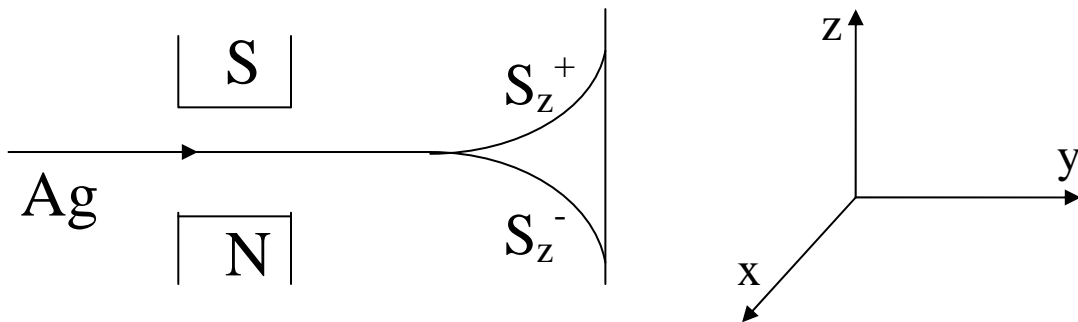


第一章：基本概念

1. Stern - Gerlach 实验

- 容易体现与经典力学的根本差别；
- 容易体现量子力学的核心 - 测量问题；
- 二能级系统是最量子的体系。



1) 结果

加热的银原子束通过不均匀磁场后分裂为两束。

2) 分析

- 磁场相互作用导致分裂，必是原子的磁矩 \vec{M} 引起的，相互作用势 $V = -\vec{M} \cdot \vec{B}$ 。
- 磁矩与角动量 \vec{J} 成正比， $\vec{M} \propto \vec{J}$ 。
- 原子感受到的力 $\vec{F} = -\vec{\nabla}V = M_z \frac{\partial B}{\partial z} \vec{e}_z \propto J_z \frac{\partial B}{\partial z} \vec{e}_z$

分裂成对称的上下两束 \rightarrow 角动量在磁场方向 (Z) 只有大小相等方向相反的两个分量。如果这个角动量是由于原子本身转动引起的，热原子的角动量方向将是随机分布的，大量原子通过磁场后在屏上会有一个对称的连续分布，而不是一个分离的两分量分布。因此力不是由轨道角动量产生的。

银原子有 47 个电子，其中 46 个是满壳分布，球对称，整体不显示角动量。银原子的角动量完全是由那个价电子引起的。分离的二分量分布说明是由价电子的内禀角动量引起的，记为 \vec{s} ， s_z 只有两个大小相等方向相反的值 s_z^+ 和 s_z^- 。

3) 量子性质

- 存在自旋角动量，是内禀物理量 (与时空无关)；
- 自旋角动量的取值不连续。
- 磁场起的是测量作用。用 Z 方向的磁场测量 Z 方向的角动量。

4) 级联 Stern - Gerlach 实验

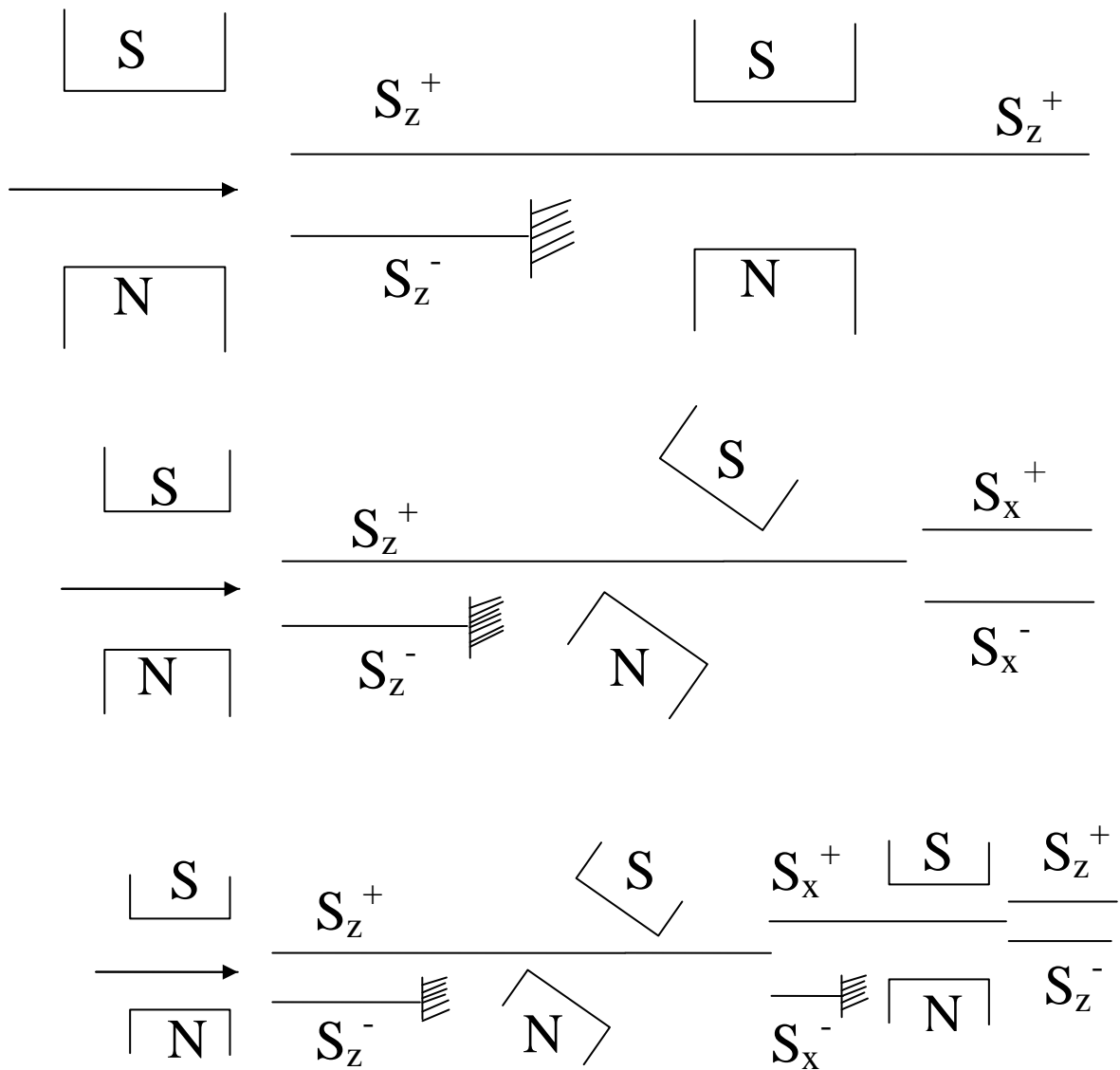


图 1

入射原子束先后经过两个 Z 方向的磁场，见图 1 上部。在第二个磁场之前 s_z 有确定值 s_z^+ ，故在磁场中原子感受的力是确定的，在第二个磁场之后 s_z 仍然有确定值 s_z^+ 。

现在让入射原子束经过 Z 和 X 方向的两个磁场，见图 1 中部。在第二个磁场中原子感受的力 $\vec{F} \propto J_x \frac{\partial B}{\partial x} \vec{e}_x$ 。在第二个磁场之后观察到原子束分裂，说明在第二个磁场之前 s_x 有两个值 s_x^+ 和 s_x^- 两个分量（虽然 s_z 有确定值 s_z^+ ）。

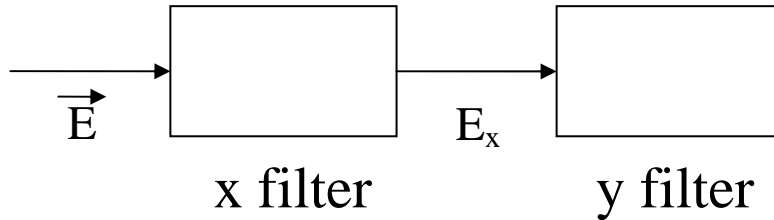
•量子性质：当 s_z 有确定值时， s_x 没有确定值。 s_z 和 s_x 不能同时有确定值！

再让入射原子束经过 Z, X 和 Z 方向的三个磁场，见图 1 下部。最后观察到 s_z 有 s_z^+ 和 s_z^-

两个分量，说明在第三个磁场之前 s_z 有两个值 s_z^+ 和 s_z^- 两个分量（虽然 s_x 有确定值 s_x^+ ）。

•量子性质：当 s_x 有确定值时， s_z 也没有确定值。 s_x 和 s_z 不能同时有确定值！

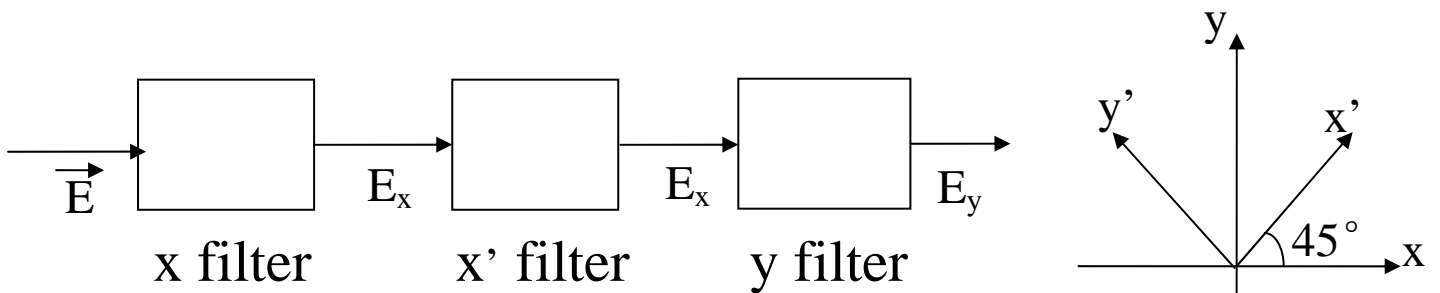
5) 与经典电磁波类似性（实物粒子与光波的类似性）



沿 Z 方向传播的电磁波先后经过只允许 X 方向的波通过的滤波器（X filter）和只允许 Y 方向的波通过的滤波器（Y filter）后全部消失。

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_0(\vec{e}_x + \vec{e}_y) \cos(kz - \omega t)$$

$$\begin{array}{l} \underline{\text{X filter}} \quad E_0 \vec{e}_x \cos(kz - \omega t) \\ \underline{\text{Y filter}} \quad 0 \end{array}$$



在 X filter 和 Y filter 之间放一个 X' filter，X' 与 X，Y 都是 45 度角，则最后仍然有 Y 方向的电磁波观察到。

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = E_0(\vec{e}_x + \vec{e}_y) \cos(kz - \omega t)$$

$$\underline{\text{X filter}} \quad E_0 \vec{e}_x \cos(kz - \omega t) = \frac{E_0}{\sqrt{2}}(\vec{e}_{x'} - \vec{e}_{y'}) \cos(kz - \omega t)$$

$$\underline{\text{X' filter}} \quad \frac{E_0}{\sqrt{2}} \vec{e}_{x'} \cos(kz - \omega t) = \frac{E_0}{2}(\vec{e}_x + \vec{e}_y) \cos(kz - \omega t)$$

$$\underline{\text{Y filter}} \quad \frac{E_0}{2} \vec{e}_y \cos(kz - \omega t)$$

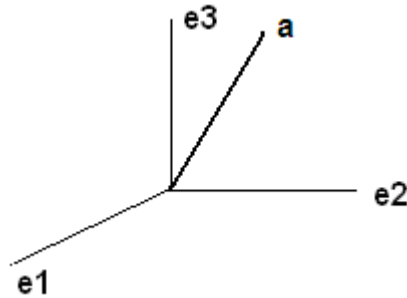
类似性： s_x, s_y, s_z 和 E_x, E_y 都可看成二分量矢量

不同： \vec{s} 是内禀角动量，量子力学量； \vec{E} 是空间相关力学量，经典力学量。

2. 线性矢量空间

从上一节，电子自旋角动量在任意方向的投影 s_n 只能取两个值，可将 s_n 看成是一个二维矢量。为了建立量子力学的数学描述方式，先讨论线性矢量空间。

1) 3 维矢量空间



任意矢量: \vec{a}

基矢: $\vec{e}_n, n=1,2,3$

基矢完备性: $\vec{a} = \sum_{n=1}^3 a_n \vec{e}_n$

内积: $\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_{n,m} a_n b_m \vec{e}_n \cdot \vec{e}_m$

矢量模方: $\vec{a} \cdot \vec{a} \geq 0$

若基矢正交归一: $\vec{e}_n \cdot \vec{e}_m = \delta_{nm}$

有内积矩阵形式: $\vec{a} \cdot \vec{b} = \sum_n a_n b_n = \tilde{a} b$, 其中矩阵 $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}$, \tilde{a} 是 $a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$ 的转置矩阵

$\tilde{a} = (a_1, a_2, a_3)$

矢量的分量 (矩阵元): $a_n = \vec{e}_n \cdot \vec{a}$

\vec{a} 是矢量的抽象形式或一般形式, 矩阵 a 是矢量 \vec{a} 在某个具体坐标系 (表象) 的表示。矩阵元与基矢的选取有关, 例如直角坐标与球坐标中的表示是不同的。

对矢量的运算, 例如平移, 旋转等 (算符): $\hat{T}\vec{a} = \vec{b}$, 仍然是 3 维空间中的一个矢量。

2) Hilbert 空间

将 3 维矢量空间扩展到任意维数的复矢量空间:

3 维 \rightarrow 任意有限维, 无限维, 连续维

常矢量 → 复变函数矢量

用 Dirac 符号 (右矢) 表示任意矢量: $|a\rangle$

对于复矢量, 引入左矢 $\langle a|$ 表示其复共轭矢量。左矢与右矢并不互相独立, 而是互为复共轭:

$$|a\rangle \leftrightarrow \langle a|.$$

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

在复变函数矢量空间, 常数一般也是复数, 有

$$\alpha|a\rangle \leftrightarrow \langle a|\alpha^*.$$

对于复空间中的运算 (算符) \hat{T} :

$$\hat{T}|a\rangle \leftrightarrow \langle a|\hat{T}^+,$$

\hat{T}^+ 是右算符 \hat{T} 的对应左算符, 称为厄米共轭算符。注意

$$\hat{T}\hat{F}|a\rangle = \hat{T}(\hat{F}|a\rangle) \leftrightarrow \langle a|\hat{F}^+\hat{T}^+.$$

进入具体表象, 以 N 维离散空间为例。

基矢: $|n\rangle, \quad n=1,2,\dots$

基矢完备性: $|a\rangle = \sum_n a_n |n\rangle, \quad \langle a| = \sum_n \langle n| a_n^*$ (矢量的具体表示)

内积: $\langle a|b\rangle = \sum_{n,m} a_n^* b_m \langle n|m\rangle$ 是一个复数。

矢量模方: $\langle a|a\rangle \geq 0$ (只有定义 $\langle a|$ 与 $|a\rangle$ 互为复共轭, 才能保证矢量模方大于零)

归一化矢量: 如果定义 $|\tilde{a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle a|a\rangle}}|a\rangle$, 有 $\langle \tilde{a}|\tilde{a}\rangle = 1$, 称为归一化。

基矢正交归一: $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

内积矩阵形式: $\langle a|b\rangle = \sum_n a_n^* b_n = a^+ b$, 其中列矩阵 $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}$, 行矩阵 a^+ 是 $a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$

的厄米共厄 (转置复共轭) 矩阵 $a^+ = (a_1^* \quad a_2^* \quad \cdots \quad a_N^*)$ 。

显然 $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$, $\langle a|\hat{T}|b\rangle = \langle b|\hat{T}^+|a\rangle^*$,

矢量的分量 (矩阵元): 将 $|a\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$ 两边左乘左矢 $\langle m|$, 有 $a_m = \langle m|a\rangle$

基矢完备性: $|a\rangle = \sum_n a_n |n\rangle = \sum_n \langle n|a\rangle |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|a\rangle = \left(\sum_n |n\rangle \langle n| \right) |a\rangle$

由于 $|a\rangle$ 是任意矢量, 有

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1, \quad \text{此即是基矢的完备性条件。}$$

算符的表示 (矩阵形式):

设 $|b\rangle = \hat{F}|a\rangle$

$$\langle m|b\rangle = \langle m|\hat{F}|a\rangle = \sum_n \langle m|\hat{F}|n\rangle \langle n|a\rangle, \quad F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle$$

$$b_m = \sum_n F_{mn} a_n,$$

矩阵形式: $b = Fa$, F 是算符 \hat{F} 的表示, 是一个方阵, 矩阵元是 F_{mn} 。

厄米共轭算符 (左算符) 的表示:

由 $\langle b| = \langle a|\hat{F}^+$

$$\langle b|m\rangle = \langle a|\hat{F}^+|m\rangle = \sum_n \langle a|n\rangle \langle n|\hat{F}^+|m\rangle$$

$$b_m^* = \sum_n F_{nm}^+ a_n^*, \quad b_m = \sum_n (F_{nm}^+)^* a_n$$

比较有 $(F_{nm}^+)^* = F_{mn}$, $F_{nm}^+ = \tilde{F}_{nm}^*$, $F^+ = \tilde{F}^*$, 即 F^+ 是 F 的厄米共轭矩阵。

外积: $|a\rangle\langle b|$

其表示是一个方阵 ($|a\rangle$ 是一列矩阵, $\langle b|$ 是一行矩阵), 故外积是一算符。实际上, 由于

$(|a\rangle\langle b||c\rangle = |a\rangle(\langle b|c\rangle))$, $|a\rangle\langle b|$ 的作用是把矢量 $|c\rangle$ 变成了另一个平行于 $|a\rangle$ 的矢量, 故外积

$|a\rangle\langle b|$ 确实是一个算符。它的具体表示是一个方阵, 矩阵元是

$$(|a\rangle\langle b|)_{mn} = \langle m|a\rangle\langle b|n\rangle = \langle m|a\rangle\langle n|b\rangle^* = a_m b_n^*$$

3. 算符（矩阵）的本征值和本征矢

1) 一般算符的本征值和本征态

算符的本征方程:

$$\hat{T}|a\rangle = \lambda|a\rangle,$$

λ 称为 \hat{T} 的本征值, $|a\rangle$ 称为 \hat{T} 的本征矢。

矩阵形式 (自己用完备性条件证明):

$$\begin{aligned} Ta &= \lambda a \\ (T - \lambda I)a &= 0 \end{aligned}$$

本征矢 $a \neq 0$ 的条件:

$$\det(T - \lambda I) = 0,$$

即久期方程 (N 维空间):

$$\begin{vmatrix} T_{11} - \lambda & T_{12} & \cdots & T_{1N} \\ T_{21} & T_{22} - \lambda & \cdots & T_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{N1} & T_{N2} & \cdots & T_{NN} - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

从而求得 N 个本征值 λ_i ($i=1,2,\dots,N$), 将任意一个代入本征方程

$$(T - \lambda_i I)a = 0$$

得到对应的本征矢 a 。

例: 求矩阵 $T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ 的本征值和本征矢。

久期方程为 $\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 \\ 0 & -1-\lambda \end{vmatrix} = 0$, 即 $\lambda^2 - 1 = 0$, 本征值为 $\lambda = \pm 1$ 。

设本征矢为 $a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$, 取 $\lambda = 1$, $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = 0$, 求得归一化后本征矢为 $a = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$;

类似, 取 $\lambda = -1$, 求得对应的本征矢为 $a = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 。

2) 厄米算符

若 $\hat{T}^+ = \hat{T}$, 或 $T^+ = T$, 则称 \hat{T} 为厄米算符, T 为厄米矩阵。

以下讨论厄米算符的性质:

a) $\langle a | \hat{T} | b \rangle = \langle b | \hat{T}^+ | a \rangle^* = \langle b | \hat{T} | a \rangle^*$

特别是, $\langle a|\hat{T}|a\rangle = \langle a|\hat{T}|a\rangle^*$, 说明厄米算符的平均值 $\langle a|\hat{T}|a\rangle$ 是实数。

注意, 对于反厄米算符, $\hat{T}^+ = -\hat{T}$, $\langle a|\hat{T}|a\rangle = -\langle a|\hat{T}|a\rangle^*$, 反厄米算符的平均值 $\langle a|\hat{T}|a\rangle$ 是虚数。

b) 设本征方程 $\hat{T}|i\rangle = \lambda_i|i\rangle$, $\hat{T}|j\rangle = \lambda_j|j\rangle$

$$\text{由 } \langle j|\hat{T}|i\rangle = \lambda_i\langle j|i\rangle$$

$$\text{和 } \langle j|\hat{T}|i\rangle = \langle j|\lambda_j^*|i\rangle = \lambda_j^*\langle j|i\rangle$$

$$\text{有 } (\lambda_i - \lambda_j^*)\langle j|i\rangle = 0$$

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

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

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

问题: 同一本征值的本征态是否正交?

c) 线性叠加正交法 (施米特正交法)

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

$$\hat{T}|i, j\rangle = \lambda_i|i, j\rangle, \quad j=1, \dots, g, \quad \text{这 } g \text{ 个本征矢量是否正交?}$$

重新定义 g 个新态:

$$|i, n\rangle = \sum_{j=1}^g C_{nj}|i, j\rangle, \quad n=1, 2, \dots, g$$

$$\text{因为 } \hat{T}|i, n\rangle = \sum_{j=1}^g C_{nj}\hat{T}|i, j\rangle = \lambda_i \sum_{j=1}^g C_{nj}|i, j\rangle = \lambda_i|i, n\rangle,$$

所以 $|i, n\rangle$ 仍然是 \hat{T} 的属于本征值 λ_i 的本征态, 故只需证明 $|i, n\rangle$ 是正交归一的就可以了。

能否通过合适的选取系数 C_{nj} , 使得这 g 个新态正交归一?

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

共有 g 个归一化方程 + $\frac{g^2 - g}{2}$ 个正交方程 = $\frac{g(g+1)}{2}$ 个独立方程 $\langle g^2$ 个待定系数 C_{nj} , 故有多种

选择来决定满足正交归一化条件的系数 C_{nj} , 使得新态 $|i, n\rangle$ 正交归一:

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

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

结论：无论简并还是非简并，厄米算符的本征态正交归一。

d) 可以证明：厄米算符的本征矢满足完备性条件，

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = 1。$$

故厄米算符的本征矢可以构成 Hilbert 空间的一组正交归一的基矢，即构成一个线性矢量空间，或一个表象。

4. 测量

讨论量子力学与 Hilbert 空间的联系。

1) 单个力学量的测量

在 Stern - Gerlach 实验中 s_z 在磁场前没有确定值（如果有确定值，则经过磁场后会只有一束银原子），只在磁场后有确定值，一束为 s_z^+ ，另一束为 s_z^- 。因此，量子力学量的取值与系统所处的状态紧密相关。力学量在一般状态没有确定值，只有在某些特点的状态有确定值。

量子力学假设：量子力学系统的力学量用线性矢量空间中的厄米算符表示，状态用矢量表示。由于厄米算符本征态的完备性，任意力学量的本征态都可构成一个线性矢量空间或一个表象。

$$\hat{F} \text{ 的本征方程 } \hat{F}|n\rangle = f_n|n\rangle$$

在 **F** 表象：基矢 $|n\rangle$

$$\text{任意态 } |a\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|a\rangle, \langle n|a\rangle \text{ 是态 } |a\rangle \text{ 在 } \mathbf{F} \text{ 表象的具体形式。}$$

量子力学假设：力学量 \hat{F} 只有在它的本征态 $|n\rangle$ 才有确定值，就是本征值 f_n ，处于任意态 $|a\rangle$ 时， \hat{F} 没有确定值，只有确定的平均值 $\langle F \rangle \equiv \langle a|\hat{F}|a\rangle$ 。（厄米算符的本征值和平均值都是实数，这是为什么将力学量用厄米算符表示的原因）

$$\begin{aligned}
\langle F \rangle &\equiv \langle a | \hat{F} | a \rangle \\
&= \sum_{n,m} \langle a | n \rangle \langle n | \hat{F} | m \rangle \langle m | a \rangle \\
&= \sum_{n,m} \langle a | n \rangle f_m \delta_{nm} \langle m | a \rangle \\
&= \sum_n \langle a | n \rangle \langle n | a \rangle f_n \\
&= \sum_n |\langle n | a \rangle|^2 f_n
\end{aligned}$$

表明 \hat{F} 取值为 f_n 的几率是 $|\langle n | a \rangle|^2$ ， $\langle n | a \rangle$ 是几率幅， $|\langle n | a \rangle|^2$ 是在态 $|a\rangle$ 中包含态 $|n\rangle$ 的几率。

在一般态，力学量取值不确定，但取值几率确定，平均值确定。

在 \hat{F} 的自身表象， F 的矩阵元

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

故力学量在自身表象是一个对角矩阵，对角元就是力学量的本征值。

现在讨论测量与态的塌缩。

Stern - Gerlach 实验中的 **Ag** 原子在磁场前 s_z 无确定值，过磁场后有了确定值。设置磁场可以看成是对自旋的一次测量，一测量就有了确定值。

在任意态 $|a\rangle$ 测量 \hat{F} ，体系便塌缩到 \hat{F} 的本征态，故 \hat{F} 有确定的值。塌缩到 \hat{F} 的哪一个本征态呢？因为在态 $|a\rangle$ 中包含态 $|n\rangle$ 的几率是 $|\langle n | a \rangle|^2$ ，故塌缩到 $|n\rangle$ 的几率是 $|\langle n | a \rangle|^2$ ，即测量取值为 f_n 的几率是 $|\langle n | a \rangle|^2$ 。

测量使得体系的粒子性质得以体现，或者说，测量产生了粒子。

问题：在态 $|a\rangle$ 测量 \hat{F} ，得值 f_n ，紧接又测量 \hat{F} ，取值为多少？

第一次测量， $|a\rangle \rightarrow |n\rangle$

第二次测量，体系已经处于 \hat{F} 的本征态 $|n\rangle$ ，测量结果仍然为 f_n 。这是为什么在经过两个 Z 方向磁场后，**Stern - Gerlach** 实验中 **Ag** 原子的自旋仍然为 s_z^+ 的原因。

2) 自旋矩阵

由 **Stern - Gerlach** 实验，电子自旋为 $\frac{1}{2}$ ，在任意方向 \vec{e}_n 的自旋算符 $\hat{s} \cdot \vec{e}_n = \hat{s}_n$ 的取值是 $\pm \frac{\hbar}{2}$ ，

本征方程

$$\hat{s}_n |s_n^\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} |s_n^\pm\rangle。$$

在 \hat{s}_z 的本征态构成的表象 (s_z 表象), s_z 是一个对角矩阵, 对角元是 $\pm \frac{\hbar}{2}$,

$$s_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}。$$

解本征方程

$$s_z \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

得归一化的本征态为

$$|s_z^+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |s_z^-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}。$$

现在 s_z 表象求解 \hat{s}_x, \hat{s}_y 的矩阵形式。由 \hat{s}_z 的本征态的完备性条件, 有

$$|s_x^+\rangle = \sum_{i=\pm} |s_z^i\rangle \langle s_z^i | s_x^+\rangle = (\langle s_z^+ | s_x^+\rangle) |s_z^+\rangle + (\langle s_z^- | s_x^+\rangle) |s_z^-\rangle,$$

由级联 Stern - Gerlach 实验, 具有确定 s_x 值的态在通过 Z 方向磁场 (测量 s_z 的装置) 后分裂为强度相等的两束, 具有 s_z^+ 和 s_z^- 的几率相等

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

$$|s_x^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |s_z^+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |s_z^-\rangle,$$

已经通过归一化把相因子归结到 δ_1 中。

由 $|s_x^\pm\rangle$ 的正交归一化, $\langle s_x^i | s_x^j\rangle = \delta_{ij}$, 有

$$|s_x^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |s_z^+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_1} |s_z^-\rangle$$

或者

$$\begin{cases} |s_z^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|s_x^+\rangle + |s_x^-\rangle) \\ |s_z^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\delta_1} (|s_x^+\rangle - |s_x^-\rangle) \end{cases}$$

代入 \hat{s}_x 的矩阵元

$$\langle s_z^+ | \hat{s}_x | s_z^+ \rangle = 0, \quad \langle s_z^+ | \hat{s}_x | s_z^- \rangle = \frac{\hbar}{2} e^{-i\delta_1}, \quad \langle s_z^- | \hat{s}_x | s_z^+ \rangle = \frac{\hbar}{2} e^{i\delta_1}, \quad \langle s_z^- | \hat{s}_x | s_z^- \rangle = 0$$

$$s_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\delta_1} \\ e^{i\delta_1} & 0 \end{pmatrix}$$

类似，有

$$|s_y^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |s_z^+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\delta_2} |s_z^-\rangle,$$

$$s_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\delta_2} \\ e^{i\delta_2} & 0 \end{pmatrix}$$

现在考虑相位 δ_1, δ_2 的取值。具有确定 s_x 值的态在通过 Y 方向磁场（测量 s_y 的装置）后分裂为强度相等的两束，分别具有 s_y^+ 和 s_y^- ，即

$$|\langle s_y^\pm | s_x^+ \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

即
$$\frac{1}{2} |1 \pm e^{i(\delta_1 - \delta_2)}| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

故
$$\delta_1 - \delta_2 = \pm \frac{\pi}{2}.$$

如果取
$$\delta_1 = 0, \quad \delta_2 = \frac{\pi}{2},$$

有矩阵
$$s_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

可以证明，对于矩阵 s_x, s_y, s_z ，有

$$[s_i, s_j] = i\epsilon_{ijk} \hbar s_k, \quad \{s_i, s_j\} = \frac{\hbar^2}{2} \delta_{ij},$$

其中

$$[A, B] = AB - BA, \quad \{A, B\} = AB + BA.$$

定义

$$s^2 = \sum_i s_i^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

因为 s^2 是一个单位矩阵，任意态都是它的本征态，即在任意态它都有确定的值 $\frac{3}{4} \hbar^2$ 。显然，

\hat{s}^2 与任意力学量 \hat{F} 对易，可看成为一个经典量。

3) 同时测量多个力学量的条件

可否同时测量两个力学量 \hat{A} , \hat{B} 呢?

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

证明: 设完备的共同本征态为 $|n\rangle$

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

在由 $|n\rangle$ 构成的表象, 任意态

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_n |n\rangle \langle n|\psi\rangle, \\ (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle &= \sum_n (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|n\rangle \langle n|\psi\rangle \\ &= \sum_n (\hat{A}b_n - \hat{B}a_n)|n\rangle \langle n|\psi\rangle \\ &= \sum_n (a_n b_n - b_n a_n)|n\rangle \langle n|\psi\rangle = 0 \end{aligned}$$

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

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

证明: 设 $|n\rangle$ 是 \hat{A} 的本征态,

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

由
$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0,$$

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

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

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

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

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

结论: 多个力学量相互对易时, 它们可以有共同的本征态。当体系处于这些共同本征态时, 它们同时有确定的值。在共同本征态可以同时测量这些力学量。

注意, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, $[\hat{B}, \hat{C}] = 0$, 只说明 A, B 可以同时有确定值, B, C 可以同时有确定值。但 A, C 不一定同时有确定值。

当 \hat{A} , \hat{B} 不对易时, \hat{A} , \hat{B} 不可能有完备的共同本征态, 它们不可能总是被同时测量, 但有可能在一个子空间中被同时测量。例如: 对于轨道角动量, \vec{L} , $[\hat{L}^2, \hat{L}_x]=0$, $[\hat{L}^2, \hat{L}_y]=0$, $[\hat{L}_x, \hat{L}_y] \neq 0$ 。说明 \hat{L}^2 , \hat{L}_x 可以同时有确定值, \hat{L}^2 , \hat{L}_y 可以同时有确定值, \hat{L}_x , \hat{L}_y 不可能同时有确定值。但是对于 $|\vec{L}|=0$ 的态, \hat{L}_x , \hat{L}_y 同时有确定值 $L_x = L_y = 0$ 。

4) 力学量完备组

当力学量的本征值与本征态有简并时, $\hat{F}|i, j\rangle = f_i|i, j\rangle$, $j=1, \dots, g$, 从数学上可用施密特方法来实现本征态的正交归一, 但一般是从物理上引入力学量完备组来实现正交归一。

一个本征值对应多个本征态说明该力学量不足以完全描述这些本征态, 必须引入新的力学量来刻画这些本征态之间的差别。引入另一个力学量 \hat{T} , 要求 \hat{F} 的本征态也是 \hat{T} 的本征态,

$$\begin{aligned} \hat{F}|i, j\rangle &= f_i|i, j\rangle \\ \hat{T}|i, j\rangle &= t_j|i, j\rangle \end{aligned}$$

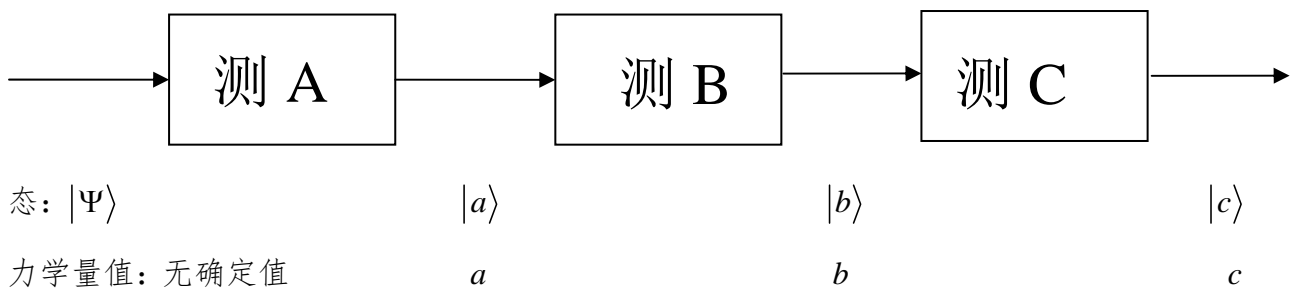
则对于力学量组 $\{\hat{F}, \hat{T}\}$, 本征值 $\{f_i, t_j\}$ 与本征态 $|i, j\rangle$ 一一对应, 无简并, 故满足正交归一条件:

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

5) 级联测量

对三个力学量 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ 分别进行如下两种测量。

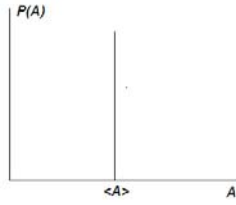
第一种方法:



经过 3 次测量后, 测得 \hat{C} 取值为 c 的几率是

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

其中 $|\langle a | \Psi \rangle|^2$ 是从 $|\Psi\rangle$ 塌缩到 $|a\rangle$ 的几率, $|\langle b | a \rangle|^2$ 是从 $|a\rangle$ 塌缩到 $|b\rangle$ 的几率, $|\langle c | b \rangle|^2$ 是从 $|b\rangle$ 塌缩到 $|c\rangle$ 的几率。



定义：用方差的乘积 $\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle$ 描述 \hat{A}, \hat{B} 之间测量的不确定度。如何估计这个不确定度？

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

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

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

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

令
$$|\alpha\rangle = \Delta\hat{A}|\Psi\rangle, \quad |\beta\rangle = \Delta\hat{B}|\Psi\rangle$$

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

因 为

$$|\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \rangle|^2 = (\text{Re} \langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \rangle)^2 + (\text{Im} \langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \rangle)^2 \geq (\text{Im} \langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \rangle)^2 = \left(\frac{1}{2i} (\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \rangle - \langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \rangle^*) \right)^2$$

故
$$\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle \geq \left(\frac{1}{2i} (\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \rangle - \langle \Delta\hat{B}\Delta\hat{A} \rangle) \right)^2,$$

等号对应 Schwarz 不等式取等号和 $\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \rangle$ 的实部为零。

由
$$\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B} \rangle = \langle \Psi | (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) | \Psi \rangle = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle$$

$$\langle \Delta\hat{B}\Delta\hat{A} \rangle = \langle \Psi | (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle) | \Psi \rangle = \langle \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle \hat{B} \rangle \langle \hat{A} \rangle$$

故
$$\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2,$$

说明：两个力学量的不确定度由它们的对易关系和态 $|\Psi\rangle$ 控制。

5. 表象变换

选取合适的表象可简化计算。不同表象的基矢之间的变换称为表象变换。

设有两个表象：

$$\text{I 表象： 基矢 } |i\rangle, \hat{I}|i\rangle = i|i\rangle$$

$$\text{M 表象： 基矢 } |m\rangle, \hat{M}|m\rangle = m|m\rangle$$

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

表象变换矩阵 S ,

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

是 M 表象的基矢在 I 表象的表示。

1) 任意矢量的变换

$$\text{I 表象： } |a\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|a\rangle,$$

$\langle i|a\rangle$ 是矢量 $|a\rangle$ 在 $|i\rangle$ 方向的分量，或称 $|a\rangle$ 在 I 表象的表示。

$$\text{M 表象： } |a\rangle = \sum_m |m\rangle \langle m|a\rangle$$

$\langle m|a\rangle$ 是矢量 $|a\rangle$ 在 $|m\rangle$ 方向的分量，或称 $|a\rangle$ 在 M 表象的表示。

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

或者写成矩阵形式

$$a_M = S^+ a_I$$

2) 任意算符的变换

$$\text{I 表象： } T_{ij} = \langle i|\hat{T}|j\rangle,$$

M 表 象 :

$$T_{mn} = \langle m|\hat{T}|n\rangle = \sum_{i,j} \langle m|i\rangle \langle i|\hat{T}|j\rangle \langle j|n\rangle = \sum_{i,j} \langle i|m\rangle^* \langle i|\hat{T}|j\rangle \langle j|n\rangle = \sum_{i,j} S_{im}^* T_{ij} S_{jn} = \sum_{i,j} S_{mi}^+ T_{ij} S_{jn}$$

或者写成矩阵形式：

$$T_M = S^+ T_I S.$$

3) 表象变换矩阵是幺正矩阵

$$(SS^+)_{ij} = \sum_m S_{im} S_{mj}^+ = \sum_m S_{im} S_{jm}^* = \sum_m \langle i|m\rangle \langle j|m\rangle^* = \sum_m \langle i|m\rangle \langle m|j\rangle = \langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

$$SS^+ = 1,$$

同理可证： $S^+S = 1$,

故 $S^+ = S^{-1}$

表象变换矩阵为么正矩阵。

注意 S 不是厄米矩阵, $S^+ \neq S$ 。

4) 表象变换不改变算符的本征值

设 $T_I |a\rangle_I = \lambda_I |a\rangle_I$,

则 $T_M |a\rangle_M = S^+ T_I S S^+ |a\rangle_I = S^+ T_I |a\rangle_I = S^+ \lambda_I |a\rangle_I = \lambda_I S^+ |a\rangle_I = \lambda_I |a\rangle_M$

说明: 在 M 表象, 本征值仍为 λ_I 。可见, 表象变换不改变力学量的取值。

例 1: 表象变换不改变对易关系。

设在 I 表象, 有

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

则在 M 表象,

$$\begin{aligned} [A_M, B_M] &= A_M B_M - B_M A_M \\ &= S^+ A_I S S^+ B_I S - S^+ B_I S S^+ A_I S \\ &= S^+ (A_I B_I - B_I A_I) S \\ &= S^+ C_I S \\ &= C_M \end{aligned}$$

说明: 对易关系是量子力学基本关系, 不随表象的变化而变化。

例 2: 表象变换不改变矩阵的求迹。

$$\text{tr}(T_M) = \text{tr}(S^+ T_I S) = \text{tr}(S S^+ T_I) = \text{tr}(T_I)$$

6. 坐标表象与动量表象

1) 连续谱

与自旋角动量 \hat{s}_z 取分离值不同，坐标 \hat{x} 与动量 \hat{p} 取值连续。

用坐标或动量的本征态构成连续的坐标或动量表象。

本征方程	$\hat{x} x\rangle = x x\rangle,$	$\hat{p} p\rangle = p p\rangle$
基矢	$ x\rangle,$	$ p\rangle$
正交归一化	$\langle x x'\rangle = \delta(x-x'),$	$\langle p p'\rangle = \delta(p-p')$
完备性条件	$\int dx x\rangle\langle x = 1,$	$\int dp p\rangle\langle p = 1$

对于任意态 $|\psi\rangle$: $|\psi\rangle = \int dx|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \int dp|p\rangle\langle p|\psi\rangle$

$\langle x|\psi\rangle, \langle p|\psi\rangle$ 是态 $|\psi\rangle$ 在坐标和动量表象的具体形式，是连续的列

矩阵。

3 维空间: $\hat{x}|\vec{x}\rangle = \vec{x}|\vec{x}\rangle, \quad \hat{p}|\vec{p}\rangle = \vec{p}|\vec{p}\rangle$

量子力学假设: 基本对易关系

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3$$

坐标动量不确定关系: $\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle\langle(\Delta\hat{p}_x)^2\rangle \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{x}, \hat{p}_x]\rangle\right)^2 = \frac{\hbar^2}{4}$

2) 空间平移变换

定义空间平移算符

$$\begin{aligned} \hat{T}(d\vec{x})|\vec{x}\rangle &= |\vec{x} + d\vec{x}\rangle \\ \hat{T}(d\vec{x})|\psi\rangle &= \hat{T}(d\vec{x})\int d^3x|\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle \\ &= \int d^3x|\vec{x} + d\vec{x}\rangle\langle\vec{x}|\psi\rangle && \text{(算符只对矢量起作用)} \\ &= \int d^3x|\vec{x}\rangle\langle\vec{x} - d\vec{x}|\psi\rangle && \text{(积分变量替换)} \end{aligned}$$

取空间无限小平移算符

$$\hat{T}(d\vec{x}) = 1 - i\hat{\vec{K}} \cdot d\vec{x} \quad (\text{其中生成元 } \hat{\vec{K}} \text{ 为厄米算符})$$

平移变换是一么正算符:

$$\hat{T}(d\vec{x})\hat{T}^\dagger(d\vec{x}) = \left(1 - i\hat{\vec{K}} \cdot d\vec{x}\right)\left(1 + i\hat{\vec{K}} \cdot d\vec{x}\right) = 1 \quad (\text{忽略二级无穷小})$$

平移变换的结合律：

$$\hat{T}(d\bar{x}_1)\hat{T}(d\bar{x}_2) = \left(1 - i\hat{K} \cdot d\bar{x}_1\right)\left(1 - i\hat{K} \cdot d\bar{x}_2\right) = 1 - i\hat{K} \cdot (d\bar{x}_1 + d\bar{x}_2) = \hat{T}(d\bar{x}_1 + d\bar{x}_2)$$

有限平移变换是无限小平移变换的多次操作。

对于任意态 $|\psi\rangle$,

$$\begin{aligned}\hat{x}\hat{T}(d\bar{x})|\psi\rangle &= \int d^3x \hat{x}\hat{T}(d\bar{x})|\bar{x}\rangle\langle\bar{x}|\psi\rangle = \int d^3x \hat{x}|\bar{x} + d\bar{x}\rangle\langle\bar{x}|\psi\rangle \\ &= \int d^3x (\bar{x} + d\bar{x})|\bar{x} + d\bar{x}\rangle\langle\bar{x}|\psi\rangle, \\ \hat{T}(d\bar{x})\hat{x}|\psi\rangle &= \int d^3x \hat{T}(d\bar{x})\hat{x}|\bar{x}\rangle\langle\bar{x}|\psi\rangle = \int d^3x \hat{T}(d\bar{x})\bar{x}|\bar{x}\rangle\langle\bar{x}|\psi\rangle \\ &= \int d^3x \bar{x}\hat{T}(d\bar{x})|\bar{x}\rangle\langle\bar{x}|\psi\rangle = \int d^3x \bar{x}|\bar{x} + d\bar{x}\rangle\langle\bar{x}|\psi\rangle, \\ [\hat{x}, \hat{T}(d\bar{x})]|\psi\rangle &= \int d^3x d\bar{x}|\bar{x} + d\bar{x}\rangle\langle\bar{x}|\psi\rangle \\ &= \int d^3x d\bar{x}|\bar{x}\rangle\langle\bar{x}|\psi\rangle \quad (\text{已忽略二级无穷小}) \\ &= d\bar{x}|\psi\rangle\end{aligned}$$

故有对易关系 $[\hat{x}, \hat{T}(d\bar{x})] = d\bar{x}$

即 $[\hat{x}, \hat{K} \cdot d\bar{x}] = id\bar{x}$

如果取平移在 x_j 的方向, $d\bar{x} = \varepsilon\bar{e}_j$

有 $[\hat{x}_i, \hat{K}_j] = i\delta_{ij}$

与量子力学基本对易关系 $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$

比较, 有 $\hat{p} = \hbar\hat{K}$,

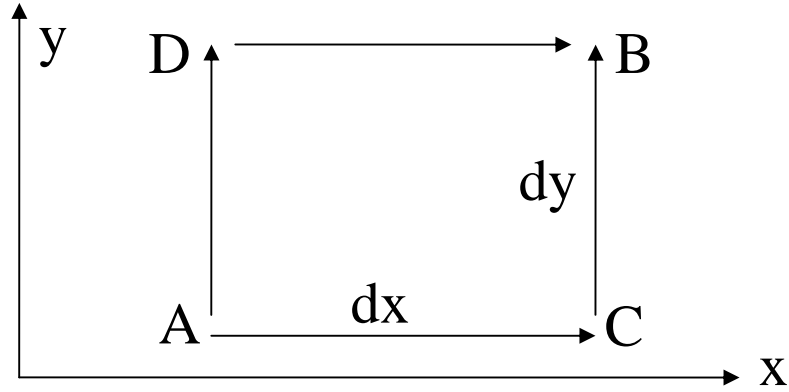
表明动量是平移变换的生成元,

$$\hat{T}(d\bar{x}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p} \cdot d\bar{x}.$$

由于 $[\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0,$

有 $[\hat{T}(dx), \hat{T}(dy)] = \left[1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_x dx, 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p}_y dy\right] = 0,$

说明, 平移与次序无关, 平移步骤 $A \underline{dx} C \underline{dy} B$ 与 $A \underline{dy} D \underline{dx} B$ 效果一样。



3) 正则量子化

Dirac, 1925: 经典力学系统的量子化

分析力学的 Poisson 括号 \rightarrow 量子力学的对易关系

$$[A, B]_P = \sum_s \left(\frac{\partial A}{\partial q_s} \frac{\partial B}{\partial p_s} - \frac{\partial A}{\partial p_s} \frac{\partial B}{\partial q_s} \right) \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] = \frac{1}{i\hbar} (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$$

例如,

$$[x_i, p_j]_P = \delta_{ij} \rightarrow [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} .$$

4) 坐标表象

\hat{x} 的矩阵元: $\langle \bar{x}_1 | \hat{x} | \bar{x}_2 \rangle = \bar{x}_2 \delta(\bar{x}_1 - \bar{x}_2) = \bar{x}_1 \delta(\bar{x}_1 - \bar{x}_2)$ 为对角矩阵

由
$$\hat{T}(d\bar{x})|\beta\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{\vec{p}} \cdot d\bar{x} \right) |\beta\rangle$$

和

$$\begin{aligned} \hat{T}(d\bar{x})|\beta\rangle &= \int d^3x |\bar{x}\rangle \langle \bar{x} - d\bar{x} | \beta \rangle = \int d^3x |\bar{x}\rangle (\langle \bar{x} | \beta \rangle - d\bar{x} \cdot \bar{\nabla} \langle \bar{x} | \beta \rangle) \\ &= |\beta\rangle - d\bar{x} \cdot \int d^3x |\bar{x}\rangle \bar{\nabla} \langle \bar{x} | \beta \rangle \end{aligned}$$

有

$$\begin{aligned} \hat{\vec{p}}|\beta\rangle &= \int d^3x |\bar{x}\rangle (-i\hbar \bar{\nabla}) \langle \bar{x} | \beta \rangle, \\ \langle \alpha | \hat{\vec{p}} | \beta \rangle &= \int d^3x \langle \alpha | \bar{x} \rangle (-i\hbar \bar{\nabla}) \langle \bar{x} | \beta \rangle \end{aligned}$$

取 $\langle \alpha | = \langle \bar{x}_1 |$, $|\beta\rangle = |\bar{x}_2\rangle$, 得动量算符 $\hat{\vec{p}}$ 在坐标表象的矩阵元:

$$\langle \bar{x}_1 | \hat{\vec{p}} | \bar{x}_2 \rangle = \int d^3x \langle \bar{x}_1 | \bar{x} \rangle (-i\hbar \bar{\nabla}) \langle \bar{x} | \bar{x}_2 \rangle = (-i\hbar \nabla_1) \delta(\bar{x}_1 - \bar{x}_2)$$

再取 $\langle \alpha | = \langle \bar{x}_1 |$, $|\beta\rangle = |\bar{p}\rangle$,

$$\langle \bar{x}_1 | \hat{p} | \bar{p} \rangle = \int d^3x \langle \bar{x}_1 | \bar{x} \rangle (-i\hbar \bar{\nabla}) \langle \bar{x} | \bar{p} \rangle = (-i\hbar \nabla_1) \langle \bar{x}_1 | \bar{p} \rangle$$

即
$$\bar{p} \langle \bar{x}_1 | \bar{p} \rangle = (-i\hbar \nabla_1) \langle \bar{x}_1 | \bar{p} \rangle$$

解此一级常微分方程得，动量本征态在坐标表象的表示是平面波，

$$\langle \bar{x} | \bar{p} \rangle = N e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \cdot \bar{x}}$$

由

$$\langle \bar{x}_2 | \bar{x}_1 \rangle = \int d^3p \langle \bar{x}_2 | \bar{p} \rangle \langle \bar{p} | \bar{x}_1 \rangle = \int d^3p |N|^2 e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \cdot (\bar{x}_2 - \bar{x}_1)}$$

$$\delta(\bar{x}_1 - \bar{x}_2) = |N|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\bar{x}_1 - \bar{x}_2)$$

$$|N| = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$$

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

5) 动量表象

\hat{p} 的矩阵元：
$$\langle \bar{p}_1 | \hat{p} | \bar{p}_2 \rangle = \bar{p}_1 \delta(\bar{p}_1 - \bar{p}_2)$$
 为对角矩阵

由

$$\begin{aligned} \langle \bar{p}_1 | \hat{x} | \bar{p}_2 \rangle &= \int d^3x_1 d^3x_2 \langle \bar{p}_1 | \bar{x}_1 \rangle \langle \bar{x}_1 | \hat{x} | \bar{x}_2 \rangle \langle \bar{x}_2 | \bar{p}_2 \rangle \\ &= \int d^3x_1 d^3x_2 \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \bar{p}_1 \cdot \bar{x}_1} \bar{x}_2 \delta(\bar{x}_1 - \bar{x}_2) e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p}_2 \cdot \bar{x}_2} \\ &= \int d^3x_1 \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \bar{x}_1 e^{\frac{i}{\hbar} (\bar{p}_2 - \bar{p}_1) \cdot \bar{x}_1} = \int d^3x_1 \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} (i\hbar \bar{\nabla}_1) e^{\frac{i}{\hbar} (\bar{p}_2 - \bar{p}_1) \cdot \bar{x}_1} = i\hbar \bar{\nabla}_1 \delta(\bar{p}_1 - \bar{p}_2) \end{aligned}$$

注意这里是对动量的微分。

坐标算符本征态在动量表象的形式

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

例 1: 在坐标表象证明 \hat{x} ， \hat{p} 为厄米算符。

$$x_{x_1 x_2} = \delta(x_1 - x_2) x_1,$$

$$x_{x_1 x_2}^+ = (x_{x_2 x_1})^* = (\delta(x_2 - x_1) x_2)^* = \delta(x_2 - x_1) x_2 = \delta(x_1 - x_2) x_1 = x_{x_1 x_2}$$

$$p_{x_1 x_2} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \delta(x_1 - x_2) = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial (x_1 - x_2)} \right) \delta(x_1 - x_2),$$

$$p_{x_1 x_2}^+ = (p_{x_2 x_1})^* = \left(\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial(x_2 - x_1)} \right) \delta(x_2 - x_1) \right)^* = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial(x_2 - x_1)} \right) \delta(x_2 - x_1) = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial(x_1 - x_2)} \right) \delta(x_1 - x_2) = p_{x_1 x_2}$$

故 \hat{x} 和 \hat{p} 均为厄米算符。

例 2: 在坐标表象计算 $[\hat{x}, \hat{p}]$

$$\begin{aligned} \hat{x}\hat{p} &= \int dx_1 dx_2 \hat{x} |x_1\rangle \langle x_1| \hat{p} |x_2\rangle \langle x_2| = \int dx_1 dx_2 x_1 |x_1\rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \delta(x_1 - x_2) \langle x_2| \\ &= -\int dx_1 dx_2 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \right) (x_1 |x_1\rangle) \delta(x_1 - x_2) \langle x_2| \quad (\text{分部积分}) \\ &= -\int dx_1 \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \right) (x_1 |x_1\rangle) \langle x_1| = \int dx_1 x_1 |x_1\rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \langle x_1| \quad (\text{分部积分}) \end{aligned}$$

同理可证,

$$\hat{p}\hat{x} = \int dx_1 |x_1\rangle \left(-i\hbar \langle x_1| -i\hbar x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \langle x_1| \right) = -i\hbar + \int dx_1 x_1 |x_1\rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \langle x_1|,$$

故 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ 。

说明: 对易关系不依赖于表象。

由不确定关系, 坐标与动量不可能同时有确定值。例如, 在动量本征态, 动量有确定值, $\langle p | (\Delta \hat{p})^2 | p \rangle = 0$, 但坐标取值为 x 的几率是

$$|\langle x | p \rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} px} \right|^2 = \text{const},$$

说明粒子在 $-\infty < x < \infty$ 出现的几率处处相等, 坐标的取值完全不确定, 方差 $\langle p | (\Delta \hat{x})^2 | p \rangle = \infty$ 。

例 3: 最小不确定波包。

要在不确定关系 $\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2$ 取等号, 得到最小不确定度, 态必须满足:

足:

1) 在 Schwarz 不等式中取等号 $\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{B})^2 \rangle = \langle \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \rangle^2$;

2) $\text{Re} \langle \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \rangle = 0$ 。

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

2) 即 $\text{Re}\left(c\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\right)=0$, 由于 $\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle$ 是实数, 故 $c=ia$, a 为实数。

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

这就是最小不确定性对态 $|\psi\rangle$ 的限制。取

$$\hat{A}=\hat{x}, \quad \hat{B}=\hat{p},$$

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

进入坐标表象, 有

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

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

是坐标空间的 Gaussian 波包。

例 4: 已知在坐标表象的态 $\langle\vec{r}|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}$ (氢原子基态), 求动量的平均值。

由于 $\langle\vec{x}|\psi\rangle$ 不是平面波, 动量无确定值, 取动量为 \vec{p} 的几率是 $|\langle\vec{p}|\psi\rangle|^2$,

$$\begin{aligned} \langle\vec{p}|\psi\rangle &= \int d^3\vec{r}\langle\vec{p}|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle = \int d^3\vec{r}\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle^*\langle\vec{r}|\psi\rangle \\ &= \int d^3\vec{r}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0} = \frac{(2a_0\hbar)^{3/2}\hbar}{\pi(a_0p^2+\hbar^2)^2}. \end{aligned}$$

由于 $\langle\vec{p}|\psi\rangle$ 只与动量大小有关, 动量大小的平均值

$$\langle p\rangle = \frac{\int dp p^3 |\langle\vec{p}|\psi\rangle|^2}{\int dp p^2 |\langle\vec{p}|\psi\rangle|^2}.$$

第二章：量子动力学

本章讨论量子力学中的态和力学量的时间演化。在非相对论量子力学中，与其它力学量用算符表示不一样，时间只是一个参量，仍然是一个经典量，不是算符。

1. 时间演化和 **Schroedinger** 方程

1) 时间演化（平移）算符

初始态： $|\alpha, t_0\rangle$

从 t_0 到 t 的时间演化： $|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\alpha, t_0\rangle$

将 $|\alpha, t_0\rangle$ 和 $|\alpha, t\rangle$ 按算符 \hat{A} 的本征态 $|a\rangle$ 展开

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\alpha, t_0\rangle$$

$$|\alpha, t\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a|\alpha, t\rangle$$

显然，处于某一确定本征态的几率不一定守恒，

$$|\langle a|\alpha, t_0\rangle|^2 \neq |\langle a|\alpha, t\rangle|^2。$$

但由归一化条件

$$\langle \alpha, t|\alpha, t\rangle = \langle \alpha, t_0|\alpha, t_0\rangle = 1，$$

有总的几率守恒

$$\sum_a |\langle a|\alpha, t\rangle|^2 = \sum_a |\langle a|\alpha, t_0\rangle|^2 = 1$$

和时间演化算符是么正算符

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{U}(t, t_0) = 1。$$

要求时间演化的结合律：

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

无限小时间演化算符可写成

$$\hat{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\hat{\Omega}dt，$$

\hat{U} 的么正性 $\hat{U}^\dagger\hat{U} = 1$ 要求 $\hat{\Omega}$ 是厄米算符，

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

考虑到 \hat{U} 无量纲， $\hat{\Omega}$ 具有频率量纲，由 Planck - Einstein 的能量频率关系 $E = \hbar\omega$ ，可令，

$$\hat{\Omega} = \hat{H}/\hbar，$$

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

2) 时间演化方程

由时间演化算符的结合律:

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

即

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

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

这就是量子力学的基本时间演化方程。

将方程右乘初始状态 $|\alpha, t_0\rangle$, 有

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

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

这就是态的时间演化方程, **Schroedinger** 方程。

下面讨论基本演化方程的解。如果哈密顿算符不含时间, 例如在沿 Z 方向常磁场中的磁相互作用 $\hat{H} \sim \hat{J}_z B$,

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

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

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

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

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

称为 **Dyson** 级数。

以下主要考虑哈密顿算符不含时间的情形。

3) 定态

如果体系初始时处于哈密顿算符 \hat{H} 的本征态,

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0\rangle &= |E\rangle, \quad \hat{H}|E\rangle = E|E\rangle, \\ |\alpha, t\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|\alpha, t_0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}|\alpha, t_0\rangle \end{aligned}$$

表明态随时间的变化只改变一个相位, 任意力学量 \hat{A} 的平均值

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

不随时间变化。故称能量本征态为定态。

如果体系初始时不处于定态, 则 t 时刻处于定态 $|E\rangle$ 的几率幅

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

几率

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

不随时间改变。任意时刻处于定态的几率与初始时相同。说明: 如果体系初始时处于定态, 则永远处于定态, 如果体系初始始不处于定态, 则永远不处于定态。

4) 电子自旋进动

考虑电子自旋磁矩与外磁场相互作用。设外磁场在 Z 方向,

$$\hat{H} = -\left(\frac{e}{mc}\right)\hat{s} \cdot \vec{B} = -\frac{eB}{mc}\hat{s}_z = \omega\hat{s}_z, \quad \omega = -\frac{eB}{mc} > 0$$

时间演化算符

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

\hat{s}_z, \hat{H} 有共同本征态 $|s_z^\pm\rangle$

$$\hat{s}_z|s_z^\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|s_z^\pm\rangle, \quad \hat{H}|s_z^\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}\omega|s_z^\pm\rangle.$$

设体系初始时处于 \hat{s}_x 的本征态 $|s_x^+\rangle$,

$$|\alpha, 0\rangle = |s_x^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|s_z^+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|s_z^-\rangle,$$

在任意时刻, 态

$$|\alpha, t\rangle = \hat{U}(t, 0)|\alpha, 0\rangle,$$

体系处于 $|s_x^+\rangle$ 的几率为

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

由几率守恒，体系处于态 $|s_x^-\rangle$ 的几率，

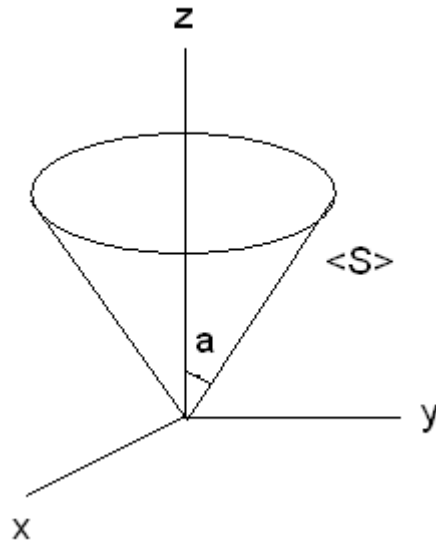
$$|\langle s_x^- | \alpha, t \rangle|^2 = 1 - |\langle s_x^+ | \alpha, t \rangle|^2 = \sin^2 \frac{\omega t}{2},$$

在任意时刻的平均值

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

同理，

$$\begin{aligned} \langle \hat{s}_y \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \omega t \\ \langle \hat{s}_z \rangle &= 0 \end{aligned}$$



平均值 $\langle \hat{s} \rangle$ 在自旋空间的时间演化类似于经典力学中的 Larmor 进动， ω 称为 Larmor 频率。

5) 能量时间不确定关系

由
$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4},$$

有
$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \Delta A \equiv \sqrt{\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle}$$

由狭义相对论
$$x_\mu = (t, x), \quad p_\mu = (E, p),$$

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

即能量时间不确定关系。

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

$$\langle (\Delta \hat{H})^2 \rangle = \langle (\hat{H} - \langle \hat{H} \rangle)^2 \rangle, \quad \langle (\Delta t)^2 \rangle = ?$$

对于任意力学量 \hat{O} ，由

$$\langle \hat{O} \rangle(t) = \langle \alpha, t | \hat{O} | \alpha, t \rangle,$$

有
$$\frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha, t | \right) \hat{O} | \alpha, t \rangle + \langle \alpha, t | \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} | \alpha, t \rangle + \langle \alpha, t | \hat{O} \left(\frac{\partial}{\partial t} | \alpha, t \rangle \right)$$

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

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

有
$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle &= -\frac{1}{i\hbar} \langle \alpha, t | \hat{H} \hat{O} | \alpha, t \rangle + \langle \alpha, t | \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} | \alpha, t \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \alpha, t | \hat{O} \hat{H} | \alpha, t \rangle \\ &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{O}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} \right\rangle \end{aligned}$$

若力学量 \hat{O} 不显含时间，

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

那么， \hat{O} ， \hat{H} 的不确定关系为

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

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

若取
$$\Delta t = \Delta O / \left| \frac{d\langle \hat{O} \rangle}{dt} \right|,$$

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

故， Δt 的物理意义是力学量 \hat{O} 的平均值变化一个标准方差 ΔO 所需的时间。显然， Δt 与所测力学量 \hat{O} 有关。

例：在定态， $\Delta E = 0$ ，但 $\langle \hat{O} \rangle$ 在定态与时间无关， $\frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle = 0$ ， $\Delta t = \Delta O / \left| \frac{d}{dt} \langle \hat{O} \rangle \right| \rightarrow \infty$ 。

2. Schroedinger 绘景与 Heisenberg 绘景

1) 么正变换的两种方式

前面讨论的空间平移变换 $\hat{U}(d\bar{x})$ 和时间平移变换 $\hat{U}(dt)$ 都是对态的作用，

$$|\alpha\rangle \rightarrow \hat{U}(d\bar{x}) |\alpha\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p} \cdot d\bar{x}\right) |\alpha\rangle,$$

$$|\alpha\rangle \rightarrow \hat{U}(dt) |\alpha\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H} dt\right) |\alpha\rangle,$$

而力学量保持不变，可观测量，即力学量矩阵元的时间变化是由态的变化引起的

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

这一时间变化既可以看到

$$|\alpha\rangle \rightarrow \hat{U}|\alpha\rangle, \quad \text{力学量 } \hat{A} \text{ 保持不变,}$$

也可以看成

$$\hat{A} \rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}, \quad \text{态 } |\alpha\rangle \text{ 保持不变.}$$

两种形式完全等价，不影响力学量的矩阵元的时间变化，特别是不影响力学量的平均值。例如，空间平移的作用也可以表示为

$$|\alpha\rangle \text{ 不变,}$$

$$\hat{x} \rightarrow \hat{U}^\dagger(d\bar{x}) \hat{x} \hat{U}(d\bar{x}) = \left(1 + \frac{i}{\hbar} \hat{p} \cdot d\bar{x}\right) \hat{x} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{p} \cdot d\bar{x}\right) = \hat{x} + \frac{i}{\hbar} [\hat{p} \cdot d\bar{x}, \hat{x}] = \hat{x} + d\bar{x}.$$

2) 时间演化的 Schroedinger 绘景与 Heisenberg 绘景

Schroedinger 绘景:

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

$$\text{力学量保持不变} \quad \hat{A}_S$$

Heisenberg 绘景:

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

$$\text{态保持不变} \quad |\alpha\rangle_H,$$

考虑相同的初始条件，

$$\begin{aligned} \hat{A}_H(0) &= \hat{A}_S, \\ |\alpha, 0\rangle_S &= |\alpha\rangle_H, \end{aligned}$$

这也是两个绘景的联系。

注意：(1) 内积（包括矩阵元，几率幅和平均值）与绘景无关：

$${}_s \langle \alpha, t | \beta, t \rangle_s = {}_s \langle \alpha, 0 | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \beta, 0 \rangle_s = {}_s \langle \alpha, 0 | \beta, 0 \rangle_s = {}_H \langle \alpha | \beta \rangle_H$$

(2) 由于么正变换不改变对易关系，如果在 **Schrodinger** 绘景有对易关系 $[\hat{A}_S, \hat{B}_S] = \hat{C}_S$ ，即 **Heisenberg** 绘景的初始对易关系 $[\hat{A}_H(0), \hat{B}_H(0)] = \hat{C}_H(0)$ ，则有等时对易关系 $[\hat{A}_H(t), \hat{B}_H(t)] = \hat{C}_H(t)$ 。

(3) 上面时间演化算符 $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$ 中的哈密顿算符是在 **Schrodinger** 绘景引入的， $\hat{H} = \hat{H}_S$ ，但是

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

上面只讨论了态和力学量的时间演化，基矢是否也象一般矢量一样随时间变化？基矢是力学量的本征态，随时间的变化由力学量确定。

在 **Schrodinger** 绘景：

$$\hat{A}_S |a\rangle_S = a |a\rangle_S，$$

力学量 \hat{A}_S 不含时间，基矢 $|a\rangle_S$ 也不随时间变化。

在 **Heisenberg** 绘景：

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

因为 \hat{A}_H 依赖时间，故 $|a\rangle_H$ 必依赖于时间。由

$$\hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_S \hat{U}(t) |a, t\rangle_H = a |a, t\rangle_H， \quad \hat{A}_S \hat{U}(t) |a, t\rangle_H = a \hat{U}(t) |a, t\rangle_H，$$

与 **Schrodinger** 绘景的本征方程比较，有

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

总结：	Schrodinger 绘景	Heisenberg 绘景
态	$ \alpha, t\rangle_S = \hat{U}(t) \alpha, 0\rangle_S$	$ \alpha\rangle_H$ 与时间无关
力学量	\hat{A}_S 与时间无关	$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}_H(0) \hat{U}(t)$
基矢	$ a\rangle_S$ 与时间无关	$ a, t\rangle_H = \hat{U}^\dagger(t) a, 0\rangle_H$

3) Heisenberg 绘景中的运动方程

由于经典力学中只有力学量随时间演化，不引入态矢量的概念。因此，量子力学的 Heisenberg 绘景更容易与经典力学比较。

对

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

求时间微分，得到 Heisenberg 运动方程，

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

其地位类似于 Schroedinger 绘景中的态方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_S = \hat{H} |\alpha, t\rangle_S.$$

比较经典分析力学中的运动方程

$$\frac{dA}{dt} = [A, H]_{poisson},$$

得到从经典力学到量子力学的方法，即正则量子化，

$$\text{经典力学} []_{poisson} \rightarrow \text{量子力学} \frac{1}{i\hbar} [].$$

4) Ehrenfest 定律

如何构造 \hat{H} ? 有经典对应的量子体系，分析力学的 $H(\vec{x}, \vec{p}) \rightarrow$ 量子力学的 $H(\hat{x}, \hat{p})$ 。

对于自由粒子，

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

Heisenberg 运动方程（下面忽略力学量的下标 H）

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}, \hat{H}] = 0, \quad \hat{p}(t) = \hat{p}(0), \\ \frac{d\hat{x}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{2i\hbar m} [\hat{x}, \hat{p}^2] = \frac{\hat{p}(t)}{m} = \frac{\hat{p}(0)}{m}, \quad \hat{x}(t) = \hat{x}(0) + \frac{\hat{p}(0)}{m}t, \end{aligned}$$

对于一般体系

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}),$$

Heisenberg 运动方程

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

将 $V(\hat{x})$ 按 \hat{x} 的级数展开, 并应用 $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$, 有

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{p}}{dt} &= -\nabla V(\hat{x}), \\ \frac{d\hat{x}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{2i\hbar m} [\hat{x}, \hat{p}^2] = \frac{\hat{p}}{m}, \\ m \frac{d^2\hat{x}}{dt^2} &= \frac{d\hat{p}}{dt} = -\nabla V(\hat{x}), \end{aligned}$$

两边求平均,

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{x} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = -\langle \nabla V(\hat{x}) \rangle,$$

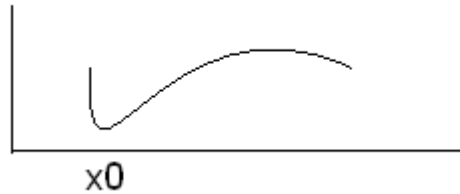
此即 **Ehrenfest** 定律, 对应经典力学中的牛顿定律。由于内积与绘景无关, 关于平均值的 **Ehrenfest** 定律与绘景无关。

以下没有特殊说明, 一般是在 **Schrodinger** 绘景讨论问题。

3. 一维线性谐振子

对于任意势，在最小点 x_0 附近按 Taylor 展开：

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



其中，常数项 $V(x_0)$ 可以归并到能量中去。在势最小值点，有 $V'(x_0) = 0$ 。略去高阶项，有

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

近似为谐振子势。故研究谐振子问题具有普遍意义。

经典： $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

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

由于

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

定义新算符

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

则

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

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

由于 $\hat{a}^+ \hat{a}$ 与 \hat{H} 只差一个常数，故 $\hat{a}^+ \hat{a}$ 与 \hat{H} 有共同本征态。

设
$$\hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = n |n\rangle,$$

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

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

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

1) 设 $\hat{a}|n\rangle = |b\rangle,$

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

因为 $\langle b|b\rangle \geq 0, \quad \langle n|n\rangle \geq 0,$

故 $n \geq 0.$

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

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

故，如果 $|n\rangle$ 是 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 的本征态，则 $\hat{a}|n\rangle, \hat{a}^\dagger|n\rangle$ 也是 $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 的本征态，并有下列关系：

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

故称 \hat{a} 为下降（消灭）算符， \hat{a}^\dagger 为上升（产生）算符。结合 $n \geq 0$ 的结论， $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ 的本征值为

$$n = n_0, n_0 + 1, n_0 + 2, \dots \quad n_0 \geq 0$$

3) 对于最小值 n_0 ，必有

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

否则由于 $(\hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a}|n_0\rangle = (n_0 - 1)\hat{a}|n_0\rangle$ ，本征值为 $n_0 - 1$ ，与 n_0 为最小本征值的假设矛盾。由

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n_0\rangle = n_0|n_0\rangle = 0, \quad \text{故 } n_0 = 0.$$

结论：

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

注意，到此仅仅用到了对易关系，没有进入具体表象。

4) 由于 $\hat{a}|n\rangle$ 对应的本征值也为 $n-1$ ，如果无简并（一维束缚态无简并），有

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

同理， $\hat{a}^+|n\rangle = b_n|n+1\rangle$ 。

因为 $\langle n|\hat{a}^+ = \langle n-1|a_n^*$ ， $\langle n|\hat{a} = \langle n+1|b_n^*$ ，

故 $\langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = |a_n|^2 \langle n-1|n-1\rangle$ ， $n = |a_n|^2$ ， $|a_n| = \sqrt{n}$ ，

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = |b_n|^2 \langle n+1|n+1\rangle，\quad \langle n|\hat{a}^+\hat{a}+1|n\rangle = |b_n|^2，\quad n+1 = |b_n|^2，\quad |b_n| = \sqrt{n+1}$$

取 $a_n = \sqrt{n}$ ， $b_n = \sqrt{n+1}$ 。

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

5) 进入 \hat{H} 与 $\hat{a}^+\hat{a}$ 的共同表象

$$(a^+a)_{mn} = \langle m|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n\langle m|n\rangle = n\delta_{mn}，$$

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

均为对角矩阵，这不难理解，因为是在自身表象。

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

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

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

则 $x_{mn} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_{mn} + a_{mn}^+) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1})$

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

均不是对角阵。注意： $\langle n|\hat{x}|n\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0$ 。

6) 进入坐标表象

对于基态 $|0\rangle$ ，

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

$$\langle x|\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}|0\rangle = 0, \quad \int dx' \langle x|\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}|x'\rangle \langle x'|0\rangle = 0,$$

因为 $\langle x|\hat{x}|x'\rangle = x\delta(x-x'), \quad \langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar\delta(x-x')\frac{d}{dx}, \quad \langle x'|0\rangle = \psi_0(x'),$

故 $\left(x + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) = 0,$

一阶常微分方程的解为 $\psi_0(x) = Ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},$

考虑到归一化条件 $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1,$

有 $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$

激发态 $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\langle x|a^+|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}\langle x|(a^+)^2|n-2\rangle$

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

$$= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{n}{2}}\int dx_1 \cdots dx_n \langle x|\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}|x_1\rangle \langle x_1|\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}|x_2\rangle \cdots \langle x_{n-1}|\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}|x_n\rangle \langle x_n|0\rangle$$

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

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

至此，一维谐振子问题全部解决。

7) $\hat{a}^+\hat{a}$ 的物理意义

谐振子的能量: $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$

其中基态能量 $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0$ 是零点能。对于激发态，存在一种量子，能量为 $\varepsilon = \hbar\omega$ ，当谐振

子处于第 n 个激发态上，意味着有 n 个量子被激发了。

n : 量子数，粒子数；

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

\hat{H} 和 \hat{N} 的共同表象：粒子数表象。

总结代数解法的思路：

束缚态 \rightarrow 分离谱 \rightarrow 寻找分离量子数的下降、上升算符。

粒子数表象是二次量子化方案的基础。

8) Casimir 效应

零点能有无观测效应？考虑量子电磁场的真空能量。

由 Planck 关于黑体辐射的研究，电磁场是各种频率 ω_k （能量 $\hbar\omega_k$ ）的简谐振动的集合。 k 是波数， $\omega_k = ck$ ， n 是能量为 $\hbar\omega_k$ 的光子的数目。电磁场的总能量是

$$E = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_k。$$

边界条件会影响频率的分布，即波数 k 的分布。

真空是无激发的态， $n=0$ ，真空能量

$$E = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \hbar\omega_k，$$

为无穷大。一般计算时将它作为激发的本底扣除掉。问题是它本身是否有可观测效应？

设在幅射电磁场中放入两块平行的板，面积为 L^2 ， L 足够大，距离为 $a \ll L$ 。边界条件对波数的限制是：在 a 方向的波数受到限制， $k_z = \frac{n\pi}{a}$ ，在横方向由于 L 很大，无限制。于是在

在两板之间的体积 L^2a 内的真空能量为

$$E(a) = \hbar c \int \frac{d^2k}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{k_{\perp}^2 + \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2}$$

其中 $d^2k / \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$ 是 \vec{k}_{\perp} 附近 $d\vec{k}_{\perp}$ 之内的态数目。

在 L^2a 体积内放入两块平行板前后真空能量的变化为

$$\begin{aligned} \Delta E(a) &= E(a) - E_0(a) \\ &= \hbar c \int \frac{d^2k}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{k_{\perp}^2 + \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} - \hbar c \int \frac{d^2k}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \int_0^{\infty} dn \sqrt{k_{\perp}^2 + \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2} \end{aligned}$$

这个变化使得两板之间每单位面积上的力

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

注意 $E(a)$ 与 $E_0(a)$ 都是发散的（真空分散），但 $\Delta E(a)$ 是有限的。经过计算（见一般量子力学教科书，例如苏汝铿和张永德的书），有

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

这个插入平行板后由于真空能量的变化（涨落）导致的吸引力以及与 a 的关系于 1958 年被实验观测到。这是真空能量导致的可观测效应。

9) Heisenberg 绘景中的力学量时间演化

忽略下标 H ，由 Heisenberg 绘景中的运动方程，有

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

解为

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

或者

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}(t) + \hat{a}^+(t)) = \hat{x}(0) \cos \omega t - \frac{1}{m\omega} \hat{p}(0) \sin \omega t, \\ \hat{p}(t) &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\hat{a}(t) - \hat{a}^+(t)) = \hat{p}(0) \cos \omega t + m\omega \hat{x}(0) \sin \omega t, \end{aligned}$$

虽然 $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$ 有振荡形式，但它们的平均值

$$\langle n | \hat{x}(t) | n \rangle = \langle n | \hat{x}(0) | n \rangle \cos \omega t - \frac{1}{m\omega} \langle n | \hat{p}(0) | n \rangle \sin \omega t = 0,$$

$$\langle n | \hat{p}(t) | n \rangle = \langle n | \hat{p}(0) | n \rangle \cos \omega t + m\omega \langle n | \hat{x}(0) | n \rangle \sin \omega t = 0$$

不随时间振荡。

4. 谐振子的相干态

在谐振子的能量本征态， \hat{x} , \hat{p} 的平均值等与零，没有呈现经典的振荡。但在能量本征态的线形组合态，例如

$$|a\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle,$$

在 Heisenberg 绘景计算平均值

$$\begin{aligned} \langle a|\hat{x}(t)|a\rangle &= (c_0^*\langle 0| + c_1^*\langle 1|)\hat{x}(t)(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) \\ &= c_0^*c_1\langle 0|\hat{x}(t)|1\rangle + c_1^*c_0\langle 1|\hat{x}(t)|0\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(c_0^*c_1e^{-i\omega t} + c_1^*c_0e^{i\omega t}) \end{aligned}$$

呈现振荡。能否找到这样的态，它最接近经典态的振荡，即 $\hat{x}(t)$ 的振荡？这就是下面要讨论的相干态 $|\alpha\rangle$ ，是下降算符的本征态，

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle,$$

注意：下降算符 \hat{a} 不是厄米算符，本征值 α 一般是复数。

1) 相干态满足最小不确定关系

由不确定关系

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

在相干态 $|\alpha\rangle$ ，

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

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

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

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

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

故相干态 $|\alpha\rangle$ 满足最小不确定关系，是最接近经典态的量子态。

2) 相干态的展开

将相干态 $|\alpha\rangle$ 按能量本征态展开,

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

$$c_n = \langle n|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\langle 0|(\hat{a}^+)^n \right) |\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle 0|((\hat{a})^n |\alpha\rangle) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0$$

$$|\alpha\rangle = c_0 \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

由 $|\alpha\rangle$ 的归一化,

$$1 = \langle \alpha|\alpha\rangle = \sum_n |c_n|^2 = |c_0|^2 \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2},$$

$$c_0 = e^{-|\alpha|^2/2},$$

故

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

3) 谐振子的基态是相干态

对应基态 $|0\rangle$, 有

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

故 $|0\rangle$ 是下降算符的本征态, 本征值 = 0。

4) 本征值的时间演化

在 Heisenberg 绘景,

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

$$\hat{a}(t)|\alpha\rangle = \hat{a}(0)e^{-i\omega t} |\alpha\rangle = \alpha e^{-i\omega t} |\alpha\rangle$$

故本征值 $\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$ 。

5. 坐标表象的 Schrodinger 方程与 WKB 近似

抽象态 $|\psi, t\rangle$,

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

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \bar{x} | \psi, t \rangle = \langle \bar{x} | \hat{H} | \psi, t \rangle = \int d\bar{x}' \langle \bar{x} | \hat{H} | \bar{x}' \rangle \langle \bar{x}' | \psi, t \rangle$$

设
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

因为
$$\langle \bar{x} | \hat{H} | \bar{x}' \rangle = \delta(\bar{x} - \bar{x}') \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\bar{x}) \right)$$

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

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

1) 定态 **Schroedinger** 方程

令
$$\psi(\bar{x}, t) = \varphi(\bar{x}) T(t)$$

代入 **Schroedinger** 方程，如果 \hat{H} 不含时间，**Schroedinger** 方程退耦为两个方程，其中关于 T 的方程的解有

$$T(t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}},$$

E 和 $\varphi(\bar{x})$ 由另一个方程，即能量本征方程确定，

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\bar{x}) \right) \varphi_E(\bar{x}) = E \varphi_E(\bar{x}),$$

定态

$$\psi_E(\bar{x}, t) = \varphi_E(\bar{x}) e^{-\frac{iEt}{\hbar}}.$$

对于束缚态，束缚条件

$$\lim_{|\bar{x}| \rightarrow \infty} \varphi_E(\bar{x}) \rightarrow 0$$

导致 E 为分离值。

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

$$\psi(\bar{x}, t) = \sum_E c_E \psi_E(\bar{x}, t).$$

2) 波函数的几率解释

单位时间单位体积内发现粒子的几率密度

$$\rho(\vec{x}, t) = \left| \langle \vec{x} | \psi(t) \rangle \right|^2 = |\psi(\vec{x}, t)|^2 = \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t),$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{x}, t) &= 0, \\ \vec{j}(\vec{x}, t) &= -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^*(\vec{x}, t) \nabla \psi(\vec{x}, t) - \psi(\vec{x}, t) \nabla \psi^*(\vec{x}, t)) \end{aligned}$$

\vec{j} 的物理意义是什么？将连续性方程对有限空间积分：

$$\begin{aligned} \int_V d^3\vec{r} \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \int_V d^3\vec{r} \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) &= 0, \\ \frac{d}{dt} \int_V d^3\vec{r} \rho(\vec{r}, t) &= - \int_S d\vec{S} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

定域几率守恒：区域 V 内几率的变化 = 流出面积 \vec{S} 的几率，故称 \vec{j} 为几率流密度。

若对整个空间积分：

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

故 $\int_{\infty} d^3\vec{r} \rho(\vec{r}, t)$ 与时间无关，是一常数。

意味着

- a) 总几率守恒，无粒子的产生与消灭，Schroedinger 方程描述的是非相对论量子力学；
- b) 若波函数是归一的，则归一化与时间无关。Schroedinger 方程保证了归一性不随时间而变化；
- c) 若 V 是复函数，几率不守恒，可以等效地描述粒子的产生与消灭。

3) 量子系统如何过渡到经典系统

算符在一般态无确定值，只有平均值有确定值，故量子力学中力学量的平均值与经典力学中的力学量相对应。

经典力学中力学量的运动方程

$$\frac{dO}{dt} = [O, H]_{\text{泊松括号}},$$

量子力学中力学量平均值的运动方程

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

向经典过渡时，任意两力学量都变得对易，对易关系 $[\hat{O}, \hat{H}] \rightarrow 0$ ，为了过渡到经典运动方

程，要求

$$\hbar \rightarrow 0,$$

此时

$$\frac{\langle [\hat{O}, \hat{H}] \rangle}{i\hbar} \rightarrow [O, H]_{\text{泊松括号}}。$$

4) 定态方程的 WKB 近似

可以严格求解的 Schrodinger 方程很少。将 Schrodinger 方程按照 \hbar 进行展开，逐级近似求解的方法称为 WKB 近似 (Wentzel, Kramers, Brillouin)。

定态波函数

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \equiv e^{\frac{i}{\hbar} s(\vec{r})} e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = e^{\frac{i}{\hbar} (s(\vec{r}) - E t)},$$

代入定态方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t) = E \psi(\vec{r}, t),$$

有

$$\frac{(\vec{\nabla} s)^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}) - E - \frac{i\hbar \vec{\nabla}^2 s}{2m} = 0。$$

将 $s(\vec{r})$ 按照 \hbar/i 展开，

$$s(\vec{r}) = s_0(\vec{r}) + \frac{\hbar}{i} s_1(\vec{r}) + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 s_2(\vec{r}) + \dots$$

代入，在方程两边取 \hbar 的相同幂次，有

$$\hbar^0: \quad (\vec{\nabla} s_0)^2 + 2m(V(\vec{r}) - E) = 0$$

$$\hbar^1: \quad \vec{\nabla} s_1 \cdot \vec{\nabla} s_0 + \frac{1}{2} \vec{\nabla}^2 s_0 = 0$$

.....

对于一维情形，解为

$$s_0(x) = \pm \int^x p(x') dx' + C$$

$$s_1(x) = -\ln \sqrt{p(x)} + \bar{C}$$

.....

$$\text{动量 } p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))}$$

精确到 \hbar^1 ,

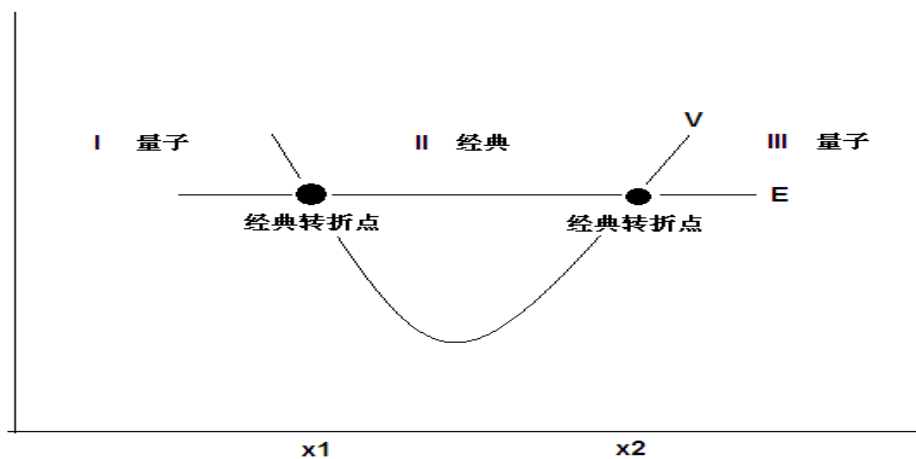
$$\begin{aligned}\psi_{II}(x) &= e^{\frac{i}{\hbar} \left(s_0(x) + \frac{\hbar}{i} s_1(x) \right)} \\ &= \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} e^{\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'} + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int^x p(x') dx'}\end{aligned}$$

显然, 解的成立条件是 $p(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} > 0$, 即 $E > V$ 。按照经典力学中能量 $E =$ 动能 $T +$ 势能 V , $E > V$ 表明是经典区间。

在非经典区间, 即 $E < V$ 区间, 有

$$\begin{aligned}p(x) &= i\tilde{p}(x) = i\sqrt{2m(V(x) - E)}, \\ \psi_{I,III}(x) &= \frac{C_3}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int^x \tilde{p}(x') dx'} + \frac{C_4}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int^x \tilde{p}(x') dx'}\end{aligned}$$

在 $E = V$, 动量 $p=0$, 解是发散的, WKB 近似不能用了。 $E - V(x) = 0 \rightarrow x_0$ 称为经典转折点。如何求解 x_0 附近的解?



在 x_0 附近将 $V(x)$ 展开至线性项,

$$V(x) \approx V(x_0) + \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x_0} (x - x_0)$$

代入定态 Schrodinger 方程, 有

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} \frac{dV}{dx_0} (x - x_0) = 0,$$

求其精确解，是 $\pm 1/3$ 阶的 **Bessel** 函数。然后考虑 **Bessel** 函数在 $|x-x_0|$ 较大时的渐近解，并要求与 x_0 左右两边的经典区间解和非经典区间解连续。这样可以把经典期间解和非经典区间解中的常数 C_1, C_2, C_3, C_4 确定下来。

6. Feynman 路径积分

1) Schrodinger 绘景中的传播子

将态的时间演化

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

进入坐标表象

$$\begin{aligned} \langle \bar{x}'' | \psi, t \rangle &= \langle \bar{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} | \psi, t_0 \rangle \\ &= \int d^3 \bar{x}' \langle \bar{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} | \bar{x}' \rangle \langle \bar{x}' | \psi, t_0 \rangle \end{aligned}$$

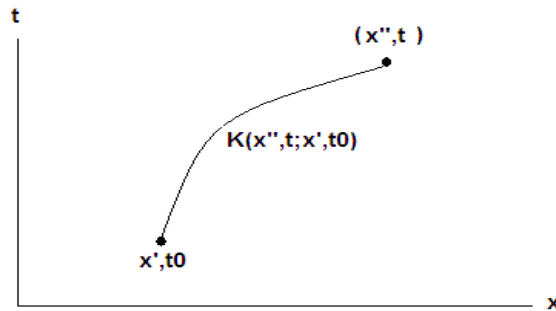
定义演化算符的矩阵元

$$K(\bar{x}'', t; \bar{x}', t_0) = \langle \bar{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} | \bar{x}' \rangle,$$

有

$$\psi(\bar{x}'', t) = \int d^3 \bar{x}' K(\bar{x}'', t; \bar{x}', t_0) \psi(\bar{x}', t_0),$$

说明 $K(\bar{x}'', t; \bar{x}', t_0)$ 是传播子，将时空中的初态波函数 $\psi(\bar{x}', t_0)$ 传播到末态波函数 $\psi(\bar{x}'', t)$ 。积分意味着初态所有可能的空间位置都对末态有贡献。



考虑到上述推导中已暗含 $t > t_0$ ，故传播子的严格定义是

$$K(\bar{x}'', t; \bar{x}', t_0) = \langle \bar{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} | \bar{x}' \rangle \theta(t-t_0),$$

由于

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(\bar{x}'', t; \bar{x}', t_0) &= \langle \bar{x}'' | \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} | \bar{x}' \rangle \theta(t-t_0) + i\hbar \langle \bar{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} | \bar{x}' \rangle \delta(t-t_0) \\ &= \int d^3 \bar{x} \langle \bar{x}'' | \hat{H} | \bar{x} \rangle \langle \bar{x} | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} | \bar{x}' \rangle \theta(t-t_0) + i\hbar \langle \bar{x}'' | \bar{x}' \rangle \delta(t-t_0), \\ &= \int d^3 \bar{x} \hat{H}(\bar{x}) \delta(\bar{x}'' - \bar{x}) K(\bar{x}, t; \bar{x}', t_0) + i\hbar \langle \bar{x}'' | \bar{x}' \rangle \delta(t-t_0) \\ &= \hat{H}(\bar{x}'') K(\bar{x}'', t; \bar{x}', t_0) + i\hbar \delta(\bar{x}'' - \bar{x}') \delta(t-t_0) \end{aligned}$$

即

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}(\bar{x}'') \right) K(\bar{x}'', t; \bar{x}', t_0) = i\hbar \delta(\bar{x}'' - \bar{x}') \delta(t - t_0) .$$

注意到

$$\begin{aligned} \int d^3 \bar{x} K(\bar{x}'', t; \bar{x}', 0) &= \int d^3 \bar{x}' \langle \bar{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} | \bar{x}' \rangle \\ &= \sum_E \int d^3 \bar{x}' \langle \bar{x}'' | E \rangle \langle E | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} | \bar{x}' \rangle \\ &= \sum_E \int d^3 \bar{x}' \langle E | x' \rangle \langle x' | E \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \\ &= \sum_E e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \\ &\stackrel{i\hbar \rightarrow 1/T}{=} \text{配分函数 } Z = \sum_E e^{-E/T} \end{aligned}$$

表明虚时封闭传播子与统计热力学的关系。

例 1: 求一维自由粒子的传播子

$$\begin{aligned} K(x'', t; x', t_0) &= \langle x'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | x' \rangle \\ &= \int dp \langle x'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | p \rangle \langle p | x' \rangle \\ &= \int dp \langle x'' | p \rangle \langle p | x' \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m}(t-t_0)} \\ &= \int dp e^{\frac{i}{\hbar} \left[p(x''-x') - \frac{p^2}{2m}(t-t_0) \right]} = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t-t_0)}} e^{\frac{im(x''-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}} \end{aligned}$$

知道了这个传播子，初始时刻的平面波（定态） $\psi(x', t_0) = \frac{1}{2\pi} e^{\frac{i}{\hbar} \left(px' - \frac{p^2}{2m} t_0 \right)}$ 的时间演化

$$\psi(x'', t) = \int dx' K(x'', t; x', t_0) \psi(x', t_0) ,$$

是一个波包。

例 2: 求一维线性谐振子的传播子

$$\begin{aligned} K(\bar{x}'', t; \bar{x}', t_0) &= \langle \bar{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \bar{x}' \rangle \\ &= \sum_n \langle \bar{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | n \rangle \langle n | \bar{x}' \rangle , \\ &= \sum_n \psi_n(x'') \psi_n^*(x') e^{-\frac{i}{\hbar} E_n(t-t_0)} \end{aligned}$$

$E_n, \psi_n(x)$ 分别是谐振子的能级和坐标表象中的波函数。

2) Heisenberg 绘景中的跃迁振幅

在 Heisenberg 绘景, 传播子

$$\begin{aligned} K(\bar{x}''; t; \bar{x}', t_0) &= \langle \bar{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} | \bar{x}' \rangle \\ &= \left(\langle \bar{x}'' | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t} \right) \left(e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t_0} | \bar{x}' \rangle \right) \\ &= \left(\langle \bar{x}'' | \hat{U}(t, 0) \right) \left(\hat{U}^+(t_0, 0) | \bar{x}' \rangle \right) = \langle \bar{x}'', t | \bar{x}', t_0 \rangle \end{aligned}$$

是 t_0 时的坐标本征态 $|\bar{x}', t_0\rangle$ 跃迁到 t 时刻的坐标本征态 $|\bar{x}'', t\rangle$ 的振幅, 故传播子也叫跃迁振幅。

由完备性条件(注意, Heisenberg 绘景中算符本征态的完备性条件是在同一时刻),

$$\int d^3 \bar{x} |\bar{x}, t\rangle \langle \bar{x}, t| = 1,$$

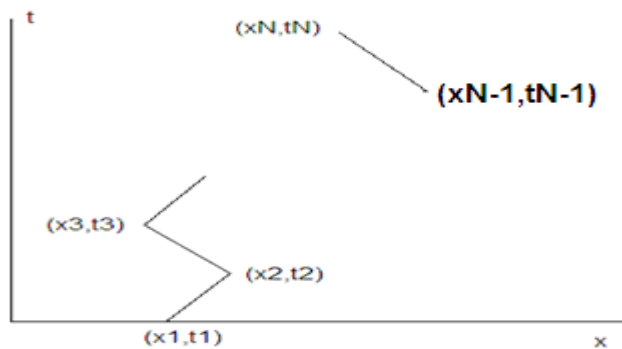
$$\begin{aligned} K(\bar{x}_3, t_3; \bar{x}_1, t_1) &= \langle \bar{x}_3, t_3 | \bar{x}_1, t_1 \rangle \\ &= \int d^3 \bar{x}_2 \langle \bar{x}_3, t_3 | \bar{x}_2, t_2 \rangle \langle \bar{x}_2, t_2 | \bar{x}_1, t_1 \rangle \\ &= \int d^3 \bar{x}_2 K(\bar{x}_3, t_3; \bar{x}_2, t_2) K(\bar{x}_2, t_2; \bar{x}_1, t_1), \quad t_3 > t_2 > t_1 \end{aligned}$$

这是传播子的相乘性, 从 (\bar{x}_1, t_1) 传播到 (\bar{x}_3, t_3) 等于从 (\bar{x}_1, t_1) 传播到 (\bar{x}_2, t_2) 再传播到 (\bar{x}_3, t_3) 。

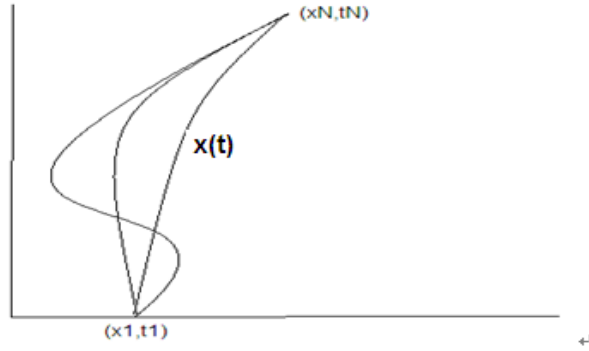
为简单起见, 只考虑一维情况。将初始时刻到末态时刻的时间 $t_N - t_1$ 等分

$$dt = \frac{t_N - t_1}{N-1},$$

$$\begin{aligned} K(x_N, t_N; x_1, t_1) &= \\ \int dx_{N-1} dx_{N-2} \dots dx_2 & K(x_N, t_N; x_{N-1}, t_{N-1}) K(x_{N-1}, t_{N-1}; x_{N-2}, t_{N-2}) \dots K(x_2, t_2; x_1, t_1), \end{aligned}$$



当 $N \rightarrow \infty$ 时, 即 $dt \rightarrow 0$ 时, 多重积分转变成对路径的求和。



与量子力学中所有路径都对时空演化有贡献不一样，经典力学中确定的初末态之间只有一条唯一的路径，由最小作用量确定。

例如，对于自由落体运动，唯一的路径就是

$$x = h - \frac{1}{2}gt^2,$$

h 是高度， g 是重力加速度。

3) 路径积分

Feynman 路径积分理论的基本假定：波函数从 (x_1, t_1) 传播到 (x_N, t_N) 的几率幅是所有可能路径 $x(t)$ 的贡献之和，

$$K(x_N, t_N; x_1, t_1) = c \int_{x_1}^{x_N} [dx(t)] e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]} = c \int_{x_1}^{x_N} [dx(t)] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_N} L_c(x, \dot{x}) dt}$$

其中每条路径对几率幅的贡献 = $c e^{\frac{i}{\hbar} S[x(t)]}$ ，

$$\text{作用量 } S[x(t)] = \int_{t_1}^{t_N} L_c(x, \dot{x}) dt,$$

$$\text{经典作用量 } L_c = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(\bar{x}).$$

如果将路径积分还原成多重积分形式，令 $dt = \frac{t_N - t_1}{N}$ ，

$$K(x_N, t_N; x_1, t_1) = c \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_{N-1} dx_{N-2} \dots dx_2 e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^N L_c(x_n, \dot{x}_n) dt}.$$

当 L_c 是 x 的二次型时，路径积分为高斯型，严格可积。比如自由粒子，

$$L_c = \frac{1}{2} m \dot{x}^2,$$

$$L_c(x_n, \dot{x}_n) dt = \frac{1}{2} m \left(\frac{x_n - x_{n-1}}{dt} \right)^2 dt = \frac{m}{2dt} (x_n - x_{n-1})^2$$

$$K(x_N, t_N; x_1, t_1) = c \lim_{N \rightarrow \infty} \int dx_{N-1} dx_{N-2} \dots dx_2 e^{\frac{im}{2\hbar dt} \sum_{n=2}^N (x_n - x_{n-1})^2} = c e^{\frac{im(x_N - x_1)^2}{2\hbar(t_N - t_1)}},$$

由坐标本征态的正交归一化条件

$$\lim_{t_N \rightarrow t_1} K(x_N, t_N; x_1, t_1) = \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \delta(x_N - x_1),$$

$$K(x_N, t_N; x_1, t_1) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar(t_N - t_1)}} e^{\frac{im(x_N - x_1)^2}{2\hbar(t_N - t_1)}},$$

与在 **Schroedinger** 绘景的计算结果一样。

再比如谐振子，

$$L_c = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2,$$

高斯积分后，有

$$K(x_N, t_N; x_1, t_1) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin[\omega(t_N - t_1)]}} e^{\frac{im\omega}{2\hbar \sin[\omega(t_N - t_1)]} [(x_1^2 + x_N^2) \cos[\omega(t_N - t_1)] - 2x_1 x_N]}.$$

讨论：

(1) 每条路径贡献的相因子都不同。对于经典体系，经典路径对应的最小作用量 S_{cl} 就远比 \hbar 大，那么经典路径周围的其它路径的作用量更大，其贡献会随路径而剧烈振荡，以致相互抵销，只留下最小作用量的贡献。

(2) 只有高斯型路径积分是可积的。

(3) **Schroedinger** 绘景中的几率幅是状态的跃迁，而 **Feynman** 路径积分中，几率幅与粒子的运动过程，即路径联系。可以证明，**Feynman** 路径积分理论等价于 **Schroedinger** 方程，见 P122。

(4) 路径积分的优点是与经典力学的差别显而易见，容易理解，不用引入算符等 **Q** 数，完全在 **C** 数范围内计算。路径积分在非相对论量子力学中处理问题较麻烦，但在规范场论中有重要作用。

7. 规范变换

1) 常数势差导致的量子相干性

经典力学中， $\vec{F} = -\nabla V(\vec{x})$ ，将势加上一个与空间无关的常数后不带来任何效用。

在量子力学中，设粒子在势场 $V_1(\vec{x})$ 中运动，初态 $|\alpha, t_0\rangle$ 的演化为

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

如果粒子在势场 $V_2(\vec{x}, t) = V_1(\vec{x}) + \Delta V(t)$ 中运动，初态 $|\alpha, t_0\rangle$ 的演化为

$$|\alpha, t\rangle_2 = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t dt' \Delta V(t')} |\alpha, t_0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t dt' \Delta V(t')} |\alpha, t\rangle_1$$

两个态之间的差别是一个相因子 $e^{i(\varphi_2 - \varphi_1)}$ ，

$$\varphi_2 - \varphi_1 = -\frac{1}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \Delta V(t') \xrightarrow{\text{时间常数势差}} -\frac{1}{\hbar} \Delta V(t - t_0)$$

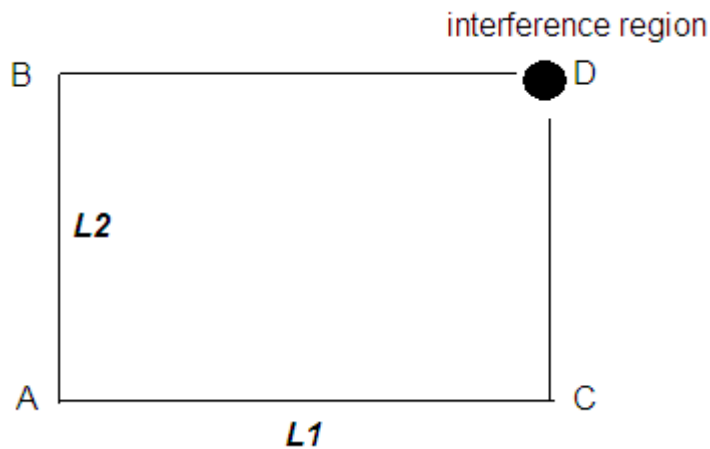
似乎不带来可测量性结果。但如果考虑这两个波函数的相干，相位差 $(\varphi_2 - \varphi_1)$ 决定会导致相干项 $\cos(\varphi_2 - \varphi_1)$ ，产生观测性。

2) 重力势差导致的量子相干性

考虑热中子（不带电）在重力场中的运动。

在 A 处把中子分成两束，一束经 AC 和 CD 到达点 D，另一束经 AB 和 BD 到达点 D。

如果框 ABCD 平行于地面，则中子在两条路径上感受到的重力势相同，在 D 处无相干现象。



如果以 AC 为轴将框向上转一角度 δ ，则粒子在 BD 部分相比 AC 部分有一常数势差

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

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

$$\varphi_{ABD} - \varphi_{ACD} = -\frac{m}{\hbar} gl_2 T \sin \delta ,$$

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

$$T = l_1 m \lambda / \hbar ,$$

$$\varphi_{ABD} - \varphi_{ACD} = -\left(\frac{m}{\hbar}\right)^2 gl_1 l_2 \lambda \sin \delta .$$

当角度 δ 变化时，相干项 $\cos(\varphi_{ABD} - \varphi_{ACD})$ 会随之产生振荡。实验确实发现了这种振荡，见图 2.6。

以上讨论表明，空间均匀的势差虽然不改变力，但导致量子相干效应。

3) 电磁学中的规范变换

标势与矢势 $\varphi(\vec{x}, t), \vec{A}(\vec{x}, t),$

场强 $\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \vec{B} = \nabla \times \vec{A}.$

由经典电动力学的哈密顿量，量子力学中带电粒子在电磁场中运动的哈密顿算符

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c} \vec{A}\right)^2}{2m} + e\varphi, \quad \text{其中 } \varphi = \varphi(\hat{\vec{x}}, t), \vec{A} = \vec{A}(\hat{\vec{x}}, t).$$

利用基本对易关系

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

有

$$\left[\left(\hat{p}_i - \frac{e}{c} A_i \right), \left(\hat{p}_j - \frac{e}{c} A_j \right) \right] = \frac{i\hbar e}{c} \varepsilon_{ijk} B_k,$$

Heisenberg 绘景中的运动方程为

$$\begin{aligned}
\frac{d\hat{x}_i}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}_i, \hat{H}] \\
&= \frac{1}{2mi\hbar} \left[\hat{x}_i, \left(\hat{p}_j - \frac{e}{c} A_j \right) \left(\hat{p}_j - \frac{e}{c} A_j \right) \right] \\
&= \frac{1}{m} \left(\hat{p}_i - \frac{e}{c} A_i \right), \\
m \frac{d^2 \hat{x}_i}{dt^2} &= \frac{d}{dt} \left(\hat{p}_i - \frac{e}{c} A_i \right) \\
&= \frac{1}{i\hbar} \left[\left(\hat{p}_i - \frac{e}{c} A_i \right), \hat{H} \right] \\
&= \frac{e}{2mc} \varepsilon_{ijk} \left(\hat{p}_j - \frac{e}{c} A_j \right) B_k - \frac{e}{2mc} \varepsilon_{ijk} B_j \left(\hat{p}_k - \frac{e}{c} A_k \right) + \frac{e}{i\hbar} \frac{\partial \varphi}{\partial \hat{x}_i}, \\
m \frac{d^2 \hat{\vec{x}}}{dt^2} &= e \left[\vec{E} + \frac{1}{2c} \left(\frac{d\hat{\vec{x}}}{dt} \times \vec{B} - \vec{B} \times \frac{d\hat{\vec{x}}}{dt} \right) \right]
\end{aligned}$$

此即 Heisenberg 绘景中的 Ehrenfest 定理。注意， $\hat{\vec{x}}$ 与 $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ 不对易。

在 Schroedinger 绘景中的坐标表象，有 Schroedinger 方程

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

连续性方程

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

$$\rho(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2,$$

$$\vec{j}(\vec{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[\psi^*(\vec{x}, t) \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}(\vec{x}) \right) \psi(\vec{x}, t) \right]$$

将势进行变换，

$$\varphi(\vec{x}, t) \rightarrow \varphi(\vec{x}, t) \text{ 保持不变}, \quad \vec{A}(\vec{x}, t) \rightarrow \vec{A}(\vec{x}, t) + \nabla \Lambda(\vec{x}),$$

其中 $\Lambda(\vec{x})$ 为任意标量函数。显然，在此变换下，场强 $\vec{E} = -\nabla \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ ， $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ 保持不

变。称这类势变化而场强不变的变换为规范变换，不同的 $\Lambda(\vec{x})$ 称为不同的规范。

设势 $\varphi(\hat{x}, t)$, $\vec{A}(\hat{x}, t)$ 对应的态为 $|\psi, t\rangle_1$, 势 $\varphi(\hat{x}, t)$, $\vec{A}(\hat{x}, t) + \nabla\Lambda(\hat{x})$ 对应的态为 $|\psi, t\rangle_2$, 各自满足 Schrodinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle_1 = \left[\frac{\left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{x}) \right)^2}{2m} + e\varphi(\hat{x}) \right] |\psi, t\rangle_1,$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t\rangle_2 = \left[\frac{\left(\hat{p} - \frac{e}{c} (\vec{A}(\hat{x}) + \nabla\Lambda(\hat{x})) \right)^2}{2m} + e\varphi(\hat{x}) \right] |\psi, t\rangle_2,$$

如果令

$$|\psi, t\rangle_2 = e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(\hat{x})} |\psi, t\rangle_1,$$

由于

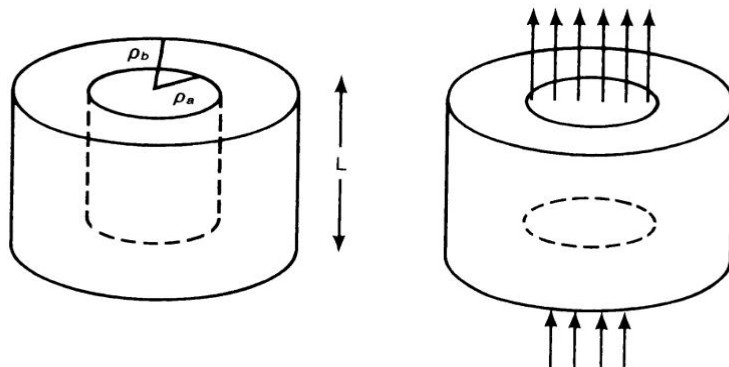
$$e^{-\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(\hat{x})} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} (\vec{A}(\hat{x}, t) + \nabla\Lambda(\hat{x})) \right) e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(\hat{x})} = \hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A}(\hat{x}, t),$$

容易证明上述两个 Schrodinger 方程是自洽的。表明，在规范变化下，两个态只相差一个

相因子 $|\psi, t\rangle \rightarrow e^{\frac{ie}{\hbar c} \Lambda(\hat{x})} |\psi, t\rangle$ 。

规范变换有无可测量的量子效应？

4) AB 效应(Aharonov-Bohm)



如图，半径为 ρ_a 和 ρ_b 构成的长的空心圆柱壳。粒子在 $\rho_a < \rho < \rho_b$ 的壳中运动，不能运动到 $\rho < \rho_a$ 和 $\rho > \rho_b$ 的空间。波函数在 $\rho = \rho_a$ 和 $\rho = \rho_b$ 处为零，是一个束缚态问题。

现在中间空心处放一个长的螺线管，使得产生的磁场限制在管内，保证管外的磁场为零。假设

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

考虑到在柱坐标系中

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = \frac{1}{\rho} \begin{vmatrix} \vec{e}_\rho & \rho\vec{e}_\varphi & \vec{e}_z \\ \frac{\partial}{\partial \rho} & \frac{\partial}{\partial \varphi} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_\rho & \rho A_\varphi & A_z \end{vmatrix},$$

有

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

在 $\rho < \rho_a$ 的区间放一个磁场，则在 $\rho_a < \rho < \rho_b$ 的区间进行了一个规范变换：由 $\vec{A} = 0$ 到 $\vec{A} \neq 0$ ，但该区的磁场 $\vec{B} = 0$ 没变化。

定态 Schrodinger 方程为

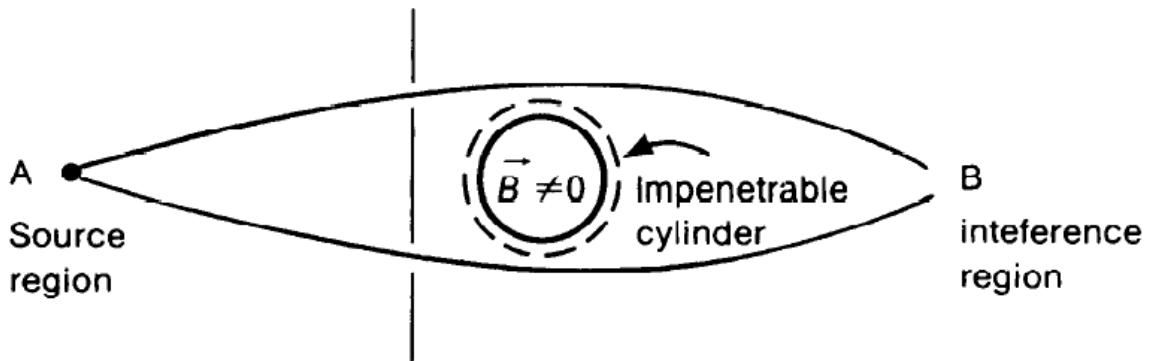
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\hat{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\vec{e}_\rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{ieB\rho_a^2}{2\hbar c} \right) + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right]^2 \psi = E\psi, \quad \rho_a < \rho < \rho_b$$

显然，磁场项会改变粒子的束缚能级 E 。重要的是，磁场 \vec{B} 并不出现在粒子的运动区间，但势 \vec{A} 出现在粒子的运动区间。可见，在经典力学中，带电粒子的运动由场强 \vec{E} 和 \vec{B} 确定，而在量子力学中，只有势场而无场强也对体系的性质有影响，这是单纯的量子效应。

以上是 AB 效应对束缚态问题的影响。

现在用路径积分来考虑 AB 效应本身。带电粒子从点 A 出发经屏上的两个缝到达点 B，在 B 处发生干涉现象。屏后两缝之间有一长螺旋管，管内有磁场 \vec{B} ，管外无磁场。对于经

典系统，管内的磁场不会对 B 处的干涉产生影响。



对于量子力学系统，管外虽然无磁场，但势 $\vec{A} \neq 0$ 。路径积分中的作用量

$$\begin{aligned}
 S(\vec{x}(t)) &= \int_{t_A}^{t_B} dt \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 \\
 &\approx \int_{t_A}^{t_B} dt \left[\frac{m}{2} \left(\frac{d\vec{x}}{dt} \right)^2 - \frac{e}{c} \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{A} \right] \\
 &= S_0(\vec{x}(t)) - \frac{e}{c} \int_{t_A}^{t_B} dt \frac{d\vec{x}}{dt} \cdot \vec{A} \\
 &= S_0(\vec{x}(t)) - \frac{e}{c} \int_{x_A}^{x_B} \vec{A} \cdot d\vec{x},
 \end{aligned}$$

已略去 \vec{A}^2 项。对于任意一条螺线管以上的路径和任意一条螺线管以下的路径，对几率幅的贡献 $K(x_B, t_B; x_A, t_A)$ 是

$$e^{-\frac{ie}{\hbar c} \int_{x_A, above}^{x_B} \vec{A} \cdot d\vec{x}} e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\vec{x}(t))} + e^{-\frac{ie}{\hbar c} \int_{x_A, below}^{x_B} \vec{A} \cdot d\vec{x}} e^{\frac{i}{\hbar} S_0(\vec{x}(t))},$$

存在一个影响干涉条纹的相对相因子

$$\begin{aligned}
 \frac{e}{\hbar c} \left[\int_{x_1, above}^{x_2} \vec{A} \cdot d\vec{x} - \int_{x_1, below}^{x_2} \vec{A} \cdot d\vec{x} \right] &= \frac{e}{\hbar c} \oint \vec{A} \cdot d\vec{x} \\
 &= \frac{e}{\hbar c} \int (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{s} = \frac{e}{\hbar c} \int \vec{B} \cdot d\vec{s} = \frac{e}{\hbar c} B \pi R^2
 \end{aligned}$$

与路径无关，此处用到了 Stokes 定理。

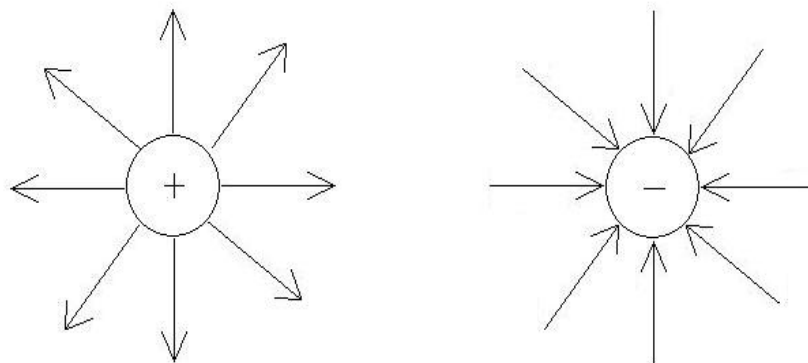
AB 效应表明，在量子力学中，虽然场强为零，只要势不为零，也会影响粒子的干涉。

5) 磁单极

在经典电磁场中，静磁场与静电场完全不对称。静电场有源无旋，满足

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

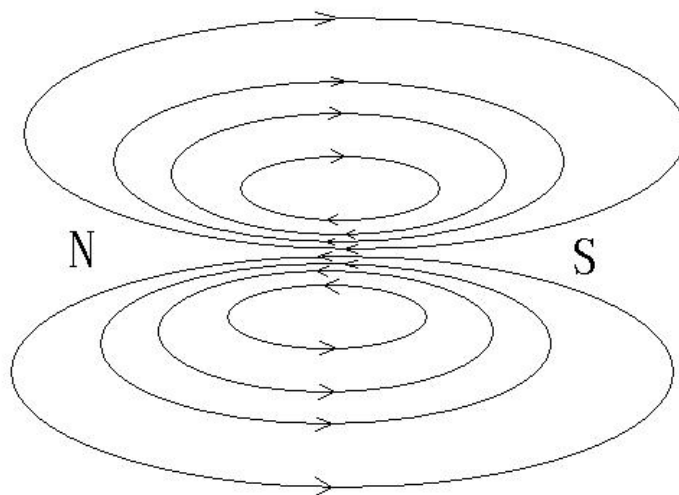
电力线分布（单电荷结构）:



静磁场无源有旋，满足

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

磁力线分布（Dipole 结构）:



问题：是否也存在单独的磁荷，即磁单极（Monopole 结构）？

Dirac 弦

如果在原点存在单个的磁荷 e_m ，则它所产生的静磁场满足

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

其解为

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

能否找到一个矢势 $\vec{A}(\vec{r})$ ，使得原来的关系 $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ 仍然成立？回答是不可能的。

证明：如果

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A},$$

则必有

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) = 0,$$

破坏了

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

另外，由高斯定理，在围绕磁荷的封闭面上，有

$$\int \vec{B} \cdot d\vec{S} = 4\pi e_m,$$

但如果有 $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ ，则

$$\int \vec{B} \cdot d\vec{S} = \int (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot d\vec{S} = \int \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) \cdot dV = 0,$$

破坏高斯定理。故不可能存在一个单一的矢势 $\vec{A}(\vec{r})$ ，产生 $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ 。

例如，在球坐标系中，设

$$\vec{A} = e_m \frac{1 - \cos \theta}{r \sin \theta} \vec{e}_\varphi,$$

在 $\theta < \pi - \varepsilon$ (ε 是无限小量)，由

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{A} &= \left(\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (A_\varphi \sin \theta) - \frac{\partial A_\theta}{\partial \varphi} \right) \vec{e}_r + \frac{1}{r} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial A_r}{\partial \varphi} - \frac{\partial}{\partial r} (r A_\varphi) \right) \vec{e}_\theta + \frac{1}{r} \left(\frac{\partial}{\partial r} (r A_\theta) - \frac{\partial A_r}{\partial \theta} \right) \vec{e}_\varphi \\ &= \frac{e_m}{r^2} \vec{e}_r = \vec{B} \end{aligned}$$

但在 $\theta = \pi$ 时， \vec{A} 发散。即在负 z 轴上存在一条奇异弦，称为 Dirac 弦。此时，

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{e_m}{r^2} \vec{e}_r + 4\pi e_m \delta(x) \delta(y) \vec{e}_z \neq \vec{B}.$$

电荷量子化

虽然不能在全空间有满足 $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ 的 \vec{A} ，但可以分区间找到满足要求的 \vec{A} 。例如取

$$\begin{aligned}\vec{A}_I &= e_m \frac{1 - \cos \theta}{r \sin \theta} \vec{e}_\varphi, & \theta < \pi - \varepsilon \\ \vec{A}_{II} &= -e_m \frac{1 + \cos \theta}{r \sin \theta} \vec{e}_\varphi, & \theta > \varepsilon\end{aligned}$$

\vec{A}_I 在 $\theta = \pi$ 处发散, \vec{A}_{II} 在 $\theta = 0$ 处发散。对于这样选取的 \vec{A} , 有

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

在两个势的重叠区域, 由于两个势导致相同的磁场 \vec{B} , 它们之间必能通过一个规范变换 Λ 连接起来,

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

在球坐标系中,

$$\vec{\nabla} \Lambda = \frac{\partial \Lambda}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial \Lambda}{\partial \theta} \vec{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \Lambda}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi,$$

有

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

考虑一个带电荷 e 的粒子在磁单极产生的磁场中运动, 对应势 \vec{A}_I, \vec{A}_{II} 的波函数 ψ_I, ψ_{II} 在在两个势的重叠区域有关系

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

由于波函数的单值性, ψ_{II} 在重叠区域必须满足单值条件。例如在 $\theta = \pi/2$,

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

即

$$\frac{2ee_m}{\hbar c} = \pm n, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

即电荷量子化

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

存在最小电荷单元

$$\frac{\hbar c}{2e_m}$$

注意：量子力学并不要求（导致）磁单极。但是如果有磁单极，则必有电荷量子化，存在最小电荷单元。

第三章：角动量理论

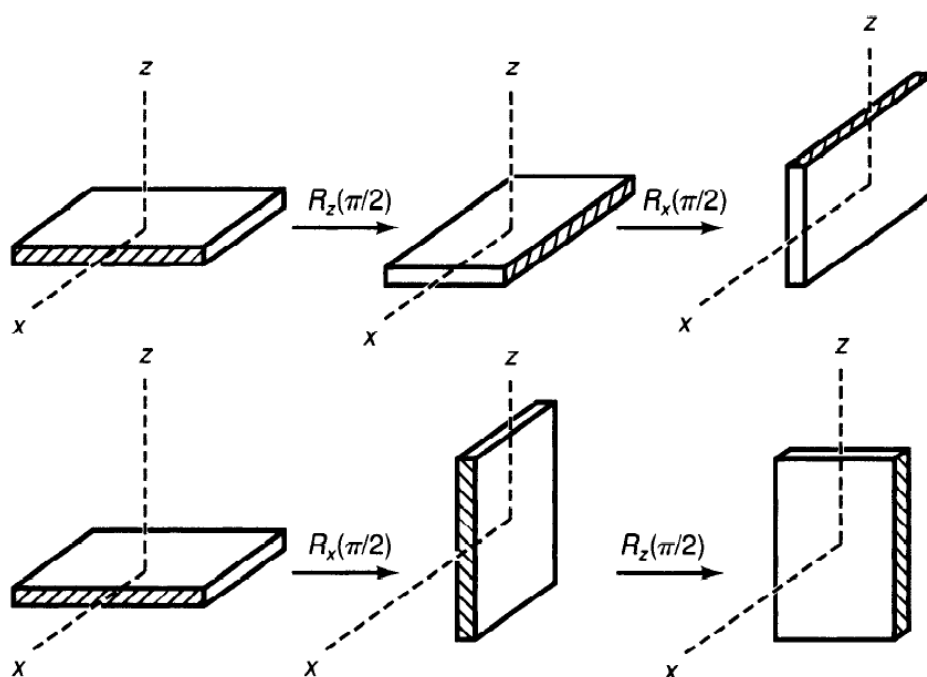
1. 旋转与角动量

旋转与角动量在量子力学中具有独特的地位。

1) 经典转动

绕同一轴的两个转动是对易的。例如绕 Z 轴先转 30 度再转 60 度和先转 60 度再转 30 度是完全相同的。

但是，绕不同轴的两个转动是不对易的。如图所示，先绕 Z 轴逆时针转动 90 度再绕 X 轴转动 90 度，与先绕 X 轴转动 90 度再绕 Z 轴转动 90 度的结果不相同。



3 维矢量 $\vec{V} = V_x \vec{e}_x + V_y \vec{e}_y + V_z \vec{e}_z$ 经转动 $R(\varphi)$ 后变为 $\vec{V}' = V'_x \vec{e}_x + V'_y \vec{e}_y + V'_z \vec{e}_z$ ，写成矩阵形式为

$$\vec{V}' = R(\varphi)\vec{V},$$

$R(\varphi)$ 是一 3×3 的矩阵。显然转动前后矢量的模不改变，

$$|\vec{V}'| = |\vec{V}|。$$

容易得到绕 Z 轴转动角 φ 的转动矩阵

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

对于无限小转动 ε ，

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

这里已经略去高于 ε^2 的项。类似有

$$R_x(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix}， \quad R_y(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} & 0 & \varepsilon \\ 0 & 1 & 0 \\ -\varepsilon & 0 & 1 - \frac{\varepsilon^2}{2} \end{pmatrix}。$$

显然，

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

上式表明的就是绕 X 轴和绕 Y 轴的转动是不对易的。

一般有

$$R_i(\varepsilon)R_j(\varepsilon) - R_j(\varepsilon)R_i(\varepsilon) = \varepsilon_{ijk} (R_k(\varepsilon^2) - 1_k)。$$

2) 量子转动

设与经典转动矩阵 $R(\varphi)$ 相应的量子转动算符为 $\hat{D}(\varphi)$ ，

$$|\alpha\rangle_\varphi = \hat{D}(\varphi)|\alpha\rangle，$$

它的表示是一个矩阵 $D(\varphi)$ 。

先讨论转动算符 $\hat{D}(\varphi)$ 的一般性质。对于无限小空间平移算符，其生成元是动量算符，

$$\hat{T}(d\vec{x}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{\vec{p}} \cdot d\vec{x} \simeq e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\vec{p}} \cdot d\vec{x}},$$

空间平移不变意味动量守恒。对于无限小时间演化算符，其生成元是哈密顿算符，

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

时间平移不变意味能量守恒。对于转动，由经典力学，知其生成元是对应的守恒力学量——

角动量。设在量子力学中，角动量算符 $\hat{\vec{J}}$ 是转动算符 $\hat{D}(\varphi)$ 的生产元。对于绕 \vec{e}_n 方向的无限小转动 $d\varphi$ ，

$$\hat{D}(d\varphi) = 1 - \frac{i}{\hbar} \hat{\vec{J}} \cdot \vec{e}_n d\varphi \simeq e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\vec{J}} \cdot \vec{e}_n d\varphi}.$$

考虑到绕同一轴的转动是可对易的，有限的转动可以看成是很多无限小转动，故对于有限的转动 φ 有

$$\hat{D}(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{\vec{J}} \cdot \vec{e}_n \varphi}.$$

设量子力学中的 \hat{D} 与经典力学中的 \mathbf{R} 满足相同的对易关系，

$$[\hat{D}_i(\varepsilon), \hat{D}_j(\varepsilon)] = \varepsilon_{ijk} \hat{D}_k(\varepsilon^2) - 1,$$

保留到 ε^2 级，有

$$\left[\left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_i \varepsilon - \frac{\hat{J}_i^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2} \right), \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_j \varepsilon - \frac{\hat{J}_j^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2} \right) \right] = \varepsilon_{ijk} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{J}_k \varepsilon^2 \right) - 1,$$

即

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

或者，

$$\hat{\vec{J}} \times \hat{\vec{J}} = i\hbar \hat{\vec{J}}.$$

这是量子力学中角动量的基本对易关系。

3) 角动量的平均值

设绕 Z 轴转动 φ ，态的改变，

$$|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha\rangle_\varphi = \hat{D}_z(\varphi)|\alpha\rangle = e^{-\frac{i\hat{J}_z\varphi}{\hbar}}|\alpha\rangle,$$

平均值 $\langle \hat{J}_x \rangle$ 的改变

$$\langle \hat{J}_x \rangle_0 = \langle \alpha | \hat{J}_x | \alpha \rangle \rightarrow \langle \hat{J}_x \rangle_\varphi = {}_\varphi \langle \alpha | \hat{J}_x | \alpha \rangle_\varphi = \langle \alpha | e^{\frac{i\hat{J}_z\varphi}{\hbar}} \hat{J}_x e^{-\frac{i\hat{J}_z\varphi}{\hbar}} | \alpha \rangle,$$

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

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

有

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

故

$$\langle \hat{J}_x \rangle_\varphi = \langle \hat{J}_x \rangle_0 \cos\varphi - \langle \hat{J}_y \rangle_0 \sin\varphi,$$

类似，

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}_y \rangle_\varphi &= \langle \hat{J}_y \rangle_0 \cos\varphi + \langle \hat{J}_x \rangle_0 \sin\varphi, \\ \langle \hat{J}_z \rangle_\varphi &= \langle \hat{J}_z \rangle_0. \end{aligned}$$

如果把 $\langle \hat{J}_x \rangle, \langle \hat{J}_y \rangle, \langle \hat{J}_z \rangle$ 看成是一个矢量 $\langle \hat{J} \rangle$ 的 3 个分量，有

$$\langle \hat{J} \rangle_\varphi = R_z(\varphi) \langle \hat{J} \rangle_0.$$

满足经典力学中力学量矢量的变化关系。

2. 自旋角动量

1) 自旋进动 (转动算符与时间演化算符的关系)

前面讨论过绕 Z 轴的自旋进动的的时间演化。在粒子自身坐标系中, 无动能, 只有自旋与外磁场的相互作用,

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

设初态($t=0$)处于 \hat{s}_x 的本征态 $|s_x^+\rangle$, 则任意时刻 t 的平均值

$$\langle \hat{s}_x \rangle_t = \frac{\hbar}{2} \cos \omega t, \quad \langle \hat{s}_y \rangle_t = \frac{\hbar}{2} \sin \omega t, \quad \langle \hat{s}_z \rangle_t = 0 \quad .$$

比较时间演化算符 $\hat{U}(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \omega \hat{s}_z t}$ 与自旋绕 Z 轴的转动算符 $\hat{D}_z(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{s}_z \varphi}$, 如令

$$\varphi = \omega t,$$

φ 与 t 一一对应。由旋转前后的角动量平均值关系,

$$\begin{cases} \langle \hat{s}_x \rangle_\varphi = \langle \hat{s}_x \rangle_0 \cos \varphi - \langle \hat{s}_y \rangle_0 \sin \varphi \\ \langle \hat{s}_y \rangle_\varphi = \langle \hat{s}_y \rangle_0 \cos \varphi + \langle \hat{s}_x \rangle_0 \sin \varphi \\ \langle \hat{s}_z \rangle_\varphi = \langle \hat{s}_z \rangle_0 \end{cases}$$

对任意初态有,

$$\begin{cases} \langle \hat{s}_x \rangle_t = \langle \hat{s}_x \rangle_0 \cos \omega t - \langle \hat{s}_y \rangle_0 \sin \omega t \\ \langle \hat{s}_y \rangle_t = \langle \hat{s}_y \rangle_0 \cos \omega t + \langle \hat{s}_x \rangle_0 \sin \omega t \\ \langle \hat{s}_z \rangle_t = \langle \hat{s}_z \rangle_0 \end{cases}$$

这是初态处于任意态的自旋角动量在 t 时刻的平均值。

当取 $t = 2\pi / \omega$ 时, 有

$$\begin{cases} \langle \hat{s}_x \rangle_t = \langle \hat{s}_x \rangle_0 \\ \langle \hat{s}_y \rangle_t = \langle \hat{s}_y \rangle_0 \\ \langle \hat{s}_z \rangle_t = \langle \hat{s}_z \rangle_0 \end{cases}$$

故称 $t = 2\pi / \omega$ 为自旋进动周期。

将任意态按 \hat{s}_z 的本征态 $|s_z^\pm\rangle$ 进行展开, 在绕 Z 轴的转动作用下,

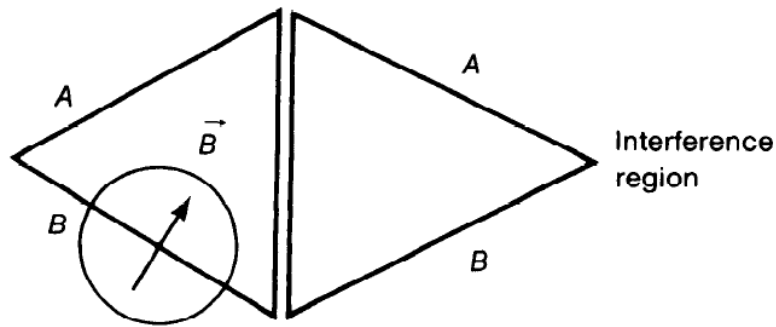
$$|\alpha\rangle = |s_z^+\rangle\langle s_z^+|\alpha\rangle + |s_z^-\rangle\langle s_z^-|\alpha\rangle \rightarrow$$

$$|\alpha\rangle_\varphi = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\varphi}|\alpha\rangle = e^{-\frac{i}{2}\varphi}|s_z^+\rangle\langle s_z^+|\alpha\rangle + e^{\frac{i}{2}\varphi}|s_z^-\rangle\langle s_z^-|\alpha\rangle,$$

当 $\varphi = 2\pi$ 或 $t = \varphi/\omega = 2\pi/\omega$ 时, $|\alpha\rangle_\varphi = -|\alpha\rangle$, 态不能回到原来! 只有转动 $\varphi = 4\pi$ 才能回到原来。故与平均值的时间演化周期 $t = 2\pi/\omega$ 不同, 态的时间演化周期是 $t = 4\pi/\omega$ 。

2) 中子干涉实验 (自旋进动的实验验证)

中子自旋是 $1/2$ 。将能量几乎确定的中子分成两束, 分别经路径 A, B 到达干涉区域。在 B 束路径上设置一个磁场不等于零的区间, 见图。



中子磁矩 $\mu_n = \frac{g_n e\hbar}{2m_n c}$, $g_n = -1.91$, 自旋进动频率 $\omega = \frac{g_n eB}{m_n c}$ (注意, 对于电子, $g_e = -1$,

自旋进动频率 $\omega = \frac{g_e eB}{m_e c}$)。由时间演化 $\hat{U}(t,0) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}\omega\hat{s}_z t}$, B 束中子的态经过有 Z 方向磁

场 B 的区间后会有一个额外的相因子 $e^{\mp\frac{i}{2}\omega T}$, T 是中子经过磁场的的时间 ($T = l/v_n = lm_n/p_n = lm_n\lambda/\hbar$)。那么存在干涉项

$$\cos\left(\mp\frac{\omega T}{2} + \delta\right),$$

其中 δ 是没有磁场时 A, B 两束中子的相位差。

当调控外磁场 B 的强度使 Lamor 频率变化时, 干涉强度会呈现周期性变化。变化一个周期对应的频率变化是 $\frac{\Delta\omega T}{2} = 2\pi$, 对应的磁场变化是

$$\Delta B = \frac{4\pi m_n c}{g_n e T}.$$

实验上证实了这一磁场变化引起的干涉强度变化。

3) Pauli 矩阵

引入 Pauli 算符 $\hat{\sigma}$: $\hat{s} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$,

$\hat{\sigma}_i$ 的本征值 $\sigma_i = \pm 1$, $\sigma_i^2 = 1$, $\vec{\sigma}^2 = 3$ 。

由对易关系

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k。$$

有

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x &= \frac{1}{2i}(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y)\hat{\sigma}_y + \frac{1}{2i}\hat{\sigma}_y(\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z - \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y) \\ &= \frac{1}{2i}(-\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_y^2 + \hat{\sigma}_y^2\hat{\sigma}_z) = \frac{1}{2i}(-\hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z) = 0 \end{aligned}$$

即反对易关系

$$\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}。$$

在 σ_z 表象,

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

$\hat{\sigma}_z$ 的本征态

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

由 σ_z 的完备性条件, 任意自旋态

$$\chi = c_+\chi_+ + c_-\chi_-。$$

现在讨论自旋态的转动。自旋转动变换算符 $\hat{D}_n(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{s}\cdot\vec{e}_n\varphi}$ 在 s_z 表象的矩阵形式为

$$D_n(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{s}\cdot\vec{e}_n\varphi} = e^{-\frac{i}{2}\vec{\sigma}\cdot\vec{e}_n\varphi}。$$

容易证明, 对于任意矢量 \vec{a}, \vec{b} , 有

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{a}\times\vec{b}),$$

显然

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})^2 = a^2。$$

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{e}_n)^i = \begin{cases} 1 & \text{for } i \text{ even} \\ \vec{\sigma}\cdot\vec{e}_n & \text{for } i \text{ odd} \end{cases},$$

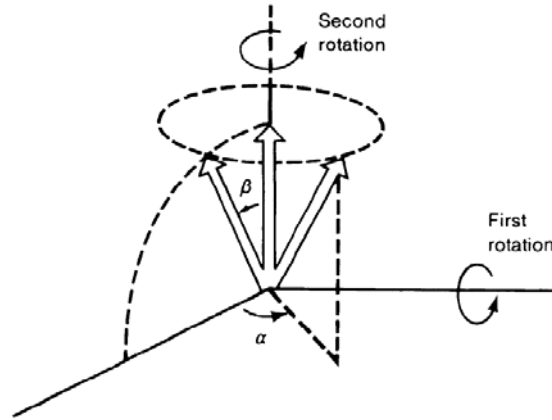
$$D_n(\varphi) = \cos \frac{\varphi}{2} - i \vec{\sigma} \cdot \vec{e}_n \sin \frac{\varphi}{2}.$$

例题：任意自旋态可以由 s_z (σ_z) 的本征态转动生成。

设任意自旋态 χ 的方向是 \vec{e}_n ， \vec{e}_n 的方位角是 α, β ，如图。设它的本征值为 $+1$ ，满足本征

方程 $(\hat{\sigma} \cdot \vec{e}_n)\chi = \chi$ ， χ 可以看成是 $\hat{\sigma}_z$ 的本征态 $\hat{\sigma}_z \chi_+ = \chi_+$ ， $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 绕 Y 轴转动角度 β ，

再绕 Z 轴转动角度 α ，



$$\begin{aligned} \chi &= D_z(\alpha) D_y(\beta) \chi_+ = e^{-\frac{i}{2} \sigma_z \alpha} e^{-\frac{i}{2} \sigma_y \beta} \chi_+ \\ &= \left(\cos \frac{\alpha}{2} - i \sigma_z \sin \frac{\alpha}{2} \right) \left(\cos \frac{\beta}{2} - i \sigma_y \sin \frac{\beta}{2} \right) \chi_+ \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\alpha}{2} - i \sin \frac{\alpha}{2} & 0 \\ 0 & \cos \frac{\alpha}{2} + i \sin \frac{\alpha}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} e^{-i\alpha/2} \\ \sin \frac{\beta}{2} e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \\ &= \cos \frac{\beta}{2} e^{-i\alpha/2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sin \frac{\beta}{2} e^{i\alpha/2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \cos \frac{\beta}{2} e^{-i\alpha/2} \chi_+ + \sin \frac{\beta}{2} e^{i\alpha/2} \chi_- \end{aligned}$$

4) Euler 转动

现在讨论将任意转动变化为绕 X, Y, Z 轴的转动的乘积。

设有一组固定坐标系(X,Y,Z)，一组随矢量运动的坐标系(X',Y',Z')。由分析力学，刚体的任意转动都可以用 3 个 Euler 角来描述。转动之前，两组坐标系重合。先逆时针绕 Z 轴转角度 α ，如图 a。这时 Y' 与 Y 不再重合了。然后绕 Y' 轴转角度 β ，如图 b。这时 Z' 与 Z 轴也不重合了。最后绕 Z' 轴转角度 γ ，如图 c。这时 Y' 轴又改变了方向，变成 Y''。刚体的任意转动可以表示为

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{z'}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha),$$

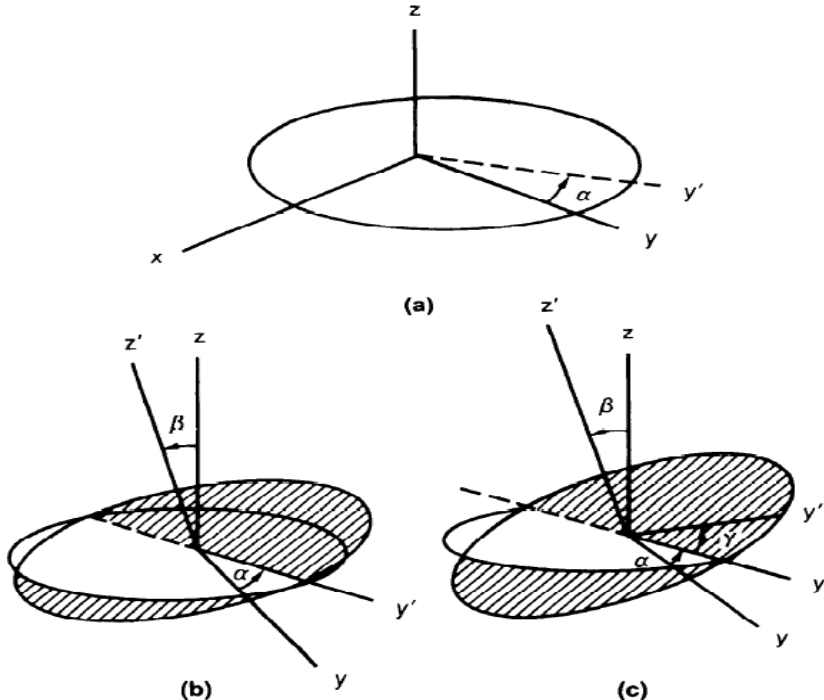
角度 α, β, γ 称为 Euler 角。

这 3 次 Euler 转动中，有两次是绕运动坐标轴 y', z' 的。这在转动的计算中很不方便，因为用角动量生成的转动都是在固定坐标系中进行的。因此，必须把绕运动坐标轴的转动改写成绕固定坐标轴的转动。可以证明，上述的 3 次转动等价于在固定坐标系的 3 次转动，

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma),$$

相应量子力学转动算符的因子化是

$$\hat{D}(\alpha, \beta, \gamma) = \hat{D}_z(\alpha)\hat{D}_{y'}(\beta)\hat{D}_{z'}(\gamma) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{j}_z\alpha} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{j}_{y'}\beta} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{j}_{z'}\gamma}.$$



自旋 1/2 的转动算符 $\hat{D}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-\frac{i}{2}\hat{\sigma}_z\alpha} e^{-\frac{i}{2}\hat{\sigma}_y\beta} e^{-\frac{i}{2}\hat{\sigma}_z\gamma}$ ，在 s_z 表象的转动矩阵

$$\begin{aligned}
D(\alpha, \beta, \gamma) &= e^{-\frac{i}{2}\sigma_z\alpha} e^{-\frac{i}{2}\sigma_y\beta} e^{-\frac{i}{2}\sigma_z\gamma} \\
&= \left(\cos \frac{\alpha}{2} - i\sigma_z \sin \frac{\alpha}{2} \right) \left(\cos \frac{\beta}{2} - i\sigma_y \sin \frac{\beta}{2} \right) \left(\cos \frac{\gamma}{2} - i\sigma_z \sin \frac{\gamma}{2} \right) \\
&= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\beta/2) & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\beta/2) \\ e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin(\beta/2) & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos(\beta/2) \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

3. 系综与密度算符

考虑多粒子体系的自旋性质。

1) 纯系综和混合系综

相同的物理体系构成系综，例如由具有相同自旋的粒子构成的系综。

一个自旋为 $1/2$ 的粒子的自旋态（方位角 α, β ）

$$\chi(\alpha, \beta) = c_+(\alpha, \beta)\chi_+ + c_-(\alpha, \beta)\chi_- = \cos\frac{\beta}{2}e^{-i\alpha/2}\chi_+ + \sin\frac{\beta}{2}e^{i\alpha/2}\chi_- ,$$

其中 χ_+, χ_- 是 \hat{S}_z 的本征态，

$$\frac{c_+}{c_-} = \frac{\cos(\beta/2)}{e^{i\alpha} \sin(\beta/2)} .$$

如果所有粒子处于同一状态，例如自旋取相同方向，则称构成的系综是纯系综或极化系统。如果粒子处于不同的状态，例如自旋不在同一方向，则构成的系综叫混合系综。例如自旋向上的粒子数占 70%，自旋向下的粒子数占 30%，体系是部分极化，处于部分混合系综。一个自旋方向完全随机的系综，其自旋向上，向下的几率各有 50%，整的表现是相互抵销，自旋为零，完全没极化。

2) 系综平均与态密度算符

系统的力学量平均值

$$\langle A \rangle_\alpha = \langle \alpha | \hat{A} | \alpha \rangle ,$$

这里态 $|\alpha\rangle$ 是固定的，是量子平均。进入任意表象 B，

$$\langle A \rangle_\alpha = \sum_{b, b'} \langle \alpha | b' \rangle \langle b' | \hat{A} | b \rangle \langle b | \alpha \rangle .$$

系综平均

$$[A] = \sum_\alpha w_\alpha \langle A \rangle_\alpha ,$$

这里 w_α 是体系处于态 $|\alpha\rangle$ 的几率，显然满足归一化条件

$$\sum_\alpha w_\alpha = 1 ,$$

是统计平均。

由

$$[A] = \sum_{\alpha, b, b'} w_{\alpha} \langle \alpha | b' \rangle \langle b' | \hat{A} | b \rangle \langle b | \alpha \rangle = \sum_{b, b'} \left(\sum_{\alpha} w_{\alpha} \langle b | \alpha \rangle \langle \alpha | b' \rangle \right) \langle b' | \hat{A} | b \rangle.$$

定义态密度算符

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha} w_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha|,$$

它在表象 **B** 的矩阵元

$$\rho_{bb'} = \langle b | \hat{\rho} | b' \rangle = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \langle b | \alpha \rangle \langle \alpha | b' \rangle,$$

$$[A] = \sum_{b, b'} \langle b | \hat{\rho} | b' \rangle \langle b' | \hat{A} | b \rangle = \sum_b \langle b | \hat{\rho} \hat{A} | b \rangle \equiv \text{tr}(\hat{\rho} \hat{A}).$$

这是量子统计力学的基本公式，包含了量子平均与统计平均。注意：表象变换不改变矩阵的求迹，上式不依赖于表象的选取。

在连续表象，例如坐标表象，密度算符的矩阵元

$$\rho_{xx'} = \langle \bar{x} | \hat{\rho} | \bar{x}' \rangle = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \langle \bar{x} | \alpha \rangle \langle \alpha | \bar{x}' \rangle = \sum_{\alpha} w_{\alpha} \psi_{\alpha}(\bar{x}) \psi_{\alpha}^*(\bar{x}'),$$

系综平均

$$[A] = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{A}) = \int d^3 \bar{x} \langle \bar{x} | \hat{\rho} \hat{A} | \bar{x} \rangle.$$

密度矩阵满足归一化条件

$$\begin{aligned} \text{tr} \hat{\rho} &= \sum_{\alpha, b} w_{\alpha} \langle b | \alpha \rangle \langle \alpha | b \rangle \\ &= \sum_{\alpha, b} w_{\alpha} \langle \alpha | b \rangle \langle b | \alpha \rangle \\ &= \sum_{\alpha} w_{\alpha} \langle \alpha | \alpha \rangle && \text{完备性条件} \\ &= \sum_{\alpha} w_{\alpha} && \text{态的量子归一化条件} \\ &= 1 && \text{态的统计归一化条件} \end{aligned}$$

设密度算符 $\hat{\rho}$ 的本征态为 $|\theta\rangle$,

$$\begin{aligned} \hat{\rho} |\theta\rangle &= \theta |\theta\rangle, \\ \hat{\rho}^2 |\theta\rangle &= \hat{\rho} \theta |\theta\rangle = \theta^2 |\theta\rangle. \end{aligned}$$

对于纯系综，所有系统都取同一个态 $|n\rangle$,

$$w_{\alpha} = \begin{cases} 1 & \alpha = n \\ 0 & \alpha \neq n \end{cases},$$

$$\hat{\rho} = |n\rangle\langle n|, \quad \hat{\rho}^2 = |n\rangle\langle n|n\rangle\langle n| = |n\rangle\langle n| = \hat{\rho},$$

$$\theta^2 = \theta, \quad \theta = 0, 1.$$

如果 $|n\rangle$ 为某一个基矢, 则纯系综的密度矩阵在该表象为 $\rho_{bb'} = \langle b|n\rangle\langle n|b'\rangle = \delta_{bn}\delta_{b'n}$, 是一个对角矩阵, 只有一个矩阵元 $= 1$, 其它矩阵元 $= 0$:

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & \dots & & \\ & & 1 & \\ & & & \dots \\ & & & & 0 \end{pmatrix}$$

对于完全混合系综, 由于取各个态的几率相同, $w_\alpha = w_0 = 1/N$, N 是状态数,

$$\rho_{bb'} = \sum_\alpha w_\alpha \langle b|\alpha\rangle\langle\alpha|b'\rangle = \frac{1}{N} \sum_\alpha \langle b|\alpha\rangle\langle\alpha|b'\rangle = \frac{1}{N} \langle b|b'\rangle = \frac{1}{N} \delta_{bb'}$$

密度矩阵是一个单位矩阵

$$\rho = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \dots & & \\ & & 1 & \\ & & & \dots \\ & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

例题 1: 纯系综。假设完全极化态为 $|n\rangle = |+\rangle$, $\hat{s}_z|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|\pm\rangle$ 。

$$\hat{\rho} = |+\rangle\langle +|,$$

在 s_z 表象, ρ 是一个 2×2 的矩阵,

$$\rho_{++} = \langle +|+\rangle\langle +|+\rangle = 1,$$

$$\rho_{+-} = \langle +|+\rangle\langle +|-\rangle = 0,$$

$$\rho_{-+} = \langle -|+\rangle\langle +|+\rangle = 0,$$

$$\rho_{--} = \langle -|+\rangle\langle +|-\rangle = 0,$$

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

如果完全极化态是 $|n\rangle = |s_x^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$, $\hat{s}_x|s_x^+\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}|s_x^+\rangle$ 。

$$\hat{\rho} = |s_x^+\rangle\langle s_x^+|,$$

在 s_z 表象,

$$\rho_{++} = \langle + | s_x^+ \rangle \langle s_x^+ | + \rangle = 1/2,$$

$$\rho_{+-} = \langle + | s_x^+ \rangle \langle s_x^+ | - \rangle = 1/2,$$

$$\rho_{-+} = \langle - | s_x^+ \rangle \langle s_x^+ | + \rangle = 1/2,$$

$$\rho_{--} = \langle - | s_x^+ \rangle \langle s_x^+ | - \rangle = 1/2,$$

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

例题 2: 完全不极化系统的密度矩阵。

$$N = 2, \quad \hat{\rho} = \frac{1}{2} |+\rangle \langle +| + \frac{1}{2} |-\rangle \langle -|,$$

在 s_z 表象,

$$\rho_{++} = 1/2, \quad \rho_{+-} = 0, \quad \rho_{-+} = 0, \quad \rho_{--} = 1/2,$$

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

表明在完全混合系综中密度矩阵是一个单位矩阵。

在完全不极化系综中的平均值显然相互抵销, 等于零:

$$[s_i] = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{s}_i) = \frac{1}{2} \text{tr}(\hat{s}_i),$$

代入自旋矩阵 s_x, s_y, s_z , 有

$$[s_i] = 0.$$

例题 3: 部分极化系统的密度矩阵。

设

$$\hat{\rho} = \frac{3}{4} |+\rangle \langle +| + \frac{1}{4} |s_x^+\rangle \langle s_x^+|,$$

在 s_z 表象,

$$\rho_{++} = \frac{3}{4} \langle + | + \rangle \langle + | + \rangle + \frac{1}{4} \langle + | s_x^+ \rangle \langle s_x^+ | + \rangle = \frac{3}{4} + \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{7}{8},$$

$$\rho_{+-} = \rho_{-+} = \rho_{--} = \frac{1}{8},$$

$$[s_x] = \frac{\hbar}{8}, \quad [s_y] = 0, \quad [s_z] = \frac{3\hbar}{8}.$$

3) 系综的演化

态密度算符如何随时间演化？

如果系综的性质不随时间变化，态的几率分布 w_α 不随时间变化，

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{\alpha} w_{\alpha} |\alpha, t\rangle \langle \alpha, t|,$$

由态的时间演化

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle &= \hat{H} |\alpha, t\rangle, \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha, t| &= \langle \alpha, t| \hat{H}, \end{aligned}$$

有

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} &= \sum_{\alpha} w_{\alpha} \left(\hat{H} |\alpha, t\rangle \langle \alpha, t| - |\alpha, t\rangle \langle \alpha, t| \hat{H} \right) \\ &= -[\hat{\rho}, \hat{H}] \end{aligned}$$

这就是密度算符的时间演化。虽然类似于 Heisenberg 绘景中力学量的运动方程，只差一个负号，但 $\hat{\rho}$ 不是力学量算符，而是 Schrodinger 绘景中由态构成的算符。

4. 角动量的本征值和本征态

本节讨论一般角动量的本征值和本征态。

角动量 $\hat{\mathbf{J}}$ 的一般定义由其对易关系确定：

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

满足该定义的力学量称为角动量。显然，轨道角动量 $\hat{\mathbf{L}}$ 和自旋角动量都是这个定义的特例。

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

1) 定义角动量平方

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

描述角动量的大小，它与任意方向的角动量都对易：

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_j] &= \hat{J}_i [\hat{J}_i, \hat{J}_j] + [\hat{J}_i, \hat{J}_j] \hat{J}_i \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_i \hat{J}_k + i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k \hat{J}_i \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_i \hat{J}_k + i\hbar \varepsilon_{kji} \hat{J}_i \hat{J}_k \\ &= i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_i \hat{J}_k - i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_i \hat{J}_k = 0, \end{aligned}$$

此处用到了 ε_{ijk} 的反对称性质： $\varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{jik}$ 。

由于 $\hat{\mathbf{J}}^2$ 与 \hat{J}_z 对易，有共同本征函数，并考虑到 $\hat{\mathbf{J}}^2$ 不仅仅依赖于 \hat{J}_z ，共同本征态至少应由两个量子数描述，记为 $|\lambda, m\rangle$ 。量子数一般无量纲。考虑到 $\hat{\mathbf{J}}^2$ 和 \hat{J}_z 的量纲，记

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

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

问题： $\lambda = ?, m = ?$

2) 构造新的算符组

$$\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z \rightarrow \hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y = \hat{J}_+^\dagger, \quad \hat{J}_z,$$

由于

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 + \hbar \hat{J}_z,$$

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z,$$

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+) + \hat{J}_z^2$$

有新的对易关系:

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

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

$$\begin{aligned} 3) \quad \langle \lambda, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | \lambda, m \rangle &= \frac{1}{2} \langle \lambda, m | \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ | \lambda, m \rangle \\ (\lambda - m^2) \hbar^2 \underbrace{\langle \lambda, m | \lambda, m \rangle}_{\geq 0} &= \frac{1}{2} \underbrace{\langle \lambda, m | \hat{J}_- \hat{J}_- | \lambda, m \rangle}_{\geq 0} + \frac{1}{2} \underbrace{\langle \lambda, m | \hat{J}_+ \hat{J}_+ | \lambda, m \rangle}_{\geq 0}, \end{aligned}$$

故 $\lambda \geq m^2$

$$\begin{aligned} 4) \quad \begin{cases} \hat{J}^2 (\hat{J}_+ | \lambda, m \rangle) = \hat{J}_+ \hat{J}^2 | \lambda, m \rangle = \lambda \hbar^2 (\hat{J}_+ | \lambda, m \rangle) \\ \hat{J}_z (\hat{J}_+ | \lambda, m \rangle) = (\hbar\hat{J}_+ + \hat{J}_+ \hat{J}_z) | \lambda, m \rangle = (m+1)\hbar (\hat{J}_+ | \lambda, m \rangle) \end{cases} \\ \begin{cases} \hat{J}^2 (\hat{J}_- | \lambda, m \rangle) = \hat{J}_- \hat{J}^2 | \lambda, m \rangle = \lambda \hbar^2 (\hat{J}_- | \lambda, m \rangle) \\ \hat{J}_z (\hat{J}_- | \lambda, m \rangle) = (-\hbar\hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_z) | \lambda, m \rangle = (m-1)\hbar (\hat{J}_- | \lambda, m \rangle) \end{cases} \end{aligned}$$

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

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

故称 \hat{J}_- 为下降算符, \hat{J}_+ 为上升算符。

结合上面的结论,

\hat{J}^2 的本征值为 $\lambda \hbar^2$;

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

有最大值与最小值的原因是 $\lambda \geq j^2$, $\lambda \geq j'^2$ 。

5) 对于最大值 j :

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

否则与 $j\hbar$ 是 \hat{J}_z 最大本征值相矛盾。

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

$$\text{即 } \lambda = j(j+1).$$

对于最小值 j' :

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

否则与 $j'\hbar$ 是 \hat{J}_z 最小本征值相矛盾。

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

$$\text{即 } \lambda = j'(j'-1).$$

$$\text{由 } j(j+1) = j'(j'-1),$$

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

而 $j' = j+1 > j$ 与 j 为最大值, j' 为最小值的假设不符, 故取

$$j' = -j.$$

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

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

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

剩下的问题是: $j = ?$

6) 态 $|j, j\rangle$ 用下降算符 \hat{J}_- 作用 $2j$ 次后变为 $|j, -j\rangle$, 或态 $|j, -j\rangle$ 用上升算符 \hat{J}_+ 作用 $2j$ 次后变为 $|j, j\rangle$,

$$2j = 0, \text{ 正整数,}$$

即 j 为零, 正整数, 和半正整数。

总结: $\hat{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle$, j 可为零, 正整数, 和半正整数,

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

j 为零和正整数时, \hat{J} 可用轨道角动量 \hat{L} 来解释, 而 j 为半正整数时, \hat{J} 的物理意义是什么?

这说明由角动量的定义，即对易关系出发，一定还存在一种新的角动量，这就是自旋角动量。

7) 由于本征值组 $\{j, m\}$ 与本征态 $|j, m\rangle$ 一一对应，无简并，故

$$\begin{aligned}\hat{J}_+ |j, m\rangle &= a_{jm} |j, m+1\rangle, & \hat{J}_- |j, m\rangle &= b_{jm} |j, m-1\rangle, \\ \langle j, m | \hat{J}_- &= \langle j, m+1 | a_{jm}^*, & \langle j, m | \hat{J}_+ &= \langle j, m-1 | b_{jm}^* \\ |a_{jm}|^2 \langle j, m+1 | j, m+1\rangle &= \langle j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ |j, m\rangle = \langle j, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 - \hbar \hat{J}_z |j, m\rangle \\ &= (j(j+1) - m^2 - m) \hbar^2 \langle j, m | j, m\rangle, \\ |a_{jm}|^2 &= (j(j+1) - m(m+1)) \hbar^2,\end{aligned}$$

取

$$a_{jm} = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \hbar = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \hbar.$$

类似，可得

$$b_{jm} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar,$$

即

$$\begin{cases} \hat{J}_+ |j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \hbar |j, m+1\rangle \\ \hat{J}_- |j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar |j, m-1\rangle \end{cases}.$$

因为

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2}(\hat{J}_+ + \hat{J}_-), \quad \hat{J}_y = \frac{1}{2i}(\hat{J}_+ - \hat{J}_-),$$

有

$$\begin{cases} \hat{J}_x |j, m\rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle + \frac{\hbar}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle \\ \hat{J}_y |j, m\rangle = \frac{\hbar}{2i} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} |j, m+1\rangle - \frac{\hbar}{2i} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} |j, m-1\rangle \end{cases}$$

8) 进入 \hat{J}^2 与 \hat{J}_z 的共同表象

基矢为 $|j, m\rangle$ 。当 j 确定时，即 \hat{J}^2 的本征值确定时，存在一个由 \hat{J}_z 的本征态构成的子空间，维数 $D = 2j + 1$ 。矩阵元

$$\langle j, n | \hat{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1) \hbar^2 \delta_{nm},$$

$$\langle j, n | \hat{J}_z |j, m\rangle = m \hbar \delta_{nm},$$

$$\begin{aligned}\langle j, n | \hat{J}_x | j, m \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{n, m+1} + \frac{\hbar}{2} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{n, m-1} \\ \langle j, n | \hat{J}_y | j, m \rangle &= \frac{\hbar}{2i} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{n, m+1} - \frac{\hbar}{2i} \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{n, m-1},\end{aligned}$$

这就是在 \hat{J}^2 与 \hat{J}_z 的共同表象中 $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ 的矩阵形式。

例题 1: $j = \frac{1}{2}$ (电子自旋)

$$\vec{J}^2 = j(j+1)\hbar^2 = \frac{3}{4}\hbar^2, \quad J_z = m\hbar, \quad m = -j, \dots, j = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

$D=2$, 在这个子空间选第一个基矢为 $|j, m\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$, 第二个基矢为 $\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$, 有

$$\begin{aligned}J_z &= \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \\ J_x &= \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_x, \\ J_y &= \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{2}\hbar \\ \frac{i}{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_y.\end{aligned}$$

设 J_z 的本征态为 $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, 有本征方程

$$\begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = m\hbar \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

考虑到归一化条件, 得:

$$m = \frac{1}{2} \text{ 时, 本征态为 } \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad m = -\frac{1}{2} \text{ 时, 本征态为 } \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

例题 2: $j=1$ (光子自旋)

$$\vec{J}^2 = j(j+1)\hbar^2 = 2\hbar^2, \quad J_z = m\hbar, \quad m = -j, \dots, j = -1, 0, 1.$$

在 $D=3$ 的子空间, 选第一个基矢为 $|1, 1\rangle$, 第二个基矢为 $|1, 0\rangle$, 第三个基矢为 $|1, -1\rangle$, 有

$$J_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

\hat{J}_z 的本征值与本征态为

$$m=1, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad m=0, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad m=-1, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

9) 转动算符的矩阵表示

$$\text{转动算符 } \hat{D}_n(\varphi) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{J} \cdot \hat{e}_n \varphi},$$

由于

$$\left[\hat{J}^2, \hat{J} \right] = 0, \quad \left[\hat{J}^2, \hat{D}_n(\varphi) \right] = 0,$$

表明 $\hat{D}(\varphi)$ 与 \hat{J}^2 有共同本征态, D 在 \vec{J}^2 表象中是对角矩阵, 在 \vec{J}^2 与 J_z 的共同表象中, D 在不同 j 之间的矩阵元为零,

$$D_{mm'}^{jj'} = \langle j, m | \hat{D}(\varphi) | j', m' \rangle = 0, \quad \text{for } j \neq j'$$

由于 $[\hat{J}_z, \hat{D}_n(\varphi)] \neq 0$, 故在 j 固定的子空间中, D 有非对角元. 由于任意转动都可以由 Euler 角 α, β, γ 来表示, 在 j 固定的子空间的矩阵元

$$\begin{aligned} D_{mm'}^j &= \langle j, m | \hat{D}_n(\varphi) | j, m' \rangle \\ &= \langle j, m | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{J} \cdot \hat{e}_n \varphi} | j, m' \rangle \\ &= \langle j, m | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{J}_z \alpha} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{J}_y \beta} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{J}_z \gamma} | j, m' \rangle \\ &= e^{-i(m\alpha + m'\gamma)} \langle j, m | e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{J}_y \beta} | j, m' \rangle \\ &= e^{-i(m\alpha + m'\gamma)} d_{mm'}^j(\beta) \end{aligned}$$

由此可知, 转动矩阵 $D_{mm'}^{jj'}$ 是一个分块对角的矩阵, 当 $j \neq j'$ 时矩阵元 = 0, 只有 $j = j'$ 时的矩阵元 $D_{mm'}^j \neq 0$.

对于 $j=1/2$, 在 \hat{J}^2 与 \hat{J}_z 的共同表象, 前面已经求出

$$d^{1/2}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix},$$

对于 $j=1$, 在 \hat{J}^2 与 \hat{J}_z 的共同表象, 可以证明

$$J_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix},$$

$$e^{\frac{i}{\hbar} J_y \beta} = 1 - \frac{i}{\hbar} \sin \beta J_y + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 (1 - \cos \beta) J_y^2.$$

$$d^1(\beta) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \beta & -\sqrt{2} \sin \beta & 1 - \cos \beta \\ \sqrt{2} \sin \beta & 2 \cos \beta & -\sqrt{2} \sin \beta \\ 1 - \cos \beta & \sqrt{2} \sin \beta & 1 + \cos \beta \end{pmatrix}.$$

5. 轨道角动量

1) 本征值与本征态

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \rightarrow \hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$$
$$\hat{L}_i = \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \hat{p}_k, \quad i, j, k = 1, 2, 3$$

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

可以证明 $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k,$

表明轨道角动量算符满足一般角动量的定义。

由于是轨道角动量，我们在坐标表象计算本征值和本征态：

$$\hat{r} = \vec{r}, \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla$$
$$\hat{L} = -i\hbar \vec{r} \times \nabla, \quad \hat{L}_i = -i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{x}_j \frac{\partial}{\partial x_k}$$

在球坐标系考虑转动较方便，

$$x, y, z \rightarrow r, \theta, \varphi,$$
$$\hat{L}_x = i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad \hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$
$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

表明 \hat{L}^2 只与角度 θ, φ 有关。

先考虑 \hat{L}_z 的本征方程。由于 \hat{L}_z 与 θ 无关，

$$\hat{L}_z \Phi(\varphi) = L_z \Phi(\varphi), \quad -i\hbar \frac{d}{d\varphi} \Phi(\varphi) = L_z \Phi(\varphi),$$

解为 $\Phi(\varphi) = A e^{\frac{i}{\hbar} L_z \varphi}.$

考虑单值性，

$$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi) \rightarrow L_z = m\hbar, \quad \Phi(\varphi) = A e^{im\varphi}, \quad \text{磁量子数 } m = 0, \pm 1, \dots, \pm\infty$$

归一化，

$$\int_0^{2\pi} |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi = 1 \rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

解为

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \dots$$

再考虑 \hat{L}^2 的本征方程。设

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \varphi) = L^2 Y(\theta, \varphi),$$

$$\left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right) Y_{lm}(\theta, \varphi) + \frac{L^2}{\hbar^2} Y_{lm}(\theta, \varphi) = 0$$

用分离变量法求解，利用单值性、有限性条件，

本征值为 $L^2 = l(l+1)\hbar^2$ ，角量子数 $l = 0, 1, 2, \dots, \infty$ 。

本征态为 球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi) = N_{lm} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\varphi}$ ， $P_l^{|m|}(x)$ 为连带 Legendre 多项式。

磁量子数 $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ 共 $2l+1$ 个。

简并度：本征值 L^2 只与角量子数有关，但本征态还与磁量子数有关，简并度 $g = 2l+1$ 。

归一化：
$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin\theta d\theta d\varphi |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = 1 \rightarrow N_{lm} = \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{(l+|m|)!4\pi}}$$

由于 \hat{L}^2 的本征态 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 中与 φ 有关的部分是 \hat{L}_z 的本征态，故 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 是 \hat{L}^2, \hat{L}_z 共同本征态：

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

$$\hat{L}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$l = 0, 1, 2, \dots, \infty, \quad m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$$

注意：由于角动量分量的取值受到总角动量的约束， m 不能取值到 $\pm\infty$ 。

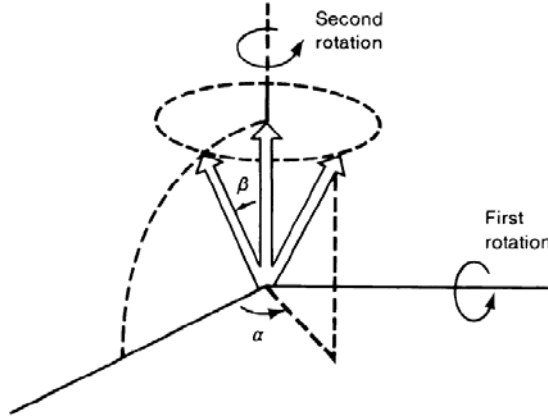
由上面的分析，轨道角动量是一般角动量理论在坐标空间的实现，但它只是角动量的一部分，它的 l 取值只能是零和正整数，不能取半正整数。

2) 空间转动算符

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 是轨道角动量本征态 $|l, m\rangle$ 在坐标表象（球坐标系）中基矢 $\vec{e}_r(\theta, \varphi)$ 方向的投影，

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \langle \vec{e}_r(\theta, \varphi) | l, m \rangle,$$

$|\vec{e}_r(\theta, \varphi)\rangle$ 可由 $|\vec{e}_z(0, \varphi)\rangle$ 经两次转动变换得到：先绕 y 轴转动角度 θ 再绕 z 轴转动角度 φ ，



$$\begin{aligned} |\bar{e}_r(\theta, \varphi)\rangle &= \hat{D}_z(\varphi)\hat{D}_y(\theta)|\bar{e}_z(0, \varphi)\rangle \\ &= \sum_{m'} \hat{D}_z(\varphi)\hat{D}_y(\theta)|l, m'\rangle \langle l, m'|\bar{e}_z(0, \varphi)\rangle \end{aligned}$$

$$Y_{lm}^*(\theta, \varphi) = \langle l, m|\bar{e}_z(\theta, \varphi)\rangle = \sum_{m'} \langle l, m|\hat{D}_z(\varphi)\hat{D}_y(\theta)|l, m'\rangle \langle l, m'|\bar{e}_z(0, \varphi)\rangle,$$

因为

$$\langle l, m'|\bar{e}_z(0, \varphi)\rangle = Y_{lm'}^*(0, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m'0},$$

$$\langle l, m|\hat{D}_z(\varphi) = \langle l, m|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\varphi} = e^{-im\varphi}\langle l, m|$$

故

$$Y_{lm}^*(\theta, \varphi) = e^{-im\varphi}d_{mm'}^l(\theta)\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m'0}, \quad d_{mm'}^l(\theta) = \langle l, m|\hat{D}_y(\theta)|l, m'\rangle$$

任意方向的球函数可以通过Z方向的球函数的转动而得到。

6. 两个角动量的耦合

考虑任意两个独立角动量 \hat{J}_1, \hat{J}_2 的合成,

$$\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2,$$

$$[\hat{J}_{1i}, \hat{J}_{1j}] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_{1k}, \quad [\hat{J}_{2i}, \hat{J}_{2j}] = i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_{2k}, \quad [\hat{J}_{1i}, \hat{J}_{2j}] = 0$$

$$J_1^2 = j_1(j_1+1)\hbar^2, \quad J_{1z} = m_1\hbar, \quad m_1 = -j_1, \dots, j_1$$

$$J_2^2 = j_2(j_2+1)\hbar^2, \quad J_{2z} = m_2\hbar, \quad m_2 = -j_2, \dots, j_2$$

容易证明:

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

故 \hat{J} 仍是一个角动量算符, 称为总角动量。本征值:

$$J^2 = j(j+1)\hbar^2, \quad J_z = m\hbar, \quad m = -j, \dots, j.$$

问题是, j, m 与 j_1, m_1, j_2, m_2 的关系如何?

1) 两个表象

无耦合表象: \hat{J}_1 与 \hat{J}_2 相互对易, 故 $\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z}$ 有共同本征矢 $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$, 构成无耦合表象:

$$\hat{J}_1^2 |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2 |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle, \quad \hat{J}_{1z} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = m_1\hbar |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$$

$$\hat{J}_2^2 |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2 |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle, \quad \hat{J}_{2z} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle = m_2\hbar |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$$

但由于

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_{1z}] \neq 0, \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_{2z}] \neq 0,$$

\hat{J}^2 在无耦合表象不是对角矩阵, 不便求解 \hat{J}^2 的本征值。

耦合表象: 由于

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_z] = [\hat{J}^2, \hat{J}_1^2] = [\hat{J}^2, \hat{J}_2^2] = [\hat{J}_z, \hat{J}_1^2] = [\hat{J}_z, \hat{J}_2^2] = [\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2] = 0,$$

故 $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$ 有共同本征矢 $|j_1 j_2 jm\rangle$, 构成耦合表象,

$$\hat{J}_1^2 |j_1 j_2 jm\rangle = j_1(j_1+1)\hbar^2 |j_1 j_2 jm\rangle, \quad \hat{J}_2^2 |j_1 j_2 jm\rangle = j_2(j_2+1)\hbar^2 |j_1 j_2 jm\rangle$$

$$\hat{J}^2 |j_1 j_2 jm\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j_1 j_2 jm\rangle, \quad \hat{J}_z |j_1 j_2 jm\rangle = m\hbar |j_1 j_2 jm\rangle$$

由于已知的是 $\hat{J}_1^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{2z}$ 的本征值和本征矢, 为了用它们来表示总角动量 \hat{J}^2, \hat{J}_z 的本征值和本征态, 必须联系两个表象, 即进行表象变换。

由无耦合表象的完备性条件

$$\sum_{m_1, m_2} |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2| = 1,$$

有表象变换:

$$\underbrace{|j_1 j_2 jm\rangle}_{\text{有耦合表象基矢}} = \sum_{m_1, m_2} \underbrace{|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle}_{\text{无耦合表象基矢}} \underbrace{\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm \rangle}_{\text{Clebsch-Gordon系数}}$$

2) 耦合表象的本征值 (j, m)

将上式用 \hat{J}_z 作用,

$$\begin{aligned}\hat{J}_z |j_1 j_2 jm\rangle &= \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm\rangle (\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}) |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle, \\ m\hbar |j_1 j_2 jm\rangle &= \sum_{m_1, m_2} (m_1 + m_2) \hbar \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm\rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle \\ \sum_{m_1, m_2} (m - m_1 - m_2) \hbar \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm\rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle &= 0\end{aligned}$$

在无耦合表象中，基矢 $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ 是相互独立的，故上式存立的条件是每个基矢前的系数都必须等于零。即要么 CG(Clebsch-Gordon) 系数=0，要么 $m = m_1 + m_2$ 。我们要求的就是不等于零的 CG 系数，因此取

$$m = m_1 + m_2。$$

再考虑 j 的取值。设

$$j_{\min} \leq j \leq j_{\max}, \quad j_{\max} = m_{\max} = (m_1)_{\max} + (m_2)_{\max} = j_1 + j_2。$$

由无耦合表象维数

$$D = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1),$$

与耦合表象维数

$$D = \sum_{j=j_{\min}}^{j_{\max}} (2j+1) = j_{\max}^2 - j_{\min}^2 + 2j_{\max} + 1$$

相等，

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = (j_1 + j_2)^2 - j_{\min}^2 + 2(j_1 + j_2) + 1,$$

$$j_{\min}^2 = (j_1 - j_2)^2, \quad j_{\min} = |j_1 - j_2|。$$

故当 j_1, j_2 确定时，总角动量 \hat{J}^2, \hat{J}_z 的取值：

$$J^2 = j(j+1)\hbar^2, \quad j = |j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2, \quad J_z = m\hbar, \quad m = m_1 + m_2$$

3) 耦合表象的本征态 $|j_1 j_2 jm\rangle$

关键是如何求 CG 系数。不做一般讨论，有专门表可查。

$$\text{例题 1: } \hat{J}_1 = \hat{L}, \quad \hat{J}_2 = \hat{S}, \quad \hat{J} = \hat{L} + \hat{S},$$

$$\text{耦合表象基矢} \quad \left| l, \frac{1}{2}, j, m \right\rangle,$$

$$\text{无耦合表象基矢} \quad \left| l, m_l, \frac{1}{2}, m_s \right\rangle。$$

表象变换:
$$\left| l \frac{1}{2} jm \right\rangle = \sum_{m_l, m_s} C_{m_l, m_s} \left| l, m_l, \frac{1}{2}, m_s \right\rangle = \sum_{m_l} \left[A_{m_l} \left| l, m_l, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + B_{m_l} \left| l, m_l, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle \right]$$

由于
$$m = m_l + m_s, \quad m_l = m - m_s = \begin{cases} m - 1/2, & \text{当 } m_s = 1/2 \\ m + 1/2, & \text{当 } m_s = -1/2 \end{cases}$$
 只能取两个值,

故
$$\left| l \frac{1}{2} jm \right\rangle = A \left| l, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + B \left| l, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle.$$

以下确定系数 **A** 和 **B**。

在无耦合表象的自旋子空间, 算符

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S} = \begin{pmatrix} \hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar\hat{L}_z & \hbar\hat{L}_- \\ \hbar\hat{L}_+ & \hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar\hat{L}_z \end{pmatrix},$$

其中 $\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ 为轨道角动量上升、下降算符, 态

$$\begin{aligned} \left| l, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \left| l, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle &= \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle \end{pmatrix} \end{aligned}$$

将 \hat{J}^2 的本征方程

$$\hat{J}^2 \left| l \frac{1}{2} jm \right\rangle = j(j+1)\hbar^2 \left| l \frac{1}{2} jm \right\rangle$$

$$j(j+1)\hbar^2 \left(A \left| l, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + B \left| l, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle \right) = \left(\hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L} \cdot \hat{S} \right) \left(A \left| l, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + B \left| l, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle \right)$$

进入自旋子空间, 有

$$\begin{cases} A \left[\left(\hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar\hat{L}_z \right) - j(j+1)\hbar^2 \right] \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle + B \hbar \hat{L}_- \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle = 0 \\ A \hbar \hat{L}_+ \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle + B \left[\left(\hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar\hat{L}_z \right) - j(j+1)\hbar^2 \right] \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle = 0 \end{cases}$$

即
$$\begin{cases} \left\{ \left[\left(l(l+1) + \frac{3}{4} + m - \frac{1}{2} \right) - j(j+1) \right] A + \sqrt{\left(l - m + \frac{1}{2} \right) \left(l + m + \frac{1}{2} \right)} B \right\} \left| l, m - \frac{1}{2} \right\rangle = 0 \\ \left\{ \sqrt{\left(l + m - \frac{1}{2} \right) \left(l - m + \frac{3}{2} \right)} A + \left[\left(l(l+1) + \frac{3}{4} - \left(m + \frac{1}{2} \right) \right) - j(j+1) \right] B \right\} \left| l, m + \frac{1}{2} \right\rangle = 0 \end{cases}$$

即

$$\begin{cases} \left[\left(l(l+1) + \frac{3}{4} + m - \frac{1}{2} \right) - j(j+1) \right] A + \sqrt{\left(l - m + \frac{1}{2} \right) \left(l + m + \frac{1}{2} \right)} B = 0 \\ \sqrt{\left(l + m - \frac{1}{2} \right) \left(l - m + \frac{3}{2} \right)} A + \left[\left(l(l+1) + \frac{3}{4} - \left(m + \frac{1}{2} \right) \right) - j(j+1) \right] B = 0 \end{cases} \rightarrow A, B$$

j 可能取值: $j = \left| l - \frac{1}{2} \right|, l + \frac{1}{2}$ 共两个值。

当 $j = l + \frac{1}{2}$ 时, 归一化后:

$$\underbrace{\left| l \frac{1}{2} j m \right\rangle}_{\text{有耦合表象}} = \underbrace{\sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}}}_{CG} \underbrace{\left| l, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle}_{\text{无耦合表象}} + \underbrace{\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}}}_{CG} \underbrace{\left| l, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle}_{\text{无耦合表象}},$$

同理, 当 $j = l - \frac{1}{2}$ 时,

$$\left| l \frac{1}{2} j m \right\rangle = -\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \left| l, m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{l+m-\frac{1}{2}}{2l+1}} \left| l, m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle.$$

例题 2: 两个电子的自旋耦合。

$$\hat{s} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2, \quad s_1 = s_2 = 1/2, \quad s_{1z} = s_{2z} = -1/2, 1/2, \quad s = |s_1 - s_2|, \dots, s_1 + s_2 = 0, 1.$$

$$\text{无耦合表象的基矢: } |s_1 s_{1z} s_2 s_{2z}\rangle = |s_1 s_{1z}\rangle |s_2 s_{2z}\rangle = \begin{cases} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \frac{-1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2} \frac{-1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2} \frac{-1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2} \frac{-1}{2} \right\rangle \end{cases}$$

$$\text{有耦合表象的基矢: } |s_1 s_2 s s_z\rangle = \begin{cases} \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} 1 1 \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} 1 0 \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} 1 -1 \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 0 \right\rangle \end{cases}$$

由类似于例题 1 的方法，可将有耦合表象的基矢用无耦合表象表示。

对于 $s=1$ ，自旋三重态

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 1 \right\rangle &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, 0 \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right), \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1, -1 \right\rangle &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

对于 $s=0$ ，自旋单态

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

7. 自旋关联与 Bell 不等式

1) 自旋测量关联

两电子体系的自旋单态按 $\hat{s}_{1z}, \hat{s}_{2z}$ 的本征态展开，

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|s_{1z}^+\rangle |s_{2z}^-\rangle - |s_{1z}^-\rangle |s_{2z}^+\rangle)$$

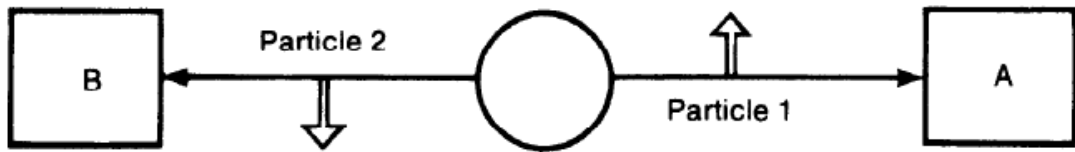
由

$$|s_z^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|s_x^+\rangle \pm |s_x^-\rangle),$$

自旋单态也可按 $\hat{s}_{1x}, \hat{s}_{2x}$ 的本征态展开，

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0 \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|s_{1x}^-\rangle |s_{2x}^+\rangle - |s_{1x}^+\rangle |s_{2x}^-\rangle).$$

如图，设处于自旋单态的两个电子从中心分别向两边探测器 A 和 B 运动。先用 A 测量电子 1 的自旋，紧接着用 B 测量电子 2 的自旋。



当 A 测量电子 1 的自旋 s_z ，再用 B 测量电子 2 的自旋 s_x ，此时电子 2 的自旋态取 $|s_x^+\rangle$ 和 $|s_x^-\rangle$ 的几率各为 50%。表明两次测量无关联。

当 A 测量电子 1 的自旋 s_x ，再用 B 测量电子 2 的自旋 s_x ，此时电子 2 的自旋态确定：当电子 1 处于 $|s_x^+\rangle$ ，则电子 2 处于 $|s_x^-\rangle$ ，而当电子 1 处于 $|s_x^-\rangle$ ，则电子 2 处于 $|s_x^+\rangle$ 。表明两次测量有关联。

当 A 不测量电子 1，而用 B 测量电子 2 的自旋 s_x ，此时电子 2 的自旋态取 $|s_x^+\rangle$ 和 $|s_x^-\rangle$ 的几率各为 50%，表明两次测量无关联。

2) Einstein 定域原理与 Bell 不等式

上面量子力学的自旋测量关联说明，对 B 处的第 2 个粒子的测量依赖于之前 A 处测量第 1 个粒子的哪个物理量，即在 A 处测量不同的物理量会影响在 B 处的测量结果，尽管 A, B 相距很远。

许多物理学家对这种长程关联很困惑。Einstein 等提出定域原理：系统 2 的行为应该不依赖于远离它的系统 1 的状态 (EPR 佯谬)。为了解决这种困惑，许多人提出了隐变量理论：

量子力学是一个还包含其它参数的理论在这些参数隐藏起来（隐变量）后的结果。

我们并不具体讨论隐变量理论，只讨论实验上如何观测 **Einstein** 定域原理与量子力学的差别。

考虑两粒子系统。假设对于其中一个粒子，一测 s_z 就处于 $|s_z^+\rangle$ ，而一测 s_x 就处于 $|s_x^+\rangle$ ，而不依赖于它处的另一个粒子处于什么状态，即满足 **Einstein** 定域原理。标记这种类型的粒子为 (s_z^+, s_x^+) 。当然，仍然认为 s_z 和 s_x 不能同时测量。由于要求整个系统的自旋为单态，另一个粒子必处于类型 (s_z^-, s_x^-) 。依此类推，两粒子测量之间的关联是

粒子 1	粒子 2
(s_z^+, s_x^+)	(s_z^-, s_x^-)
(s_z^+, s_x^-)	(s_z^-, s_x^+)
(s_z^-, s_x^+)	(s_z^+, s_x^-)
(s_z^-, s_x^-)	(s_z^+, s_x^+)

这个结果与上面的量子力学自旋测量（无 **Einstein** 定域关联）结果一致。例如在 **A** 处测第一个粒子 s_z ，在 **B** 处测第二个粒子 s_x 时， s_x 可取值 s_x^+ 和 s_x^- ；当在 **A** 处测第一个粒子 s_x ，在 **B** 处测第二个粒子 s_x 时，两个 s_x 的测量值方向相反，等等。故看不出定域原理的影响。

仍然考虑两粒子系统。但不是只测量两个方向，而是测量 3 个方向 $\vec{e}_a, \vec{e}_b, \vec{e}_c$ 的自旋，即测量 $s_a = \vec{s} \cdot \vec{e}_a$, $s_b = \vec{s} \cdot \vec{e}_b$, $s_c = \vec{s} \cdot \vec{e}_c$ 的取值（注意， $\vec{e}_a, \vec{e}_b, \vec{e}_c$ 不必相互正交）。粒子属于类型 (s_a^+, s_b^+, s_c^+) 说明一测 s_a 就处于 $|s_a^+\rangle$ ，一测 s_b 就处于 $|s_b^+\rangle$ ，一测 s_c 就处于 $|s_c^+\rangle$ （当然不能同时测量）。要求系统处于自旋单态，**Einstein** 定域原理导致在 **A**, **B** 两处测量粒子 1 和粒子 2 的关联是

粒子 1	粒子 2	几率
(s_a^+, s_b^+, s_c^+)	(s_a^-, s_b^-, s_c^-)	N_1
(s_a^+, s_b^+, s_c^-)	(s_a^-, s_b^-, s_c^+)	N_2
(s_a^+, s_b^-, s_c^+)	(s_a^-, s_b^+, s_c^-)	N_3
(s_a^+, s_b^-, s_c^-)	(s_a^-, s_b^+, s_c^+)	N_4
(s_a^-, s_b^+, s_c^+)	(s_a^+, s_b^-, s_c^-)	N_5

$$\left(s_a^-, s_b^+, s_c^-\right) \quad \left(s_a^+, s_b^-, s_c^+\right) \quad N_6$$

$$\left(s_a^-, s_b^-, s_c^+\right) \quad \left(s_a^+, s_b^+, s_c^-\right) \quad N_7$$

$$\left(s_a^-, s_b^-, s_c^-\right) \quad \left(s_a^+, s_b^+, s_c^+\right) \quad N_8$$

A 处的第 1 个粒子处于 $|s_a^+\rangle$ 而 B 处的第 2 个粒子处于 $|s_b^+\rangle$ 的几率是

$$P(s_a^+, s_b^+) = (N_3 + N_4) / \sum_{i=1}^8 N_i,$$

A 处的第 1 个粒子处于 $|s_a^+\rangle$ 而 B 处的第 2 个粒子处于 $|s_c^+\rangle$ 的几率是

$$P(s_a^+, s_c^+) = (N_2 + N_4) / \sum_{i=1}^8 N_i,$$

A 处的第 1 个粒子处于 $|s_c^+\rangle$ 而 B 处的第 2 个粒子处于 $|s_b^+\rangle$ 的几率是

$$P(s_c^+, s_b^+) = (N_3 + N_7) / \sum_{i=1}^8 N_i.$$

由于

$$N_3 + N_4 \leq (N_3 + N_7) + (N_2 + N_4),$$

有

$$P(s_a^+, s_b^+) \leq P(s_a^+, s_c^+) + P(s_c^+, s_b^+),$$

这就是 Bell 不等式，它反映了 Einstein 定域原理对测量的影响。

3) 量子力学与 Bell 不等式

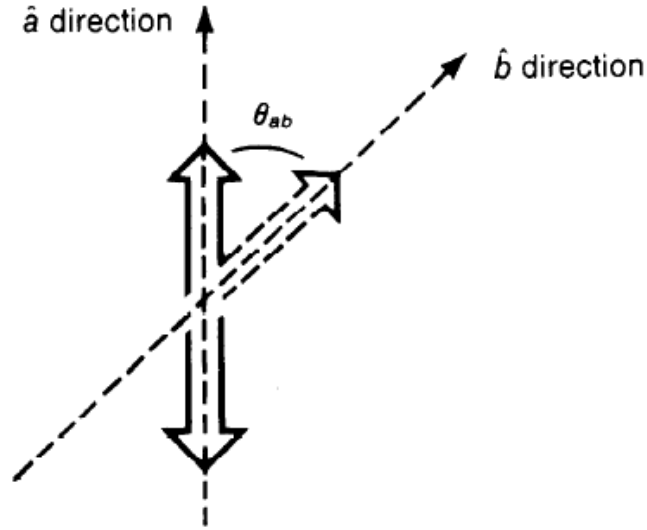
上面的 Bell 不等式的基础是 Einstein 定域原理。在量子力学框架内，Bell 不等式是否成立？下面用量子力学计算 Bell 不等式中的 3 个几率。

当在 A 处测量第 1 个粒子的 s_a 处于 $|s_a^+\rangle$ ，求在 B 处测量第 2 个粒子的 s_b 处于 $|s_b^+\rangle$ 的几率 $P(s_a^+, s_b^+)$ 是多少。由自旋单态，第 2 个粒子的 s_a 必处于 $|s_a^-\rangle$ 。再由前面关于自旋态转动的描述， $|s_a^-\rangle$ 与 \hat{s}_b 的本征态之间可以通过转动联系起来。设 \vec{e}_b 与 \vec{e}_a 之间的夹角为 θ_{ab} ，方位角为 α_{ab} ，如图。对于第 2 个粒子，有

$$|s_a^-\rangle = \cos \frac{\pi - \theta_{ab}}{2} e^{-i\alpha_{ab}/2} |s_b^+\rangle + \sin \frac{\pi - \theta_{ab}}{2} e^{i\alpha_{ab}/2} |s_b^-\rangle,$$

故当第二个粒子的 s_a 处于 $|s_a^-\rangle$ 时 s_b 处于 $|s_b^+\rangle$ 的几率是

$$\cos^2 \frac{\pi - \theta_{ab}}{2} = \sin^2 \frac{\theta_{ab}}{2}.$$



考虑到第 1 个粒子处于 $|s_a^+\rangle$ 的几率是 $1/2$, 有

$$P(s_a^+, s_b^+) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{ab}}{2},$$

同理, 有

$$P(s_a^+, s_c^+) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{ac}}{2},$$

$$P(s_c^+, s_b^+) = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta_{cb}}{2}$$

Bell 不等式

$$P(s_a^+, s_b^+) \leq P(s_a^+, s_c^+) + P(s_c^+, s_b^+)$$

表明, 对任意的 3 个矢量 $\vec{e}_a, \vec{e}_b, \vec{e}_c$ 都有关系

$$\sin^2 \frac{\theta_{ab}}{2} \leq \sin^2 \frac{\theta_{ac}}{2} + \sin^2 \frac{\theta_{cb}}{2}.$$

但是, 这个不等式并不总是成立的。例如, 设 $\vec{e}_a, \vec{e}_b, \vec{e}_c$ 在同一平面上, 如图。设 $\theta_{ab} = 2\theta, \theta_{ac} = \theta_{cb} = \theta$ 。

当

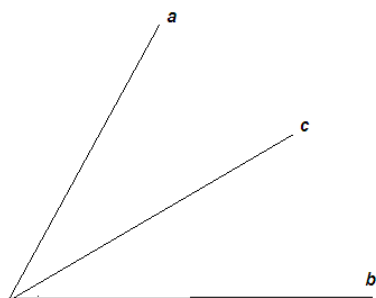
$$0 < \theta < \pi/2,$$

Bell 不等式

$$\sin^2 \theta \leq 2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

不成立。例如，取 $\theta = \pi/4$ ，由 Bell 不等式将有荒谬的结果 $0.5 \leq 0.292$ 。

上面分析表明，量子力学的计算与 Bell 不等式不一致。



3) 实验结果

许多精确实验结果表明 Bell 不等式被破坏，并且结果在误差范围内与量子力学的预言一致。

但是，如何理解量子力学，特别是测量，仍然是一个没有完全解决的问题。

第四章：近似方法

Schroedinger 方程

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

可以精确求解的物理问题太少，大部分实际问题由于 \hat{H} 的构造太复杂，不能严格求解，只能用近似方法。不同的问题用不同的近似方法。

1. 定态微扰论思想

当 \hat{H} 不含时，应用分离变量法，定态 $|\psi_n, t\rangle = |n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$ ，能量 E_n 与能量本征态 $|n\rangle$ 满足定态 Schroedinger 方程

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle.$$

令

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)},$$

要求：

- 1) $\hat{H}^{(0)}$ 包含了 \hat{H} 的主要部分，即 $\hat{H}^{(1)}$ 很小。由于 $\hat{H}^{(0)}$ 与 $\hat{H}^{(1)}$ 均为算符，比较大小可从经典对应来理解。严格来说，是比较这两个算符的矩阵元，见下面讨论。
- 2) 要求 $\hat{H}^{(0)}$ 的定态方程 $\hat{H}^{(0)} |n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |n\rangle^{(0)}$ 可严格求解。

将 E_n 和 $|n\rangle$ 展开：

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots,$$
$$|n\rangle = |n\rangle^{(0)} + |n\rangle^{(1)} + |n\rangle^{(2)} + \dots$$

代入待求的定态 Schroedinger 方程

$$\left(\hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}\right) \left(|n\rangle^{(0)} + |n\rangle^{(1)} + |n\rangle^{(2)} + \dots\right) = \left(E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \dots\right) \left(|n\rangle^{(0)} + |n\rangle^{(1)} + |n\rangle^{(2)} + \dots\right),$$

然后，逐级近似求解该方程。

零级近似：

$$\hat{H}^{(0)} |n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |n\rangle^{(0)} \rightarrow E_n^{(0)} \text{ 和 } |n\rangle^{(0)}.$$

一级近似：

$$\hat{H}^{(0)} |n\rangle^{(1)} + \hat{H}^{(1)} |n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |n\rangle^{(1)} + E_n^{(1)} |n\rangle^{(0)}$$

即

$$\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)|n\rangle^{(1)} = -\left(\hat{H}^{(1)} - E_n^{(1)}\right)|n\rangle^{(0)} \rightarrow E_n^{(1)} \text{ 和 } |n\rangle^{(1)}.$$

二级近似:

$$\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)|n\rangle^{(2)} = -\left(\hat{H}^{(1)} - E_n^{(1)}\right)|n\rangle^{(1)} + E_n^{(2)}|n\rangle^{(0)} \rightarrow E_n^{(2)} \text{ 和 } |n\rangle^{(2)}.$$

.....

一般情形, 只求到第一个不为零的修正项。

微扰论的基础是 $H^{(0)}$ 的本征值 $E_n^{(0)}$ 和本征态 $|n\rangle^{(0)}$ 。求高阶修正要考虑 $E_n^{(0)}$ 是否有简并。

先考虑 $E_n^{(0)}$ 无简并情形。

2. 无简并微扰论

1) 将一级近似方程进入 $H^{(0)}$ 表象:

$$\begin{aligned} |n\rangle^{(1)} &= \sum_i |i\rangle^{(0)} \langle i|n\rangle^{(1)} \\ \sum_i \left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)|i\rangle^{(0)} \langle i|n\rangle^{(1)} &= -\left(\hat{H}^{(1)} - E_n^{(1)}\right)|n\rangle^{(0)} \end{aligned}$$

左乘 $\langle m|^{(0)}$, 得

$$\begin{aligned} \sum_i \left(E_i^{(0)} - E_n^{(0)}\right) \delta_{mi} \langle i|n\rangle^{(1)} &= -\langle m|\hat{H}^{(1)}|n\rangle^{(0)} + E_n^{(1)} \delta_{mn}, \\ &= -H_{mn}^{(1)} + E_n^{(1)} \delta_{mn}, \end{aligned}$$

其中, $H_{mn}^{(1)} = \langle m|\hat{H}^{(1)}|n\rangle^{(0)}$ 是 $\hat{H}^{(1)}$ 在 $H^{(0)}$ 表象的矩阵元。上面已经考虑了 $\hat{H}^{(0)}$ 的本征态的正交归一化。

$$\left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right) \langle m|n\rangle^{(1)} = -H_{mn}^{(1)} + E_n^{(1)} \delta_{mn}$$

当 $m = n$ 时,

$$E_n^{(1)} = H_{nn}^{(1)},$$

当 $m \neq n$ 时,

$$\langle m|n\rangle^{(1)} = \frac{H_{mn}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}},$$

为了求得完整的 $|n\rangle^{(1)} = \sum_m |m\rangle^{(0)(0)} \langle m|n\rangle^{(1)}$, 还需知道 ${}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(1)}$ 。

由近似到一级的归一化 (忽略二级及二级以上高级修正):

$$\begin{aligned} 1 &= \langle n|n\rangle \\ &= \left({}^{(0)}\langle n| + {}^{(1)}\langle n| \right) \left(|n\rangle^{(0)} + |n\rangle^{(1)} \right) \quad , \\ &\simeq {}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(0)} + {}^{(1)}\langle n|n\rangle^{(0)} + {}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(1)} \end{aligned}$$

由于

$${}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(0)} = 1,$$

有

$${}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(1)} + {}^{(1)}\langle n|n\rangle^{(0)} = 0,$$

$${}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(1)} + \left({}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(1)} \right)^* = 0,$$

要求 ${}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(1)}$ 的实部为零, 只有虚部, 即

$${}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(1)} = i\alpha$$

故

$$\begin{aligned} |n\rangle &= |n\rangle^{(0)} + \sum_m |m\rangle^{(0)(0)} \langle m|n\rangle^{(1)} \\ &= |n\rangle^{(0)} + i\alpha |n\rangle^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{H_{mn}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle^{(0)} \\ &\simeq e^{i\alpha} |n\rangle^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{H_{mn}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle^{(0)} \\ &\simeq e^{i\alpha} \left(|n\rangle^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{H_{mn}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle^{(0)} \right) \quad (\text{近似到一级}) \end{aligned}$$

说明: ${}^{(0)}\langle n|n\rangle^{(1)} = i\alpha$ 的贡献对于一级修正只是增加一个相因子, 不影响几率分布。可取 $\alpha = 0$,

近似到一级的定态 **Schrodinger** 方程的解是

$$\begin{cases} E_n = E_n^{(0)} + H_{nn}^{(1)} \\ |n\rangle = |n\rangle^{(0)} + \sum_{m \neq n} \frac{H_{mn}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle^{(0)} \quad . \end{cases}$$

2) 将二级近似方程进入 $\hat{H}^{(0)}$ 表象:

$$|n\rangle^{(2)} = \sum_i |i\rangle^{(0)} \langle i|n\rangle^{(2)}$$

$$\sum_i (\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}) |i\rangle^{(0)} \langle i|n\rangle^{(2)} = -\sum_{i \neq n} (\hat{H}^{(1)} - E_n^{(1)}) |i\rangle^{(0)} \langle i|n\rangle^{(1)} + E_n^{(2)} |n\rangle^{(0)}$$

左乘 $\langle m|$, 得

$$\sum_i (E_i^{(0)} - E_n^{(0)}) \delta_{mi} \langle i|n\rangle^{(2)} = -\sum_{i \neq n} (H_{mi}^{(1)} - E_n^{(1)} \delta_{mi}) \langle i|n\rangle^{(1)} + E_n^{(2)} \delta_{mn}$$

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) \langle m|n\rangle^{(2)} = -\sum_{i \neq n} H_{mi}^{(1)} \langle i|n\rangle^{(1)} + E_n^{(1)} \langle m|n\rangle^{(1)} + E_n^{(2)} \delta_{mn}$$

当 $m = n$ 时, $\langle n|n\rangle^{(1)} = i\alpha = 0$,

$$E_n^{(2)} = \sum_{i \neq n} H_{ni}^{(1)} \langle i|n\rangle^{(1)}$$

$$= \sum_{i \neq n} \frac{H_{ni}^{(1)} H_{in}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} = \sum_{i \neq n} \frac{|H_{in}^{(1)}|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}$$

当 $m \neq n$ 时, 可以得到 $\langle m|n\rangle^{(2)}$ (自己看书, 计算)。

于是, 近似到二级的定态 **Schrodinger** 方程的解是

$$\begin{cases} E_n = E_n^{(0)} + H_{nn}^{(1)} + \sum_{i \neq n} \frac{|H_{in}^{(1)}|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \\ |n\rangle = |n\rangle^{(0)} + \sum_{i \neq n} \frac{H_{in}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} |i\rangle^{(0)} + |n\rangle^{(2)} \end{cases}$$

3) 收敛性讨论:

微扰论能实际应用的条件是收敛性, 即

$$\left| \frac{H_{in}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \right| \ll 1,$$

即 $|H_{in}^{(1)}| \ll |E_n^{(0)} - E_i^{(0)}|$ 。

这就是 $\hat{H}^{(1)}$ 远小于 $\hat{H}^{(0)}$ 的意义: 在 $H^{(0)}$ 表象, $\hat{H}^{(1)}$ 的矩阵元远小于两个对应能级之差。

由此可知:

(1) 上述方法只适用于 $\hat{H}^{(0)}$ 有分离谱。对于连续谱, $|E_n^{(0)} - E_i^{(0)}| \rightarrow 0$, 上述不等式不可能成立。

(2) $\hat{H}^{(0)}$ 有简并时也不能用。有简并时, 对态求和 \sum_i 包含了与 $|n\rangle^{(0)}$ 有相同能量 $E_n^{(0)}$ 的简

并态，

此时 $|E_n^{(0)} - E_i^{(0)}| = 0$ ，上述不等式也不可能成立。

例题：带电谐振子在外电场中的运动。设电荷为 q ，场强 ε ，

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 - q \varepsilon x$$

对于弱电场 ε ，取

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)},$$

$$\hat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2,$$

$$\hat{H}^{(1)} = -q \varepsilon x$$

零级近似：

$$\hat{H}^{(0)} |n\rangle^{(0)} = E_n^{(0)} |n\rangle^{(0)},$$

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

$\langle x | n \rangle^{(0)} = \psi_n(x)$ ，厄米多项式，能级无简并，分离谱。

一级近似：

$$E_n^{(1)} = H_{nn}^{(1)} = -q \varepsilon x_{nn},$$

$$x_{mm} = {}^{(0)} \langle m | \hat{x} | m \rangle^{(0)} = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}} \left(\sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} \right), \quad x_{mm} = 0, \quad E_n^{(1)} = 0.$$

$$\begin{aligned} |n\rangle^{(1)} &= \sum_{m \neq n} \frac{H_{mn}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle^{(0)} \\ &= -q \varepsilon \sum_{m \neq n} \frac{x_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m\rangle^{(0)} \\ &= -q \varepsilon \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(\frac{\sqrt{n+1}}{E_n^{(0)} - E_{n+1}^{(0)}} |n+1\rangle^{(0)} + \frac{\sqrt{n}}{E_n^{(0)} - E_{n-1}^{(0)}} |n-1\rangle^{(0)} \right) \\ &= \frac{q \varepsilon}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}} \left(\sqrt{n+1} |n+1\rangle^{(0)} - \sqrt{n} |n-1\rangle^{(0)} \right). \end{aligned}$$

进入坐标表象：

$$\begin{aligned}
\psi_n^{(1)}(x) &= \langle x|n \rangle^{(1)} \\
&= \frac{q\varepsilon}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}} \left(\sqrt{n+1} \langle x|n+1 \rangle^{(0)} - \sqrt{n} \langle x|n-1 \rangle^{(0)} \right) \\
&= \frac{q\varepsilon}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}} \left(\sqrt{n+1} \psi_{n+1}^{(0)}(x) - \sqrt{n} \psi_{n-1}^{(0)}(x) \right).
\end{aligned}$$

二级近似:

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} \frac{|H_{mn}^{(1)}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\
&= \frac{\varepsilon^2 q^2 \hbar}{m\omega} \sum_{m \neq n} \frac{\left(\sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{m,n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{m,n-1} \right)^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\
&= -\frac{\varepsilon^2 q^2}{2m\omega^2}
\end{aligned}$$

故精确到第一个不为零的修正项, 有

$$\begin{cases} E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{\varepsilon^2 q^2}{2m\omega^2} \\ \psi_n(x) = \psi_n^{(0)}(x) + \psi_n^{(1)}(x) \\ \quad = \psi_n^{(0)}(x) + \frac{q\varepsilon}{\sqrt{2m\hbar\omega^3}} \left(\sqrt{n+1} \psi_{n+1}^{(0)}(x) - \sqrt{n} \psi_{n-1}^{(0)}(x) \right) \end{cases}$$

能否有精确解?

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - q\varepsilon x \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

配平方:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2} \right)^2 \right) \psi(x) = \left(E + \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2} \right) \psi(x)$$

令

$$\xi = x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2},$$

有

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\xi^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \xi^2 \right) \psi(\xi) = \left(E + \frac{q^2 \varepsilon^2}{2m\omega^2} \right) \psi(\xi)$$

解为

$$\begin{cases} E_n + \frac{\varepsilon^2 q^2}{2m\omega^2} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega & \rightarrow E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{\varepsilon^2 q^2}{2m\omega^2} \\ \psi_n(\xi) = \psi_n\left(x - \frac{q\varepsilon}{m\omega^2}\right), & \text{厄米多项式} \end{cases}$$

说明：能量近似到二级已是精确解。

3. 简并微扰论

$$\hat{H}^{(0)}|n,i\rangle^{(0)} = E_n^{(0)}|n,i\rangle^{(0)}, \quad i=1,2,\dots,a,$$

零级能量有 a 重简并，但通过 **Schmidt** 方法或引入力学量组等可以保证互相之间正交归一，

$${}^{(0)}\langle n,i|n,j\rangle^{(0)} = \delta_{ij}.$$

问题：选取 $|n,i\rangle^{(0)}$ 中的哪一个作为 $E_n^{(0)}$ 的波函数？

取一般形式，

$$|n\rangle^{(0)} = \sum_{i=1}^a c_i |n,i\rangle^{(0)},$$

它仍是 $\hat{H}^{(0)}$ 的属于 $E_n^{(0)}$ 的本征态。

问题： c_i 怎样取？

将 $|n\rangle^{(0)}$ 代入一级近似方程：

$$(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)})|n\rangle^{(1)} = -(\hat{H}^{(1)} - E_n^{(1)})|n\rangle^{(0)},$$

有
$$(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)})|n\rangle^{(1)} = -\sum_{i=1}^a c_i (\hat{H}^{(1)} - E_n^{(1)})|n,i\rangle^{(0)},$$

左乘 ${}^{(0)}\langle n,j|$ ：

$$0 = \sum_{i=1}^a c_i (H_{ji}^{(1)} - E_n^{(1)}\delta_{ji}), \quad H_{ji}^{(1)} = {}^{(0)}\langle n,j|\hat{H}^{(1)}|n,i\rangle^{(0)},$$

这是关于系数 c_i 的齐次方程组（ a 个方程， $j=1,\dots,a$ ）确定 a 个系数 c_i （ $i=1,\dots,a$ ）。 c_i 不

全为零的条件是系数行列式等于零：

$$\begin{vmatrix} H_{11}^{(1)} - E_n^{(1)} & H_{12}^{(1)} & \cdots & H_{1a}^{(1)} \\ H_{21}^{(1)} & H_{22}^{(1)} - E_n^{(1)} & \cdots & H_{2a}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{a1}^{(1)} & H_{a2}^{(1)} & \cdots & H_{aa}^{(1)} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0,$$

由此久期方程决定能量的一级修正 $E_n^{(1)}$ 的 a 个根 $E_{ni}^{(1)}$ ， $i=1,\dots,a$

$$E_n^{(0)} \rightarrow E_{ni} = E_n^{(0)} + E_{ni}^{(1)}$$

如果久期方程的 a 个根互不相等，间并完全消去，如果有重根，间并部分消去。

注意：如果 $\hat{H}^{(1)}$ 在简并子空间中是对角矩阵，则 $E_{ni}^{(1)} = H_{ii}^{(1)}$ 。

将每一个 $E_{ni}^{(1)}$ 代回齐次方程组，可以得到一组系数 $\{c_{i1}, c_{i2}, \dots, c_{ia}\}$ ，则得到一个与 E_{ni} 相应的 \hat{H} 的零级波函数：

$$E_{ni} = E_n^{(0)} + E_{ni}^{(1)},$$

$$|n\rangle_i^{(0)} = \sum_{j=1}^a c_{ij} |n, j\rangle^{(0)},$$

高级修正见参考书。

例 1：二重简并体系 $E_n^{(0)}$ ， $|n, 1\rangle^{(0)}$ ， $|n, 2\rangle^{(0)}$ 。

在 2 维简并子空间中的久期方程为

$$\begin{vmatrix} H_{11}^{(1)} - E_n^{(1)} & H_{12}^{(1)} \\ H_{21}^{(1)} & H_{22}^{(1)} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad H_{ij}^{(1)} = {}^{(0)}\langle n, i | \hat{H}^{(1)} | n, j \rangle^{(0)}, \quad i, j = 1, 2,$$

即

$$(E_n^{(1)})^2 - (H_{11}^{(1)} + H_{22}^{(1)})E_n^{(1)} + H_{11}^{(1)}H_{22}^{(1)} - |H_{12}^{(1)}|^2 = 0,$$

$$E_n^{(1)} = \frac{1}{2} \left[(H_{11}^{(1)} + H_{22}^{(1)}) \pm \sqrt{(H_{11}^{(1)} - H_{22}^{(1)})^2 + 4|H_{12}^{(1)}|^2} \right]$$

若

$$H_{12}^{(1)} = 0,$$

则

$$E_{n1}^{(1)} = H_{11}^{(1)}, \quad E_{n2}^{(1)} = H_{22}^{(1)}, \quad E_{n1} = E_n^{(0)} + H_{11}^{(1)}, \quad E_{n2} = E_n^{(0)} + H_{22}^{(1)}.$$

例 2：外电场中的氢原子（Stark Effect）。选外电场 $\bar{\varepsilon}$ 的方向为 z 轴，

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \bar{\nabla}^2 - \frac{e^2}{r} + e\bar{\varepsilon} \cdot \bar{r} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \bar{\nabla}^2 - \frac{e^2}{r} + e\varepsilon r \cos\theta \end{aligned}$$

对于弱电场 ε ，

$$\hat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \bar{\nabla}^2 - \frac{e^2}{r},$$

$$\hat{H}^{(1)} = e\epsilon r \cos \theta$$

零级近似:

$$E_n^{(0)} = -\frac{\mu e^4}{2n^2 \hbar^2},$$

$$\psi_{nlm}(\vec{r}), \quad l=0, \dots, n-1, \quad m=-l, \dots, l, \quad \text{简并度 } g = \sum_{l=0}^{n-1} 2l+1 = n^2$$

对于 $n=2$, 零级能量和态:

$$E_2^{(0)}, \quad 4 \text{ 重简并态 } \varphi_1 = \psi_{200}, \quad \varphi_2 = \psi_{210}, \quad \varphi_3 = \psi_{211}, \quad \varphi_4 = \psi_{21-1}.$$

为求解久期方程, 先计算微扰矩阵元

$$H_{ij}^{(1)} = \int d^3\vec{r} \varphi_i^*(\vec{r}) \hat{H}^{(1)} \varphi_j(\vec{r}), \quad i, j = 1, 2, 3, 4,$$

有

$$H_{12}^{(1)} = H_{21}^{(1)} = -3e\epsilon a_0, \quad \text{其他矩阵元都为零。}$$

在 4 维简并子空间中的久期方程为

$$\begin{vmatrix} -E_2^{(1)} & -3e\epsilon a_0 & 0 & 0 \\ -3e\epsilon a_0 & -E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0$$

有

$$E_{2,1}^{(1)} = 3e\epsilon a_0, \quad E_{2,2}^{(1)} = -3e\epsilon a_0, \quad E_{2,3}^{(1)} = E_{2,4}^{(1)} = 0.$$

$$\begin{array}{l} \text{---} E_2^{(0)} + 3e\epsilon a_0 \\ \text{---} E_2^{(0)} (4\text{重简并}) \rightarrow \text{---} E_2^{(0)} (2\text{重简并}) \\ \text{---} E_2^{(0)} - 3e\epsilon a_0 \end{array}$$

零级能量 $E_2^{(0)}$ 的 4 重简并部分消除。

例 3: 氢原子的相对论修正。

非相对论动能

$$T = \frac{p^2}{2m},$$

相对论动能

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 = mc^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} - mc^2 = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2} + \dots,$$

只保留 p^4 项，有相对论哈密顿量

$$\hat{H} = \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 - \frac{e^2}{r} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} - \frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2}.$$

取

$$\hat{H}^{(0)} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r},$$

$$\hat{H}^{(1)} = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2}.$$

零级近似:

$$\text{能量 } E_n^{(0)}, \quad n^2 \text{ 重简并态 } \langle \vec{r} | nlm \rangle = \psi_{nlm}(\vec{r}) = N_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

在 n^2 维简并子空间中的微扰矩阵元

$$\begin{aligned} H_{nlm, n'l'm'}^{(1)} &= \langle nlm | \hat{H}^{(1)} | n'l'm' \rangle \\ &= -\frac{1}{8m^3 c^2} \langle nlm | \hat{p}^4 | n'l'm' \rangle, \end{aligned}$$

由 $\hat{H}^{(0)}$ 的定态 Schrodinger 方程

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \right) |nlm\rangle = E_n^{(0)} |nlm\rangle,$$

$$\hat{p}^2 |nlm\rangle = 2m(E_n^{(0)} - V(r)) |nlm\rangle,$$

$$\langle nlm | \hat{p}^2 = 2m \langle nlm | (E_n^{(0)} - V(r)),$$

故

$$\begin{aligned} H_{nlm, n'l'm'}^{(1)} &= -\frac{1}{2mc^2} \langle nlm | (E_n^{(0)} - V(r))^2 | n'l'm' \rangle \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left[(E_n^{(0)})^2 \delta_{ll'} \delta_{mm'} - 2E_n^{(0)} \langle nlm | V(r) | n'l'm' \rangle + \langle nlm | V^2(r) | n'l'm' \rangle \right] \end{aligned}$$

由于 $V(r)$ 与 θ, φ 无关,

$$\langle nlm | V(r) | n'l'm' \rangle = \int dr r^2 N_{nl}(r) \frac{e^2}{r} N_{n'l'}(r) \delta_{ll'} \delta_{mm'} = -\frac{e^2}{n^2 a} \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

$$\langle nlm|V^2(r)|n'l'm'\rangle = \frac{e^4}{(l+1/2)n^3a^2} \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

故

$$H_{nlm,n'l'm'}^{(1)} = H_{nl}^{(1)} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$H_{nl}^{(1)} = -\frac{1}{2mc^2} \left((E_n^{(0)})^2 + \frac{2e^2}{n^2a} E_n^{(0)} + \frac{e^4}{(l+1/2)n^3a^2} \right)$$

说明：微扰矩阵元 $H_{nlm,n'l'm'}^{(1)}$ 在由 \hat{L}^2, \hat{L}_z 的本征态构成的简并空间中是对角的，久期方程的根是

$$E_{nl}^{(1)} = H_{nl}^{(1)}$$

$$E_n^{(0)} (n^2 \text{重简并}) \rightarrow E_{nl} = E_n^{(0)} + H_{nl}^{(1)} (2l+1 \text{重简并})$$

例 4：光谱的精细结构。

考虑氢原子的自旋-轨道耦合

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}$$

$$\hat{H}^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r)$$

$$\hat{H}^{(1)} = -\frac{1}{2\mu^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \hat{L} \cdot \hat{s} = \xi(r) \hat{L} \cdot \hat{s}$$

零级近似：本征值 $E_n^{(0)}$ ，考虑自旋以后， $2n^2$ 重简并态。简并空间可用力学量完备组

$\{\hat{H}^{(0)}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}_z\}$ 构成的无耦合表象中的 $|nlm_l m_s\rangle$ 描述，也可用力学量完备组 $\{\hat{H}^{(0)}, \hat{L}^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z\}$

构成的有耦合表象中的 $|nlj m_j\rangle$ 描述。

零级态有简并，需求解久期方程。到底取哪个表象？

若在无耦合表象考虑久期方程，由于 $[\hat{H}^{(1)}, \hat{L}_z] \neq 0$ ， $[\hat{H}^{(1)}, \hat{S}_z] \neq 0$ ，态 $|nlm_l m_s\rangle$ 不是 $\hat{H}^{(1)}$ 的本征态，那么矩阵 $\hat{H}^{(1)}$ 在简并空间有非对角元 $\langle nlm_l m_s | \hat{H}^{(1)} | n'l'm'_l m'_s \rangle$ ，久期方程结构会很复杂。

若在有耦合表象考虑久期方程，由于 $[\hat{H}^{(1)}, \hat{J}^2] = [\hat{H}^{(1)}, \hat{L}^2] = [\hat{H}^{(1)}, \hat{J}_z] = 0$ ，即态 $|nlj m_j\rangle$ 是 $\hat{H}^{(1)}$ 的本征态，故 $H^{(1)}$ 矩阵是对角矩阵，能量的一级修正就是对角元

$$\begin{aligned}
E_{nlj}^{(1)} &= \langle nljm_j | \hat{H}^{(1)} | nljm_j \rangle \\
&= \langle nljm_j | \xi(r) \hat{L} \cdot \hat{S} | nljm_j \rangle \\
&= \langle nljm_j | \frac{\xi(r)}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) | nljm_j \rangle, \\
&= \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \int_0^\infty R_{nl}^2(r) \xi(r) r^2 dr \\
E_n^{(0)} (2n^2 \text{重间并}) &\rightarrow E_{nlj} = E_n^{(0)} + E_{nlj}^{(1)} \quad (2j+1 \text{重间并}).
\end{aligned}$$

例如取 $n=2$,

$$E_2^{(0)} (8 \text{重间并}) \rightarrow E_{nlj} = \begin{cases} E_2^{(0)} + E_{21\frac{3}{2}}^{(1)} (4 \text{重间并}) \\ E_2^{(0)} + E_{21\frac{1}{2}}^{(1)} (2 \text{重间并}) \\ E_2^{(0)} + E_{20\frac{1}{2}}^{(1)} (2 \text{重间并}) \end{cases}$$

注意: $l=0$ 时, $j=s$, $E_{20\frac{1}{2}}^{(1)}=0$ 。

4. 变分法

非微扰近似方法求解定态方程。

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle,$$

对于任意态

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle,$$

能量平均值

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \\
&= \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle m | \hat{H} | n \rangle \\
&= \sum_{n,m} c_m^* c_n E_n \delta_{mn} \\
&= \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0
\end{aligned}$$

变分方法思想:

取不同的态 $|\psi\rangle$, 计算 $\langle E \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$, 其中最小的 $\langle E \rangle$ 最接近 E_0 , 可近似看成基态能 E_0 。

方法:

由体系的物理性质猜测含参量 λ 的尝试波函数 $|\psi(\lambda)\rangle$, 计算

$$\langle E \rangle(\lambda) = \langle \psi(\lambda) | \hat{H} | \psi(\lambda) \rangle,$$

由 $\frac{d\langle E \rangle(\lambda)}{d\lambda} = 0, \frac{d^2\langle E \rangle(\lambda)}{d\lambda^2} > 0 \rightarrow \lambda_0$, 能量最小值 $\langle E \rangle(\lambda_0)$ 。

则基态能 $E_0 \approx \langle E \rangle(\lambda_0)$ 。

例: 氦原子。

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_2^2 - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|} \\ &= \hat{H}^{(0)} + \frac{e^2}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|} \end{aligned}$$

这里已近似认为原子核固定不动。考虑基态。对于 $\hat{H}^{(0)}$,

$$\text{基态能量 } E_0^{(0)} = -4 \frac{e^2}{a_0}$$

$$\text{基态 } \psi_0(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \psi_{100}(\bar{r}_1) \psi_{100}(\bar{r}_2), \quad \psi_{100}(\bar{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-\frac{Z}{a_0} r}, \quad Z = 2.$$

对于 \hat{H} , 考虑两电子间相互作用后, 两电子之间的屏蔽使得有效电荷 $Z < 2$ 。取 Z 为参数,

$\psi_0(\bar{r}_1, \bar{r}_2, Z)$ 为 \hat{H} 的尝试波函数。由于 \hat{H} 与自旋无关,

$$\begin{aligned} \langle E \rangle(Z) &= \int \psi_0^*(\bar{r}_1, \bar{r}_2, Z) \hat{H} \psi_0(\bar{r}_1, \bar{r}_2, Z) d^3\bar{r}_1 d^3\bar{r}_2, \\ &= \left(-2Z^2 + \frac{27}{4}Z \right) \frac{-e^2}{2a}, \end{aligned}$$

由 $\frac{d\langle E \rangle(Z)}{dZ} = 0, \frac{d^2\langle E \rangle(Z)}{dZ^2} > 0$

得 $Z_0 = \frac{27}{16} < 2$,

基态能 $E_0 \approx \langle E \rangle(Z_0) = -2.85 \frac{e^2}{a_0}$, 与 E_0 对应的基态波函数为 $\psi_0(\bar{r}_1, \bar{r}_2, Z_0)$ 。

也可用微扰论的方法来求解基态能量修正:

$$\hat{H}^{(1)} = \frac{e^2}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|},$$

基态不简并，用非简并微扰论，得

$$E_0^{(1)} = \int d^3\bar{r}_1 d^3\bar{r}_2 \psi^*(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \frac{e^2}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|} \psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \frac{5}{4} \frac{e^2}{a_0},$$

$$E_0 \simeq E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = -4 \frac{e^2}{a_0} + \frac{5}{4} \frac{e^2}{a_0} = -2.75 \frac{e^2}{a_0}.$$

基态能实验值为 $-2.904 \frac{e^2}{a_0}$ 。可见，变分的结果更接近实验值，更好。

5. 强耦合 Schrodinger 方程

1999 年, 李政道等提出了一种求解强耦合 Schrodinger 方程的方法, 以下用 Yukawa 势为例来简单介绍。

Yukawa 势

$$V(r) = -g^2 \frac{e^{-\alpha r}}{r}, \quad \text{强耦合 } g > 1.$$

能量本征方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \bar{\nabla}^2 + V(r) \right) \psi(\bar{r}) = E \psi(\bar{r})$$

无严格解析解。令 $\hbar = 1$, 以简化计算过程。

基态波函数与角度无关, 令

$$\psi(r) = e^{-S(r)},$$

将本征值 E 和本征态的指数函数 $S(r)$ 用 $1/g^2$ 来展开:

$$E = g^4 E_0 + g^2 E_1 + E_2 + \dots,$$

$$S = g^2 S_0 + S_1 + g^{-2} S_2 + \dots$$

这样展开的目的是使得 V 不出现在 E_0 与 S_0 的方程中。代入定态 Schrodinger 方程, 并比较 g 的相同幂次, 得到

$$\text{零级方程: } (\bar{\nabla} S_0)^2 = -2mE_0$$

$$\text{一级方程: } \bar{\nabla} S_0 \cdot \bar{\nabla} S_1 = \frac{1}{2} \bar{\nabla}^2 S_0 - m \left(\frac{e^{-\alpha r}}{r} + E_1 \right)$$

$$\text{二级方程: } \bar{\nabla} S_0 \cdot \bar{\nabla} S_2 = -\frac{1}{2} (\bar{\nabla} S_1)^2 + \frac{1}{2} \bar{\nabla}^2 S_1 - mE_2$$

.....

零级方程的解

$$S_0(r) = \sqrt{-2mE_0} r,$$

开方只取正号是考虑了无穷远处波函数 $\psi(r)$ 有限的约束条件。将 $S_0(r)$ 代入一级方程

$$\sqrt{-2mE_0} \frac{dS_1}{dr} = \frac{1}{r} (\sqrt{-2mE_0} - me^{-\alpha r}) - mE_1,$$

要求 ψ 和 ψ' 的一级导数连续, 即 S_0, S_1, S_2, \dots 和它们的一级导数连续, 故要求 $\frac{dS_1}{dr}$ 在 $r=0$ 处非奇异 (S_0 及其一级导数是连续的), 有

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\sqrt{-2mE_0} - me^{-\alpha r}}{r} \text{ 有限,}$$

故

$$\begin{aligned} E_0 &= -m/2, \\ S_0(r) &= mr, \\ S_1 &= \int_0^r dr' \left[\frac{1}{r'} (1 - e^{-\alpha r'}) - E_1 \right] \end{aligned}$$

代入二级方程, 要求 $\frac{dS_2}{dr}$ 在 $r=0$ 处非奇异, 有

$$E_1 = \alpha.$$

如此逐级求解, 基态能

$$E = -\frac{m}{2} g^4 + \alpha g^2 - \frac{3\alpha^2}{4m} + \frac{\alpha^2}{2m^2} g^{-2} + \dots.$$

若取 $\alpha=0$, 汤川势退化为库仑势, 此时

$$\begin{cases} E = -\frac{m}{2} g^4 \\ \psi(r) = e^{-g^2 S_0(r)} = e^{-mg^2 r} \end{cases},$$

与氢原子问题的基态严格解完全相同。

6. 含时微扰论

Schrodinger 方程为

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

其中 $\hat{H}(t)$ 可写成:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)}(t),$$

$$\hat{H}^{(0)} |m\rangle = E_m |m\rangle.$$

问题: 系统在 $t \leq 0$ 时 $\hat{H} = \hat{H}^{(0)}$ 不含时, 可以处于定态, 设在 $t=0$ 时处于定态 $|n\rangle$ 。当 $t > 0$ 时,

$\hat{H}(t)$ 含时，系统不再稳定地处于定态 $|n\rangle$ ，而是以一定几率处于不同的定态。 t 时刻时，系统所处的态为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m a_m(t) |m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t},$$

处于定态 $|m\rangle$ 的几率为 $|a_m(t)|^2$ 。对于含时微扰问题，就是要求在宏观时间后 ($t \rightarrow \infty$) 系统从一个初始定态 $|n\rangle$ 跃迁到另一个定态 $|m\rangle$ 的跃迁几率：

$$\lim_{t \rightarrow \infty} W_{n \rightarrow m}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} |a_m(t)|^2。$$

1) 跃迁方程

将 $|\psi(t)\rangle$ 的展开式代入 Schrodinger 方程：

$$i\hbar \sum_m \dot{a}_m |m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} + \sum_m a_m E_m |m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} = \sum_m a_m \hat{H}^{(0)} |m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} + \sum_m a_m \hat{H}^{(1)}(t) |m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t},$$

左边第二项与右边第一项消去得：

$$i\hbar \sum_m \dot{a}_m |m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} = \sum_m a_m \hat{H}^{(1)}(t) |m\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t}$$

左乘 $\langle k|$ ，得

$$i\hbar \dot{a}_k e^{-\frac{i}{\hbar} E_k t} = \sum_m a_m H_{km}^{(1)}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t},$$

其中

$$H_{km}^{(1)}(t) = \langle k | \hat{H}^{(1)}(t) | m \rangle$$

是 $\hat{H}^{(1)}(t)$ 在 $\hat{H}^{(0)}$ 表象的矩阵元。故有：

$$\begin{cases} i\hbar \dot{a}_k = \sum_m a_m H_{km}^{(1)}(t) e^{i\omega_{km}t}, & \omega_{km} = \frac{E_k - E_m}{\hbar} \\ a_k(0) = \delta_{kn} \end{cases}。$$

2) 微扰求解

令

$$a_k(t) = a_k^{(0)}(t) + a_k^{(1)}(t) + \dots,$$

代入跃迁方程，得：

$$i\hbar(\dot{a}_k^{(0)}(t) + \dot{a}_k^{(1)}(t) + \dots) = \sum_m (a_m^{(0)}(t) + a_m^{(1)}(t) + \dots) H_{km}^{(1)}(t) e^{i\omega_{kn}t},$$

那么，零级方程为

$$\begin{cases} i\hbar\dot{a}_k^{(0)}(t) = 0 \\ a_k^{(0)}(0) = \delta_{kn} \end{cases},$$

解得

$$a_k^{(0)}(t) = \delta_{kn}.$$

一级方程为

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{a}_k^{(1)}(t) &= \sum_m a_m^{(0)}(t) H_{km}^{(1)}(t) e^{i\omega_{kn}t} \\ &= H_{kn}^{(1)}(t) e^{i\omega_{kn}t}, \end{aligned}$$

解得

$$a_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H_{kn}^{(1)}(t') e^{i\omega_{kn}t'} dt',$$

那么由 $|n\rangle$ 跃迁到 $|k\rangle$ ($k \neq n$) 的几率幅为

$$a_k(t) \approx a_k^{(1)}(t),$$

则跃迁几率为：

$$W_{n \rightarrow k}(t) \approx |a_k^{(1)}(t)|^2.$$

3) 周期性微扰

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(1)}(t) &= \hat{A} \cos \omega t \\ &= \hat{F} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \end{aligned}$$

其中 \hat{A} , \hat{F} 与 t 无关。

那么一级跃迁振幅为

$$\begin{aligned} a_m^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H_{mn}^{(1)}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' \\ &= \frac{F_{mn}}{i\hbar} \int_0^t (e^{i(\omega_{mn} + \omega)t'} + e^{i(\omega_{mn} - \omega)t'}) dt', \end{aligned}$$

其中 ω_{mn} 为跃迁频率， ω 为外场频率。积分得：

$$a_m^{(1)}(t) = \frac{F_{mn}}{\hbar} \left(\frac{e^{i(\omega_{mn} + \omega)t} - 1}{\omega_{mn} + \omega} + \frac{e^{i(\omega_{mn} - \omega)t} - 1}{\omega_{mn} - \omega} \right).$$

当 $\omega \neq \pm\omega_{mn}$ 时, $a_m^{(1)}(t)$ 是 t 的震荡函数, 不随时间 t 单调增长。但当 $\omega \rightarrow \pm\omega_{mn}$ 时,

$$a_m^{(1)}(t) = \frac{F_{mn}}{\hbar} \frac{e^{i(\omega_{mn} \mp \omega)t} - 1}{\omega_{mn} \mp \omega},$$

跃迁几率为

$$\begin{aligned} W_{n \rightarrow m}(t) &= |a_m^{(1)}(t)|^2 \\ &= \frac{4|F_{mn}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2\left((\omega_{mn} \mp \omega)\frac{t}{2}\right)}{(\omega_{mn} \mp \omega)^2}, \end{aligned}$$

因为

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 xt}{\pi t x^2} = \delta(x),$$

所以

$$\lim_{t \rightarrow \infty} W_{n \rightarrow m}(t) = \frac{2\pi t |F_{mn}|^2}{\hbar^2} \delta(\omega_{mn} \mp \omega) = \frac{2\pi t |F_{mn}|^2}{\hbar} \delta(E_m - E_n \mp \hbar\omega),$$

随着 t 线性增长。其中, δ 函数意味着能量守恒, 如下图所示:



跃迁速率为

$$\frac{dW_{n \rightarrow m}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |F_{mn}|^2 \delta(\omega_{mn} \mp \omega),$$

实际上微扰不会是一个严格的单色场, 而是有一个频率范围 $\Delta\omega$, 故总的跃迁速率为:

$$\begin{aligned} \frac{dW_{n \rightarrow m}(t)}{dt} &= \frac{2\pi}{\hbar^2} |F_{mn}|^2 \int_{\Delta\omega} \delta(\omega_{mn} \mp \omega) d\omega \\ &= \begin{cases} \frac{2\pi}{\hbar^2} |F_{mn}|^2 & \text{若 } \Delta\omega \text{ 包含 } |\omega_{mn}| \\ 0 & \text{若 } \Delta\omega \text{ 不包含 } |\omega_{mn}| \end{cases} \end{aligned}$$

例: $t=0$ 时氢原子处于基态 $|100\rangle$, 微扰 $\hat{H}^{(1)}(t) = -ez\varepsilon_0\delta(t)$, 求跃迁到所有激发态的几率。

解:

$$\begin{aligned}
a_m^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H_{mn}^{(1)}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' \\
&= -\frac{e\mathcal{E}_0 z_{mn}}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{mn}t'} \delta(t') dt', \\
&= -\frac{e\mathcal{E}_0 z_{mn}}{i\hbar}
\end{aligned}$$

其中, $|n\rangle = |100\rangle$ 为基态, $|m\rangle = |nlm\rangle (n \neq 1)$ 为激发态。由基态跃迁到所有激发态的几率为:

$$W = \sum'_{nlm} \left(\frac{e\mathcal{E}_0}{\hbar} \right)^2 |\langle nlm|z|100\rangle|^2,$$

其中 \sum' 表示求和不含基态。

$$z = r \cos \theta,$$

相应矩阵元为

$$\langle nlm|z|n'l'm'\rangle = \langle n|r|n'\rangle \langle lm|\cos\theta|l'm'\rangle.$$

因为

$$\cos\theta|lm\rangle = \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}} |l+1, m\rangle - \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l-1)(2l+1)}} |l-1, m\rangle,$$

所以矩阵元 $\langle lm|\cos\theta|l'm'\rangle$ 不为零的条件 (即发生跃迁的选择定则) 为:

$$\Delta l = l - l' = \pm 1.$$

所以

$$\langle 100|z|100\rangle = 0,$$

$$\begin{aligned}
W &= \sum_{nlm} \left(\frac{e\mathcal{E}_0}{\hbar} \right)^2 |\langle nlm|z|100\rangle|^2 \\
&= \left(\frac{e\mathcal{E}_0}{\hbar} \right)^2 \sum_{nlm} \langle 100|z|nlm\rangle \langle nlm|z|100\rangle \\
&= \left(\frac{e\mathcal{E}_0}{\hbar} \right)^2 \langle 100|z^2|100\rangle
\end{aligned}$$

因为

$$\langle 100|z^2|100\rangle = a_0^2,$$

其中 a_0 为 Bohr 半径, 所以

$$W = \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0}{\hbar} \right)^2,$$

那么氢原子仍处在基态的几率为

$$1 - W = 1 - \left(\frac{e\mathcal{E}_0 a_0}{\hbar} \right)^2.$$

7. 相互作用绘景与微扰论

1) 相互作用绘景

先回顾 Schroedinger 绘景与 Heisenberg 绘景。

Schroedinger 绘景:

态与时间 t 有关, $|\alpha, t\rangle_S = \hat{U}(t)|\alpha, 0\rangle_S$, $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

力学量与时间无关, \hat{A}_S

动力学方程, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_S = \hat{H} |\alpha, t\rangle_S$

Heisenberg 绘景:

态与时间无关, $|\alpha\rangle_H$

力学量与时间有关, $\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}_H(0)\hat{U}(t)$

动力学方程, $\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H, \hat{H}]$

\hat{H} 在两绘景一样。

现在引入相互作用绘景。在 Schroedinger 绘景将 \hat{H} 分成两部分,

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)},$$

设相互作用绘景与 Schroedinger 绘景中态的联系:

$$|\alpha, t\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t} |\alpha, t\rangle_S,$$

由力学量 \hat{O} 的平均值与绘景无关,

$$\begin{aligned} {}_I\langle \alpha, t | \hat{O} | \alpha, t \rangle_I &= {}_S\langle \alpha, t | \hat{O} | \alpha, t \rangle_S \\ &= {}_I\langle \alpha, t | e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t} \hat{O} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t} | \alpha, t \rangle_I \end{aligned}$$

有相互作用绘景与 Schroedinger 绘景中力学量的联系:

$$\hat{O}_I = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t} \hat{O}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}t},$$

注意: $\hat{H}^{(0)}$ 在 Schroedinger 绘景与相互作用绘景一样, 但 $\hat{H}^{(1)}$ 不一样。

相互作用绘景中态和力学量都与时间有关。态的运动方程:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_I &= -\hat{H}^{(0)} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(0)} t} |\alpha, t\rangle_S + e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(0)} t} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t\rangle_S \\
&= -e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(0)} t} \hat{H}^{(0)} |\alpha, t\rangle_S + e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(0)} t} \hat{H}_S |\alpha, t\rangle_S \\
&= e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(0)} t} \hat{H}_S^{(1)} |\alpha, t\rangle_S \\
&= e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(0)} t} \hat{H}^{(1)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(0)} t} e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}^{(0)} t} |\alpha, t\rangle_S \\
&= \hat{H}_I^{(1)} |\alpha, t\rangle_I
\end{aligned}$$

相互作用绘景中力学量的运动方程:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{O}_I &= -\hat{H}^{(0)} \hat{O}_I + \hat{O}_I \hat{H}^{(0)} \\
&= [\hat{O}_I, \hat{H}^{(0)}]
\end{aligned}$$

在相互作用绘景中虽然态和力学量都与时间有关 (Schrodinger 绘景中只有态与时间有关, Heisenberg 绘景中只有力学量与时间有关), 但由于态的演化只与 $\hat{H}^{(0)}$ 有关, 力学量的时间演化只与 $\hat{H}^{(0)}$ 有关, 在微扰展开中有重要应用。

2) 微扰展开

设相互作用绘景中的态的时间演化

$$|\alpha, t\rangle_I = \hat{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle_I,$$

由相互作用绘景中的态的运动方程, 有

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H}_I^{(1)} \hat{U}(t, t_0),$$

满足

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

的形式解是

$$\hat{U}(t, t_0) = 1 + \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_I^{(1)}(t') \hat{U}(t', t_0).$$

用迭代方法,

$$\hat{U}(t, t_0) = 1 + \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}_I^{(1)}(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{H}_I^{(1)}(t') \hat{H}_I^{(1)}(t'') + \dots$$

对于右边第三项,

$$\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{H}_I^{(1)}(t') \hat{H}_I^{(1)}(t'') = \frac{1}{2!} \left(\int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{H}_I^{(1)}(t') \hat{H}_I^{(1)}(t'') + \int_{t_0}^t dt'' \int_{t_0}^{t''} dt' \hat{H}_I^{(1)}(t') \hat{H}_I^{(1)}(t'') \right) \\ = \frac{1}{2!} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' T(\hat{H}_I^{(1)}(t') \hat{H}_I^{(1)}(t''))$$

这里第一个等式的右边的第二项是将积分变量互换，而时序乘积 T 的定义是

$$T(\hat{H}_I^{(1)}(t') \hat{H}_I^{(1)}(t'')) = \hat{H}_I^{(1)}(t') \hat{H}_I^{(1)}(t'') \theta(t' - t'') + \hat{H}_I^{(1)}(t'') \hat{H}_I^{(1)}(t') \theta(t'' - t'),$$

时间大的算符总是排前。

这样，时间演化算符的解可以写成

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n T(\hat{H}_I^{(1)}(t_1) \hat{H}_I^{(1)}(t_2) \dots \hat{H}_I^{(1)}(t_n))$$

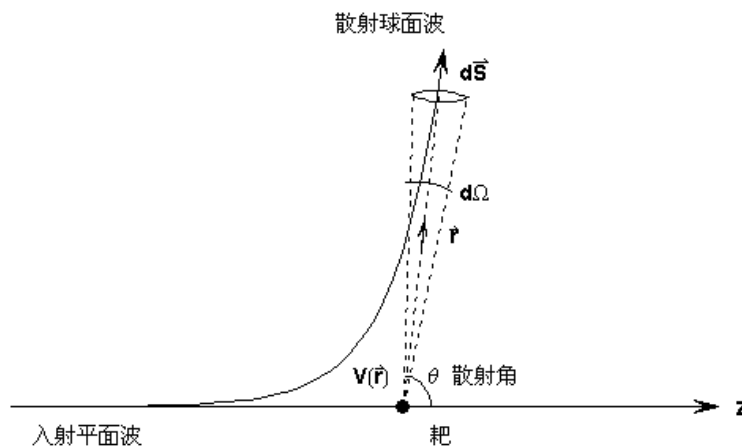
这就是在相互作用绘景中态的演化算符的微扰展开，是量子力学和量子场论的微扰基础。

第五章 散射理论

上面讨论的定态微扰方法主要适用于束缚态，即分离谱的情形。如何求解连续谱问题？连续谱对应的物理问题就是散射。

1. 一般描述

1) 微分散射截面



入射平面波经散射变为球面波。

求：一个入射粒子被散射到 Ω 方向单位立体角内的几率 $\sigma(\theta, \varphi)$ 。 $\sigma(\theta, \varphi)$ 与相互作用、靶的性质相关。通过测量 $\sigma(\theta, \varphi)$ 来了解靶粒子的内部结构和发现新粒子。

散射分为弹性散射和非弹性散射：

弹性散射：散射前后粒子的能量不改变，只改变粒子运动的方向。

非弹性散射：散射后粒子性质改变，甚至产生新粒子。

我们只考虑弹性散射。在靶粒子的静止坐标系中考虑问题。设入射平面波为

$$\psi_1(\vec{r}) = Ae^{ikz},$$

入射粒子几率流密度（单位时间内穿过单位面积的几率）为

$$J_z = \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\psi_1 \frac{\partial \psi_1^*}{\partial z} - \psi_1^* \frac{\partial \psi_1}{\partial z} \right) = \frac{\hbar k}{\mu} |A|^2,$$

这些入射粒子在单位时间内散射到 $d\Omega$ 方向的几率为

$$dN = J_z \sigma(\theta, \varphi) d\Omega.$$

$$\text{分析 } \sigma \text{ 的量纲: } \because [dN] = \frac{1}{T}, \quad [J_z] = \frac{1}{L^2 T}, \quad [d\Omega] = 1,$$

$$\therefore [\sigma] = L^2, \text{ 面积量纲, 故称 } \sigma(\theta, \varphi) \text{ 为微分散射截面。}$$

2) 计算 $\sigma(\theta, \varphi)$ 的一般方法

当 $r \rightarrow \infty$, $V(\vec{r}) \rightarrow 0$, $\psi(\vec{r})$ 包含两部分：没受相互作用影响沿 z 方向传播的入射平面波和沿 \vec{r} 方向向外传播的散射球面波

$$\psi(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r}) = Ae^{ikz} + Af(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

注意：1) 球面波与 θ, φ 有关，可调节 $f(\theta, \varphi)$ 使得 ψ_2 与 ψ_1 有相同常数 A , $f(\theta, \varphi)$ 的具体形式由相互作用决定。2) 弹性散射，能量不变， k 大小不变，但方向变化。

散射粒子几率流密度

$$J_r = \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\psi_2 \frac{\partial \psi_2^*}{\partial r} - \psi_2^* \frac{\partial \psi_2}{\partial r} \right) = \frac{\hbar k}{\mu} |A|^2 \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2} = J_z \frac{|f(\theta, \varphi)|^2}{r^2},$$

单位时间内散射到 $d\Omega$ 内的几率为

$$dN = J_r dS = J_r r^2 d\Omega = J_z |f(\theta, \varphi)|^2 d\Omega,$$

与微分散射截面的定义式

$$dN = J_z \sigma(\theta, \varphi) d\Omega$$

比较, 得

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2,$$

$f(\theta, \varphi)$ 可称为散射振幅。

结论: 计算 $\sigma(\theta, \varphi)$ 的一般方法:

- 1) 求解具体的 **Schroedinger** 方程得到 $\psi(\vec{r})$;
- 2) 将其渐进解 ($r \rightarrow \infty$) 与标准渐进解 $\psi(r \rightarrow \infty) = Ae^{ikz} + Af(\theta, \varphi)\frac{e^{ikr}}{r}$ 比较, 得到 $f(\theta, \varphi)$;
- 3) $\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2$ 。

2. Green 函数方法

1) 积分方程

定态 **Schroedinger** 方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).$$

对于弹性散射, 能量守恒, E 是入射能量, 已知, 只求 $\psi(\vec{r})$ 。(束缚态问题中是利用束缚条件确定 E 的取值。) 令

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad U(\vec{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{r}),$$

有

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r}),$$

具有连续源 (势) $U(\vec{r})$ 。

Green 函数方法的思想是先求解点源 $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ 对应的定态方程

$$(\nabla_r^2 + k^2)G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

得到 **Green** 函数 $G(\vec{r}, \vec{r}')$, 再求解定态方程

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) &= U(\vec{r})\psi(\vec{r}) \\ &= \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}')\psi(\vec{r}')\delta(\vec{r} - \vec{r}') \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') (\bar{\nabla}_r^2 + k^2) G(\vec{r}, \vec{r}') \\
&= (\bar{\nabla}^2 + k^2) \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') ,
\end{aligned}$$

所以定态方程的一个解是

$$\psi(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') .$$

考虑到无源方程

$$(\bar{\nabla}^2 + k^2) \psi^{(0)}(\vec{r}) = 0$$

的解是

$$\psi^{(0)}(\vec{r}) = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} ,$$

故定态方程的通解为

$$\psi(\vec{r}) = A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}') \psi(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') ,$$

满足要求

$$\lim_{V \rightarrow 0} \psi(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) .$$

这是一个关于 $\psi(\vec{r})$ 的积分方程，与定态方程的微分形式完全等价。

积分方程有其优点：1) 边界条件已包含在方程中（入射平面波 $A e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ ）；2) 可用迭代法求解。

2) Green 函数

作 Fourier 变换

$$\begin{aligned}
G(\vec{r}, \vec{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{k}' g(\vec{k}', \vec{r}') e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \\
\delta(\vec{r} - \vec{r}') &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{k}' e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}
\end{aligned}$$

代入 $G(\vec{r}, \vec{r}')$ 满足的方程，得到

$$g(\vec{k}', \vec{r}') = \frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{k'^2 - k^2}$$

故

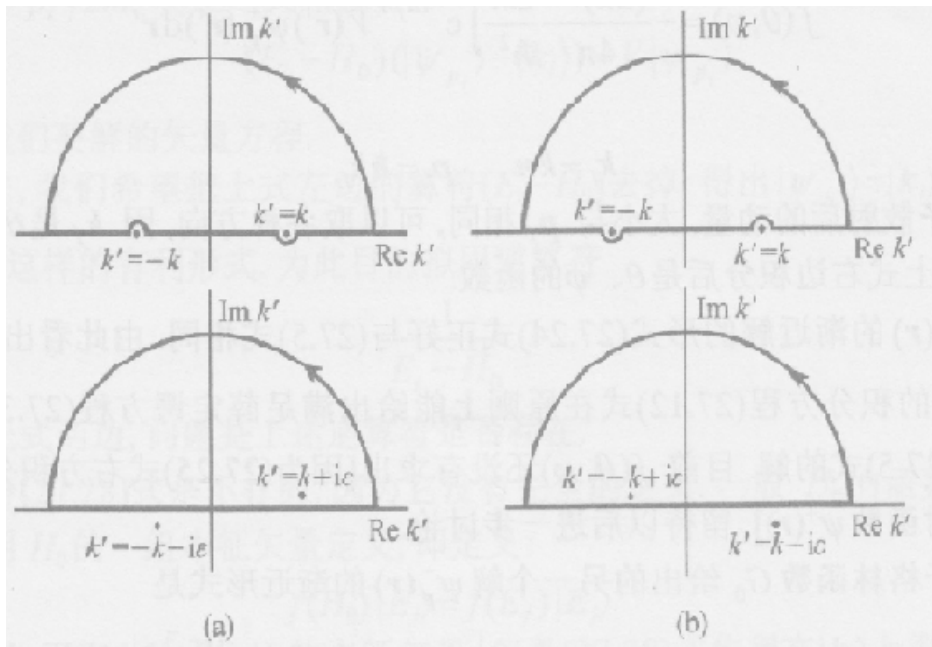
$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d^3\vec{k}' \frac{e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{r}-\vec{r}')}}{k'^2 - k^2} = G(\vec{r} - \vec{r}')$$

取 $\bar{r} - \bar{r}'$ 为极轴，对角度积分后有

$$\begin{aligned} G(\bar{r} - \bar{r}') &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{|\bar{r} - \bar{r}'|} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \frac{k'}{k^2 - k'^2} \sin k' |\bar{r} - \bar{r}'| \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{|\bar{r} - \bar{r}'|} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \frac{k'}{k^2 - k'^2} e^{ik'|\bar{r} - \bar{r}'|} \\ &= \frac{-1}{4\pi^2 i} \frac{1}{2|\bar{r} - \bar{r}'|} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \left(\frac{e^{ik'|\bar{r} - \bar{r}'|}}{k' - k} + \frac{e^{ik'|\bar{r} - \bar{r}'|}}{k' + k} \right) \end{aligned}$$

其中 $\cos k'|\bar{r} - \bar{r}'|$ 部分的被积函数是 k' 的奇函数，积分为零。上式积分有两个奇点 $k' = \pm k$ 。

用复变函数方法处理。



在 k' 的复平面上，如果取上半平面的回路一（图左），这时第一个奇点有贡献，第二个奇点无贡献。在半圆上， $e^{ik|\bar{r} - \bar{r}'} = e^{i\text{Re}k|\bar{r} - \bar{r}'} e^{-\text{Im}k|\bar{r} - \bar{r}'}$ ，因为在上半平面， $\text{Im}k' > 0$ ，故当 $|\bar{r} - \bar{r}'| \rightarrow \infty$ 时，即考虑散射问题的解时， $e^{ik|\bar{r} - \bar{r}'} \rightarrow 0$ ，利用留数定理，对应回路一的 Green 函数是

$$G^+(\bar{r} - \bar{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik|\bar{r} - \bar{r}'|}}{|\bar{r} - \bar{r}'|},$$

称为推迟 Green 函数。如果取上半平面的回路二（图右），第一个奇点无贡献，第二个奇点有贡献。

$$G^-(\bar{r} - \bar{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{-ik|\bar{r} - \bar{r}'|}}{|\bar{r} - \bar{r}'|},$$

称为超前 Green 函数。如果取把两个奇点都包含的回路, 得到的 Green 函数称为因果 Green 函数。上面的积分路径都弯了两个小半园, 也可以通过把两个奇点向上向下移动一点, 而把积分路径变成直的, 见图下部。。

推迟 Green 函数, 超前 Green 函数, 和因果 Green 函数都是 Green 函数方程 $(\bar{\nabla}_r^2 + k^2)G(\bar{r}, \bar{r}') = \delta(\bar{r} - \bar{r}')$ 的解。例如, 将推迟和超前 Green 函数代入 $\psi(\bar{r})$ 的积分方程, 有

$$\psi^\pm(\bar{r}) = Ae^{i\bar{k}\cdot\bar{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d^3\bar{r}' U(\bar{r}') \psi^\pm(\bar{r}') \frac{e^{\pm ik|\bar{r}-\bar{r}'|}}{|\bar{r}-\bar{r}'|}。$$

3. Lippmann—Schwinger 方程

1) Hilbert 空间的 Lippmann—Schwinger 方程

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

入射平面波 $|\phi\rangle$,

$$\hat{H}_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle, \quad E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$$

散射波 $|\psi\rangle$ ，对与弹性散射，能量不改变，

$$\begin{aligned} \hat{H}|\psi\rangle &= (\hat{H}_0 + \hat{V})|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \\ (E - \hat{H}_0)|\psi\rangle &= \hat{V}|\psi\rangle \end{aligned}$$

满足初始条件 $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} |\psi\rangle = |\phi\rangle$ 的形式解是

$$|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0} \hat{V}|\psi\rangle,$$

但是算符 $\frac{1}{E - \hat{H}_0}$ 作用到 \hat{H}_0 的本征态是发散的。为避免发散，将能量扩展到复平面，把形式解写成

$$|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} \hat{V}|\psi^\pm\rangle$$

这就是 Hilbert 空间的 Lippmann—Schwinger 方程。

进入坐标表象，

$$\langle \vec{r} | \psi^\pm \rangle = \langle \vec{r} | \phi \rangle + \int d^3r' \langle \vec{r} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{V} | \psi^\pm \rangle$$

由于

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \vec{r}' \rangle &= \int d^3\vec{p}' d^3\vec{p}'' \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \vec{p}'' \rangle \langle \vec{p}'' | \vec{r}' \rangle \\ \langle \vec{p}' | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \vec{p}'' \rangle &= \frac{\delta(\vec{p}' - \vec{p}'')}{E - E' \pm i\epsilon} \\ \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle &= \frac{e^{i\vec{p}' \cdot \vec{r} / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \quad \langle \vec{p}'' | \vec{r}' \rangle = \frac{e^{-i\vec{p}'' \cdot \vec{r}' / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \end{aligned}$$

故

$$\langle \vec{r} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \vec{r}' \rangle = \int \frac{d^3 \vec{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \frac{e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{E - E' \pm i\epsilon} = \int \frac{d^3 \vec{k}'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{E - E' \pm i\epsilon}.$$

通过把 Green 函数积分路径中的小半圆转变成把奇点向上或向下移动一点，而把积分路径变成直的，并且利用 $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ，有

$$G^\pm(\vec{r} - \vec{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^3 \vec{k}'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{k^2 - k'^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \int \frac{d^3 \vec{k}'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k}' \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}}{E - E' \pm i\epsilon},$$

$$\langle \vec{r} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} | \vec{r}' \rangle = \frac{2m}{\hbar^2} G^\pm(\vec{r} - \vec{r}'),$$

故坐标表象的 Lippmann-Schwinger 方程可以写成

$$\langle \vec{r} | \psi^\pm \rangle = \langle \vec{r} | \phi \rangle + \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3 r' \langle \vec{r} | \hat{V} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi^\pm \rangle,$$

由于

$$\langle \vec{r} | \hat{V} | \psi^\pm \rangle = \int d^3 r'' \langle \vec{r} | \hat{V} | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \psi^\pm \rangle = \int d^3 r'' V(\vec{r}') \delta(\vec{r}' - \vec{r}'') \langle \vec{r}'' | \psi^\pm \rangle = V(\vec{r}') \langle \vec{r}' | \psi^\pm \rangle$$

故

$$\langle \vec{r} | \psi^\pm \rangle = \langle \vec{r} | \phi \rangle + \int d^3 r' V(\vec{r}') G^\pm(\vec{r} - \vec{r}') \langle \vec{r}' | \psi^\pm \rangle.$$

这就是上一节通过 Green 函数方法得到的坐标表象中的 Schroedinger 方程对应的积分方程，是 Lippmann-Schwinger 方程在坐标表象的形式。

2) Dyson 方程

一般 Lippmann-Schwinger 方程

$$|\psi^\pm\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} \hat{V} |\psi^\pm\rangle$$

的算符

$$\hat{G}_0^\pm = \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon}$$

的坐标表象矩阵元 $\langle \vec{r} | \hat{G}_0^\pm | \vec{r}' \rangle$ 是 Green 函数，故称 \hat{G}_0^\pm 为自由 Green 算符（与 \hat{H}_0 相关）。

而 Lippmann-Schwinger 方程可以改写为

$$(E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon)|\psi^\pm\rangle = (E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon)|\varphi\rangle + \hat{V}|\psi^\pm\rangle,$$

$$(E - \hat{H} \pm i\varepsilon)|\psi^\pm\rangle = (E - \hat{H} \pm i\varepsilon)|\varphi\rangle + \hat{V}|\varphi\rangle,$$

$$|\psi^\pm\rangle = |\varphi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H} \pm i\varepsilon} \hat{V}|\varphi\rangle,$$

注意： $|\varphi\rangle$ 是 \hat{H}_0 的本征态，不是 \hat{H} 的本征态。称

$$\hat{G}^\pm = \frac{1}{E - \hat{H} \pm i\varepsilon}$$

为全 Green 算符（与 \hat{H} 相关）。

由

$$(E - \hat{H} \pm i\varepsilon)\hat{G}^\pm = 1,$$

$$(E - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon)\hat{G}^\pm - \hat{V}\hat{G}^\pm = 1$$

有

$$\hat{G}^\pm = \hat{G}_0^\pm + \hat{G}_0^\pm \hat{V} \hat{G}^\pm,$$

称为 Dyson 方程，描述自由 Green 算符和全 Green 算符的关系，在量子统计和量子场论中有重要的应用。

3) 散射振幅

考虑与推迟 Green 函数 G^+ 相关的态 $|\psi^+\rangle$ 。由坐标表象的 Lippmann-Schwinger 方程

$$\psi^+(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}') \psi^+(\vec{r}') \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|}。$$

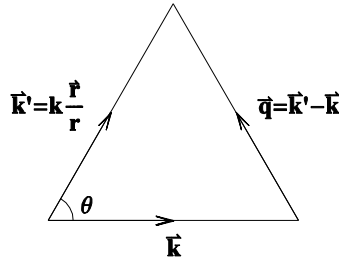
由于势能 $V(\vec{r}')$ 的有效区域有限，当 $r \rightarrow \infty$ 时，有

$$|\vec{r}'| \ll |\vec{r}|,$$

$$\begin{aligned} |\vec{r}-\vec{r}'| &= \sqrt{(\vec{r}-\vec{r}')^2} = (r^2 + r'^2 - 2\vec{r}\cdot\vec{r}')^{1/2} \\ &\approx r \left(1 - 2\frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r^2}\right)^{1/2} \approx r - \frac{\vec{r}\cdot\vec{r}'}{r} \end{aligned}$$

$$\psi^+(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi^+(\vec{r}')$$

相位中 $|\vec{r}-\vec{r}'|$ 保留到一级近似，分母中 $|\vec{r}-\vec{r}'|$ 只保持到零级， $\vec{k}'=k\frac{\vec{r}}{r}$ 是散射后的波矢， $|\vec{k}'|=k$ 。



与标准渐进解

$$\psi(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + Af(\theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}$$

比较，得散射振幅

$$\begin{aligned} f(\theta, \varphi) &= -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\vec{r}' \frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\vec{r}') \psi^+(\vec{r}') \\ &= -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\vec{r}' \langle \vec{k}' | \vec{r}' \rangle V(\vec{r}') \langle \vec{r}' | \psi^+ \rangle \\ &= -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\vec{r}' \langle \vec{k}' | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{V} | \psi^+ \rangle \\ &= -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{V} | \psi^+ \rangle = f(\vec{k}, \vec{k}') \end{aligned}$$

此处已取 $\langle \vec{r}' | \varphi \rangle = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}}$ 。

定义跃迁算符 \hat{T}

$$\hat{V} | \psi^+ \rangle \equiv \hat{T} | \varphi \rangle,$$

则散射振幅

$$f(\vec{k}', \vec{k}) = -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle,$$

跃迁矩阵元 $\langle \vec{k}' | \hat{T} | \vec{k} \rangle$ 的物理意义也变得很清楚：它是从平面波 $|\vec{k}\rangle$ 跃迁到自由态 $|\vec{k}'\rangle$ 的跃迁振幅。

注意，如果考虑超前 Green 函数 G^- ， $\psi^-(\vec{r})$ 导致的是一个平面波和向内传播的球面波的叠加，不是散射问题的解。超前 Green 函数和因果 Green 函数在动力学系统的时间演化中有意义。

4) 光学定理

向前散射振幅

$$f(0, \varphi) = f(\vec{k}, \vec{k}) = -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \langle \vec{k} | \hat{V} | \psi^+ \rangle,$$

由 Lippmann—Schwinger 方程 ($|\varphi\rangle = |\vec{k}\rangle$),

$$|\psi^+\rangle = |\varphi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} \hat{V} |\psi^+\rangle,$$

$$\langle \vec{k} | = \langle \psi^+ | - \langle \psi^+ | \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 - i\varepsilon},$$

有

$$\begin{aligned} \langle \vec{k} | V | \psi^+ \rangle &= \left(\langle \psi^+ | - \langle \psi^+ | \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 - i\varepsilon} \right) \hat{V} |\psi^+\rangle \\ &= \langle \psi^+ | V | \psi^+ \rangle - \langle \psi^+ | \hat{V} \frac{1}{E - \hat{H}_0 - i\varepsilon} \hat{V} |\psi^+\rangle \end{aligned}$$

由

$$\frac{1}{E - \hat{H}_0 - i\varepsilon} = \text{Pr.} \frac{1}{E - \hat{H}_0} + i\pi\delta(E - \hat{H}_0),$$

注意到 \hat{V} ， $\hat{V} \left(\text{Pr.} \frac{1}{E - \hat{H}_0} \right) \hat{V}$ 均为厄米算符，在态 $|\psi^+\rangle$ 的平均值必为实数，有

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle \vec{k} | \hat{V} | \psi^+ \rangle &= -\text{Im} i\pi \langle \psi^+ | \hat{V} \delta(E - \hat{H}_0) \hat{V} | \psi^+ \rangle \\ &= -\pi \langle \psi^+ | \hat{V} \delta(E - \hat{H}_0) \hat{V} | \psi^+ \rangle \\ &= -\pi \int d^3\vec{k}' \langle \psi^+ | \hat{V} | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | \delta(E - \hat{H}_0) \hat{V} | \psi^+ \rangle \\ &= -\pi \int d^3\vec{k}' \left| \langle \vec{k}' | V | \psi^+ \rangle \right|^2 \delta\left(E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m}\right) \\ &= -\frac{\pi mk}{\hbar^2} \int d\Omega' \left| \langle \vec{k}' | V | \psi^+ \rangle \right|^2 \end{aligned}$$

因为

$$\sigma_{tot} = \left| f(\vec{k}', \vec{k}) \right|^2 = \frac{(2\pi)^6 4m^2}{16\pi^2 \hbar^4} \left| \langle \vec{k}' | V | \psi^+ \rangle \right|^2 ,$$

故

$$\begin{aligned} \text{Im} \langle \vec{k} | V | \psi^+ \rangle &= -\frac{\hbar^2 k}{4\pi^3 m} \int d\Omega' \sigma(\theta, \varphi) \\ &= -\frac{\hbar^2 k}{4\pi^3 m} \sigma_{tot} \end{aligned}$$

所以，

$$\begin{aligned} \text{Im} f(\theta=0) &= -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} (2\pi)^3 \text{Im} \langle \vec{k} | V | \psi^+ \rangle \\ &= \frac{k}{4\pi} \sigma_{tot} \end{aligned}$$

这就是向前散射振幅与总散射截面的关系，称为光学定理。

4. Born 级数

1) 一级 Born 近似

对于积分方程和散射振幅

$$\psi^+(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} A e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3\vec{r}' e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} V(\vec{r}') \psi^+(\vec{r}'),$$

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\vec{r}' \frac{e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\vec{r}') \psi^+(\vec{r}'),$$

若势能 $V(\vec{r})$ 是一个弱势 (入射能量 $E \gg V$), 可用迭代法求解。零级近似

$$\psi^{(0)}(\vec{r}) = \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}{(2\pi)^3},$$

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{(2\pi)^3}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d^3\vec{r}' \frac{e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} V(\vec{r}') \frac{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}} = -\frac{1}{4\pi} \int d^3\vec{r}' e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}'} U(\vec{r}')$$

对于低能散射 (满足 $E \gg V$ 条件时的低能散射),

$$q = |\vec{k} - \vec{k}'| = \sqrt{k^2 + k'^2 - 2kk' \cos \theta} = \sqrt{2k^2(1 - \cos \theta)} = \sqrt{4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} = 2k \sin \frac{\theta}{2}$$

很小, 相位在有效相互作用范围内可看成一个常数, 提到 $f(\theta, \varphi)$ 的积分号外, 对 σ 无贡献,

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3\vec{r}' U(\vec{r}').$$

例题: 散射势 $V(r) = \begin{cases} V_0, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases}$, 考虑低能散射。

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3\vec{r} U(\vec{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\vec{r}) d^3\vec{r} = -\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2} \int_{r \leq a} d^3\vec{r} = -\frac{mV_0}{2\pi\hbar^2} \frac{4}{3} \pi a^3,$$

$$\sigma(\theta, \varphi) = |f(\theta, \varphi)|^2 = \left(\frac{2mV_0 a^3}{3\hbar^2} \right)^2$$

总截面

$$\sigma_{tot} = \int \sigma(\theta, \varphi) d\Omega = 4\pi \left(\frac{2mV_0 a^3}{3\hbar^2} \right)^2.$$

对于一般散射, 如果为中心势场

$$V(\vec{r}) = V(r),$$

$$f(\theta, \varphi) = -\frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dr' r'^2 U(r') \int_0^\pi d\theta' \sin \theta' e^{-iqr' \cos \theta'} \int_0^{2\pi} d\varphi'$$

$$= -\frac{1}{q} \int_0^\infty dr' U(r') r' \sin qr' = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr' V(r') r' \sin qr'.$$

注意：使用 Born 近似的条件是弱势散射。

2) Born 级数

坐标表象的 Lippmann - Schwinger 方程

$$\psi(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3\vec{r}' \psi(\vec{r}') U(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}').$$

零级近似:

$$\psi^{(0)}(\vec{r}) = Ae^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

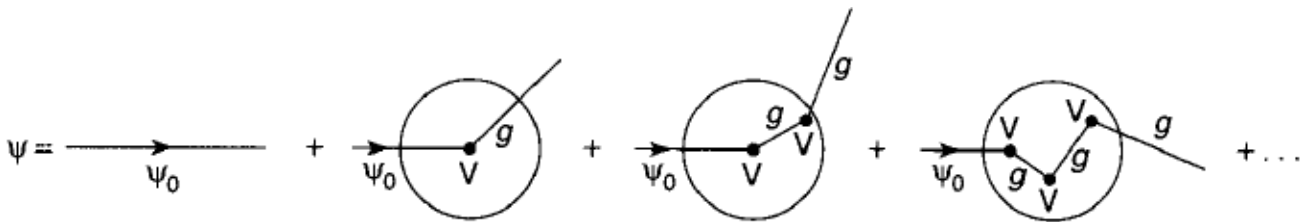
一级近似:

$$\psi^{(1)}(\vec{r}) = \psi^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3\vec{r}' \psi^{(0)}(\vec{r}') U(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}')$$

二级近似:

$$\begin{aligned} \psi^{(2)}(\vec{r}) &= \psi^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3\vec{r}' \psi^{(1)}(\vec{r}') U(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') \\ &= \psi^{(0)}(\vec{r}) + \int d^3\vec{r}' \psi^{(0)}(\vec{r}') U(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') \\ &\quad + \int d^3\vec{r}' d^3\vec{r}'' \psi^{(0)}(\vec{r}'') U(\vec{r}'') G(\vec{r}', \vec{r}'') U(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') \end{aligned}$$

上面级数展开可以用下面的图形来表示，



Green 函数是传播两点之间相互作用的函数。

5.分波法

求中心势场的散射振幅。

1) 思想

入射平面波 Ae^{ikz} 是自由粒子力学量 $\{\hat{H}, \hat{p}, \hat{L}_z\}$ 的共同本征态，本征值为

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}, \quad p_x = p_y = 0, \quad p_z = \hbar k, \quad L_z = 0.$$

对于中心势， $[\hat{p}, \hat{H}] \neq 0$ ， \hat{p} 不是守恒量，但 $[\hat{L}^2, \hat{H}] = 0$ ， \hat{L}^2 是守恒量。守恒力学量组为 $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ 。故平面波不是中心场问题的守恒力学量组的本征态，不便于直接描述散射前后态的关系。

分波法：在保证能量守恒（ k 不变）和 \hat{L}_z 守恒（ $m=0$ 不变）的条件下，将入射平面波按 \hat{L}^2 的本征态 $P_l(\cos\theta)$ 展开（分波展开），将平面波散射变成守恒力学量组的本征态（分波）的散射之和。

2) 平面波的分波展开

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta),$$

l 阶球 Bessel 函数

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi\right),$$

$$e^{ikz} \rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi\right) P_l(\cos\theta),$$

标准渐进解

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi(\vec{r}) = A e^{ikz} + Af(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

$$= A \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi\right) P_l(\cos\theta) + Af(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

3) 中心场中态的分波展开

中心场问题定态 Schroedinger 方程的特解

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

一般解

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{n,l,m} B_{nlm} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

满足能量守恒（ k 不变）和 \hat{L}_z 守恒（ $m=0$ 不变）的一般解

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} B_l R_l(r) P_l(\cos\theta)$$

$R_l(r)$ 由径向方程决定

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l}{dr} \right) + \left(k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l = 0.$$

当 $r \rightarrow \infty$ 时, $V(r) \rightarrow 0$,

$$\frac{d^2(rR_l)}{dr^2} + k^2(rR_l) = 0,$$

故
$$R_l(r \rightarrow \infty) = \frac{C_l}{kr} \sin \left(kr - \frac{l}{2} \pi + \delta_l \right),$$

两个待定常数 C_l 和 δ_l , 与具体中心场 $V(r)$ 有关, $-\frac{l}{2}\pi$ 是为了计算方便引入的。故渐进解为

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \psi(r, \theta) = A \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_l}{kr} \sin \left(kr - \frac{l}{2} \pi + \delta_l \right) P_l(\cos \theta),$$

其中 $AA_l = B_l C_l$ 。与标准渐进解相比较, 有

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{l}{2} \pi \right) P_l(\cos \theta) + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{A_l}{kr} \sin \left(kr - \frac{l}{2} \pi + \delta_l \right) P_l(\cos \theta).$$

利用

$$\sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i},$$

有
$$0 = \left(2kif(\theta) + \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{-il\pi/2} P_l(\cos \theta) - \sum_{l=0}^{\infty} A_l e^{i(\delta_l - l\pi/2)} P_l(\cos \theta) \right) e^{ikr} \\ - \left(\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{il\pi/2} P_l(\cos \theta) - \sum_{l=0}^{\infty} A_l e^{-i(\delta_l - l\pi/2)} P_l(\cos \theta) \right) e^{-ikr},$$

对任意的 r 均成立的条件是 e^{ikr} 和 e^{-ikr} 前面的系数分别为零, 即

$$A_l = (2l+1) i^l e^{i\delta_l} \\ f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{k} (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

定义分波散射振幅:

$$f_l(\theta) = \frac{1}{k} (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{i\delta_l} \sin \delta_l$$

总散射振幅是分波散射振幅之和:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\theta),$$

微分散射截面:

$$\sigma(\theta) = \left| \sum_{l=0}^{\infty} f_l(\theta) \right|^2.$$

分波散射振幅只与 δ_l 有关, 关键是求 δ_l :

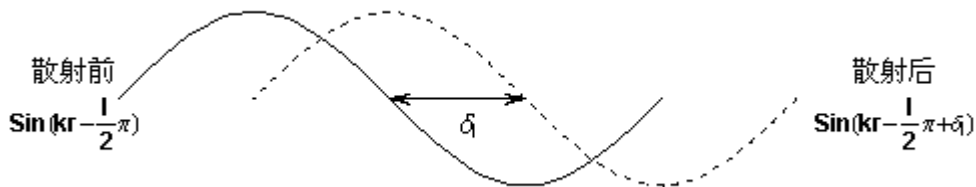
1) 将 $V(r)$ 代入径向方程, 得到 $R_l(r)$,

2) 将 $\lim_{r \rightarrow \infty} R_l(r)$ 与 $\frac{C_l}{kr} \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi + \delta_l\right)$ 相比得到 δ_l 。

δ_l 的物理意义:

散射前的分波为 $\frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi\right)$,

散射后的分波为 $\frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{l}{2}\pi + \delta_l\right)$,



可见, 散射前后是同一分波, 只是有一总体的相移 δ_l 。

4) 收敛性

求和收敛性的半经典估计:

角动量 $L \sim pr$ 。设 $V(r)$ 的有效半径为 a , $L < pa$ 时才有散射, 即只有 $\sqrt{l(l+1)} < ka$ 时, 才有贡献。当入射能量 $E(k)$ 较小时, 可只取低次分波的贡献, 例如 s 分波。

结论: 低能中心场散射适合用分波法。

例: 低能粒子被球对称势阱的散射。
$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

径向方程

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_l}{dr} \right) + \left(k^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_l = 0$$

只考虑 s 分波 ($l=0$)，则

$$\begin{cases} \frac{d^2(rR_0)}{dr^2} + k'^2(rR_0) = 0 & r \leq a \\ \frac{d^2(rR_0)}{dr^2} + k^2(rR_0) = 0 & r > a \end{cases},$$

$$k'^2 = k^2 + \frac{2\mu}{\hbar^2} V_0,$$

解为

$$R_0(r) = \begin{cases} \frac{C'_0}{k'r} \sin(k'r + B'_0) & r \leq a \\ \frac{C_0}{kr} \sin(kr + B_0) & r > a \end{cases}$$

要求 $r=0$ 时， $R_0(r)$ 有限，故 $B'_0 = 0$ ，

又要求 $r=a$ 时， $R_0(r)$ ， $\frac{dR_0(r)}{dr}$ 连续，

$$\begin{cases} C'_0 = C_0 \\ B_0 = \arctan\left(\frac{k}{k'} \tan k'a\right) - ka \end{cases}.$$

将 $\lim_{r \rightarrow \infty} R_0(r) = \frac{C_0}{kr} \sin(kr + B_0)$

与中心势的标准渐进式

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R_0(r) = \frac{C_0}{kr} \sin(kr + \delta_0)$$

比较，有 s 波相位移

$$\delta_0 = B_0,$$

由于 $P_0(\cos \theta) = 1$ ，

$$f_0(\theta) = \frac{1}{k} e^{i\delta_0} \sin \delta_0,$$

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \simeq |f_0(\theta)|^2 = \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2}.$$

低能时, $k \rightarrow 0$,

$$\arctan\left(\frac{k}{k'} \tan k'a\right) \rightarrow \frac{k}{k'} \tan k'a, \quad k'^2 \rightarrow \frac{2\mu}{\hbar^2} V_0,$$

$$\delta_0 \approx \frac{k}{k'} \tan k'a - ka = ka \left(\frac{\tan k'a}{k'a} - 1 \right),$$

$$\sigma(\theta) \approx \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2} \approx \frac{\delta_0^2}{k^2} \approx a^2 \left(\frac{\tan k'a}{k'a} - 1 \right)^2.$$

由于只考虑了 s 分波, σ 与 θ 无关。

$$\text{总散射截面} \quad \sigma_{\text{tot}} = \int \sigma(\theta) d\Omega = 4\pi a^2 \left(\frac{\tan k'a}{k'a} - 1 \right)^2.$$

第六章：对称性与全同粒子

对称性是一个体系最重要的性质。

1. 守恒量

定义：若力学量的平均值不随时间变化

$$\frac{d\langle F \rangle}{dt} = 0,$$

则称力学量 F 为守恒量。

由

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

和 Schrodinger 方程

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

有

$$\begin{aligned} \frac{d\langle F \rangle}{dt} &= \frac{\partial \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle}{\partial t} + \langle \psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{F} \frac{\partial | \psi \rangle}{\partial t} \\ &= \left\langle \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{F}, \hat{H}] \rangle \end{aligned}$$

若 \hat{F} 不显含时间 t ,

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

按照定义，若 \hat{F} 与 \hat{H} 对易，则 \hat{F} 为守恒量。

例如：

- a) 对于自由粒子体系， $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ ，动量 \hat{p} 不显含时间 t ，且 $[\hat{p}, \hat{H}] = 0$ ，有动量守恒；
- b) 对于一般体系， $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ ， $[\hat{p}, \hat{H}] \neq 0$ ，动量不守恒；
- c) 对于中心场体系， $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} + V(r)$ ，轨道角动量算符 \hat{L}^2 ， \hat{L}_i 均不显含时间 t ，且 $[\hat{L}^2, \hat{H}] = [\hat{L}_i, \hat{H}] = 0$ ，有轨道角动量及其任意分量守恒；
- d) 若 \hat{H} 不显含时间 t ， $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$ ，有能量守恒。

一个力学量是否为守恒量，由体系的 \hat{H} 决定。

守恒量的性质：

a) 在任意态的平均值与时间无关（定义）；

b) 在任意态的取值几率与时间无关

证明：

$$[\hat{F}, \hat{H}] = 0, \quad \hat{F}, \hat{H} \text{ 有共同完备本征矢 } |n\rangle,$$

$$\hat{F}|n\rangle = F_n|n\rangle, \quad \hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$$

对于任一态 $|\psi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\psi(t)\rangle$, $C_n(t) = \langle n|\psi(t)\rangle$,

$$\hat{F} \text{ 取值为 } F_n \text{ 的几率为 } |C_n(t)|^2.$$

因为 $\frac{d}{dt} C_n(t) = \langle n | \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle n | \hat{H} |\psi(t)\rangle = \frac{E_n}{i\hbar} \langle n | \psi(t)\rangle = \frac{E_n}{i\hbar} C_n(t)$,

故 $C_n(t) = C_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$,

$$|C_n(t)|^2 = |C_n(0)|^2 \text{ 与时间无关。}$$

推论：

a) 若体系初始时处于守恒量的本征态，则恒处于该本征态；

b) 若体系初始时不处于守恒量的本征态，则恒不处于该守恒量的本征态；

c) 量子力学中习惯用描述力学量本征值的量子数来标志状态，例如中心场中的状态 $|nlm\rangle$ 用能量，角动量，角动量分量的量子数描述。但是，非守恒量的量子数不适合描述状态，因为即使初始状态是这些力学量的本征态，可用这些量子数来描述，但演化以后的状态不再是这些力学量的本征态，不能再用这些量子数来描述。只有守恒量的量子数才是描述状态的好量子数：当体系初始时处于守恒量的本征态，则恒处于该本征态。

注意两个概念：

守恒量：守恒量在任意态中的平均值及取值几率不随时间变化

定态：而任意力学量在定态中的平均值及取值几率不随时间变化。

2. 对称性与守恒量

定义变换 \hat{S} ,

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{S}|\psi\rangle,$$

变换前态 $|\psi\rangle$ 满足 Schrodinger 方程:

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

由左作用不含时间 t 的变换 \hat{S} :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{S} |\psi\rangle = \hat{S} \hat{H} |\psi\rangle = \hat{S} \hat{H} \hat{S}^{-1} \hat{S} |\psi\rangle,$$

变换后态 $|\psi'\rangle$ 满足 Schrodinger 方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle = \hat{H}' |\psi'\rangle, \quad \hat{H}' = \hat{S} \hat{H} \hat{S}^{-1}.$$

若 \hat{H} 在变换前后保持不变:

$$\hat{H}' = \hat{S} \hat{H} \hat{S}^{-1} = \hat{H}, \quad \hat{S} \hat{H} = \hat{H} \hat{S},$$

即

$$[\hat{S}, \hat{H}] = 0,$$

则 $|\psi'\rangle$ 与 $|\psi\rangle$ 满足相同的 Schrodinger 方程,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle = \hat{H} |\psi'\rangle$$

称体系在变换 \hat{S} 下具有不变性, 或对称性。

对称性与守恒量的关系:

对于对称变换 \hat{S} , 如果 $\hat{S} = \hat{S}^+$, \hat{S} 为力学量, 则 $[\hat{S}, \hat{H}] = 0$ 表明 \hat{S} 是守恒力学量; 若 $\hat{S} \neq \hat{S}^+$, 但 \hat{S} 由某一力学量 $\hat{F} = \hat{F}^+$ 生成, $\hat{S}(\hat{F})$, 则 $[\hat{S}, \hat{H}] = 0$ 意味 $[\hat{F}, \hat{H}] = 0$, 表明 \hat{F} 为守恒力学量。

1) 空间平移不变与动量守恒

空间平移算符

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

由动量算符 \hat{p} 生成。若体系具有空间平移不变性, $[\hat{S}, \hat{H}] = 0$, 则 $[\hat{p}, \hat{H}] = 0$, 导致动量守恒。

2) 时间平移不变与能量守恒

时间平移算符

$$\hat{S} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$$

由哈密顿算符 \hat{H} 生成。若体系具有时间平移不变性, $[\hat{S}, \hat{H}] = 0$, 则 $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$, 导致能量

守恒。

3) 空间旋转不变与角动量守恒

空间转动算符

$$\hat{S} = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{J} \cdot \vec{e}_n \varphi}$$

由角动量算符 \hat{J} 生成。若体系具有空间转动不变性, $[\hat{S}, \hat{H}] = 0$, 则 $[\hat{J}, \hat{H}] = 0$, 导致角动量守恒。

4) 空间反演不变与宇称守恒

定义空间反演算符

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \hat{I} \vec{r} \hat{I}^{-1} = -\vec{r}, \quad \psi(\vec{r}) \rightarrow \psi'(\vec{r}) = \hat{I} \psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}),$$

是空间突变。

对于任意态 $\psi(\vec{r})$ 和 $\varphi(\vec{r})$, 有

$$\int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) (\hat{I} \varphi(\vec{r})) = \int d^3\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \varphi(-\vec{r}) = \int d^3\vec{r} \psi^*(-\vec{r}) \varphi(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} (\hat{I} \psi(\vec{r}))^* \varphi(\vec{r}),$$

所以 \hat{I} 为厄米算符, 表示一力学量, 称为宇称。

$$\text{由 } \hat{I} \psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}), \quad \hat{I}^2 \psi(\vec{r}) = \hat{I} \psi(-\vec{r}) = \psi(\vec{r}),$$

\hat{I}^2 的本征值为 1, 宇称算符 \hat{I} 的,

$$\text{本征值为 } \quad 1 \quad \text{和} \quad -1,$$

$$\text{本征方程为 } \hat{I} \psi_s(\vec{r}) = \psi_s(\vec{r}) \quad \text{和} \quad \hat{I} \psi_a(\vec{r}) = -\psi_a(\vec{r}).$$

$$\text{本征态为 } \psi_s(\vec{r}) = \psi_s(-\vec{r}) \quad \text{和} \quad \psi_a(\vec{r}) = -\psi_a(-\vec{r}),$$

若体系具有空间反演不变性, $[\hat{I}, \hat{H}] = 0$, 则

a) 宇称守恒;

b) 宇称 \hat{I} 与 \hat{H} 有共同本征态。

例如: $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$, 若 $V(-\vec{r}) = V(\vec{r})$, 有 $\hat{I} \hat{H} \hat{I}^{-1} = \hat{H}$, 故宇称守恒, 宇称与 \hat{H} 有

共同本征态。可以证明, 对于一维束缚态问题, 无简并, \hat{H} 的所有本征态都是 \hat{I} 的本征态。

例题:

$$\hat{L} = \vec{r} \times \hat{p}, \quad \hat{p} = -i\hbar \nabla,$$

$$\hat{L}\hat{L}^{-1} = \hat{L}\hat{L}^{-1} \times \hat{L}\hat{L}^{-1} = \hat{r} \times \hat{p} = \hat{L}, \quad [\hat{L}, \hat{L}] = 0, \quad [\hat{L}, \hat{L}^2] = 0,$$

故 \hat{L} 与 \hat{L}^2 , \hat{L}_z 有共同本征态。 \hat{L}^2 , \hat{L}_z 的共同本征态是球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$,

$$\because Y_{lm}(\theta, \varphi) = N_{lm} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi},$$

$$P_l^{|m|}(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} (1 - \cos^2 \theta)^{|m|/2} \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{|m|} (\cos^2 \theta - 1)^l$$

在 \hat{L} 变换 $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ 下,

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \pi + \varphi, \quad \cos \theta \rightarrow -\cos \theta,$$

$$\therefore P_l^{|m|}(\cos \theta) \rightarrow (-1)^{l+|m|} P_l^{|m|}(\cos \theta), \quad e^{im\varphi} \rightarrow (-1)^m e^{im\varphi} = (-1)^{|m|} e^{im\varphi},$$

故

$$\hat{L} Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{l+2|m|} Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

\hat{L} 与 \hat{L}^2 , \hat{L}_z 的共同本征态就是球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, \hat{L} 的本征值为 $L = (-1)^l$ 。

问题: 为什么在经典力学中无宇称这一力学量?

回答: 在经典力学中无突变, 不能从 \vec{r} 突变到 $-\vec{r}$ 。

3. 全同粒子对称性

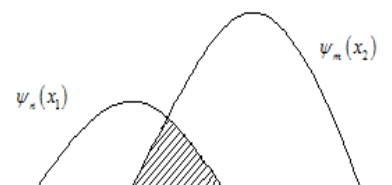
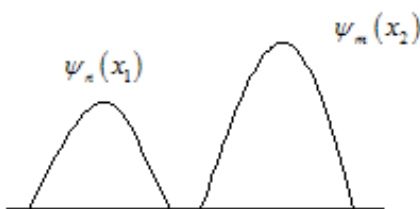
全同粒子: 内禀性质 (质量, 电荷, 自旋等) 完全相同的粒子。

由于经典力学中物理量的连续性, 两粒子的性质可以无限接近, 但不会全同, 总是可以区分的。故在经典力学中无全同粒子的概念。量子力学中物理量的取值可以是分离值, 要么完全相同, 要么完全不同。因此具有全同粒子的问题。

那么怎么区分全同粒子呢?

1) 全同性原理

在经典力学中即使有“全同”粒子, 也可以通过轨道区分“全同”粒子。但在量子力学中, 无轨道, 状态用波函数描述。考虑两个无相互作用的全同粒子, 设单粒子状态为 $\psi_n(x)$, 两全同粒子的波函数不重叠时, 可区分全同粒子。波函数重叠时, 若在重叠区内发现一个粒子, 不能区分它是第一个还是第二个粒子, 即波函数重叠时不可区分全同粒子。



严格来说，波函数在全空间都是重叠的。故交换两个粒子位置时，即将 $\{\psi_n(x_1), \psi_m(x_2)\} \rightarrow \{\psi_n(x_2), \psi_m(x_1)\}$ 时，发现粒子的几率分布相同，即状态不改变， $\{\psi_n(x_1), \psi_m(x_2)\}$ 与 $\{\psi_n(x_2), \psi_m(x_1)\}$ 描述的是全同粒子体系的同一状态。

全同性原理：交换两个全同粒子不改变体系的状态。

问题：这一原理对态有什么限制呢？

2) 波函数的交换对称性

对于包含 N 个粒子的体系，态 $|...i...j... \rangle$,

定义交换算符 \hat{P}_{ij} ：

$$\hat{P}_{ij} |...i...j... \rangle = |...j...i... \rangle = \lambda |...i...j... \rangle,$$

第二个等式用到了全同性原理。因为

$$\hat{P}_{ij}^2 |...i...j... \rangle = \hat{P}_{ij} |...j...i... \rangle = |...i...j... \rangle,$$

所以 \hat{P}_{ij}^2 的本征值为 1， \hat{P}_{ij} 的本征值 $\lambda = \pm 1$ 。即

$$\hat{P}_{ij} |...i...j... \rangle = \pm |...i...j... \rangle。$$

交换对称性：全同粒子体系的波函数在交换任意两个粒子时必须是对称或者是反对称的。

问题：全同粒子体系的波函数可不可以一会儿处于对称态，一会儿处于反对称态呢？

若全同粒子体系的 \hat{H} 满足交换对称性，

$$\hat{P}_{ij} \hat{H} \hat{P}_{ij}^{-1} = \hat{H}, \quad [\hat{P}_{ij}, \hat{H}] = 0,$$

则 \hat{P}_{ij} 是守恒量。若体系在初始时处于 \hat{P}_{ij} 的某个本征态（对称态或者反对称态），则恒处于该本征态。即全同粒子体系波函数的对称性不随时间改变。

实验表明，交换对称性由自旋决定：对于玻色子（自旋为整数的粒子）组成的全同粒子系统，状态是交换对称的，对于费米子（自旋为半整数的粒子）组成的全同粒子系统，状态是交换反对称的。

问题：全同粒子系统的状态一方面要满足交换对称性，另一方面要满足 Schrodinger

方程，怎样构造满足二者的态？

3) 两全同粒子的态

设

$$\hat{H}(1,2)\psi(1,2) = E\psi(1,2),$$

两边用交换算符 \hat{P}_{12} 作用, 有

$$\hat{P}_{12}\hat{H}(1,2)\hat{P}_{12}^{-1}\hat{P}_{12}\psi(1,2) = E\hat{P}_{12}\psi(1,2),$$

$$\hat{H}(2,1)\psi(2,1) = E\psi(2,1)$$

由 \hat{H} 满足交换对称性,

$$\hat{H}(1,2) = \hat{H}(2,1),$$

有

$$\hat{H}(1,2)\psi(2,1) = E\psi(2,1).$$

所以, $\psi(1,2)$ 与 $\psi(2,1)$ 都是属于 \hat{H} 的同一本征值 E 的本征态。

若 $\psi(1,2)$ 不满足交换对称性, 即 $\psi(2,1) \neq \pm\psi(1,2)$, 可以构造对称或反对称波函数:

$$\text{玻色子系统: } \psi_+(1,2) = \psi(1,2) + \psi(2,1),$$

$$\text{费米子系统: } \psi_-(1,2) = \psi(1,2) - \psi(2,1),$$

它们仍然是系统 \hat{H} 的属于本征值 E 的本征态:

$$\hat{H}\psi_{\pm}(1,2) = E\psi_{\pm}(1,2).$$

例如: 若不考虑两粒子的相互作用

$$\hat{H}(1,2) = \hat{H}_0(1) + \hat{H}_0(2),$$

求
$$\hat{H}\psi(1,2) = E\psi(1,2)$$

设
$$\hat{H}_0\varphi_n(i) = \varepsilon_n\varphi_n(i), \quad i=1,2$$

则
$$E = \varepsilon_n + \varepsilon_m, \quad \psi(1,2) = \varphi_n(1)\varphi_m(2),$$

$\psi(1,2)$ 一般不满足交换对称性。为达到交换对称性要求, 对于玻色子系统:

$$\psi_+(1,2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_n(1)\varphi_m(2) + \varphi_n(2)\varphi_m(1)], & n \neq m \\ \varphi_n(1)\varphi_n(2) & n = m \end{cases}$$

对于费米子系统:

$$\psi_{-}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_n(1)\varphi_m(2) - \varphi_n(2)\varphi_m(1)] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_n(1) & \varphi_n(2) \\ \varphi_m(1) & \varphi_m(2) \end{vmatrix}.$$

对于费米子系统,若两粒子处于同一状态(具有相同量子数)时, $n=m$, $\psi_{-}(1,2)=0$, \rightarrow

Pauli 不相容原理: 两个全同费米子不能处于同一状态。

需要强调指出的是: 交换对称化以前的多粒子波函数给出的是哪个粒子处于哪个单粒子态, 交换对称化以后的多粒子波函数给出的是有多少个粒子处于哪个单粒子态, 而不再关心每个粒子的状态。

以上关于波函数对称性的讨论, 可推广到多个全同粒子体系 \rightarrow 二次量子化, 量子场论。

4) 全同性原理的观察效应

例 1: 两个自由粒子的空间波函数

a) 不考虑全同性:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i(\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1 + \vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2)},$$

引入质心坐标: $\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$, 相对坐标: $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$,

$$\text{总动量: } \vec{K} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2, \quad \text{相对动量: } \vec{k} = \frac{1}{2}(\vec{k}_1 - \vec{k}_2),$$

波函数为

$$\psi(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}.$$

在以一粒子为中心, 半径为 r 的球壳内找到另一个粒子的几率为

$$P(r) = \int |\psi(\vec{R}, \vec{r})|^2 d^3\vec{R} r^2 d\Omega = Ar^2.$$

b) 两个全同 Bose 子:

$$\psi_{+}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)),$$

$$\psi_{+}(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{2} \cos(\vec{k} \cdot \vec{r}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}},$$

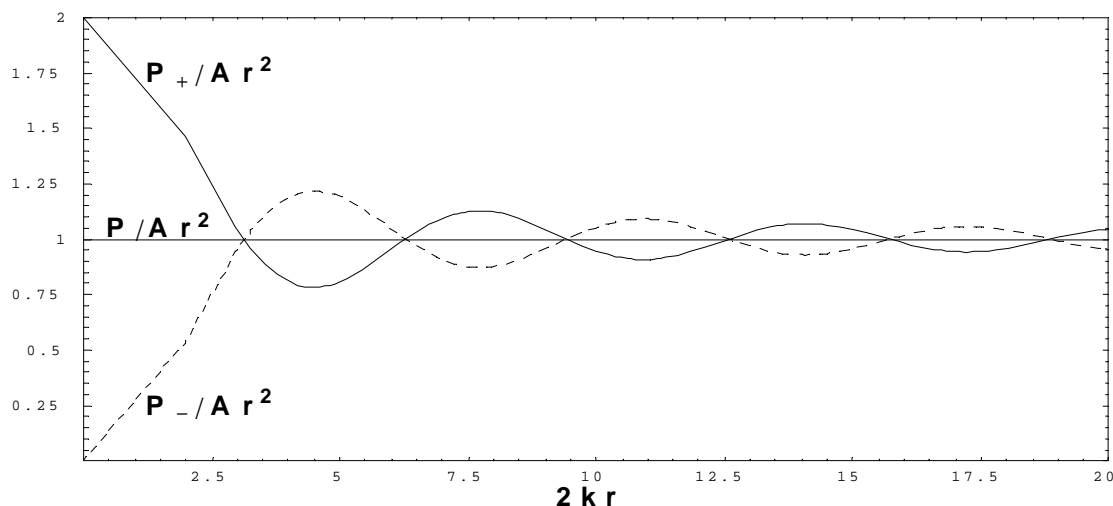
$$P_{+}(r) = \int |\psi_{+}(\vec{R}, \vec{r})|^2 d^3\vec{R} r^2 d\Omega = Ar^2 \left(1 + \frac{\sin 2kr}{2kr} \right)$$

c) 反对称波函数

$$\psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)),$$

$$\psi_-(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{2i} \sin(\vec{k} \cdot \vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}},$$

$$P_-(r) = Ar^2 \left(1 - \frac{\sin 2kr}{2kr} \right)$$



说明：对称空间波函数 \rightarrow 两粒子靠近的几率增大，

反对称空间波函数 \rightarrow 两粒子靠近的几率减小，

似乎在全同粒子间存在一种作用力，玻色子是吸引力，费米子是排斥力。这种力称为交换力，它不是一种真正意义上的力，无施力者，在 $r \rightarrow \infty$ 时，交换力消失。

例 2：两粒子体系的力学量平均值

设力学量 $\hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ 。不考虑交换对称性，

$$\langle F \rangle = \int \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2;$$

考虑交换对称性，

$$\begin{aligned} \langle F \rangle_{\pm} &= \int \psi_{\pm}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \\ &= \int \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \pm \psi^*(\vec{r}_2, \vec{r}_1)] \hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \pm \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)] d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \\ &= \frac{1}{2} \int [\psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \psi^*(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \\ &\quad \pm \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \pm \psi^*(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \hat{F}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)] d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \end{aligned}$$

$$= \langle F \rangle \pm \int \psi^*(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \hat{F}(|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|) \psi(\bar{r}_2, \bar{r}_1) d^3\bar{r}_1 d^3\bar{r}_2 \neq \langle F \rangle$$

5) 两全同费米子体系的自旋波函数

总波函数

$$\psi(\bar{r}_1, s_{1z}; \bar{r}_2, s_{2z})。$$

若忽略位形空间和自旋空间的耦合，即 $\hat{L} \bullet \hat{S}$ 耦合，则

$$\psi(\bar{r}_1, s_{1z}; \bar{r}_2, s_{2z}) = \psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \chi(s_{1z}, s_{2z})$$

(总的 Hilbert 空间是位形空间和自旋空间的直积)

总波函数交换反对称性要求：

a) 空间对称 $\psi_+(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$ ，自旋反对称 $\chi_-(s_{1z}, s_{2z})$ ，

或 b) 空间反对称 $\psi_-(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$ ，自旋对称 $\chi_+(s_{1z}, s_{2z})$ 。

若进一步忽略 $\hat{s}_1 \cdot \hat{s}_2$ 耦合，总自旋波函数是单费米子自旋算符 \hat{s}_z 的本征态的直积

$$\chi(s_{1z}, s_{2z}) = \chi(s_{1z}) \chi(s_{2z}) = \begin{cases} \chi_+(1) \chi_+(2) \\ \chi_+(1) \chi_-(2) \\ \chi_-(1) \chi_+(2) \\ \chi_-(1) \chi_-(2) \end{cases}$$

可以构成 4 个独立的对称或反对称自旋态：

$$\chi_+^1(s_{1z}, s_{2z}) = \chi_+(1) \chi_+(2)，$$

$$\chi_+^2(s_{1z}, s_{2z}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+(1) \chi_-(2) + \chi_+(2) \chi_-(1))，$$

$$\chi_+^3(s_{1z}, s_{2z}) = \chi_-(1) \chi_-(2)，$$

$$\chi_-(s_{1z}, s_{2z}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+(1) \chi_-(2) - \chi_+(2) \chi_-(1))$$

容易证明，它们是总自旋角动量 $\hat{s}^2 = (\hat{s}_1 + \hat{s}_2)^2$ 和 $\hat{s}_z = \hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}$ 的本征态：

本征值	本征态
对称三重态	$s = 1, \quad \bar{S}^2 = 2\hbar^2, \quad S_z = \begin{cases} \hbar \\ 0 \\ -\hbar \end{cases}$
χ_+^1 χ_+^2 χ_+^3	

反对称单态 χ_-

$$S = 0, \quad \bar{S}^2 = 0, \quad S_z = 0,$$

问题：两全同费米子体系的自旋波函数是否一定是上述 4 个态之一呢？

回答：若体系取反对称自旋态，必为 χ_- ；若取对称自旋态，可以是 $\chi_+^1, \chi_+^2, \chi_+^3$ 的线形组合，不再是自旋的本征态。

4. 简单全同粒子体系

1) 氦原子

设含有 Z 个电子的原子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)},$$
$$\hat{H}^{(0)} = \sum_{j=1}^z \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 - \frac{Ze^2}{r_j} \right), \quad \hat{H}^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^z (j \neq k) \frac{e^2}{|\bar{r}_j - \bar{r}_k|},$$

$\hat{H}^{(0)}$ 包含电子动能和电子-原子核相互作用， $\hat{H}^{(1)}$ 是两电子之间相互作用，去掉重复求和，有因子 1/2。已经忽略了三电子以上相互作用。

由于没考虑 $\hat{L} \cdot \hat{S}$ 耦合，原子态为

$$\psi(\bar{r}_1, \dots, \bar{r}_z) \chi(s_{1z}, \dots, s_{zz}).$$

对于氦原子， $z=2$ ，由于没有 $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ 耦合，对称或反对称的自旋态上面已给出。若不考虑两电子之间相互作用，空间波函数为

$$\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \psi_{nlm}(\bar{r}_1) \psi_{n'l'm'}(\bar{r}_2), \quad E = \varepsilon_n + \varepsilon_{n'}, \quad \varepsilon_n = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

对于 $\hat{H}^{(0)}$ ，由全同粒子对称性，全反对称的电子波函数为

$$\psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, S_{1z}, S_{2z}) = \psi_{\pm}(\bar{r}_1, \bar{r}_2) \chi_{\mp}(S_{1z}, S_{2z}),$$

$$\psi_{\pm}(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{nlm}(\bar{r}_1) \psi_{n'l'm'}(\bar{r}_2) \pm \psi_{nlm}(\bar{r}_2) \psi_{n'l'm'}(\bar{r}_1)).$$

对于基态，只有对称的空间波函数 $\psi_+(\bar{r}_1, \bar{r}_2) = \psi_{100}(\bar{r}_1) \psi_{100}(\bar{r}_2)$ ，没有反对称的空间波函数。

考虑 $\hat{H}^{(1)}$ 引起的能量修正。前一章已用微扰方法和变分法分别计算了基态能量和波函数的一级修正。对于激发态，零级能量 E 有二重简并态 $\psi_{nlm}(\bar{r}_1) \psi_{n'l'm'}(\bar{r}_2)$ 和 $\psi_{nlm}(\bar{r}_2) \psi_{n'l'm'}(\bar{r}_1)$ ，

但是其正确的零级波函数是 $\psi_{\pm}(\bar{r}_1, \bar{r}_2)$ ，能量一级修正是

$$E_{\pm} = \int \psi_{\pm}^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 = I \pm J$$

$$I = \int |\psi_{nlm}(\vec{r}_1)|^2 |\psi_{n'l'm'}(\vec{r}_2)|^2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

$$J = \int \psi_{nlm}(\vec{r}_1) \psi_{nlm}^*(\vec{r}_2) \psi_{n'l'm'}(\vec{r}_2) \psi_{n'l'm'}^*(\vec{r}_1) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

其中 I 是直接积分， J 是交换积分。

对于空间对称态 $\psi_+(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ，两个全同粒子靠得近，排斥力大；而对于空间反对称态 $\psi_-(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ ，两个全同粒子离得远，排斥力小，故有 $E_+ > E_-$ 。

2) 原子的角动量

考虑激发态。系统的行为由价电子决定，可以看成是由全同价电子构成的体系。考虑有 2 个价电子的原子。

$$\text{自旋角动量:} \quad \hat{s}_1 \quad \hat{s}_2 \quad \hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2$$

$$\text{量子数:} \quad s_1 = \frac{1}{2} \quad s_2 = \frac{1}{2} \quad S = 0, 1$$

$$\text{轨道角动量:} \quad \hat{L}_1 \quad \hat{L}_2 \quad \hat{L} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2$$

$$\text{量子数:} \quad l_1 = l \quad l_2 = l \quad L = |l_1 - l_2|, \dots, l_1 + l_2 = 0, \dots, 2l$$

$$\text{总角动量:} \quad \hat{J} = \hat{L} + \hat{S},$$

$$\text{量子数} \quad J = |L - S|, \dots, L + S = \begin{cases} L & S = 0, \text{自旋反对称} \\ L - 1, L, L + 1 & S = 1, \text{自旋对称} \end{cases}$$

问题：交换对称性对于 L 的取值有没有限制？

总的波函数应该是反对称的。空间波函数可分成质心与相对两部分， $\Phi(\vec{R})\Psi(\vec{r})$ 。质心部分 $\Phi(\vec{R})$ ， $\vec{R} = \frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)$ ，交换两个电子时， $\vec{R} \rightarrow \vec{R}$ ，是交换对称的。相对部分 $\Psi(\vec{r}) = R_{NL}(r)Y_{LM}(\theta, \varphi)$ ， $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ ，交换两个电子时， $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ ，故交换算符等价于宇称算符，由

$$\hat{P}_{12} Y_{LM}(\theta, \varphi) = (-1)^L Y_{LM}(\theta, \varphi),$$

L 为偶数时，空间波函数是对称的； L 为奇数时，空间波函数是反对称的。故考虑总波函数

的反对称要求导致

空间对称，自旋反对称，此时 L 为偶数， $S=0$ ；

或空间反对称，自旋对称，此时 L 为奇数， $S=1$ 。

不论何种情形，都有 $L+S$ 为偶数。表明受波函数交换对称性的限制， L 和 S 不能任意组合。

3) Pauli 效应导致的压强

固体中的电子可近似看成是自由费米气体。

经典粒子的相空间分布是 Boltzmann 分布：

$$f(k) = e^{-(E-\mu)/T}, \quad E = \frac{k^2}{2m}.$$

Pauli 不相容原理导致的量子费米粒子的相空间分布是 Fermi - Dirac 分布：

$$f(k) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/T} + 1}$$

$T = 0$ ：

$$f(k) = \theta(\mu - E), \quad k < k_F = \sqrt{2m\mu}, \quad \text{费米动量}$$

电子数密度：

$$n = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} f(k) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{k_F} k^2 dk = \frac{k_F^3}{3\pi^2},$$

上式中因子 2 是电子有两个自旋态。

能量密度

$$\varepsilon = 2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} E f(k) = \frac{k_F^5}{10m\pi^2}$$

由热力学关系

$$\varepsilon = -P + \mu n,$$

压强：

$$P = \frac{2}{3} \varepsilon.$$

注意：经典系统的压强在 $T=0$ 时 $P=0$ 。自由量子系统的压强不是由于电子间的相互作用引起的，也不是由于热运动引起的，而完全是由于全同粒子效应，即 Pauli 不相容原理引起的，是量子效应。

第七章 二次量子化

以上处理全体粒子体系的方法是先将粒子编号，再考虑各种可能的编号排列，以满足交换对称性的要求。这种方法有下列不足：1) 既然是全同粒子，本来就不能编号区分；2) 粒子数 N 较大时，对称/反对称的波函数会非常繁琐；3) 不能处理粒子间的转化，即不能过渡到相对论量子多体系统。

1. 粒子数表象

1) Fock 空间

思想：用单粒子的力学量 \hat{A} 的本征值和本征态来构造全同粒子体系的本征值和本征态，不论全同粒子之间是否有相互作用。

\hat{A} 的本征值： a_1, a_2, \dots ,

本征态： $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots$,

处于本征态的粒子数： n_1, n_2, \dots

由全同性原理，我们不知道全同粒子体系中哪个粒子处于哪个本征态，只关心有几个粒子处于某个本征态。所以体系的状态用

$$|n_1, n_2, \dots\rangle$$

描述， n_i 是处于态 $|a_i\rangle$ 的粒子数。

由 $|n_1, n_2, \dots\rangle$ 构成的多粒子态矢量空间称为 **Fock** 空间。用单粒子态的粒子数分布来描述全同粒子体系的状态。显然，真空态和单粒子态可以写成

$$|0\rangle = |0, 0, \dots\rangle, \quad |a_i\rangle = |0, 0, \dots, n_i = 1, \dots\rangle \quad .$$

2) 产生与消灭算符

既然多粒子态用粒子数分布表示，则作用在态上的算符就是改变粒子数分布的粒子产生与消灭算符 \hat{a}_i 和 \hat{a}_i^+ 。

$$\hat{a}_i^+ |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \sim |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle,$$

$$\hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \sim |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle,$$

显然，对于真空态，

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0 \quad ,$$

对于单粒子态，

$$\hat{a}_i |a_j\rangle = \delta_{ij} |0\rangle, \quad \hat{a}_i^+ |0\rangle = |a_i\rangle \quad .$$

3) 两个 Fock 空间之间的变换

设有两个单粒子力学量 \hat{A}, \hat{B} ,

	表象 A	表象 B
本征值	a_i	b_i
本征态	$ a_i\rangle$	$ b_i\rangle$
粒子数	n_i	\tilde{n}_i
产生算符	\hat{a}_i^+	\hat{b}_i^+
消灭算符	\hat{a}_i	\hat{b}_i

按照单粒子态 $|a_i\rangle$ 的粒子数分布可构成一个 Fock 空间 $|n_1, n_2, \dots\rangle$ ，按照单粒子态 $|b_i\rangle$ 的粒子数分布也可构成一个 Fock 空间 $|\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \dots\rangle$ 。两个 Fock 空间的变换归结为产生与消灭算符 \hat{a}_i ， \hat{a}_i^+ 与 \hat{b}_i ， \hat{b}_i^+ 之间的变换。

单粒子本征态的表象变换，

$$|a_i\rangle = \sum_j |b_j\rangle \langle b_j | a_i \rangle = \sum_j S_{ji} |b_j\rangle, \quad S_{ji} = \langle b_j | a_i \rangle \quad .$$

表象变换矩阵 S 的么正性，

$$\sum_k S_{ik}^+ S_{jk} = \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} = \delta_{ij} \quad .$$

算符的表象变换，

$$\begin{aligned} \hat{a}_i |a_j\rangle &= \delta_{ij} |0\rangle = \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} |0\rangle = \sum_{k,l} S_{ki}^+ S_{lj} \delta_{kl} |0\rangle \\ &= \sum_{k,l} S_{ki}^+ S_{lj} \hat{b}_k |b_l\rangle = \sum_k S_{ki}^+ \hat{b}_k \left(\sum_l S_{lj} |b_l\rangle \right) = \sum_k S_{ki}^+ \hat{b}_k |a_j\rangle \end{aligned}$$

故

$$\hat{a}_i = \sum_k S_{ki}^+ \hat{b}_k, \quad \hat{a}_i^+ = \sum_k S_{ki} \hat{b}_k^+, \quad .$$

4) 产生与消灭算符之间的对易关系

A. 先考虑 \hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+ (\hat{a}_i, \hat{a}_j) 之间的对易关系。

对于任意状态 $|\psi\rangle$ ， $\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+|\psi\rangle$ 与 $\hat{a}_j^+\hat{a}_i^+|\psi\rangle$ 是同一个状态，只能差一个常数，

$$\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+|\psi\rangle = \lambda\hat{a}_j^+\hat{a}_i^+|\psi\rangle \quad ,$$

即

$$\begin{aligned} 0 &= (\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+ - \lambda\hat{a}_j^+\hat{a}_i^+)|\psi\rangle \\ &= \sum_{k,l} S_{ki}S_{lj}(\hat{b}_k^+\hat{b}_l^+ - \lambda\hat{b}_l^+\hat{b}_k^+)|\psi\rangle \\ &= \sum_{l,k} S_{li}S_{kj}(\hat{b}_l^+\hat{b}_k^+ - \lambda\hat{b}_k^+\hat{b}_l^+)|\psi\rangle \end{aligned}$$

由于 $|\psi\rangle$ 和表象变换矩阵元 $S_{ji} = \langle b_j | a_i \rangle$ 的独立性（即基矢的独立性），有

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^+\hat{a}_j^+ - \lambda\hat{a}_j^+\hat{a}_i^+ &= 0, \\ \hat{b}_k^+\hat{b}_l^+ - \lambda\hat{b}_l^+\hat{b}_k^+ &= 0, \\ \hat{b}_l^+\hat{b}_k^+ - \lambda\hat{b}_k^+\hat{b}_l^+ &= 0, \end{aligned}$$

后两式导致

$$(1 - \lambda^2)\hat{b}_k^+\hat{b}_l^+ = 0, \quad \lambda = \pm 1$$

代入第一式，取 $\lambda=1$ 有

$$\begin{cases} \hat{a}_i^+\hat{a}_j^+ - \hat{a}_j^+\hat{a}_i^+ = 0 \\ \hat{a}_i\hat{a}_j - \hat{a}_j\hat{a}_i = 0 \end{cases}$$

取 $\lambda=-1$ 有

$$\begin{cases} \hat{a}_i^+\hat{a}_j^+ + \hat{a}_j^+\hat{a}_i^+ = 0 \\ \hat{a}_i\hat{a}_j + \hat{a}_j\hat{a}_i = 0 \end{cases} .$$

B. 再考虑 \hat{a}_i, \hat{a}_j^+ 之间的对易关系。

先取 $i \neq j$ 。 $\hat{a}_i\hat{a}_j^+|\psi\rangle$ 与 $\hat{a}_j^+\hat{a}_i|\psi\rangle$ 是同一个态，

$$0 = (\hat{a}_i\hat{a}_j^+ - \mu\hat{a}_j^+\hat{a}_i)|\psi\rangle, \quad ,$$

即

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^+ - \mu\hat{a}_j^+\hat{a}_i = 0 \quad .$$

进行表象变换，

$$0 = \sum_{k,l} S_{ki}^+ S_{lj} (\hat{b}_k \hat{b}_l^+ - \mu \hat{b}_l^+ \hat{b}_k) |\psi\rangle \quad ,$$

当 $k \neq l$ 时，由表象变换矩阵元的独立性，

$$\hat{b}_k \hat{b}_l^+ - \mu \hat{b}_l^+ \hat{b}_k = 0 \quad .$$

当 $k = l$ 时，

$$0 = \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} (\hat{b}_k \hat{b}_k^+ - \mu \hat{b}_k^+ \hat{b}_k) |\psi\rangle \quad ,$$

只有当

$$\hat{b}_k \hat{b}_k^+ - \mu \hat{b}_k^+ \hat{b}_k = \hat{A}$$

是一与 k 无关的算符，能保证

$$\sum_k S_{ki}^+ S_{kj} (\hat{b}_k \hat{b}_k^+ - \mu \hat{b}_k^+ \hat{b}_k) |\psi\rangle = \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} \hat{A} |\psi\rangle = \sum_k \delta_{ij} \hat{A} |\psi\rangle = 0 \quad (\text{因为 } i \neq j) \quad .$$

现在考虑 $i = j$ 。

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i &= \sum_{k,l} S_{ki}^+ S_{lj} (\hat{b}_k \hat{b}_l^+ - \mu \hat{b}_l^+ \hat{b}_k) \\ &= \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} (\hat{b}_k \hat{b}_k^+ - \mu \hat{b}_k^+ \hat{b}_k) \\ &= \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} \hat{A} \\ &= \hat{A} \quad (i = j) \end{aligned}$$

综合 $i \neq j$ 和 $i = j$ 两种情况，有

$$\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = \hat{A} \delta_{ij} \quad .$$

注意： \hat{a}_i, \hat{a}_j^+ 的对易关系与 \hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+ (\hat{a}_i, \hat{a}_j) 不同，原因是表象变换的么正性，

$$\sum_k S_{ik}^+ S_{jk} = \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} = \delta_{ij} \quad .$$

C. 确定 μ 与 \hat{A} 。

总的粒子数不随表象变换而改变，

$$N = \sum_i n_i = \sum_i \tilde{n}_i, \quad \hat{N} = \sum_i \hat{n}_i = \sum_i \hat{\tilde{n}}_i \quad .$$

因为

$$\sum_i \hat{a}_i \hat{a}_i^+ = \sum_{i,k,l} S_{ki}^+ S_{li} \hat{b}_k \hat{b}_l^+ = \sum_i \hat{b}_i \hat{b}_i^+, \quad \sum_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \sum_i \hat{b}_i^+ \hat{b}_i \quad ,$$

与表象无关，有

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i = x \sum_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i + y \sum_i \hat{a}_i \hat{a}_i^+ + Z,$$

$$\hat{n}_i = x \hat{a}_i^+ \hat{a}_i + y \hat{a}_i \hat{a}_i^+ + z,$$

其中 x, y, z 均为常数。

由于

$$\hat{n}_i |0\rangle = 0, \quad x \hat{a}_i^+ \hat{a}_i |0\rangle + y \hat{a}_i \hat{a}_i^+ |0\rangle + z |0\rangle = 0,$$

考虑到

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0, \quad \hat{a}_i \hat{a}_i^+ |0\rangle = \hat{a}_i |a_i\rangle = |0\rangle,$$

有

$$(y+z)|0\rangle = 0, \quad z = -y$$

$$\hat{n}_i = x \hat{a}_i^+ \hat{a}_i + y(\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - 1)$$

还是先考虑 $i \neq j$, $\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = 0$, 确定 μ 。

$$\hat{n}_i \hat{a}_j | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle = \hat{n}_i c_j | \dots, n_i, \dots, n_j - 1, \dots \rangle = c_j n_i | \dots, n_i, \dots, n_j - 1, \dots \rangle,$$

$$\hat{a}_j \hat{n}_i | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle = \hat{a}_j n_i | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle = n_i c_j | \dots, n_i, \dots, n_j - 1, \dots \rangle,$$

故

$$\hat{n}_i \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{n}_i = 0,$$

$$x(\hat{a}_i^+ \hat{a}_i \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i^+ \hat{a}_i) + y(\hat{a}_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_i^+) = 0,$$

当 $\hat{a}_i \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i = 0$ 时,

$$x(\hat{a}_i^+ \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i^+) \hat{a}_i + y \hat{a}_i (\hat{a}_i^+ \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i^+) = 0,$$

即

$$\hat{a}_j \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_j = 0.$$

同理, 当 $\hat{a}_i \hat{a}_j + \hat{a}_j \hat{a}_i = 0$ 时, 有

$$\hat{a}_j \hat{a}_i^+ + \hat{a}_i^+ \hat{a}_j = 0.$$

故 $i \neq j$ 时, $\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = 0$ 中的 $\mu = \pm 1$, 与 $\lambda = \pm 1$ 的取号完全相同。

再考虑 $i = j$, 此时 $\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \mu \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \hat{A}$, $\mu = \pm 1$ 已确定, 现在确定 \hat{A} 。

由

$$(\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \mu \hat{a}_i^+ \hat{a}_i)|0\rangle = \hat{A}|0\rangle \quad ,$$

即

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

有

$$\hat{A} = 1 \quad .$$

故综合 $i \neq j$ 和 $i = j$ 两种情况, 有

$$\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = \delta_{ij} \quad .$$

D. 总结对易关系

有, 而且仅有两套对易关系:

$$\left\{ \begin{array}{l} [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \\ [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0 \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij} \end{array} \right. , \quad \left\{ \begin{array}{l} \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0 \\ \{\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+\} = 0 \\ \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\} = \delta_{ij} \end{array} \right. ,$$

对应两类全同粒子: 玻色子和费米子。

5) Pauli 不相容原理

对于费米子系统,

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ &= 0, \\ \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ |0\rangle &= 0, \\ \hat{a}_i^+ |0, \dots, n_i = 1, \dots\rangle &= 0, \\ |0, \dots, n_i = 2, \dots\rangle &= 0, \end{aligned}$$

说明不可能有两个以上的费米子占据同一个单粒子态。对于费米子, $n_i = 0, 1$ 。

6) 粒子数算符

$$\hat{n}_i = x \hat{a}_i^+ \hat{a}_i + y (\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - 1) \quad ,$$

因为

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ = 1 \pm \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \quad ,$$

故

$$\hat{n}_i = (x \pm y) \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \quad .$$

因为

$$\begin{aligned}\hat{n}_i |a_i\rangle &= |a_i\rangle, \\ (x \pm y) \hat{a}_i^+ \hat{a}_i |a_i\rangle &= (x \pm y) \hat{a}_i^+ |0\rangle = (x \pm y) |a_i\rangle = |a_i\rangle,\end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned}x \pm y &= 1, \\ \hat{n}_i &= \hat{a}_i^+ \hat{a}_i.\end{aligned}$$

第七章 二次量子化

以上处理全体粒子体系的方法是先将粒子编号，再考虑各种可能的编号排列，以满足交换对称性的要求。这种方法有下列不足：1) 既然是全同粒子，本来就不能编号区分；2) 粒子数 N 较大时，对称/反对称的波函数会非常繁琐；3) 不能处理粒子间的转化，即不能过渡到相对论量子多体系统。

1. 粒子数表象

1) Fock 空间

思想：用单粒子的力学量 \hat{A} 的本征值和本征态来构造全同粒子体系的本征值和本征态，不论全同粒子之间是否有相互作用。

\hat{A} 的本征值： a_1, a_2, \dots ,

本征态： $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots$,

处于本征态的粒子数： n_1, n_2, \dots

由全同性原理，我们不知道全同粒子体系中哪个粒子处于哪个本征态，只关心有几个粒子处于某个本征态。所以体系的状态用

$$|n_1, n_2, \dots\rangle$$

描述， n_i 是处于态 $|a_i\rangle$ 的粒子数。

由 $|n_1, n_2, \dots\rangle$ 构成的多粒子态矢量空间称为 **Fock** 空间。用单粒子态的粒子数分布来描述全同粒子体系的状态。显然，真空态和单粒子态可以写成

$$|0\rangle = |0, 0, \dots\rangle, \quad |a_i\rangle = |0, 0, \dots, n_i = 1, \dots\rangle \quad .$$

2) 产生与消灭算符

既然多粒子态用粒子数分布表示，则作用在态上的算符就是改变粒子数分布的粒子产生与消灭算符 \hat{a}_i 和 \hat{a}_i^+ 。

$$\hat{a}_i^+ |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \sim |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle,$$

$$\hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle \sim |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle,$$

显然，对于真空态，

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0 \quad ,$$

对于单粒子态，

$$\hat{a}_i |a_j\rangle = \delta_{ij} |0\rangle, \quad \hat{a}_i^+ |0\rangle = |a_i\rangle \quad .$$

3) 两个 Fock 空间之间的变换

设有两个单粒子力学量 \hat{A}, \hat{B} ,

	表象 A	表象 B
本征值	a_i	b_i
本征态	$ a_i\rangle$	$ b_i\rangle$
粒子数	n_i	\tilde{n}_i
产生算符	\hat{a}_i^+	\hat{b}_i^+
消灭算符	\hat{a}_i	\hat{b}_i

按照单粒子态 $|a_i\rangle$ 的粒子数分布可构成一个 Fock 空间 $|n_1, n_2, \dots\rangle$ ，按照单粒子态 $|b_i\rangle$ 的粒子数分布也可构成一个 Fock 空间 $|\tilde{n}_1, \tilde{n}_2, \dots\rangle$ 。两个 Fock 空间的变换归结为产生与消灭算符 \hat{a}_i ， \hat{a}_i^+ 与 \hat{b}_i ， \hat{b}_i^+ 之间的变换。

单粒子本征态的表象变换，

$$|a_i\rangle = \sum_j |b_j\rangle \langle b_j | a_i \rangle = \sum_j S_{ji} |b_j\rangle, \quad S_{ji} = \langle b_j | a_i \rangle \quad .$$

表象变换矩阵 S 的么正性，

$$\sum_k S_{ik}^+ S_{jk} = \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} = \delta_{ij} \quad .$$

算符的表象变换，

$$\begin{aligned} \hat{a}_i |a_j\rangle &= \delta_{ij} |0\rangle = \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} |0\rangle = \sum_{k,l} S_{ki}^+ S_{lj} \delta_{kl} |0\rangle \\ &= \sum_{k,l} S_{ki}^+ S_{lj} \hat{b}_k |b_l\rangle = \sum_k S_{ki}^+ \hat{b}_k \left(\sum_l S_{lj} |b_l\rangle \right) = \sum_k S_{ki}^+ \hat{b}_k |a_j\rangle \end{aligned}$$

故

$$\hat{a}_i = \sum_k S_{ki}^+ \hat{b}_k, \quad \hat{a}_i^+ = \sum_k S_{ki} \hat{b}_k^+, \quad .$$

4) 产生与消灭算符之间的对易关系

A. 先考虑 \hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+ (\hat{a}_i, \hat{a}_j) 之间的对易关系。

对于任意状态 $|\psi\rangle$ ， $\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+|\psi\rangle$ 与 $\hat{a}_j^+\hat{a}_i^+|\psi\rangle$ 是同一个状态，只能差一个常数，

$$\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+|\psi\rangle = \lambda\hat{a}_j^+\hat{a}_i^+|\psi\rangle \quad ,$$

即

$$\begin{aligned} 0 &= (\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+ - \lambda\hat{a}_j^+\hat{a}_i^+)|\psi\rangle \\ &= \sum_{k,l} S_{ki}S_{lj}(\hat{b}_k^+\hat{b}_l^+ - \lambda\hat{b}_l^+\hat{b}_k^+)|\psi\rangle \\ &= \sum_{l,k} S_{li}S_{kj}(\hat{b}_l^+\hat{b}_k^+ - \lambda\hat{b}_k^+\hat{b}_l^+)|\psi\rangle \end{aligned}$$

由于 $|\psi\rangle$ 和表象变换矩阵元 $S_{ji} = \langle b_j | a_i \rangle$ 的独立性（即基矢的独立性），有

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^+\hat{a}_j^+ - \lambda\hat{a}_j^+\hat{a}_i^+ &= 0, \\ \hat{b}_k^+\hat{b}_l^+ - \lambda\hat{b}_l^+\hat{b}_k^+ &= 0, \\ \hat{b}_l^+\hat{b}_k^+ - \lambda\hat{b}_k^+\hat{b}_l^+ &= 0, \end{aligned}$$

后两式导致

$$(1 - \lambda^2)\hat{b}_k^+\hat{b}_l^+ = 0, \quad \lambda = \pm 1$$

代入第一式，取 $\lambda=1$ 有

$$\begin{cases} \hat{a}_i^+\hat{a}_j^+ - \hat{a}_j^+\hat{a}_i^+ = 0 \\ \hat{a}_i\hat{a}_j - \hat{a}_j\hat{a}_i = 0 \end{cases}$$

取 $\lambda=-1$ 有

$$\begin{cases} \hat{a}_i^+\hat{a}_j^+ + \hat{a}_j^+\hat{a}_i^+ = 0 \\ \hat{a}_i\hat{a}_j + \hat{a}_j\hat{a}_i = 0 \end{cases} .$$

B. 再考虑 \hat{a}_i, \hat{a}_j^+ 之间的对易关系。

先取 $i \neq j$ 。 $\hat{a}_i\hat{a}_j^+|\psi\rangle$ 与 $\hat{a}_j^+\hat{a}_i|\psi\rangle$ 是同一个态，

$$0 = (\hat{a}_i\hat{a}_j^+ - \mu\hat{a}_j^+\hat{a}_i)|\psi\rangle, \quad ,$$

即

$$\hat{a}_i\hat{a}_j^+ - \mu\hat{a}_j^+\hat{a}_i = 0 \quad .$$

进行表象变换，

$$0 = \sum_{k,l} S_{ki}^+ S_{lj} (\hat{b}_k \hat{b}_l^+ - \mu \hat{b}_l^+ \hat{b}_k) |\psi\rangle \quad ,$$

当 $k \neq l$ 时，由表象变换矩阵元的独立性，

$$\hat{b}_k \hat{b}_l^+ - \mu \hat{b}_l^+ \hat{b}_k = 0 \quad .$$

当 $k = l$ 时，

$$0 = \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} (\hat{b}_k \hat{b}_k^+ - \mu \hat{b}_k^+ \hat{b}_k) |\psi\rangle \quad ,$$

只有当

$$\hat{b}_k \hat{b}_k^+ - \mu \hat{b}_k^+ \hat{b}_k = \hat{A}$$

是一与 k 无关的算符，能保证

$$\sum_k S_{ki}^+ S_{kj} (\hat{b}_k \hat{b}_k^+ - \mu \hat{b}_k^+ \hat{b}_k) |\psi\rangle = \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} \hat{A} |\psi\rangle = \sum_k \delta_{ij} \hat{A} |\psi\rangle = 0 \quad (\text{因为 } i \neq j) \quad .$$

现在考虑 $i = j$ 。

$$\begin{aligned} \hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i &= \sum_{k,l} S_{ki}^+ S_{lj} (\hat{b}_k \hat{b}_l^+ - \mu \hat{b}_l^+ \hat{b}_k) \\ &= \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} (\hat{b}_k \hat{b}_k^+ - \mu \hat{b}_k^+ \hat{b}_k) \\ &= \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} \hat{A} \\ &= \hat{A} \quad (i = j) \end{aligned}$$

综合 $i \neq j$ 和 $i = j$ 两种情况，有

$$\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = \hat{A} \delta_{ij} \quad .$$

注意： \hat{a}_i, \hat{a}_j^+ 的对易关系与 \hat{a}_i^+, \hat{a}_j (\hat{a}_i, \hat{a}_j) 不同，原因是表象变换的么正性，

$$\sum_k S_{ik}^+ S_{jk} = \sum_k S_{ki}^+ S_{kj} = \delta_{ij} \quad .$$

C. 确定 μ 与 \hat{A} 。

总的粒子数不随表象变换而改变，

$$N = \sum_i n_i = \sum_i \tilde{n}_i, \quad \hat{N} = \sum_i \hat{n}_i = \sum_i \hat{\tilde{n}}_i \quad .$$

因为

$$\sum_i \hat{a}_i \hat{a}_i^+ = \sum_{i,k,l} S_{ki}^+ S_{li} \hat{b}_k \hat{b}_l^+ = \sum_i \hat{b}_i \hat{b}_i^+, \quad \sum_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \sum_i \hat{b}_i^+ \hat{b}_i \quad ,$$

与表象无关，有

$$\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i = x \sum_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i + y \sum_i \hat{a}_i \hat{a}_i^+ + Z,$$

$$\hat{n}_i = x \hat{a}_i^+ \hat{a}_i + y \hat{a}_i \hat{a}_i^+ + z,$$

其中 x, y, z 均为常数。

由于

$$\hat{n}_i |0\rangle = 0, \quad x \hat{a}_i^+ \hat{a}_i |0\rangle + y \hat{a}_i \hat{a}_i^+ |0\rangle + z |0\rangle = 0,$$

考虑到

$$\hat{a}_i |0\rangle = 0, \quad \hat{a}_i \hat{a}_i^+ |0\rangle = \hat{a}_i |a_i\rangle = |0\rangle,$$

有

$$(y+z)|0\rangle = 0, \quad z = -y$$

$$\hat{n}_i = x \hat{a}_i^+ \hat{a}_i + y(\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - 1)$$

还是先考虑 $i \neq j$, $\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = 0$, 确定 μ 。

$$\hat{n}_i \hat{a}_j | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle = \hat{n}_i c_j | \dots, n_i, \dots, n_j - 1, \dots \rangle = c_j n_i | \dots, n_i, \dots, n_j - 1, \dots \rangle,$$

$$\hat{a}_j \hat{n}_i | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle = \hat{a}_j n_i | \dots, n_i, \dots, n_j, \dots \rangle = n_i c_j | \dots, n_i, \dots, n_j - 1, \dots \rangle,$$

故

$$\hat{n}_i \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{n}_i = 0,$$

$$x(\hat{a}_i^+ \hat{a}_i \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i^+ \hat{a}_i) + y(\hat{a}_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i \hat{a}_i^+) = 0,$$

当 $\hat{a}_i \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i = 0$ 时,

$$x(\hat{a}_i^+ \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i^+) \hat{a}_i + y \hat{a}_i (\hat{a}_i^+ \hat{a}_j - \hat{a}_j \hat{a}_i^+) = 0,$$

即

$$\hat{a}_j \hat{a}_i^+ - \hat{a}_i^+ \hat{a}_j = 0.$$

同理, 当 $\hat{a}_i \hat{a}_j + \hat{a}_j \hat{a}_i = 0$ 时, 有

$$\hat{a}_j \hat{a}_i^+ + \hat{a}_i^+ \hat{a}_j = 0.$$

故 $i \neq j$ 时, $\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = 0$ 中的 $\mu = \pm 1$, 与 $\lambda = \pm 1$ 的取号完全相同。

再考虑 $i = j$, 此时 $\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \mu \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \hat{A}$, $\mu = \pm 1$ 已确定, 现在确定 \hat{A} 。

由

$$(\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - \mu \hat{a}_i^+ \hat{a}_i) |0\rangle = \hat{A} |0\rangle \quad ,$$

即

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

有

$$\hat{A} = 1 \quad .$$

故综合 $i \neq j$ 和 $i = j$ 两种情况, 有

$$\hat{a}_i \hat{a}_j^+ - \mu \hat{a}_j^+ \hat{a}_i = \delta_{ij} \quad .$$

D. 总结对易关系

有, 而且仅有两套对易关系:

$$\left\{ \begin{array}{l} [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \\ [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0 \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij} \end{array} \right. , \quad \left\{ \begin{array}{l} \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0 \\ \{\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+\} = 0 \\ \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\} = \delta_{ij} \end{array} \right. ,$$

对应两类全同粒子: 玻色子和费米子。

5) Pauli 不相容原理

对于费米子系统,

$$\begin{aligned} \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ &= 0, \\ \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ |0\rangle &= 0, \\ \hat{a}_i^+ |0, \dots, n_i = 1, \dots\rangle &= 0, \\ |0, \dots, n_i = 2, \dots\rangle &= 0, \end{aligned}$$

说明不可能有两个以上的费米子占据同一个单粒子态。对于费米子, $n_i = 0, 1$ 。

6) 粒子数算符

$$\hat{n}_i = x \hat{a}_i^+ \hat{a}_i + y (\hat{a}_i \hat{a}_i^+ - 1) \quad ,$$

因为

$$\hat{a}_i \hat{a}_i^+ = 1 \pm \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \quad ,$$

故

$$\hat{n}_i = (x \pm y) \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \quad .$$

因为

$$\begin{aligned}\hat{n}_i |a_i\rangle &= |a_i\rangle, \\ (x \pm y) \hat{a}_i^+ \hat{a}_i |a_i\rangle &= (x \pm y) \hat{a}_i^+ |0\rangle = (x \pm y) |a_i\rangle = |a_i\rangle,\end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned}x \pm y &= 1, \\ \hat{n}_i &= \hat{a}_i^+ \hat{a}_i.\end{aligned}$$

7) 粒子数算符的比例常数

由

$$n_i = \langle 0, \dots, n_i, \dots | \hat{n}_i | 0, \dots, n_i, \dots \rangle = \langle 0, \dots, n_i, \dots | \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | 0, \dots, n_i, \dots \rangle \quad ,$$

注意: 在上式中 $n_1 = n_2, = \dots = n_{i-1} = 0$, 有

$$\hat{a}_i | 0, \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i} | 0, \dots, n_i - 1, \dots \rangle,$$

$$\hat{a}_i^+ | 0, \dots, n_i - 1, \dots \rangle = \sqrt{n_i} | 0, \dots, n_i, \dots \rangle,$$

由

$$| n_1, \dots, n_i, \dots \rangle = A(n_1, \dots, n_{i-1}, \dots) (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} \dots (\hat{a}_{i-1}^+)^{n_{i-1}} | 0, \dots, n_i, \dots \rangle \quad ,$$

注意产生算符的次序, 当 \hat{a}_j^+ 作用时, $n_1 = n_2, = \dots = n_{j-1} = 0$ 。对于玻色子, 由对易关系, 有

$$\begin{aligned} \hat{a}_i | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle &= A(n_1, \dots, n_{i-1}, \dots) (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} \dots (\hat{a}_{i-1}^+)^{n_{i-1}} \hat{a}_i | 0, \dots, n_i, \dots \rangle \\ &= A(n_1, \dots, n_{i-1}, \dots) (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} \dots (\hat{a}_{i-1}^+)^{n_{i-1}} \sqrt{n_i} | 0, \dots, n_i - 1, \dots \rangle \\ &= \sqrt{n_i} | n_1, \dots, n_i - 1, \dots \rangle \end{aligned}$$

同理,

$$\hat{a}_i^+ | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle = \sqrt{n_i + 1} | n_1, \dots, n_i + 1, \dots \rangle \quad .$$

对于费米子, 由反对易关系, 有

$$\begin{aligned} \hat{a}_i | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle &= A(n_1, \dots, n_{i-1}, \dots) (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} \dots (\hat{a}_{i-1}^+)^{n_{i-1}} (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} \hat{a}_i | 0, \dots, n_i, \dots \rangle \\ &= (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} \sqrt{n_i} | n_1, \dots, n_i - 1, \dots \rangle, \\ \hat{a}_i^+ | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle &= (-1)^{\sum_{j=1}^{i-1} n_j} \sqrt{n_i + 1} | n_1, \dots, n_i + 1, \dots \rangle. \end{aligned}$$

故, 无论是玻色子还是费米子, 都有

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots | \hat{n}_i | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle = \langle n_1, \dots, n_i, \dots | \hat{a}_i^+ \hat{a}_i | n_1, \dots, n_i, \dots \rangle = n_i \quad .$$

2. 用产生消灭算符表示力学量

1) 可加性单粒子算符

体系的力学量是每个粒子的力学量之和, 例如动能算符。

设单粒子力学量 \hat{A} , 在其自身表象有确定值, $\hat{A} | a_i \rangle = a_i | a_i \rangle$ 。在 Fock 空间 $| n_1, \dots, n_i, \dots \rangle$,

产生与消灭算符为 \hat{a}_i, \hat{a}_i^+ , 全同粒子系统的力学量

$$\hat{A} = \sum_i a_i \hat{n}_i = \sum_i a_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \quad .$$

对于另一个单粒子力学量 \hat{B} ，在其自身表象有确定值，在 Fock 空间 $|\tilde{n}_1, \dots, \tilde{n}_i, \dots\rangle$ ，产生与消灭算符为 \hat{b}_i, \hat{b}_i^+ ，由表象变换，全同粒子系统的力学量

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \sum_i a_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \\ &= \sum_{i,j,k} a_i S_{ji} S_{ki}^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_k \\ &= \sum_{j,k} \hat{b}_j^+ \hat{b}_k \sum_i a_i \langle b_j | a_i \rangle \langle a_i | b_k \rangle \quad . \\ &= \sum_{j,k} \hat{b}_j^+ \hat{b}_k \sum_i \langle b_j | \hat{A} | a_i \rangle \langle a_i | b_k \rangle \\ &= \sum_{j,k} \hat{b}_j^+ \hat{b}_k \langle b_j | \hat{A} | b_k \rangle \end{aligned}$$

表明：可加性单粒子算符在任意表象由非对角元，在自身表象只有对角元。

应用：对于一个粒子间有相互作用的真实多粒子体系，其它粒子对某个粒子的作用可近似处理为一个平均势场。这就是平均场近似。这时，体系的力学量就是可加性单粒子算符，是所有准粒子的贡献之和。

2) 可加性两粒子算符

考虑两粒子相互作用势 \hat{V} 。

设在粒子数表象 \mathbf{A} ， $\hat{A} | a_i \rangle = a_i | a_i \rangle$ ，两粒子态

$$| a_i, a_j \rangle = | a_i \rangle | a_j \rangle = | 0, \dots, n_i = 1, \dots, n_j = 1, \dots \rangle \quad ,$$

势有确定值，

$$\hat{V} | a_i, a_j \rangle = V_{ij} | a_i, a_j \rangle \quad ,$$

显然， $V_{ij} = V_{ji}$ 。考虑到两粒子可处于不同态，也可处于同一态，

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{n}_i \hat{n}_j V_{ij} + \frac{1}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) V_{ii} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} (\hat{n}_i \hat{n}_j - \hat{n}_j \delta_{ij}) V_{ij} \quad , \end{aligned}$$

由对易/反对易关系， $i \neq j$ 时，有

$$\hat{n}_i \hat{n}_j - \hat{n}_j \delta_{ij} = \hat{n}_i \hat{n}_j = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \hat{a}_j^+ \hat{a}_j = \pm \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_i \hat{a}_j = \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_j \hat{a}_i \quad ,$$

$i = j$ 时，有

$$\hat{n}_i \hat{n}_j - \hat{n}_j \delta_{ij} = \hat{n}_i \hat{n}_i - \hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \hat{a}_i^+ (1 \pm \hat{a}_i^+ \hat{a}_i) \hat{a}_i - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \pm \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \hat{a}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \hat{a}_i ,$$

最后一步把两个消灭算符进行了对易。

结合 $i \neq j$ 和 $i = j$ 两种情况，有

$$\begin{aligned} \hat{n}_i \hat{n}_j - \hat{n}_j \delta_{ij} &= \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_j \hat{a}_i , \\ \hat{\mathcal{V}} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_j \hat{a}_i V_{ij} . \end{aligned}$$

在任意的粒子数表象 \mathbf{B} ，势无确定值，利用算符的表象变换，有

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{V}} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j^+ \hat{a}_j \hat{a}_i V_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ijklmn} \hat{b}_k^+ \hat{b}_l^+ \hat{b}_m \hat{b}_n S_{ki} S_{lj} S_{mj}^+ S_{ni}^+ V_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ijklmn} \hat{b}_k^+ \hat{b}_l^+ \hat{b}_m \hat{b}_n \langle b_k | a_i \rangle \langle b_l | a_j \rangle \langle a_j | b_m \rangle \langle a_i | b_n \rangle V_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{klmn} \hat{b}_k^+ \hat{b}_l^+ \hat{b}_m \hat{b}_n \sum_{ij} \langle b_k, b_l | a_i, a_j \rangle \langle a_j, a_i | b_m, b_n \rangle V_{ij} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{klmn} \hat{b}_k^+ \hat{b}_l^+ \hat{b}_m \hat{b}_n \sum_{ij} \langle b_k, b_l | \hat{\mathcal{V}} | a_i, a_j \rangle \langle a_j, a_i | b_m, b_n \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{klmn} \hat{b}_k^+ \hat{b}_l^+ \hat{b}_m \hat{b}_n \langle b_k, b_l | \hat{\mathcal{V}} | b_m, b_n \rangle \end{aligned}$$

最后一步用到了完备性条件

$$\sum_{ij} |a_i, a_j\rangle \langle a_j, a_i| = \sum_{ij} |a_i\rangle \langle a_j| |a_j\rangle \langle a_i| = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = 1 .$$

表明：可加性两粒子算符在任意表象是四阶张量，在有确定值的表象是二阶张量。

应用：超出平均场近似，但只考虑两粒子相互作用，即配对相互作用。

3) 单粒子连续谱情形

对于分离谱的粒子数表象 \mathbf{A} ：消灭产生算符 \hat{a}_i, \hat{a}_i^+ ，

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = 1, \quad \hat{N} = \sum_i \hat{n}_i, \quad \hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i ,$$

对易关系

$$\left\{ \begin{aligned} [\hat{a}_i, \hat{a}_j] &= 0 \\ [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] &= 0 \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] &= \delta_{ij} \end{aligned} \right. , \quad \left\{ \begin{aligned} \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} &= 0 \\ \{\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+\} &= 0 \\ \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\} &= \delta_{ij} \end{aligned} \right. ,$$

推广到连续谱的粒子数表象，例如坐标与自旋 $(\hat{r}, \hat{\sigma})$ （坐标连续，自旋分离）：

消灭产生算符 $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$ ， $\hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})$ ，

$$\begin{aligned} \hat{r}|\vec{r}, \sigma\rangle &= \vec{r}|\vec{r}, \sigma\rangle, & \hat{\sigma}|\vec{r}, \sigma\rangle &= \sigma|\vec{r}, \sigma\rangle, \\ \langle\vec{r}', \sigma'|\vec{r}'', \sigma''\rangle &= \delta(\vec{r}' - \vec{r}'')\delta_{\sigma'\sigma''}, & \int d^3\vec{r} \sum_\sigma |\vec{r}, \sigma\rangle\langle\vec{r}, \sigma| &= 1 \end{aligned}$$

粒子数算符 $\hat{N} = \int d^3\vec{r} \sum_\sigma \hat{n}_\sigma(\vec{r})$ ， $\hat{n}_\sigma(\vec{r}) = \hat{\psi}_\sigma^\dagger(\vec{r})\hat{\psi}_\sigma(\vec{r})$ ，

对易关系

$$\begin{cases} [\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}(\vec{r}'')] = 0 \\ [\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}^\dagger(\vec{r}'')] = 0 \\ [\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}^\dagger(\vec{r}'')] = \delta(\vec{r}' - \vec{r}'')\delta_{\sigma'\sigma''} \end{cases}, \quad \begin{cases} \{\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}(\vec{r}'')\} = 0 \\ \{\hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}^\dagger(\vec{r}'')\} = 0 \\ \{\hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}'), \hat{\psi}_{\sigma''}^\dagger(\vec{r}'')\} = \delta(\vec{r}' - \vec{r}'')\delta_{\sigma'\sigma''} \end{cases}$$

可加性单粒子算符的形式

$$\begin{aligned} \hat{A} &= \sum_{j,k} \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_k \langle b_j | \hat{A} | b_k \rangle \\ &\Rightarrow \sum_{\sigma'\sigma''} \int d^3\vec{r}' d^3\vec{r}'' \hat{\psi}_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma''}(\vec{r}'') \langle \vec{r}', \sigma' | \hat{A} | \vec{r}'', \sigma'' \rangle \end{aligned}$$

可加性两粒子算符（两粒子势）的形式

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \frac{1}{2} \sum_{klmn} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_m \hat{b}_n \langle b_k, b_l | \hat{V} | b_m, b_n \rangle \\ &\Rightarrow \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1\sigma_2\sigma_3\sigma_4} \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 d^3\vec{r}_3 d^3\vec{r}_4 \hat{\psi}_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\psi}_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) \hat{\psi}_{\sigma_3}(\vec{r}_3) \hat{\psi}_{\sigma_4}(\vec{r}_4) \langle \vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2 | \hat{V} | \vec{r}_3, \sigma_3, \vec{r}_4, \sigma_4 \rangle \end{aligned}$$

4) 量子动力学与二次量子化

在 Heisenberg 绘景讨论消灭算符的运动方程。

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

忽略三体以上相互作用，只考虑单粒子与两粒子相互作用，

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$$

\hat{H}_0 包含了单粒子的动能和在外场中的势能。在任意的分离粒子数表象 \mathbf{A} ,

$$\hat{H} = \sum_{k,l} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \langle a_k | \hat{H}_0 | a_l \rangle + \frac{1}{2} \sum_{klmn} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n \langle a_k, a_l | \hat{V} | a_m, a_n \rangle$$

因为

$$\begin{aligned} [\hat{a}_i, \hat{a}_k^+ \hat{a}_l] &= \hat{a}_i \hat{a}_k^+ \hat{a}_l - \hat{a}_k^+ \hat{a}_l \hat{a}_i = \hat{a}_i \hat{a}_k^+ \hat{a}_l \mp \hat{a}_k^+ \hat{a}_l \hat{a}_i = \hat{a}_i \hat{a}_k^+ \hat{a}_l - (\hat{a}_i \hat{a}_k^+ - \delta_{ik}) \hat{a}_l = \hat{a}_l \delta_{ik}, \\ [\hat{a}_i, \hat{a}_k^+ \hat{a}_l^+ \hat{a}_m \hat{a}_n] &= \hat{a}_l^+ \hat{a}_m \hat{a}_n \delta_{ik} + \hat{a}_k^+ \hat{a}_n \hat{a}_m \delta_{il}, \end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{a}_i}{dt} &= [\hat{a}_i, \hat{H}] \\ &= \sum_l \hat{a}_l \langle a_i | \hat{H}_0 | a_l \rangle + \sum_{lmn} \hat{a}_l^+ \hat{a}_m \hat{a}_n \langle a_i, a_l | \hat{V} | a_m, a_n \rangle \end{aligned}$$

如果 \hat{V} 在 **A** 表象有确定值，即

$$\hat{V} |a_m, a_n\rangle = V_{mn} |a_m, a_n\rangle,$$

有

$$i\hbar \frac{d\hat{a}_i}{dt} = \sum_l \langle a_i | \hat{H}_0 | a_l \rangle \hat{a}_l + \sum_l V_{il} \hat{a}_l^+ \hat{a}_l \hat{a}_i.$$

如果表象 **A** 为连续的坐标自旋表象，有

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) &= \sum_{\sigma'} \int d^3\vec{r}' \langle \vec{r}, \sigma | \hat{H}_0 | \vec{r}', \sigma' \rangle \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}', t) \\ &\quad + \sum_{\sigma'} \int d^3\vec{r}' V(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\psi}_{\sigma'}^+(\vec{r}', t) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}', t) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

如果 \hat{H}_0 只是坐标和动量的函数，与自旋无关，

$$\langle \vec{r}, \sigma | \hat{H}_0 | \vec{r}', \sigma' \rangle = \hat{H}_0(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma\sigma'},$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) &= \hat{H}_0(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) \\ &\quad + \sum_{\sigma'} \int d^3\vec{r}' \hat{\psi}_{\sigma'}^+(\vec{r}', t) \hat{\psi}_{\sigma'}(\vec{r}', t) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) V(\vec{r}, \vec{r}') \end{aligned}$$

$\hat{V} = 0$ 时，Heisenberg 绘景中多粒子体系的消灭算符 $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)$ 满足的运动方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t) = \hat{H}_0(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)$$

与 Schrodinger 绘景中单粒子波函数 $\varphi_\sigma(\vec{r}, t)$ 满足的波动方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_\sigma(\vec{r}, t) = \hat{H}_0(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla}) \varphi_\sigma(\vec{r}, t)$$

一致，说明：如果将 $\psi_\sigma(\vec{r}, t)$ 看成是 Schrodinger 波函数（经典场），则通过场的正则量子

化，即引入场算符的对易关系，量子场 $\hat{\psi}_\sigma(\vec{r}, t)$ 与经典场 $\psi_\sigma(\vec{r}, t)$ 的运动方程相同。因此，可将上面引入 **Fock** 空间处理多体问题的步骤看成是二从量子化：量子力学中将力学量量子化，变成算符，但波函数仍然是经典的函数，进入粒子数表象后，等价于把波函数也量子化了，变成量子场。

第八章 相对论量子力学

非相对论量子力学的困难:

- 1) 无相对论协变性 (动量能量不对称, 空间时间不对称);
- 2) 理论上不能自洽引入自旋;
- 3) 几率守恒, 无粒子的产生与湮灭。

由非相对论量子力学到相对论量子力学不是一个简单地把 $E = \frac{\vec{p}^2}{2m} \rightarrow E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4$ 的

推广, 在发展的过程中最后建立了处理相对论多粒子体系的理论 - 量子场论, 而相对论量子力学只是一个中间过程。

相对论量子力学是研究一些量子系统 (例如石墨稀) 的重要工具, 更是建立量子场论的基础。

1. 相对论运动方程

1) 自然单位制

物理学中一共有三个独立的量纲, 一般选取长度量纲【L】, 时间量纲【T】, 和能量量纲【E】。在相对论量子力学, 特别是由此发展的量子场论中, 引入一个新的单位制: 取光速 c 为速度的单位, 取 \hbar 为作用量的单位, 则只剩下一个独立单位了, 取为能量量纲【E】。于是, 在新的单位制中, 可取 $\hbar = c = 1$, 这样 \hbar, c 便不在计算中明显出现了。

2) Klein-Gordon 方程

考虑自由粒子的波动方程。

非相对论能量: $E = \frac{\vec{p}^2}{2m},$

相对论能量: $E^2 = \vec{p}^2 + m^2$

用正则量子化方案: $E \rightarrow i \frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{p} \rightarrow -i \vec{\nabla},$

得到非相对论 Schrodinger 方程: $i \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\vec{\nabla}^2}{2m} \psi,$

和相对论 Klein-Gordon 方程: $(\partial^\mu \partial_\mu + m^2) \psi = 0, \quad \partial^\mu \partial_\mu = \partial_t^2 - \vec{\nabla}^2.$

用 ψ^* 左乘 Klein-Gordon 方程, 用 ψ 右乘 Klein-Gordon 方程的复共轭 $\psi^*(\partial^\mu\partial_\mu+m^2)=0$,

然后两式相减, 有

$$\begin{aligned}\psi^*(\partial^\mu\partial_\mu\psi)-(\partial^\mu\partial_\mu\psi^*)\psi &= 0, \\ \partial^\mu[\psi^*(\partial_\mu\psi)-(\partial_\mu\psi^*)\psi] &= 0\end{aligned}$$

即流守恒方程 (连续性方程)

$$\begin{aligned}\partial^\mu j_\mu &= 0, \\ j_\mu &= \psi^*(\partial_\mu\psi)-(\partial_\mu\psi^*)\psi\end{aligned}$$

或

$$\begin{aligned}\partial_t\rho+\vec{\nabla}\cdot\vec{j} &= 0 \\ \rho &= \frac{i}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}-\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right), \quad \vec{j} = \frac{1}{2im}(\psi^*\vec{\nabla}\psi-\psi\vec{\nabla}\psi^*)\end{aligned}$$

但是, ρ 不是几率密度, 不正定, 不能保证 $\rho \geq 0$ 。这是因为 Klein-Gordon 方程是一个时间的二阶微分方程, ψ 和 $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 都是独立的初始条件, 导致上式中的 ρ 可能为负。这就是 Klein-Gordon 方程的几率不正定困难。解决复几率困难的方法是把 Klein-Gordon 方程看成是场方程 (量子场论), 流不是几率流而是电流, 电流密度可以是负的。注意, Schroedinger 方程是时间的一阶微分方程, $\rho = \psi^+\psi$ 正定。

另外, 任意能量 E 的平面波 $\psi = e^{-ip^\mu x_\mu} = e^{-i(Et-\vec{p}\cdot\vec{x})}$ 只要满足 $E^2 = \vec{p}^2 + m^2$, 都是 Klein-Gordon 方程的解, 即 $E = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$ 和 $E = -\sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$ 的平面波都是 Klein-Gordon 方程的解。此即 Klein-Gordon 方程的负能困难。在经典力学中, 由于粒子初始时处在正能态, 而且没有跃迁, 故无复能困难。量子力学中的跃迁则导致复能困难。注意, Schroedinger 方程无复能困难。解决复能困难的方法是引入反粒子 (量子场论)。

3) Dirac 方程

为了解决由时间二次微分引起的负几率困难, 只考虑时间一次微分, 又由于相对论协变性, 空间也只考虑一次微分。由此, Dirac 给出波函数的运动方程

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi = 0$$

其中, ψ 是 Dirac 空间的 4-矢量波函数 (下面将看到, 4 个分量对应正, 负能和自旋向上,

向下), 称为 Dirac 旋量波函数。 γ^μ 是一个 Lorentz 4-矢量 $(\gamma^0, \vec{\gamma})$, 每一个分量是 Dirac 空间的 4X4 矩阵,

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad \gamma_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix},$$

满足以下关系

$$\begin{aligned} \{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} &= \gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2g_{\mu\nu}, & \gamma_\mu^+ &= \gamma_0 \gamma_\mu \gamma_0 \\ \gamma^\mu \gamma_\mu &= g_\mu^\mu = 4, \\ \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma_\mu &= -2\gamma^\nu, & \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma_\mu &= 4g^{\nu\rho}, & \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\rho \gamma^\sigma \gamma_\mu &= -2\gamma^\sigma \gamma^\rho \gamma^\nu \end{aligned}$$

$g_{\mu\nu}$ 是 4 维 Minkowski 空间的度规张量,

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1), \quad g_\nu^\mu = g^{\mu\sigma} g_{\sigma\nu} = \text{diag}(1, 1, 1, 1),$$

由于

$$\begin{aligned} (i\gamma^\mu \partial_\mu + m)(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi &= 0 \\ -(\gamma^\mu \gamma^\nu \partial_\mu \partial_\nu - m^2)\psi &= 0 \\ \left(-\frac{1}{2}(\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu) \partial_\mu \partial_\nu - m^2\right)\psi &= 0, \\ \left(-\frac{1}{2}2g^{\mu\nu} \partial_\mu \partial_\nu - m^2\right)\psi &= 0 \\ (\partial^\mu \partial_\mu + m^2)\psi &= 0 \end{aligned}$$

说明矢量 ψ 的每个分量均满足 Klein-Gordon 方程 (但总个矢量波函数满足 Dirac 方程, 有交叉项), 故满足 $E^2 = \vec{p}^2 + m^2$ 的正负能平面波解都是 Dirac 方程的解, 表明 Dirac 方程也有负能困难。

将 Dirac 方程两边取厄米共轭

$$\psi^+ (i\gamma^{\mu+} \bar{\partial}_\mu + m) = 0, \quad ,$$

利用 $\gamma_\mu^+ = \gamma_0 \gamma_\mu \gamma_0$, $\gamma_0 \gamma_0 = 1$, 并定义

$$\bar{\psi} = \psi^+ \gamma_0, \quad ,$$

有

$$\bar{\psi} \left(i\gamma^\mu \bar{\partial}_\mu \gamma_0 + m\gamma_0 \right) = 0$$

右乘 γ_0 , 有

$$\bar{\psi} \left(i\gamma^\mu \bar{\partial}_\mu + m \right) = 0 \quad .$$

将这个方程右乘 ψ 后与 Dirac 方程左乘 $\bar{\psi}$ 相加,

$$\bar{\psi} \gamma^\mu \left(\bar{\partial}_\mu + \partial_\mu \right) \psi = 0$$

$$\partial_\mu \left(\bar{\psi} \gamma^\mu \psi \right) = 0$$

定义流

$$j^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$$

流守恒方程

$$\partial_\mu j^\mu = 0,$$

$$j^0 = \rho = \bar{\psi} \gamma_0 \psi = \psi^\dagger \psi \geq 0, \quad \text{正定}$$

$$\vec{j} = \bar{\psi} \vec{\gamma} \psi$$

说明在 Dirac 方程中没有几率不正定的困难。

2. 相对论不变性

1) Lorentz 不变性

考虑两个坐标系 O 与 O' , Dirac 方程分别为

$$i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} \psi(x) - m\psi(x) = 0,$$

$$i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x'^\mu} \psi'(x') - m\psi'(x') = 0$$

设坐标 x^μ 与波函数 ψ 在两个坐标系的变换关系是

$$x' = \Lambda x,$$

$$\psi'(x') = S(\Lambda)\psi(x) \quad .$$

这里 $\Lambda, S(\Lambda)$ 都是 4×4 的矩阵, 不是坐标的函数。由 Lorentz 标量在变换下保持不变, 即

$x'_\mu x'^\mu = x_\mu x^\mu$, Λ 满足

$$\Lambda_\mu^\nu \Lambda_\rho^\mu = g_\rho^\nu, \quad ,$$

两边求行列式，

$$(\det \Lambda)^2 = 1, \quad \det \Lambda = \pm 1,$$

满足 $\det \Lambda = +1$ 的变换称为正 Lorentz 变换，满足 $\det \Lambda = -1$ 的变换称为非正 Lorentz 变换。

在上述变换下，O' 系的 Dirac 方程为，

$$i\gamma^\mu \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\nu} S\psi(x) - mS\psi(x) = 0,$$

$$i\gamma^\mu (\Lambda^{-1})^\nu_\mu \frac{\partial}{\partial x^\nu} S\psi(x) - mS\psi(x) = 0,$$

将 O 系的 Dirac 方程左乘 S 后有

$$iS\gamma^\mu S^{-1} \frac{\partial}{\partial x^\mu} S\psi(x) - mS\psi(x) = 0,$$

则 Dirac 方程具有 Lorentz 不变性，即 O, O' 系的两个方程等价的条件是，S 应该满足

$$S\gamma^\mu S^{-1} = (\Lambda^{-1})^\mu_\nu \gamma^\nu = (\Lambda^{-1})^{\mu\nu} \gamma_\nu, \quad \text{或} \quad S^{-1}\gamma^\mu S = \Lambda^{\mu\nu} \gamma_\nu.$$

这就是 Dirac 方程的相对论不变性对变换 S 的限制条件。

例如，对于一个无穷小变换

$$\Lambda^\mu_\nu = g^\mu_\nu + \omega^\mu_\nu,$$

$\omega^{\mu\nu} = -\omega^{\nu\mu}$ 是全反对称张量，

$$(\Lambda^{-1})^\mu_\nu = g^\mu_\nu - \omega^\mu_\nu, \quad \omega^\mu_\nu = \omega^{\mu\sigma} g_{\sigma\nu}$$

设

$$S = I - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu}, \quad S^{-1} = I + \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu},$$

$\sigma_{\mu\nu}$ 是 4X4 矩阵，待定，代入 S 应该满足的条件，有

$$\left(I - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} \right) \gamma^\rho \left(I + \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} \right) = \gamma^\nu (g^\rho_\nu - \omega^\rho_\nu),$$

$$\frac{i}{4} (\gamma^\rho \sigma_{\mu\nu} - \sigma_{\mu\nu} \gamma^\rho) \omega^{\mu\nu} = -\gamma_\nu \omega^{\rho\nu},$$

$$\frac{i}{4} [\gamma^\rho, \sigma_{\mu\nu}] \omega^{\mu\nu} = \frac{1}{2} (-\gamma_\nu \omega^{\rho\nu} - \gamma_\mu \omega^{\rho\mu}) = -\frac{1}{2} (\gamma_\nu g_\mu^\rho \omega^{\mu\nu} + \gamma_\mu g_\nu^\rho \omega^{\nu\mu}) = -\frac{1}{2} (\gamma_\nu g_\mu^\rho - \gamma_\mu g_\nu^\rho) \omega^{\mu\nu},$$

$$[\gamma^\rho, \sigma_{\mu\nu}] = 2i (\gamma_\nu g_\mu^\rho - \gamma_\mu g_\nu^\rho)$$

满足此条件的 $\sigma_{\mu\nu}$ 可以取为

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma_\mu, \gamma_\nu] \quad .$$

显然, $\sigma_{\mu\nu} = -\sigma_{\nu\mu}$ 是全反对称张量矩阵。

2) 自旋

粒子的自旋是自动包含在 Dirac 方程中。

对于无限小 Lorentz 变换,

$$\begin{aligned} \psi'(x') &= \left(I - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} \right) \psi(x) \\ &= \left(I - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} \right) \psi(\Lambda^{-1}x') \end{aligned}$$

作 Taylor 展开,

$$\begin{aligned} \psi'(x') &= \left(I - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} \right) (1 + x'_\mu \omega^{\mu\nu} \partial'_\nu) \psi(x') \\ \psi'(x) &= \left(I - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} \right) (1 + x_\mu \omega^{\mu\nu} \partial_\nu) \psi(x) \\ &= \left(I - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} + x_\mu \omega^{\mu\nu} \partial_\nu \right) \psi(x) \\ &= \left(I - \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} + \frac{1}{2} (x_\mu \partial_\nu - x_\nu \partial_\mu) \omega^{\mu\nu} \right) \psi(x) \end{aligned}$$

这里已忽略二阶无穷小。

对于无限小的转动, 有

$$\psi'(x) = \left(I - \frac{i}{2} J_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} \right) \psi(x) \quad ,$$

其中角动量张量 $J_{\mu\nu}$ 是转动的生成元。比较上面二式, 有

$$J_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \sigma_{\mu\nu} + i (x_\mu \partial_\nu - x_\nu \partial_\mu)$$

令角动量分量

$$J_1 = J_{23}, \quad J_2 = J_{31}, \quad J_3 = J_{12}$$

有总角动量

$$\vec{J} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix} + \vec{r} \times \vec{p} = \frac{1}{2} \vec{\Sigma} + \vec{L}, \quad \vec{p} = -i\vec{\nabla} \quad .$$

说明总的角动量 \vec{J} 包含轨道角动量 \vec{L} 和自旋角动量 $\vec{S} = \frac{1}{2} \vec{\Sigma}$ 。

Dirac 方程自动包含自旋是相对论效应。但具体来说 Dirac 方程只含一阶微分的结果，Klein - Gordon 方程是二阶微分方程，不包含自旋。

3)空间反演不变性 (P 变换)

上面证明了, Dirac 方程在变换 $\psi'(x') = S\psi(x)$ 下保持不变的要求是 $S^{-1}\gamma^\mu S = \Lambda^{\mu\nu}\gamma_\nu$ 。对于连续性变换, 可取 $S = I - \frac{i}{4}\sigma_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}$, $\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma_\mu, \gamma_\nu]$ 。对于突变, 例如宇称变换

$$x' = \Lambda x, \quad \Lambda^{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1, -1) = g^{\mu\nu},$$

如果取

$$S = P = \gamma_0,$$

则

$$S^{-1}\gamma^\mu S = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 = g^{\mu\nu}\gamma_\nu = \Lambda^{\mu\nu}\gamma_\nu,$$

满足 S 的协变条件, 说明 Dirac 方程是空间反演不变的。

4)时间反演不变性 (T 变换)

对于时间反演变换

$$x' = \Lambda x, \quad \Lambda^{\mu\nu} = \text{diag}(-1, 1, 1, 1) = -g^{\mu\nu},$$

如果取

$$S = T = \gamma_1\gamma_2\gamma_3,$$

因为

$$SS = \gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_1\gamma_2\gamma_3 = -\gamma_1\gamma_2\gamma_1\gamma_3\gamma_2\gamma_3 = \gamma_1\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_2\gamma_3 = -\gamma_1\gamma_1\gamma_2\gamma_2\gamma_3\gamma_3 = I$$

故

$$S^{-1} = S$$

$$S^{-1}\gamma^\mu S = S\gamma^\mu S = S\gamma^\mu\gamma_1\gamma_2\gamma_3 = \Lambda^{\mu\nu}S\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_\nu = \Lambda^{\mu\nu}SS\gamma_\nu = \Lambda^{\mu\nu}\gamma_\nu,$$

满足 S 的协变条件, 说明 Dirac 方程是时间反演不变的。

5)电荷共轭不变性 (C 变换)

由最小耦合引入电磁相互作用。将 Dirac 方程中的

$$\partial_\mu \rightarrow \text{协变微分 } D_\mu = \partial_\mu + ieA_\mu,$$

其中电磁势 $A_\mu = (A_0, \vec{A})$ 是外场, 不是波函数。Dirac 方程

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - e\gamma^\mu A_\mu - m)\psi = 0$$

在定域规范变换

$$\begin{aligned}\psi(x) &\rightarrow e^{ie\alpha(x)}\psi(x), \\ A_\mu(x) &\rightarrow A_\mu(x) - \partial_\mu\alpha(x)\end{aligned}$$

下保持不变。

将上面的 Dirac 方程取厄米共轭，再右乘 γ_0 ，有

$$\bar{\psi}\left(i\gamma^\mu\partial_\mu + e\gamma^\mu A_\mu + m\right) = 0,$$

转置，

$$\left(i\gamma^{\mu T}\partial_\mu + e\gamma^{\mu T}A_\mu + m\right)\bar{\psi}^T = 0.$$

左乘变换矩阵 C ，

$$\left(iC\gamma^{\mu T}C^{-1}\partial_\mu + eC\gamma^{\mu T}C^{-1}A_\mu + m\right)C\bar{\psi}^T = 0$$

如果变换 C 满足关系

$$C\gamma^{\mu T}C^{-1} = -\gamma^\mu,$$

并令 $\psi^c = C\bar{\psi}^T$ ，

则有

$$\left(i\gamma^\mu\partial_\mu + e\gamma^\mu A_\mu - m\right)\psi^c = 0.$$

与电荷为 e 的粒子满足的 Dirac 方程相比， ψ^c 表示的是电荷为 $-e$ 的粒子的波函数。变换 C 称为电荷共轭变换，或粒子 \leftrightarrow 反粒子变换。

注意， C 变换是内部变换，不是时空变换。

6) 双线性密度量

物理上可观测的量应该是由 Dirac 旋量 $\psi(x) = \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{pmatrix}$ ， $\bar{\psi}(x) = \psi^\dagger(x)\gamma_0$ 构成的双线性

Dirac 标量 $\bar{\psi}\Gamma\psi$ ， Γ 是 4×4 的矩阵。它们的 Lorentz 变换性质如何？

先看 $\bar{\psi}(x)$ 的变换。由

$$\psi'(x') = S\psi(x),$$

有

$$\psi^{+'}(x') = \psi^+(x)S^+ ,$$

右乘 γ_0 ，有

$$\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)\gamma_0 S^+ \gamma_0 ,$$

由

$$\gamma_0 \sigma_{\mu\nu}^+ \gamma_0 = \sigma_{\mu\nu} ,$$

$$\gamma_0 S^+ \gamma_0 = \gamma_0 \left(I + \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu}^+ \omega^{\mu\nu} \right) \gamma_0 = I + \frac{i}{4} \sigma_{\mu\nu} \omega^{\mu\nu} = S^{-1}$$

故

$$\bar{\psi}'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1} .$$

独立的 4×4 的矩阵有 16 个，可取为

$$\Gamma = \begin{cases} I & (1\text{个}) \\ \gamma_\mu & (4\text{个}) \\ \sigma_{\mu\nu} & (6\text{个}) \\ \gamma_5 & (1\text{个}) \\ \gamma_5 \gamma_\mu & (4\text{个}) \end{cases}$$

其中 γ_5 的定义是

$$\gamma_5 = i\gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3 ,$$

具有性质

$$\{\gamma_5, \gamma_\mu\} = 0, \quad \gamma_5^2 = I, \quad S^{-1}\gamma_5 S = \gamma_5 .$$

利用 Γ 的变换性质，

$$S^{-1}IS = I$$

$$S^{-1}\gamma_\mu S = \Lambda_{\mu\nu}\gamma^\nu$$

$$S^{-1}\sigma_{\mu\nu} S = \Lambda_{\mu\sigma}\Lambda_{\nu\rho}\sigma^{\sigma\rho}$$

$$S^{-1}\gamma_5 S = -\gamma_5$$

$$S^{-1}\gamma_5\gamma_\mu S = -\Lambda_{\mu\nu}\gamma_5\gamma^\nu$$

容易证明这 16 个独立的 Dirac 标量的 Lorentz 变换性质是

$\bar{\psi}'(x')\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}S\psi(x) = \bar{\psi}(x)\psi(x)$, Lorentz标量,

$\bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^\mu S\psi(x) = \Lambda_\nu^\mu\bar{\psi}(x)\gamma^\nu\psi(x)$, Lorentz矢量,

$\bar{\psi}'(x')\gamma^5\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^5 S\psi(x) = \det\Lambda\bar{\psi}(x)\gamma^5\psi(x)$, Lorentz赝标量,

$\bar{\psi}'(x')\gamma^5\gamma^\mu\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\gamma^5 S S^{-1}\gamma^\mu S\psi(x) = \det\Lambda\Lambda_\nu^\mu\bar{\psi}(x)\gamma^5\gamma^\nu\psi(x)$, Lorentz赝矢量,

$\bar{\psi}'(x')\sigma^{\mu\nu}\psi'(x') = \bar{\psi}(x)S^{-1}\sigma^{\mu\nu} S\psi(x) = \Lambda_\rho^\mu\Lambda_\sigma^\nu\bar{\psi}(x)\sigma^{\rho\sigma}\psi(x)$, Lorentz张量。

变换 S 既可以是连续变换也可以是宇称变换。

3. 自由 Dirac 方程的平面波解

自由粒子的 Dirac 方程

$$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi(x) = 0,$$

设正负能平面波解为

$$\begin{aligned}\psi^+(x) &= u(k)e^{-ik^\mu x_\mu}, \\ \psi^-(x) &= v(k)e^{ik^\mu x_\mu}, \quad k_0 = E = \sqrt{m^2 + \vec{k}^2}\end{aligned}$$

其中 $u(k), v(k)$ 是 Dirac 旋量。代入方程, 有

$$\begin{aligned}(\gamma^\mu k_\mu - m)u(k) &= 0, \\ (\gamma^\mu k_\mu + m)v(k) &= 0,\end{aligned}$$

先考虑在粒子静止系, 即 $k_\mu = (m, \vec{0})$ 的解,

$$\begin{aligned}(\gamma_0 - 1)u(m, \vec{0}) &= 0, \\ (\gamma_0 + 1)v(m, \vec{0}) &= 0,\end{aligned}$$

取

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix},$$

I 是单位矩阵, $\vec{\sigma}$ 是 Pauli 矩阵, 则 u, v 分别有两个独立的解

$$u_\uparrow(m, \vec{0}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad u_\downarrow(m, \vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_\uparrow(m, \vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad v_\downarrow(m, \vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

设从粒子静止系到运动系的 Lorentz 变换为

$$\begin{aligned} u_\alpha(k) &= S_u u_\alpha(m, \vec{0}), \\ v_\alpha(k) &= S_v v_\alpha(m, \vec{0}), \quad \alpha = \uparrow, \downarrow, \end{aligned}$$

代入 $u(k), v(k)$ 满足的方程

$$\begin{aligned} (\gamma^\mu k_\mu - m) S_u u_\alpha(m, \vec{0}) &= 0, \\ (\gamma^\mu k_\mu + m) S_v v_\alpha(m, \vec{0}) &= 0, \end{aligned}$$

注意到

$$(\gamma^\mu k_\mu - m)(\gamma^\mu k_\mu + m) = (\gamma^\mu k_\mu + m)(\gamma^\mu k_\mu - m) = k^2 - m^2 = 0,$$

有

$$\begin{aligned} S_u &= A(\gamma^\mu k_\mu + m), \\ S_v &= B(\gamma^\mu k_\mu - m), \end{aligned}$$

其中 A, B 为常数, 即

$$\begin{aligned} u_\alpha(k) &= A(\gamma^\mu k_\mu + m) u_\alpha(m, \vec{0}) = A \begin{pmatrix} (E+m)\varphi_\alpha(m, \vec{0}) \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{k} \varphi_\alpha(m, \vec{0}) \end{pmatrix}, \\ v_\alpha(k) &= B(\gamma^\mu k_\mu - m) v_\alpha(m, \vec{0}) = -B \begin{pmatrix} \vec{\sigma} \cdot \vec{k} \varphi_\alpha(m, \vec{0}) \\ (E+m)\varphi_\alpha(m, \vec{0}) \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

其中 φ_α 是 2 分量的旋量 $\varphi_\uparrow(m, \vec{0}) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\varphi_\downarrow(m, \vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 。

为了用正交归一化条件确定常数 A, B , 定义

$$\bar{u}_\alpha = u_\alpha^\dagger \gamma_0, \quad \bar{v}_\alpha = v_\alpha^\dagger \gamma_0,$$

取厄米共轭, 有

$$\begin{aligned} \bar{u}_\alpha(k) &= \bar{u}_\alpha(m, \vec{0})(\not{k} + m)A = A(\varphi_\alpha^T(m, \vec{0})(E+m), \quad -\varphi_\alpha^T(m, \vec{0})\vec{\sigma} \cdot \vec{k}), \\ v_\alpha(k) &= \bar{v}_\alpha(m, \vec{0})(\not{k} - m)B = -B(-\varphi_\alpha^T(m, \vec{0})\vec{\sigma} \cdot \vec{k}, \quad \varphi_\alpha^T(m, \vec{0})(E+m)). \end{aligned}$$

定义正交归一化条件:

$$\begin{aligned} \bar{u}_\alpha(k)u_\beta(k) &= \delta_{\alpha\beta}, \\ \bar{v}_\alpha(k)v_\beta(k) &= -\delta_{\alpha\beta}, \\ \bar{u}_\alpha(k)v_\beta(k) &= 0, \\ \bar{v}_\alpha(k)u_\beta(k) &= 0, \end{aligned}$$

则待定的常数为

$$A = -B = \frac{1}{\sqrt{2m(m+E)}} \text{ .}$$