b}_{\vec{k}i}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}-\hat{b}^{+}_{\vec{k}i}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}],[\hat{b}_{\vec{k}\alpha}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}'-\omega_{\vec{k}}t)}-\hat{b}^{+}_{\vec{k}\alpha}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}'-\omega_{\vec{k}}t)}]\right]$$

因为不同偏振的产生湮灭算符是对易的，所以只有$\alpha=i$的项才有贡献：

$$[\hat{E}_i(\vec{r},t),\hat{B}_j(\vec{r}',t)]$$
$$=-\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\sum_{\vec{k}n}\varepsilon_{jni}k_n\left[[\hat{b}_{\vec{k}i}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}-\hat{b}^{+}_{\vec{k}i}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}],[\hat{b}_{\vec{k}i}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}'-\omega_{\vec{k}}t)}-\hat{b}^{+}_{\vec{k}i}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}'-\omega_{\vec{k}}t)}]\right]$$
$$=-\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\sum_{\vec{k}n}\varepsilon_{ijn}k_n\{[\hat{b}_{\vec{k}i}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)},-\hat{b}^{+}_{\vec{k}i}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}]+[-\hat{b}^{+}_{\vec{k}i}e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}'-\omega_{\vec{k}}t)},\hat{b}_{\vec{k}i}e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}'-\omega_{\vec{k}}t)}]\}$$
$$=\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 V}\sum_{\vec{k}n}\varepsilon_{ijn}k_n(e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}-e^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')})$$

因为$e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}$对第 n 个坐标的偏导数为$\partial_n e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}=\mathrm{i}k_n e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}$，所以

$$[\hat{E}_i(\vec{r},t),\hat{B}_j(\vec{r}',t)]$$
$$=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\varepsilon_0 V}\sum_{\vec{k}n}\varepsilon_{ijn}\partial_n(e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}+e^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')})\approx-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\varepsilon_0 V}\int\sum_n\varepsilon_{ijn}\partial_n(e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}+e^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')})\frac{\mathrm{d}\vec{k}}{(2\pi)^3}$$
$$=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2\varepsilon_0 V}\frac{1}{(2\pi)^3}\sum_n\varepsilon_{ijn}\partial_n\int(e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}+e^{-\mathrm{i}\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')})\mathrm{d}\vec{k}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{8\pi^3\varepsilon_0}\sum_n\varepsilon_{ijn}\partial_n\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$

当 $i=j$ 时，对易子为 0；当 $i\neq j$ 时，取 n 为 x,y,z 中不是 i,j 的那一个即可。

5、零点能与 Casimir 效应

（1）量子描述与经典描述的本质区别在于，量子化的谐振子是有零点能的，这是源于不确定关系，即粒子必然会有位置的不确定。因此，弹性位移场、电磁场都有零点能；电磁场算符的不对易说明它们不能同时确定，这也更体现出，即使是在真空中，电磁场也有涨落（真空不是真的什么都没有）。

（2）零点能的大小：$E_{\mathrm{vac}}=\sum_{\vec{k},\alpha}\frac{1}{2}\hbar\omega_{\vec{k}}$。

对于真空的电磁场零点能，有$E_{\mathrm{vac}}=\frac{2V}{(2\pi)^3}\int\hbar\omega_{\vec{k}}\mathrm{d}^3\vec{k}\sim V\int\omega^3\mathrm{d}\omega\sim\infty$，即涨落能量是无限大，但是这部分能量无法被利用。

（3）Casimir 效应：说明真空能量有涨落的一种现象。

将两块无限大金属平行板放在一起，相距为 a，则单位面积内的真空能为

$$\frac{E_{\mathrm{vac}}}{S}=\sum_{\vec{k},\alpha}\frac{1}{2}\hbar\omega_{\vec{k}}=\hbar c\sum_{n,\vec{q}}\sqrt{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2+q^2}=\frac{\hbar c}{(2\pi)^2}\sum_n\int\sqrt{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2+q^2}\mathrm{d}^2q$$
$$=\frac{\hbar c}{4\pi}\sum_n\int_0^\infty\sqrt{\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2+q^2}\mathrm{d}(q^2)\sim\infty$$

这里要求垂直板面方向满足周期性边界条件，即波矢在该方向的分量为$\frac{n\pi}{a}$。

这样算出的能量密度发散，但是实际上高频电磁波对金属板的作用不明显，因此可以认为作用大小关于频率是指数衰减的，也就是在被积函数中加入一个因子：

$$\begin{aligned}\frac{E_{\text{vac}}}{S}&=\frac{\hbar c\pi^2}{4a^3}\sum_n\int_0^\infty dr^2\sqrt{n^2+r^2}e^{-\frac{\eta}{a}\sqrt{n^2+r^2}}\qquad(r\equiv qa/\pi)\\&=\frac{\hbar c\pi^2}{2a^3}\sum_n\int_n^\infty dz\,z^2e^{-\frac{\eta}{a}z}\qquad(z\equiv\sqrt{n^2+r^2})\\&=\frac{\hbar c\pi^2}{2a}\sum_n\int_n^\infty dz\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}e^{-\frac{\eta}{a}z}=\frac{\hbar c\pi^2}{2a}\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\sum_n\int_n^\infty dz\,e^{-\frac{\eta}{a}z}\\&=\frac{\hbar c\pi^2}{2a}\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\sum_n\frac{a}{\eta}e^{\frac{-n\eta}{a}}=\frac{\hbar c\pi^2}{2a}\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\frac{a/\eta}{e^{\eta/a}-1}\\&\approx\hbar c\pi^2\left(\frac{3a}{\eta^4}-\frac{1}{2\eta^3}-\frac{1}{720a^3}\right).\end{aligned}$$

这是两个金属板之间的能量密度。如果要考察板外侧对板的作用力，可以固定左板，这样只要考察右板外侧与右板之间的能量，它应该对应于$E_{\text{vac}}(L-a)$，其中L是右板到宇宙边界的距离。因此总的真空能量为$E_{\text{vac}}(a)+E_{\text{vac}}(L-a)$，而单位面积上的作用力为

$$\frac{F}{S}=-\frac{1}{S}\frac{\partial}{\partial a}[E_{\text{vac}}(a)+E_{\text{vac}}(L-a)]=-\frac{\hbar c\pi^2}{240a^4}$$

即右板会受到吸引力，被称为 Casimir 力。

四、物质与场相互作用

1、磁矢势、电标势存在规范自由度，而粒子波函数的相位也有一个整体平移的自由度。二者看似没有关联，实则关联紧密。

在绝热近似中我们了解到，波函数的相位会受到矢势的影响，并且和具体位置、路径有关。因此，设粒子波函数的具体形式为

$$\psi(\vec{r},t)e^{\mathrm{i}\frac{e\chi(\vec{r},t)}{\hbar}}$$

则薛定谔方程变为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla-\mathrm{i}\frac{e}{\hbar}\nabla\chi\right)^2+V(\vec{r},t)-e\frac{\partial\chi}{\partial t}\right]\psi$$

可以认为$\nabla\chi\sim\vec{A}$，$-\dfrac{\partial\chi}{\partial t}\sim\varphi$，即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla-\mathrm{i}\frac{e}{\hbar}\vec{A}\right)^2+V(\vec{r},t)+e\varphi\right]\psi=\left[\frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla-e\vec{A})^2+V(\vec{r},t)+e\varphi\right]\psi$$

即体系正则动量变为$\vec{p}-e\vec{A}$，势能变为$V(\vec{r},t)+e\varphi$。对于多粒子体系，假设电势完全由它们的两体相互作用产生，并且忽略外界势能：

$$V(\vec{r},t)+e\varphi\sim e\varphi\sim\frac{1}{2}\sum_{ij}U(\vec{r}_i-\vec{r}_j)\equiv H^{(2)}$$

其二次量子化形式为

$$\hat{H}^{(2)}=\frac{1}{2}\int U(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\hat{\psi}^+(\vec{r}_1)\hat{\psi}^+(\vec{r}_2)\hat{\psi}(\vec{r}_2)\hat{\psi}(\vec{r}_1)\mathrm{d}\vec{r}_1\mathrm{d}\vec{r}_2$$

电磁场自带的能量为$\hat{H}_{\text{em}}=\sum_{\vec{k},\alpha}\hbar\omega_{\vec{k}}\left(\hat{b}_{\vec{k}\alpha}^{+}\hat{b}_{\vec{k}\alpha}+\frac{1}{2}\right)$。因此粒子与电磁场整个系统的总能量为

$$\begin{aligned}\hat{H}&=\int\hat{\psi}^{+}(\vec{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla-\mathrm{i}\frac{e}{\hbar}\vec{A}\right)^2\right]\hat{\psi}(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r}+\hat{H}^{(2)}+\hat{H}_{\text{em}}\\&=\underbrace{\int\hat{\psi}^{+}(\vec{r})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right)\hat{\psi}(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r}+\hat{H}^{(2)}}_{\text{物质}}+\underbrace{\sum_{\vec{k},\alpha}\hbar\omega_{\vec{k}}\left(\hat{b}_{\vec{k}\alpha}^{+}\hat{b}_{\vec{k}\alpha}+\frac{1}{2}\right)}_{\text{电磁场}}\\&+\underbrace{\int\hat{\psi}^{+}(\vec{r})\left(\mathrm{i}\frac{e\hbar}{2m}\{\nabla,\vec{A}\}+\frac{(e\vec{A})^2}{2m}\right)\hat{\psi}(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r}}_{\text{相互作用}}\end{aligned}$$

其中，如果略去磁矢势二阶项，可以验证相互作用能被写为

$$\hat{H}_{\text{int}}=-\int\hat{\vec{A}}(\vec{r})\cdot\hat{\vec{j}}(\vec{r})\mathrm{d}^3\vec{r}$$

电流密度算符

$$\hat{\vec{j}}(\vec{r})=-\mathrm{i}\frac{e\hbar}{2m}\{\hat{\psi}^{+}(\vec{r})[\nabla\hat{\psi}(\vec{r})]-[\nabla\hat{\psi}^{+}(\vec{r})]\hat{\psi}(\vec{r})\}=\sum_{n}\frac{e}{2m}[\hat{\vec{p}}_n\delta(\vec{r}-\vec{r}_n)+\delta(\vec{r}-\vec{r}_n)\hat{\vec{p}}_n].$$

2、自发辐射

（1）原则上，原子的各个定态都是寿命无限长的，只有当外界有扰动时才会发生跃迁，产生辐射。但是实际原子的激发态寿命都是有限长，原因就在于空间内总是有电磁场涨落，会诱导原子发生辐射。

（2）自发辐射的过程，用态矢表示为：激发态与真空$|e\rangle\otimes|0\rangle$转变为基态和有一个波矢$\vec{k}$、偏振$p$的光子：$|g\rangle\otimes|1_{\vec{k}p}\rangle$。

（3）自发辐射速率：根据费米黄金定则，有

$$\begin{aligned}\Gamma_{sp}&=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\mathbf{k}p}\left|\langle f_{\mathbf{k}p}|\hat{H}_{int}|i\rangle\right|^2\delta(E_e-E_g-\hbar\omega_{\mathbf{k}})\\&=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\mathbf{k}p}\left|\int d^3\mathbf{r}\langle 1_{\mathbf{k}p}|\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})|0\rangle\cdot\langle g|\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})|e\rangle\right|^2\delta(E_e-E_g-\hbar\omega_{\mathbf{k}})\\&=\frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\mathbf{k}p}\left|\langle 1_{\mathbf{k}p}|\hat{\mathbf{A}}(0)|0\rangle\cdot\int d^3\mathbf{r}\langle g|\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})|e\rangle\right|^2\delta(E_e-E_g-\hbar\omega_{\mathbf{k}})\\&=\frac{2\pi e^2}{\hbar}\sum_{\mathbf{k}p}\left|\langle 1_{\mathbf{k}p}|\hat{\mathbf{A}}(0)|0\rangle\cdot\left\langle g\left|\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}\right|e\right\rangle\right|^2\delta(E_e-E_g-\hbar\omega_{\mathbf{k}})\end{aligned}$$

其中，认为原子的位置局域化，即$\vec{r}\approx 0$。因此，有

$$\begin{aligned}\left\langle 1_{\vec{k}p}\left|\vec{A}(0)\right|0\right\rangle&=\sum_{\vec{k}',p'}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{\vec{k}'}V}}\vec{e}_{p'}\left\langle 1_{\vec{k}p}\left|\hat{b}_{\vec{k}'p'}e^{-\mathrm{i}\omega_{\vec{k}'}t}+\hat{b}_{\vec{k}'p'}^{+}e^{\mathrm{i}\omega_{\vec{k}'}t}\right|0\right\rangle\\&=\sum_{\vec{k}',p'}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{\vec{k}'}V}}\vec{e}_{p'}e^{\mathrm{i}\omega_{\vec{k}'}t}\left\langle 1_{\vec{k}p}\left|1_{\vec{k}'p'}\right.\right\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{\vec{k}}V}}\vec{e}_{p}e^{\mathrm{i}\omega_{\vec{k}}t}.\end{aligned}$$

而

$$\left\langle g\left|\frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}\right|e\right\rangle=\langle g|\hat{\mathbf{r}}|e\rangle=\frac{i}{\hbar}\langle g|[\hat{H},\hat{\mathbf{r}}]|e\rangle$$

$$=-\frac{i}{\hbar}(E_e-E_g)\langle g|\hat{\mathbf{r}}|e\rangle\equiv-i\omega_{ge}\mathbf{r}_{ge}$$

所以

$$\Gamma_{sp}=\frac{2\pi e^2}{\hbar}\sum_{\mathbf{k}p}\frac{\hbar\omega_{ge}}{2\varepsilon_0\mathcal{V}}\left|\mathbf{r}_{ge}\cdot\mathbf{e}_p\right|^2\delta(E_e-E_g-\hbar\omega_{\mathbf{k}})$$

$$=\frac{2\pi e^2}{\hbar}\sum_p\int\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{\hbar\omega_{ge}}{2\varepsilon_0}\left|\mathbf{r}_{ge}\cdot\mathbf{e}_p\right|^2\delta(E_e-E_g-\hbar\omega_{\mathbf{k}})$$

$$=\frac{2\pi e^2}{\hbar}\frac{\hbar\omega_{ge}}{2\varepsilon_0}\sum_p\int\frac{k^2d\Omega dk}{(2\pi)^3}\left|\mathbf{r}_{ge}\cdot\mathbf{e}_p\right|^2\delta(\hbar\omega_{ge}-\hbar ck)$$

$$=\frac{2\pi e^2}{\hbar}\frac{\hbar\omega_{ge}}{2\varepsilon_0}\frac{\omega_{ge}^2}{(2\pi)^3\hbar c^3}\sum_p\int d\Omega\left|\mathbf{r}_{ge}\cdot\mathbf{e}_p\right|^2$$

$$=\frac{e^2\omega_{ge}^3}{8\pi^2\varepsilon_0\hbar c^3}\int\sin\theta d\theta d\phi\sum_p\left|\mathbf{r}_{ge}\cdot\mathbf{e}_p\right|^2$$

$$=\frac{e^2\omega_{ge}^3}{8\pi^2\varepsilon_0\hbar c^3}\left|\mathbf{r}_{ge}\right|^2\int\sin^3\theta d\theta d\phi=\frac{e^2\omega_{ge}^3}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3}\left|\mathbf{r}_{ge}\right|^2.$$

精细结构常数 $\alpha=\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\Rightarrow\Gamma_{\mathrm{sp}}=\dfrac{4\alpha}{3c}\omega_{\mathrm{ge}}^3\left|\vec{r}_{\mathrm{ge}}\right|^2$.

3、激光

（1）受激辐射：这是激光的基本产生机制。当外界有若干个能量恰好等于能级差的光子时，它们会刺激原子跃迁、辐射。用态矢表示：$|e\rangle\otimes\left|n_{\vec{k}}\right\rangle\Rightarrow|g\rangle\otimes\left|n_{\vec{k}}+1\right\rangle$。这一跃迁速率的表达式基本与自发辐射一致，只是磁矢势一项变为

$$\left\langle n_{\vec{k}}+1\left|\vec{A}(0)\right|n_{\vec{k}}\right\rangle=\sqrt{n_{\vec{k}}+1}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega_{\vec{k}}V}}\vec{e}_p e^{\mathrm{i}\omega_{\vec{k}}t}$$

所以 $\Gamma_{\mathrm{em}}=(n_{\vec{k}}+1)\dfrac{4\alpha}{3c}\omega_{\mathrm{ge}}^2\left|\vec{r}_{\mathrm{ge}}\right|^2=(n_{\vec{k}}+1)\Gamma_{\mathrm{sp}}$。

（2）受激吸收：$|g\rangle\otimes\left|n_{\vec{k}}\right\rangle\Rightarrow|e\rangle\otimes\left|n_{\vec{k}}-1\right\rangle$。速率 $\Gamma_{\mathrm{ab}}=n_{\vec{k}}\Gamma_{\mathrm{sp}}$。

$\vec{k}$ 光子的受激吸收与受激辐射速率之比为 $\dfrac{\Gamma_{\mathrm{ab}}(\vec{k})}{\Gamma_{\mathrm{em}}(\vec{k})}=\dfrac{n_{\vec{k}}}{n_{\vec{k}}+1}$；总的吸收与辐射速率之比 $\dfrac{\Gamma_{\mathrm{ab}}}{\Gamma_{\mathrm{em}}}=\dfrac{\bar{n}}{\bar{n}+1}$。因此，辐射总是比吸收快，因此基态总还是粒子多的态。

（3）如果有很多粒子处于激发态，那么只要一个粒子发生了辐射，并且光子可以留在粒子之间，那么这些粒子就会互相刺激，产生雪崩式的辐射。要产生这一效应，要求光子可以被束缚在周围，并且激发态的粒子要始终比较多。这就是激光的产生条件。

（4）氦氖激光器：电子将氦原子从基态激发到 2s 态；由于氦原子的 2s 态与氖原子的 5s 态能量很接近，所以 2s 氦原子与氖原子碰撞时会把氖原子激发到 5s 态（泵浦）；然后氖原子从 5s 向下跃迁，发出激光。

4、切伦科夫辐射

（1）肉眼可见的辐射现象：浸泡在水中的核反应堆会发出蓝光。

（2）物理机制：电子速度过高，超过水中的光速，就会发生这样的辐射。

设水中光速 $c'=\dfrac{c}{n}<c$。电子初始波矢为 $\vec{k}$，放出波矢为 $\vec{q}$ 的光子，末态波矢为 $\vec{k}'$。根据动量守恒与能量守恒，有

$$\begin{cases}\vec{k}=\vec{k}'+\vec{q}\Rightarrow\delta\vec{k}=\vec{k}-\vec{k}'=\vec{q}\\ E(k)-E(k')=\nabla_{\vec{k}}E\cdot\delta\vec{k}=\hbar c'q\end{cases}$$

对于半经典情形，可认为电子波包的速度 $\vec{v}=\dfrac{1}{\hbar}\nabla_{\vec{k}}E$，故

$$\nabla_{\vec{k}}E\cdot\delta\vec{k}=\hbar\vec{v}\cdot\vec{q}=\hbar c'q\Rightarrow\vec{v}\cdot\vec{q}=vq\cos\theta=c'q\Rightarrow\cos\theta=\frac{c'}{v}.$$

因此，如果 $v>c'$，则θ为实数，从而会有光子辐射出来，光子波矢与电子速度的夹角为θ。（类似于马赫锥）

（3）辐射速率

忽略其他相互作用，则 $|i\rangle=\left|\vec{k}\right\rangle\otimes|0\rangle$，$|f\rangle=\left|\vec{k}-\vec{q}\right\rangle\otimes\left|1_{\vec{q}\alpha}\right\rangle$。从而可以计算相互作用的矩阵元：

$$\left\langle 1_{\vec{q}\alpha}\left|\hat{\vec{A}}(\vec{r})\right|0\right\rangle=\sum_{\vec{k},\alpha}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon\omega_{\vec{k}}V}}\vec{e}_\alpha[\left\langle 1_{\vec{q}\alpha}\left|\hat{b}_{\vec{k}\alpha}\right|0\right\rangle e^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}+\left\langle 1_{\vec{q}\alpha}\left|\hat{b}^+_{\vec{k}\alpha}\right|0\right\rangle e^{-\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{k}}t)}]=\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon\omega_{\vec{q}}V}}e^{-\mathrm{i}(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{q}}t)}\vec{e}_\alpha$$

$$\begin{cases}\hat{\vec{j}}(\vec{r})=-\mathrm{i}\dfrac{e\hbar}{2m}\{\hat{\psi}^+(\vec{r})[\nabla\hat{\psi}(\vec{r})]-[\nabla\hat{\psi}^+(\vec{r})]\hat{\psi}(\vec{r})\}\\ \hat{\psi}(\vec{r})=\sum\limits_{\vec{k}}\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\hat{c}_{\vec{k}},\quad\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\dfrac{1}{\sqrt{V}}e^{\mathrm{i}\vec{k}\cdot\vec{r}}\end{cases}$$

$$\Rightarrow\hat{\vec{j}}(\vec{r})=\frac{e\hbar}{2mV}\sum_{\vec{k},\vec{k}'}e^{\mathrm{i}(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{r}}(\vec{k}'+\vec{k})\hat{c}^+_{\vec{k}}\hat{c}_{\vec{k}'}$$

$$\left\langle\vec{k}-\vec{q}\left|\hat{\vec{j}}(\vec{r})\right|\vec{k}\right\rangle=\frac{e\hbar}{2mV}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2}e^{\mathrm{i}(\vec{k}_2-\vec{k}_1)\cdot\vec{r}}\left\langle\vec{k}-\vec{q}\left|(\vec{k}_2+\vec{k}_1)\hat{c}^+_{\vec{k}_1}\hat{c}_{\vec{k}_2}\right|\vec{k}\right\rangle=\frac{e\hbar}{2mV}e^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\left\langle\vec{k}-\vec{q}\left|(\vec{k}+\vec{k}-\vec{q})\hat{c}^+_{\vec{k}-\vec{q}}\hat{c}_{\vec{k}}\right|\vec{k}\right\rangle$$

$$=\frac{e\hbar}{2mV}e^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}(2\vec{k}-\vec{q})\approx\frac{e}{V}e^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\frac{\hbar\vec{k}}{m}=\frac{e}{V}e^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\vec{v}.$$

$$\text{故}\left\langle f\left|\hat{H}_{\mathrm{int}}\right|i\right\rangle=-\int\left\langle 1_{\vec{q}\alpha}\left|\hat{\vec{A}}(\vec{r})\right|0\right\rangle\cdot\left\langle\vec{k}-\vec{q}\left|\hat{\vec{j}}(\vec{r})\right|\vec{k}\right\rangle\mathrm{d}^3\vec{r}=-\int\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon\omega_{\vec{q}}V}}e^{-\mathrm{i}(\vec{q}\cdot\vec{r}-\omega_{\vec{q}}t)}\vec{e}_\alpha\cdot\frac{e}{V}e^{\mathrm{i}\vec{q}\cdot\vec{r}}\vec{v}\mathrm{d}^3\vec{r}$$

$$=-e\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon\omega_{\vec{q}}V}}e^{\mathrm{i}\omega_{\vec{q}}t}(\vec{v}\cdot\vec{e}_\alpha).$$

辐射速率在波矢空间中的谱密度为

$$\mathrm{d}\Gamma_{\vec{q}}=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle f\left|\hat{H}_{\mathrm{int}}\right|i\right\rangle\right|^2\delta(E_i-E_f)\frac{V}{(2\pi)^3}\mathrm{d}^3\vec{q}=\sum_{\alpha}\frac{\pi e^2}{\varepsilon\omega_{\vec{q}}}\left|\vec{v}\cdot\vec{e}_{\alpha}\right|^2\delta(\hbar\vec{v}\cdot\vec{q}-\hbar c'q)\frac{\mathrm{d}^3\vec{q}}{(2\pi)^3}$$

$$=\frac{\pi e^2}{\varepsilon\omega_{\vec{q}}}v^2\sin^2\theta\delta(\hbar vq\cos\theta-\hbar c'q)\frac{q^2\sin\theta\,\mathrm{d}q\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi}{(2\pi)^3}.$$

在频率空间中的密度为

$$\mathrm{d}\Gamma_{\vec{q}}=\frac{\pi e^2}{\varepsilon\omega_{\vec{q}}}v^2\frac{q^2\mathrm{d}q}{(2\pi)^3}\iint\delta(\hbar vq\cos\theta-\hbar c'q)\sin^3\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi=\frac{\pi e^2}{\varepsilon\omega_{\vec{q}}\hbar}v\frac{q\mathrm{d}q}{(2\pi)^3}\cdot2\pi(1-\cos^2\theta)\Big|_{\cos\theta=c'/v}$$

$$=\frac{e^2}{\varepsilon\omega_{\vec{q}}\hbar}v\frac{q\mathrm{d}q}{4\pi}\cdot\left(1-\frac{c'^2}{v^2}\right)=\frac{e^2}{4\pi\hbar\varepsilon c'}\frac{v}{c'}\left(1-\frac{c'^2}{v^2}\right)\mathrm{d}\omega=\alpha\frac{v}{c'}\left(1-\frac{c'^2}{v^2}\right)\mathrm{d}\omega.$$

该谱密度对频率的积分是发散的。事实上，为了满足 $q\ll k$，电子不可能放出太高频的光子，否则电子末态能量将过低，无法使之速度超过水中光速，也就不可能辐射。为此，可以引入截断函数计算总的辐射速率。

第六章 相对论量子力学

一、狭义相对论的参考系变换

1、伽利略变换：若参考系 K'相对参考系 K 以匀速 $\vec{v}$ 运动，则两参考系中的时空位形满足 $\begin{cases}\vec{r}'=\vec{r}-\vec{v}t\\ t'=t\end{cases}$。位置矢量的变换纯粹来自于几何，而时间的绝对性则是默认成立的，这也是经典力学所承认的时空观。这一时空观下，牛顿力学规律在所有惯性系中保持形式不变。

2、洛伦兹变换：Maxwell 方程组被证明在伽利略变换下形式不能保持；实验事实说明光速在任何惯性参考系下都不变。为了满足狭义相对性与光速不变，需要修改参考系变换的公式。

以一维为例。在各向同性、均匀的体系中，新的参考系变换必然是线性变换：

$$\begin{pmatrix}\Delta x'\\ c\Delta t'\end{pmatrix}=A\begin{pmatrix}\Delta x\\ c\Delta t\end{pmatrix}$$

取特殊情况以求解矩阵 A。

（1）若物体以光速运动，则 $\begin{cases}\Delta x=\pm c\Delta t\\ \Delta x'=\pm c\Delta t'\end{cases}$，从而有

$$c\Delta t'\begin{pmatrix}\pm1\\ 1\end{pmatrix}=Ac\Delta t\begin{pmatrix}\pm1\\ 1\end{pmatrix}$$

因此 $\begin{pmatrix}\pm1\\ 1\end{pmatrix}$ 是 A 的本征值，由此可知 A 的形式为 $A=\gamma\begin{pmatrix}1&-\beta\\ -\beta&1\end{pmatrix}$。

（2）若物体相对参考系 K 静止，则 $\Delta x=0$，从而 $\Delta x'=-v\Delta t'$，即

$$\begin{pmatrix}-v\Delta t'\\ c\Delta t'\end{pmatrix}=\gamma\begin{pmatrix}1&-\beta\\ -\beta&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ c\Delta t\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{cases}-\beta\gamma c\Delta t=-v\Delta t'\\ \gamma c\Delta t=c\Delta t'\end{cases}\Rightarrow\beta=\frac{v}{c}.$$

（3）经过两次参考系变换应该变回参考系 K，所以

$$\gamma^2\begin{pmatrix}1&-\beta\\ -\beta&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&\beta\\ \beta&1\end{pmatrix}=\gamma^2\begin{pmatrix}1-\beta^2&0\\ 0&1-\beta^2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\ 0&1\end{pmatrix}\Rightarrow\gamma=\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}.$$

二、不变、逆变和协变（本部分公式全部采用爱因斯坦求和定则）

1、在物理学中有三种物理量（有可能是物理量的微分）。它们的区别体现在参考系变换上。

（1）不变量：取值不随参考系改变而改变。一般是标量。

$$A(x_1,x_2,x_3)=A(x_1',x_2',x_3')$$

（2）逆变量：服从全微分形式的变换规律。一般至少是矢量，或者张量。指标使用上标。（坐标的微分本身就是逆变量）

$$\widetilde{A}^i=\frac{\partial\widetilde{x}^i}{\partial x^j}A^j,\ \ \widetilde{A}^{ij}=\frac{\partial\widetilde{x}^i}{\partial x^p}\frac{\partial\widetilde{x}^j}{\partial x^q}A^{pq}$$

（3）协变量：服从链式法则形式的变换规律。一般至少是矢量，或者张量。指标使用下标。

$$\widetilde{A}_i=\frac{\partial x^j}{\partial\widetilde{x}^i}A_j,\ \ \widetilde{A}_{ij}=\frac{\partial x^p}{\partial\widetilde{x}^i}\frac{\partial x^q}{\partial\widetilde{x}^j}A_{pq}$$

从它们的变换规律可以猜测，逆变量一般就是与坐标本身有关的量（正比于坐标微分），而协变量往往与导数相关（反比于坐标微分）。

2、三种物理量之间的关系

（1）逆变量与协变量的内积 G_iA^i 等于不变量。

（2）协变二阶张量与逆变矢量的乘积 $G_{ij}A^j$ 等于协变矢量。

3、度规张量

（1）空间中的距离是各坐标微分的二次型：

$$\mathrm{d}s^2=g_{ij}\mathrm{d}x^i\mathrm{d}x^j$$

其中 g_{ij} 被称为度规张量，其协变性容易证明。

（2）度规张量的逆阵是逆变张量：$g^{ij}=(g)^{-1}_{ij}$.

距离一般这样写：

$$\mathrm{d}s^2=g_{ij}\mathrm{d}x^i\mathrm{d}x^j=g^{ij}\mathrm{d}x_i\mathrm{d}x_j=\mathrm{d}x^i\mathrm{d}x_i$$

其中 $\mathrm{d}x_i\equiv g_{ij}\mathrm{d}x^j$ 是逆变的坐标，它们与原先的坐标相比会多出一些因子，没有特定的几何意义，只是在计算时可以使用。

4、四维时空

（1）在相对论中，时间不是绝对的，在考察一个质点的运动时不能只考虑位置，而还要考虑时间。因此，我们需要在三个位置坐标、一个时间坐标下讨论问题，这个四维空间被称为四维时空，即闵式空间。

（2）四维时空中的坐标：$(\mathrm{d}x^0,\mathrm{d}x^1,\mathrm{d}x^2,\mathrm{d}x^3)=(c\mathrm{d}t,\mathrm{d}x,\mathrm{d}y,\mathrm{d}z)$

度规张量被规定为 $g_{\mu\nu}=\begin{pmatrix}1&&&\\&-1&&\\&&-1&\\&&&-1\end{pmatrix}$，即

$$(\mathrm{d}x_0,\mathrm{d}x_1,\mathrm{d}x_2,\mathrm{d}x_3)=(c\mathrm{d}t,-\mathrm{d}x,-\mathrm{d}y,-\mathrm{d}z)$$

因此四维时空中的距离 $\mathrm{d}s^2=(c\mathrm{d}t)^2-\mathrm{d}x^2-\mathrm{d}y^2-\mathrm{d}z^2$。之所以这样规定，是为了保证光速不可超越，即 $\mathrm{d}s^2$ 恒大于 0。

（3）洛伦兹变换张量：若参考系 K’相对 K 以速度 v 沿 x 方向匀速运动，则两个参考系中的四维时空坐标通过如下关系变换：

$$x'_\mu=\Lambda^\mu_\nu x^\nu,\ \ \Lambda=\begin{pmatrix}\gamma & -\gamma\beta & 0 & 0\\ -\gamma\beta & \gamma & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

（4）四维时空下的三种物理量

①不变量：距离 $\mathrm{d}s^2=g_{\mu\nu}\mathrm{d}x^\mu\mathrm{d}x^\nu=g^{\mu\nu}\mathrm{d}x_\mu\mathrm{d}x_\nu=\mathrm{d}x^\mu\mathrm{d}x_\mu$，固有时间 $\mathrm{d}\tau=\dfrac{\mathrm{d}s}{c}=\dfrac{\mathrm{d}t}{\gamma}$，电荷 q，静止质量 m_0，静止密度ρ_0。达朗贝尔算符$\Box=\dfrac{\partial^2}{\partial(ct)^2}-\nabla^2$也是不变量。

②逆变量：四维坐标的微分 $\mathrm{d}x^\mu$，四维速度$u^\mu=\dfrac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}\tau}=\gamma(c,v_x,v_y,v_z)$，四维加速度 $a^\mu=\dfrac{\mathrm{d}u^\mu}{\mathrm{d}\tau}=\gamma^2(0,a_x,a_y,a_z)$，四维动量 $p^\mu=m_0u^\mu=\gamma\left(\dfrac{E}{c},\vec{p}\right)$，四维电流密度（$\rho$指电荷密度） $j^\mu=\rho_0u^\mu=(c\rho,\vec{j})$，四维矢势 $A^\mu=\left(\dfrac{\varphi}{c},\vec{A}\right)$。

③协变量：四维梯度$\partial_\mu=\dfrac{\partial}{\partial x^\mu}=\left(\dfrac{\partial}{\partial ct},\nabla\right)$，协变四维速度$u_\mu=g_{\mu\nu}u^\nu$，协变四维动量 $p_\mu=g_{\mu\nu}p^\nu$。

在量子力学中，动量算符为

$$\hat{p}_\mu=-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu=\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial ct},-\mathrm{i}\hbar\nabla\right),\ \hat{p}^\mu=-\mathrm{i}\hbar\partial^\mu=\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial ct},\mathrm{i}\hbar\nabla\right)\Rightarrow\hat{p}^\mu\hat{p}_\mu=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial(ct)^2}-\nabla^2\right).$$

三、Klein-Gordon 方程（K-G 方程）

1、利用相对论的能量动量关系：

$$E=\sqrt{p^2c^2+m^2c^4},\ \ E\sim\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t},\ \ \vec{p}\sim-\mathrm{i}\hbar\nabla$$

$$\Rightarrow\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\sqrt{m^2c^4-\hbar^2c^2\nabla^2}\psi$$

该方程丑陋并且非局域（因为含有位置的无穷阶导数）。将原先的能量动量关系进行平方：

$$E^2=p^2c^2+m^2c^4\Rightarrow-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial(ct)^2}\psi=(m^2c^2-\hbar^2\nabla^2)\psi\Rightarrow\left(\Box+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi=0.$$

或者$\left(\partial_\mu\partial^\mu+\dfrac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi=0$，$(\hat{p}_\mu\hat{p}^\mu-m^2c^2)\psi=0$。

这就是 K-G 方程。

2、K-G 方程的典型解及其物理困难

（1）K-G 方程的一类典型解依然是平面波：

$$\psi(\vec{r},t)\propto\exp\left(-\frac{\mathrm{i}p_\mu x^\mu}{\hbar}\right)=\exp\left(\frac{\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}-Et}{\hbar}\right)$$

因为只要求平方关系成立，所以 $E=\pm\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}$ 的解都可满足 K-G 方程。其中负能量的解与正常物体相反，蕴含新的物理。

（2）K-G 波函数的连续性方程

$$\psi^*\left(\partial_\mu\partial^\mu+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi=0=\psi\left(\partial_\mu\partial^\mu+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi^*$$

$$\Rightarrow 0=\psi^*\left(\partial_\mu\partial^\mu+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi-\psi\left(\partial_\mu\partial^\mu+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi^*=\partial_\mu(\psi^*\partial^\mu\psi-\psi\partial^\mu\psi^*)\equiv\partial_\mu J^\mu$$

其中四维概率流 $J^\mu=\psi^*\partial^\mu\psi-\psi\partial^\mu\psi^*$。故

$$0=\partial_t\left[\frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc^2}(\psi^*\dot{\psi}-\psi\dot{\psi}^*)\right]+\nabla\cdot\left[-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)\right]$$

可以写为 $\frac{\partial}{\partial t}\rho+\nabla\cdot\vec{J}=0$。

其形式类似于非相对论量子力学中的流守恒定律。其中，概率流密度

$$\vec{J}=-\frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)$$

与非相对论量子力学一致；但是概率密度有所不同：

$$\rho=\frac{\mathrm{i}\hbar}{2mc^2}(\psi^*\dot{\psi}-\psi\dot{\psi}^*)$$

当波函数对应能量本征态时，有 $\rho=\frac{E}{mc^2}|\psi|^2$。不过，由于 E 可能为负数，所以ρ可以为负，此时似乎不能再将它理解为概率密度。（电荷自由度的存在）（K-G 方程的两大物理困难：负几率密度、负能量）

四、Dirac 方程

1、K-G 方程出现负能量的原因：K-G 方程关于时间是二阶方程，因此存在更多的可能性；需要通过降阶来解决此问题。

2、在 K-G 方程 $\left(\Box+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi=0$ 中，对左侧算符进行因式分解：

$$\Box+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}=\left(\hat{w}+\mathrm{i}\frac{mc}{\hbar}\right)\left(\hat{w}-\mathrm{i}\frac{mc}{\hbar}\right)$$

其中定义 $\Box=\hat{w}^2$。于是 K-G 方程等价于 $\left(\hat{w}+\mathrm{i}\frac{mc}{\hbar}\right)\psi=0$ 或 $\left(\hat{w}-\mathrm{i}\frac{mc}{\hbar}\right)\psi=0$。一般而言，取第一个方程进行研究，并称其为狄拉克方程。

3、$\hat{w}$ 算符的表达式

因为 $\Box=\partial_\mu\partial^\mu=\hat{w}^2$ 是不变量，所以定义不变量 $\hat{w}=\gamma_\mu\partial^\mu=\gamma^\mu\partial_\mu$。从而

$$\hat{w}^2=\gamma^\mu\gamma^\nu\partial_\mu\partial_\nu=\Box=g^{\mu\nu}\partial_\mu\partial_\nu\Rightarrow\gamma^\mu\gamma^\nu+\gamma^\nu\gamma^\mu=2g^{\mu\nu}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\gamma^\mu\gamma^\nu+\gamma^\nu\gamma^\mu=0\ (\mu\neq\nu)\\ \gamma^0\gamma^0=1\\ \gamma^1\gamma^1=\gamma^2\gamma^2=\gamma^3\gamma^3=-1\end{cases}$$

满足这些条件的γ不会是普通的数，只能让它们成为矩阵。一种可行的取法：

$$\hat{\gamma}^0=\begin{pmatrix}\hat{1} & 0\\ 0 & -\hat{1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1\end{pmatrix},\quad \hat{\gamma}^1=\begin{pmatrix}0 & \hat{\sigma}^1\\ -\hat{\sigma}^1 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

$$\hat{\gamma}^2=\begin{pmatrix}0 & \hat{\sigma}^2\\ -\hat{\sigma}^2 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & -\mathrm{i}\\ 0 & 0 & \mathrm{i} & 0\\ 0 & \mathrm{i} & 0 & 0\\ -\mathrm{i} & 0 & 0 & 0\end{pmatrix},\quad \hat{\gamma}^3=\begin{pmatrix}0 & \hat{\sigma}^3\\ -\hat{\sigma}^3 & 0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\\ -1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\end{pmatrix}$$

于是：

$$\left(\hat{w}+\mathrm{i}\frac{mc}{\hbar}\right)\psi\Rightarrow\left(\hat{\gamma}^\mu\partial_\mu+\mathrm{i}\frac{mc}{\hbar}\right)\psi=0\Rightarrow\begin{pmatrix}\mathrm{i}\hbar\partial_t & -c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}}\\ c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}} & -\mathrm{i}\hbar\partial_t\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}=mc^2\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}.$$

由于γ是四维矩阵，所以这要求态矢ψ是双旋量[1]（Bispinor）。一般将其上下两半分别写为旋量（二维矢量）ϕ与χ。两边左乘$\hat{\gamma}^0$，则方程可以改写为

$$\boxed{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=(c\hat{\vec{\alpha}}\cdot\hat{\vec{p}}+\hat{\beta}mc^2)\psi}$$

其中$\hat{\alpha}^i=\hat{\gamma}^0\hat{\gamma}^i=\begin{pmatrix}0 & \hat{\sigma}^i\\ \hat{\sigma}^i & 0\end{pmatrix}$，$\hat{\beta}=\hat{\gamma}^0=\begin{pmatrix}\hat{1} & 0\\ 0 & -\hat{1}\end{pmatrix}$。

4、有电磁场：$\left[\hat{\gamma}^\mu\left(\partial_\mu-\mathrm{i}\frac{e}{\hbar}A_\mu\right)+\mathrm{i}\frac{mc}{\hbar}\right]\psi=0$。（$\hat{\vec{p}}\to\hat{\vec{p}}-e\vec{A}$，$\partial_t\to\partial_t+\mathrm{i}\frac{e}{\hbar}\Phi$）

5、连续性方程：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=c\hat{\vec{\alpha}}\cdot(\hat{\vec{p}}\psi)+\hat{\beta}mc^2\psi\Rightarrow\mathrm{i}\hbar\psi^+\frac{\partial}{\partial t}\psi=c\psi^+\hat{\vec{\alpha}}\cdot(\hat{\vec{p}}\psi)+mc^2\psi^+\hat{\beta}\psi$$

$$\Rightarrow-\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^+\right)\psi=(\hat{\vec{p}}\psi)^+\cdot c\hat{\vec{\alpha}}\psi+mc^2\psi^+\hat{\beta}\psi$$

$$\Rightarrow\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^+\psi)=c[\psi^+\hat{\vec{\alpha}}\cdot(\hat{\vec{p}}\psi)-(\hat{\vec{p}}\psi)^+\cdot\hat{\vec{\alpha}}\psi]=-\mathrm{i}\hbar c[\psi^+\hat{\vec{\alpha}}\cdot(\nabla\psi)+(\nabla\psi^+)\cdot\hat{\vec{\alpha}}\psi]$$

$$\Rightarrow\frac{\partial}{\partial t}(\psi^+\psi)=-[(\nabla\psi^+)\cdot c\hat{\vec{\alpha}}\psi+\psi^+c\hat{\vec{\alpha}}\cdot(\nabla\psi)]=-\nabla\cdot(\psi^+c\hat{\vec{\alpha}}\psi)$$

于是有几率流的连续性方程$\frac{\partial}{\partial t}\rho+\nabla\cdot\vec{J}=0$。其中几率密度$\rho=\psi^+\psi$，几率流密度$\vec{J}=\psi^+c\hat{\vec{\alpha}}\psi$。这样一来，几率密度就不会为负数，解决了 K-G 方程的一个物理困难。

6、自由粒子的狄拉克方程本征解

（1）对自由粒子，狄拉克方程的哈密顿量$\hat{H}=c\hat{\vec{\alpha}}\cdot\hat{\vec{p}}+\hat{\beta}mc^2$，与动量算符对易。因此，可以寻找能量与动量的共同本征态。设粒子能量为E，动量为$\vec{p}$，则狄拉克方程变为$\begin{pmatrix}E-mc^2 & -c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}\\ c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p} & E-mc^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}=0$。存在非平凡解的条件是

[1] 旋量（Spinor）是二维矢量，并且能够表示自旋表象的状态。两个旋量整合成的四维态矢称为双旋量。

$$\begin{vmatrix} E-mc^2 & -c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p} \\ c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p} & E-mc^2 \end{vmatrix}=0\Rightarrow E_{p\lambda}=\lambda E_p,\ \ \lambda=\pm1,\ \ E_p=\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}.$$

即本征能量依然满足相对论能量-动量关系。但是，负能量的解还是出现了，即狄拉克方程不能解决能量为负的困难。在此情况下，本征态为

$$\psi_{\vec{p}\lambda}(\vec{r},t)=\sqrt{\frac{mc^2+E_{p\lambda}}{2E_{p\lambda}}}\begin{pmatrix}\phi\\ \dfrac{c(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p})}{mc^2+E_{p\lambda}}\phi\end{pmatrix}\frac{e^{\mathrm{i}\frac{\vec{p}\cdot\vec{r}-E_{p\lambda}t}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

根据好量子数 $\vec{p}$ 与λ无法进一步确定ϕ的形式，目前ϕ还是任取的。

（2）寻找更多的好量子数来确定本征态。现在考虑角动量：由于 $\hat{\vec{L}}=\vec{r}\times\hat{\vec{p}}$ 与动量算符不对易，所以它与哈密顿量也不对易。但是，如果将它加上一个算符，就可以与哈密顿量对易了：

$$\hat{\vec{S}}=\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\Sigma}}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\hat{\vec{\sigma}} & 0\\ 0 & \hat{\vec{\sigma}}\end{pmatrix},\ \ \hat{\vec{J}}=\hat{\vec{L}}+\hat{\vec{S}}\Rightarrow\left[\hat{\vec{J}},\hat{H}\right]=0.$$

将 $\hat{\vec{S}}$ 称为自旋角动量算符。从这里来看，狄拉克方程可以预测 1/2 自旋的存在，自旋在这里只是为了配出守恒律而引出的一个数学工具，它没有具体的物理对应（不是粒子的自转）。

在引入自旋之后，可以选择这样一个物理量作为好量子数：

$$\left.\begin{array}{c}\vec{J}\text{守恒}\\ \vec{p}\text{守恒}\end{array}\right\}\Rightarrow\vec{J}\cdot\vec{p}\text{守恒}\left.\begin{array}{c}\\ \\ \end{array}\right\}\Rightarrow\vec{S}\cdot\vec{p}\text{守恒}$$
$$\vec{L}\cdot\vec{p}\text{显然恒为0}$$

因此，考虑自旋在动量方向的投影：

$$\boxed{\hat{\Lambda}_S=\hat{\vec{S}}\cdot\frac{\hat{\vec{p}}}{|\vec{p}|}=\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\Sigma}}\cdot\frac{\hat{\vec{p}}}{|\vec{p}|}}$$

称此算符为螺旋度（Helicity）算符。于是，螺旋度与 $\vec{p}$ 、λ构成一组好量子数，可以用来区分所有状态。

（3）若粒子动量沿 z 方向，则螺旋度算符 $\hat{\Lambda}_S=\hat{S}_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1&&&\\ &-1&&\\ &&1&\\ &&&-1\end{pmatrix}$。其本征值和本征态如下：

$$S_z=\frac{\hbar}{2},\ \ \psi=\begin{pmatrix}\phi_+\\ 0\end{pmatrix}\text{或}\begin{pmatrix}0\\ \phi_+\end{pmatrix};\ \ S_z=-\frac{\hbar}{2},\ \ \psi=\begin{pmatrix}\phi_-\\ 0\end{pmatrix}\text{或}\begin{pmatrix}0\\ \phi_-\end{pmatrix}$$

其中 $\phi_+=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，$\phi_-=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$。即

$$\psi_{\vec{p}\lambda s}(\vec{r},t)=\sqrt{\frac{mc^2+E_{p\lambda}}{2E_{p\lambda}}}\begin{pmatrix}\phi_s\\ \dfrac{c(\hat{\sigma}_z p_z)}{mc^2+E_{p\lambda}}\phi_s\end{pmatrix}\frac{e^{\mathrm{i}\frac{pz-E_{p\lambda}t}{\hbar}}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

其中 $\lambda=\pm$，$s=\pm$。

7、狄拉克对负能量的解释

（1）负能量为什么会成为困难：粒子倾向于处在能量低的状态，而宇宙经过长时间的演化，如果粒子可以跃迁至负能量状态，那么现在所有的粒子应该都被填充在负能量区域内，也就不是眼前的真实世界。

（2）狄拉克的空穴理论：既然真实的粒子并没有跃迁至负能量区域，那么负能量处可能是被粒子全部填满了（狄拉克海），从而根据泡利不相容原理，粒子无法向下跃迁。在这样的假设下，真空相当于一个带隙为 $2mc^2$ 的半导体；如果有一束光的能量超过这一带隙，那么可能会将负能量的电子激发出来，原处留下一个空穴，而空穴则是实际被观察到的粒子，被称为正电子，它是电子的反粒子；实验上观察到的电子与正电子的湮灭，实际上是电子填入了负能量的空穴，这一过程显然会放出光子，与实验现象相符。

（3）空穴理论的实验证实：电子会排斥真空中潜在的负电荷，从而使其周围呈现一定的极化，有正电荷的出现。因此，在近处可以感受到电子的电量偏小。

7、电磁场中的 Pauli 方程

（1）在电磁场下，设 $\hat{\vec{\pi}}=\hat{\vec{p}}-e\vec{A}$，则狄拉克方程变为

$$\begin{pmatrix} \mathrm{i}\hbar\partial_t-e\Phi & -c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}} \\ c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}} & -\mathrm{i}\hbar\partial_t+e\Phi \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\widetilde{\phi}\\ \widetilde{\chi}\end{pmatrix}=mc^2\begin{pmatrix}\widetilde{\phi}\\ \widetilde{\chi}\end{pmatrix}$$

（2）非相对论近似：设 $\begin{pmatrix}\widetilde{\phi}\\ \widetilde{\chi}\end{pmatrix}=e^{-\mathrm{i}mc^2t/\hbar}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}$，且 ϕ 与 χ 对应的能量远小于 mc^2，则

$$\begin{pmatrix} \mathrm{i}\hbar\partial_t-e\Phi & -c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}} \\ c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}} & -2mc^2-\mathrm{i}\hbar\partial_t+e\Phi \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}\approx\begin{pmatrix} \mathrm{i}\hbar\partial_t-e\Phi & -c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}} \\ c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}} & -2mc^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}=0$$

进一步处理：

$$c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}}\phi-2mc^2\chi=0\Rightarrow\chi=\frac{c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}}}{2mc^2}\phi$$

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi\right)\phi-c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}}\chi=\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi\right)\phi-c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}}\frac{c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}}}{2mc^2}\phi=0$$

$$\Rightarrow\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi=\left[\frac{1}{2m}(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}})(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}})+e\Phi\right]\phi$$

可以计算：

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{\pi}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{\pi}})&=\hat{\boldsymbol{\pi}}^2+i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\hat{\boldsymbol{\pi}}\times\hat{\boldsymbol{\pi}})\\&=\hat{\boldsymbol{\pi}}^2+i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\left[(\hat{\mathbf{p}}-e\hat{\mathbf{A}})\times(\hat{\mathbf{p}}-e\hat{\mathbf{A}})\right]\\&=\hat{\boldsymbol{\pi}}^2-e\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\nabla\times\hat{\mathbf{A}}+\hat{\mathbf{A}}\times\nabla)\\&=\hat{\boldsymbol{\pi}}^2-e\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\nabla\times\hat{\mathbf{A}})=\hat{\boldsymbol{\pi}}^2-e\hbar\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\mathbf{B}\end{aligned}$$

所以

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi\right)\phi-c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}}\chi=\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-e\Phi\right)\phi-c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}}\frac{c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{\pi}}}{2mc^2}\phi=0$$

$$\Rightarrow\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi=\left(\frac{\hat{\vec{\pi}}^2}{2m}-\frac{e\hbar}{2m}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{B}+e\Phi\right)\phi$$

这便是 Pauli 方程，其哈密顿量为

$$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{\pi}}^2}{2m}-\frac{e\hbar}{2m}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{B}+e\Phi=\frac{1}{2m}(\hat{\vec{p}}-e\vec{A})^2-\frac{e}{m}\hat{\vec{S}}\cdot\vec{B}+e\Phi$$

从这里可以看出，自旋对能量有贡献，自旋磁矩 $\hat{\vec{\mu}}_S=-\frac{e}{m}\hat{\vec{S}}$，完美预测了电子自旋旋磁比为 e/m 的事实，也说明自旋是个相对论的概念。

8、自旋-轨道耦合

考虑静电场中的粒子，并规定磁矢势为 0。设粒子的非相对论能量为 E，则狄拉克方程变为

$$\begin{pmatrix}E-e\Phi & -c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}}\\ c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}} & -2mc^2-E+e\Phi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}=0$$

进一步处理：

$$c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}}\phi+(-2mc^2-E+e\Phi)\chi=0\Rightarrow\chi=\frac{c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}}}{2mc^2+E-e\Phi}\phi$$

$$(E-e\Phi)\phi-c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}}\chi=(E-e\Phi)\phi-(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\frac{c^2}{2mc^2+E-e\Phi}(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\phi=0$$

做非相对论近似：$\frac{1}{2mc^2+E-e\Phi}\approx\frac{1}{2mc^2}\left(1-\frac{E-e\Phi}{2mc^2}\right)$。故

$$(E-e\Phi)\phi-(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\frac{1}{2m}\left(1-\frac{E-e\Phi}{2mc^2}\right)(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\phi=0$$

$$\Rightarrow E\phi=\left[e\Phi+(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\frac{1}{2m}\left(1-\frac{E-e\Phi}{2mc^2}\right)(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\right]\phi$$

由于 $(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})=\hat{\vec{p}}^2+\mathrm{i}\hat{\vec{\sigma}}\cdot(\hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{p}})=\hat{\vec{p}}^2$，故

$$E\phi=\left[e\Phi+\frac{\hat{p}^2}{2m}\left(1-\frac{E}{2mc^2}\right)+\frac{1}{4m^2c^2}(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})e\Phi(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\right]\phi$$

$$\Rightarrow E\left(1+\frac{\hat{p}^2}{4m^2c^2}\right)\phi=\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+e\Phi+\frac{1}{4m^2c^2}(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})e\Phi(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\right]\phi$$

为了处理 $1+\frac{\hat{p}^2}{4m^2c^2}$，可以考虑波函数的归一化条件：

$$1=\int(\phi^+\phi+\chi^+\chi)\mathrm{d}\vec{r}=\int\left[1+\frac{c^2(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})^+(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})}{(2mc^2+E-e\Phi)^2}\right]\phi^+\phi\mathrm{d}\vec{r}\approx\int\left(1+\frac{\hat{p}^2}{4m^2c^2}\right)\phi^+\phi\mathrm{d}\vec{r}$$

令 $\hat{\Omega}=\sqrt{1+\frac{\hat{p}^2}{4m^2c^2}}\approx1+\frac{\hat{p}^2}{8m^2c^2}$，$\psi=\hat{\Omega}\phi$，则

$$E\hat{\Omega}^2\phi=\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+e\Phi+\frac{1}{4m^2c^2}(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})e\Phi(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\right]\phi$$

$$\Rightarrow E\hat{\Omega}\psi=\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+e\Phi+\frac{1}{4m^2c^2}(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})e\Phi(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\right]\hat{\Omega}^{-1}\psi$$

$$\Rightarrow E\psi=\hat{\Omega}^{-1}\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+e\Phi+\frac{1}{4m^2c^2}(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})e\Phi(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{p}})\right]\hat{\Omega}^{-1}\psi$$

其中 $\hat{\Omega}^{-1}=\left(\sqrt{1+\frac{\hat{p}^2}{4m^2c^2}}\right)^{-1}\approx 1-\frac{\hat{p}^2}{8m^2c^2}$。规定：$p^2$、$e\Phi$、$\hbar$ 都远小于 mc^2。在这一近似下，有

$$E\psi=\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+e\Phi-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}-\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\hat{\vec{\sigma}}\cdot(\vec{E}\times\hat{\vec{p}})-\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}(\nabla\cdot\vec{E})\right]\psi$$

（1）$\frac{\hat{p}^2}{2m}+e\Phi$：非相对论下的动能和电势能。

（2）$-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}$：相对论动能修正。

（3）$-\frac{e\hbar}{4m^2c^2}\hat{\vec{\sigma}}\cdot(\vec{E}\times\hat{\vec{p}})$：涉及到自旋与动量的乘积，就是自旋-轨道耦合项。

（4）$-\frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}(\nabla\cdot\vec{E})$：粒子的分布在空间内有一定尺度，因此会感受到电势的二阶变化。这种作用称为 Dirac 颤动（Zitterbewegung）。

9、Klein 佯谬

考虑一束沿 z 轴传播、能量为 E 的平面波。z 方向有一个方形势垒，其势垒高度比粒子的相对论能量更大：$V_0>mc^2+E$。

（1）狄拉克方程：$(c\hat{\alpha}_3\hat{p}_z+\hat{\beta}mc^2)\psi=\begin{cases}E\psi, & \text{入射区}\\ (E-V_0)\psi, & \text{透射区}\end{cases}$。

（2）方程的解：入射波 $\psi_I=A\begin{pmatrix}1\\0\\\frac{p_1c}{mc^2+E}\\0\end{pmatrix}e^{\mathrm{i}\frac{p_1z}{\hbar}}$，反射波 $\psi_r=C\begin{pmatrix}1\\0\\\frac{-p_1c}{mc^2+E}\\0\end{pmatrix}e^{-\mathrm{i}\frac{p_1z}{\hbar}}$；

透射波 $\psi_{II}=B\begin{pmatrix}1\\0\\\frac{p_2c}{mc^2+E-V_0}\\0\end{pmatrix}e^{\mathrm{i}\frac{p_2z}{\hbar}}$。

（3）波函数在连接处（设为 $z=0$ 处）连续：

$$A\begin{pmatrix}1\\0\\\frac{p_1c}{mc^2+E}\\0\end{pmatrix}+C\begin{pmatrix}1\\0\\\frac{-p_1c}{mc^2+E}\\0\end{pmatrix}=B\begin{pmatrix}1\\0\\\frac{p_2c}{mc^2+E-V_0}\\0\end{pmatrix}$$

因为狄拉克方程是一阶方程，所以不要求波函数一阶导连续。根据以上关系，可以得到：反射率 $\frac{B}{A}=\frac{2}{1-\gamma}$，透射率 $\frac{C}{A}=\frac{1+\gamma}{1-\gamma}$。其中

$$\gamma=\sqrt{\frac{(V_0-E+mc^2)(E+mc^2)}{(V_0-E-mc^2)(E-mc^2)}}>1$$

由此可知：几率流反射率 $\frac{|j_r|}{|j_I|}=\frac{(1+\gamma)^2}{(1-\gamma)^2}>1$，即反射的粒子比入射的更多，这就是 Klein 佯谬。

（4）Klein 佯谬的解释：势垒过高，粒子进入势垒时激发了狄拉克海中的电子，从而反射出来的更多，而正电子则留在势垒区中。

[参考资料]

[1]复旦大学物理学系肖江老师《量子力学 II》课程
[2]Nazarov. Advanced Quantum Mechanics - A Practical Guide
[3]曾谨言. 量子力学（卷 II, 第三版）. 科学出版社.

允文君知识梳理