自　序

记得在给 82 级本科生讲量子力学时，有位学生问我："老师，你为什么不照着书讲？"这真是个很好的问题，因为它反映了对于量子力学的讲授和理解的现状. 大学物理系的学生恐怕都知道这样一句话：学会了用量子力学解题，不一定就学懂了量子力学. 而在老师当中则流传着另一句话：你教你的量子力学，我教我的量子力学，每个人都可以有他自己的量子力学. 当然这句话说得有点过头，不过在实际上关于量子力学讲法的版本也确实太多，而许多对量子力学原理理解上的争论在最后也都是不了了之. 到图书馆里去看看理论物理的教材和参考书，无论是国外还是国内的，都数量子力学的种类多. 比较一下，对于具体问题的讲法，比如角动量、谐振子、氢原子、分波法、Born 近似、微扰论，等等，都各有特色. 而对于基本原理的讲法，也是见仁见智各有千秋.

对基本原理讲法上的差别，在一定程度上体现了作者对基本原理理解的差别. 这种理解上的差别，则在很大程度上取决于作者理性思维的不同模式、风格与偏爱. 从形式上说，量子力学就是提出了一些基本假设，然后进行逻辑推理和数学演绎，最后得到了与实验观测一致的结果. 对许多人来说，推理和演绎的结果与实验观测一致，这就足够了. 对具体问题的解法和其中的技巧更能吸引他们的关注. 可是这并不能使我满足. 这些基本假设的物理基础和提出这些基本假设的想法和方式更能引起我的兴趣. 为什么能够用线性空间的矢量来表示量子态？为什么不用测量值而要用一个算符来表示观测量？为什么观测量的测得值等于算符的本征值？观测量平均值的公式是怎么想出来的？为什么动量算符可以表示成

对坐标的偏微商? 等等,等等.可以告诉我这是需要先验地接受的基本假设,可以告诉我所有的实验测量都证实了这些基本假设,可以告诉我这个理论的逻辑体系是多么严密和完美,等等,等等,可是我仍然有这些问题.

感谢王竹溪先生,我和徐至展跟他做研究生时,他让我们花了一年的时间研读 Dirac 的《量子力学原理》.在这一年里,他每个星期花一个下午解答和讨论我们的问题.一个星期里,我把一个一个的问题写成小纸条夹在 Dirac 的书里.在那一个下午,我又把那些纸条一个一个地从书里抽去.特别是,“Dirac 的书完全是讲物理,不是讲数学”,先生一语点破我的谜团,给了我读懂 Dirac 的书的钥匙.我终于从 Dirac 的书里,从先生那里,找到了问题的答案,获得了满足.

我在本科三年级已经学过一遍量子力学,在这以后的课程几乎都在用量子力学,到五、六年级又学了高等量子力学、量子场论和量子场论中的泛函分析这三门课.研究生的入学考试科目就有高等量子力学和量子场论.到了研究生一年级又要我念量子力学,刚开始我真不理解.一年下来,我才懂得了它对我的意义,感觉到对量子力学的理解爬上了一个新的台阶.只有像先生这样伴随着量子力学的诞生和发展学习量子力学、与 Dirac 为好朋友而把握了量子力学精髓的大物理学家,才能高屋建瓴地给我们做出这个使我终生受益的安排.

在那一年的时间里,我们在先生指导下几乎是逐句逐段地读 Dirac 的书.一次在讨论量子化条件时,先生指出 Dirac 的书只给出了 Descartes 平直坐标中的结果,而先生早年在西南联大讲授量子力学时,曾着力讨论过曲线坐标中的量子化问题.严格地说,只在平直坐标中表述的理论,还不是完整的普遍理论.所以这实在是量子力学中一个极重要的基本问题(见本书第二章 § 2.5,第四章 § 4.5).在 1978 年庐山全国物理学年会上,杨振宁先生在演讲中也提到听先生讲过这个问题,并且说,他当年听课的笔记本是自

已用茅草纸订成的，一直保存着，经常翻阅，获益匪浅. 前些年国内对这个问题热了一阵，我写了篇文章寄给 *American Journal of Physics* 发表，引起国外一些同行的兴趣，因此还结识了苏格兰圣安德鲁斯大学研究量子力学基础的温奇亢先生，而我的兴趣就是来源于 40 多年前先生的这一席议论.

我跟先生做研究生的前一年，在美国通用电器公司获得工程师职位不久的北欧青年 Giaever 业余时间听量子力学课，到公司实验室做实验验证量子力学的隧道效应，发现了超导体的隧道效应. Bardeen 提出了一个解释这种效应的物理模型，芝加哥的 Cohen，Falicov 和 Phillips 把它写成了二次量子化表象的模型 Hamilton 量（见本书第七章 § 7. 3）. 当时正在剑桥做研究生的 Josephson，则用这个模型 Hamilton 量计算二级微扰，写了一篇关于超导体隧道结（现称 Josephson 结）的短文，预言了一个后来以他的名字命名的重要效应，因此与超导体隧道效应的发现者 Giaever 和半导体隧道效应的发现者江崎玲于奈同获 1973 年诺贝尔物理学奖. Caltech 的 Feynman 也紧跟着在他著名的物理学演讲中写出了关于 Josephson 结的 Feynman 方程（本书引进 Dirac 方程的方法，就是模仿 Feynman 的这个做法，见本书第五章 § 5. 2）. 这些开拓固体微结构领域的先驱性工作，是发生在短短两三年中的事. Falicov 后来做 U. C. Berkeley 的系主任，曾开玩笑说："我们本来可以算到二级微扰，诺贝尔奖就是我们的了." Cohen 等人的模型 Hamilton 量确实是理解超导体隧道效应的一个恰当的基础. 当时我想研究一下 Cohen 等人的模型 Hamilton 量的理论基础，以此来写我的研究生毕业论文.

我在研究的期间，看到美国某名校的一位作者发表在 *Physical Review* 上的一篇论文，与我思路相同，声称给出了 Cohen 等人的模型 Hamilton 量的理论基础. 我想完了，这下要另换题目了. 先生听我说完未置可否，只是让我把那篇文章留下，等他看完再说. 这期间我相当沮丧. 再去见先生时，出乎我的预料，先

生并没有让我换题目，而是叫我安心继续研究. 先生告诉我，那篇文章是错的，并且证明给我看. 原来，那篇文章所用的左边态和右边态分别构成完备组，同时用它们做表象的基矢就带来任意性，从而使得整个理论都站不住脚(参考本书第二章 § 2.2). 我这才知道，原来发表在权威刊物上的文章也不一定靠得住，而且甚至还会在量子力学基本理论的把握和运用这样最基础的问题上出错. 我后来在变分法的框架内解决这个问题，用了 Löwdin 和 Боголюбов 先后运用于分子结构和金属理论的正交化变换(见本书第二章 § 2.2)，发现在展开的级数中取到第二项就是 Cohen 等人的模型 Hamilton 量，三次以上的项太小，实验观测不到.

Josephson 的那篇文章我当时看过. 他预言的可观测效应与隧道结两边电子波函数的相位差有关，我觉得很玄，但没有深入想下去. “文化大革命”后期我从汉中来北京出差，顺便去看王竹溪先生. 先生问我：“你做研究生时看 Josephson 的文章，有没有发现什么问题?”听了我的回忆，先生告诉我，杨振宁先生回来看先生时，曾告诉先生，为了弄清这个问题，杨先生曾专门把 Josephson 请到石溪讲了两天. 这时我才恍然领悟，我轻易地放过了一个很深层次的问题(后来在 80 年代中期，杨先生在中国科技大学研究生院作题为《相位与近代物理》的系列演讲，曾专门谈到这个问题，参考本书第五章 § 5.4 中的定域规范变换). 尚可自慰的是，我一直还记得这是一个问题，而这则是得益于王竹溪先生对我的教诲：在学问的研习中会遇到各种问题，我们不可能立即解答其中的每一个，但要弄清哪些是问题，记下存疑，不能稀里糊涂.

量子理论中最玄奥的莫过于测量理论了(见本书第一章 § 1.5). 王竹溪先生曾经对于测量理论作过深入的思考和探索. “文化大革命”后期，先生告诉我，他准备写一本关于量子力学的专著. 我听了十分兴奋，以为又可以从先生的这本书里继续跟先生学习量子力学，跟随着先生的引导来深入探讨这类重大的基本理论问题了. 没有想到，“文革”的折腾不仅消磨了我的青春，更夺去了

先生的生命. 文革期间先生被驱使到江西鲤鱼洲牧牛时不幸染上肝炎,在当时那种气氛下没有给以确诊和及时治疗,以致"文革"结束不久就与世长辞了.(有兴趣的读者请参阅拙文《怀念王竹溪先生》,载于1993年第一期的《物理》杂志,或者《我在北大跟王竹溪先生做学生》,载于萧超然主编的《巍巍上庠,百年星辰——名人与北大》,北京大学出版社1998年出版.)

在量子力学的发现和创建时期以后,很快就进入了它的应用和扩展时期. 量子力学从它的诞生地原子物理扩展到分子物理、固体物理、原子核物理、粒子物理以至于天体和宇宙,并且成为整个化学和一系列高新技术的理论基础. 在这种情况下,物理学家的精力和兴趣自然地集中到数学的技巧、群论的分析以及把量子力学运用于更多更复杂的问题的各种近似方法上. 当然,量子力学的基本物理原理并没有被遗忘,只不过不再是受关注的主体,而是退居到基础的地位. 不过,在高能物理中的经验使我们越来越多地感觉到,也许我们对于支配粒子结构的基本原理还没有完全的了解,或许我们正面临着一个基本观念上的新的飞跃. 跟随着这种感觉,我们回过头来花一些时间和精力温习和总结一下量子力学的基本物理原理,也许是值得的.

1985至1989年期间,我教了几遍本科生的量子力学和研究生的高等量子力学,使我有机会把量子力学的基本原理整理成文. 有几个具体问题,已经写成文章发表在 *American Journal of Physics* 和《大学物理》杂志上,或者写入了我的《近代物理学》教科书中. 本书也是在那时的一部分讲稿的基础上加工发展而成的.

量子力学的经典有四本:关于量子力学的数学结构有 J. von Neumann 的 *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*,关于量子力学的物理原理有 W. Heisenberg 的 *The Physical Principles of the Quantum Theory* 和 P. A. M. Dirac 的 *The Principles of Quantum Mechanics*,此外还有 W. Pauli 的 *Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik*. 这四本书都是把主

要的注意放在量子力学的物理原理上. Heisenberg 的整本书就是专门讨论测不准原理. Pauli 的书一上来就讲测不准原理和并协性,并且用了很大篇幅讨论测量问题.很多人看重 Dirac 的符号体系与数学规则,而其实 Dirac 的书主要也是讲量子力学的物理原理,他设计的符号体系与数学规则正是为了更清楚地表述物理的原理.就连 von Neumann 的书,虽然主题是讨论量子力学的数学基础,也用了大量篇幅讨论测量问题特别是测不准原理.

但是,一般的量子力学教科书主要着眼于尽快教会学生运用量子力学去解决实际问题,大都是采取公理化的讲法,把几条得自物理原理的计算规则作为基本假设告诉学生叫他们记住,这样学生容易上手,很快就能算题.然后再回过头来讲表象理论.但是,这种讲法不可避免地给学生造成一个先入为主的印象,认为量子力学的几条基本假设是某种先验的思辨的结果,而不是微观物理学经验的结晶,以至于有些学生虽然学会了用量子力学的数学规则解题,却没有把握量子力学的物理原理,产生了量子力学是玄学不好懂的看法.所以,要讲量子力学的物理原理,我认为最好还是要从物理上把基本原理讲清楚,不要采取公理化的讲法.

本书的基本内容都可以在 Dirac 的书中找到,或者可以说是按照 Dirac 的方法和方式所作的推演.同时,本书把 Heisenberg 测不准原理真正放到了最基本的*第一原理*的位置.测量是量子力学的一个核心概念,测不准是量子力学的精髓,我不赞成回避测量问题,把**测不准**改成含糊其辞的**不确定**.正像被誉为物理学之良心的 Pauli 所说,量子力学的建立,是以放弃对于物理现象的客观处理,亦即放弃我们惟一地区分观测者与被观测者的能力作为代价的.要想讲清量子力学的物理原理,测量问题是不能含糊和回避的.对于量子力学的理解,我想 Planck 的被戏称为 *Planck 原理*的下面这一段话是恰当的:"一项重要的科学发明创造,很少是通过逐渐争取和转变它的对手而获得成功的,Saul 变成 Paul 是罕见的事.一般的情况是,对手们逐渐故去,成长中的一代人从一开始就熟悉

这种观念.这是未来属于青年的又一实例."(转引自关洪,《物理学史选讲》,高等教育出版社,1994年,19页. Saul 变成 Paul 是圣经典故,见《新约》使徒行传第九章.)

我希望本书有助于读者从物理的角度来思考量子力学,能对那些像我一样对量子力学基本原理感兴趣的读者有所助益.当然,不仅是有许多问题的讲法不同于一般的量子力学教科书,本书有一些内容也是在一般的量子力学教科书中不易找到的,例如广义 Schrödinger 表象,非厄米的 $\hat{H}$,宏观量子力学等.这些内容都与量子力学的基本原理有直接的关系,而且在扩展量子力学的应用领域中起着不可或缺的作用.特别是广义 Schrödinger 表象和宏观量子力学,对于工作在介观物理和固体微结构领域而不熟悉标准的正则量子化程序的读者,我相信是值得参考的.

在本书题材的选择、内容的安排和问题的讲法上,我都是着眼于量子力学的基本原理.我不想涉及过多冗长的数学推演而冲淡对基本物理原理的阐述,希望即使是初学量子力学的读者也能从本书获益,所以略去了许多数学和技巧方面的重要论题或细节.例如对于量子力学的实际运用十分重要的角动量理论和各种近似方法都没有讨论,对于量子力学的 Feynman 路径积分形式只讨论了它的物理原理方面,而略去了在数学上泛函积分的具体技巧和问题.基于同样的考虑,也没有收入训练解题方法和技巧的例题和习题.另一方面,本书选入了一些在一般的量子力学课程中不讲或没有时间讲的问题,例如前面提到的广义坐标表象和 Pauli-Podolsky 量子化规则,宏观量子力学模型,非厄米的 Hamilton 算符模型,以及 Schrödinger 波函数的单值性和关于不能把时间作为算符来处理的 Pauli 定理的证明等.在量子力学基本概念和原理的引入和阐述方面,本书完全采取逻辑和系统的方式,而略去了对于帮助初学者的理解和掌握来说是十分重要和有益的历史发展和背景知识,只是对于测不准原理,在附录中介绍了 Heisenberg 提出它的经过.此外,本书不是一部研究性质的专著,所以没有开

列详细的参考文献，只是按照同类书籍的惯例，在少数地方注明了出处.

受过理论物理科班训练的人，我相信大多数都和我一样，已经养成了一种习惯，在认真看一本书时，总要拿一支笔和一些草稿纸，跟着书上的公式推演一步一步算下去. 要是能够不看书独立地把结果推出来，或者把书上省略了的步骤补上，那心中就油然生出一种成就感来，有说不出的喜悦. 这样看书，我觉得有时也可以算是一种享受. 再详细的书也会有许多省略，不可能把推演的每一步都写出来，否则这本书的厚度就要成倍地增加了. 我在本科六年级时听胡宁先生的广义相对论，胡先生为我们选的课本是 Landau 的《经典场论》，苏肇冰先生给我们辅导. Landau 是思维敏捷的大物理学家，在他的书上省略就更多. 我至今还记得，对于静止球对称场的 Christoffel 记号，他只是说了一句很容易从某某公式算出，就把结果写出来了. 而他的这个"很容易"，让我花了半天多的时间. 用这种方式读完一本理论物理的书，无形中已经做了许多道练习题. 我和徐至展跟王竹溪先生念量子力学时，曾经问先生要不要做一些习题，先生说用不着，把书看懂了就行. 而这个"看懂"，已经意味着要做许多道无形的练习题了. 所以，我在写本书时，原来是想仿照 Dirac 的书，不准备出练习题的. 还是本书的编辑提醒了我，也许会有老师选本书做教材，最好还是出一些练习题，以适合大多数读者和用者的需要. 这使我改变了初衷. 现在在书末给出的练习题，大都是本书正文中省略的部分. 难易不齐，仅供各位读者参考.

广义地说，本书的成书过程可以追溯到我的学生时代，得到过许多老师、朋友和学生的帮助. 除了王竹溪先生外，我还要感谢我的量子力学启蒙老师孙洪洲先生和指导我做大学本科毕业论文的胡慧玲先生，以及在做这篇论文时指点过我的胡宁先生与杨立铭先生. 我大学本科毕业论文的题目是关于矩阵力学的建立，我就是从这篇论文开始进入量子力学领域的. 我曾经跟曾谨言先生做过

一段时间的助教，得到不少指点和帮助. 我与杨泽森先生和关洪先生有过许多关于量子力学的富有启发性的讨论. 从与胡济民先生关于量子力学的合作和许多讨论中，我得到过很多启发和帮助. 高崇寿先生、杨泽森先生、曾谨言先生、关洪先生和喀兴林先生先后送给我的他们的著作，在我写这本书的过程中都是反复翻阅和参考的. 我要特别感谢技术物理系听过我的量子力学课的学生，和技术物理系与物理系听过我的高等量子力学课的研究生，他们的提问和各种反馈给我的信息，对我的帮助是具体而实际的. 最后，我要感谢高崇寿先生与林纯镇先生对本书书稿的审阅和推荐. 还有许多老师和朋友的帮助，请原谅我不可能在这里一一提到.

人生有限，学海无边. 错误或不妥之处，望识者不吝指正.

2003 年春作者自序于北京大学燕北园

目　　录

引　言

量子力学的概念和图像源自微观物理经验　近代科学与古代玄学在观念上的主要分野，在于如何判断一个理论的是非正误．近代科学是把经验，具体地说是把观测和实验的事实，作为判断是非正误的最终标准，而不是把某个权威先贤的话语或某种先验的观念作为判断是非正误的最终标准．这是从 Francis Bacon 与 Galileo Galilei 开始的近代科学的传统观念，也是量子力学的基本观念．基于这种观念，*量子力学在本质上是以观测和实验为基础的实验科学，量子力学的概念和图像，都是在微观物理经验的基础上建立起来的．*

经典物理的经验局限于宏观领域，与我们日常生活经验的领域一致，所以经典物理的概念和图像往往与我们日常生活经验的概念和图像一致，容易理解和接受．量子力学不同，它的经验属于微观领域，与我们日常生活经验的领域不一样．微观物理的经验往往与我们日常生活的经验不一致，从微观物理经验得出的概念和图像往往与从我们日常生活经验得出的概念和图像完全不同．在这种情况下，随时准备用观测和实验的事实来修正我们的观念，而不是先验和不加批判地坚持我们从经典物理或日常生活经验得来的观念，就成为理解量子力学概念和图像的关键．

在 20 世纪初发生的三次基本物理观念上的革命，其结果是狭义相对论、广义相对论和量子力学的建立，它们深刻地改变了我们

对物理世界的理解①. 而在这三者之中改变最大理解最难的，当首推量子力学. 量子力学是物理学研究的经验扩充到微观领域的结果，它修改了物理学中关于物理世界的描述以及物理规律的陈述的基本观念，影响尤其深远.

微观现象的基本特征是波粒二象性 19 世纪末，相继发现天然放射性、X 射线和阴极射线，物理学研究深入到原子结构的微观物理世界. 探索微观世界所积累的物理经验逐渐表明，微观现象的基本特征是*波粒二象性*. 光的干涉、衍射和偏振，表明光是一种波动，用波长、频率和偏振方向来描述，满足电磁场的波动方程. 而黑体辐射、光电效应、Compton 散射以及正负电子偶的产生和消灭，又表明光是一种粒子，用能量和动量来描述，满足能量动量守恒. 阴极射线中的电子在磁场中偏转，在荧光屏上产生光点，表明电子是一种粒子，具有电荷和质量，用能量和动量来描述，满足能量动量守恒. 而另一方面，电子在晶体上的衍射和通过狭缝的干涉，又表明电子是一种波动，可以用波长来描述，满足 Schrödinger 波动方程. *微观现象一方面表现出波动性，另一方面表现出粒子性，同时具有波动和粒子的特征，而描述这种波动性的波函数满足波的叠加原理.*

波函数的统计诠释改变了物理学的基本观念 对于波粒二象性所包含的物理，Max Born 于 1926 年提出了*波函数的统计诠释*，*认为描述微观现象波动性的波函数只是用来计算对微观粒子测量结果出现概率的数学工具，不具有实在的物理含义*. 这就在两个方面改变了物理学的基本观念：一是关于物理世界的描述方式，即物理图像问题；另一个是关于物理规律的表达形式，即因果关系问题.

对宏观物理现象，例如海鸥在天空的飞翔，可以用时空中的轨迹来描述，有一幅直观而且实在的物理图像. 微观物理现象不同，

① 杨振宁，《杨振宁演讲集》，宁平治等主编，南开大学出版社，天津，1989 年，366 页.

虽然可以形象地描述两束电子波的干涉,或者氢原子中的电子云分布,但这是概率波而不是物理实在的干涉或分布.在照相底片的乳胶或云室中探测到的电子是实在的,但却不能在时空中追踪它的运动.量子力学不再能在时空中描绘一幅既直观形象而又具有物理实在的图像.

在宏观物理中,原因与结果之间一定可以找到明确肯定的联系.天王星轨道意外的摄动一定对应某种原因.这种观念直接导致了海王星的发现,这种关于在原因与结果之间有决定性联系的因果观念被称为 Laplace 决定论的因果关系.微观物理则不同.在电子束的双缝衍射中,不可能预言电子将肯定落到屏幕上哪一点.它落到屏幕上任何一点都是可能的,只能预言它落到屏幕上每一点的概率有多大.在钴 60 的 β 衰变中,不可能预言钴核将肯定在什么时刻放出电子.它在任何时刻都可能衰变,只能预言它在某一时刻衰变的概率有多大.量子力学表达的物理规律是统计性的,在原因与结果之间不再能给出明确肯定的联系,对一定的物理条件,它只能预言可以测到哪些结果,以及测到每一种可能结果的概率是多少.

微观现象的波粒二象性根源于微观现象的测不准 相对论基本概念的经验基础,是我们传递信息的速度存在一个上限.这就要求我们准确定义"同时"的概念,从而导致时间与长度都是相对的,依赖于观测者的参考系,而只有由它们联合构成的四维时空的不变长度才具有绝对的含义.类似地,量子力学基本概念的经验基础,则是微观现象的测不准.一般说来,任何一个测定某些物理量的实验,同时也就会改变以前所获得的另一些物理量的知识.即使定量地追溯这种影响,我们仍会发现,在很多情况下,同时测量两个不同物理量总是存在一个不能再提高的精度下限.我们可以把同时测量两个不同物理量有一个精度下限,假设为一条自然定律,并以此作为建立量子力学理论的一个基本出发点.具体地说,在原则上,微观系统的正则坐标与其正则共轭动量是不能同时测准的,存在一个精度的下限,这就是 Werner Heisenberg 的测不准原理,

它是微观量子性的根源,是波函数的统计诠释的物理基础.

作为理论的一个基本出发点,这种测量精度的下限不是来自实验和技术方面的限制,而是由理论本身在原则上决定的.这种测不准的大小由约化 Planck 常数 $\hbar$ 来表征.只有当物理过程的作用量 S 比约化 Planck 常数 $\hbar$ 大得多时,这种测不准才能近似忽略,由这种测不准所引起的量子效应才不明显,而能使用轨道的描述和 Laplace 决定论的因果关系.当所涉及的物理过程其作用量可与约化 Planck 常数相比时,微观现象的波粒二象性就很明显,而要代之以波函数的描述和统计性的因果关系.量子力学在关于微观世界的物理图像和微观规律的因果关系方面给物理学基本观念带来的巨大改变,究其物理基础,根源于微观现象的测不准.

量子力学的基本特点 以这种基本观念为基础的量子力学,是围绕观测量及其测量的概率这一核心问题而展开的.既然微观系统的正则坐标与其正则共轭动量不能同时测准,观测结果表现为统计的分布,量子力学就必然要采取统计性的描述.量子力学的基本原理和定律,既包含关于如何确定观测量的测得值的原理,也包含关于如何确定测得某一结果的概率的原理,即波函数的统计诠释,以及确定这种概率的波函数随时间变化的动力学规律,即确定波函数的 Schrödinger 方程.量子力学的基本方程不再是联系观测量的关系,而只是关于计算系统测量概率的波函数的规律.由于这种特点,使得量子力学在以下三个方面不同于所有其他物理学理论.

首先,测量的概念在量子力学的整个理论体系中具有核心的地位,而不像在其他物理学理论中测量的概念只是隐含在具体物理量的定义之中.态的叠加原理、波函数的统计诠释和 Heisenberg 测不准原理这三条量子力学的基本原理,都是直接与测量有关的. Schrödinger 方程作为量子力学的动力学方程,在量子力学中处于中心地位,而这个方程所给出的,恰恰是关于确定测量结果的概率的波函数随时间变化的规律.

其次，量子力学给出的只是一套计算观测量的测量概率的规则，而不像其他物理学理论那样给出观测量测量值之间的定量关系. 量子力学与其他物理学理论的这种差别，正是统计性因果关系不同于拉普拉斯决定论因果关系的反映. 在量子力学中，什么量是物理观测量，一个物理观测量具有哪些可能的测得值，都需要专门进行讨论，而不像其他物理学理论那样是自明的.

最后，量子力学明显地包含了主观的因素，而不像其他物理学理论那样看起来是完全客观的. 量子力学的主观因素，表现在进行测量时观测者的介入. 何时进行测量以及测量什么观测量，这都是由观测者主观决定的. 而由于有测不准，测量的操作会使系统的运动状态发生不可控制的改变，使得测量后系统的运动状态依赖于测量过程. 所以，量子力学系统的运动状态并不完全独立于观测者，我们对一个量子力学系统的描述并不是完全客观的. 而在其他物理学理论中，总是隐含地假设在原则上可以同时测准所有的物理观测量而不干扰和破坏系统的运动状态，我们可以对这个系统作出完全客观的描述.

这里区分了两种不同的过程：一种是作为研究对象的客体在不受研究者干扰时的运动，这时波函数的变化遵从 Schrödinger 方程；另一种是作为研究主体的观测者对于观测对象的测量过程，这时波函数的变化过程被称之为“波包的缩编”，根据波函数统计诠释的规则来计算. 波函数在哪一段过程中由 Schrödinger 方程来确定，从什么时候开始发生波包的缩编，以及缩编到什么本征态，这都取决于实验者的安排和选择. 这就造成了量子力学中区分主观与客观的困难或任意性. 量子力学的这种困难或任意性，同样也是测不准原理这一物理原理的反映，只要有波函数的统计诠释，波包的缩编就不可避免.

其实，把其他物理学理论看成是完全客观的，这本身就是一种误解. 一个理论，作为一种观念形态，不可避免地含有主观的成分. 在 1926 年的一次讨论会上，当 Heisenberg 向 Einstein 表示“一个

完善的理论必须以直接可观测量作依据"时，Einstein 向他指出："在原则上，试图单靠可观测量去建立理论那是完全错误的. 实际上正好相反，是理论决定我们能够观测到什么东西". Einstein 的这段话，从一方面说明了物理学理论与物理学实验观测之间的关系，同时也隐约地说出了理论家在根据观测和实验事实来建立理论时所能起的作用. 物理学家的理性思维模式、风格与偏爱，会影响到所建立的理论的表述. 同样是对于测不准，W. Heisenberg 说 uncertainty，D. Bohm 说 indeterminacy，这种个体的差别，倒是真正客观和无法避免的.

量子力学的进一步发展依赖于全新的物理经验 将近 80 年以来量子力学所取得的成就毋庸多说. 但是，我们能不能把量子力学看成一门已经完成了的物理学?从宏观物理到微观物理世界，在空间和时间的尺度上都减小了 5～6 个数量级以上. 这反映在物理学理论上，则是发生了从经典物理学到量子力学的巨大改变. 当代物理学研究的领域，在大的方面进入了研究从天体到宇宙的*宇观世界*，在小的方面则进入了从亚原子到亚核的*超微观世界*. 在这两个方面，尺度的变化都相当于甚至超过了从宏观世界到微观世界的数量级，这已经并将继续带给我们全新的物理经验. 迄今为止，这些新的物理经验仍然可以纳入量子力学的框架之中. 特别是，*量子力学仍然是我们用来分析和综合这些物理经验的最基本的物理理论*. 这种情况使我们十分庆幸，不过也感到有些惊讶. 当然，我们还没有关于物理学发展的系统和成熟的理论，我们还不能对量子力学的前景进行具有足够可信度的预言. 我们实在是不知道量子力学的这种情形能够继续多久，量子力学的适用范围还能再走多远. 不过可以肯定的是，*修改量子力学的某些观念和图像的任何要求，都必须来自全新的物理经验，而不是某种先验的思辩*. "没有实验物理学家，理论物理学家就要漂浮不定. "①

① 李政道，《对称，不对称和粒子世界》，朱允伦译，北京大学出版社，1992 年，45 页.

第一章　基本原理

§1.1　态的叠加原理

1. 量子态的描述

我们可以从一些具体的实验现象综合概括出量子态的概念.请看下面的例子：

- 阴极射线管中的电子,有一定的动量 $\boldsymbol{p}$,其态可记为 $|\boldsymbol{p}\rangle$.
- 加速器中的质子,有一定的动量 $\boldsymbol{p}$,其态可记为 $|\boldsymbol{p}\rangle$.
- 打到荧光屏上 $\boldsymbol{r}$ 处的电子,有一定的坐标 $\boldsymbol{r}$,其态可记为 $|\boldsymbol{r}\rangle$.
- Stern-Gerlach 实验中分裂的银原子束,有一定的动量 $\boldsymbol{p}$ 和自旋角动量投影 S_z,其态可记为 $|\boldsymbol{p},S_z\rangle$.
- 氢原子中处于定态的电子,有一定的能量 E,角动量 l,角动量投影 l_z 和自旋角动量投影 s_z,其态可记为 $|E,l,l_z,s_z\rangle$.

一个量子态,是可以由某种实验测量完全确定的系统的运动状态,它可以用一些观测量的测得值来确定和标志.

Dirac 符号规则 1　*用右半尖括号"$|\quad\rangle$"表示一个量子态,其中用一些字母或数值指明其特征.如 $|q\rangle$,$|\boldsymbol{p}\rangle$,$|\boldsymbol{r}\rangle$,$|\psi\rangle$,….*

2. 态的叠加

态的叠加的概念,也是从具体实验现象中综合概括出来的.我们来看下面的几个例子.

电子双缝实验　在双缝后的干涉区域,既可测到来自缝 1 的

态 $|\psi_1\rangle$，也可测到来自缝 2 的态 $|\psi_2\rangle$，而电子在此区域的态 $|\psi\rangle$ 是这两个态的叠加，可以写成

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle.$$

Rutherford 散射实验　可以测到在各个方向散射的 α 粒子，出射态是各个方向的散射态 $|\boldsymbol{p}\rangle$ 的叠加，可以写成

$$|\psi_{\text{out}}\rangle = \int |\boldsymbol{p}\rangle \mathrm{d}\boldsymbol{p}.$$

偏振光实验　对于偏振方向在 xy 平面某一方向的偏振光态 $|P\rangle$，用一偏振片来测量，一般来说，既可测得在 x 轴方向偏振的态 $|P_x\rangle$，也可测得在 y 轴方向偏振的态 $|P_y\rangle$，偏振态 $|P\rangle$ 是这两个态的叠加，可以写成

$$|P\rangle = |P_x\rangle + |P_y\rangle.$$

极化原子束的 Stern-Gerlach 实验　用自旋投影取某一方向的银原子束射入不均匀磁场，设入射前的自旋态为 $|S\rangle$，其自旋与磁场梯度方向成一角度. 出射束一般会分成自旋向上和自旋向下的两束，所以自旋态是这两个态的叠加，可以写成

$$|S\rangle = |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle.$$

态的叠加　我们可以把态的叠加定义为：*已知物理系统的两个态 $|A\rangle$ 和 $|B\rangle$，如果存在系统的这样一个态 $|R\rangle$，使得在它上面的测量，有一定概率测得 $|A\rangle$ 的结果，有一定概率测得 $|B\rangle$ 的结果，除此之外没有其他别的结果，则称 $|R\rangle$ 为 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$ 的叠加*，记为

$$|R\rangle = |A\rangle + |B\rangle.$$

在上面的例子中我们已经用到这个定义. 由这个定义可得两个推论：

推论 1　*一个态与它自己叠加的结果，仍是原来的态.*

推论 2　*若在态 $|R\rangle$ 上还有在态 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$ 上测量不到的结果，则态 $|R\rangle$ 不能只由态 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$ 叠加而成，一定还有其他别的成分 $|C\rangle$，*

$$|R\rangle = |A\rangle + |B\rangle + |C\rangle.$$

根据以上定义和推论，我们可以进一步定义 0 态，以及态的数乘和加法：

0 态是不含任何物理信息的态，系统的任一态与 0 态叠加的结果，还是它自己. $|A\rangle+0=|A\rangle$.

复数 c 与量子态 $|A\rangle$ 的数乘 $c|A\rangle$ 仍为一个量子态，满足以下运算规则：

① 结合律 $c_1(c_2|A\rangle)=(c_1c_2)|A\rangle=c_1c_2|A\rangle$.

② 分配律 $(c_1+c_2)|A\rangle=c_1|A\rangle+c_2|A\rangle$.

量子态 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$ 的相加 $|A\rangle+|B\rangle$，仍为一个量子态，满足以下运算规则：

① 交换律 $|A\rangle+|B\rangle=|B\rangle+|A\rangle$.

② 结合律 $|A\rangle+(|B\rangle+|C\rangle)=(|A\rangle+|B\rangle)+|C\rangle$.

③ 分配律 $c(|A\rangle+|B\rangle)=c|A\rangle+c|B\rangle$.

可以把态的数乘看成是态的叠加的一种推广，而 $c\neq0$ 时 $c|A\rangle$ 与 $|A\rangle$ 表示物理系统的同一量子态. 不难看出，前面定义的态的叠加满足上述加法规则.

3. 态的叠加原理

原理的表述 若态 $|A\rangle$ 与态 $|B\rangle$ 是系统的可能态，则它们的叠加态

$$|R\rangle=c_1|A\rangle+c_2|B\rangle$$

也是系统的可能态，而且，在不受外界干扰的情况下，它们的这种叠加关系保持不变.

这是一个普遍的**物理原理**. 它说，如果系统有两个态 $|A\rangle$ 和 $|B\rangle$，则**在物理上一定还存在**这样的态 $|R\rangle$，在它上面的测量，以一定概率得 $|A\rangle$ 的结果，一定概率得 $|B\rangle$ 的结果，此外没有别的结果，并且这种关系（测得的结果和相应的概率）不随时间而改变. 由此可得两个推论：

① 若 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$ 是系统的同一个态，则它们是相关的，即有

$$c_1|A\rangle + c_2|B\rangle = 0,$$

其中 c_1 和 c_2 都不为 0；反之，若 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$ 是系统不同的两个态，则它们是不相关的，即不可能有上述关系，除非 $c_1=c_2=0$.

② 若 $\{l_n\}=(l_1,l_2,\cdots)$ 是观测量 L 的所有可能测得值的集合，$|l_n\rangle$ 是测得值为 l_n 的态，则系统的任一可测 L 的态 $|\psi\rangle$ 都可写成

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |l_n\rangle.$$

可以看出，态的叠加原理的数学含义是：系统所有可能态的集合，对于上面定义的数乘和加法运算，构成一个**线性空间**. 在这个意义上，量子态 $|\quad\rangle$ 又称为**态矢量**. 必须指出，态的叠加原理是对大量实验现象的综合与归纳，它的正确性，亦即它的这种数学含义的适用性，要由实验来判定.

§1.2　波函数的统计诠释

1. 左矢量与右矢量，内积空间

Dirac 符号规则 2　*可以等价地用左半尖括号"$\langle\quad|$"来表示一个量子态，并与 $|\quad\rangle$ 一一对应，如*

$$\langle A| \leftrightarrow |A\rangle,\quad \langle B| \leftrightarrow |B\rangle,\quad \cdots.$$

共轭对偶空间　设集合 $\{\langle A|\}$ 与 $\{|A\rangle\}$ 中的元素一一对应，有

① $\langle A| \leftrightarrow |A\rangle$,

② $\langle A| + \langle B| \leftrightarrow |A\rangle + |B\rangle$,

③ $c^*\langle A| \leftrightarrow c|A\rangle$,

则，如果 $\{|A\rangle\}$ 构成线性空间，那么 $\{\langle A|\}$ 也构成线性空间. 称 $\{\langle A|\}$ 与 $\{|A\rangle\}$ 互为**共轭对偶空间**，共轭空间，或对偶空间. 称 $\langle\quad|$ 为**左矢量**，$|\quad\rangle$ 为**右矢量**. ③中的 c^* 是 c 的复数共轭.

对于任意二矢量 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$，若能定义一个**复数** $\langle B|A\rangle$，使它对于 $|A\rangle$ 是线性的，对于 $|B\rangle$ 是反线性的，亦即

① $\langle B|(|A\rangle + |A'\rangle) = \langle B|A\rangle + \langle B|A'\rangle$, ② $\langle B|(c|A\rangle)=c\langle B|A\rangle$,

③ $(\langle B|+\langle B'|)|A\rangle=\langle B|A\rangle+\langle B'|A\rangle$,

④ $(c\langle B|)|A\rangle=c\langle B|A\rangle$,

则称$\langle B|A\rangle$为它们的内积,或标量积.

这种定义了复内积的空间称为内积空间,酉空间或复欧氏空间.通常定义的内积,除上述性质外,还满足

⑤ $\langle B|A\rangle=\overline{\langle A|B\rangle}\equiv\langle A|B\rangle^*$, $\bar{c}\equiv c^*$,

⑥ $\langle A|A\rangle\geqslant 0$,等号仅当$|A\rangle=0$时成立.

Dirac 符号规则 3 不完整的尖括号$|\quad\rangle$与$\langle\quad|$表示态矢量,完整的尖括号$\langle\quad|\quad\rangle$表示复数.

若$\langle B|A\rangle=0$,则称$|A\rangle$与$|B\rangle$互相正交,记为$|B\rangle\perp|A\rangle$.

矢量与它自己内积的平方根,称为矢量的长度或模,记为

$$\||A\rangle\| = \sqrt{\langle A|A\rangle}.$$

由于$c|A\rangle$与$|A\rangle$表示同一量子态,所以,只是态矢量的方向有物理意义,而态矢量的长度没有物理意义.通常总是选择适当的常数因子,使态矢量归一化,

$$\langle A|A\rangle = 1.$$

归一化还不能完全确定一个态矢量,仍有一个模为1的因子$e^{i\gamma}$的任意性,γ为实数,称为相因子.

若$|q\rangle$是归一化矢量,则$\langle q|\psi\rangle$称为矢量$|\psi\rangle$在$|q\rangle$方向的投影.

2. 波函数及其统计诠释

波函数 态矢量$|\psi\rangle$在某一方向$|q\rangle$的投影$\langle q|\psi\rangle$,称为态在该方向的波函数,记为$\psi(q)$,

$$\psi(q) = \langle q|\psi\rangle.$$

例如:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle, \quad \psi(\boldsymbol{p}) = \langle \boldsymbol{p}|\psi\rangle.$$

统计诠释 在量子态$|\psi\rangle$上测得$|q\rangle$的概率$W(q)$正比于波函数$\psi(q)$的模的平方,

$$W(q) \propto |\psi(q)|^2 = |\langle q|\psi\rangle|^2.$$

所以,波函数 $\psi(q)$ 又称为**概率振幅**或**概率幅**.

例: Malus 定律 设线性偏振光的偏振方向 $\boldsymbol{P}$ 在 xy 平面内,与 x 轴的夹角为 θ,则测得在 x 轴方向偏振的光强正比于 $\cos^2\theta$,这里 $\cos\theta$ 是 $\boldsymbol{P}$ 在 x 轴方向的投影.

在数学上,波函数的统计诠释为态矢量的内积提供了一种物理的定义. 与态的叠加原理一样,波函数的统计诠释也是对实验现象的综合与归纳,其正确性,亦即它的这种数学含义的适用性,同样要由实验来判定.

§1.3 Heisenberg 测不准原理

1. 观测量的本征态

我们先看几个例子.

- 银原子自旋角动量投影 S_z 的测得值: $\frac{1}{2}\hbar, -\frac{1}{2}\hbar$.
- H_2 分子振动能级的测得值: $\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, n=0,1,2,\cdots$.
- Compton 散射 γ 光子动量 $\boldsymbol{p}$ 的测得值: 在某一范围连续分布.
- 双缝干涉实验中电子在屏上坐标 $\boldsymbol{r}$ 的观测值: 在屏上连续分布.

本征值和本征值谱 一个物理观测量的测得值称为它的**本征值**,全体本征值的集合称为它的**本征值谱**. 由这个定义可知,观测量的本征值都是实数,因为任何观测值都是实数.

不同的物理观测量,其本征值谱不同,可以分为**离散谱**,**连续谱**和**混合谱**.

- 离散谱: 观测量 L,本征值谱 $\{l_n\}$, $n=1,2,3,\cdots$.
- 连续谱: 观测量 Q,本征值谱 $\{q\}$, $q\in\boldsymbol{R}$.

● 混合谱：观测量 G，本征值谱 $\{g_s, g\}$，$s=1,2,3,\cdots$，$g \in \mathbf{R}$.

某一观测量 Q 具有确定本征值 q 的量子态 $|q\rangle$，称为它的*本征态*. 某两个观测量 Q 与 P 同时都具有确定本征值 q 与 p 的量子态 $|qp\rangle$，称为它们的*共同本征态*. 据此定义，在本征态 $|q\rangle$ 上测量 Q，测得值必是 q. 在共同本征态 $|qp\rangle$ 上测量 Q 与 P，能同时测准，分别测得 q 与 p.

观测量 Q 具有确定值 q 的量子态 $|qp\rangle$ 可以有许多个，对应于不同的本征值 p. 一般地说，若与某一本征值相应的本征态不止一个，我们就说这个本征值的态是*简并的*，而与此本征值相应的本征态的个数，则称为它的*简并度*.

以上基本实验事实，是我们讨论的出发点. 为了简明起见，我们只讨论离散谱的情形，但不难推广到连续谱和混合谱. 我们还假设本征态不简并. 对于有简并的情形，可以找到另外的独立观测量来把简并消除，这只增加麻烦，而不构成原则上的问题.

一个观测量的全体本征态的集合称为它的*本征态组*. 本征态组具有以下两个重要的性质.

正交归一性 设观测量 L 的本征值谱为 $\{l_n\}=(l_1, l_2, \cdots)$，相应的本征态组为 $\{|l_n\rangle\}=(|l_1\rangle, |l_2\rangle, \cdots)$. 根据本征态的上述定义，如果 $n \neq m$，则在态 $|l_m\rangle$ 上测不到态 $|l_n\rangle$. 于是，由波函数的统计诠释，有 $\langle l_n | l_m\rangle = 0$，选择归一化的本征态，就有正交归一化关系

$$\langle l_n | l_m\rangle = \delta_{nm}, \tag{1}$$

其中 δ_{nm} 是 Kronecker 符号，

$$\delta_{nm} = \begin{cases} 1, & n = m, \\ 0, & n \neq m. \end{cases}$$

(1)就是观测量本征态的*正交归一性*，它是从本征态的物理定义和波函数的统计诠释推出的一个对于本征态矢量的普遍要求和结论.

完备性 上节已经指出，任意可观测 L 的物理态 $|\psi\rangle$，根据态的叠加原理，可以写成本征态组 $\{|l_n\rangle\}$ 的展开式

$$|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |l_n\rangle, \tag{2}$$

这称为本征态组$\{|l_n\rangle\}$的完备性. 其中的展开系数ψ_n相当于态矢量$|\psi\rangle$在坐标轴$|l_n\rangle$上的坐标.

算$|\psi\rangle$与$|l_n\rangle$的内积,利用$|l_n\rangle$的正交归一性(1),就得到展开系数ψ_n的公式

$$\langle l_n|\psi\rangle = \sum_m \psi_m \langle l_n|l_m\rangle = \sum_m \psi_m \delta_{nm} = \psi_n.$$

把上式代回(2)式,有

$$|\psi\rangle = \sum_n |l_n\rangle\psi_n = \sum_n |l_n\rangle\langle l_n|\psi\rangle.$$

由于$|\psi\rangle$是任意态矢量,所以上式表示

$$\sum_n |l_n\rangle\langle l_n| = 1, \tag{3}$$

这就是本征态矢量组$\{|l_n\rangle\}$的完备性公式,它在由$\{|l_n\rangle\}$张成的线性空间成立. 其中的$|l_n\rangle\langle l_n|$是把态矢量$|\psi\rangle$投影到$|l_n\rangle$方向的投影算符. (3)式的几何含义是,任一态矢量在空间所有方向的分量的和应等于它自己.

一般地, $|A\rangle\langle B|$是一个算符,它按下述方式从左边作用于右矢量,从右边作用于左矢量:

$$(|A\rangle\langle B|)|P\rangle \equiv |A\rangle\langle B|P\rangle, \quad \langle P|(|A\rangle\langle B|) \equiv \langle P|A\rangle\langle B|.$$

Dirac 符号规则 4 *左矢量和右矢量能按各种方式相乘,所得结果可能是复数,矢量或算符,乘法有分配律和结合律,但一般没有交换律.*

2. 观测量的算符和本征值方程

根据本征态组$\{|l_n\rangle\}$的定义和波函数的统计诠释,在态$|\psi\rangle$上测量L多次所得平均值$\langle L\rangle$的计算公式为

$$\langle L\rangle = \sum_n l_n |\langle l_n|\psi\rangle|^2 = \sum_n \langle\psi|l_n\rangle l_n \langle l_n|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{L}|\psi\rangle, \tag{4}$$

其中$|\psi\rangle$是归一化态矢量, $\hat{L}$是下述线性算符

$$\hat{L} \equiv \sum_n |l_n\rangle l_n \langle l_n|. \tag{5}$$

算符 $\hat{L}$ 可以从左边作用于右矢量 $|\psi\rangle$，得到一个新的右矢量 $|\varphi\rangle$，或从右边作用于左矢量 $\langle\psi|$，得到一个新的左矢量 $\langle\chi|$，

$$\hat{L}|\psi\rangle = \left(\sum_n |l_n\rangle l_n \langle l_n|\right)|\psi\rangle = \sum_m |l_n\rangle l_n \langle l_n|\psi\rangle = |\varphi\rangle,$$

$$\langle\psi|\hat{L} = \langle\psi|\left(\sum_n |l_n\rangle l_n \langle l_n|\right) = \sum_n \langle\psi|l_n\rangle l_n \langle l_n| = \langle\chi|.$$

这里的一个算符，既作用于右矢量空间，也作用于共轭的左矢量空间．在这个意义上，它能把这互为共轭对偶的两个空间联系起来．

Dirac 符号规则 5　*算符总是从左边作用于右矢量，得到一个新的右矢量，或从右边作用于左矢量，得到一个新的左矢量．*

可以证明，上述定义(5)引入的算符 $\hat{L}$ 是线性厄米算符．下面先分别给出线性算符和厄米算符的定义和重要性质．

满足以下性质的算符 $\hat{L}(\hat{F},\hat{G})$，称为线性算符：

① $\hat{L}(|A\rangle+|B\rangle)=\hat{L}|A\rangle+\hat{L}|B\rangle$.

② $\hat{L}(c|A\rangle)=c\hat{L}|A\rangle$.

③ 乘法有分配律　$(\hat{F}+\hat{G})|A\rangle=\hat{F}|A\rangle+\hat{G}|A\rangle$.

④ 乘法有结合律　$\hat{F}(\hat{G}|A\rangle)=(\hat{F}\hat{G})|A\rangle$.

⑤ 乘法一般无交换律，对易子 $[\hat{F},\hat{G}]\equiv\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F}$ 一般不为 0.

我们现在来定义一个算符的**共轭算符**．若对任意态矢量 $|P\rangle$，都有

$$\langle P|\hat{L} \leftrightarrow \bar{\hat{L}}|P\rangle,$$

则称算符 $\bar{\hat{L}}$ 是 $\hat{L}$ 的共轭算符，同样，称算符 $\hat{L}$ 是 $\bar{\hat{L}}$ 的共轭算符，或称 $\hat{L}$ 与 $\bar{\hat{L}}$ 互为共轭算符，其中 $|P\rangle$ 与 $\langle P|$ 分别属于互相对偶的矢量空间．

$\bar{\hat{L}}$ 又记为 $\hat{L}^\dagger$，

$$\hat{L}^\dagger \equiv \bar{\hat{L}}.$$

一个算符的共轭算符又称为它的伴算符，求一个算符的共轭算符，又称为求它的共轭．

根据共轭算符的定义，可以证明以下重要性质：

① $(\hat{L}^\dagger)^\dagger=\hat{L}$，或 $\bar{\bar{\hat{L}}}=\hat{L}$.

② 对于任意的 $|B\rangle$ 与 $|P\rangle$，有 $\langle B|\hat{L}^\dagger|P\rangle=\overline{\langle P|\hat{L}|B\rangle}$.

③ $\overline{|A\rangle\langle B|}=|B\rangle\langle A|$.

④ $\overline{\hat{F}\hat{G}}=\bar{\hat{G}}\bar{\hat{F}}$.

例如，令 $|A\rangle=\hat{L}^\dagger|P\rangle$，则由 $\langle B|A\rangle=\overline{\langle A|B\rangle}$，即有②.

令 $\hat{L}=|A\rangle\langle B|$，则由

$$\langle\phi|\hat{L}^\dagger|\psi\rangle=\overline{\langle\psi|\hat{L}|\phi\rangle},$$

有

$$\langle\phi|\hat{L}^\dagger|\psi\rangle=\overline{\langle\psi|A\rangle\langle B|\phi\rangle}=\langle\phi|B\rangle\langle A|\psi\rangle,$$

而 $|\phi\rangle$，$|\psi\rangle$ 为任意矢量，故上式给出

$$\hat{L}^\dagger=|B\rangle\langle A|.$$

这就证明了③.

Dirac 符号规则 6 *左矢量、右矢量与线性算符的任意乘积的共轭，等于每一因子的共轭按相反的次序相乘，*

$$\bar{c}\equiv c^*,\quad \bar{\hat{L}}\equiv\hat{L}^\dagger,\quad \overline{|A\rangle}\equiv\langle A|,\quad \overline{\langle A|}\equiv|A\rangle;$$

$$\overline{c|A\rangle}=\bar{c}\langle A|,\quad \overline{c\langle A|}=\bar{c}|A\rangle,$$

$$\overline{\hat{L}|A\rangle}=\langle A|\bar{\hat{L}},\quad \overline{\langle A|\hat{L}}=\bar{\hat{L}}|A\rangle;$$

$$\overline{\langle A|B\rangle}=\langle B|A\rangle,\quad \overline{|A\rangle\langle B|}=|B\rangle\langle A|,$$

$$\overline{\langle A|\hat{L}|B\rangle}=\langle B|\bar{\hat{L}}|B\rangle,\quad \overline{\hat{F}\hat{G}}=\bar{\hat{G}}\bar{\hat{F}}.$$

一个算符如果与它的共轭算符相等，我们就说这个算符是自共轭的，简称自轭的，或厄米的．现在我们来证明上述定义(5)引入的算符 $\hat{L}$ 是厄米算符．由于本征值 l_m 是观测量的测得值，应该是实数，

$$l_m^*=l_m,$$

所以从(5)式可得

$$\hat{L}^\dagger=\overline{\sum_m|l_m\rangle l_m\langle l_m|}=\sum_m|l_m\rangle l_m^*\langle l_m|=\sum_m|l_m\rangle l_m\langle l_m|=\hat{L},$$

亦即 $\hat{L}$ 是厄米算符.

用(5)式定义的算符 $\hat{L}$ 作用于它的本征态 $|l_n\rangle$，代入(1)式，可以得到

$$\hat{L}|l_n\rangle = l_n|l_n\rangle, \tag{6}$$

这就是从算符 $\hat{L}$ 求它的本征态和本征值的**本征值方程**.

到此，我们从态的叠加原理、波函数的统计诠释和观测量的一般性质推出了观测量可以用线性厄米算符来表示，并且给出了观测量的算符、本征态和本征值应满足的本征值方程. 归纳起来，能够表示一个物理观测量的算符，在数学上必须满足的条件是：**线性，厄米性，在态矢量空间内作用，本征态组有完备性**. 后两点既是对算符的要求，也是对本征态矢量组的要求，它们往往被疏忽，这会在一些具体问题中造成问题. 我们将在第三章 §3.3 和第四章 §4.1 及 §4.3 给出具体的讨论.

反之，若算符是厄米的，$\hat{L}^\dagger = \hat{L}$，则可证明，对于从它的本征值方程(6)解出的本征值谱 $\{l_m\}$ 和本征态组 $\{|l_m\rangle\}$，有以下性质：

① 本征值都是实数，$l_m^* = l_m$.

② 属于不同本征值的两个本征态是正交的，本征态组 $\{|l_m\rangle\}$ 有正交归一性(1).

③ 相应于本征右矢的本征值，都同时是相应于本征左矢的本征值.

④ 与本征右矢相对应的左矢，是属于同一本征值的本征左矢，反之亦然.

于是，在一方面，我们证明了，在计算平均值时所引入的算符是线性厄米算符. 在另一方面，我们又表明了，线性厄米算符有可能用来表示物理观测量. 当然，这还需要证明它的本征态组具有完备性.

3. 相容性与测不准定理

上面讨论了任意一个物理观测量的算符应满足的条件. 现在

来讨论两个观测量的算符之间应满足的条件.

在量子力学中,一般地讲,两个观测量可以分别单独地测准,却不一定能同时测准. 在一个测准了 A 的态 $|a_r\rangle$ 上,再去测 B,就有可能会干扰这个态,测得 $|b_s\rangle$ 时,A 的态 $|a_r\rangle$ 就被破坏了. 在这种情况下,两个观测互相干扰,或者说不相容. 我们将要证明,若两个观测量的算符不对易,这两个观测量就不相容.

但也有一些观测量可以同时测准,具有共同本征态. 在这种情况下,两个观测互不干扰,或者说是相容的. 两个观测相容的必要充分条件,是这两个观测量的算符可以对易.

定理 如果两个观测量有共同本征态组,并且这个共同本征态组形成一个完备组,则它们的算符是对易的.

证明 由题设,有

$$\hat{A}|a_rb_s\rangle = a_r|a_rb_s\rangle, \quad \hat{B}|a_rb_s\rangle = b_s|a_rb_s\rangle, \quad |\psi\rangle = \sum_{r,s} c_{rs}|a_rb_s\rangle,$$

其中 $|\psi\rangle$ 是任意态矢量. 于是有

$$\begin{aligned}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle &= \sum_{r,s} c_{rs}(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|a_rb_s\rangle \\ &= \sum_{r,s} c_{rs}(b_sa_r - a_rb_s)|a_rb_s\rangle = 0.\end{aligned}$$

由于 $|\psi\rangle$ 是任意态矢量,所以有

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0.$$

逆定理 如果两个观测量的算符是对易的,它们就有共同本征态组,并且这个共同本征态组形成一个完备组.

证明 设观测量 A 的本征态组为 $\{|a_rt\rangle\}$,

$$\hat{A}|a_rt\rangle = a_r|a_rt\rangle,$$

其中参数 t 用来区分属于同一本征值 a_r 的不同本征态. 由于 $\{|a_rt\rangle\}$ 是完备组,可以把观测量 B 的本征态 $|b_s\rangle$ 用它来展开,

$$|b_s\rangle = \sum_{r,t} c_{srt}|a_rt\rangle = \sum_r c_{sr}|a_rb_s\rangle,$$

其中

$$c_{sr}|a_r b_s\rangle \equiv \sum_t c_{rt}|a_r t\rangle.$$

由于$|b_s\rangle$是观测量 B 的本征态，用$(\hat{B}-b_s)$作用的结果应等于 0，

$$0=(\hat{B}-b_s)|b_s\rangle=\sum_r c_{sr}(\hat{B}-b_s)|a_r b_s\rangle.$$

其中 c_{sr}不会全为 0，而且由于 $\hat{B}$ 与 $\hat{A}$ 对易，有$(\hat{B}-b_s)|a_r b_s\rangle\sim|a_r\rangle$，上述求和中各项线性无关，所以必定有

$$(\hat{B}-b_s)|a_r b_s\rangle=0,$$

亦即$\{|a_r b_s\rangle\}$是 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 的共同本征态组. 由于$|a_r b_s\rangle$线性地依赖于$\{|a_r t\rangle\}$，而$\{|a_r t\rangle\}$是完备组，所以$\{|a_r b_s\rangle\}$也是完备组.

对于两个以上的观测量，上述讨论也成立. 如果任意一组观测量中每一个与其他所有的都对易，则它们有共同本征态，组成一个完备组，反之亦然. 从原则上看，多个相容的观测，可以看成单个的观测，多个互相对易的观测量，可以当成单个观测量，对它的观测结果，包括多个本征值，而得到它们的一个共同本征态.

多个观测量的共同本征态形成完备组的条件是：它们的算符互相对易，互相独立，属于任意一组本征值的本征态都只有一个. 这样的一组观测量，称为一个观测量的完全集.

从物理上看，更有兴趣的是系统的不相容观测量. 两个不相容观测量的算符是不对易的，它们满足一定的对易规则. 确定了算符之间的对易规则，也就确定了整个算符的代数. 那么，如何从物理上确定观测量算符的对易规则呢？这需要有新的物理原理. 这个新原理的基础，是 Robertson 证明的测不准定理①.

从上述二定理可以推知，两个测量不相容的必要充分条件，是这两个观测量的算符不对易. Robertson 证明了，两个观测量不相容的程度，即它们测不准的程度，可以用这两个算符的对易式来表示.

测不准定理 对于任意两个物理观测量 A 与 B，在任一态

① H. P. Robertson, *Phys. Rev.* **34** (1929) 163.

$|\psi\rangle$上同时测量它们，所得结果的均方差满足不等式

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geqslant \frac{1}{4}\langle \mathrm{i}[\hat{A},\hat{B}]\rangle^2, \tag{7}$$

其中 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 分别表示这两个观测量的算符，

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

用尖括号括起来的量表示该量在态$|\psi\rangle$上的平均，

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle, \quad \langle\hat{B}\rangle = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle.$$

证明 对于任意一个归一化态矢量$|\psi\rangle$，令

$$|\phi\rangle = \mathrm{i}\Delta\hat{A}|\psi\rangle, \quad |\varphi\rangle = \Delta\hat{B}|\psi\rangle.$$

由于观测量的算符是厄米的，$\hat{A}^\dagger = \hat{A}, \hat{B}^\dagger = \hat{A}$，有

$$\langle\phi|\phi\rangle = \langle\psi|\,\overline{\mathrm{i}\Delta\hat{A}}\mathrm{i}\Delta\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|(\Delta\hat{A})^2|\psi\rangle = \langle(\Delta\hat{A})^2\rangle,$$

$$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\psi|\,\overline{\Delta\hat{B}}\Delta\hat{B}|\psi\rangle = \langle\psi|(\Delta\hat{B})^2|\psi\rangle = \langle(\Delta\hat{B})^2\rangle,$$

$$\begin{aligned}\langle\phi|\varphi\rangle + \langle\varphi|\phi\rangle &= \langle\psi| - \mathrm{i}\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} + \mathrm{i}\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}|\psi\rangle \\ &= -\mathrm{i}\langle\psi|\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = \langle -\mathrm{i}[\hat{A},\hat{B}]\rangle.\end{aligned}$$

代入 Schwarz 不等式

$$\langle\phi|\phi\rangle\cdot\langle\varphi|\varphi\rangle \geqslant \frac{1}{4}[\langle\phi|\varphi\rangle + \langle\varphi|\phi\rangle]^2, \tag{8}$$

即得定理的结果(7).

4. Heisenberg 测不准原理

测不准定理只告诉我们，如果两个观测量的算符不对易，则它们不能同时测准. 但并没有告诉我们，系统的哪些物理观测量是不能同时测准的. 回答这个问题的物理原理，是 Werner Heisenberg 的测不准原理.

Heisenberg 测不准原理 对于一个力学系统，其正则坐标 $q_1, q_2, \cdots, q_N$ 的测量是相容的，其正则共轭动量 $p_1, p_2, \cdots, p_N$ 的测量也是相容的，而对任何一对正则坐标 q_r 与正则动量 p_s 来说，当 $r\neq s$ 时是相容的，当 $r=s$ 时不相容.

Heisenberg 测不准原理的实验基础是粒子的波动性和对这

个波的统计诠释. 粒子的波动性表明，动量一定的平面波，坐标完全测不准. 坐标一定的 δ 型波包，是各种动量值的平面波的叠加，动量完全测不准. 在一定空间范围的波包，是由一定范围动量值的平面波叠加而成，坐标与动量都在一定范围内测不准. 波函数的统计诠释表明，这种测不准的含义，是指在多次重复测量中，测得值在一个范围内分布，其均方差在原则上有一个下限.

根据 Heisenberg 测不准原理，我们可以写出下述 Heisenberg *对易关系*：

$$[\hat{q}_r,\hat{q}_s]=0,\quad [\hat{p}_r,\hat{p}_s]=0,\quad [\hat{q}_r,\hat{p}_s]=\mathrm{i}\hbar\delta_{rs}. \tag{9}$$

在这里，应当把上述 Heisenberg 对易关系看作是根据 Heisenberg 测不准原理而作出的一个**基本假设**. 由于 $\hat{q}_r$ 与 $\hat{p}_s$ 是厄米的，它们的对易子是*反厄米的*，

$$\overline{[\hat{q}_r,\hat{p}_s]}=-[\hat{q}_r,\hat{p}_s].$$

在(9)的第三式右边引入虚单位 i，是为了使得 $\hbar$ 是实数. 这里引入的常数 $\hbar$ 称为*约化 Planck 常数*，是量子力学的基本常数，由实验来测定. (9)的第三式，就是约化 Planck 常数的定义式. 这个对易关系反映了系统的基本量子特征，如果 $\hbar\to 0$，不存在测不准，整个理论就过渡到经典力学(见下一节和下一章 § 2.6 关于经典极限的讨论). 所以又把上述 Heisenberg 对易关系称为*量子化条件*.

把 Heisenberg 对易关系(9)代入测不准定理(7)，就得到下述 Heisenberg *测不准关系*

$$\Delta q\Delta p\geqslant\frac{\hbar}{2}, \tag{10}$$

其中 $\Delta l\equiv\langle(\Delta\hat{l})^2\rangle^{1/2}$是观测量 l 的标准误差. 上式表示，同时测量系统的正则坐标与其正则共轭动量，所得的标准误差 Δq 与 Δp 之积不小于 $\hbar/2$. 也就是说，它表示，系统的正则坐标与其正则共轭动量不可能同时测准，在原则上存在一个测量精度的下限. 实际上，这就是 Heisenberg 测不准原理的具体表达式，它可以说是整个量子力学的物理基础.

由于有测不准,在一个观测量的本征态上测量系统的另一不相容观测量,能够按一定的概率测到其所有的本征值,我们只能采用概率的描述. 所以,波函数的统计诠释也是根源于测不准的.

正则量子化 对于力学现象,最基本的观测量是坐标 q 与动量 p. 从坐标算符 $\hat{q}$ 与动量算符 $\hat{p}$ 满足的对易关系(9),可以在具体表象中确定算符 $\hat{q}$ 与 $\hat{p}$ 的表达式,从而在很大程度上确定用坐标和动量来表示的大多数算符. 所以,在数学上,对于有经典对应的系统来说,有了这套对易关系,算符的运算规则就完全了.

由测不准原理所给出的量子化(9)称为*正则量子化*. 正则量子化只给出了正则变量的算符之间的对易关系. 有些观测量不属于正则变量,在确定这些观测量的算符时,要借助于*对称性分析*. 此外,对有些系统运用正则量子化会带来一些麻烦,采用 Feynman 的*路径积分量子化*更方便. 我们将在第二章 § 2.7 简单介绍量子力学的路径积分形式,在第三章讨论对称性分析,在第四章和第八章分别讨论一些动力学模型和场的量子化问题.

§ 1.4 运动方程

1. 幺正变换

线性变换 线性算符作用于一个态矢量的结果,得到一个新的态矢量. 这相当于从一个态矢量到另一个态矢量的**变换**. 线性算符在态矢量空间中引起的这种变换,称为*线性变换*. 用加一撇的量表示变换后的量,就有

$$|a\rangle \rightarrow |a'\rangle = \hat{U}|a\rangle, \quad \langle a| \rightarrow \langle a'| = \langle a|\overline{\hat{U}}. \tag{11}$$

对方程

$$|c\rangle = \hat{A}|b\rangle \tag{12}$$

两边用线性算符 $\hat{U}$ 作用,有

$$|c'\rangle = \hat{U}\hat{A}|b\rangle = \hat{A}'|b'\rangle, \tag{13}$$

其中

$$\hat A \to \hat A' = \hat U\hat A\hat U^{-1}. \tag{14}$$

(13)式表明，如果在变换 $\hat U$ 的作用下，态矢量按照(11)式变换，算符按照(14)式变换，则方程(12)的形式在线性变换 $\hat U$ 的作用下不变. 类似地还可以证明，算符的代数关系在线性变换下也保持不变：

$$\hat A + \hat B \to \hat A' + \hat B',$$
$$\hat A\hat B \to \hat A'\hat B'.$$

所以，线性变换保持矢量方程和算符的代数关系不变.

幺正变换 在物理上最重要的算符是厄米算符. 一个自然的问题是：什么样的线性变换能保持算符的厄米性？求(14)式的共轭，并要求它不变，就有

$$\begin{aligned}\overline{\hat A'} = \overline{\hat U\hat A\hat U^{-1}} &= \overline{\hat U^{-1}}\,\overline{\hat A}\,\overline{\hat U} = \overline{\hat U}^{-1}\hat U^{-1}\hat A'\hat U\overline{\hat U}\\ &= (\hat U\overline{\hat U})^{-1}\hat A'(\hat U\overline{\hat U}) = \hat A',\end{aligned}$$
$$(\hat U\overline{\hat U})\hat A' = \hat A'(\hat U\overline{\hat U}).$$

由于 $\hat A$ 是任一厄米算符，要求上式成立的条件是 $\hat U\overline{\hat U}=c$，可以证明等价地有

$$\overline{\hat U}\hat U = c,$$

其中 c 是一实常数. 这就是线性变换 $\hat U$ 能够保持算符厄米性的厄米条件.

此外，若还要求保持左矢量与右矢量之间的任意代数关系也不变，则还要求有

$$\langle b'|a'\rangle = \langle b|\overline{\hat U}\hat U|a\rangle = \langle b|a\rangle. \tag{15}$$

要求上式对任意态矢量 $|a\rangle$、$|b\rangle$ 都成立，就必须有

$$\overline{\hat U}\hat U = 1. \tag{16}$$

(15)式的一个特例是

$$\langle a'|a'\rangle = \langle a|a\rangle,$$

它表示在上述线性变换下任一态矢量的长度保持不变.

通常，我们把保持态矢量长度不变的线性变换称为幺正变换，而把(16)式称为变换的幺正条件. 归纳起来，幺正变换保持算符的厄米性，保持线性算符、左矢量、右矢量之间的任意代数关系不变. 所以，幺正变换把物理观测量变成物理观测量，并保持它们之间的关系不变.

无限小幺正变换的厄米算符 与单位变换只差一无限小量的幺正变换称为无限小幺正变换. 考虑下述无限小幺正变换

$$\hat{U} = 1 + \mathrm{i}\varepsilon\hat{F}, \tag{17}$$

其中 ε 为一无限小的实数. 把上式代入幺正条件(16)，有

$$\overline{\hat{U}}\hat{U} = (1 - \mathrm{i}\varepsilon\overline{\hat{F}})(1 + \mathrm{i}\varepsilon\hat{F}) = 1 - \mathrm{i}\varepsilon(\overline{\hat{F}} - \hat{F}) = 1,$$

其中略去了二级小量. 最后一个等式成立的条件是

$$\overline{\hat{F}} = \hat{F},$$

亦即要求 $\hat{F}$ 是厄米算符.

任一算符 $\hat{A}$ 在无限小幺正变换下的改变是

$$\begin{aligned}\hat{A}' - \hat{A} &= \hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1} - \hat{A} = (1 + \mathrm{i}\varepsilon\hat{F})\hat{A}(1 - \mathrm{i}\varepsilon\hat{F}) - \hat{A} \\ &= \mathrm{i}\varepsilon(\hat{F}\hat{A} - \hat{A}\hat{F}) = \mathrm{i}\varepsilon[\hat{F},\hat{A}].\end{aligned} \tag{18}$$

2. 运动方程的 Schrödinger 形式

在量子力学里，时间只能作为一个参数，而不是一个表示成算符的物理观测量(见第三章 § 3.1). 我们把时间 t 当作描述系统运动状态的一个参数，就可以问：在两次测量之间，不受外界干扰的情况下，系统的态如何随时间变化？

时间发展算符 设系统在不受外界干扰的情况下，从初始时刻 t_0 到某一时刻 t，态矢量从 $|\psi(t_0)\rangle$ 变化为 $|\psi(t)\rangle$. 这种变化可以看成是发生于态矢量空间中的一个变换，

$$|\psi(t_0)\rangle \to |\psi(t)\rangle = \hat{T}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle, \tag{19}$$

其中 $\hat{T}(t,t_0)$ 称为时间发展算符或时间演化算符，满足下列初条件：

$$\hat{T}(t_0,t_0) = 1. \tag{20}$$

于是，系统物理态随时间的变化，可以由系统的时间发展算符来确定. 而系统的时间发展算符，则要由系统所应满足的一般物理原理和系统的动力学性质来确定. 根据系统所应满足的一般物理原理，我们可以推得时间发展算符 $\hat{T}$ 应具有下列性质.

① *有逆算符.* 由定义(19)式，可以写出

$$\hat{T}(t,t')\hat{T}(t',t_0) = \hat{T}(t,t_0),$$

于是

$$\hat{T}(t_0,t)\hat{T}(t,t_0) = 1,$$

所以有

$$\hat{T}^{-1}(t,t_0) = \hat{T}(t_0,t).$$

② *线性.* 根据态的叠加原理，态的叠加关系不随时间改变，若在 t_0 时刻有叠加关系

$$|R(t_0)\rangle = c_1|A(t_0)\rangle + c_2|B(t_0)\rangle,$$

则在 t 时刻有

$$|R(t)\rangle = c_1|A(t)\rangle + c_2|B(t)\rangle.$$

另一方面，t 时刻的态是由 t_0 时刻的态经过时间发展而达到的，所以有

$$\begin{aligned}|R(t)\rangle &= \hat{T}|R(t_0)\rangle = c_1\hat{T}|A(t_0)\rangle + c_2\hat{T}|B(t_0)\rangle \\ &= \hat{T}[c_1|A(t_0)\rangle + c_2|B(t_0)\rangle].\end{aligned}$$

这就表明 $\hat{T}$ 是线性算符. 从物理上看，时间发展算符的线性性质，是态的叠加关系满足时间平移不变性的结果.

③ *幺正性.* 在时间发展过程中，如果系统中没有粒子的产生或湮没，则态矢量在时间发展变换下只可能改变方向，而不改变长度，只有相因子的差别. 这称为态矢量长度的时间平移不变性. 根据这种不变性，可以写出

$$\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|\overline{\hat{T}}\hat{T}|\psi(t_0)\rangle,$$

这就要求

$$\overline{\hat{T}}\hat{T} = 1,$$

这就是 $\hat{T}$ 的幺正性. 此外，由性质①，我们还有

$$\overline{\hat{T}} = \hat{T}^{-1}.$$

Schrödinger 方程　当 $t \to t_0$ 时，无限小时间发展算符 $\hat{T}$ 依赖于 $t-t_0$，保留到一次项，可以写成

$$\hat{T} = 1 + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{H}(t_0)(t-t_0), \quad t \to t_0. \tag{21}$$

其中引入虚单位 i 的目的，是使得 $\hat{H}$ 是厄米算符. 由于约化 Planck 常数 $\hbar$ 的量纲是时间乘能量，所以 H 具有能量的量纲. 在下面关于经典对应和经典极限的讨论中可以看出，这样引入约化 Planck 常数以后，观测量 H 对应于经典力学中系统的 Hamilton 量. 所以相应地，我们把 $\hat{H}$ 称为系统的 Hamilton *算符*.

把上式代入(19)式，取极限 $t \to t_0$，就有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle. \tag{22}$$

这个方程称为 Schrödinger *方程*，是量子力学中确定系统的物理态随时间变化的基本动力学方程. 系统的动力学特征，完全体现在系统的 Hamilton 算符中. 可以说，对一个物理系统进行量子力学描述的核心，就是写出系统的 Hamilton 算符. 如何根据系统的物理特征写出它的 Hamilton 算符，虽然也有一些原则可循，比如我们下面将要讨论的经典对应，但这主要还是靠我们的物理经验和直觉，只能在一些具体例子中去细细体味(见第四章).

$\hat{T}$ 的方程　把时间发展算符的(19)式代入 Schrödinger 方程(22)，由于 $|\psi(t_0)\rangle$ 是系统的任一初始态矢量，所以就有 $\hat{T}$ 的方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{T}}{\mathrm{d}t} = \hat{H}(t)\hat{T}. \tag{23}$$

这个方程的解，还要满足初条件(20). 当系统的 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 不显含时间 t 时，H 相应于系统的能量，可以解出

$$\hat{T}(t,t_0) = e^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}, \tag{24}$$

其中只有一个任意相因子的不确定. 于是，系统态矢量随时间的变

化可以写成

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}|\psi(t_0)\rangle. \tag{25}$$

特别是，如果$|\psi(t_0)\rangle$是系统的能量本征值为 E 的本征态，满足能量本征值方程

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

则有

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(t-t_0)/\hbar}|\psi(t_0)\rangle.$$

这种态称为系统的定态，它所满足的上述能量本征值方程则称为定态 Schrödinger 方程. 可以看出，系统的定态保持态矢量的方向不变，从而保持系统的测量概率不变.

平均值的方程 在系统的态随时间变化的情况下，系统任一观测量 A 的平均值也随时间变化. 求系统观测量平均值随时间的变化率，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}|\psi\rangle + \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\right)\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{A}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi\rangle,$$

代入态矢量$\langle\psi|$和$|\psi\rangle$随时间变化的 Schrödinger 方程，就有下述公式

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{A}\rangle &= \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}|\psi\rangle \\ &= \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A},\hat{H}]\right\rangle.\end{aligned} \tag{26}$$

守恒定理 一个不显含时间的无限小幺正变换若保持系统的 Hamilton 量不变，则生成此无限小变换的厄米算符代表一个守恒量.

证明 考虑观测量算符 $\hat{H}$ 在无限小幺正变换(17)下的改变，代入上一小节的公式(18)，就有

$$\hat{H}' - \hat{H} = \mathrm{i}\epsilon[\hat{F},\hat{H}].$$

题设 $\hat{H}'=\hat{H}$，所以有

$$[\hat{F},\hat{H}]=0.$$

代入上述平均值公式(26)就有守恒式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\hat{F}\rangle=\left\langle\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F},\hat{H}]\right\rangle=0.$$

显然,若系统的 Hamilton 量不显含时间,则它自己也是守恒量.这也是假设 $\hat{H}$ 为系统能量算符的一个依据.

3. 运动方程的 Heisenberg 形式

量子力学中的绘景或图像 在上一小节中,我们用态矢量随时间的变化来描述两次测量之间系统随时间变化的物理过程.态矢量随时间的变化,就是态矢量的方向随时间的变化.在这个图像中,系统随时间变化的物理过程,表现为态矢量方向的变化过程.这种运动态的图像,称为 Schrödinger 绘景或 Schrödinger 图像.在 Schrödinger 绘景中,系统的态随时间变化,而观测量的算符一般不随时间变化.

在实验上,态矢量方向的变化或观测量算符的变化都不能直接测量.能够直接测量的,是观测量的本征值和平均值,以及测得某一本征值的概率.所以,这种态矢量随时间变化的 Schrödinger 绘景,给出的只是我们用来描述系统物理过程的一个几何图像,而不代表实际发生的物理过程.完全等效地,我们也可以采取别的几何图像来描述系统的物理过程.除了 Schrödinger 绘景外,常用的还有 Heisenberg 绘景和相互作用绘景.

Heisenberg 绘景 从 Schrödinger 绘景出发,作时间发展的幺正变换 $U=\hat{T}^{-1}(t,t_0)$,就可以得到 Heisenberg 绘景.在这个变换下,系统的态矢量从 t 时刻的运动态 $|\psi(t)\rangle$ 变回到初始时刻 t_0 的静止态 $|\psi(t_0)\rangle$,

$$|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle\rightarrow|\psi_{\mathrm{H}}\rangle=\hat{T}^{-1}(t,t_0)|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle=|\psi_{\mathrm{S}}(t_0)\rangle,$$

其中分别用下标 H 和 S 来表示 Heisenberg 绘景和 Schrödinger 绘景中的量.同时,在这一幺正变换下,Schrödinger 绘景中不随时

间变化的线性算符 $\hat{A}_S$ 变成了随时间变化的线性算符 $\hat{A}_H$，

$$\hat{A}_S \to \hat{A}_H = \hat{T}^{-1}\hat{A}_S\hat{T}. \tag{27}$$

所以在 Heisenberg 绘景中，系统的观测量算符随时间变化，而态矢量不随时间变化．由于幺正变换不改变态矢量的内积和各种代数关系，所以上述变换不改变问题的物理条件，只改变了问题的描述方式，而变换前后的这两种描述方式在物理上是完全等效的．

Heisenberg 运动方程 求(27)式给出的 Heisenberg 算符随时间的变化，并利用时间发展算符的方程(23)，就有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}_H &= \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} - \frac{\mathrm{d}\hat{T}}{\mathrm{d}t}\hat{T}^{-2}\hat{A}_S\hat{T} + \hat{T}^{-1}\hat{A}_S\frac{\mathrm{d}\hat{T}}{\mathrm{d}t} \\ &= \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A}_H, \hat{H}_H].\end{aligned}$$

这就是观测量算符 $\hat{A}_H$ 的 Heisenberg 运动方程，其中

$$\hat{H}_H = \hat{T}^{-1}\hat{H}_S\hat{T}, \quad \hat{A}_H = \hat{T}^{-1}\hat{A}_S\hat{T}.$$

当 $\hat{H}_S$ 不显含 t 时，有(24)式，

$$\hat{T}(t,t_0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_S(t-t_0)/\hbar},$$

从而

$$\hat{H}_H = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_S(t-t_0)/\hbar}\hat{H}_S\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_S(t-t_0)/\hbar} = \hat{H}_S,$$

$$\hat{A}_H = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_S(t-t_0)/\hbar}\hat{A}_S\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_S(t-t_0)/\hbar}.$$

4. 经典对应

这一小节的讨论采用 Heisenberg 绘景．为了简洁起见，我们省去 Heisenberg 算符的下标 H．我们来讨论用正则变量描述的系统．

基本方程 归纳起来，在 Heisenberg 绘景中，观测量算符的基本方程有两组．第一组是观测量算符之间的对易关系，

$$[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A},$$

$$[\hat{q}_r,\hat{q}_s] = 0, \quad [\hat{p}_r,\hat{p}_s] = 0, \quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{q}_r,\hat{p}_s] = \delta_{rs}, \tag{28}$$

其中 $\hat{A},\hat{B}$ 一般是正则坐标算符 $\hat{q}_r$ 和正则动量算符 $\hat{p}_s$ 的函数，所以只要有了 Heisenberg 对易关系(28)，就可以算出它们的对易关系. 特别是，当观测量算符 $\hat{F}$ 可以写成 $\hat{q}_r$ 和 $\hat{p}_s$ 的幂级数时，可以证明

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{q}_r,\hat{F}] = \frac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{p}_r}, \quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{p}_s,\hat{F}] = -\frac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{q}_s}. \tag{29}$$

第二组是观测量算符随时间变化的运动方程，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A} = \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A},\hat{H}], \tag{30}$$

特别是

$$\frac{\mathrm{d}\hat{q}_r}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{q}_r,\hat{H}], \quad \frac{\mathrm{d}\hat{p}_s}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{p}_s,\hat{H}]. \tag{31}$$

经典对应 在上述运动方程(31)中代入关系(29)，就有

$$\frac{\mathrm{d}\hat{q}_r}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{p}_r}, \quad \frac{\mathrm{d}\hat{p}_s}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial\hat{H}}{\partial\hat{q}_s}. \tag{32}$$

可以看出，如果算符 $\hat{H}$ 对应于经典力学中系统的 Hamilton 量，则上述方程在形式上与经典力学中系统的 Hamilton 正则方程完全相同. 这就是我们把 $\hat{H}$ 称为系统的 Hamilton 算符的原因.

把经典力学的 Hamilton 正则方程写成 Poisson 括号的形式，这种对应可以看得更清楚. 在经典力学中，两个力学量 A,B 的 Poisson 括号定义为

$$[A,B]_c \equiv \sum_r\left(\frac{\partial A}{\partial q_r}\frac{\partial B}{\partial p_r} - \frac{\partial B}{\partial q_r}\frac{\partial A}{\partial p_r}\right),$$

其中下标 c 表示这个括号是经典 Poisson 括号. 很容易证明，经典 Poisson 括号具有下列性质：

$$[A,B]_c = -[B,A]_c,$$

$$[A+B,C]_c = [A,C]_c + [B,C]_c,$$

$$[AB,C]_c = [A,C]_c B + A[B,C]_c,$$

$$[A,[B,C]_c]_c + [B,[C,A]_c]_c + [C,[A,B]_c]_c = 0,$$

以及

$$[A,c]_c = 0,$$

其中 c 为常数.

写成 Poisson 括号的形式，我们有

$$[q_r,q_s]_c = 0,\quad [p_r,p_s]_c = 0,\quad [q_r,p_s]_c = \delta_{rs},$$

$$\frac{\mathrm{d}q_r}{\mathrm{d}t} = [q_r,H]_c,\quad \frac{\mathrm{d}p_r}{\mathrm{d}t} = -[p_s,H]_c,$$

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial A}{\partial t} + [A,H]_c.$$

可以看出，如果采取下列对应关系

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\quad] \sim [\quad]_c,\quad \hat{H} \sim H,$$

则力学量算符的 Heisenberg 对易关系(28)和运动方程(31)、(30)与上述经典力学方程在形式上完全一一对应.

在这种对应关系的意义上，两个观测量算符的对易子$[\hat{A},\hat{B}]$又称为它们的量子 Poisson 括号. 很容易证明，量子 Poisson 括号具有与经典 Poisson 括号对应的性质：

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

$$[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}] + [\hat{B},\hat{C}],$$

$$[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = [\hat{A},\hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B},\hat{C}],$$

$$[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]] + [\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]] + [\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]] = 0,$$

以及

$$[\hat{A},c] = 0,$$

其中 c 是常数.

经典极限 $\hbar\to 0$ 的极限称为经典极限. 我们来证明，在经典极限下，对于用正则变量描述的系统来说，量子力学将过渡到经典力学. 首先，在上一节已经指出，如果 $\hbar\to 0$，就不存在测不准，系统的正则坐标与正则共轭动量能够同时测准，有共同本征态. 在这种情况下，系统的任一态$|\psi\rangle$都是它的全体正则变量的共同本征态，

$$\hat{q}_r|\psi\rangle = q_r|\psi\rangle,\quad \hat{p}_s|\psi\rangle = p_s|\psi\rangle.$$

由于系统的其他任何力学量 F 都是 q_r 与 p_s 的函数，我们有

$$\hat{F}(\hat{q}_r,\hat{p}_s)|\psi\rangle = F(q_r,p_s)|\psi\rangle,$$

所以，$|\psi\rangle$ 是系统所有力学量的共同本征态. 把算符的正则方程(32)作用到这个态上，就得到本征值的方程

$$\frac{\mathrm{d}q_r}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial H}{\partial p_r},\quad \frac{\mathrm{d}p_r}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial H}{\partial q_r},$$

这正是经典力学的 Hamilton 正则方程.

从这个证明可以看出，对于用正则变量描述的系统来说，测不准是微观现象区别于宏观现象的根本特征，也就是量子力学区别于经典力学的根本特征，测不准原理是量子力学的一条具有根本重要性的原理. 如果在所讨论的问题中测不准可以忽略，量子力学就过渡到经典力学. 在这个意义上，经典力学是量子力学在 $\hbar\to 0$ 极限下的近似.

5. 相互作用绘景

相互作用绘景又称 Dirac 绘景，它是在系统的 Hamilton 量可以分解为无相互作用时的 H_0 与描述相互作用的 H' 之和时用来处理相互作用的一个方便和有用的绘景. 这时

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}',$$

设 $\hat{H}_0$ 不含时间 t. 从 Schrödinger 绘景出发，用

$$\hat{U}=\exp(\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar)$$

做幺正变换，

$$|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle \to |\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}|\psi_{\mathrm{S}}(t)\rangle,$$

$$\hat{A}_{\mathrm{S}} \to \hat{A}_{\mathrm{I}}(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}\hat{A}_{\mathrm{S}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar},$$

可以得到态矢量和观测量算符随时间变化的运动方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = \hat{H}'_{\mathrm{I}}|\psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}_{\mathrm{I}}(t) = \frac{\partial\hat{A}_{\mathrm{I}}}{\partial t}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{A}_{\mathrm{I}},\hat{H}_0],$$

其中下标 I 表示相互作用绘景，

$$\hat{H}'_{\mathrm{I}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{H}'\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar}.$$

可以看出，在相互作用绘景中，态矢量的变化受 $\hat{H}'_{\mathrm{I}}$ 的支配，观测量算符的变化受 $\hat{H}_0$ 的支配. 在没有相互作用时，态矢量不随时间变化，观测量算符随时间变化的方程就是 Heisenberg 运动方程，相互作用绘景还原为 Heisenberg 绘景. 于是，在没有相互作用的问题已经解出的情况下，就可以用相互作用绘景来求解由于相互作用引起的态随时间的变化.

§1.5 测量问题

1. 波包的缩编

波包的缩编 在测量过程中，测量仪器与被测量的系统之间会发生某种相互作用. 一般地说，这种相互作用会使系统的态发生改变，使得测量以后的态与测量以前的态不同. 设系统在测量之前处于态 $|\psi\rangle$，测量之后处于态 $|\psi_M\rangle$，则可以用算符 $\hat{M}$ 来描述这种改变，

$$|\psi_M\rangle = \hat{M}|\psi\rangle.$$

系统的态矢量在测量过程中的这种变化，称为*波包的缩编*或波包从态 $|\psi\rangle$ 到态 $|\psi_M\rangle$ 的*投影*.

投影假设 根据波函数的统计诠释，在系统的一个态上可以测量到系统的任何一个可能的态，所以系统测量以后的态 $|\psi_M\rangle$ 主要是由测量仪器和测量过程来确定，与系统初始的态 $|\psi\rangle$ 不会有太强的关联. 最简单的假设就是，如果是测量系统的某个观测量 $\hat{L}$，则在测量以后系统处于它的某一本征态 $|l_n\rangle$，也就是说，波包的缩编完全由测量仪器和测量过程来确定. 这个假设称为*投影假设*. 根据投影假设，

$$|\psi_M\rangle = |l_n\rangle, \quad \hat{M} = |l_n\rangle\langle\psi|.$$

这里假设态矢量都是归一化的.

主观与客观的划分 现在我们看到，在量子力学中有两种量子态的变化：在两次测量之间，系统的量子态服从 Schrödinger 方程，按照由系统的动力学性质所确定的方式变化；在测量过程中，系统的量子态发生波包的缩编，什么时候缩编以及缩编到什么态由测量仪器和测量过程来确定. 前一种变化过程是客观的，没有观测者的介入. 后一种变化过程有观测者介入，包含了主观的因素. 要在什么时候进行测量，测量什么观测量，在一定程度上由观测者的安排和选择来确定. 所以，波包什么时候进行缩编，缩编到什么态，在一定程度上是由观测者的安排和选择来确定的. 在这个意义上，*量子力学包含了主观的因素，不是完全客观的*. 量子力学的这种状况，是统计诠释的必然结果，是测不准这一物理原理的反映.

测量理论 波包的缩编也可以看作是态矢量随时间的变化，所以自然地会想到能否用 Schrödinger 方程来处理. 把测量仪器与被测量的系统合起来当作一个服从 Schrödinger 方程的大系统，根据一定的模型假设写出包含测量仪器、被测量系统以及它们之间的相互作用的总的 Hamilton 算符和大系统的初始态，看看从 Schrödinger 方程能否解出 M 和被测量系统的态 $|\psi_M\rangle$ 来？这种类型的理论称为*测量理论*，已经研究了好多年了. 不过，**即使能够建立一个测量理论，波包的缩编仍然存在**，只不过是推迟到对这个大系统进行测量的时候. 所以，主观的介入并不能消除，只不过是推迟了一步. 由统计诠释所引起的波包缩编问题是独立于 Schrödinger 方程的，不可能把它纳入 Schrödinger 方程之中.

2. 完全测量与不完全测量

观测量的完全集 系统的一个量子态，总是由某种测量所确定的. 所以，在原则上我们总可以把系统的一个量子态看作是某一组观测量的共同本征态. 这组确定系统量子态的观测量，就是系统

的一个观测量的完全集. 例如一个无自旋粒子的坐标(x,y,z)或动量(p_x,p_y,p_z)，一个质子的动量和自旋投影$(\boldsymbol{p},s_z)$，氢原子中电子的能量、轨道角动量大小、轨道角动量投影和自旋投影(E,l,l_z,s_z)，等等.

完全测量与不完全测量 考虑加速器中的质子束，已经测定了它的动量 $\boldsymbol{p}$，但是没有测定它的自旋投影 s_z. 为了完全确定这个质子的态，还必须测定它的自旋投影. 我们称这种只测出一组观测量完全集中的部分观测量的测量为*不完全测量*，而称把一组观测量完全集中所有观测量都测出的测量为*完全测量*. 对加速器中质子束的上述测量，就是不完全测量.

一个不完全测量，不能提供有关系统所处状态的完全的信息. 这时被测量系统所处的状态，有两种可能的情形. 第一种情形是，系统处于一个确定的量子态，但是我们只知道观测量完全集的一部分本征值. 例如只测量了氢原子中电子的能量、轨道角动量大小和轨道角动量投影. 氢原子中电子的自旋投影肯定在某个方向，我们只是没有测量. 这种情形，仍然属于量子力学的动力学问题.

第二种情形是，系统没有处于一个确定的量子态，而是以一定的概率处于各种可能的量子态. 例如加速器中的质子束，其中不同质子的自旋投影方向不同，我们不能用一个具有确定的自旋投影方向的态矢量来统一地描述这个质子束. 这种情形的问题已经不是量子力学的动力学问题，而是一个量子系综的统计力学问题.

统计系综 考虑大量相同但互相独立的系统所构成的*系综*，每个系统以概率 P_n 处于本征态$|n\rangle$. 测量这种系综的观测量 $\hat{A}$ 所得的统计平均值可以写成

$$\langle\langle\hat{A}\rangle\rangle=\sum_n P_n\langle n|\hat{A}|n\rangle,$$

它是先算观测量 $\hat{A}$ 在系统量子态$|n\rangle$上的量子力学平均$\langle n|\hat{A}|n\rangle$，然后再算它按概率 P_n 在所有系统上的统计力学系综平均. 在上述公式中，已经假设概率 P_n 是归一化的，$\sum_n P_n=1$. 利用本征态组

$\{|n\rangle\}$的完备性，可以把上式改写成

$$\langle\langle\hat{A}\rangle\rangle = S_p(\hat{\rho}\hat{A}) \equiv \sum_n \langle n|\hat{\rho}\hat{A}|n\rangle,$$

其中引入的

$$\hat{\rho} = \sum_n |n\rangle P_n \langle n|$$

称为*密度算符*，是描述系综性质和计算系综平均的基本量。容易证明：密度算符的本征值是非负的实数，在系综上测量到态$|\psi\rangle$的概率为$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle$，以及密度算符的变化满足下述量子 Liouville 方程

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

第二章　表象理论

§2.1　基矢和 δ 函数

1. δ 函数

$\delta(x)$是用下列条件定义的非正规函数：

$$\int\delta(x)\mathrm{d}x = 1,$$

$$\delta(x) = 0, \quad x \neq 0.$$

它的图像是，这个函数处处为零，只在原点附近一个无限小范围成为无限大，使得它在这个范围内的积分等于 1. 我们可以把它看成下列阶跃函数 $\epsilon(x)$的微商 $\epsilon'(x)$：

$$\epsilon(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ 1, & x > 0. \end{cases}$$

根据这个定义，可以证明 $\delta(x)$具有下列性质：

$$\int f(x)\delta(x-a)\mathrm{d}x = f(a),$$

$$\delta(-x) = \delta(x),$$

$$x\delta(x) = 0,$$

$$x\delta'(x) = -\delta(x),$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x),$$

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2a}[\delta(x+a) + \delta(x-a)], \quad a > 0.$$

上述关系的意义是，当方程两边作为被积函数的因子时，所给出的

结果相等. 作为 δ 函数的一个应用,我们可以写出①

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln x = \frac{1}{x} - \mathrm{i}\pi\delta(x). \tag{1}$$

2. 基矢与表象

定义 根据态的叠加原理,态矢量的任何一个完全集,都可以作为*基矢*,而把任一态矢量表示成它们的线性叠加,把任一算符表示成在它们之间的投影算符的线性叠加. 表示态矢量和算符的这种方式,叫做一个*表象*. 我们将看到,一组基矢足以完全确定任一态矢量和算符,从而完全确定一个表象.

一般地说,一个表象的基矢不必全部互不相关. 但在实用上,绝大多数表象的基矢都是互不相关的,亦即它们之中任何两个都是互相正交的. 这种表象叫做*正交表象*. 设 $\{|l\rangle\}$ 是用一组实参数 $l=(l_1,l_2,\cdots,l_N)$ 标记的正交基矢,则它具有以下的性质. 这里假设 l 的取值是离散的分立谱. 对于连续谱的情形,我们将在下一小节讨论.

正交基矢的性质 1 正交归一化:

$$\langle l|l'\rangle = \delta_{ll'}.$$

为了简洁起见,在不需要强调时,我们总是使用简写

$$\delta_{ll'} = \delta_{l_1l_1'}\delta_{l_2l_2'}\cdots\delta_{l_Nl_N'}.$$

正交基矢的性质 2 $|l\rangle$ 必定是一组观测量的共同本征态,本征值 l. 实际上,由于 $\{|l\rangle\}$ 是正交归一化的完备组,在上一章 § 1.3 已经证明了算符

$$\hat{L}_r = \sum_l |l\rangle l_r\langle l| \tag{2}$$

是作用于态矢量空间的线性厄米算符,有本征值方程

$$\hat{L}_r|l\rangle = l_r|l\rangle,\quad r=1,2,\cdots,N.$$

---

① P. A. M. 狄拉克,《量子力学原理》,陈咸亨译,喀兴林校,科学出版社,1979 年,北京,62 页.

正交基矢的性质 3 完备性：

$$\sum_l |l\rangle\langle l| = 1.$$

这是在上一章 §1.3 已经指出的本征态矢量组的性质，它在由 $\{|l\rangle\}$ 张成的线性空间成立. 在它两边乘以任一态矢量 $|\psi\rangle$，就得到态矢量 $|\psi\rangle$ 按基矢 $\{|l\rangle\}$ 的展开式：

$$|\psi\rangle = \sum_l |l\rangle\langle l| \cdot |\psi\rangle = \sum_l \psi_l |l\rangle,$$

其中

$$\psi_l = \langle l|\psi\rangle.$$

反之，如果我们有一组观测量的共同本征态，则可以用它们来做表象的基矢. 这可以分两种情形.

情形 1 设 $\{\hat{L}_r, r=1,2,\cdots,N\}$ 是一组互相对易的观测量完全集，则它们的共同本征态 $\{|l\rangle\}$ 是一个完备组，可用作一组正交基矢，其中 $l=(l_1,l_2,\cdots,l_N)$. 在这种情形，由于 $\hat{L}_r$ 是厄米的，所以 $|l\rangle$ 是正交的. 另外，由于 $\{\hat{L}_r\}$ 是完全集，所以 $|l\rangle$ 不简并，是完备组. 否则，如果对应于每一组 l 值还有 s 个态 $|l1\rangle, |l2\rangle, \cdots, |ls\rangle$，则可用 Gram-Schmidt 程序把它们正交化，从而按上述正交基矢的性质 1 再引入一个与 $\{\hat{L}_r\}$ 对易的观测量 $\hat{M}$，这违反了 $\{\hat{L}_r\}$ 是完全集的前提. 所以 $\{|l\rangle\}$ 是一个正交的完备组，可以用作基矢来表示任一观测到的态矢量.

情形 2 设 $\{\hat{L}_r, r=1,2,\cdots,u\}$ 是一组互相对易的观测量，但不是完全集. 这时 $\{\hat{L}_r\}$ 的共同本征态有简并，可以用另一组参数来标记，写成 $|lm\rangle$，其中 $l=(l_1,l_2,\cdots,l_u)$ 是观测量 $\{\hat{L}_r, r=1,2,\cdots,u\}$ 的本征值，$m=(m_1,m_2,\cdots,m_v)$ 是简并的标记. 于是，可以用 Gram-Schmidt 程序把这些简并态正交化，并按上述正交基矢的性质 1 再引入一组与 $\hat{L}_r$ 对易的观测量 $\{\hat{M}_s, s=1,2,\cdots,v\}$. 观测量组 $\{\hat{L}_r\}$ 与 $\{\hat{M}_s\}$ 合起来就构成完全集，$\{|l_m\rangle\}$ 是相应的完备组，可以用作基矢来表示任一态矢量. 由于 Gram-Schmidt 正交化有无限多种方法，这样引入的观测量 $\{\hat{M}_s\}$ 也有无限多种可能.

投影算符的性质 很容易证明，投影算符 $\hat{P}_l=|l\rangle\langle l|$ 是厄米的，具有本征值 0 和 1. 我们来证明后一点. 由于

$$\hat{P}_l^2=|l\rangle\langle l|\cdot|l\rangle\langle l|=|l\rangle\langle l|=\hat{P}_l,$$

有

$$\hat{P}_l^2-\hat{P}_l=\hat{P}_l(\hat{P}_l-1)=0.$$

把它作用在 $\hat{P}_l$ 的本征态上，就得到本征值的关系 $P_l(P_l-1)=0$，给出 $P_l=0$ 或 1. 显然，$|l'\rangle$ 是 $\hat{P}_l$ 的本征态，$l=l'$ 时本征值为 1，$l\neq l'$ 时本征值为 0，

$$\hat{P}_l|l\rangle=|l\rangle,\quad \hat{P}_l|l'\rangle=0,\quad l\neq l'.$$

此外，

$$\hat{P}_{ll'}=\hat{P}_l+\hat{P}_{l'},\quad l\neq l',$$

也是投影算符，具有本征值 0 或 1，它把任一态投影到 ll' 平面.

3. 连续谱的情形

如果基矢 $\{|q\rangle\}$ 的参数 $q=(q_1,q_2,\cdots,q_N)$ 取值是连续的，对它的求和就要换成积分，对基矢内积 $\langle q|q'\rangle$ 的归一化也就需要重新考虑. 内积 $\langle q|q'\rangle$ 一般都出现在积分里，如果把求和换成积分

$$\sum_q\rightarrow\int\mathrm{d}qw(q)=\int\mathrm{d}q_1\int\mathrm{d}q_2\cdots\int\mathrm{d}q_Nw(q_1,q_2,\cdots,q_N),\tag{3}$$

其中 $w(q)=w(q_1,q_2,\cdots,q_N)$ 是某种权函数，则把内积 $\langle q|q'\rangle$ 用 δ 函数归一成

$$\langle q|q'\rangle=w^{-1}(q)\delta(q-q'),\tag{4}$$

就有对应关系

$$\sum_l\langle l|l'\rangle=1\rightarrow\int\mathrm{d}qw(q)\langle q|q'\rangle=1.$$

为了简洁起见，在上面我们采用了简写

$$\langle q|q'\rangle=\langle q_N,\cdots,q_2,q_1|q_1,q_2,\cdots,q_N\rangle$$

和

$$\delta(q-q')=\delta(q_1-q_1')\delta(q_2-q_2')\cdots\delta(q_N-q_N').$$

采用这种归一化，$\{|q\rangle\}$的完备性公式为

$$\int dq|q\rangle w(q)\langle q| = 1, \tag{5}$$

态矢量$|\psi\rangle$的展开式为

$$|\psi\rangle = \int dq w(q)\psi(q)|q\rangle, \tag{6}$$

其中

$$\psi(q) = \langle q|\psi\rangle.$$

对于混合谱的情形，既有对离散本征值的求和，也有对连续本征值的积分，基矢内积对离散本征值归一为 Kronecker 符号，对连续本征值归一为 δ 函数．可以仿照上述讨论，我们就不在此具体写出．

§2.2 表象和表象变换

1. 分立谱基矢$\{|l\rangle\}$的表象

态矢量和内积的表示 在态矢量$|\psi\rangle$的展开式

$$|\psi\rangle = \sum_l \psi_l|l\rangle$$

中，我们把它在基矢上的投影$\psi_l=\langle l|\psi\rangle$称为它的表示或坐标，有时也简单地把上式称为它的表示．类似地，左矢量$\langle\varphi|$的表示为

$$\langle\varphi| = \sum_l \varphi_l^*\langle l|,$$

其中$\varphi_l=\langle l|\varphi\rangle$．利用基矢的完备性，可以推出内积的表示

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|1|\psi\rangle = \sum_l\langle\varphi|l\rangle\langle l|\psi\rangle = \sum_l \varphi_l^*\psi_l. \tag{7}$$

不难看出，这一结果也可以利用基矢的正交归一性由上述$\langle\varphi|$与$|\psi\rangle$的表示相乘而得．

用矩阵的形式，我们可以把右矢量$|\psi\rangle$的表示写成列矢量

$$\psi = (\psi_r) \equiv \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix},$$

其中我们改用数字 1，2，…，n 来标记基矢 $|l)$，n 是基矢的总数. 类似地，我们可以把左矢量的表示写成行矢量

$$\bar{\varphi} = \varphi^\dagger = (\varphi_r)^\dagger \equiv (\varphi_1^* \varphi_2^* \cdots \varphi_n^*),$$

而把内积 $(\varphi|\psi)$ 的表示写成行矢量与列矢量之积

$$\bar{\varphi}\psi = (\varphi_1^* \quad \varphi_2^* \quad \cdots \quad \varphi_n^*) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} = \sum_r \varphi_r^* \psi_r.$$

线性算符的表示 利用基矢的完备性，可以推出线性算符 $\hat{A}$ 的表示

$$\hat{A} = 1 \cdot \hat{A} \cdot 1 = \sum_{rs} |r)(r|\hat{A}|s)(s| = \sum_{rs} |r)A_{rs}(s|, \tag{8}$$

其中

$$A_{rs} = (r|\hat{A}|s)$$

是它把 $|s)$ 投影到 $|r)$ 的系数，称为 $\hat{A}$ 在 r 与 s 态之间的矩阵元，$\{A_{rs}\}$ 则是 $\hat{A}$ 在此表象中的表示. 写成矩阵的形式，有

$$A = (A_{rs}) = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix}.$$

可以看出，厄米算符的矩阵元与其交换下标后的复数共轭相等，

$$A_{rs} = A_{sr}^*.$$

交换一个矩阵的下标后再取其复数共轭，所得的矩阵称为这个矩阵的厄米共轭，简称为其共轭. 我们把矩阵 A 的共轭记为 $A^\dagger$，把

等于它自己的厄米共轭的矩阵称为**厄米矩阵**或**自共轭矩阵**，简称**自轭矩阵**. 显然，厄米矩阵以从其左上角到右下角的对角线为轴转180°后再取复数共轭是不变的，它的**对角矩阵元**是实数. 上式表明厄米算符的表示矩阵为厄米矩阵.

不难证明，与表象基矢相应的观测量完全集对易的算符 $\hat{F}$ 的矩阵是**对角矩阵**，其对角矩阵元是 $\hat{F}$ 的本征值 F_r，非对角矩阵元全为 0，

$$F = (F_{rt}) = \begin{pmatrix} F_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & F_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & F_n \end{pmatrix}$$

单位算符 1 的矩阵称为**单位矩阵**，它的对角元都是 1，非对角元全为 0，

$$1 = (\delta_{rt}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

最后，利用基矢的完备性，可以推出线性算符乘积 $\hat{A}\hat{B}$ 的表示

$$\hat{A}\hat{B} = 1 \cdot \hat{A} \cdot 1 \cdot \hat{B} \cdot 1 = \sum_{rts} |r\rangle\langle r|\hat{A}|t\rangle\langle t|\hat{B}|s\rangle\langle s|$$

$$= \sum_{rs} |r\rangle(\hat{A}\hat{B})_{rs}\langle s|,$$

其中

$$(\hat{A}\hat{B})_{rs} = \sum_t A_{rt}B_{ts}.$$

可以看出，这个结果等于矩阵 A 与 B 的乘积：*两个算符之积的表示矩阵，等于每个算符的表示矩阵之积.*

算符与态矢量的积 对于线性算符 $\hat{A}$ 与态矢量 $|\psi\rangle$ 的积 $|\varphi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$，类似地有

$$\sum_r \varphi_r|r\rangle = 1 \cdot \hat{A} \cdot 1 \cdot |\psi\rangle = \sum_{rs} |r\rangle\langle r|\hat{A}|s\rangle\langle s|\psi\rangle$$

$$= \sum_{rs} A_{rs}\psi_s |r\rangle,$$

所以

$$\varphi_r = \sum_s A_{rs}\psi_s.$$

写成矩阵关系就是 $\varphi = A\psi$，亦即

$$\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}.$$

类似地，$\langle\varphi| = \langle\psi|\hat{A}$ 的表示 $\varphi^\dagger = \psi^\dagger A$ 可以写成

$$(\varphi_1^* \quad \varphi_2^* \quad \cdots \quad \varphi_n^*) = (\psi_1^* \quad \psi_2^* \quad \cdots \quad \psi_n^*) \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix},$$

$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$ 的表示可以写成

$$\varphi^\dagger A\psi = (\varphi_1^* \quad \varphi_2^* \quad \cdots \quad \varphi_n^*) \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}.$$

2. 连续谱基矢 $\{|q\rangle\}$ 的表象

态矢量的表示　把求和换成积分，把 Kronecker 符号换成 δ 函数，加入适当的权函数 $w(q)$，就有

$$|\psi\rangle = \int dq w(q)\psi(q)|q\rangle,$$

$$\langle\varphi| = \int dq w(q)\varphi^*(q)\langle q|,$$

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int dq w(q)\varphi^*(q)\psi(q), \tag{9}$$

其中

$$\psi(q) = \langle q|\psi\rangle, \quad \varphi(q) = \langle q|\varphi\rangle.$$

与矩阵的情形相应地，我们把 $\psi(q)$ 称为列矢量，把 $\varphi^*(q)$ 称为行矢量. $\psi(q)$ 也就是态 $|\psi\rangle$ 在此表象中的波函数.

线性算符的表示 同样地，我们有

$$\hat{A} = \iint \mathrm{d}q\mathrm{d}q' \, |q\rangle w(q) A(q,q') w(q') \langle q'|,$$

其中

$$A(q,q') = \langle q|\hat{A}|q'\rangle$$

是算符 A 在此表象中的矩阵元. 特别是，与表象基矢相应的观测量完全集对易的算符 $\hat{F}$ 的对角矩阵是

$$F(q,q') = F(q) w^{-1}(q) \delta(q-q'),$$

而单位矩阵是

$$\langle q|q'\rangle = w^{-1}(q)\delta(q-q').$$

其中 $F(q)$ 是 $\hat{F}$ 在 $|q\rangle$ 态的本征值. 此外也容易证明，$\hat{A}\hat{B}$ 的 (q,q') 矩阵元是

$$(\hat{A}\hat{B})(q,q') = \int \mathrm{d}q'' A(q,q'') w(q'') B(q'',q').$$

算符与态矢量的积 类似地我们可以得到 $|\varphi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$，$\langle\varphi| = \langle\psi|\hat{A}$ 和 $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$ 的表示分别为

$$\varphi(q) = \int \mathrm{d}q' A(q,q') w(q') \psi(q'),$$

$$\varphi^*(q) = \int \mathrm{d}q' \psi^*(q') w(q') A(q',q),$$

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \iint \mathrm{d}q\mathrm{d}q' \varphi^*(q) w(q) A(q,q') w(q') \psi(q'). \quad (10)$$

3. 表象变换

不同表象的选择 对于一个具体物理问题，可以选择不同的表象. 不同的表象给出的物理结果一样，但算法不同. 所以，常常要做从一个表象到另一表象的变换. 考虑分别用完备组 $\{|ql\rangle\}$ 与

$\{|pm\rangle\}$做基矢的两个表象，其中 q 与 p 有连续谱，l 与 m 是分立谱. 它们的正交归一化和完备性公式分别为

$$\langle lq|q'l'\rangle = w_l^{-1}(q)\delta(q-q')\delta_{ll'},$$

$$\sum_l \int \mathrm{d}q\,|ql\rangle w_l(q)\langle lq| = 1,$$

$$\langle mp|p'm'\rangle = w_m^{-1}(p)\delta(p-p')\delta_{mm'},$$

$$\sum_m \int \mathrm{d}p\,|pm\rangle w_m(p)\langle mp| = 1.$$

下面我们来考虑从$\{|ql\rangle\}$表象到$\{|pm\rangle\}$表象的变换.

态矢量和算符的表象变换 利用$\{|ql\rangle\}$的完备性公式，可以写出态矢量$|\psi\rangle$在$\{|pm\rangle\}$表象的波函数

$$\psi_m(p) = \langle mp|\psi\rangle = \sum_l \int \mathrm{d}q\langle mp|ql\rangle w_l(q)\langle lq|\psi\rangle$$

$$= \sum_l \int \mathrm{d}q S_{ml}(p,q) w_l(q)\psi_l(q),$$

其中 $\psi_l(q)=\langle lq|\psi\rangle$是态矢量$|\psi\rangle$在$\{|ql\rangle\}$表象的波函数，而

$$S_{ml}(p,q) = \langle mp|ql\rangle$$

称为从$\{|ql\rangle\}$表象到$\{|pm\rangle\}$表象变换的变换矩阵. 类似地，可以求出算符的表象变换

$$A_{mm'}(p,p') = \sum_{ll'} \iint \mathrm{d}q\mathrm{d}q' S_{ml}(p,q) w_l(q)$$

$$\cdot A_{ll'}(q,q') w_{l'}(q') S^*_{m'l'}(p',q'),$$

其中 $A_{ll'}(q,q')=\langle lq|\hat{A}|q'l'\rangle$是算符 $\hat{A}$ 在$\{|ql\rangle\}$表象的表示，$A_{mm'}(p,p')=\langle mp|\hat{A}|p'm'\rangle$是算符 $\hat{A}$ 在$\{|pm\rangle\}$表象的表示.

变换矩阵的幺正性 利用$\{|ql\rangle\}$的完备性公式，我们有

$$\sum_l \int \mathrm{d}q S_{ml}(p,q) w_l(q) S^*_{m'l}(p',q)$$

$$= \sum_l \int \mathrm{d}q\langle mp|ql\rangle w_l(q)\langle lq|p',m'\rangle$$

$$= \langle mp|p'm'\rangle = w_m^{-1}(p)\delta(p-p')\delta_{mm'}.$$

上式左边是变换矩阵及其厄米共轭之积 $SS^\dagger$，右边是单位矩阵，这就表示变换矩阵是幺正的，

$$\hat{S}\hat{S}^\dagger = 1.$$

同样有 $\hat{S}^\dagger\hat{S}=1$. 这是在表象变换中态矢量的长度和内积保持不变的结果. 实际上，基矢的变换 $|lq\rangle\to|mp\rangle$ 是一个幺正变换.

4. Löwdin-Боголюбов 变换

不正交的基矢 在有些物理问题中，特别是在一些以**变分法近似**为基础的物理模型中，所采用的基矢往往是不正交的. 假设 $\{|\phi_n\rangle\}=(|\phi_1\rangle,|\phi_2\rangle,\cdots,|\phi_N\rangle)$ 是一个完备组，能够用来表示任一态矢量 $|\psi\rangle$，

$$|\psi\rangle=\sum_n f_n|\phi_n\rangle, \tag{11}$$

但是它们互相不正交，

$$s_{nm}=\langle\phi_n|\phi_m\rangle=\delta_{nm}+\Lambda_{nm}\begin{cases}=1, & n=m,\\ \neq 0, & n\neq m,\end{cases}$$

其中 Λ_{nm} 当 $n=m$ 时为 0，当 $n\neq m$ 时通常为一小量，s_{nm} 称为态 $|\phi_n\rangle$ 与 $|\phi_m\rangle$ 的重叠积分. 在这种情况下，展开式(11)中的系数 $f_n\neq\langle\phi_n|\psi\rangle$，基矢 $\{|\phi_n\rangle\}$ 也没有完备性公式，

$$\sum_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\neq 1,$$

从而，表象理论的许多公式都不适用.

Löwdin-Боголюбов 正交化 可以用 Gram-Schmidt 程序把基矢 $\{|\phi_n\rangle\}$ 正交化，但是这样得到的新的基矢 $|\varphi_n\rangle$ 一般来说与 $|\phi_n\rangle$ 相差很远，没有一个简单清楚的物理图像. 所以，我们希望找到一个**非幺正的和可逆的**线性变换 (L_{mn})，

$$|\varphi_n\rangle=\sum_m|\phi_m\rangle L_{mn}, \quad |\phi_n\rangle=\sum_m|\varphi_m\rangle L^{-1}_{mn},$$

使得 $\{|\varphi_n\rangle\}$ 是正交归一化的，

$$(\varphi_n|\varphi_m) = \delta_{nm},$$

并且$|\varphi_n)$与$|\phi_n)$的差是一小量.

写成矩阵形式,我们有

$$s = \phi^\dagger \phi = 1 + \Lambda,$$

$$\varphi = \phi L, \quad \phi = \varphi L^{-1},$$

$$\varphi^\dagger \varphi = 1.$$

若令L是厄米的,则不难证明其逆变换L^{-1}也是厄米的,

$$L^\dagger = L, \quad (L^{-1})^\dagger = L^{-1}.$$

于是我们有

$$s = (\varphi L^{-1})^\dagger (\varphi L^{-1}) = (L^{-1})^\dagger \varphi^\dagger \varphi L^{-1} = (L^{-1})^\dagger L^{-1} = L^{-2},$$

从而可以解出

$$L = s^{-1/2}, \quad L^{-1} = s^{1/2}.$$

代入$s=1+\Lambda$,展开成Λ的幂级数,就有

$$L = 1 - \frac{1}{2}\Lambda + \frac{3}{8}\Lambda^2 - \frac{5}{16}\Lambda^3 + \frac{35}{128}\Lambda^4 - \cdots,$$

$$L^{-1} = 1 + \frac{1}{2}\Lambda - \frac{1}{8}\Lambda^2 + \frac{1}{16}\Lambda^3 - \frac{5}{128}\Lambda^4 + \cdots.$$

这样得到的正交化,称为 Löwdin-Боголюбов 正交化,与之相应的基矢变换则称为 Löwdin-Боголюбов 变换①. 当重叠积分Λ很小时,只保留它的一次项,我们有

$$|\varphi_n) = |\phi_n) - \frac{1}{2}\sum_m |\phi_m)\Lambda_{mn},$$

$$|\phi_n) = |\varphi_n) + \frac{1}{2}\sum_m |\varphi_m)\Lambda_{mn},$$

可以看出,态$|\varphi_n)$的主要成分是$|\phi_n)$,但还以重叠积分的数量级混入了一些其他态$|\phi_m)$,$m\neq n$.

---

① P. O. Löwdin, *J. Chem. Phys.* **18** (1950) 365; H. H. 博戈留波夫,《量子统计学》,杨棨译,科学出版社,北京,1959年.

§2.3 Schrödinger 表象和动量表象

1. Schrödinger 表象

基矢 以体系的 Descartes 直角坐标本征态为基矢的表象称为 Schrödinger 表象，或坐标表象. 选取体系的全体 Descartes 直角坐标 $\{\hat{q}\}=(\hat{q}_1,\hat{q}_2,\cdots,\hat{q}_N)$ 为观测量完全集，可以证明，其本征值有连续谱(参阅第三章 §3.1 中的 Pauli 定理). 于是，正交归一化关系和完备性公式分别为

$$(q|q')=\delta(q-q'),\quad \int dq\,|q)(q|=1, \tag{12}$$

这里我们选择权函数为 $w(q)=1$.

态矢量和只依赖于坐标的算符的表示 态矢量 $|\psi)$ 和只依赖于坐标的算符 $\hat{Q}(\hat{q})$ 的表示是

$$(q|\psi)=\psi(q)=\psi(q_1,q_2,\cdots,q_N),$$
$$(q|\hat{Q}(\hat{q})|q')=Q(q)\delta(q-q'),$$

其中 $Q(q)=Q(q_1,q_2,\cdots,q_N)$ 是 $\hat{Q}(\hat{q})$ 在 $|q)$ 上的本征值. 由此，可得以下更常用的公式

$$(q|\hat{Q}(\hat{q})|\psi)=Q(q)\psi(q).$$

坐标算符的函数对态矢量的作用在坐标表象中的表示，等于其本征值乘以波函数.

动量算符的表示 现在我们利用 Heisenberg 对易关系

$$[\hat{q}_r,\hat{p}_s]=i\hbar\delta_{rs}$$

来求动量算符的表示. $r\neq s$ 时上式为 0. 求它当 $r=s$ 时的表示，有

$$(q|\hat{q}_r\hat{p}_r-\hat{p}_r\hat{q}_r|q')=i\hbar\delta(q-q').$$

由于 $|q)$ 和 $|q')$ 是 $\hat{q}_r$ 的本征态，分别具有本征值 q 和 q'，于是上式成为

$$(q_r-q_r')(q|\hat{p}_r|q')=i\hbar\delta(q-q').$$

与 δ 函数的性质 $x\delta'(x)=-\delta(x)$ 对照，并注意到 $x\delta(x)=0$，就有

$$(q|\hat{p}_r|q')=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}\delta(q-q')+f_r(q)\delta(q-q'),$$

其中 $f_r(q)$ 是 q 的任意实函数. $f_r(q)$ 之所以是实的，是由于 $\hat{p}_r$ 是厄米的. 于是，我们有

$$(q|\hat{p}_r|q')=\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}+f_r(q)\right](q|q'),$$

$$(q|\hat{p}_r|\psi)=\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}+f_r(q)\right](q|\psi).$$

$f_r(q)$ 的选择　考虑幺正变换

$$|q)\to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\gamma}(\hat{q})}|q)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma(q)}|q),\tag{13}$$

其中 $\gamma(q)$ 为任意实函数. 这相当于一个表象变换，但是变换前后的基矢描述同一物理态. 用 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma(q)}|q)$ 代替前面的 $|q)$，就有

$$\begin{aligned}(q|\hat{p}_r|\psi)&=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma(q)}\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}+f_r(q)\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma(q)}(q|\psi)\\&=\left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}-\hbar\frac{\partial\gamma(q)}{\partial q_r}+f_r(q)\right](q|\psi).\end{aligned}$$

所以，只要选择 $\gamma(q)$ 使得

$$f_r(q)=\hbar\frac{\partial\gamma(q)}{\partial q_r},$$

就有

$$(q|\hat{p}_r|\psi)=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}\psi(q).$$

动量算符 $\hat{p}_r$ 对态矢量的作用在坐标表象中的表示，在适当选择基矢的相因子时，等于微分算符 $-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_r$ 作用于波函数. 类似地还有

$$(q|\hat{p}_r|q')=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}\delta(q-q').$$

于是，对于任一依赖于坐标和动量的算符 $\hat{F}(\hat{q}_r,\hat{p}_s)$，有

$$(q|\hat{F}(\hat{q}_r,\hat{p}_s)|q')=F\left(q_r,-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_s}\right)\delta(q-q'),$$

$$\langle q|\hat{F}(\hat{q}_r,\hat{p}_s)|\psi\rangle = F\left(q_r, -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_s}\right)\psi(q).$$

由于坐标和动量算符存在对易关系，在 $\hat{F}(\hat{q}_r,\hat{p}_s)$ 当中如果有坐标和动量算符相乘的交叉项，需要特别讨论.

小结 *在坐标表象中，坐标算符和动量算符对态矢量的作用，对应于以下算符对波函数的作用：*

$$\hat{q}_r \to q_r, \quad \hat{p}_r \to -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}. \tag{14}$$

例：动量本征态 动量本征值方程 $\hat{p}_r|p\rangle = p_r|p\rangle$ 在坐标表象中的表示是

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}\varphi_p(q) = p_r\varphi_p(q),$$

其中 $\varphi_p(q)=\langle q|p\rangle$ 是动量本征态的坐标表象波函数. 上述方程的解为

$$\varphi_p(q) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{N/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}pq/\hbar}, \quad pq = \sum_r p_r q_r, \tag{15}$$

其中 N 是体系的自由度，因子 $1/(2\pi\hbar)^{N/2}$ 是归一化常数，使得

$$\langle p|p'\rangle = \int \mathrm{d}q\varphi_p^*(q)\varphi_{p'}(q) = \delta(p-p').$$

2. 动量表象

基矢 *以体系的动量本征态为基矢的表象称为动量表象.* 选取体系的全体动量 $\{p\}=(p_1,p_2,\cdots,p_N)$ 为观测量完全集，可以证明，其本征值有连续谱(参阅第三章 §3.1 中的 Pauli 定理). 于是，正交归一化关系和完备性公式分别为

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p'), \quad \int \mathrm{d}p|p\rangle\langle p| = 1,$$

这里选择权函数 $w(p)=1$.

态矢量和算符的表示 对于态矢量 $|\psi\rangle$ 和只依赖于动量的算符 $\hat{P}(\hat{p})$，我们有

$$\langle p|\psi\rangle = \psi(p) = \psi(p_1, p_2, \cdots, p_N),$$
$$\langle p|\hat{P}(\hat{p})|p'\rangle = P(p)\delta(p-p'),$$
$$\langle p|\hat{P}(\hat{p})|\psi\rangle = P(p)\psi(p),$$

其中 $P(p)=P(p_1, p_2, \cdots, p_N)$ 是 $\hat{P}(\hat{p})$ 在 $|p\rangle$ 上的本征值. 与上一小节类似地,利用 Heisenberg 对易关系,可以得到坐标算符 $\hat{q}_r$ 和只依赖于坐标的算符 $\hat{Q}(\hat{q})$ 的表示

$$\langle p|\hat{q}_r|p'\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_r}\delta(p-p'),$$
$$\langle p|\hat{Q}(\hat{q})|\psi\rangle = Q\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_r}\right)\psi(p).$$

一般地,对于任一依赖于坐标和动量的算符 $\hat{F}(\hat{q}_r, \hat{p}_s)$,有

$$\langle p|\hat{F}(\hat{q}_r, \hat{p}_s)|\psi\rangle = F\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_r}, p_s\right)\psi(p).$$

在动量表象中,坐标算符和动量算符对态矢量的作用,对应于以下算符对波函数的作用:

$$\hat{q}_r \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p_r},\quad \hat{p}_s \to p_s. \tag{16}$$

同样,在 $\hat{F}(\hat{q}_r, \hat{p}_s)$ 中如果有坐标和动量算符相乘的交叉项,需要特别讨论.

显然,动量表象中的坐标本征态波函数,是坐标表象中动量本征态波函数的复数共轭,

$$\varphi_q(p) = \langle p|q\rangle = \overline{\langle q|p\rangle} = \varphi_p^*(q) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{N/2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qp/\hbar}.$$

3. 动量表象波函数与坐标表象波函数之间的变换

利用上述波函数 $\langle q|p\rangle=\varphi_p(q)$ 和 $\langle p|q\rangle=\varphi_q(p)$,我们可以写出动量表象波函数 $\psi(p)$ 与坐标表象波函数 $\psi(q)$ 之间的变换:

$$\psi(p) = \langle p|\psi\rangle = \int\mathrm{d}q\langle p|q\rangle\langle q|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{N/2}}\int\mathrm{d}q\mathrm{e}^{-\mathrm{i}qp/\hbar}\psi(q), \tag{17}$$

$$\psi(q) = \langle q|\psi\rangle = \int \mathrm{d}p\langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{N/2}}\int \mathrm{d}p\mathrm{e}^{\mathrm{i}pq/\hbar}\psi(p). \tag{18}$$

可以看出，波函数 $\langle q|p\rangle = \varphi_p(q)$ 和 $\langle p|q\rangle = \varphi_q(p)$ 是这里的变换矩阵，上述变换则是数学上的 Fourier 变换.

§ 2.4 居位数表象

1. 居位数的定义和对易关系

居位数的定义 考虑坐标算符 $\hat{q}_r$ 与动量算符 $\hat{p}_r$ 的线性组合

$$\hat{a}_r = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha_r\hat{q}_r + \frac{\mathrm{i}}{\hbar\alpha_r}\hat{p}_r\right), \tag{19}$$

$$\hat{a}_r^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha_r\hat{q}_r - \frac{\mathrm{i}}{\hbar\alpha_r}\hat{p}_r\right), \tag{20}$$

其中 α_r 为正实数，量纲为长度的倒数，使得 $\hat{a}_r$ 与 $\hat{a}_r^\dagger$ 不带单位. 我们引入

$$\hat{n}_r = \hat{a}_r^\dagger\hat{a}_r, \quad r = 1, 2, \cdots, N.$$

不难看出，这是一组厄米算符，称为*居位数算符*. 可以证明它们互相对易，互相独立. 于是，可以用它们作为观测量的完全集，用它们的共同本征态作为表象的基矢. 利用以下关系

$$\hat{q}_r = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha_r}(\hat{a}_r + \hat{a}_r^\dagger),$$

$$\hat{p}_r = -\frac{\mathrm{i}\hbar\alpha_r}{\sqrt{2}}(\hat{a}_r - \hat{a}_r^\dagger),$$

就可以把坐标算符与动量算符的函数表示成 $\{\hat{a}_r\}$ 与 $\{\hat{a}_r^\dagger\}$ 的函数.

对易关系 利用坐标与动量的对易关系，可以得到下列对易关系：

$$[\hat{a}_r, \hat{a}_s] = 0, \quad [\hat{a}_r^\dagger, \hat{a}_s^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_r, \hat{a}_s^\dagger] = \delta_{rs},$$

$$[\hat{n}_r,\hat{a}_s^\dagger]=\hat{a}_r^\dagger\delta_{rs},\quad [\hat{n}_r,\hat{a}_s]=-\hat{a}_r\delta_{rs},$$

$$[\hat{n}_r,(\hat{a}_s^\dagger)^m]=m(\hat{a}_r^\dagger)^m\delta_{rs},\quad [\hat{n}_r,(\hat{a}_s)^m]=-m(\hat{a}_r)^m\delta_{rs},$$

$$[\hat{n}_r,(\hat{a}_s^\dagger)^l(\hat{a}_s)^m]=(l-m)(\hat{a}_r^\dagger)^l(\hat{a}_r)^m\delta_{rs}.$$

当 $l=m=1$ 时，上述最后一式成为 $\hat{n}_r\hat{n}_s-\hat{n}_s\hat{n}_r=0$，表明 $\hat{n}_r$ 与 $\hat{n}_s$ 对易.

本征值方程 设居位数 $\{\hat{n}_r\}$ 的共同本征态为 $|n\rangle$，具有本征值 n，

$$\hat{n}_r|n\rangle=n_r|n\rangle,$$

并选取归一化

$$\langle n|n'\rangle=\delta_{nn'}.$$

这里我们采用了简写

$$n=(n_1,n_2,\cdots,n_N),\quad |n\rangle=|n_1,n_2,\cdots,n_N\rangle$$

和

$$\delta_{nn'}=\delta_{n_1n_1'}\delta_{n_2n_2'}\cdots\delta_{n_Nn_N'}.$$

由于不同下标的算符互相对易，可以分别独立地讨论. 以下我们只讨论某一个下标的情形，为了简洁起见，略去下标不写. 这也相当于只讨论 $N=1$ 的情形.

2. 居位数的本征值和本征态

移位算 由对易关系 $\hat{n}\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{n}=\hat{a}^\dagger$，有

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

这表明，$\hat{a}^\dagger|n\rangle$ 也是居位数 $\hat{n}$ 的本征态，本征值为 $n+1$，

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle=C_n^+|n+1\rangle.$$

类似地，由对易关系 $\hat{n}\hat{a}-\hat{a}\hat{n}=-\hat{a}$，有

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

这表明，$\hat{a}|n\rangle$ 也是居位数 $\hat{n}$ 的本征态，本征值为 $n-1$，

$$\hat{a}|n\rangle=C_n^-|n-1\rangle.$$

$\hat{a}^\dagger$ 作用到居位数 $\hat{n}$ 的本征态上，得到本征值增加 1 的态；$\hat{a}$ 作用

到居位数 $\hat{n}$ 的本征态上，得到本征值减少 1 的态. 所以，$\hat{a}^\dagger$ 称为居位数 n 的升位算符，$\hat{a}$ 称为居位数 n 的降位算符，合称居位数的移位算符.

C_n^+ 与 C_n^- 的值 由于 $|n\rangle$ 是归一的，我们有

$$\langle n|\hat{n}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n.$$

另一方面，上式左边可以写成

$$\langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = C_n^{-*}C_n^-,$$

所以有 $C_n^{-*}C_n^- = n$，于是可以取

$$C_n^- = \sqrt{n},$$

这里可以有一个任意相因子的不确定. 此外，由于

$$C_n^{+*} = \overline{\langle n+1|\hat{a}^\dagger|n\rangle} = \langle n|\hat{a}|n+1\rangle = \langle n|C_{n+1}^-|n\rangle = C_{n+1}^-.$$

于是可以取

$$C_n^+ = \sqrt{n+1}.$$

最后我们得到下列公式：

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \tag{21}$$

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle. \tag{22}$$

居位数的本征值和本征态 由

$$n = C_n^{-*}C_n^- \geqslant 0,$$

我们知道 n 有下限，

$$n \geqslant \underline{n}.$$

由于 $\underline{n}$ 是本征值的下限，用降位算符作用于 $|\underline{n}\rangle$ 必须等于 0，

$$\hat{a}|\underline{n}\rangle = \sqrt{\underline{n}}\,|\underline{n}-1\rangle = 0.$$

从而

$$\underline{n} = 0.$$

于是我们求得居位数本征值谱

$$n = 0,1,2,\cdots.$$

居位数 $n=0$ 的态 $|0\rangle$ 可以称为基态. 不难证明本征态 $|n\rangle$ 可以写成

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^{n}|0\rangle. \tag{23}$$

3. 一些有用的矩阵元

用对易关系和上一小节给出的公式，可以算出下列矩阵元：

$$\langle n|\hat{n}|n'\rangle = n\delta_{nn'},$$

$$\langle n|\hat{a}^{\dagger}|n'\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{nn'+1},$$

$$\langle n|\hat{a}|n'\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{nn'-1},$$

$$\langle n|\hat{q}|n'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha}(\sqrt{n+1}\,\delta_{nn'-1} + \sqrt{n}\,\delta_{nn'+1}),$$

$$\langle n|\hat{p}|n'\rangle = -\frac{\mathrm{i}\hbar\alpha}{\sqrt{2}}(\sqrt{n+1}\,\delta_{nn'-1} - \sqrt{n}\,\delta_{nn'+1}).$$

这里我们采用了简写

$$\delta_{nn'\pm 1} = \delta_{n,n'\pm 1}.$$

写成矩阵，有

$$(\hat{n}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 2 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix},$$

$$(\hat{a}^{\dagger}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix},$$

$$(\hat{a}) = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix},$$

$$(\hat{q})=\frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha}\begin{pmatrix}0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots\\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots\\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix},$$

$$(\hat{p})=-\frac{\mathrm{i}\hbar\alpha}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & \sqrt{1} & 0 & \cdots\\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdots\\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix}.$$

4. 波函数 $\varphi_n(q)$和 $\varphi_n(p)$

基态波函数 $\varphi_0(q)$ 基态满足的方程 $\hat{a}|0\rangle=0$ 可以写成

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha\hat{q}+\frac{\mathrm{i}}{\hbar\alpha}\hat{p}\right)|0\rangle=0.$$

它在坐标表象的表示为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha q+\frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial q}\right)\varphi_0(q)=0,$$

其中 $\varphi_0(q)=\langle q|0\rangle$. 令 $\xi=\alpha q$,上式可以约化为

$$\left(\xi+\frac{\partial}{\partial\xi}\right)\varphi_0=0.$$

很容易求出它的归一化解为

$$\varphi_0(q)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\xi^2/2}=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-\alpha^2q^2/2},$$

它满足归一化条件

$$\langle 0|0\rangle=\int\mathrm{d}q\varphi_0^*(q)\varphi_0(q)=1.$$

激发态波函数 $\varphi_n(q)$ 由上一小节的公式,可以把激发态的归一化矢量$|n\rangle$写成

$$|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha\hat{q}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar\alpha}\hat{p}\right)\right]^n|0\rangle.$$

它在坐标表象的表示为

$$\varphi_n(q) = (q|n) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha q - \frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial q}\right)\right]^n \varphi_0(q)$$

$$= \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}\right)^{1/2}\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n e^{-\xi^2/2}.$$

用恒等式

$$\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right) f(\xi) = e^{\xi^2/2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right) e^{-\xi^2/2} f(\xi), \tag{24}$$

有

$$\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n e^{-\xi^2/2} = e^{-\xi^2/2} H_n(\xi),$$

其中

$$H_n(\xi) = e^{\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \tag{25}$$

为 ξ 的 n 阶 Hermite 多项式. 于是我们最后有

$$\varphi_n(q) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}\,2^n n!}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 q^2/2} H_n(\alpha q). \tag{26}$$

可以直接验证它确实是是归一化的:

$$(n|n) = \int \mathrm{d}q\, \varphi_n^*(q)\varphi_n(q) = 1.$$

波函数 $\varphi_n(p)$ 与上面类似地,在动量表象中,确定基态的方程成为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{i}\hbar\alpha\frac{\partial}{\partial p} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar\alpha}p\right)\varphi_0(p) = 0,$$

其中 $\varphi_0(p) = (p|0)$. 引入无量纲变量 $\xi = p/\hbar\alpha$,上述方程化为

$$\left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right)\varphi_0(p) = 0,$$

可以解出

$$\varphi_0(p) = \left(\frac{1}{\hbar\alpha\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} e^{-p^2/2\hbar^2\alpha^2}.$$

同样地，有

$$\varphi_n(p)=\langle p|n\rangle=(-\mathrm{i})^n\left(\frac{1}{\hbar a\sqrt{\pi}\,2^n n!}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{-p^2/2\hbar^2a^2}H_n(p/\hbar a), \tag{27}$$

其中引入相因子$(-\mathrm{i})^n$，是为了使上式与表象变换

$$\varphi_n(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\mathrm{d}q\mathrm{e}^{-\mathrm{i}pq/\hbar}\varphi_n(q)$$

算得的一致.

5. 算符 $\hat{a}$ 的本征值与本征态

$\hat{a}$ 的本征值 考虑本征值方程

$$\hat{a}|z\rangle=z|z\rangle,\quad \langle z|\hat{a}^\dagger=z^*\langle z|.$$

$\hat{a}$ 不是厄米算符，所以本征值 z 是复数，可以写成 $z=x+\mathrm{i}y$，其中 x 与 y 是实数. 这就表示，$\hat{a}$ 不是一个单纯的观测量，而是联系于两个独立的观测量.

求坐标 $\hat{q}$ 和动量 $\hat{p}$ 在这个态的平均值，有

$$\langle\hat{q}\rangle=\langle z|\hat{q}|z\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}\,a}(\langle z|\hat{a}|z\rangle+\langle z|\hat{a}^\dagger|z\rangle)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}\,a}(z+z^*)=\frac{\sqrt{2}}{a}x,$$

$$\langle\hat{p}\rangle=\langle z|\hat{p}|z\rangle=-\frac{\mathrm{i}\hbar a}{\sqrt{2}}(\langle z|\hat{a}|z\rangle-\langle z|\hat{a}^\dagger|z\rangle)$$

$$=-\frac{\mathrm{i}\hbar a}{\sqrt{2}}(z-z^*)=\sqrt{2}\,\hbar a y.$$

所以，

$$x=\frac{a}{\sqrt{2}}\langle\hat{q}\rangle,\quad y=\frac{1}{\sqrt{2}\,\hbar a}\langle\hat{p}\rangle,$$

x 正比于坐标在本征态$|z\rangle$的平均值，y 正比于动量在本征态$|z\rangle$的平均值.

$\hat{a}$ 本征态在居位数表象中的波函数 把本征态$|z\rangle$在居位数表象中的波函数写成

$$Z_n(z) = \langle n|z\rangle,$$

并注意$\langle n|\hat{a}=\sqrt{n+1}\langle n+1|$，本征值方程$\hat{a}|z\rangle=z|z\rangle$在居位数表象中的表示就可以写成

$$\sqrt{n+1}Z_{n+1} = zZ_n,$$

这里$Z_n=Z_n(z)$. 于是有Z_n的递推关系

$$Z_n = \frac{z}{\sqrt{n}}Z_{n-1} = \cdots = \frac{z^n}{\sqrt{n!}}Z_0.$$

由于$\hat{a}$不是厄米算符，具有不同本征值的本征态$|z\rangle$与$|z'\rangle$互相并不正交. 所以，虽然本征值z具有复平面上的连续谱，仍然可以把态矢量简单地归一到1. 由$|z\rangle$的归一化条件

$$\langle z|z\rangle = \sum_n |Z_n|^2 = |Z_0|^2\sum_n \frac{|z|^{2n}}{n!} = |Z_0|^2 e^{|z|^2} = 1,$$

可以求出

$$Z_0 = e^{-|z|^2/2},$$

这里可以有一个任意相因子的不确定性. 把它代回前面的公式，就有

$$|z\rangle = \sum_n Z_n(z)|n\rangle = \sum_n \frac{e^{-|z|^2/2}z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle,$$

$$Z_n(z) = \frac{e^{-|z|^2/2}z^n}{\sqrt{n!}}.$$

$\hat{a}$ 本征态在坐标表象中的波函数 本征态$|z\rangle$在坐标表象的归一化波函数为

$$Z(z,q) = \langle q|z\rangle = \sum_n \langle q|n\rangle\langle n|z\rangle = \sum_n \varphi_n(q)Z_n$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-(|z|^2+\alpha^2q^2)/2}\sum_n \frac{(z/\sqrt{2})^n}{n!}H_n(\alpha q)$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-(\alpha q - \sqrt{2} z)^2/2}, \tag{28}$$

其中最后一个等式用到了 Hermite 多项式 $H_n(\xi)$的生成函数表达式. 可以看出, $\hat{a}$ 的本征态的坐标表象波函数是以$\sqrt{2}z/\alpha$ 为中心的 Gauss 分布, 其中 z 是坐标与动量在这个本征态的平均值的线性组合.

最后需要指出, 从本征值方程 $\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle$在坐标表象的表示

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi}\right) Z(z,q) = zZ(z,q),$$

可以直接解出上述波函数 $Z(z,q)$, 其中 $\xi = \alpha q$.

§ 2.5 广义 Schrödinger 表象

基矢 以系统的广义坐标本征态为基矢的表象称为广义 Schrödinger 表象, 或广义坐标表象. 选取系统的全体广义坐标$\{\hat{q}\} = (\hat{q}_1, \hat{q}_2, \cdots, \hat{q}_N)$为观测量完全集, 其本征值有连续谱, 正交归一化关系和完备性公式分别为

$$\langle q|q'\rangle = w^{-1}(q)\delta(q - q'), \quad \int \mathrm{d}q w(q)|q\rangle\langle q| = 1,$$

其中权函数 $w(q)$的形式依赖于广义坐标的选择.

态矢量和只依赖于坐标的算符的表示 与态矢量$|\psi\rangle$和只依赖于坐标的算符 $\hat{Q}(\hat{q})$有关的公式是

$$\langle q|\psi\rangle = \psi(q) = \psi(q_1, q_2, \cdots, q_N),$$
$$\langle q|\hat{Q}(\hat{q})|q'\rangle = Q(q)w^{-1}\delta(q - q'),$$
$$\langle q|\hat{Q}(\hat{q})|\psi\rangle = Q(q)\psi(q).$$

广义动量算符的表示 把与上述广义坐标共轭的广义动量记为$\{\hat{p}\} = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \cdots, \hat{p}_N)$, 假设有 Heisenberg 对易关系

$$[\hat{q}_r, \hat{p}_s] = \mathrm{i}\hbar\delta_{rs}.$$

求它在 $r = s$ 时的表示, 有

$$(q_r - q'_r)\langle q|p_r|q'\rangle = \mathrm{i}\hbar w^{-1}(q)\delta(q-q').$$

从而可以写出

$$w(q)\langle q|p_r|q'\rangle = \left[-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r} + F_r(q)\right]\delta(q-q'),$$

于是我们有

$$\langle q|p_r|q'\rangle = \left[-\mathrm{i}\hbar w^{-1}\frac{\partial}{\partial q_r}w + F_r(q)\right]\langle q|q'\rangle.$$

由动量算符的厄米性 $p_r^\dagger = p_r$，可以推出

$$F_r(q) - F_r^*(q) = \mathrm{i}\hbar w^{-1}\frac{\partial w}{\partial q_r}.$$

于是我们有

$$\langle q|p_r|q'\rangle = \left[-\mathrm{i}\hbar w^{-1/2}\frac{\partial}{\partial q_r}w^{1/2} + f_r(q)\right]\langle q|q'\rangle,$$

其中

$$f_r(q) = \mathrm{Re}F_r(q)$$

为 q 的任意实函数. 由对易关系 $[p_r, p_s]=0$，可以得到 $f_r(q)$ 应满足的可积条件

$$\frac{\partial f_r}{\partial q_s} - \frac{\partial f_s}{\partial q_r} = 0.$$

与前面 Schrödinger 表象的做法类似地，作表象变换

$$|q\rangle \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma(q)}|q\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma(q)}|q\rangle,$$

并选择 $\gamma(q)$ 使得

$$f_r(q) = \hbar\frac{\partial\gamma}{\partial q_r},$$

就有

$$\langle q|p_r|\psi\rangle = -\mathrm{i}\hbar w^{-1/2}\frac{\partial}{\partial q_r}w^{1/2}\psi(q).$$

动量算符 p_r 对态矢量的作用在广义坐标表象中的表示，在适当选择基矢的相因子时，等于微分算符 $-\mathrm{i}\hbar w^{-1/2}(\partial/\partial q_r)w^{1/2}$ 作用于波函数.

小结　在广义坐标表象中，坐标算符和动量算符对态矢量的作用，对应于以下算符对波函数的作用：

$$\hat{q}_r \to q_r,\quad \hat{p}_r \to -\mathrm{i}\hbar w^{-1/2}\frac{\partial}{\partial q_r}w^{1/2}. \tag{29}$$

上述公式又称为 Pauli-Podolsky 量子化规则①，它并不包含新的物理，只是 Heisenberg 正则量子化规则在广义坐标中的表示.

权函数 $w(q)$ 的选择　波函数的归一化条件是

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int \mathrm{d}q w(q)\langle\psi|q\rangle\langle q|\psi\rangle = \int \mathrm{d}q w(q)|\psi(q)|^2 = 1.$$

要求上式在广义坐标变换下不变，$w(q)\mathrm{d}q$ 就应是广义坐标空间中的不变体积元，

$$w(q)\mathrm{d}q = \sqrt{g}\,\mathrm{d}q,$$

其中 g 是下述不变线元平方表达式中度规矩阵 g_{rs} 的行列式②：

$$\mathrm{d}s^2 = \sum_{rs} g_{rs}\mathrm{d}q_r\mathrm{d}q_s,$$

$$g = \| g_{rs} \|.$$

显然，当 $\{\hat{q}\}$ 为 Descartes 直角坐标时，

$$g_{rs} = \delta_{rs},\quad w = \sqrt{g} = 1,$$

上述结果简化为普通的 Schrödinger 表象.

例：质点的球极坐标　球极坐标 (r,θ,ϕ) 中的度规矩阵为

$$(g_{rs}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2\sin^2\theta \end{pmatrix},$$

于是有

$$w(r,\theta,\phi) = \sqrt{g} = r^2\sin\theta.$$

---

① W. Pauli, Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik, *Handb. Phys.* **24**, 1 (1933); B. Podolsky, *Phys. Rev.* **32** (1928) 812.

② P. A. M. Dirac, *General Theory of Relativity*, John Wiley, 1975.

§2.6 量子力学的经典极限

理想波包 在第一章§1.3的测不准定理证明中，Schwarz不等式中等号成立的条件是态矢量$|\phi\rangle$与$|\varphi\rangle$平行，亦即

$$|\phi\rangle = \gamma|\varphi\rangle,$$

其中γ是任一大于0的常数. 若取坐标与动量的平均值为0，则有$|\phi\rangle=\mathrm{i}\hat{q}|\psi\rangle$与$|\varphi\rangle=\hat{p}|\psi\rangle$，上式就成为

$$(\hat{q}+\mathrm{i}\gamma\hat{p})|\psi\rangle = 0.$$

不难看出，这正是§2.4中基态满足的方程，它在坐标表象中的归一化解为

$$\psi(q) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-\alpha^2 q^2/2},$$

其中$\alpha=1/\sqrt{\hbar\gamma}$. 这是以原点为中心的Gauss分布，不难算出在这个态上测量坐标和动量的方差分别是

$$\overline{(\Delta q)^2} = \frac{\hbar\gamma}{2}, \quad \overline{(\Delta p)^2} = \frac{\hbar}{2\gamma},$$

它对应于测不准关系中等号成立的情形

$$\Delta q \Delta p = \frac{\hbar}{2}.$$

所以，坐标和动量的测不准量最小的态具有Gauss型波函数. 这是最接近经典描述的态，所以又把这个波函数称为理想波包. 当$\hbar\to 0$时，坐标和动量的测不准量趋于0，波函数的描述应过渡到经典的轨道描述. 相应地，决定波包运动的Schrödinger方程在$\hbar\to 0$时应过渡到决定轨道的经典力学方程. 下面我们就来讨论这种极限过渡.

取Schrödinger表象，把波函数写成

$$\psi(q,t) = \langle q|\psi(t)\rangle = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar},$$

其中振幅A和相位S一般都是坐标q和时间t的函数.

S 的方程 上述波函数在坐标表象的 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}A\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}=H(q_r,-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_r)A\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}. \tag{30}$$

考虑到

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}S/\hbar}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/\hbar}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial q_r}+\frac{\partial S}{\partial q_r},$$

(30)式可以化成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial A}{\partial t}-A\frac{\partial S}{\partial t}=H(q_r,-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_r+\partial S/\partial q_r)A. \tag{31}$$

当 $\hbar\to 0$ 时，略去含 $\hbar$ 的项，上式就成为

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=H(q_r,\partial S/\partial q_r), \tag{32}$$

这正是经典力学的 Hamilton-Jacobi 方程，$H(q_r,p_r)$ 相应于经典力学的 Hamilton 量，$S(q,t)$ 相应于经典力学的作用量函数，而

$$p_r=\frac{\partial S}{\partial q_r}. \tag{33}$$

A 的方程 在(31)中，把 $H(q_r,-\mathrm{i}\hbar\partial/\partial q_r+\partial S/\partial q_r)$ 展开成 $\hbar$ 的幂级数，只保留到 $\hbar$ 的一次项，并代入 Hamilton-Jacobi 方程，经过化简可以得到

$$\frac{\partial A^2}{\partial t}=-\sum_s\frac{\partial}{\partial q_s}\left[A^2\frac{\partial H}{\partial p_s}\right].$$

可以看出，这个方程相应于一个流场的连续性方程，波函数的模方 $A^2(q,t)$ 描述一个守恒流密度，其速度场为

$$\frac{\mathrm{d}q_s}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial H}{\partial p_s}. \tag{34}$$

经典近似成立的条件 在得到 Hamilton-Jacobi 方程(32)时所作的略去 $\hbar$ 的近似，相当于 $\hbar\partial A/\partial q_r \ll A\partial S/\partial q_r$，也就是

$$\frac{1}{A}\frac{\partial A}{\partial q_r}\ll\frac{1}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial q_r}.$$

这就要求，在空间的某一区域内，经过了很多个波长时，振幅没有明显的变化. 换言之，波长应比有关区域的尺度小得多. 在此近似

成立时，若系统在初始时刻为一波包，限制在一小区域内，则守恒流方程保证了它能在一段时间内保持为一波包，而其运动方程为经典力学的 Hamilton-Jacobi 方程. 波包受测不准关系限制，并且逐渐扩散开来.

正则方程 由(33)、(32)和(34)式，可以算出

$$\frac{\mathrm{d}p_s}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial^2 S}{\partial t\partial q_s}+\sum_r\frac{\partial^2 S}{\partial q_r\partial q_s}\frac{\mathrm{d}q_r}{\mathrm{d}t}=-\frac{\partial H}{\partial q_s}. \tag{35}$$

(34)与(35)正是经典力学的 Hamilton 正则方程. 于是，我们在坐标表象中，再一次得到了与上一章§1.4的经典极限一致的结果.

§2.7 量子力学的路径积分形式

1. 跃迁振幅的 Feynman 公式

跃迁振幅的定义 运用时间发展算符 $\hat{T}$，我们可以把系统在坐标表象的波函数写成

$$\begin{aligned}\psi(q,t)&=(q|\psi(t))=(q|\hat{T}|\psi(t_0))\\&=\int\mathrm{d}q_0K(q,t;q_0,t_0)\psi(q_0,t_0),\end{aligned} \tag{36}$$

其中 $\psi(q_0,t_0)=(q_0|\psi(t_0))$.

$$K(q,t;q_0,t_0)=(q|\hat{T}|q_0) \tag{37}$$

是时间发展算符在坐标表象的表示. 称为系统的跃迁振幅或变换函数，它是当 t_0 时处于 q_0 的系统到 t 时跃迁到 q 的概率幅. 我们来推导它的计算公式. 为了简明起见，假设系统只有1个自由度. 最后的结果可以直接推广到多个自由度.

路径积分表示 把时间间隔 $t-t_0$ 划分成 n 等份，

$$\Delta t=\frac{t-t_0}{n},\quad \epsilon=\frac{\Delta t}{\hbar},$$

当 $n\to\infty$ 和 $\epsilon\to 0$ 时，我们就可以把时间发展算符写成 n 个因子的积，

$$\hat{T} = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} = (1 - i\epsilon\hat{H})^n.$$

把它代入跃迁振幅的定义式(37),并运用基矢$\{|q\rangle\}$的完备性公式,就有

$$K(q,t;q_0,t_0) = \int dq_1 \cdots \int dq_{n-1} \langle q|(1 - i\epsilon\hat{H})|q_{n-1}\rangle \cdots \langle q_1|(1 - i\epsilon\hat{H})|q_0\rangle, \tag{38}$$

其中的因子可以写成

$$\begin{aligned}\langle q_{m+1}|(1 - i\epsilon\hat{H})|q_m\rangle &= \int dp_m \langle q_{m+1}|p_m\rangle\langle p_m|(1 - i\epsilon\hat{H})|q_m\rangle \\ &= \int \frac{dp_m}{2\pi\hbar} e^{ip_m(q_{m+1}-q_m)/\hbar}[1 - i\epsilon H(p_m,q_m)],\end{aligned} \tag{39}$$

这里我们代入了动量本征态的波函数

$$\langle q|p\rangle = \exp(ipq/\hbar)/(2\pi\hbar)^{1/2},$$

$H(p,q)$定义为

$$\langle p|\hat{H}|q\rangle = H(p,q)\langle p|q\rangle.$$

在这个定义里,假设$H(p,q)$中不含q与p的交叉项,否则,应取正规乘序,即把算符$\hat{H}$中所有的$\hat{p}$都用对易关系移到$\hat{q}$的左边.

把(39)式代入(38)式,注意到$n\to\infty$和$\epsilon\to 0$时$(q_{m+1}-q_m)/\Delta t\to\dot{q}$,就有

$$K(q,t;q_0,t_0) = \int [Dq][Dp] e^{\frac{i}{\hbar}\int dt[p\dot{q}-H(p,q)]}, \tag{40}$$

其中指数上的积分限为$[t_0,t]$,积分中的q与p都依赖于时间,而

$$[Dq] = \prod_{m=1}^{n-1} dq(t_m), \quad [Dp] = \prod_{m=0}^{n-1} \frac{dp(t_m)}{2\pi\hbar}.$$

(40)式表示在时间t_0与t之间$q(t)$和$p(t)$分别在坐标和动量空间跑遍固定端点之间所有路径的一个无限维积分,简称*路径积分*.这实际上是一种*泛函积分*.

Feynman 公式 对于下列形式的经典 Hamilton 量,

$$H(p,q)=\frac{p^2}{2m}+V(q),\tag{41}$$

我们可以完成(40)式中对动量的积分，最后得到 Feynman 公式

$$K(q,t;q_0,t_0)=\mathscr{N}\int[\mathrm{D}q]\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\mathrm{d}tL(q,\dot{q})},\tag{42}$$

其中

$$L(q,\dot{q})=\frac{1}{2}m\dot{q}^2-V(q)\tag{43}$$

是系统的经典 Lagrange 量. $\mathscr{N}$ 是归一化常数. 它通常在 $n\to\infty$ 时趋于无限，但这并不影响物理结果，因为在实际计算中它总可以消去. 所以，[Dq]可以有一个常数因子(可以是无限大)的不确定.

如果在积分体积元[Dq]中包含所有自由度的贡献，Feynman 公式就推广到多自由度的情形，我们这里就不给出证明. 实际上，Feynman 公式不限于(41)式类型的系统，它对于下列更一般的经典 Lagrange 量也适用：

$$L(q,\dot{q})=\frac{1}{2}\sum_{i,j}\dot{q}_i m_{ij}\dot{q}_j+\sum_i A_i(q)\dot{q}_i-V(q),$$

其中 m 是与 q 无关的实的非奇异矩阵.

2. 路径积分量子化

Feynman 公式与 Schrödinger 方程的等效 对于由(43)式描述的系统，考虑一个很小的时间间隔$[t,t+\varepsilon]$，由 Feynman 公式我们有

$$\begin{aligned}K(q,t;q_0,t_0)&=C\exp\left[\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}L\left(\frac{q+q_0}{2},\frac{q-q_0}{\varepsilon},t\right)\right]\\&=C\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m\eta^2}{2\varepsilon^2}-V(q+\eta/2,t)\right]\right\},\end{aligned}$$

其中 $\eta=q_0-q$. 把上式代入波函数的公式(36)，就有

$$\psi(q,t+\varepsilon)=C\int\mathrm{d}\eta\exp\left\{\frac{\mathrm{i}\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m\eta^2}{2\varepsilon^2}-V(q+\eta/2,t)\right]\right\}\psi(q+\eta,t).$$

当 $\epsilon\to0^+$ 时,对积分的贡献主要来自 $\eta\sim0$ 的区域,我们有

$$\psi(q,t)+\epsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}=C\int d\eta\exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right)\left[1-\frac{i\epsilon}{\hbar}V(q,t)\right]\cdot\left[\psi(q,t)+\eta\frac{\partial\psi}{\partial q}+\frac{\eta^2}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial q^2}+\cdots\right].$$

完成积分以后,上式中 ϵ 的 0 次和 1 次项分别给出

$$C\int d\eta\exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon}\right)=1$$

和

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}+V(q)\right]\psi(q,t).$$

上面第一个方程给出常数 C 的表达式,第二个方程则正是系统的 Schrödinger 方程.

路径积分量子化 从上面的推导可以看出,我们从跃迁振幅的 Feynman 路径积分公式出发,可以推出 Schrödinger 方程,而在 Schrödinger 方程中,自动地得到了动能算符的表达式

$$\frac{p^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}.$$

所以,在 Feynman 的路径积分公式中已经包含了正则量子化的内容. 这种方式的量子化,称为*路径积分量子化*. 在规范场的量子理论中,采用路径积分量子化更方便. 这就是量子力学的路径积分形式受到广泛重视的原因.

量子力学的路径积分形式 正则量子化是 Heisenberg 测不准原理的结果, Schrödinger 方程则是量子力学的运动方程,这二者构成了量子力学计算的核心. 这种形式的量子力学,称为*正则形式的量子力学*. 既然 Feynman 的路径积分公式包括了这两方面的内容. 自然就可以想到,我们可以把 Feynman 的路径积分公式作为量子力学的一条基本原理,用来取代关于量子化规则的 Heisenberg 测不准原理和关于态矢量随时间变化的 Schrödinger 方程. 量子力学的这种形式,称为*量子力学的路径积分形式*.

在量子力学的路径积分形式中，基本原理有三条：**态的叠加原理，波函数的统计诠释，和跃迁振幅的 Feynman 公式.** Feynman 公式中的

$$S = \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t L(q,\dot{q})$$

是系统的作用量，所以 Feynman 公式的物理含义是：*t_0 时处于 q_0 的系统到 t 时跃迁到 q 的概率幅，对于固定在这两个端点之间的所有路径都是等权的，总的概率幅等于各个路径的贡献按相位 $S/\hbar$ 叠加的结果. S 是系统的作用量.* 这就是在量子力学的路径积分形式中用来取代 Heisenberg 测不准原理和 Schrödinger 方程的一条**物理原理**，我们可以把它称为*量子作用量原理*. 在正则形式的量子力学中，问题的核心是写出系统的 Hamilton 算符 $\hat{H}$，而在路径积分形式的量子力学中，问题的核心则是写出系统的经典 Lagrange 量 L 或作用量 S.

第三章　基本观测量

由于有测不准，量子态的概率幅分布在位形空间，是一个数学上的场. 对于一个场来说，它在整体上的一些对称性，无疑是描述这个场的最重要的特征，能够联系于这个场的重要物理观测量. 我们在本章着重讨论与量子态的时空对称性相联系的物理观测量，然后讨论与全同粒子交换对称性相联系的物理观测量. 时空对称性是一种几何对称性或运动学对称性，全同粒子交换对称性则是一种物理对称性或动力学对称性. 除了本章的讨论外，我们还将在第五章讨论与交换正反粒子的对称性相联系的物理观测量，而在第八章讨论与场的整体规范不变性相联系的物理观测量.

§3.1　动量和能量

1. 空间平移和动量

空间平移　选择 Schrödinger 表象，系统的波函数 $\psi(\boldsymbol{r})=\langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle$ 就是在空间中分布的一个**波场**，这里 $\boldsymbol{r}=(x,y,z)$ 是用 Descartes 直角坐标表示的系统的空间位置矢量. 我们来讨论这个波场在空间平移时的性质. 考虑态矢量的幺正变换

$$|\psi\rangle\rightarrow U|\psi\rangle,$$

它把系统做了一个空间平移 $\boldsymbol{d}$. 平移后系统波函数在 $\boldsymbol{r}$ 点的值应该等于平移前系统波函数在 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{d}$ 点的值，我们可以写出

$$\psi(\boldsymbol{r})\rightarrow\psi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{d})=\langle\boldsymbol{r}-\boldsymbol{d}|\psi\rangle=\langle\boldsymbol{r}|U|\psi\rangle.$$

这个式子也可看成是基矢的变换

$$|\boldsymbol{r}\rangle \to |\boldsymbol{r}-\boldsymbol{d}\rangle = \hat{U}^{-1}|\boldsymbol{r}\rangle,$$

它把坐标本征态从本征值为 $\boldsymbol{r}$ 的 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 变到本征值为 $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{d}$ 的 $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{d}\rangle$. 这相当于把空间坐标架做了一个平移 $-\boldsymbol{d}$. 显然,这两种观点是等效的.

$\hat{U}$ 是幺正的,所以当 $\boldsymbol{d}\to 0$ 时可以写成

$$\hat{U} = 1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{d}\cdot\hat{\boldsymbol{p}},$$

其中 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 是生成空间无限小平移 $\boldsymbol{d}$ 的厄米算符,可以作为一个表征系统空间平移特征的观测量. 如果空间平移 $\boldsymbol{d}$ 不是无限小,我们可以把它分成 n 等份,并令 $n\to\infty$. 于是,空间平移 $\boldsymbol{d}$ 可以看成相继 n 次小平移的结果,我们有

$$\hat{U} = \lim_{n\to\infty}\left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\boldsymbol{d}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}}{n}\right)^n = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{d}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar}.$$

动量 与态矢量的幺正变换 $|\psi\rangle\to\hat{U}|\psi\rangle$ 相应地,观测量算符的变换是

$$\hat{A}\to\hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1}.$$

于是,坐标算符的空间平移可以写成

$$\hat{\boldsymbol{r}} - \boldsymbol{d} = \hat{U}\hat{\boldsymbol{r}}\hat{U}^{-1}.$$

当 $\boldsymbol{d}$ 为一沿 x 轴的无限小位移时,它给出

$$\hat{x} - d = \left(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}\hat{p}_x\right)\hat{x}\left(1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}\hat{p}_x\right) = \hat{x} - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}\hat{p}_x\hat{x} + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{x}\mathrm{d}\hat{p}_x,$$

其中已经略去 d 的二次项. 上式化简后成为

$$[\hat{x},\hat{p}_x] = \hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = \mathrm{i}\hbar,$$

这正是坐标与其正则共轭动量的 Heisenberg 对易关系. 所以,*在 x 轴上生成无限小平移变换的厄米算符 $\hat{p}_x$ 联系于系统在 x 轴的正则共轭动量算符*. 类似地,$\hat{p}_y$ 和 $\hat{p}_z$ 分别是系统在 y 和 z 轴的正则共轭动量算符.

由以上讨论可以看出,*量子力学里的动量,是表征系统在空间平移变换下的特征的物理观测量*. 在原则上,我们可以把这个生成

系统无限小平移变换的厄米算符作为系统动量算符的定义. 这是系统动量的非经典定义. 与此相联系地,我们可以把这个定义作为一条基本假设,用来代替 Heisenberg 测不准原理和正则量子化假设. 这样做,在大多数情形是可行的,只是在一些特殊情形,就需要引入新的量子化假设. 比如我们在第四章将要讨论的宏观量子力学,和在第八章将要讨论的场的量子化,都要用到正则量子化. 正是因为这个原因,我们还是把 Heisenberg 测不准原理作为量子力学的基本原理,而把空间平移变换与动量算符的联系,作为对量子力学动量的物理含义的一种深入的理解.

空间平移不变性 如果系统在空间平移以后的态 $\hat{U}|\psi\rangle$ 与原来的态 $|\psi\rangle$ 都满足 Schrödinger 方程,是同一量子态,则这个系统就具有空间平移不变性. 用空间平移的幺正算符 $\hat{U}$ 作用到 Schrödinger 方程上,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}|\psi\rangle = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}\hat{U}|\psi\rangle,$$

要求上式是关于态 $\hat{U}|\psi\rangle$ 的 Schrödinger 方程,这就要求系统的 Hamilton 算符在空间平移变换下不变, $\hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}=\hat{H}$,亦即

$$[\hat{p},\hat{H}] = 0.$$

所以,对于具有空间平移不变性的系统,动量算符 $\hat{p}$ 与系统的 Hamilton 算符对易,动量是系统的守恒量,可以有能量与动量的共同本征态 $|Ep\rangle$.

从动量本征态的波函数

$$\varphi_p(r) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p\cdot r/\hbar}$$

可看出,空间平移后的态与原来的态只差一个常数相位 $-p\cdot d/\hbar$,描述同一个量子态,确实具有空间平移不变性.

2. 时间平移和能量

Pauli 定理 我们先来证明,在量子力学里时间只能作为一个

参数，而不是一个表示成算符的物理观测量. 换句话说，时间 t 与所有的观测量算符都是对易的，不能像上一小节那样来处理时间 t 与系统 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 的关系. 特别是，不存在与正则坐标和正则共轭动量的对易关系对应的下列对易关系①：

$$[\hat{t},\hat{H}] = \mathrm{i}\hbar. \tag{1}$$

这个结论称为 Pauli 定理. 它的证明如下：

如果有上述对易关系，则与正则坐标和正则共轭动量类似地，也有下列对易关系：

$$[\hat{H},\hat{F}] = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial t},$$

其中 $\hat{F}$ 是 t 的函数，可以展开成 t 的幂级数. 于是，假设 $|E\rangle$ 是 $\hat{H}$ 的本征态，

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

则有

$$\hat{H}\mathrm{e}^{\mathrm{i}at}|E\rangle = \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}at}\hat{H} - \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{e}^{\mathrm{i}at}\right)\right]|E\rangle = (E+\hbar a)\mathrm{e}^{\mathrm{i}at}|E\rangle,$$

其中 a 是任一实数. 上式表明，$\exp(\mathrm{i}at)|E\rangle$ 也是 $\hat{H}$ 的本征态，具有本征值 $(E+\hbar a)$，

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}at}|E\rangle = C|E+a\hbar\rangle,$$

其中 C 是一个常数. 由于 a 是任意实数，这就表明 $\hat{H}$ 的本征值具有从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 的连续谱. 这与实验不符，实验表明束缚态的能量本征值是离散谱. 所以，时间不可能作为一个具有(1)式那样对易关系的观测量算符.

用同样的方法，可以从正则坐标与其正则共轭动量的 Heisenberg 对易关系证明它们的本征值都具有从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 的连续谱.

时间平移 我们选择 Schrödinger 绘景，把时间 t 当作描述系

---

① W. Pauli, Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik, *Handb. Phys.* 24, I (1933); P. Carruthers and M. M. Nieto, *Rev. Mod. Phys.* 40 (1968) 411.

统量子态的一个参数. 对系统作时间平移 Δ,系统的态矢量就要作相应的幺正变换

$$|\psi(t)\rangle \to \hat{U}|\psi(t)\rangle.$$

系统时间平移 Δ 以后的态,等于系统原来在 $t-\Delta$ 时的态,

$$\hat{U}|\psi(t)\rangle = |\psi(t-\Delta)\rangle.$$

所以,对系统作时间平移 Δ,相当于把时间坐标的原点提前 Δ.

把上式右边在 t 点展开成 Δ 的 Taylor 级数,就得到时间平移算符的表达式

$$\hat{U} = \mathrm{e}^{-\Delta \mathrm{d}/\mathrm{d}t}.$$

注意时间平移算符是一个作用于时间参数 t 的微分算符.

通过 Schrödinger 方程

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

可以把作用于时间参数 t 的微分算符 $\mathrm{d}/\mathrm{d}t$ 联系于系统的 Hamilton 算符 $\hat{H}$,我们可以有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}.$$

但是,上式不是恒等式,仅当两边作用于系统的态矢量时成立,因为 Schrödinger 方程并不是对任何态矢量都成立的恒等式,而是一个对系统态矢量的约束条件. 实际上,微分算符 $\mathrm{d}/\mathrm{d}t$ 只从左边作用于时间的函数,而算符 $\hat{H}$ 作用于任何左矢量和右矢量.

在作用于系统态矢量的意义上,我们可以把时间平移算符写成

$$\hat{U} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta\hat{H}/\hbar}.$$

这就表明,量子力学里的能量,是表征系统在时间平移变换下的特征的物理观测量.

时间平移不变性 如果系统在时间平移后的态 $\hat{U}|\psi(t)\rangle$ 与原来的态 $|\psi(t)\rangle$ 都满足 Schrödinger 方程,是同一量子态,则这个系统就具有时间平移不变性. 用无限小时间平移算符 $\hat{U}=1-\Delta\mathrm{d}/\mathrm{d}t$

作用到 Schrödinger 方程上，并作代换 $t\to t'=t-\Delta$，就有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}\hat{U}|\psi\rangle=\hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}\hat{U}|\psi\rangle=\left(\hat{H}-\Delta\frac{\partial\hat{H}}{\partial t'}\right)\hat{U}|\psi\rangle.$$

要求上式是关于时间平移态 $\hat{U}|\psi\rangle$ 的 Schrödinger 方程，就要求

$$\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0.$$

所以，具有时间平移不变性的系统，Hamilton 算符 $\hat{H}$ 不显含时间，系统处于能量具有确定值的定态，能量不会随时间改变，是一个守恒量.

从定态波函数

$$|\psi(t)\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(t-t_0)/\hbar}|\psi(t_0)\rangle$$

可以看出，时间平移后的态与原来的态只差一个常数相位 $E\Delta/\hbar$，描述同一个量子态，确实具有时间平移不变性.

§3.2　角　动　量

1. 空间转动和角动量

坐标空间中的转动矩阵　考虑系统绕 z 轴转过角度 ϕ 的变换. 系统中的一点 $\boldsymbol{r}$ 在这个转动下转到了 $\boldsymbol{r}'$，我们有

$$\begin{pmatrix}x'\\y'\\z'\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\phi&-\sin\phi&0\\\sin\phi&\cos\phi&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\y\\z\end{pmatrix}.$$

上式可以简写成 $\boldsymbol{r}'=g(\boldsymbol{k},\phi)\boldsymbol{r}$，其中 $\boldsymbol{k}$ 是沿 z 轴的单位矢量，$g(\boldsymbol{k},\phi)$ 是上述转动矩阵. 类似地，系统绕 x 轴转 α 角和绕 y 轴转 β 角的转动矩阵分别为

$$g(\boldsymbol{i},\alpha)=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&\cos\alpha&-\sin\alpha\\0&\sin\alpha&\cos\alpha\end{pmatrix},\quad g(\boldsymbol{j},\beta)=\begin{pmatrix}\cos\beta&0&\sin\beta\\0&1&0\\-\sin\beta&0&\cos\beta\end{pmatrix}.$$

于是，系统绕 $\boldsymbol{n}$ 方向转过一个无限小角度 θ 的转动矩阵可以写成

$$g(\boldsymbol{n},\theta)=\begin{bmatrix}1 & -\theta_z & \theta_y\\ \theta_z & 1 & -\theta_x\\ -\theta_y & \theta_x & 1\end{bmatrix},$$

而

$$\boldsymbol{r}'=g(\boldsymbol{n},\theta)\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}+\boldsymbol{\Theta}\times\boldsymbol{r},$$

其中 $\boldsymbol{\Theta}=(\boldsymbol{n},\theta)=(\theta_x,\theta_y,\theta_z)$.

空间转动和角动量 我们来考虑把态矢量$|\psi\rangle$转动到$\hat{U}|\psi\rangle$的无限小幺正变换,

$$\hat{U}=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{\Theta}\cdot\hat{\boldsymbol{l}},\tag{2}$$

其中$\hat{\boldsymbol{l}}$是生成这个空间无限小转动变换的厄米算符.转动后系统波函数在$\boldsymbol{r}$点的值应该等于转动前系统波函数在$g(\boldsymbol{n},-\theta)\boldsymbol{r}$点的值,我们可以写出

$$\psi(\boldsymbol{r})\to\psi(g(\boldsymbol{n}-\theta)\boldsymbol{r})=\langle g(\boldsymbol{n},-\theta)\boldsymbol{r}|\psi\rangle=\langle\boldsymbol{r}|\hat{U}|\psi\rangle.$$

这个式子也可看成是基矢的变换

$$|\boldsymbol{r}\rangle\to|g(\boldsymbol{n},-\theta)\boldsymbol{r}\rangle=\hat{U}^{-1}|\boldsymbol{r}\rangle,$$

它把坐标本征态从本征值为$\boldsymbol{r}$的$|\boldsymbol{r}\rangle$变到本征值为$g(\boldsymbol{n},-\theta)\boldsymbol{r}$的$|g(\boldsymbol{n},-\theta)\boldsymbol{r}\rangle$.这相当于把空间坐标架被了一个转动$g(\boldsymbol{n},-\theta)$.同样,这两种观点是等效的.

与态矢量的空间转动$|\psi\rangle\to\hat{U}|\psi\rangle$相应地,观测量算符的变换为$\hat{A}\to\hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1}$.于是,坐标算符$\hat{\boldsymbol{r}}$的变换可以写成

$$\hat{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{\Theta}\times\hat{\boldsymbol{r}}=\hat{U}\hat{\boldsymbol{r}}\hat{U}^{-1}.$$

把(2)式代入,化简后可得

$$[\hat{x},\hat{l}_x]=0,\quad[\hat{y},\hat{l}_x]=-\mathrm{i}\hbar\hat{z},\quad[\hat{z},\hat{l}_x]=\mathrm{i}\hbar\hat{y},$$

$$[\hat{x},\hat{l}_y]=\mathrm{i}\hbar\hat{z},\quad[\hat{y},\hat{l}_y]=0,\quad[\hat{z},\hat{l}_y]=-\mathrm{i}\hbar\hat{x},$$

$$[\hat{x},\hat{l}_z]=-\mathrm{i}\hbar\hat{y},\quad[\hat{y},\hat{l}_z]=\mathrm{i}\hbar\hat{x},\quad[\hat{z},\hat{l}_z]=0.$$

由它们可以解出

$$\hat{l}_x=\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y,\quad\hat{l}_y=\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z,\quad\hat{l}_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x,$$

或者简写成

$$\hat{l} = \hat{r} \times \hat{p}.$$

这正是轨道角动量算符. 所以,生成无限小空间转动变换的厄米算符联系于系统的角动量. 换句话说,量子力学里的角动量,是表征系统在空间转动变换下的特征的物理观测量.

与上一节同样地,对于有限角度 Θ 的转动,我们有

$$\hat{U} = e^{-i\Theta\cdot\hat{l}/\hbar}.$$

空间转动不变性 如果系统在空间转动以后的态 $\hat{U}|\psi\rangle$ 与原来的态 $|\psi\rangle$ 都满足 Schrödinger 方程,是同一量子态,则这个系统就具有空间转动不变性. 与前面讨论空间平移不变性的做法一样,用空间转动的幺正算符 $\hat{U}$ 作用到 Schrödinger 方程上,要求得到的方程是关于空间转动态 $\hat{U}|\psi\rangle$ 的 Schrödinger 方程,就要求系统的 Hamilton 算符在空间转动下不变,亦即

$$[\hat{l}, \hat{H}] = 0.$$

具有空间转动不变性的系统,其角动量算符与 Hamilton 算符对易,系统具有能量与角动量的共同本征态、系统的角动量是守恒量.

下面我们就来讨论角动量的本征值和本征态.

2. 角动量本征值

角动量算符的定义和基本关系 我们把满足以下对易关系的厄米算符 $\hat{J}=(\hat{J}_x,\hat{J}_y,\hat{J}_z)$ 定义为角动量算符:

$$[\hat{J}_x,\hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y,\hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z,\hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y. \tag{3}$$

可以看出,从其中的一个对易关系,在 x,y,z 之间作循环置换,就可以得到另外两个. 于是,可以一般地写成

$$[\hat{J}_i,\hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k, \quad i,j,k = 1,2,3,$$

其中 $(\hat{J}_1,\hat{J}_2,\hat{J}_3)=(\hat{J}_x,\hat{J}_y,\hat{J}_z)$,而 ϵ_{ijk} 是如下定义的完全反对称张量:

$$\begin{cases}\epsilon_{123}=1,\\ \epsilon_{ijk}=-\epsilon_{ikj}=-\epsilon_{jik}.\end{cases}$$

利用坐标算符 $\hat{x},\hat{y},\hat{z}$ 与动量算符 $\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z$ 之间的 Heisenberg 对易关系，可以证明上一小节给出的轨道角动量算符 $\hat{l}_x,\hat{l}_y,\hat{l}_z$ 满足上述对易关系(3). 利用角动量算符的对易关系(3)，可以得到以下对易关系：

$$[\hat{J}^2,\hat{J}_x]=[\hat{J}^2,\hat{J}_y]=[\hat{J}^2,\hat{J}_z]=0,$$

其中

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

于是，虽然 $\hat{J}_x,\hat{J}_y,\hat{J}_z$ 之间互相不对易，它们没有共同本征态，但是其中之一可以与 $\hat{J}^2$ 有共同本征态.

我们还可以定义下述**角动量移位算符**：

$$\hat{J}_\pm=\hat{J}_x\pm\mathrm{i}\hat{J}_y.$$

容易证明，

$$\hat{J}_\pm^\dagger=\hat{J}_\mp,$$

$$[\hat{J}^2,\hat{J}_\pm]=0,$$

$$[\hat{J}_z,\hat{J}_\pm]=\pm\hbar\hat{J}_\pm,$$

$$\hat{J}^2=\hat{J}_-\hat{J}_++\hat{J}_z(\hat{J}_z+\hbar)=\hat{J}_+\hat{J}_-+\hat{J}_z(\hat{J}_z-\hbar).$$

$\hat{J}^2$ 与 $\hat{J}_z$ 的本征值 设 $\hat{J}^2$ 与 $\hat{J}_z$ 的归一化共同本征态为 $|jm\rangle$. 可以写成

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

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

其中 $j\geqslant0$，$|jm\rangle$的正交归一化关系为

$$\langle mj|j'm'\rangle=\delta_{jj'}\delta_{mm'}.$$

由 $\hat{J}^2=\hat{J}_x^2+\hat{J}_y^2+\hat{J}_z^2$，我们有

$$\begin{aligned}j(j+1)\hbar^2&=\langle jm|\hat{J}_x^2|jm\rangle+\langle jm|\hat{J}_y^2|jm\rangle+\langle jm|\hat{J}_z^2|jm\rangle\\&\geqslant\langle jm|\hat{J}_z^2|jm\rangle=m^2\hbar^2,\end{aligned}$$

所以 m 有上界 $\bar{m}$ 和下界 $\underline{m}$，

$$\bar{m}^2, \underline{m}^2 \leqslant j(j+1).$$

下面我们用移位算符 $\hat{J}_\pm$ 来定出 $\bar{m}$ 和 $\underline{m}$. 由于 $\hat{J}_\pm$ 与 $\hat{J}^2$ 对易，所以 $\hat{J}_\pm|jm\rangle$ 也是 $\hat{J}^2$ 的本征态，具有同样的本征值 $j(j+1)\hbar^2$. 此外，由于

$$\hat{J}_z\hat{J}_\pm|jm\rangle = (\hat{J}_\pm\hat{J}_z \pm \hbar\hat{J}_\pm)|jm\rangle = (m\pm 1)\hbar\hat{J}_\pm|jm\rangle,$$

所以 $\hat{J}_\pm|jm\rangle$ 也是 $\hat{J}_z$ 的本征态，本征值从 $m\hbar$ 移到 $(m\pm 1)\hbar$. 于是，可以写出

$$\hat{J}_\pm|jm\rangle = C^\pm_{jm}\hbar|jm\pm 1\rangle, \tag{4}$$

其中 $C^\pm_{jm}$ 是待定常数.

用升位算符 $\hat{J}_+$ 相继作用于态 $|j\underline{m}\rangle$，或者用降位算符 $\hat{J}_-$ 相继作用于态 $|j\bar{m}\rangle$，我们就可以得到本征态组 $|j\underline{m}\rangle$，$|j\underline{m}+1\rangle$，$|j,\underline{m}+2\rangle$，…，$|j\bar{m}-1\rangle$，$|j\bar{m}\rangle$，与它们相应的本征值谱为

$$m = \underline{m}, \underline{m}+1, \underline{m}+2, \cdots, \bar{m}-1, \bar{m}.$$

由于 $\hat{J}_+|j\bar{m}\rangle=0$，用 $\hat{J}^2=\hat{J}_-\hat{J}_++\hat{J}_z(\hat{J}_z+\hbar)$ 作用在 $|j\bar{m}\rangle$ 态上，可以得到

$$j(j+1)-\bar{m}(\bar{m}+1)=0.$$

这个方程有两个解，$\bar{m}=j$ 和 $-j-1$. 由于 $\bar{m}$ 是 m 的上界，所以取

$$\bar{m}=j.$$

类似地，由于 $\hat{J}_-|j\underline{m}\rangle=0$，用 $\hat{J}^2=\hat{J}_+\hat{J}_-+\hat{J}_z(\hat{J}_z-\hbar)$ 作用在 $|j\underline{m}\rangle$ 态上，可以得到

$$j(j+1)-\underline{m}(\underline{m}-1)=0.$$

这个方程有两个解，$\bar{m}=-j$ 和 $j+1$. 由于 $\underline{m}$ 是 m 的下界，所以取

$$\underline{m}=-j.$$

所以 m 的可能值为

$$m=-j, -j+1, -j+2, \cdots, j-1, j.$$

由于 $\underline{m}=-j$ 和 $\bar{m}=j$ 这两个解是惟一确定的，所以 m 除了上述值以外不可能再有别的值. 于是，$-j$ 与 j 间只差一个整数或 0，

$$j-(-j)=2j=0,1,2,3,\cdots,$$

最后得到

$$j=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\cdots.$$

角动量平方的量子数 j 可以取 0,整数或半奇数,角动量投影的量子数 m 则取 $-j$ 到 j 之间的 $2j+1$ 个值,这是从角动量算符的对易关系推出的普遍结论. 除了角动量算符的对易关系以外,具体的问题还有别的具体条件. 我们将在下一节证明,轨道角动量平方的量子数只能取 0 或整数,而不能取半奇数.

3. 角动量本征态

$C^{\pm}_{jm}$的确定 求(4)式的模方,由于 $|jm\rangle$ 是归一化的,我们可以得到

$$\begin{aligned}C^{\pm *}_{jm}C^{\pm}_{jm}\hbar^2&=\langle mj|\hat{J}^{\dagger}_{\pm}\hat{J}_{\pm}|jm\rangle=\langle mj|\hat{J}^2-\hat{J}_z(\hat{J}_z\pm\hbar)|jm\rangle\\&=[j(j+1)-m(m\pm 1)]\hbar^2.\end{aligned}$$

从上式可以解出

$$C^{\pm}_{jm}=\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)},$$

其中可以有一个相因子的不确定,不同作者往往有他自己习惯的选择,我们这里取 Condon-Shortley 约定①. 于是,(4)式成为

$$\hat{J}_{\pm}|jm\rangle=\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\hbar\,|jm\pm 1\rangle. \tag{5}$$

用 $|jj\rangle$ 或 $|j-j\rangle$ 表示的本征态 $|jm\rangle$ 用升位算符相继作用于 $|j-j\rangle$,或用降位算符相继作用于 $|jj\rangle$,并运用(5)式,可以得到

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

---

① E. U. Condon and G. H. Shortley, *The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge, 1957; A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton, 1960.

$$= \sqrt{\frac{(j+m)!}{(2j)!(j-m)!}}\left(\frac{\hat{J}_-}{\hbar}\right)^{j-m}|jj\rangle.$$

定理　任何一个转动不变的算符 $\hat{K}$，在 $\{|jm\rangle\}$ 表象中的非 0 矩阵元均与 m 无关. 证明如下：

题设 $\hat{K}$ 转动不变，有 $[\hat{K},\hat{J}]=0$，于是

$$\langle m\pm 1j|\hat{K}|jm\pm 1\rangle = \frac{\langle mj|\hat{J}_{\mp}\hat{K}|jm\pm 1\rangle}{\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}}$$

$$= \frac{\langle mj|\hat{K}\hat{J}_{\mp}|jm\pm 1\rangle}{\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}} = \langle mj|\hat{K}|jm\rangle.$$

4. 转动矩阵 $\mathscr{D}^j_{mm'}(g)$

定义　把在空间转动下态矢量的变换 $|\psi\rangle\to\hat{U}|\psi\rangle$ 写在角动量表象 $\{|jm\rangle\}$ 中，就有

$$\psi_{jm} = \langle mj|\psi\rangle \to \langle mj|\hat{U}|\psi\rangle = \sum_{m'}\mathscr{D}^j_{mm'}\psi_{jm'},$$

其中

$$\mathscr{D}^j_{mm'} = \langle mj|e^{-i\theta\cdot\hat{J}/\hbar}|jm'\rangle \tag{6}$$

称为角动量空间的转动矩阵，简称转动矩阵或 $\mathscr{D}^j$ 矩阵. 可以看出，D^j 矩阵是系统在坐标空间转动下引起态矢量变换的幺正算符在角动量表象中的表示矩阵. $\mathscr{D}^j$ 矩阵作用于 $|jm\rangle$ 所张的 $2j+1$ 维空间，只改变角动量的投影 J_z，不改变角动量的大小 J^2.

定理　如果 $\{|jm\rangle, m=-j,-j+1,\cdots,j\}$ 为 $2j+1$ 个正交归一化的态矢量，在坐标空间的转动下按 $\mathscr{D}^j$ 矩阵变换，

$$e^{-i\theta\cdot\hat{J}/\hbar}|jm\rangle = \sum_{m'}|jm'\rangle\mathscr{D}^j_{m'm},$$

则 $|jm\rangle$ 必定是 $\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的共同本征态，满足

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

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

$$\hat{J}_\pm|jm\rangle = \sqrt{(j\mp 1)(j\pm m+1)}\hbar|jm\pm 1\rangle.$$

证明 首先，在方程

$$e^{-i\theta\cdot J/\hbar}|jm\rangle = \sum_{m'}|jm'\rangle\langle m'j|e^{-i\theta\cdot J/\hbar}|jm\rangle \tag{7}$$

的两边对 θ 微商两次，再令 $\theta\to 0$，可得

$$\hat{J}_n^2|jm\rangle = \sum_{m'}|jm'\rangle\langle m'j|\hat{J}_n^2|jm\rangle,$$

在上式中 n 分别取 i,j,k，对它们求和，就有

$$\begin{aligned}\hat{J}^2|jm\rangle &= \sum_{m'}|jm'\rangle\langle m'j|\hat{J}^2|jm\rangle \\ &= \sum_{m'}|jm'\rangle j(j+1)\hbar^2\delta_{m'm} = j(j+1)\hbar^2|jm\rangle.\end{aligned}$$

其次，在(7)式两边对 θ 微商一次，再令 $\theta\to 0$，并取 n 在 z 轴，就有

$$\begin{aligned}\hat{J}_z|jm\rangle &= \sum_{m'}|jm'\rangle\langle m'j|\hat{J}_z|jm\rangle \\ &= \sum_{m'}|jm'\rangle m\hbar\delta_{m'm} = m\hbar|jm\rangle.\end{aligned}$$

与上面类似地，取 n 在 x 和 y 轴，就有

$$\begin{aligned}\hat{J}_\pm|jm\rangle &= \sum_{m'}|jm'\rangle\langle m'j|\hat{J}_\pm|jm\rangle \\ &= \sum_{m'}|jm'\rangle\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\hbar\delta_{m'm\pm 1} \\ &= \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\hbar|jm\pm 1\rangle.\end{aligned}$$

§ 3.3 轨道角动量和自旋角动量

1. 轨道角动量和 Schrödinger 波函数的单值性

轨道角动量算符及本征值方程的球坐标表示 从 Descartes 直角坐标 (x,y,z) 变换到球极坐标 (r,θ,ϕ)，

$$x = r\sin\theta\cos\phi,$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi,$$

$$z = r\cos\theta,$$

在上一节轨道角动量的公式中代入动量算符在坐标表象中的表示,就可以得到轨道角动量平方 $\hat{l}^2$ 及其投影 $\hat{l}_z$ 在坐标表象中的表示

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right),$$

$$\hat{l}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}.$$

于是,轨道角动量平方 $\hat{l}^2$ 及其投影 $\hat{l}_z$ 的共同本征态的坐标表象波函数 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi)=(\boldsymbol{r}|lm)$ 由下述本征值方程确定:

$$-\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi)$$
$$= l(l+1)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi),$$

$$-\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\phi}\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi) = m\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi).$$

它们可以分离变量,$\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi)$,上述方程分别化为 $\Theta(\theta)$ 与 $\Phi(\phi)$ 的方程,

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}-\frac{m^2}{\sin^2\theta}+l(l+1)\right]\Theta(\theta)=0, \tag{8}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi}\Phi(\phi)=\mathrm{i}m\Phi(\phi). \tag{9}$$

l 和 m 的值 作代换 $\zeta=\cos\theta$ 和 $\Theta(\theta)=(1-\zeta^2)^{|m|/2}p(\zeta)$,方程(8)成为

$$(1-\zeta^2)p''-2(|m|+1)\zeta p'+(l-|m|)(l+|m|+1)p=0.$$

求级数解

$$p=\sum_{k=0}^{\infty}a_k\zeta^k,$$

可得系数的递推关系

$$a_{k+2}=\frac{(k+|m|-l)(k+|m|+l+1)}{(k+2)(k+1)}a_k.$$

当 $k\to\infty$ 时 $a_{k+2}/a_k\to1$,级数发散,除非中断为多项式,即

$$l=|m|+n,$$

其中 n 为零或正整数. 对于给定的 l, 上式表明, m 的最大值 $\overline{m}$ 和最小值 $\underline{m}$ 满足

$$\overline{m} = -\underline{m} = l, \tag{10}$$

以及 m 的增量为 1, 从而 $\overline{m}$ 与 $\underline{m}$ 只能相差 0 或一正整数,

$$\overline{m} = \underline{m} + k, \quad k = 0, 1, 2, \cdots. \tag{11}$$

代入(10)式, 得 $l = -l + k$, 所以

$$l = \frac{k}{2} = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots,$$

而(10)和(11)式限定了

$$m = -l, -l+1, \cdots, l-1, l.$$

$Y_{lm}(\theta,\phi)$的解 上述 $p(\zeta)$ 的方程是 Jacobi 方程①

$$(1-x^2)y'' - [\alpha - \beta + (\alpha+\beta+2)x]y' + n(n+\alpha+\beta+1)y = 0$$

取 $\alpha = \beta = |m|$ 和 $n = l - |m|$ 的情形, 所以它的正常解可以用 Jacobi 多项式 $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ 来表示,

$$p(\zeta) = P_{l-|m|}^{(|m|,|m|)}(\zeta).$$

Jacobi 多项式的 Rodrigues 公式为

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta} \cdot \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n [(1-x)^{n+\alpha}(1+x)^{n+\beta}],$$

所以可引入函数

$$P_l^m(\zeta) = (-1)^{l-|m|}\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!} \cdot \frac{1}{2^l \Gamma(l+1)(1-\zeta^2)^{|m|/2}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta}\right)^{l-|m|}(1-\zeta^2)^l, \tag{12}$$

而把本征值方程(8)和(9)的解写成

---

① M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, National Bureau of Standards, Washington, D.C., 1965.

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=N_{lm}P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}, \tag{13}$$

其中归一化常数 N_{lm}可由 Jacobi 多项式的正交关系

$$\int_{-1}^{1}dx(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}[P_n^{(\alpha,\beta)}(x)]^2$$

$$=\frac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n+\alpha+\beta+1}\frac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{n!\Gamma(n+\alpha+\beta+1)}$$

算得

$$N_{lm}=\pm\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}},$$

其中正负号的选择，我们约定对 $m\leqslant 0$ 取正号，对 $m>0$ 取$(-1)^m$. 当 l 取整数时，(12)式给出连带 Legendre 函数，而(13)式给出通常的球谐函数，可以由它们算出 $Y_{lm}(\theta,\phi)$的具体表达式. 一般地，我们有

$$Y_{lm}^*(\theta,\phi)=(-1)^m Y_{l,-m}(\theta,\phi),$$

$$Y_{lm}(\pi-\theta,\phi+\pi)=(-1)^l Y_{lm}(\theta,\phi).$$

Schrödinger 波函数的单值性 从上面的求解可以看出，轨道角动量的本征值方程(8)和(9)既有 l 为零和整数的解，也有 l 为半奇数的解. 由方程(9)的解 $\Phi(\phi)=C\exp(im\phi)$可以看出，当 l 取零或整数时，波函数是单值的，而当 l 取半奇数时，波函数是双值的.

那么，轨道角动量本征值方程的半奇数解有没有物理意义呢？例如，从(12)和(13)式可以算出(归一化常数取正号)

$$Y_{1/2,\pm 1/2}(\theta,\phi)=\frac{1}{\pi}\sin^{1/2}\theta\, e^{\pm i\phi/2},$$

$$Y_{3/2,\pm 1/2}(\theta,\phi)=\frac{2}{\pi}\sin^{1/2}\theta\cos\theta\, e^{\pm i\phi/2},$$

$$Y_{3/2,\pm 3/2}(\theta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{2}{\pi}\sin^{3/2}\theta\, e^{\pm i3\phi/2},$$

等等. 可以验证，它们确实是本征值方程(8)和(9)的解，并且满足

正交归一化条件

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi Y_{lm}^*(\theta,\phi)Y_{l'm'}(\theta,\phi)=\delta_{ll'}\delta_{mm'}.$$

但是，这种半奇数解没有物理意义[①]，因为用移位算符

$$\hat{l}_\pm=\hat{l}_x\pm\mathrm{i}\hat{l}_y=\hbar\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\phi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

作用到这些解上，得到的结果不能用它们的线性叠加来表示. 例如：

$$\hat{l}_+Y_{1/2,-1/2}(\theta,\phi)=\frac{\hbar}{\pi}\sin^{1/2}\theta\cot\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi/2},$$

$$\hat{l}_-Y_{1/2,1/2}(\theta,\phi)=-\frac{\hbar}{\pi}\sin^{1/2}\theta\cot\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi/2},$$

等号右边的函数不能表示成 $Y_{1/2,1/2}$与 $Y_{1/2,-1/2}$的线性叠加，它们虽然也具有本征值 $l=1/2$，但却与 $Y_{1/2,\pm1/2}$正交；它们虽然与 $Y_{3/2,\pm1/2}$具有不同的本征值 l，但却与后者不正交. 这就说明，l 取半奇数时，$Y_{lm}(\theta,\phi)$并不构成角动量的表示空间，因而不具有物理意义.

量子力学的基本原理，要求任一量子态都是态矢量空间的矢量，在表示物理观测量的算符作用下，得到的结果仍在这个空间，还是一个可能的量子态. 轨道角动量的半奇数解不满足这个要求，因而并不代表量子态. 这就说明，在 Schrödinger 表象中波函数只能是单值函数，轨道角动量本征值只能取零或整数.

以上的结论只限于 Schrödinger 表象，即以空间坐标(x,y,z)或(r,θ,ϕ)为观测量完全集的表象. 对于粒子自旋的表象，没有这个限制，自旋角动量的本征值可以取半奇数，自旋波函数可以是双值的. 对于刚性对称陀螺的情形，可以选刚体转动的 Euler 角(α,β,γ)为观测量完全集，在这个表象中的波函数 $\psi(\alpha,\beta,\gamma)$也不受此限制. 我们在下一小节讨论粒子的自旋角动量，在第四章

---

① W. Pauli, *Helv. Phys. Acta* **12** (1939) 147.

§4.5 的宏观模型中再来讨论刚性对称陀螺的问题.

2. 粒子的自旋角动量

基本假设 在上一节中我们已经指出,量子力学里的角动量,是表征系统在空间转动变换下的特征的物理观测量. 在上一小节我们又指出,在 Schrödinger 表象中的波函数只能是单值函数,轨道角动量本征值只能取零或整数. 所以,实验上观测到的粒子半奇数自旋角动量,不可能是普通坐标空间中的物理现象,只能是粒子的某种内部空间的物理现象. *粒子的自旋角动量是表征粒子在某种内部空间转动变换下的特征的物理观测量.*

于是,我们可以假设: *在普通空间的转动变换下,粒子的内部空间也发生相应的转动,表示这个内部空间转动的厄米算符 $\hat{s}=(\hat{s}_x,\hat{s}_y,\hat{s}_z)$ 满足与角动量算符相同的对易关系:*

$$[\hat{s}_x,\hat{s}_y]=\mathrm{i}\hbar\hat{s}_z,\quad [\hat{s}_y,\hat{s}_z]=\mathrm{i}\hbar\hat{s}_x,\quad [\hat{s}_z,\hat{s}_x]=\mathrm{i}\hbar\hat{s}_y.$$

换句话说,我们假设*粒子的自旋角动量是表示在普通空间转动下粒子内部空间转动特征的物理观测量.*

粒子的自旋角动量是一个*非经典观测量*,它没有与之对应的经典物理量,而是与粒子内部空间的转动特征相联系的. 与这个粒子内部空间相联系的物理观测量,除了这里讨论的粒子自旋角动量以外,还有下一节要讨论的粒子内禀宇称和第五章 §5.4 将要讨论的粒子内禀磁矩. 对于这些非经典观测量,虽然我们可以做一些理论分析,比如在第五章我们将要指出粒子自旋角动量和内禀磁矩与理论的相对论协变性存在联系,但是它们有些什么物理性质,还是要由实验来确定. 我们关于这个粒子内部空间的了解,至今仍很有限,关于系统在这个粒子内部空间的动力学,则还一无所知.

自旋表象和 Pauli 矩阵 以自旋角动量平方 $\hat{s}^2$ 及其投影 $\hat{s}_z$ 的共同本征态 $\{|sm_s\rangle\}$ 为基矢的表象,称为*自旋表象*,它所表示的空间,称为*自旋空间*. 我们只考虑自旋量子数 $s=1/2$ 的情形. 这时基

矢只有两个，$|1/2,1/2\rangle$和$|1/2,-1/2\rangle$，自旋空间是二维的. 运用移位算符的公式(5)，可以算出它们在自旋空间的表示矩阵为：

$$s_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

由它们就可以算出 $\hat{s}_x$ 和 $\hat{s}_y$ 在自旋空间的表示矩阵. $\hat{s}_z$ 在自旋空间的表示矩阵是对角的. 于是我们可以写出

$$\boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma},$$

其中

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

称为 Pauli 矩阵. 很容易证明，Pauli 矩阵具有下列性质：

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1,$$

$$\{\sigma_x,\sigma_y\} = \{\sigma_y,\sigma_z\} = \{\sigma_z,\sigma_x\} = 0,$$

其中

$$\{A,B\} \equiv AB + BA.$$

自旋空间的转动 我们来求自旋空间的转动矩阵 $\mathscr{D}^{1/2}$. 由于

$$\mathrm{e}^{\hat{x}} = \sum_k \frac{\hat{x}^k}{k!},$$

可以看出，把 $\hat{x}$ 换成它在一个表象中的表示矩阵 x，就得到 $\exp(\hat{x})$在这个表象中的表示矩阵 $\exp(x)$. 于是，在(6)式中代入粒子自旋角动量的表示矩阵 $\hbar\boldsymbol{\sigma}/2$，就有

$$\mathscr{D}^{1/2} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{\theta}\cdot\boldsymbol{\sigma}/2} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}/2}.$$

把它展开成幂级数，并注意

$$(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2 = (n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z)^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1,$$

就可得到

$$\mathscr{D}^{1/2}(\boldsymbol{n},\theta) = \cos\frac{\theta}{2} - \mathrm{i}\sin\frac{\theta}{2}\sigma_n.$$

把它作用在一个自旋态上，就可以看出，当系统绕 $\boldsymbol{n}$ 轴转一

周，$\theta=2\pi$，$\mathscr{D}^{1/2}(\boldsymbol{n},2\pi)=-1$，态矢量变号；当系统绕 $\boldsymbol{n}$ 轴转两周，$\theta=4\pi$，$\mathscr{D}^{1/2}(\boldsymbol{n},4\pi)=1$，态矢量才复原. 这个结论对于半奇数自旋角动量的情形都成立. 所以，半奇数自旋角动量的波函数是双值函数. 这是粒子自旋角动量不同于普通轨道角动量的一个重要特点，也可以理解为是粒子的内部空间转动不同于普通空间转动的一个重要特点.

对于有自旋的系统，上一节幺正变换中的轨道角动量 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 应换成总角动量，

$$\hat{U}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{\theta}\cdot\hat{\boldsymbol{j}}/\hbar},$$

其中 $\hat{\boldsymbol{j}}$ 是系统的总角动量，

$$\hat{\boldsymbol{j}}=\hat{\boldsymbol{l}}+\hat{\boldsymbol{s}}.$$

相应地，系统具有转动不变性的条件成为

$$[\hat{\boldsymbol{j}},\hat{H}]=0.$$

对于这种情况，轨道角动量和自旋角动量一般都不是守恒量，只有总角动量才是守恒量.

§3.4 两个角动量的耦合

算符和对易关系 假设系统具有两种互相独立的角动量 $\hat{\boldsymbol{J}}_1$ 与 $\hat{\boldsymbol{J}}_2$，分别属于不同的自由度，

$$[\hat{J}_{1i},\hat{J}_{1j}]=\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_{1k},\quad[\hat{J}_{2i},\hat{J}_{2j}]=\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_{2k},\quad[\hat{J}_{1i},\hat{J}_{2j}]=0.$$

于是，我们可以定义这两个角动量的和为

$$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{J}}_1+\hat{\boldsymbol{J}}_2.$$

很容易证明，这样定义的 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 也是一个角动量，具有对易关系

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

此外，我们还可以证明$(\hat{J}_1^2,\hat{J}_2^2,\hat{J}^2,\hat{J}_z)$互相对易，构成一个相容观测量组，具有共同本征态.

表象变换 我们既可以取$(\hat{J}_1^2,\hat{J}_{1z},\hat{J}_2^2,\hat{J}_{2z})$的共同本征态组

$\{|j_1m_1j_2m_2)\}$作为表象的基矢，也可以取$(\hat{J}_1^2,\hat{J}_2^2,\hat{J}^2,\hat{J}_z)$的共同本征态组$\{|j_1j_2jm)\}$作为表象的基矢. 在它们之间的表象变换为

$$|j_1j_2jm) = \sum_{m_1,m_2} |j_1m_1j_2m_2)\langle m_2j_2m_1j_1|j_1j_2jm), \qquad (14)$$

概率幅

$$C(jm|j_1m_1j_2m_2) = \langle m_2j_2m_1j_1|j_1j_2jm\rangle$$

又称为表象变换矩阵，矢量耦合系数或 Clebsch-Gordan 系数，简称 C-G 系数. 上式的逆变换为

$$|j_1m_1j_2m_2) = \sum_{j,m} |j_1j_2jm)(mjj_2j_1|j_1m_1j_2m_2\rangle.$$

下面我们分别讨论本征值 m 与 j 的取值，以及举例说明如何来确定 C-G 系数.

m 的取值 根据 § 3.2 的一般结论，m 可以取 $-j$ 到 j 的 $2j+1$ 个值，

$$m = -j, -j+1, \cdots, j-1, j.$$

把 $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$ 作用到(14)式两边，可以得到

$$m|j_1j_2jm) = \sum_{m_1m_2} (m_1 + m_2)|j_1m_1j_2m_2)\langle m_2j_2m_1j_1|j_1j_2jm\rangle.$$

再把(14)式代入上式的左边，就得到

$$m(m_2j_2m_1j_1|j_1j_2jm\rangle = (m_1 + m_2)\langle m_2j_2m_1j_1|j_1j_2jm),$$

所以有

$$m = m_1 + m_2,$$

否则

$$\langle m_2j_2m_1j_1|j_1j_2jm\rangle = 0, \quad m \neq m_1 + m_2.$$

j 的取值 对于给定的 j_1 和 j_2，表象$\{|j_1m_1j_2m_2)\}$为$(2j_1+1)\cdot(2j_2+1)$维空间，所以表象$\{|j_1j_2jm)\}$也应为$(2j_1+1)(2j_2+1)$维空间：

$$\sum_{\underline{j}}^{\bar{j}} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1).$$

上述条件给出了本征值 j 的最大值 $\bar{j}$ 与最小值 $\underline{j}$ 的关系

$$(\bar{j}+1)^2-\underline{j}^2=(2j_1+1)(2j_2+1).$$

另一方面，

$$\bar{j}=\bar{m}=\bar{m}_1+\bar{m}_2=j_1+j_2.$$

从而可以算出

$$\begin{aligned}\underline{j}^2&=(\bar{j}+1)^2-(2j_1+1)(2j_2+1)\\&=(j_1+j_2+1)^2-(2j_1+1)(2j_2+1)\\&=(j_1-j_2)^2.\end{aligned}$$

于是有

$$\underline{j}=|j_1-j_2|,$$

$$j=j_1+j_2,j_1+j_2-1,\cdots,|j_1-j_2|+1,|j_1-j_2|.$$

自旋轨道耦合的 C-G 系数 作为一个例子，我们来讨论自旋角动量 $\hat{s}$ 与轨道角动量 $\hat{l}$ 的耦合 $\hat{j}=\hat{l}+\hat{s}$. 自旋 $s=1/2$，自旋投影只有 $m_s=\pm 1/2$ 的两个本征态，自旋表象空间只有二维. 对于给定的轨道角动量量子数 l，总角动量量子数只有两个值，$j=l+1/2$，$l-1/2$. 要求的 C-G 系数为

$$C(jm|lm_lsm_s)=\langle m_ssm_ll|lsjm\rangle.$$

我们先来看 $j=l+1/2$ 的态 $|lsjm\rangle=|l,1/2,l+1/2,l+1/2\rangle$. 显然，只有在 $|lm_lsm_s\rangle=|l,l,1/2,1/2\rangle$ 的态上才能而且肯定测到它. 根据波函数的统计诠释，适当选择相因子，我们就有

$$\langle 1/2,1/2,l,l|l,1/2,l+1/2,l+1/2\rangle=1.$$

这里选取了 Condon-Shortley 的相位约定(见 §3.2). 换句话说，我们可以取

$$|l,1/2,l+1/2,l+1/2\rangle=|l,l,1/2,1/2\rangle.$$

用降位算符 $\hat{J}_-=\hat{l}_-+\hat{s}_-$ 作用到上式两边，有

$$\begin{aligned}&\sqrt{(2l+1)}\,|l,1/2,l+1/2,l-1/2\rangle\\&\quad=\sqrt{2l}\,|l,l-1,1/2,1/2\rangle+|l,l,1/2,-1/2\rangle,\end{aligned}$$

亦即

$$
\begin{aligned}
&|l,1/2,l+1/2,l-1/2\rangle \\
&\quad=\sqrt{\frac{2l}{2l+1}}|l,l-1,1/2,1/2\rangle \\
&\qquad+\sqrt{\frac{1}{2l+1}}|l,l,1/2,-1/2\rangle.
\end{aligned}
$$

再用降位算符 $\hat{J}_-=\hat{l}_-+\hat{s}_-$ 作用到上式两边，类似地可以得到

$$
\begin{aligned}
&|l,1/2,l+1/2,l-3/2\rangle \\
&\quad=\sqrt{\frac{2l-1}{2l+1}}|l,l-2,1/2,1/2\rangle \\
&\qquad+\sqrt{\frac{2}{2l+1}}|l,l-1,1/2,-1/2\rangle.
\end{aligned}
$$

重复这一做法，我们可以一直求出 $|l,1/2,l+1/2,-l-1/2\rangle$ 的表达式. 一般地，用数学归纳法可以证明：

$$
\begin{aligned}
|l,1/2,l+1/2,m\rangle=&\sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}}|l,m-1/2,1/2,1/2\rangle \\
&+\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}}|l,m+1/2,1/2,-1/2\rangle.
\end{aligned}
\tag{15}
$$

我们再来看 $j=l-1/2$ 的态 $|lsjm\rangle=|l,1/2,l-1/2,m\rangle$. 它也是 $|lm_lsm_s\rangle=|l,m-1/2,1/2,1/2\rangle$ 与 $|l,m+1/2,1/2,-1/2\rangle$ 的叠加，叠加系数可以利用它与 $j=l+1/2$ 的态的正交关系

$$\langle m,l+1/2,1/2,l|l,1/2,l-1/2,m\rangle=0$$

求出，从而得到

$$
\begin{aligned}
|l,1/2,l-1/2,m\rangle=&-\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}}|l,m-1/2,1/2,1/2\rangle \\
&+\sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}}|l,m+1/2,1/2,-1/2\rangle.
\end{aligned}
\tag{16}
$$

上述展开式(15)与(16)中的系数，就是所要求的 C-G 系数.

显然，上述结果不限于 l 为零或正整数的轨道角动量，对于半奇数的一般情形也适用. $\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{J}}_1+\hat{\boldsymbol{J}}_2$ 的一般情形我们就不讨论. 表 3.1 和 3.2 分别给出了 $j_2=1/2$ 和 $j_2=1$ 的 C-G 系数.

表 3.1 $j_2=1/2$ 的 C-G 系数

	$m_2=1/2$	$m_2=-1/2$
$j=j_1+1/2$	$\left[\dfrac{j_1+m+1/2}{2j_1+1}\right]^{1/2}$	$\left[\dfrac{j_1-m+1/2}{2j_1+1}\right]^{1/2}$
$j=j_1-1/2$	$-\left[\dfrac{j_1-m+1/2}{2j_1+1}\right]^{1/2}$	$\left[\dfrac{j_1+m+1/2}{2j_1+1}\right]^{1/2}$

表 3.2 $j_2=1$ 的 C-G 系数

	$m_2=1$	$m_2=0$	$m_2=-1$
$j=j_1+1$	$\left[\dfrac{(j_1+m)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$	$\left[\dfrac{(j_1-m+1)(j_1+m+1)}{(2j_1+1)(j_1+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\dfrac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{(2j_1+1)(2j_1+2)}\right]^{1/2}$
$j=j_1$	$-\left[\dfrac{(j_1+m)(j_1-m+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{1/2}$	$\dfrac{m}{[j_1(j_1+1)]^{1/2}}$	$\left[\dfrac{(j_1-m)(j_1+m+1)}{2j_1(j_1+1)}\right]^{1/2}$
$j=j_1-1$	$\left[\dfrac{(j_1-m)(j_1-m+1)}{2j_1(2j_1+1)}\right]^{1/2}$	$-\left[\dfrac{(j_1-m)(j_1+m)}{j_1(2j_1+1)}\right]^{1/2}$	$\left[\dfrac{(j_1+m)(j_1+m+1)}{2j_1(2j_1+1)}\right]^{1/2}$

§3.5 宇　　称

1. 空间反射变换

量子态的空间反射 把系统从 $\boldsymbol{r}$ 点变到 $-\boldsymbol{r}$ 点的变换，称为系统的空间反射. 与系统的空间反射相应地，设系统态矢量的幺正变换为

$$|\psi\rangle \rightarrow \hat{P}|\psi\rangle,$$

这样引进的算符 $\hat{P}$，称为宇称算符. 系统空间反射后在 $\boldsymbol{r}$ 点的波函数，应该等于系统空间反射前在 $-\boldsymbol{r}$ 点的波函数，我们可以写出

$$\psi(\boldsymbol{r}) \rightarrow \psi(-\boldsymbol{r}) = \langle -\boldsymbol{r}|\psi\rangle = \langle \boldsymbol{r}|\hat{P}|\psi\rangle.$$

同样地，上式也可以看成基矢的变换，把本征值为 $\boldsymbol{r}$ 的坐标本征态 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 变到本征值为 $-\boldsymbol{r}$ 的坐标本征态 $|-\boldsymbol{r}\rangle$，

$$|\boldsymbol{r}\rangle \to |-\boldsymbol{r}\rangle = \hat{P}^{-1}|\boldsymbol{r}\rangle.$$

这相当于坐标架的反射变换 $\boldsymbol{r}\to-\boldsymbol{r}$，把右手坐标系变成左手坐标系，

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

与空间平移和转动不同，空间反射不是用一个参数来描述的可以通过一系列相继的无限小变换而完成的连续变换，而是一个分立的离散变换．属于离散变换的例子，还有与空间点阵的各种对称性相联系的变换，这是晶体理论的问题，我们就不在此讨论．

观测量算符的空间反射变换 与态矢量的空间反射 $|\psi\rangle\to\hat{P}|\psi\rangle$ 相应地，观测量算符的变换为 $\hat{A}\to\hat{P}\hat{A}\hat{P}^{-1}$．于是，坐标算符的变换可以写成

$$-\hat{\boldsymbol{r}} = \hat{P}\hat{\boldsymbol{r}}\hat{P}^{-1}.$$

如果我们要求 Heisenberg 对易关系在空间反射下不变，则从上式可得

$$-\hat{\boldsymbol{p}} = \hat{P}\hat{\boldsymbol{p}}\hat{P}^{-1}.$$

以上二式表明，宇称算符 $\hat{P}$ 与坐标算符 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 和动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 都是反对易的，

$$\{\hat{P},\hat{\boldsymbol{r}}\} = 0, \quad \{\hat{P},\hat{\boldsymbol{p}}\} = 0.$$

由于轨道角动量算符是坐标算符 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 和动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的矢量积，$\hat{\boldsymbol{l}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$，所以宇称算符 $\hat{P}$ 与轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 是对易的，

$$[\hat{P},\hat{\boldsymbol{l}}] = 0.$$

对于粒子的自旋角动量算符 $\hat{\boldsymbol{s}}$，我们假设它与轨道角动量算符一样，也与宇称算符 $\hat{P}$ 对易，

$$[\hat{P},\hat{\boldsymbol{s}}] = 0.$$

这样，我们就确定了宇称算符 $\hat{P}$ 与所有观测量算符的对易关系，从而就完全确定了宇称算符 $\hat{P}$．

与宇称算符反对易的矢量算符，在空间反射下变号，这种矢量

称为极矢量. 与宇称算符对易的矢量算符,在空间反射下不变,这种矢量称为轴矢量. 两个极矢量的标量积或两个轴矢量的标量积在空间反射下不变,是一个标量. 一个极矢量与一个轴矢量的标量积在空间反射下变号. 这种在空间反射下变号的标量,称为赝标量.

2. 宇称作为物理观测量

宇称本征值和本征态 由于

$$\langle \boldsymbol{r}|\hat{P}^2 = \langle -\boldsymbol{r}|\hat{P} = \langle \boldsymbol{r}|,$$

而且$\{|\boldsymbol{r}\rangle\}$是态矢量空间的完备组,于是我们有

$$\hat{P}^2 = 1.$$

从而,幺正算符 $\hat{P}$ 是厄米的,并且它的逆算符等于它自己:

$$\hat{P}^\dagger = \hat{P}, \quad \hat{P}^{-1} = \hat{P}.$$

由于 $\hat{P}$ 是厄米的,它可以是一个观测量. 设它的本征值为 P 的本征态为$|\varphi_P\rangle$,则本征值方程为

$$\hat{P}|\varphi_P\rangle = P|\varphi_P\rangle.$$

由 $\hat{P}^2=1$,从上式可得 $P^2=1$,于是宇称的本征值为 1 或 -1,

$$P = 1, -1.$$

本征值为 1 的宇称本征态,在空间反射下不变;本征值为-1的宇称本征态,在空间反射下变号. 宇称为 1 的态,简称宇称为正或偶. 宇称为-1的态,简称宇称为负或奇. 写在坐标表象里,我们有

$$\varphi_+(-\boldsymbol{r}) = \varphi_+(\boldsymbol{r}), \quad \varphi_-(-\boldsymbol{r}) = -\varphi_-(\boldsymbol{r}).$$

需要指出,无论是偶宇称的态,还是奇宇称的态,在空间反射后的态矢量与空间反射前的态矢量至多相差一个正负号,都描述同一个量子态. 所以可以说,宇称本征态对于系统的空间反射是不变的.

归纳起来,可以说:量子力学里的宇称,是表征系统在空间反射变换下的特征的物理观测量. 这是一个非经典观测量,它的性质和规律,要由实验来确定.

粒子的内禀宇称 实验表明，在普通空间的反射变换下，粒子的内部空间也发生相应的变换，而一定种类的粒子，其内部空间要么具有偶宇称，要么具有奇宇称. 粒子内部空间的这种反射对称性，称为粒子的内禀宇称. 由于粒子具有内禀宇称，宇称算符 $\hat{P}$ 对于态矢量的作用，既要考虑普通空间的反射变换，也要考虑内部空间的反射变换. 系统的总宇称，是系统的普通空间宇称与粒子内禀宇称之积.

空间反射不变性 如果系统在空间反射以后的态 $\hat{P}|\psi\rangle$ 与原来的态 $|\psi\rangle$ 都满足 Schrödinger 方程，是同一量子态，则这个系统就具有空间反射不变性. 用宇称算符 $\hat{P}$ 作用到 Schrödinger 方程上，要求得到的方程是关于空间反射态 $\hat{P}|\psi\rangle$ 的 Schrödinger 方程，就要求系统的 Hamilton 算符在空间反射下不变，亦即

$$[\hat{P},\hat{H}] = 0.$$

具有空间反射不变性的系统，宇称算符与系统的 Hamilton 算符对易，系统具有能量与宇称的共同本征态，宇称是守恒的.

当然，一个系统是否具有空间反射不变性，换句话说，系统的宇称是否守恒，取决于系统的动力学性质，这要由实验来判定，不能先验地论断. 在历史上，是从原子能级跃迁的 Laporte 选择定则了解到原子系统的宇称是守恒量. 原子系统只涉及电子与原子核之间的电磁相互作用，这只表明电磁相互作用过程中宇称守恒. 后来发现，在强相互作用过程中宇称也守恒，但在弱相互作用过程中宇称并不守恒①. 比如说，中微子具有螺旋性，就没有空间反射不变性. 我们将在第五章 §5.1 再回到这个问题上来.

§3.6 时 间 反 演

时间反演变换 我们在本章 §3.1 中已经证明，在量子力学

① T. D. Lee and C. N. Yang, *Phys. Rev.* **104** (1956) 254.

里时间只能作为一个参数，而不是一个表示成算符的物理观测量。系统发展变化的动力学过程，正是用时间 t 这个参数来描写的。系统的时间反演，就是沿着这个时间参数减少的方向来考察系统的运动和变化。这相应于对时空坐标作如下的变换：

$$\begin{pmatrix} t \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} t' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

与此相应地，我们可以引入一个算符 $\hat{T}$ 来描述系统的态矢量和观测量算符的变换，

$$|\psi\rangle \to \hat{T}|\psi\rangle,$$
$$\hat{A} \to \hat{T}\hat{A}\hat{T}^{-1}.$$

$\hat{T}$ 的性质 系统随时间的发展和变化，是由 Schrödinger 方程来确定的。对 Schrödinger 方程两边取复数共轭，并作代换 $t \to t' = -t$，有

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}|\psi(-t')\rangle^* = \hat{H}^*|\psi(-t')\rangle^*.$$

可以看出，如果 $\hat{H}^* = \hat{H}$，上式就描写系统的时间反演过程，态 $|\psi(-t')\rangle^*$ 则是系统态 $|\psi(t)\rangle$ 的时间反演态。这里对一个态矢量取复数共轭 $|\psi\rangle^*$ 的定义是，如果一个态矢量是某些态矢量的线性叠加，则它的复数共轭，等于这些态矢量的复数共轭的线性叠加，而叠加系数是原来的系数的复数共轭：

$$(c_1|1\rangle + c_2|2\rangle + \cdots)^* = c_1^*|1\rangle^* + c_2^*|2\rangle^* + \cdots.$$

此外，两个态矢量的复数共轭的内积，等于它们的内积的复数共轭：

$$\{\langle\varphi|\}^*\{|\psi\rangle\}^* = \langle\psi|\varphi\rangle.$$

于是，对于 $\hat{H}^* = \hat{H}$ 的系统，我们可以定义时间反演算符 $\hat{T}$ 为

$$\hat{T}|\psi\rangle = \eta_T|\psi\rangle^*, \tag{17}$$

其中 η_T 是一个常数. 这就意味着,时间反演算符把一个数改成它的复数共轭:

$$\hat{T}c\hat{T}^{-1} = c^*.$$

写成对易关系,为

$$\hat{T}c = c^*\hat{T},$$

当时间反演算符与一个数交换时,把这个数改成它的复数共轭. 由于这个性质,时间反演算符不是线性算符,我们把它称为*反线性算符*.

此外,我们要求任意两个态矢量的内积的绝对值在时间反演下不变,亦即

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

这就要求 $\eta_T^*\eta_T=1$. 满足上述条件的变换称为*反幺正变换*,所以时间反演是一个反幺正变换. 注意上式左边的写法. 由于时间反演算符不仅对于态矢量起作用,还对复数起作用,所以要区分它是从左边作用于右边,还是从右边作用于左边,这两者是不同的.

在时间反演变换下,系统的空间坐标不改变,所以

$$\hat{T}\hat{\boldsymbol{r}}\hat{T}^{-1} = \hat{\boldsymbol{r}}.$$

在 Heisenberg 对易关系右边有虚单位 i, 所以, 为了保持 Heisenberg 对易关系在时间反演变换下不变,我们有

$$\hat{T}\hat{\boldsymbol{p}}\hat{T}^{-1} = -\hat{\boldsymbol{p}}.$$

上述二式表明,时间反演算符与坐标算符对易,与动量算符反对易. 类似地,为了保持角动量各个分量的算符之间的对易关系(3)在时间反演变换下不变,我们还要求时间反演算符与角动量算符反对易. 于是可以写出

$$[\hat{T},\hat{\boldsymbol{r}}] = 0, \quad \{\hat{T},\hat{\boldsymbol{p}}\} = 0, \quad \{\hat{T},\hat{\boldsymbol{J}}\} = 0,$$

我们假设上述最后一式对于粒子的自旋角动量也成立. 这样,我们就确定了时间反演算符 $\hat{T}$ 与所有观测量算符的对易关系,从而就完全确定了时间反演算符 $\hat{T}$. 对于 $\hat{H}^*=\hat{H}$ 的系统,这样得到的 $\hat{T}$ 就是(17)式,而对于 $\hat{H}^*\neq\hat{H}$ 的系统,就没有这么简单(参阅第五

章§5.3).

时间反演不变性　如果系统在时间反演后的态$\hat{T}|\psi\rangle$也满足Schrödinger方程,则它就是原来态$|\psi\rangle$的时间反演态,这个系统具有时间反演不变性.把时间反演算符$\hat{T}$作用到Schrödinger方程,并且作代换$t'=-t$,就有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\hat{T}|\psi\rangle=\hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1}\hat{T}|\psi\rangle.$$

要求上式是关于态矢量$\hat{T}|\psi\rangle$依赖于时间t'的Schrödinger方程,就要求

$$[\hat{T},\hat{H}]=0.$$

*具有时间反演不变性的系统,其Hamilton算符在时间反演下不变,它的时间反演过程与其原过程是对称的.*当然,一个系统是否具有时间反演不变性,取决于系统的动力学性质,这要由实验来判定.

与本章讨论的其他观测量算符不同,时间反演算符不是幺正算符,不对应于一个物理观测量.实际上,前面讨论的所有的观测量算符都联系于系统的静态性质,而时间反演算符$\hat{T}$联系于系统发展变化的动态过程.所以,与时间反演变换相联系的观测,需要比较和测量两个时间历程相反的过程.例如,系统的时间反演不变性,意味着下列正反两个方向的过程是对称的:

$$A+B\rightleftharpoons C+D.$$

通过测量上述正反两个过程的有关物理观测量,我们就可以了解系统在时间反演变换下的性质.在这里有一个重要的定理,**互逆定理**.我们将在第六章§6.3来讨论这个问题.

§3.7　全同粒子交换

全同粒子的交换算符　考虑由N个全同粒子组成的体系,其中每个粒子的运动可以由单粒子态$\{|\varphi_i\rangle\}$来描述.引入交换算符

$\hat{P}_{st}$，表示交换它所作用的量中的粒子 s 与 t，

$$\hat{P}_{st}|\cdots\varphi_i(s)\cdots\varphi_j(t)\cdots\rangle = |\cdots\varphi_i(t)\cdots\varphi_j(s)\cdots\rangle,$$

$$\hat{P}_{st}\hat{A}(\cdots s\cdots t\cdots) = \hat{A}(\cdots t\cdots s\cdots)\hat{P}_{st},$$

则可以证明它具有以下性质：

① $\hat{P}_{st}$是线性厄米算符，$\hat{P}_{st}^{\dagger}=\hat{P}_{st}$.

② $\hat{P}_{st}$的本征值为 1 或 -1.

③ 对于一类全同粒子的态，$\hat{P}_{st}$的本征值不可能既有 1 又有 -1，要么都是 1，或者都是 -1.

我们来证明②. 设粒子 s 在 $|\varphi_i\rangle$态，粒子 t 在 $|\varphi_j\rangle$态，有本征值方程

$$\hat{P}_{st}|\cdots\varphi_i(s)\cdots\varphi_j(t)\cdots\rangle = \lambda_{st}|\cdots\varphi_i(s)\cdots\varphi_j(t)\cdots\rangle,$$

$$\hat{P}_{st}^2|\cdots\varphi_i(s)\cdots\varphi_j(t)\cdots\rangle = \lambda_{st}^2|\cdots\varphi_i(s)\cdots\varphi_j(t)\cdots\rangle, \qquad (18)$$

其中$|\cdots\varphi_i(s)\cdots\varphi_j(t)\cdots\rangle$是交换算符 $\hat{P}_{st}$的本征态，λ_{st}为其本征值. 另一方面，根据 $\hat{P}_{st}$的定义，有

$$\begin{aligned}\hat{P}_{st}^2|\cdots\varphi_i(s)\cdots\varphi_j(t)\cdots\rangle &= \hat{P}_{st}|\cdots\varphi_i(t)\cdots\varphi_j(s)\cdots\rangle \\ &= |\cdots\varphi_i(s)\cdots\varphi_j(t)\cdots\rangle.\end{aligned}$$

比较上式与(18)式的右端，就有

$$\lambda_{st}^2 = 1, \quad \lambda_{st} = 1, -1.$$

若 $\lambda_{st}=1$，则态矢量$|\cdots\varphi_i(s)\cdots\varphi_j(t)\cdots\rangle$对于粒子 s 与 t 的交换不变号，是对称的；若 $\lambda_{st}=-1$，则态矢量$|\cdots\varphi_i(s)\cdots\varphi_j(t)\cdots\rangle$对于粒子 s 与 t 的交换变号，是反对称的. 需要强调的是，无论是交换对称的态，还是交换反对称的态，交换后的态矢量与交换前的态矢量至多相差一个正负号，都描述同一个量子态. 所以可以说，这种态对于粒子的交换是不变的，或者说，在这种态上不能区分粒子 s 与 t.

再来证明③. 我们只需证明 $N=3$ 成立，就可证明任意 N 也成立. $N=3$ 时有三个粒子，我们来证明 $\lambda_{12}=\lambda_{23}$. 根据交换算符的定义，有

$$
\begin{aligned}
&\hat{P}_{23}\hat{P}_{31}\hat{P}_{12}\hat{P}_{31}|\varphi_1(1)\varphi_2(2)\varphi_3(3)\rangle \\
&\qquad = \hat{P}_{23}\hat{P}_{31}\hat{P}_{12}|\varphi_1(3)\varphi_2(2)\varphi_3(1)\rangle \\
&\qquad = \hat{P}_{23}\hat{P}_{31}|\varphi_1(3)\varphi_2(1)\varphi_3(2)\rangle \\
&\qquad = \hat{P}_{23}|\varphi_1(1)\varphi_2(3)\varphi_3(2)\rangle \\
&\qquad = |\varphi_1(1)\varphi_2(2)\varphi_3(3)\rangle.
\end{aligned}
\tag{19}
$$

另一方面，根据本征态的定义，上式左边等于

$$\lambda_{23}\lambda_{31}\lambda_{12}\lambda_{31}|\varphi_1(1)\varphi_2(2)\varphi_3(3)\rangle = \lambda_{23}\lambda_{12}|\varphi_1(1)\varphi_2(2)\varphi_3(3)\rangle.$$

令其与(19)式右边相等，即证.

全同粒子体系的交换不变性 显然，全同粒子体系的 Hamilton 算符在任意两个粒子的交换下是不变的，

$$[\hat{P}_{ij},\hat{H}] = 0.$$

全同粒子体系存在交换任意两个粒子的对称性，全同粒子体系的态是任意两个粒子的交换算符的共同本征态. 这种对称性，是在以单粒子态$\{|\varphi\rangle\}$为坐标的抽象空间中的对称性. 全同粒子体系的这种交换对称性，称为粒子全同性.

粒子全同性表明，全同粒子是不能区分的，具有**不可分辨性**. 全同粒子的这种不可分辨性是微观粒子的量子效应，是测不准和波粒二象性的结果. 在宏观的经典力学中，可以根据两个全同粒子的坐标和轨道，亦即根据它们的运动状态和历史来区分它们. 在量子力学中，由于粒子的坐标和动量不能同时测准，没有轨道的概念，两个粒子的波函数在空间有重叠，对它们是无法分辨的，不能指认第几个粒子处于哪一个态，只能指出哪一个态有几个粒子.

根据这个性质，全同粒子体系的态，是所有粒子对的交换算符的共同本征态. 再根据上一小节的性质④，任意两个粒子的交换算符在这个态上的本征值都相同，要么都是 1，或者都是 −1. 交换算符的本征值都是 1 的态，称为完全对称态；交换算符的本征值都是 −1 的态，称为完全反对称态. 所以，全同粒子体系的态，要么是完全对称态，要么是完全反对称态.

例 考虑由两个全同粒子构成的体系，每一个粒子所可能处的单粒子态是 $|\varphi_1\rangle$ 和 $|\varphi_2\rangle$. 容易看出，这个体系的完全对称态 $|\psi_S\rangle$ 和完全反对称态 $|\psi_A\rangle$ 分别为

$$|\psi_S\rangle = N_S[|\varphi_1(1)\varphi_2(2)\rangle + |\varphi_1(2)\varphi_2(1)\rangle],$$
$$|\psi_A\rangle = N_A[|\varphi_1(1)\varphi_2(2)\rangle - |\varphi_1(2)\varphi_2(1)\rangle],$$

其中假设单粒子态是归一化的. N_S 和 N_A 分别是整个态的归一化因子.

可以看出，对于完全对称态 $|\psi_S\rangle$，两个单粒子态 $|\varphi_1\rangle$ 与 $|\varphi_2\rangle$ 可以相同，即在同一个单粒子态上可以有任意数量的粒子. 完全反对称态 $|\psi_A\rangle$ 则不同，两个单粒子态 $|\varphi_1\rangle$ 与 $|\varphi_2\rangle$ 不能相同，否则 $|\psi_A\rangle = 0$，即在同一个单粒子态上最多只能有一个粒子. 这就是 Pauli 不相容原理. 显然，这个结论不限于两个全同粒子的体系，对于任意多个全同粒子的体系也成立.

两种统计法 由于全同粒子不可分辨，对于全同粒子体系的态 $|\psi\rangle$，我们不能区分哪一个粒子处于某一个单粒子态 $|\varphi_i\rangle$，只能说出某一个单粒子态 $|\varphi_i\rangle$ 上有几个粒子，全同粒子体系的统计力学不同于经典的统计力学，全同粒子的统计分布不同于经典的 Maxwell-Boltzmann 分布. 处于完全对称态上的全同粒子体系，一个单粒子态上可以有任意数量的粒子，这样的统计法称为 Bose-Einstein 统计，得到的统计分布称为 Bose-Einstein 分布. 处于完全反对称态上的全同粒子体系，一个单粒子态上最多只能有 1 个粒子，服从 Pauli 不相容原理，这样的统计法称为 Fermi-Dirac 统计，得到的统计分布称为 Fermi-Dirac 分布.

Bose 子和 Fermi 子 实验表明，整数自旋的粒子是交换对称的，交换算符的本征值总是 1，服从 Bose-Einstein 统计；半奇数自旋的粒子是交换反对称的，交换算符的本征值总是 -1，服从 Pauli 不相容原理和 Fermi-Dirac 统计. 我们把服从 Bose-Einstein 统计的粒子称为 Bose 子，把服从 Pauli 不相容原理和 Fermi-Dirac 统计的粒子称为 Fermi 子. 换句话说，实验表明，整数自旋的粒子是

Bose 子，半奇数自旋的粒子是 Fermi 子. 这个结论可以用相对论性量子场论来证明(见第八章 § 8.4).

粒子全同性原理 全同粒子体系的交换算符 $\hat{P}_n$ 也是一个非经典观测量，没有与之对应的经典物理量，它是与全同粒子体系的交换对称性相联系的. 我们可以根据理论的分析，提出各种可能的非经典观测量. 至于这些观测量具有什么物理性质，就不能完全依靠理论分析，而要由实验来确定. 在这个意义上，所谓的粒子全同性原理，不过是关于全同粒子交换算符 $\hat{P}_n$ 的一条具体的实验规律，并且能够用相对论性量子场论来证明. 所以，粒子全同性原理不能算作一条量子力学的基本原理. 只是由于它是量子统计力学的基础，它所包含的 Pauli 不相容原理在原子结构中具有基本的重要性，许多作者才把它当作一条基本原理来讲.

第四章　动力学模型

一个物理系统的动力学过程，是由它的运动方程来决定的．而系统的运动方程，完全由它的 Hamilton 算符来确定．所以，系统的动力学模型，就是关于系统的 Hamilton 算符的模型．可以说，如何写出一个系统的 Hamilton 算符，这是量子力学应用的核心问题．我们在本章将首先讨论在写出系统 Hamilton 算符时的一般性考虑，然后在此基础上讨论在量子力学的实际应用中最常遇到的一些模型．关于电子（一般地说是自旋 1/2 的 Fermi 子）的满足相对论协变性要求的 Hamilton 算符将放在第五章来讨论，关于粒子物理系统的场论模型则放在第八章讨论．

§4.1　一般性考虑

1．Hamilton 算符与正则量子化

Hamilton 算符　我们知道，在有经典对应的情形，系统的 Hamilton 算符对应于它的经典 Hamilton 函数．所以，我们在构造系统 Hamilton 算符时，往往是先写出它的经典 Hamilton 函数，然后再把其中的正则变量换成对应的算符．

一个经典系统的 Lagrange 函数可以写成

$$L = L(q,\dot{q}),$$

它是系统的广义坐标 $q=(q_1,q_2,\cdots,q_N)$ 及其时间微商 $\dot{q}=(\dot{q}_1,\dot{q}_2,\cdots,\dot{q}_N)$ 的**标量实函数**．经典作用量原理要求 Lagrange 函数在两个固定端点之间的时间积分对于广义坐标的任意变动取极值：

$$\delta\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}tL(q,\dot{q})=0.$$

由这个变分给出的 Lagrange 方程为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}-\frac{\partial L}{\partial q_i}=0.$$

用 Lagrange 方程作为基本动力学方程的理论形式,称为理论的 Lagrange *形式*.

定义广义动量

$$p_i\equiv\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i},$$

就可定义 Hamilton 函数为

$$H(p,q)\equiv\sum_i p_i\dot{q}_i-L.$$

从 Lagrange 方程和 H 的定义,可以推出 Hamilton 正则方程

$$\dot{p}_i=-\frac{\partial H}{\partial q_i},\quad \dot{q}_i=\frac{\partial H}{\partial p_i}.$$

用 Hamilton 正则方程作为基本动力学方程的理论形式,称为理论的 Hamilton *正则形式*.

Hamilton 正则形式与 Lagrange 形式是等价的. Hamilton 正则形式的优点是便于采用正则量子化程序过渡到量子力学,而 Lagrange 形式的优点则是容易满足相对论协变性要求. 把 Hamilton 函数中的正则变量 q 和 p 换成算符,并要求它们满足 Heisenberg 对易关系,就可以得到量子力学的 Hamilton 算符,

$$H(p,q)\rightarrow\hat{H}(\hat{p},\hat{q}).$$

正则量子化问题 采用上述正则量子化程序,经常会遇到的有两个问题. 第一个问题是:如何确定 $\hat{q}$ 与 $\hat{p}$ 的次序?在经典力学中,q 与 p 可以对易,它们在乘积中的次序是任意的. 量子力学不同,$\hat{q}$ 与 $\hat{p}$ 不能对易. 所以,从经典 Hamilton 函数 $H(p,q)$过渡到量子的 Hamilton 算符 $\hat{H}(\hat{p},\hat{q})$,可以有多种选择. 在多数情形,都可以通过某些考虑来完全确定 $\hat{H}(\hat{p},\hat{q})$的形式. 比如,为了从 $\hat{q}$ 与

$\hat{p}$ 的积构成一个厄米算符，则既可以是 $(\hat{q}\hat{p}+\hat{p}\hat{q})/2$，也可以是 $\mathrm{i}(\hat{q}\hat{p}-\hat{p}\hat{q})/2$，前者对应于经典的 qp，后者对应于经典的 0. 但是，**一个系统的 Hamilton 算符究竟应该取什么形式，还是要看用它算得的结果是否与实验符合，才能最后判定.**

第二个问题是：如何确定没有经典对应的物理观测量的算符？我们还没有解决这个问题的一般原则，只能针对每一个具体的观测量，进行具体的分析. 在这种分析中，对于系统对称性的考虑，往往是非常有用的，例如我们在上一章对于粒子自旋、宇称、时间反演和全同粒子交换所做的那样.

对称性和系统的守恒量 系统具有的各种对称性，是在写出它的 Hamilton 算符时必须考虑和予以满足的. 更多的情况，则是在写出了系统的 Hamilton 算符以后，需要具体分析这个 Hamilton 算符具有哪些对称性，以便确定这个系统具有哪些守恒量，以及我们可以如何来对这个系统的态进行分类. 在做这种分析时，群表示论是非常有用的数学工具. 不过，这方面的内容太专门和带技术性，我们就不在这里讨论.

观测量算符和态矢量的性质 原则上，一个系统的 Hamilton 算符应该是厄米的，它的本征态应该构成一个完备组. 这两点，我们在选择系统的物理模型时往往未予考虑. 这就需要在求解的过程中随时予以注意，免除非物理的结果. 例如上一章 §3.3 中讨论的轨道角动量的半奇数解问题，以及本章 §4.3 中将要对它作的进一步的讨论. 在这里，有两个定理是十分重要和有用的.

2. 两个重要定理

定义 对于一个厄米算符 $\hat{H}$，如果它在任一态上的平均值总大于某一确定的常数，我们就说它有下限.

定理 1 设 $\hat{H}$ 是一个有下限的厄米算符，其本征值按从小到大的次序为 $(E_0, E_1, \cdots)$，相应的本征态为 $\{|0\rangle, |1\rangle, \cdots\}$，则当 $|\psi\rangle$ 为任意态时 $\langle\hat{H}\rangle$ 的最小值为 E_0，当 $|\psi\rangle$ 为与 $|0\rangle$ 正交的任意态时

$\langle\hat{H}\rangle$的最小值为E_1，当$|\psi\rangle$为与$|0\rangle,|1\rangle,\cdots,|n-1\rangle$正交的任意态时$\langle\hat{H}\rangle$的最小值为$E_n$，其中$\langle\hat{H}\rangle$为$\hat{H}$在这个态$|\psi\rangle$上的平均值

$$\langle\hat{H}\rangle=\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}.$$

证明 按题设

$$E\equiv\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

总大于某一确定的常数，所以存在极小. 为了求E的最小值，作变分

$$|\psi\rangle\to|\psi\rangle+|\delta\psi|,\quad\langle\psi|\to\langle\psi|+\langle\delta\psi|.$$

于是E的相应的变动为

$$\begin{aligned}\delta E=&\frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle}(\langle\delta\psi|\hat{H}|\psi\rangle+\langle\psi|\hat{H}|\delta\psi\rangle)\\&-\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\left(\frac{\langle\delta\psi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}+\frac{\langle\psi|\delta\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\right)\\=&\frac{1}{\langle\psi|\psi\rangle}[\langle\delta\psi|\hat{H}-E|\psi\rangle+\langle\psi|\hat{H}-E|\delta\psi\rangle]\\=&\frac{2}{\langle\psi|\psi\rangle}\mathrm{Re}\langle\varphi|\delta\psi\rangle,\end{aligned}$$

其中$|\varphi\rangle=(\hat{H}-E)|\psi\rangle$. 变分$|\delta\psi\rangle$是任意的，所以只有当

$$|\varphi\rangle=(\hat{H}-E)|\psi\rangle=0$$

时，才有$\delta E=0$. 这就表明只有当E和$|\psi\rangle$分别是$\hat{H}$的本征值和本征态时E才是极小值. 而$\hat{H}$的最小本征值为E_0，这就证明了第一点：当$|\psi\rangle$为任意态时$\langle\hat{H}\rangle$的最小值为E_0.

再来看$|\psi\rangle$与$|0\rangle$正交的情形，$\langle 0|\psi\rangle=0$. 由于$|0\rangle$是$\hat{H}$的本征态，$\hat{H}|\psi\rangle$与$|0\rangle$也正交，$\langle 0|\hat{H}|\psi\rangle=0$. 这就表明，$|\psi\rangle$与$\hat{H}|\psi\rangle$属于同一个子空间，仿照上面的推理，可以证明$\langle\hat{H}\rangle$的最小值为$\hat{H}$在这个子空间的最小本征值$E_1$. 依此类推，就可以证明定理的一般结论.

定义 一个态矢量组$\{|k\rangle,k=1,2,\cdots,n\}$，如果对于任一态矢

量$|\psi\rangle$，都存在一组常数$\{C_k, k=1,2,\cdots,n\}$，使得

$$|R_n\rangle = |\psi\rangle - \sum_{k=1}^{n} C_k |k\rangle = 0,$$

则称$\{|k\rangle, k=1,2,\cdots,n\}$为完备组.

定理 2 如果一个厄米算符 $\hat{H}$ 有下限而无上界，则它的本征态的集合构成一个完备组.

证明 设 $\hat{H}$ 的本征态的集合为$\{|k\rangle, k=1,2,\cdots,n\}$，与之相应的本征值为$(E_0, E_1, \cdots)$，在这里本征值已经按从小到大的次序排好. 当 n 为有限值时，定理是自明的. 我们来证明当 $n\to\infty$时有

$$\lim_{n\to\infty}\langle R_n|R_n\rangle = 0.$$

因为 $\hat{H}$ 有下限，只要作变换 $\hat{H}\to\hat{H}+$常数，总可以使 $E_0\geqslant 0$. 取 $C_k=\langle k|\psi\rangle$，就可以使得

$$|R_m\rangle = |\psi\rangle - \sum_{k=1}^{m} C_k |k\rangle$$

与$|k\rangle$正交，

$$\langle k|R_m\rangle = 0, \quad k\leqslant m.$$

由定理 1，我们有

$$\frac{\langle R_m|\hat{H}|R_m\rangle}{\langle R_m|R_m\rangle} \geqslant E_{m+1} \geqslant E_m. \tag{1}$$

其中

$$\begin{aligned}\langle R_m|\hat{H}|R_m\rangle &= \Big(\langle\psi| - \sum_k C_k^*\langle k|\Big)\hat{H}\Big(|\psi\rangle - \sum_{k'} C_{k'}|k'\rangle\Big)\\ &= \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle - \sum_k C_k^* C_k E_k \leqslant \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle.\end{aligned}$$

把上式代入(1)中，可以得到

$$\langle R_m|R_m\rangle \leqslant \frac{1}{E_m}\langle R_m|\hat{H}|R_m\rangle \leqslant \frac{1}{E_m}\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle,$$

其中$\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle$与 m 无关. 由于 $\hat{H}$ 无上界，当 $m\to\infty$时 $E_m\to\infty$，上式给出

$$\lim_{m\to\infty}\langle R_m|R_m\rangle = 0.$$

态矢量的完备组所张的空间称为 Hilbert 空间. 写出一个系统的 Hamilton 算符,也就是构造这个系统的 Hilbert 空间,这是量子力学实际应用特别是一些近似模型的核心. 所以,这个定理在实际问题中是很重要的,我们将在本章给出运用它的一些例子.

§4.2 平移不变性模型

Hamilton 算符 描述平移不变系统,选择 Descartes 直角坐标较方便,$q=(q_1,q_2,q_3)=(x,y,z)$. 平移不变系统的 Lagrange 函数 $L(q,\dot{q})$不依赖于空间坐标 q,只含动能项,

$$L(q,\dot{q}) = T(\dot{q}).$$

这里 q 是系统的直角坐标,$\dot{q}$ 则是相应的线性速度. 考虑速度远小于光速 c 的非相对论情形,

$$\dot{q} \ll c,$$

可以把 $T(\dot{q})$展开成 $\dot{q}$ 的幂级数. 保留到 $\dot{q}$ 的二次项,就有

$$L(q,\dot{q}) = \frac{1}{2}\sum_{ij}\dot{q}_i m_{ij}\dot{q}_j + \sum_i A_i\dot{q}_i,$$

其中$\{m_{ij}\}$是与 q 无关的**对称非奇异的实矩阵**,联系于系统的惯性,在空间转动下按二阶张量变换. $\{A_i\}$是与 q 无关的实矢量,通常联系于某种外场. 在上述展开式中没有 0 阶常数项,它在 Lagrange 方程中不出现,是没有意义的.

于是,系统的正则共轭动量为

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \sum_j m_{ij}\dot{q}_j + A_i,$$

由它可以解出

$$\dot{q}_i = \sum_j (m^{-1})_{ij}(p_j - A_j),$$

其中 m^{-1}是 m 的逆矩阵. 一般地说,系统的线性速度是其正则共轭动量的线性函数,但它们不一定有正比关系. 把上式代入 Hamilton 函数的定义式,就得到

$$H(p,q)=\sum_i p_i\dot{q}_i-L(q,\dot{q})$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{ij}(p_i-A_i)(m^{-1})_{ij}(p_j-A_j).$$

可以看出,这个 Hamilton 函数与系统的空间坐标 q 无关,是空间平移不变的.

相应的 Hamilton 算符为

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\sum_{ij}(\hat{p}_i-A_i)(m^{-1})_{ij}(\hat{p}_j-A_j). \tag{2}$$

它与动量算符对易,系统具有能量和动量的共同本征态 $|Ep\rangle$,

$$\hat{H}|Ep\rangle=E|Ep\rangle,\quad \hat{p}_i|Ep\rangle=p_i|Ep\rangle,$$

其中

$$E=E(p)=\frac{1}{2}\sum_{ij}(p_i-A_i)(m^{-1})_{ij}(p_j-A_j). \tag{3}$$

这个态在坐标表象的波函数,就是动量本征态波函数,

$$\langle q|Ep\rangle=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{ipq/\hbar},\quad pq=\sum_i p_iq_i. \tag{4}$$

$\hat{H}$ 的本征态波函数的完备性 容易证明 Hamilton 算符(2)有下限但无上界.因为在坐标表象中 $\hat{p}_i=-i\hbar\partial/\partial q_i$,若取

$$\langle q|\psi\rangle\propto e^{-q^2/\lambda^2},$$

则当 $\lambda\to\infty$时有$\langle\hat{H}\rangle\to E(0)$,而当 $\lambda\to 0$ 时有$\langle\hat{H}\rangle\to\infty$,

$$\langle\hat{H}\rangle=\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\to\begin{cases}E(0), & \lambda\to\infty,\\ \infty, & \lambda\to 0.\end{cases}$$

于是,根据 §4.1 定理 2,Hamilton 算符(2)的本征态波函数构成完备组.其实,上面我们已经看到,Hamilton 算符(2)的本征态就是动量本征态,由 Fourier 积分的理论也可以知道在坐标表象中的动量本征态波函数(4)构成完备组.

例 1 自由粒子 对于自由粒子,没有外场,$A_i=0$.此外,粒子的运动应该是空间各向同性的,不存在一个特殊的方向,质量矩阵 m_{ij}简化为一个常数 m 与单位矩阵的积,

$$\{m_{ij}\} = m\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}.$$

于是，粒子的动量正比于速度，我们有

$$p = m\dot{q},$$

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

例 2 固体能带中的电子 固体能带中的电子，其能量与动量的关系 $E=E(p)$ 不像自由粒子的 $E=p^2/2m$ 这么简单. 不过，在能带边界 $p=b$ 可以展开成幂级数，近似地写成(3)式，其中 $A_i=b_i$，而质量矩阵 $\{m_{ij}\}$ 依赖于能带边界的动量 b. 在动量空间作适当的转动，可以把质量矩阵对角化，

$$\{m_{ij}\} = \begin{bmatrix}m_1 & 0 & 0\\ 0 & m_2 & 0\\ 0 & 0 & m_3\end{bmatrix},$$

其中

$$m_i = \frac{1}{\partial^2 E/\partial p_i^2},$$

称为*有效质量*. 由于有效质量是一个张量，一般地说，电子动量方向与外力方向不同. 还应当指出，由于有效质量依赖于能带边界的动量 b，它反比于动量空间中能带边界曲面的曲率，既可以为正，也可以为负. 在能带底，函数 $E=E(p)$ 取极小，有效质量为正. 在能带顶，函数 $E=E(p)$ 取极大，有效质量为负①.

§ 4.3 球对称模型

1. 球极坐标中的 Hamilton 算符

算符 $\hat{r}$ 与 $\hat{p}_r$ 对于球对称情形，选取球极坐标 (r,θ,ϕ) 较方

① 黄昆，《固体物理学》，人民教育出版社，北京，1979 年，162 页.

便.本节采取的做法,是先写出 Descartes 直角坐标中的算符,然后再由坐标变换$(x,y,z)=(x_1,x_2,x_3)\to(r,\theta,\phi)$变到球极坐标.在§4.5 中我们再来讨论直接在球极坐标中的做法.

我们可以定义

$$\hat{r}\equiv\sqrt{\hat{x}^2+\hat{y}^2+\hat{z}^2},$$

它是厄米的,本征值从 0 到∞.可以证明,这样定义的 $\hat{r}$ 与轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 对易,在空间转动下不变:

$$[\hat{r},\hat{l}_x]=[\hat{r},\hat{l}_y]=[\hat{r},\hat{l}_z]=0.$$

我们还可以定义

$$\hat{p}_r\equiv\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\hat{r}}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\frac{1}{\hat{r}}\right).$$

这样定义的 $\hat{p}_r$ 也是厄米的,并且与 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 对易,在空间转动下不变,

$$[\hat{p}_r,\hat{l}_x]=[\hat{p}_r,\hat{l}_y]=[\hat{p}_r,\hat{l}_z]=0.$$

由于

$$\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\frac{1}{\hat{r}}=(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-3\mathrm{i}\hbar)\frac{1}{\hat{r}}=\frac{1}{\hat{r}}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\left[\frac{1}{\hat{r}},\hat{\boldsymbol{p}}\right]-\frac{3\mathrm{i}\hbar}{\hat{r}}$$

$$=\frac{1}{\hat{r}}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\hat{r}},$$

我们有

$$\hat{p}_r=\frac{1}{\hat{r}}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\frac{\mathrm{i}\hbar}{\hat{r}}.\tag{5}$$

它给出 $\hat{r}\hat{p}_r=\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\mathrm{i}\hbar$,由此可以算得

$$\hat{r}[\hat{r},\hat{p}_r]=[\hat{r},\hat{r}\hat{p}_r]=\sum_i[\hat{r},\hat{x}_i\hat{p}_i]=\sum_i\hat{x}_i[\hat{r},\hat{p}_i]$$

$$=\mathrm{i}\hbar\sum_i\hat{x}_i\frac{\hat{x}_i}{\hat{r}}=\mathrm{i}\hbar\hat{r},$$

因而有对易关系

$$[\hat{r},\hat{p}_r]=\mathrm{i}\hbar.$$

Hamilton 算符 球对称系统中,粒子的运动在空间是各向同性的,没有一个特殊的方向,系统的 Lagrange 函数不依赖于 θ 和

ϕ，可以写成

$$L = \frac{p^2}{2m} - V(r).$$

相应的 Hamilton 算符为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}), \tag{6}$$

其中

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2.$$

由于系统具有球对称性，在空间转动下不变，$\hat{H}$ 与轨道角动量算符对易，$\hat{l}^2$ 是守恒量，我们可以设法用 $\hat{r}$，$\hat{p}_r^2$ 与 $\hat{l}^2$ 来表达 $\hat{p}^2$. 计算轨道角动量算符的平方，我们有

$$\begin{aligned}
\hat{l}^2 &= \hat{\boldsymbol{l}} \cdot (\hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) = (\hat{\boldsymbol{l}} \times \hat{\boldsymbol{r}}) \cdot \hat{\boldsymbol{p}} = [(\hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \times \hat{\boldsymbol{r}}] \cdot \hat{\boldsymbol{p}} \\
&= \sum_{ij} (\hat{x}_i \hat{p}_j \hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i \hat{x}_i \hat{p}_j) \\
&= \sum_{ij} [\hat{x}_i (\hat{x}_i \hat{p}_j - \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}) \hat{p}_j - \hat{x}_j \hat{p}_i (\hat{p}_j \hat{x}_i + \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}] \\
&= \hat{r}^2 \hat{p}^2 - 2\mathrm{i}\hbar \hat{\boldsymbol{r}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} - (\hat{\boldsymbol{r}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})(\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}) \\
&= \hat{r}^2 \hat{p}^2 - (\hat{r}\hat{p}_r + \mathrm{i}\hbar)\hat{r}\hat{p}_r = \hat{r}^2 \hat{p}^2 - \hat{r}^2 \hat{p}_r^2.
\end{aligned}$$

于是可以得到

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}) = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{l}^2}{2m\hat{r}^2} + V(\hat{r}).$$

球极坐标表象 在以 $\{|r\theta\phi\rangle\}$ 为基矢的球极坐标表象中，上述 Hamilton 算符成为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} + V(r), \tag{7}$$

其中，$\hat{l}^2$ 的球极坐标表示在上一章 § 3.3 中已经给出为

$$\hat{l}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right).$$

而 $\hat{p}_r$ 的球极坐标表示可由(5)式写出为

$$\hat{p}_r = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\mathrm{i}\hbar}{r}.$$

把它们代入(7)式，就得到

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r + \frac{1}{r^2}\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)\right] + V(r). \tag{8}$$

径向方程 由上式可以看出，它给出的 Schrödinger 方程在球极坐标(r,θ,ϕ)中可以求分离变量的解，

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi),$$

其中球谐函数 $\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi)$是 $\hat{l}^2$ 与 $\hat{l}_z$ 的共同本征态. 把上式代入由(8)式给出的定态 Schrödinger 方程，就有径向方程

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r + \frac{l(l+1)}{r^2}\right) + V(r)\right]R(r) = ER(r).$$

2. 波函数的单值性和本征态组的完备性

波函数的单值性 在上一章 §3.3 中我们已经从角动量本征值方程的解的完备性证明了 Schrödinger 波函数必须是单值函数. 现在我们再从角动量算符的厄米性来给出另一个证明. 在坐标表象中，角动量投影算符 $\hat{l}_z$ 的表示为

$$\hat{l}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}.$$

它的厄米性要求对于任意的态$|\psi\rangle$和$|\varphi\rangle$都有

$$\overline{\langle\psi|\hat{l}_z|\varphi\rangle} = \langle\varphi|\hat{l}_z|\psi\rangle. \tag{9}$$

在坐标表象中，上式左边成为

$$\begin{aligned}&\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\psi(\phi)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right)^*\varphi^*(\phi)\\ &= \mathrm{i}\hbar[\varphi^*(2\pi)\psi(2\pi) - \varphi^*(0)\psi(0)]\\ &\quad + \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\varphi^*(\phi)\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\psi(\phi),\end{aligned}$$

右边第二项正是(9)式右边在坐标表象中的表示. 于是，要求(9)式

成立，就必须有

$$\varphi^*(2\pi)\psi(2\pi) - \varphi^*(0)\psi(0) = 0.$$

它给出

$$\frac{\psi(2\pi)}{\psi(0)} = \frac{\varphi^*(0)}{\varphi^*(2\pi)}, \tag{10}$$

要求上式对任意波函数 $\psi(\phi)$ 与 $\varphi(\phi)$ 都成立，就必须有

$$\frac{\psi(2\pi)}{\psi(0)} = \frac{\varphi(2\pi)}{\varphi(0)} = \cdots = C, \quad C^*C = 1.$$

显然 $\psi(\phi)=$常数是 $\hat{l}_z$ 的一个本征态，本征值 $l_z=0$，由此就可定出上式中的 $C=1$. 这就证明了在坐标表象中的波函数必须是单值的，

$$\psi(2\pi) = \psi(0).$$

本征态组的完备性 与 §4.2 例 1 前的那一段证明类似地，可以看出算符 $-\hbar^2\partial^2/\partial\phi^2$ 没有上界，由 §4.1 中的定理 2 可知它的本征函数

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\phi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

在空间 $0\leqslant\phi\leqslant2\pi$ 是完备的，这正是通常的 Fourier 级数展开定理. 同样地，算符 $-\hbar^2\nabla^2$ 没有上界，它在单位球面 $0\leqslant\theta\leqslant\pi$ 和 $0\leqslant\phi\leqslant2\pi$ 上的本征函数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ 是完备的，球谐函数构成单位球面上的完备组. 一般地，若 Hamilton 算符(6)中的 $V(\boldsymbol{r})$ 有下限，则其本征函数组是完备的.

3. Coulomb 场的束缚态解

经典力学的 Runge-Lenz 矢量 在经典力学中，对于有心力场平方反比力

$$\boldsymbol{F} = -\frac{\kappa\boldsymbol{r}}{r^3},$$

从 Newton 第二定律容易证明下述 Runge-Lenz 矢量守恒：

$$e=\frac{\boldsymbol{r}}{r}-\frac{\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l}}{\kappa m}.$$

此外，还容易看出它与轨道角动量正交，$\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{l}=0$. 由于 $\boldsymbol{e}$ 与 $\boldsymbol{l}$ 互相正交并且守恒，可以取 x 轴沿 $\boldsymbol{e}$ 方向，z 轴沿 $\boldsymbol{l}$ 方向. 由于角动量守恒，粒子轨道在 xy 平面. 在上式两边点乘 $\boldsymbol{r}$，有

$$er\cos\phi=r-\frac{\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{l})}{\kappa m}=r-\frac{l^2}{\kappa m}.$$

由此解得

$$r=\frac{l^2}{\kappa m}\frac{1}{1-e\cos\phi},$$

这正是粒子的椭圆轨道方程，椭圆长轴沿 x 轴，坐标原点是椭圆左焦点，e 是椭圆偏心率，近日点在 $\phi=\pi$ 的 $-x$ 轴上，近日点距离

$$r_m=\frac{l^2}{\kappa m(1+e)}.$$

于是，系统的能量可以用守恒量 l^2 和 e^2 写成

$$E=\frac{l^2}{2mr_m^2}-\frac{\kappa}{r_m}=-\frac{\kappa^2m(1-e^2)}{2l^2}.$$

对于有心力场，系统的角动量守恒，粒子的轨道处于一个固定的平面内. 而对于平方反比力，则还有 Runge-Lenz 矢量守恒，它意味着粒子的轨道形成一个闭合的椭圆，椭圆长轴的方向和偏心率都不随时间改变. 如果力场偏离与距离平方成反比的关系，

$$\boldsymbol{F}=-\frac{\kappa\boldsymbol{r}}{r^{3+\epsilon}},$$

其中 ϵ 是一个小量，则粒子的轨道不再闭合，长轴将在运动平面内转动，近日点发生进动，粒子的轨迹是一条玫瑰形曲线. 所以，Runge-Lenz 矢量是联系于平方反比力的一个特殊的守恒量.

一个重要公式 在讨论量子力学的 Runge-Lenz 矢量之前，我们先给出一个与轨道角动量算符有关的公式：

$$\hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{A}}+\hat{\boldsymbol{A}}\times\hat{\boldsymbol{l}}=2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{A}},\quad \hat{\boldsymbol{A}}=\hat{\boldsymbol{r}},\hat{\boldsymbol{p}},\hat{\boldsymbol{l}},\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{l}},\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}}.\qquad(11)$$

对于 $\hat{\boldsymbol{A}}=\hat{\boldsymbol{r}}$，我们有

$$\hat{\boldsymbol{l}} \times \hat{\boldsymbol{r}} = (\hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) \times \hat{\boldsymbol{r}} = -\hat{\boldsymbol{r}}(\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}) + \sum_{ij} \hat{x}_i \hat{p}_j \boldsymbol{n}_j \hat{x}_i$$

$$= -\hat{\boldsymbol{r}}(\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}) + \sum_{ij} \hat{x}_i (\hat{x}_i \hat{p}_j - \mathrm{i}\hbar\delta_{ij}) \boldsymbol{n}_j$$

$$= -\hat{\boldsymbol{r}}(\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}) + \hat{r}^2 \hat{\boldsymbol{p}} - \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}},$$

其中 $\boldsymbol{n}_j$ 是 x_j 轴方向的单位矢量. 另一方面,

$$\hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{l}} = \hat{\boldsymbol{r}} \times (\hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{p}}) = \hat{\boldsymbol{r}}(\hat{\boldsymbol{r}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}) - \hat{r}^2 \hat{\boldsymbol{p}}$$

$$= \hat{\boldsymbol{r}}(\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{r}}) + 3\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}} - \hat{r}^2 \hat{\boldsymbol{p}},$$

其中用到了 $\hat{\boldsymbol{r}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} = \hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{r}} + 3\mathrm{i}\hbar$. 把上述两式相加,就得到

$$\hat{\boldsymbol{l}} \times \hat{\boldsymbol{r}} + \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{l}} = 2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{r}}.$$

类似地,可以证明(11)式对于 $\hat{\boldsymbol{A}} = \hat{\boldsymbol{p}}, \hat{\boldsymbol{l}}, \hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{l}}$ 以及 $\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{l}}$ 也成立. 把(11)式写成分量形式就可以看出,它正是轨道角动量算符与有关算符的对易关系. 特别是,当 $\hat{\boldsymbol{A}} = \hat{\boldsymbol{l}}$ 时,(11)式正是轨道角动量算符的基本对易关系.

量子力学的 Runge-Lenz 矢量 如果系统的 Hamilton 算符为

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

则如下定义的矢量算符

$$\hat{\boldsymbol{e}} = \frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}} - \frac{\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{l}} - \hat{\boldsymbol{l}} \times \hat{\boldsymbol{p}}}{2\kappa m} \tag{12}$$

与轨道角动量算符正交,

$$\hat{\boldsymbol{e}} \cdot \hat{\boldsymbol{l}} = \hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{e}} = 0,$$

并且是守恒的,

$$[\hat{\boldsymbol{e}}, \hat{H}] = 0.$$

先来证明 $\hat{\boldsymbol{e}} \cdot \hat{\boldsymbol{l}} = 0$. 用 $\hat{\boldsymbol{A}} = \hat{\boldsymbol{p}}$ 的(11)式,可以把(12)式第二项的分子改写成

$$\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{l}} - \hat{\boldsymbol{l}} \times \hat{\boldsymbol{p}} = 2\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{l}} - 2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}} = -2\hat{\boldsymbol{l}} \times \hat{\boldsymbol{p}} + 2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}.$$

不难看出,$\hat{\boldsymbol{r}} \cdot \hat{\boldsymbol{l}} = \hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{l}} = (\hat{\boldsymbol{p}} \times \hat{\boldsymbol{l}}) \cdot \hat{\boldsymbol{l}} = 0$,于是有 $\hat{\boldsymbol{e}} \cdot \hat{\boldsymbol{l}} = 0$. 类似地也有 $\hat{\boldsymbol{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{e}} = 0$.

我们再来证明$[\hat{e},\hat{H}]=0$. 可以算出

$$\left[\frac{\hat{r}}{\hat{r}},\hat{p}^2\right]=\frac{1}{\hat{r}}[\hat{r},\hat{p}^2]+\left[\frac{1}{\hat{r}},\hat{p}^2\right]\hat{r}$$

$$=\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\hat{r}}\hat{p}-\mathrm{i}\hbar\left(\hat{p}\cdot\frac{\hat{r}}{\hat{r}^3}+\frac{\hat{r}}{\hat{r}^3}\cdot\hat{p}\right)\hat{r}$$

$$=\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\hat{r}}\hat{p}-\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\hat{r}^3}(\hat{r}\cdot\hat{p})\hat{r},$$

其中用到了第一章§1.4中的基本公式

$$[\hat{F},\hat{p}_i]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{q}_i},$$

以及

$$\hat{p}\cdot\frac{\hat{r}}{\hat{r}^3}-\frac{\hat{r}}{\hat{r}^3}\cdot\hat{p}=-\sum_i\left[\frac{\hat{x}_i}{\hat{r}^3},\hat{p}_i\right]=-\mathrm{i}\hbar\sum_i\left(\frac{1}{\hat{r}^3}-\frac{3\hat{x}_i^2}{\hat{r}^5}\right)=0.$$

另一方面，我们又有

$$\left[\hat{p}\times\hat{l}-\hat{l}\times\hat{p},\frac{1}{\hat{r}}\right]=-2\mathrm{i}\hbar\left[\hat{p},\frac{1}{\hat{r}}\right]+2\left[\hat{p}\times\hat{l},\frac{1}{\hat{r}}\right]$$

$$=\frac{2\hbar^2\hat{r}}{\hat{r}^3}-2\left[\frac{1}{\hat{r}},\hat{p}\right]\times\hat{l}=\frac{2\hbar^2\hat{r}}{\hat{r}^3}+\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\hat{r}^3}\hat{r}\times(\hat{r}\times\hat{p})$$

$$=-\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\hat{r}}\hat{p}+\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\hat{r}^3}(\hat{r}\cdot\hat{p})\hat{r},$$

其中

$$\hat{r}\times(\hat{r}\times\hat{p})=\sum_{ij}\hat{x}_i\hat{x}_j\boldsymbol{n}_j\hat{p}_i-\hat{r}^2\hat{p}=(\hat{r}\cdot\hat{p})\hat{r}+\mathrm{i}\hbar\hat{r}-\hat{r}^2\hat{p}.$$

于是，代入上面得到的结果，就有

$$[\hat{e},\hat{H}]=\left[\hat{e},\frac{\hat{p}^2}{2m}-\frac{\kappa}{\hat{r}}\right]$$

$$=\frac{1}{2m}\left[\frac{\hat{r}}{\hat{r}},\hat{p}^2\right]+\frac{1}{2m}\left[\hat{p}\times\hat{l}-\hat{l}\times\hat{p},\frac{1}{\hat{r}}\right]=0.$$

$\hat{e}$的其他性质 首先，我们来算$\hat{e}$的平方. 由于$\hat{e}$与$\hat{l}$是守恒量，并且互相正交，可以期待能用$\hat{e}^2$与$\hat{l}^2$来表示系统的Hamilton算符$\hat{H}$.

$$\hat{e}^2 = \left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}} - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}} - \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}}{\kappa m}\right)^2$$

$$= 1 - \frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}} - \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}}{\kappa m} - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}} - \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}}{\kappa m}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}}$$

$$+ \left(\frac{\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}} - \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}}{\kappa m}\right)^2$$

$$= 1 - \frac{2}{\kappa m}\frac{\hat{l}^2 + \hbar^2}{\hat{r}} + \frac{\hat{p}^2(\hat{l}^2 + \hbar^2)}{\kappa^2 m^2}$$

$$= 1 + \frac{2}{\kappa^2 m}\hat{H}(\hat{l}^2 + \hbar^2), \tag{13}$$

其中用到了

$$\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}} = \sum_i\left[\frac{\hat{x}_i}{\hat{r}}, \hat{p}_i\right] = \mathrm{i}\hbar\sum_i\left(\frac{1}{\hat{r}} - \frac{\hat{x}_i^2}{\hat{r}^3}\right) = \frac{2\mathrm{i}\hbar}{\hat{r}},$$

$$(\hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}}) = \hat{\boldsymbol{l}}\cdot[\hat{\boldsymbol{p}}\times(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}})]$$

$$= \hat{\boldsymbol{l}}\cdot[\hat{\boldsymbol{p}}(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}) - \hat{p}^2\hat{\boldsymbol{l}}] = -\hat{p}^2\hat{l}^2.$$

其次，我们来算 $\hat{e}$ 的对易关系：

$$\hat{\boldsymbol{e}}\times\hat{\boldsymbol{e}} = \left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}} - \frac{\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{p}}}{\kappa m}\right)\times\left(\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}} - \frac{\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}} - \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}}{\kappa m}\right)$$

$$= \frac{(\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}} - \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}})}{\kappa^2 m^2}$$

$$- \frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}}\times\frac{\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}} - \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}}{\kappa m} - \frac{\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{p}}}{\kappa m}\times\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}}$$

$$= -\frac{\mathrm{i}\hbar\hat{p}^2\hat{\boldsymbol{l}}}{\kappa^2 m^2} + \frac{2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{l}}}{\kappa m\hat{r}} = -\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\kappa^2 m}\hat{H}\hat{\boldsymbol{l}}, \tag{14}$$

其中用到了

$$\hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{p}} = (\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times\hat{\boldsymbol{p}} = -\hat{\boldsymbol{r}}\hat{p}^2 + (\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\hat{\boldsymbol{p}}$$

$$= -\hat{p}^2\hat{\boldsymbol{r}} + (\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} - 2\mathrm{i}\hbar)\hat{\boldsymbol{p}},$$

$$\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}} = -\hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{p}} + 2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}} = \hat{\boldsymbol{r}}\hat{p}^2 - \hat{\boldsymbol{p}}(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} - \mathrm{i}\hbar),$$

$$[\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{p}^2] = 2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{p}}, \quad [\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{p}^2] = [\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{p}^2]\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = 2\mathrm{i}\hbar\hat{p}^2,$$

$$(\hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{p}})\times(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}}) = [-\hat{p}^2\hat{\boldsymbol{r}} + (\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} - 2\mathrm{i}\hbar)\hat{\boldsymbol{p}}]\times(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}})$$

$$= -\hat{p}^2\hat{r}\times(\hat{p}\times\hat{l}) - (\hat{r}\cdot\hat{p} - 2\mathrm{i}\hbar)\hat{p}^2\hat{l}$$

$$= \hat{l}\hat{p}^2(\hat{r}\cdot\hat{p}) - (\hat{r}\cdot\hat{p})\hat{p}^2\hat{l} + \mathrm{i}\hbar\hat{p}^2\hat{l} = -\mathrm{i}\hbar\hat{p}^2\hat{l}.$$

省掉的步骤没有什么特别的技巧，只要细心和有耐性，就可以算出最后的结果．需要注意的是，算符一般是不可对易的，在交换两个算符的次序时一定要小心．

我们再来写出 $\hat{e}$ 与 $\hat{l}$ 的对易关系．由于 $\hat{e}$ 是 $\hat{r}$ 和 $\hat{p}$ 以及 $\hat{p}\times\hat{l}$ 的线性叠加，运用公式(11)就可得到

$$\hat{l}\times\hat{e} + \hat{e}\times\hat{l} = 2\mathrm{i}\hbar\hat{e}. \tag{15}$$

束缚态能级的解 引入算符

$$\hat{a} = \sqrt{-\frac{\kappa^2 m}{2\hat{H}}}\hat{e}, \tag{16}$$

对易关系(15)和(14)就成为

$$\hat{l}\times\hat{a} + \hat{a}\times\hat{l} = 2\mathrm{i}\hbar\hat{a}, \tag{17}$$

$$\hat{a}\times\hat{a} = \mathrm{i}\hbar\hat{l}, \tag{18}$$

(13)式可以改写成

$$\hat{H} = -\frac{\kappa^2 m}{2(4\hat{I}^2 + \hbar^2)}, \tag{19}$$

其中

$$\hat{I} = \frac{1}{2}(\hat{l} + \hat{a}).$$

再引入

$$\hat{K} = \frac{1}{2}(\hat{l} - \hat{a}),$$

可以得到

$$\hat{I}^2 = \hat{K}^2 = \frac{1}{4}(\hat{l}^2 + \hat{a}^2).$$

用公式(11)以及(17)和(18)，还可得到它们的对易关系

$$[\hat{I}_i, \hat{K}_j] = 0,$$

$$\hat{I}\times\hat{I} = \mathrm{i}\hbar\hat{I},$$

$$\hat{\boldsymbol{K}} \times \hat{\boldsymbol{K}} = \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{K}}.$$

对于系统的束缚态，能量本征值 $E<0$. 考虑 E 取确定值的简并态空间，(16)式中的 $\hat{H}$ 可以换成 E，$\hat{\boldsymbol{a}}$ 是厄米的，上面这些对易关系与两组互相独立的角动量算符相同，若把它们的量子数分别记为 I 与 K，就有本征值

$$I, K = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots.$$

于是(19)式给出本征值

$$E_n = -\frac{\kappa^2 m}{2n^2\hbar^2}, \tag{20}$$

其中主量子数

$$n = 2I + 1 = 1, 2, 3, \cdots.$$

对于散射态，$E>0$，(16)式定义的 $\hat{\boldsymbol{a}}$ 不是厄米的，上述解法就不适用. 此外，如果不是平方反比力，虽然仍有(13)和(14)式以及上述的结果，但其中的

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

不是系统的 Hamilton 算符，不一定是守恒量，上述解法也就失去意义.

能级的简并度 在上面我们看到，能级 E_n 完全由 $\hat{\boldsymbol{I}}$ 的大小 I 来确定. 在 I 一定时，$\hat{\boldsymbol{I}}$ 的方向还有 $2I+1$ 个选择. 而在 $\hat{\boldsymbol{I}}$ 的大小和方向都确定时，由于 $\hat{K}^2=\hat{I}^2$，$\hat{\boldsymbol{K}}$ 的大小也是 I，而其方向还有 $2I+1$ 个选择. 所以，给定能级 E_n 的简并度是

$$f = (2I+1)^2 = n^2.$$

如果粒子有自旋，则上式中还应乘以在自旋空间的简并度.

在另一方面我们可以看出，由于 $\hat{\boldsymbol{l}} = \hat{\boldsymbol{I}} + \hat{\boldsymbol{K}}$ 以及 $\hat{I}^2 = \hat{K}^2$，所以轨道角动量 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 可以看成是两个大小相等的角动量 $\hat{\boldsymbol{I}}$ 与 $\hat{\boldsymbol{K}}$ 之和，其量子数只能是 0 或正整数，

$$l = 0, 1, 2, 3, \cdots.$$

由于 $\hat{H}$ 只依赖于 $\hat{I}^2$，不依赖于轨道角动量 $\hat{l}$，能级对于不同的轨道角动量本征态 $|lm\rangle$ 是简并的. I 一定时，轨道量子数最小为 $I-I=0$，最大为 $I+I=n-1$，

$$l = 0,1,2,\cdots,n-1,$$

而 l 一定时 m 有从 $-l$ 到 l 的 $2l+1$ 个取值，这样算出的能级简并度也是

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

如果系统只有球对称性，能级一般地说依赖于轨道角动量的大小 l，简并只来自轨道角动量的方向，简并度 $f=2l+1$，比 n^2 小得多. 这就表明，平方反比力系统的 Hamilton 算符一定具有比球对称性要高的对称性.

动力学对称性 从算符的对易关系和上一章 §3.2 可以看出，$\{\hat{I}_1,\hat{I}_2,\hat{I}_1\}$ 和 $\{\hat{K}_1,\hat{K}_2,\hat{K}_3\}$ 分别是生成 3 维空间转动 SO(3) 的厄米算符. 数学的研究进一步表明，这 6 个算符合起来是生成 4 维空间转动 SO(4) 的厄米算符. 所以，平方反比力系统的 Hamilton 算符不仅具有 3 维空间转动 SO(3) 的球对称性，还具有更高的 SO(4) 对称性. 守恒量 $\hat{l}$ 属于 SO(3) 对称性，而守恒量 $\hat{e}$ 则属于 SO(4) 对称性.

这种由于系统特有的动力学性质所赋予 Hamilton 算符的对称性，称为动力学对称性. 我们在上一章 §3.7 已经给出动力学对称性的一个例子：体系的 Hamilton 算符在全同粒子交换下不变，与此相应地，交换算符是守恒量. 我们在这里给出的例子则告诉我们，可以通过对称性分析来找出系统的守恒量.

上一章讨论的时空对称性，联系于系统的运动学性质，可以对应地称之为*运动学对称性*. 需要指出，系统的运动学对称性，比如这里所讨论的球对称性，也是系统 Hamilton 算符所特有的性质，而不是时空本身的性质.

§4.4 简谐振子

1. 一般性讨论

Hamilton 算符与正则量子化 一个经典系统在稳定平衡点附近做小振动的 Lagrange 函数可以近似写成[①]

$$L(q,\dot{q}) = \frac{1}{2}\sum_{ij}(\dot{q}_i m_{ij}\dot{q}_j - q_i k_{ij} q_j),$$

其中实矩阵 m_{ij}和 k_{ij}是对称的，一般地依赖于平衡点的坐标. 假设已经变换到简正坐标，则 m_{ij}与 k_{ij}都是对角化的，上式简化成

$$L(q,\dot{q}) = \frac{1}{2}\sum_{i}(m_i\dot{q}_i^2 - k_i q_i^2),$$

不同简正模式的振动之间没有耦合，是互相独立的. 要求平衡是稳定的，m_i 和 k_i 就都是正的. 变换到正则形式，就有

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = m_i\dot{q}_i,$$

$$H(p,q) = \sum_i p_i\dot{q}_i - L = \sum_i\left(\frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2}k_i q_i^2\right).$$

运用正则量子化规则，系统的 Hamilton 算符就是

$$\hat{H} = \sum_i\left(\frac{\hat{p}_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2}k_i\hat{q}_i^2\right), \tag{21}$$

其中正则坐标算符 $\hat{q}_i$ 与正则共轭动量算符 $\hat{p}_i$ 满足 Heisenberg 对易关系

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

能量本征值 我们在这里可以用第二章 §2.4 引入的移位算符

---

① H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Cambridge, Mass., 1957.

$$\hat{a}_i=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha_i\hat{q}_i+\frac{\mathrm{i}}{\hbar\alpha_i}\hat{p}_i\right),\quad \hat{a}_i^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha_i\hat{q}_i-\frac{\mathrm{i}}{\hbar\alpha_i}\hat{p}_i\right),$$

其中取

$$\alpha_i=\sqrt{\frac{m_i\omega_i}{\hbar}},$$

ω_i 是第 i 个简正模式的经典圆频率，

$$\omega_i=\sqrt{\frac{k_i}{m_i}}.$$

于是，在 Hamilton 算符(21)中代入

$$\hat{q}_i=\frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha_i}(\hat{a}_i+\hat{a}_i^\dagger),\quad \hat{p}_i=-\frac{\mathrm{i}\,\hbar\alpha_i}{\sqrt{2}}(\hat{a}_i-\hat{a}_i^\dagger),$$

就有

$$\hat{H}=\frac{1}{2}\sum_i(\hat{a}_i\hat{a}_i^\dagger+\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i)\hbar\omega_i=\sum_i\left(\hat{n}_i+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_i,\qquad(22)$$

其中 $\hat{n}_i=\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i$，移位算符有对易关系

$$[\hat{a}_i,\hat{a}_j]=[\hat{a}_i^\dagger,\hat{a}_j^\dagger]=0,\quad [\hat{a}_i,\hat{a}_j^\dagger]=\delta_{ij}.$$

上式表明，不同简正模式的 $\hat{n}_i$ 是互相对易的，所以 $\{\hat{n}_i\}$ 与(22)式的 $\hat{H}$ 对易，$\{\hat{n}_i\}$ 的共同本征态也就是 $\hat{H}$ 的本征态，

$$\hat{H}|n_1n_2\cdots n_N\rangle=E_n|n_1n_2\cdots n_N\rangle,$$

本征值

$$E_n=\sum_i\left(n_i+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_i,\quad n_i=0,1,2,\cdots.$$

所以，(22)式的 $\hat{H}$ 描写一组振动量子的集合，$\hat{a}_i^\dagger$ 和 $\hat{a}_i$ 分别是第 i 种振动量子的产生和消灭算符，居位数 $\hat{n}_i=\hat{a}_i^\dagger\hat{a}_i$ 是这种量子的数目算符，$\hbar\omega_i$ 是每个这种量子带有的能量.

能量本征态 用第二章 §2.4 给出的公式，可以把本征态 $|n_1n_2\cdots n_N\rangle$ 写成

$$|n_1n_2\cdots n_N\rangle=\prod_i\frac{(\hat{a}_i^\dagger)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}|0\rangle,$$

其中$|0\rangle$是系统能量本征值最小的基态

$$\hat{n}_i|0\rangle = 0, \quad \hat{H}|0\rangle = \frac{1}{2}\sum_i \hbar\omega_i|0\rangle.$$

用§2.4给出的公式，还可写出本征态$|n_1n_2\cdots n_N\rangle$在简正坐标表象的波函数，

$$\varphi_n(q) = \langle q_N\cdots q_2q_1|n_1n_2\cdots n_N\rangle = \prod_i \varphi_{n_i}(q_i)$$

$$= \prod_i\left(\frac{a_i}{\sqrt{\pi}\,2^{n_i}n_i!}\right)^{1/2} e^{-a_i^2q_i^2/2}H_{n_i}(a_iq_i).$$

2. 三维球对称简谐振子

能级的简并 考虑在球对称抛物线势场中的粒子，我们有

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{r}^2, \tag{23}$$

其中

$$\hat{r}^2 = \hat{x}^2 + \hat{y}^2 + \hat{z}^2, \quad \hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2,$$

x,y,z是三维空间的Descartes直角坐标，系统的自由度$N=3$. 于是，系统的Hamilton算符可以写成

$$\hat{H} = \left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2 + \hat{n}_3 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega = \left(\hat{n} + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \tag{24}$$

其中

$$\hat{n} = \hat{n}_1 + \hat{n}_2 + \hat{n}_3 = \hat{a}_1^\dagger\hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger\hat{a}_2 + \hat{a}_3^\dagger\hat{a}_3,$$

从而系统的能量本征值为

$$E_n = \sum_{i=1}^{3}\left(n_i + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

$$= \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega,$$

其中

$$n = n_1 + n_2 + n_3, \quad n_i = 0,1,2,\cdots.$$

显然，除了$n=0$的基态以外，所有$n>0$的激发态都是简并

的.对于一个给定的 n,n_1 和 n_2 以及 n_3 都可以取从 0 到 n 的值,但要求它们的和等于 n. 能级 E_n 的简并数,就是把 n 个量子分配给 3 个自由度的方式数. 考虑到分给每一个自由度的量子数可以是 0,就能算出这个方式数为

$$f=\sum_{n_1=0}^{n}(n-n_1+1)=\frac{1}{2}(n+2)(n+1).$$

宇称 由于产生和消灭算符 $\hat{a}_i^\dagger$ 和 $\hat{a}_i$ 是坐标和动量算符 $\hat{x}_i$ 和 $\hat{p}_i$ 的线性组合,而 $\hat{x}_i$ 和 $\hat{p}_i$ 都是极矢量,所以 $\hat{a}_i^\dagger$ 和 $\hat{a}_i$ 也是极矢量,与空间反射算符 $\hat{P}$ 反对易,

$$\hat{P}\hat{a}_i^\dagger\hat{P}^{-1}=-\hat{a}_i^\dagger,\quad \hat{P}\hat{a}_i\hat{P}^{-1}=-\hat{a}_i.$$

于是,如果我们假定基态 $|0\rangle$ 的宇称为正,

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

就有

$$\hat{P}|n_1n_2n_3\rangle=\hat{P}\frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{n_2}(\hat{a}_3^\dagger)^{n_3}}{\sqrt{n_1!n_2!n_3!}}|0\rangle=(-1)^n|0\rangle.$$

这就表明,*每个振动量子带有 −1 的宇称,能级 E_n 的宇称是 $(-1)^n$,相差一个能量子的两个能级宇称相反.*

简并态的分类 Hamilton 算符(23)式具有 3 维空间转动 SO(3) 的球对称性,l 是守恒量,属于能级 E_n 的简并态不仅可以用在 3 个方向的振动量子数 n_1,n_2 和 n_3 来分类,也可以用轨道角动量的量子数 l 和 m 来分类. 换句话说,我们既可以选择 $\{|n_1n_2n_3\rangle\}$ 表象,也可以选择 $\{|nlm\rangle\}$ 表象. 需要注意的是,能级只依赖于 n,不依赖于 l,对于给定的能级 E_n,l 还可以有不同的选择. 考虑到能级 E_n 一定时,n 有确定值,系统的宇称一定,l 必须与 n 具有相同的奇偶性. 再要求这两个简并态空间的维数一样,就可以把 l 的取值完全确定. 例如 $n=2$ 的简并度 $f=6$,宇称为偶,l 可以取 0 和 2. $l=0$ 的态数为 1,$l=2$ 的态数为 5,张成 6 维简并态空间. 又如 $n=3$ 的简并度 $f=10$,l 可以取 1 和 3,由 3 个 $l=1$ 的态和 7 个 $l=3$ 的态构成 10 维简并态空间.

实际上，Hamilton 算符(23)式具有比 SO(3)更高的对称性. 从(24)式可以看出，用 3×3 的幺正矩阵 U(3)对 3 维复矢量($\hat{a}_1^\dagger$，$\hat{a}_1^\dagger$，$\hat{a}_3^\dagger$)作变换时，$\hat{H}$ 不变，所以它具有 U(3)的对称性. 更一般地，(21)或(22)式的 N 维简谐振子具有 U(N)的对称性. 简谐振子的这种对称性，也是一种动力学对称性.

一般的 3 维复矩阵 A 有 2×9 个实参数. 幺正矩阵有 9 个条件

$$A^\dagger A = 1,$$

所以幺正矩阵的 U(3)只有 9 个实参数. 相应的厄米算符有 9 个. 可以证明，由下列 9 个算符

$$\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1,\ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2,\ \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_3,\ \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_1,\ \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2,\ \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_3,\ \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_1,\ \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_2,\ \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3$$

可以构成生成 U(3)转动的算符. 它们都与 $\hat{n}$ 对易，保持 n 不变，是作用于能量一定的简并态空间的算符.

除了算符 $\hat{n}$ 以外，用上述算符还可以构成 8 个独立的算符. 其中 3 个为

$$\hat{l} = -\mathrm{i}\hbar\hat{a}^\dagger \times \hat{a}.$$

其余 5 个有不同的选择，我们就不一一写出. 我们不打算深入群论的细节，只想在这里指出，上述讨论表明，与 U(3)对称性相应的守恒量有：$\hat{n}$，$\hat{l}^2$，$\hat{l}_3$. 于是，我们可以用量子数 l 与 m 来对能级的简并态分类，正像我们前面已经指出的那样.

§4.5 宏观模型

本节的讨论要用到广义坐标表象. 在讨论宏观模型的具体例子之前，我们先给出广义坐标表象中的动能算符，作为对第二章 §2.5 的一个补充.

1. 广义坐标表象中的动能算符

Hamilton 函数 系统的 Lagrange 函数 $L(q,\dot{q})$可以一般地

写成动能 T 与势能 V 之差，

$$L(q,\dot{q}) = T(q,\dot{q}) - V(q),$$

其中势能 $V(q)$只是广义坐标的函数. 在广义速度远小于光速 c 的非相对论情形，与§4.2 类似地，我们有

$$T(q,\dot{q}) = \frac{1}{2}\sum_{ij}\dot{q}_i m_{ij}\dot{q}_j + \sum_i A_i\dot{q}_i,$$

这里质量矩阵$\{m_{ij}\}$和 A_i 可以依赖于广义坐标 q. 于是，系统的广义动量为

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \sum_j m_{ij}\dot{q}_j + A_i,$$

由它可以解出广义速度

$$\dot{q}_i = \sum_j (m^{-1})_{ij}(p_j - A_j),$$

其中 m^{-1}是 m 的逆矩阵. 把上式代入 Hamilton 函数的定义式，就得到

$$\begin{aligned} H(p,q) &= \sum_i p_i\dot{q}_i - L(q,\dot{q}) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{ij}(p_i - A_i)(m^{-1})_{ij}(p_j - A_j) + V(q). \end{aligned}$$

动能算符 没有外场时，系统的经典动能为

$$T = \frac{1}{2}\sum_{ij} p_i(m^{-1})_{ij}p_j.$$

用对应原理写出量子力学的动能算符时，可以取

$$\hat{T} = \frac{1}{2}\sum_{ij} A\hat{p}_i B(m^{-1})_{ij}\hat{p}_j C, \tag{25}$$

其中 A,B,C 为 q 的函数，应满足经典对应条件

$$ABC = 1,$$

以及使得 $\hat{T}$ 为厄米的条件

$$B^* = B, \quad C^* = A.$$

于是我们有

$$A = C^* = B^{-1/2}e^{i\beta},$$

其中 β 为 q 的任意实函数. 在(25)式中代入§2.5的广义动量算符公式,就得到

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{ij}B^{-1/2}w^{-1/2}\frac{\partial}{\partial q_i}B(m^{-1})_{ij}\frac{\partial}{\partial q_j}w^{1/2}B^{-1/2}.$$

β 的作用相应于一个改变相位的幺正变换,在上式中已令它为0. 这相当于选择了一个合适的表象. 另外,算符 $\hat{T}$ 对波函数的作用在坐标变换下应是不变的,这就要求

$$B=w=\sqrt{g},$$

这里的 g 就是质量矩阵 (m_{ij}) 的行列式,

$$g=\|m\|.$$

于是我们最后得到

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2}\sum_{ij}\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial q_i}\sqrt{g}(m^{-1})_{ij}\frac{\partial}{\partial q_j}.$$

不难看出,当 q 为曲线坐标时,这正是通常在曲线坐标中的 Laplace-Beltrami 算符[①] ∇^2 乘以 $-\hbar^2/2$:

$$\nabla^2=\sum_{ij}\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial q_i}\sqrt{g}(m^{-1})_{ij}\frac{\partial}{\partial q_j}.$$

2. 对称陀螺

Hamilton 算符 我们来考虑在随体坐标中绕第三轴有旋转对称性的刚性陀螺. 可以用 Euler 角 (α,β,γ) 来描述它绕对称轴上一固定点的转动[②],把它的动能写成

$$T=\frac{1}{2}I_1(\omega_1^2+\omega_2^2)+\frac{1}{2}I_3\omega_3^2,$$

其中 I_1 和 I_3 分别为刚体对第1和第3轴的转动惯量, ω_1, ω_2 和 ω_3

---

① W. Pauli, Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik, *Handb. Phys.* 24, I (1933); J. M. Domingos and M. H. Caldeira, *Found. Phys.* 14 (1984) 607.

② A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton, 1957.

为刚体在随体坐标中的角速度，

$$\begin{cases}\omega_1 = -\dot{\alpha}\sin\beta\cos\gamma + \dot{\beta}\sin\gamma, \\ \omega_2 = \dot{\alpha}\sin\beta\sin\gamma + \dot{\beta}\cos\gamma, \\ \omega_3 = \dot{\alpha}\cos\beta + \dot{\gamma},\end{cases}$$

把它们代入动能的表达式，就可以求出

$$(m_{ij}) = \begin{pmatrix} I_1\sin^2\beta + I_3\cos^2\beta & 0 & I_3\cos\beta \\ 0 & I_1 & 0 \\ I_3\cos\beta & 0 & I_3 \end{pmatrix},$$

从而算出权函数

$$w(\alpha,\beta,\gamma) = \sqrt{\|m\|} = I_1 I_3^{1/2}\sin\beta.$$

于是，与广义坐标 α,β 和 γ 正则共轭的广义动量算符分别为

$$\hat{p}_\alpha = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\alpha}, \quad \hat{p}_\beta = -\mathrm{i}\hbar\frac{1}{\sqrt{\sin\beta}}\frac{\partial}{\partial\beta}\sqrt{\sin\beta}, \quad \hat{p}_\gamma = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\gamma}, \tag{26}$$

而刚体的动能算符为

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2I_1}\left[\frac{1}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} - \frac{2\cos\beta}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma} + \frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\sin\beta\frac{\partial}{\partial\beta} + \left(\frac{I_1}{I_3} + \cot^2\beta\right)\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right].$$

对于球对称陀螺，$I_1 = I_3 = I$，上式简化为

$$\hat{T}_s = -\frac{\hbar^2}{2I}\left[\frac{1}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} - \frac{2\cos\beta}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma} + \frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\sin\beta\frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{1}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right]. \tag{27}$$

本征态 上式乘以 $2I$ 就是角动量平方算符 $\hat{J}^2$，

$$\hat{J}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} - \frac{2\cos\beta}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma} + \frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\sin\beta\frac{\partial}{\partial\beta} + \frac{1}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2}\right],$$

而(26)式中的 $\hat{p}_\alpha$ 与 $\hat{p}_\gamma$，其实分别就是对称陀螺相对于固定坐标系与随体坐标系的角动量第三分量的算符. 它们是互相对易的，可以求它们的共同本征态，

$$\hat{J}^2|\lambda\mu\nu\rangle = \lambda(\lambda+1)\hbar^2|\lambda\mu\nu\rangle,$$

$$\hat{p}_\alpha|\lambda\mu\nu\rangle = \mu\hbar|\lambda\mu\nu\rangle,$$

$$\hat{p}_\gamma|\lambda\mu\nu\rangle = \nu\hbar|\lambda\mu\nu\rangle,$$

其中 λ, μ 和 ν 分别是 $\hat{J}^2$, $\hat{p}_\alpha$ 和 $\hat{p}_\gamma$ 的量子数. 写在广义坐标表象 $\{|\alpha\beta\gamma\rangle\}$ 中，就有

$$\Big[\frac{1}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} - \frac{2\cos\beta}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\alpha\partial\gamma} + \frac{1}{\sin\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\sin\beta\frac{\partial}{\partial\beta}$$
$$+ \frac{1}{\sin^2\beta}\frac{\partial^2}{\partial\gamma^2} + \lambda(\lambda+1)\Big]\mathrm{Y}(\alpha\beta\gamma) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\mathrm{Y}(\alpha\beta\gamma) = \mathrm{i}\mu\mathrm{Y}(\alpha\beta\gamma),$$

$$\frac{\partial}{\partial\gamma}\mathrm{Y}(\alpha\beta\gamma) = \mathrm{i}\nu\mathrm{Y}(\alpha\beta\gamma),$$

其中 $\mathrm{Y}(\alpha\beta\gamma) = \langle\gamma\beta\alpha|\lambda\mu\nu\rangle$ 是本征态 $|\lambda\mu\nu\rangle$ 在广义坐标表象中的波函数.

上述方程显然有分离变量解

$$\mathrm{Y}(\alpha\beta\gamma) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mu\alpha+\nu\gamma)}y(\beta),$$

引入 $\zeta=\cos\beta$ 和

$$y(\beta) = (1-\zeta)^{(\mu-\nu)/2}(1+\zeta)^{(\mu+\nu)/2}f(\zeta), \qquad (28)$$

可得 $f(\zeta)$ 的方程

$$(1-\zeta^2)f'' + 2[\nu-(\mu+1)\zeta]f'$$
$$+ (\lambda-\mu)(\lambda+\mu+1)f = 0.$$

这正是 $\alpha=\mu-\nu$, $\beta=\mu+\nu$, $n=\lambda-\mu$ 的 Jacobi 方程(见 § 3.3)，所以

$$\mathrm{Y}_{\lambda\mu\nu}(\alpha\beta\gamma) = N_{\lambda\mu\nu}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mu\alpha+\nu\gamma)}2^{\mu}\left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{\mu+\nu}$$
$$\cdot\left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{\mu-\nu}P_{\lambda-\mu}^{(\mu-\nu,\mu+\nu)}(\cos\beta),$$

其中 $N_{\lambda\mu\nu}$是归一化常数. 如果取归一化条件

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\alpha\sin\beta\mathrm{d}\beta\mathrm{d}\gamma Y^*_{\lambda\mu\nu}(\alpha\beta\gamma)Y_{\lambda'\mu'\nu'}(\alpha\beta\gamma)$$

$$= \frac{8\pi^2}{2\lambda+1}\delta_{\lambda\lambda'}\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'},$$

则可由 Jacobi 多项式的正交关系(见§3.3)算得

$$N_{\lambda\mu\nu} = \sqrt{\frac{(\lambda+\mu)!(\lambda-\mu)!}{(\lambda+\nu)!(\lambda-\nu)!}}\frac{1}{2\mu}.$$

本征值 在上一章§3.3 Jacobi 多项式的 Rodrigues 公式中，$n, n+\alpha, n+\beta$ 只能取 0 或正整数，而改变(28)式中 μ 和 ν 的正负号，上述讨论仍成立. 所以 $\lambda\pm\mu$ 和 $\lambda\pm\nu$ 只能取 0 或正整数. 从而，与§3.3 的讨论类似地，我们有

$$\lambda = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \cdots,$$

$$\mu, \nu = -\lambda, -\lambda+1, \cdots, \lambda-1, \lambda.$$

所以，对称陀螺的角动量既有 0 和整数解，也有半奇数解. 实际上，由于§3.3 对 Schrödinger 波函数的论断在这里不适用，波函数 $Y_{\lambda\mu\nu}(\alpha\beta\gamma)$ 并不必须是单值的. 当 λ 取 0 或整数时波函数是单值函数，而当 λ 取半奇数时波函数是双值函数.

由于没有势能项，系统的动能算符也就是 Hamilton 算符，

$$\hat{H} = \hat{T}_r = \frac{\hat{J}^2}{2I}.$$

所以，角动量本征态$|\lambda\mu\nu\rangle$也就是系统的能量本征态，

$$\hat{H}|\lambda\mu\nu\rangle = E_\lambda|\lambda\mu\nu\rangle,$$

$$E_\lambda = \frac{\lambda(\lambda+1)\hbar^2}{2I}.$$

可以看出，对称陀螺的能级只依赖于量子数 λ，与量子数 μ 和 ν 无关，简并度为

$$f = (2\lambda+1)^2,$$

这来自对称陀螺在固定坐标和随体坐标中的转动不变性.

对于 $I_1 \neq I_3$ 的情形，可以类似地求解. 现在有

$$\hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{J}^2}{2I_1} + \frac{I_1 - I_3}{2I_1 I_3}\hat{p}_\gamma^2,$$

角动量本征态 $|\lambda\mu\nu\rangle$ 也还是系统的能量本征态，只是现在能量本征值不仅依赖于 λ，还依赖于 ν，

$$\hat{H}|\lambda\mu\nu\rangle = E_{\lambda\nu}|\lambda\mu\nu\rangle,$$

$$E_{\lambda\nu} = \frac{\lambda(\lambda+1)\hbar^2}{2I_1} + \frac{I_1 - I_3}{2I_1 I_3}\nu^2\hbar^2.$$

这时陀螺在随体坐标中仍有转动不变性，使得能级有简并度

$$f = 2\lambda + 1.$$

对于非对称刚性陀螺的情形，在三个主轴方向的转动惯量都不相同，没有任何转动不变性，问题要比这里讨论的复杂得多.

3. 均匀介质球的四极振动

描述四极振动的广义坐标 考虑一个半径为 R_0 的均匀介质球. 其形状偏离球形的运动，可以用表面的球极坐标 $r(\theta\phi)$ 来描述，一般地写成

$$r = R_0\Big[1 + \sum_{lm} \alpha_{lm} Y_{lm}(\theta\phi)\Big].$$

在这里，参数 α_{lm} 就是用来描述球面变形的广义坐标. 没有变形时，$\alpha_{lm}=0$，变形很小时，α_{lm} 是小量. $l=1$ 的情形可以略去，因为它相应于球体的整体移动. 如果介质的密度是常数，$l=0$ 的情形也可以略去，因为它相应于球体的均匀膨胀或收缩. 于是，最简单的情形就是 $l=2$，

$$r = R_0\Big[1 + \sum_{m} \alpha_m Y_{2m}(\theta\phi)\Big],$$

它描述球体的四极形变，有 5 个参数：$\alpha_0, \alpha_{\pm1}, \alpha_{\pm2}$.

由于 r 是实数，而 $Y_{lm}^* = (-1)^m Y_{l,-m}$，所以要求

$$\alpha_m^* = (-1)^m \alpha_{-m}.$$

这就是说，描述在球面附近的四极振动，需要 5 个独立的实参数.

如果介质的密度是常数，表面的变化就要保持体积不变. 这个条件是对这5个参数的一个约束，通常并不明写出来.

r 在空间转动下不变，是一个标量. 这就要求 α_m 在空间转动下的变换像 $Y_{2m}^*(\theta\phi)$ 一样，使得 $\sum \alpha_m Y_{2m}(\theta\phi)$ 在空间转动下的变换像 $\sum Y_{2m}^*(\theta'\phi')Y_{2m}(\theta\phi)$ 一样. 后者根据球谐函数加法定理是一个标量. 此外，r 在空间反演下不变，而

$$Y_{lm}(\pi-\theta,\phi+\pi)=(-1)^l Y_{lm}(\theta\phi),$$

这就要求 α_{lm} 在空间反演下变为 $(-1)^l\alpha_{lm}$. 对于 $l=2$ 的四极形变，这就意味着要求 α_m 在空间反演下不变.

Hamilton 算符 对于在球面 $r=R_0$ 附近的小振动，系统的 Lagrange 函数可以写成

$$L=\frac{1}{2}B\sum_m \dot{\alpha}_m^*\dot{\alpha}_m-\frac{1}{2}C\sum_m \alpha_m^*\alpha_m,$$

其中 B 与 C 是两个实参数. 于是，与广义坐标 α_m 正则共轭的广义动量为

$$\beta_m=(-1)^m B\dot{\alpha}_{-m}=B\dot{\alpha}_m^*,$$

而相应的 Hamilton 函数为

$$H=\frac{1}{2B}\sum_m \beta_m^*\beta_m+\frac{1}{2}C\sum_m \alpha_m^*\alpha_m.$$

由于 B 不依赖于广义坐标 α_m，在进行量子化时，可以直接采用正则量子化程序. 引入算符 $\hat{\alpha}_m$ 与 $\hat{\beta}_m$，要求它们具有对称性

$$\hat{\alpha}_m^\dagger=(-1)^m\hat{\alpha}_{-m},\quad \hat{\beta}_m^\dagger=(-1)^m\hat{\beta}_{-m},$$

满足 Heisenberg 对易关系

$$[\hat{\alpha}_m,\hat{\alpha}_{m'}]=0,\quad [\hat{\beta}_m,\hat{\beta}_{m'}]=0,\quad [\hat{\alpha}_m,\hat{\beta}_{m'}]=\mathrm{i}\hbar\delta_{mm'},$$

并且与空间反演算符对易，亦即一般地有

$$\hat{P}\hat{\alpha}_{lm}\hat{P}^{-1}=(-1)^l\hat{\alpha}_{lm},\quad \hat{P}\hat{\beta}_{lm}\hat{P}^{-1}=(-1)^l\hat{\beta}_{lm}.$$

相应的 Hamilton 算符为

$$\hat{H}=\frac{1}{2B}\sum_m \hat{\beta}_m^\dagger\hat{\beta}_m+\frac{1}{2}C\sum_m \hat{\alpha}_m^\dagger\hat{\alpha}_m.$$

能量本征态 可以看出,上述 Hamilton 算符描述一个 5 维简谐振子系统,具有共同的圆频率

$$\omega=\sqrt{\frac{C}{B}}.$$

引入移位算符

$$\hat{a}_m=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{B\omega}{\hbar}}\hat{\alpha}_m+\mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{B\hbar\omega}}\beta_m^{\dagger}\right),$$

$$\hat{a}_m^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{B\omega}{\hbar}}\hat{\alpha}_m^{\dagger}-\mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{B\hbar\omega}}\beta_m\right),$$

就可以把上述 Hamilton 算符改写成

$$\hat{H}=\sum_m\left(\hat{n}_m+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\left(\hat{n}+\frac{5}{2}\right)\hbar\omega,$$

其中

$$\hat{n}=\sum_m\hat{n}_m=\sum_m\hat{a}_m^{\dagger}\hat{a}_m.$$

于是能量本征值为

$$E_n=\left(n+\frac{5}{2}\right)\hbar\omega.$$

对于一个确定的能级,主量子数 n 一定,它在 5 个简并量子数 n_m 中还可以有不同的分布. 例如,$n=1$ 时,简并度 $f=5$,$n=2$ 时,简并度 $f=15$. 另一方面,由于在空间转动下 $\hat{a}_m$ 像 $Y_{2m}^{*}(\theta\phi)$ 一样变换,所以每一个量子具有 $l=2$ 的角动量. $n=1$ 时,有一个量子,态的角动量和字称 $J^P=2^+$,角动量投影有 5 个方向,与从 5 个简并量子数 n_m 给出的简并度一致. $n=2$ 时,有 2 个量子,态的角动量和字称有 $J^P=0^+,2^+,4^+$,角动量投影态有 $1+5+9=15$ 个,与上面给出的 $f=15$ 一致.

4. LC 回路的振荡

LC 回路的 Lagrange 函数可以写成①

$$L_c = \frac{1}{2}L\dot{Q}^2 - \frac{Q^2}{2C},$$

其中 L 是回路的电感，C 是回路的电容. 把电容器极板上的电量 Q 作为系统的广义坐标，与其正则共轭的动量 P 就是

$$P = L\dot{Q}.$$

于是系统的 Hamilton 函数为

$$H = \frac{P^2}{2L} + \frac{Q^2}{2C}.$$

L 是不依赖于广义坐标 Q 的常数，所以我们可以直接用正则量子化规则，引入算符 $\hat{Q}$ 与 $\hat{P}$，要求它们满足 Heisenberg 对易关系，

$$[\hat{Q},\hat{P}] = \mathrm{i}\hbar.$$

系统的 Hamilton 算符为

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2L} + \frac{\hat{Q}^2}{2C}.$$

这是一维简谐振子系统，能量本征值

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

$$\omega = \frac{1}{\sqrt{LC}}.$$

所以，回路具有零点能

$$E_0 = \frac{\hbar}{2\sqrt{LC}},$$

电量与电流的测不准为

① H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Addison-Wesley Press, Cambridge, Mass., 1957.

$$\Delta Q \Delta \dot{Q} \geqslant \frac{\hbar}{2L}.$$

当回路的$\sqrt{LC}$足够小时，回路的量子力学零点能就必须考虑，而当回路的 L 足够小时，电量与电流的测不准就必须考虑.

§4.6 非厄米的 $\hat{H}$

1. 一般性讨论

本章前面的讨论，都是先写出系统的经典 Lagrange 函数，然后变换到 Hamilton 正则形式，再运用正则量子化规则过渡到量子力学. 当然这并不是必须和惟一的程序. 实际上，这个程序的依据是量子力学与经典力学的对应关系：量子力学在 $\hbar\to 0$ 的近似下给出经典力学. 所以，这个程序只适用于有经典对应的系统，是一个有用和技术性的但不是基本和原理性的程序. 在原理上，量子力学是比经典力学更基本的理论，所有的讨论都可以直接从量子力学出发. 本节的模型没有经典对应，我们将直接从系统的 Hamilton 算符出发.

在本章 §4.1 我们曾经指出，在原则上，一个系统的 Hamilton 算符应该是厄米的，这是由于我们要求时间发展算符是幺正的，以保证系统的态矢量长度不变，满足态矢量长度的时间平移不变性（见第一章 §1.4 的讨论）. 如果我们放弃这个要求，则系统的 Hamilton 算符可以是非厄米的，含有虚部. 当然，这只能看成是一种唯象的做法.

含虚部的 Hamilton 算符 在选定了正则变量 $\hat{q}$ 与 $\hat{p}$ 以后，我们可以把系统的 Hamilton 算符写成

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \mathrm{i}\hat{W},$$

其中 $\hat{H}_0$ 和 $\hat{W}$ 是厄米的，一般地说依赖于 $\hat{q}$ 与 $\hat{p}$，但通常不依赖于时间 t. 这个 Hamilton 算符是非厄米的，

$$\hat{H}^\dagger = \hat{H}_0 + \mathrm{i}\hat{W}.$$

如果 $\hat{H}_0$ 与 $\hat{W}$ 对易，则它们有共同本征态 $|Ew\rangle$，

$$\hat{H}_0|Ew\rangle = E|Ew\rangle, \quad \hat{W}|Ew\rangle = w|Ew\rangle.$$

这个本征态也就是 $\hat{H}$ 的本征态，

$$\hat{H}|Ew\rangle = \epsilon|Ew\rangle,$$

其中的本征值 ϵ 是由本征值 E 与 w 组成的复数，

$$\epsilon = E - \mathrm{i}w.$$

这种本征态组 $\{|Ew\rangle\}$ 可以正交归一化，具有完备性，没有什么特别的地方.

如果 $\hat{H}_0$ 与 $\hat{W}$ 不对易，则它们没有共同本征态，$\hat{H}$ 的本征值方程可以写成

$$\hat{H}|\epsilon\rangle = \epsilon|\epsilon\rangle,$$

其中 ϵ 是复数，一般不能分解成另外两个厄米算符的本征值，不同本征值的本征态并不正交，

$$\langle\epsilon|\epsilon'\rangle \neq 0, \quad \epsilon \neq \epsilon'.$$

我们在第二章 §2.4 中讨论过的移位算符 $\hat{a}$ 的本征态 $|z\rangle$，就是这种类型的本征态. 由于没有正交性，也就没有完备性公式，处理时需要特别的考虑.

虚部 $\hat{W}$ 的作用 在 Hamilton 算符中引入虚部 $\hat{W}$，态矢量 $|\psi\rangle$ 满足的 Schrödinger 方程就成为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi\rangle = (\hat{H} - \mathrm{i}\hat{W})|\psi\rangle. \tag{29}$$

我们来证明这个态矢量的长度不守恒. 上述方程的厄米共轭为

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi| = \langle\psi|(\hat{H} + \mathrm{i}\hat{W}). \tag{30}$$

在(29)式左边乘以 $\langle\psi|$，在(30)式右边乘以 $|\psi\rangle$，然后两式相减，就有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\psi\rangle = -\frac{2}{\hbar}\langle\psi|\hat{W}|\psi\rangle.$$

由此可以看出，$|\psi\rangle$ 的模方，或者说态矢量的长度将随时间改变.

特别是,当

$$\langle\hat{W}\rangle=\frac{\langle\psi|\hat{W}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}>0$$

时,态矢量$|\psi\rangle$的模方将随时间指数衰减.

归一化态矢量的模方是系统在这个态上的总的概率.态矢量的模方随时间衰减,就表明系统不稳定,它在这个态上的概率随时间衰减.当$\hat{W}$很小时,这种衰减很慢,这种态就是一种准稳态.一般地说,非厄米的 Hamilton 算符唯象地描述系统在一个子空间的行为,随着时间的增加,系统进入或逸出此子空间,Hamilton 算符虚部的平均值描述这种进入或逸出的速率.

例:能级的寿命 设系统的$\hat{H}_0$与$\hat{W}$对易,初态是它们的归一化共同本征态$|Ew\rangle$.由于$\hat{H}_0$与$\hat{W}$对易,可以直接写出

$$|\psi(t)\rangle=e^{-i(\hat{H}_0-i\hat{W})t/\hbar}|Ew\rangle=e^{-wt/\hbar}e^{-iEt/\hbar}|Ew\rangle.$$

于是有

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=e^{-2wt/\hbar}=e^{-t/\tau},$$

其中τ称为系统处于能级E的寿命

$$\tau=\frac{\hbar}{2w}=\frac{\hbar}{\gamma},$$

$\gamma=2w$称为这个能级的自然宽度,简称宽度.

2. 中性 K 介子的奇异数振荡

中性 K 介子物理 中性K^0介子和它的反粒子$\overline{K^0}$的质量m_{K^0}相等,是不稳定粒子,分别具有奇异数$S=1$和$S=-1$,内禀宇称$P=-1$,自旋$s=0$.它们在强相互作用中产生,通过弱相互作用衰变.

中性 K 介子衰变的量子力学 考虑由这两个态$|K^0\rangle$和$|\overline{K^0}\rangle$构成的子空间,它们的衰变可以唯象地用 Hamilton 算符

$$\hat{H}=\hat{M}-i\frac{\hat{\Gamma}}{2}$$

来描述，$\hat{M}$ 主要依赖于产生它们的强相互作用，称为质量矩阵，$\hat{\Gamma}$ 则依赖于引起它们衰变的弱相互作用，称为衰变矩阵. 可以证明，如果系统在正反粒子变换 C（见下一章 §5.4）、空间反射 P 和时间反演 T 的联合作用下不变，则在以 $|K^0\rangle$ 和 $|\overline{K^0}\rangle$ 为基矢的表象中 $\hat{H}$ 的对角元相等，我们可以写出

$$\hat{H} = \hat{M} - \mathrm{i}\,\frac{\Gamma}{2} = \begin{pmatrix} A & p^2 \\ q^2 & A \end{pmatrix},$$

其中 A，p^2 和 q^2 可以是复数①. 在彻底的微观理论处理中，这几个模型参数都可以从系统的微观 Hamilton 算符推算出来.

求解这个表象中的本征值方程

$$\hat{H}|K\rangle = E|K\rangle,$$

有两个本征态，

$$|K_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{p^*p + q^*q}}(p|K^0\rangle + q|\overline{K^0}\rangle),$$

$$|K_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{p^*p + q^*q}}(p|K^0\rangle - q|\overline{K^0}\rangle).$$

相应的本征值为

$$E_L = A + pq = m_L - \mathrm{i}\,\frac{\gamma_L}{2},$$

$$E_S = A - pq = m_S - \mathrm{i}\,\frac{\gamma_S}{2},$$

其中 m_L、m_S，γ_L 和 γ_S 是实数，分别是粒子 K_L 与 K_S 的质量和衰变宽度. 设 $\gamma_L<\gamma_S$，于是粒子 K_L 的寿命比 K_S 的长. 注意 $\hat{H}$ 不是厄米算符，它的本征态 $|K_L\rangle$ 与 $|K_S\rangle$ 不正交，

$$\langle K_S|K_L\rangle \neq 0,$$

于是，在态 $|K_L\rangle$ 上可以测到 K_S，在态 $|K_S\rangle$ 上可以测到 K_L.

奇异数振荡 假设在 $t=0$ 时的态是 $|K^0\rangle$ 与 $|\overline{K^0}\rangle$ 的叠加，

---

① 李政道，《场论与粒子物理学》（上册），科学出版社，北京，1982 年，207 页.

$$|K(0)\rangle = a_1|K^0\rangle + a_2|\overline{K^0}\rangle,$$

我们来求 t 时刻的态. 为此,我们把 $|K(0)\rangle$ 用 $|K_L\rangle$ 与 $|K_S\rangle$ 来展开,

$$|K(0)\rangle = c_L|K_L\rangle + c_S|K_S\rangle,$$

其中 c_L 与 c_S 可以用 a_1, a_2, p 与 q 来表示. 于是, t 时刻的态为

$$\begin{aligned}|K(t)\rangle &= e^{-iHt/\hbar}|K(0)\rangle \\ &= e^{-i(m_L - i\gamma_L/2)t/\hbar}c_L|K_L\rangle + e^{-i(m_S - i\gamma_S/2)t/\hbar}c_S|K_S\rangle \\ &= e^{-\gamma_L t/2\hbar}e^{-im_L t/\hbar}c_L|K_L\rangle + e^{-\gamma_S t/2\hbar}e^{-im_S t/\hbar}c_S|K_S\rangle.\end{aligned}$$

从上式可以看出,由于 $\gamma_L<\gamma_S$,经过一段比 K_S 的寿命稍长的时间, K_S 就衰变光了,剩下来的基本上是纯 K_L. 由于 K_L 是 K^0 与 $\overline{K^0}$的叠加,所以,如果 $t=0$ 时 $a_2=0$,是纯的 K^0,则现在既有 K^0 也有 $\overline{K^0}$. $\overline{K^0}$比 K^0 更容易与核子发生反应而转变成别的粒子,所以让剩下的 K_L 束通过物质后,又可获得较纯的 K^0. 中性 K 介子在 K^0 与 $\overline{K^0}$ 之间的这种转变,相应于奇异数在 $S=1$ 与 $S=-1$ 之间的振荡,所以称为*奇异数振荡*.

中性 K 介子的奇异数振荡中,正反粒子变换 C 与空间反射变换 P 的联合变换 CP 并不严格守恒. 这是粒子物理研究的一个重要问题,我们就不进一步讨论.

3. 光学模型

散射问题中的光学模型 考虑入射粒子 p 在靶 A 上的散射 p+A,假设靶 A 与入射粒子 p 的相互作用势能为

$$V(\boldsymbol{r}) = V_0(\boldsymbol{r}) - iW(\boldsymbol{r}),$$

这个势称为*复数势*或*光学势*. 光学势的实部 V_0 像通常的相互作用势一样,描写粒子能量不改变的*弹性散射*. 下面我们就来表明,光学势的虚部 W 描写入射粒子被靶 A 的*吸收*.

在坐标表象中,粒子波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$的 Schrödinger 方程为

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\boldsymbol{r})\psi, \tag{31}$$

其中 m 为粒子 p 的质量，靶 A 位于坐标原点. 由上述方程可以推出连续性方程

$$\nabla\cdot j+\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}V(r)\rho, \tag{32}$$

其中

$$\rho=\psi^*\psi$$

是粒子的概率密度，

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

是粒子的概率流密度.

(32)式右边是流场的源. 所以，相互作用势能的虚部正比于源的强度. 当 $W>0$ 时，源是负的，描述对入射波的吸收. 入射波的吸收，意味着出射波的减弱，这相当于非弹性过程，除了改变粒子能量的非弹性散射以外，还包括物理上真的吸收，以及新粒子的产生. 换句话说，这种有虚部的相互作用势，可以用来唯象地描述非弹性过程.

在能量为 E 的定态，Schrödinger 方程(31)成为

$$\left[\nabla^2+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\right]\psi=0,$$

它与光波在折射率为 $n=\sqrt{(E-V)/E}$ 的介质中传播的方程相同. 在光学中，复数折射率的实部描述光的色散，虚部描述介质对光的吸收. 光学模型这个名称，就是从这种类比得来的.

光学模型的程函近似 假设粒子以动量 $p_0=\hbar k_0$ 沿 z 轴入射，入射波为

$$\psi_{\mathrm{in}}(r)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0z}.$$

我们把 Schrödingder 方程的解近似写成

$$\psi_{\mathrm{eikonal}}(r)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0z+\mathrm{i}\gamma(r)},$$

这种近似称为程函近似. 把它代入 Schrödinger 方程，可以求得程函相移 $\gamma(r)$ 为

$$\gamma(\boldsymbol{r}) \approx -\frac{m}{\hbar^2 k_0}\int_{-\infty}^{z} V(\boldsymbol{r})\mathrm{d}z,$$

上式成立的条件是 $E \geqslant |V(\boldsymbol{r})|$, $k_0 \gg |\nabla\gamma(\boldsymbol{r})|$, 和 $\boldsymbol{p}_0 \times \nabla\gamma(\boldsymbol{r}) \approx 0$. 在这种程函近似下, $r\to\infty$的出射波为

$$\psi_{\text{out}}(\mathbf{r}) = \frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r} f(\theta,\phi),$$

其中散射振幅 $f(\theta,\phi)$为

$$f(\theta,\phi) = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}+i\gamma(\boldsymbol{r})}V(\boldsymbol{r})$$

$$= \frac{k_0}{2\pi\mathrm{i}}\int \mathrm{d}^2\boldsymbol{b}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{b}}[\mathrm{e}^{i\chi(\boldsymbol{b})} - 1]. \tag{33}$$

在上述方程中, $\hbar\boldsymbol{q} = \hbar(\boldsymbol{k}_0 - \boldsymbol{k})$是弹性散射 $k_0 = k$ 过程的动量转移, θ是 $\boldsymbol{k}$ 与 $\boldsymbol{k}_0$ 之间的夹角, 而

$$\chi(\boldsymbol{b}) = \gamma(\boldsymbol{b}, z\to\infty) = -\frac{m}{\hbar^2 k_0}\int_{-\infty}^{\infty} V(\boldsymbol{b},z)\mathrm{d}z,$$

其中 $\boldsymbol{b}$ 是与$(\boldsymbol{k}_0+\boldsymbol{k})$垂直的平面矢量. 对于高能过程, θ很小, $\boldsymbol{b}$ 近似于 xy 平面中的碰撞参数. 由这个散射振幅 $f(\theta,\phi)$可以推出散射过程的总吸收截面为(参阅第六章 § 6.2)

$$\sigma^{a} = -\frac{m}{\hbar^2 k_0}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}[2\mathrm{Im}V(\boldsymbol{r})]\mathrm{e}^{-2\mathrm{Im}\gamma(\boldsymbol{r})}$$

$$= \int \mathrm{d}^2\boldsymbol{b}[1 - \mathrm{e}^{-2\mathrm{Im}\chi(\boldsymbol{b})}].$$

上面的推导所用的 Schrödinger 方程, 是非相对论的. 对于高能过程, 应该用相对论的 Dirac 方程(见下一章). 可以证明, 用光学势的 Dirac 方程求出的程函相移、散射振幅和总吸收截面与这里得到的完全相同, 只是在相对论的情形, 应当把上述各式中的 m 换成相对论能量除以光速的平方 $E/c^2$①.

---

① K. C. Chung, C. S. Wang, A. J. Santiago, and G. Pech, *Phys. Rev.* C57 (1998) 847.

第五章 Dirac 方程

上一章讨论的模型都是非相对论性的，也没有考虑粒子的内部自由度. 本章我们来讨论自旋 $s=1/2$ 的粒子的相对论性波动方程. 相对论性的情形，能量很高，有粒子的产生和湮没，粒子数不守恒，已经属于量子场论的范围. 在量子场论中，除了粒子自旋以外，还要讨论粒子的一些别的内部自由度. 所以，本章既是上一章的继续，也是第八章的准备.

在本章和第八章，我们将采用区分上标和下标的相对论记号①，并且采用 Einstein 约定：除非特别声明，相同的一对上下标意味着对它求和. 希腊字母 $\mu,\nu,\lambda=0,1,2,3$，拉丁字母 $i,j,k=1,2,3$. 时空坐标用逆变 4 矢量表示，

$$x^\mu=(x^0,x^1,x^2,x^3)\equiv(ct,x,y,z).$$

它的协变 4 矢量为

$$x_\mu=(x_0,x_1,x_2,x_3)\equiv(ct,-x,-y,-z)=g_{\mu\nu}x^\nu,$$

这里 $g_{\mu\nu}=g^{\mu\nu}$是四维时空的度规矩阵，

$$(g_{\mu\nu})=(g^{\mu\nu})=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix},$$

可以用来提升或降低指标. 注意 $g_{ij}=g_{ji}$，而 $g^i{}_j=g^{ik}g_{kj}$是单位矩

---

① P. A. M. 狄拉克，《量子力学原理》，陈咸亨译，科学出版社，北京，1979 年，258 页；J. D. Bjorken & S. D. Drell, *Relativistic Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, 1964.

阵.

两个 4 矢量 a 与 b 的内积为

$$a_\mu b^\mu = g^{\mu\nu} a_\mu b_\nu = g_{\mu\nu} a^\nu b^\mu = a^0 b^0 - a^1 b^1 - a^2 b^2 - a^3 b^3$$
$$= a^0 b^0 - \boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b}.$$

协变微商和逆变微商分别为

$$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = (\partial_0, \nabla),$$

$$\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu} = (\partial_0, -\nabla).$$

对于能量动量 4 矢量,有

$$p^\mu = (E/c, \boldsymbol{p}), \quad p_\mu = (E/c, -\boldsymbol{p}), \quad p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - p^2.$$

§ 5.1 Weyl 方程

1. Weyl 方程的引入

相对论的要求 粒子的内部自由度没有经典对应,我们可以直接来讨论 Hamilton 算符的构成. 为了使得 Schrödinger 方程对于时间和空间变量具有对等的地位, Hamilton 算符显然只能是动量算符的线性函数. 我们先讨论只有动能的自由粒子,来构造一个动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的线性函数 $\hat{H}(\hat{\boldsymbol{p}})$,并且使得它与动量算符一起能够构成一个相对论性 4 矢量$(\hat{H}/c, \hat{\boldsymbol{p}})$,而它的本征值满足相对论的自由粒子能量动量关系$(E/c, \boldsymbol{p})$,也就是

$$\frac{E^2}{c^2} - p^2 = m^2 c^2, \tag{1}$$

这里 mc 是 4 矢量$(E/c, \boldsymbol{p})$的不变长度, m 是粒子的质量.

引入内部自由度 考虑粒子的内部自由度,可以写出

$$\hat{H} = a + c\hat{b}_i \hat{p}^i,$$

它是动量的一次函数,其中 a 是常数, $\hat{b}_i$ 是与粒子内部自由度相

联系的算符. 算符 $\hat{b}_i$ 与 $\hat{p}^i$ 互相对易,因为它们分别属于不同的自由度. 我们可以算出

$$\hat{H}^2 = a^2 + 2ac\hat{b}_i\hat{p}^i + c^2\hat{b}_i\hat{b}_j\hat{p}^i\hat{p}^j.$$

可以看出,为了本征值能够给出相对论的能量动量关系(1),必须有 $a=0$,使得上式中动量的线性项为 0. 此外,还必须有

$$\{\hat{b}_i, \hat{b}_j\} = 2\delta_{ij}. \tag{2}$$

这样得到的能量动量关系

$$E^2 = p^2c^2$$

是相对论的质量 $m=0$ 的粒子的能量动量关系.

为了使得 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 是厄米的, $\hat{b}_i$ 必须是厄米的,它在一个表象中的表示 b_i 为厄米矩阵. 不难看出,满足条件(2)的厄米矩阵至少是 2×2 的. 如果我们只限于二维空间,可以从(2)式解出

$$b^i = \pm\, \sigma^i,$$

这里 $\sigma=(\sigma^1,\sigma^2,\sigma^3)=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ 是 Pauli 矩阵.

Hamilton 算符与 Weyl 方程 于是,我们得到 Hamilton 算符在这个二维内部空间的表象为

$$\hat{H} = \pm\, c\sigma_i\hat{p}^i = \mp\, c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}. \tag{3}$$

这就是质量为 0 的自由粒子的相对论性 Hamilton 算符. 它的 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \mp\, c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\psi \tag{4}$$

称为 *Weyl 方程*. 上式已经是写在二维内部空间表象的表示, ψ 是粒子态矢量在这个表象的波函数. 因为这个波函数有两个分量,所以 Weyl 方程是*二分量方程*.

Weyl 方程实际上有两个,分别对应于其中的负号与正号. 下面我们将会讨论到这个问题.

连续性方程 在 Schrödinger 表象, Weyl 方程(4)及其共轭方程可以分别写成

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \pm\, c\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla\psi,$$

$$\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}=\pm c(\nabla\psi^\dagger)\cdot\boldsymbol{\sigma},$$

其中 $\psi^\dagger$ 是把列矢量 ψ 的两个分量取复数共轭以后再转置得到的行矢量. 用 $\psi^\dagger$ 从左边乘第一式,用 ψ 从右边乘第二式,把所得的结果相加,可得如下的连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0,$$

其中概率密度 ρ 与概率流密度 $\boldsymbol{j}$ 分别为

$$\rho=\psi^\dagger\psi,\quad \boldsymbol{j}=\mp c\psi^\dagger\boldsymbol{\sigma}\psi.$$

所以, Weyl 方程作为零质量自由粒子的相对论性 Schrödinger 方程,与波函数的统计诠释是一致的. 下面的演算表明上述概率流密度 $\boldsymbol{j}$ 中的 $\mp c\boldsymbol{\sigma}$ 就是粒子的速度算符:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},\hat{H}]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r},\mp c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}]=\mp c\boldsymbol{\sigma}.$$

2. 粒子的自旋角动量

总角动量守恒 我们先来证明 $\boldsymbol{s}=\hbar\boldsymbol{\sigma}/2$ 与粒子的轨道角动量 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 之和 $\hat{\boldsymbol{j}}=\hat{\boldsymbol{l}}+\hat{\boldsymbol{s}}$ 是守恒量,因此 $\boldsymbol{s}$ *具有角动量的性质*. 容易证明,这个粒子的轨道角动量不守恒:

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{l}},\hat{H}]&=\mp c[\hat{\boldsymbol{l}}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\hat{\boldsymbol{l}}]\\&=\mp c[\boldsymbol{\sigma}\times(\hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{p}})+(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{l}})\hat{\boldsymbol{p}}-(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})\hat{\boldsymbol{l}}]\\&=\mp c\{\boldsymbol{\sigma}\times(\hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}})+[\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{l}},\hat{\boldsymbol{p}}]\}\\&=\mp\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\sigma}\times\hat{\boldsymbol{p}}.\end{aligned}$$

同样地,还可以证明

$$[\hat{\boldsymbol{s}},\hat{H}]=\mp\frac{\hbar c}{2}[\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}]=\pm\frac{\hbar c}{2}(\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{\sigma})\times\hat{\boldsymbol{p}}=\pm\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\sigma}\times\hat{\boldsymbol{p}}.$$

于是,我们有

$$[\hat{\boldsymbol{j}},\hat{H}]=[\hat{\boldsymbol{l}}+\hat{\boldsymbol{s}},\hat{H}]=0.$$

现在我们再来证明,*在三维普通空间的转动下*,这个二维的内

部空间也跟着发生相应的转动，而 $\hat{s}$ 是生成这种转动的无限小算符. 为此，我们先来给出 Weyl 方程在普通三维空间转动下具有不变性的条件.

Weyl 方程空间转动不变性条件 坐标算符在三维空间的转动可以写成

$$\hat{x}'^{i} = a^{i}_{j}\hat{x}^{j},$$

其中 a^{i}_{j} 是实幺模正交转动矩阵，正交条件为

$$a_{k}{}^{i}a^{k}{}_{j} = g^{i}_{j}.$$

对于无限小转动，我们有(见第三章 §3.2)

$$a^{i}_{j} = g^{i}_{j} + \epsilon^{i}_{jk}\theta^{k},$$

其中

$$\epsilon^{i}_{jk} = g^{il}\epsilon_{ljk}.$$

与这个空间转动相应地，态矢量空间有一个幺正变换，

$$\psi \rightarrow \psi' = \Lambda\psi,$$

这是在二维内部空间的一个转动. 用 Λ 作用于方程(4)，并且代入

$$p^{i} = a_{j}{}^{i}p^{j\prime},$$

就有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \pm c\Lambda\sigma_{i}\Lambda^{-1}a_{j}{}^{i}p^{j\prime}\psi',$$

注意这里 $\sigma_{i} = g_{ij}\sigma^{j} = -\sigma^{i}$. 要求上式与(4)式的形式一样，就有下述条件，

$$\Lambda\sigma_{i}\Lambda^{-1}a_{j}{}^{i} = \sigma_{j},$$

或者等价的

$$\Lambda^{-1}\sigma^{i}\Lambda = a^{i}_{j}\sigma^{j}. \tag{5}$$

在二维内部空间，Λ 是 2×2 的幺正矩阵，有 4 个实参数，要由上述 3 个条件和幺正条件来确定. 下面我们将会看到，对于普通三维空间的转动，上式有解，而对于空间反射，上式无解. 换句话说，Weyl 方程有三维空间的转动不变性，而没有空间反射的不变性.

三维空间转动的 Λ 对于三维空间的无限小转动，我们可以把内部空间的无限小转动矩阵写成

$$\Lambda = 1 + i\varepsilon_j\sigma^j.$$

把上述方程代入(5)式，略去 ε_i 的二次项，就有

$$\sigma^i + i\varepsilon_j(\sigma^i\sigma^j - \sigma^j\sigma^i) = \sigma^i + \varepsilon^i{}_{jk}\sigma^j\theta^k.$$

由此可以解出 $\varepsilon_i = \theta_i/2$，从而

$$\Lambda = 1 - \frac{i}{2}\Theta\cdot\sigma, \tag{6}$$

其中 $\Theta = (\theta_x, \theta_y, \theta_z)$. 对于有限角度的转动，上式给出第三章 § 3.3 的结果

$$\Lambda = e^{-i\Theta\cdot\sigma/2}.$$

这就证明了 § 3.3 的基本假设，$\hat{s} = \hbar\sigma/2$ 是这个二维内部空间转动的自旋角动量算符. 由于波函数 ψ 具有在这个二维内部空间的旋转性质，所以称为旋量波函数，简称 Weyl 旋量.

宇称不守恒 我们来证明 Weyl 方程(4)没有空间反射不变性，宇称不守恒. 考虑空间反射变换

$$(a^i_j) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

这时(5)式要求 Λ 与 σ^i 反对易. 由于 2×2 的幺正矩阵只有 4 个实参数，线性无关的矩阵只有 4 个，除了 3 个 Pauli 矩阵，只有一个单位矩阵. 它们都不可能同时与 3 个 Pauli 矩阵反对易，所以当 (a^i_j) 取上式时，(5)式没有解. 这就证明了 Weyl 方程(4)没有空间反射不变性，宇称不守恒.

所以，零质量自旋 1/2 的粒子的态没有空间反射对称性，不是宇称本征态，有零质量自旋 1/2 的粒子参与的过程宇称不守恒. 这是因为在空间反射变换下，右手坐标系变成左手坐标系，粒子的螺旋性发生改变，粒子的态不能保持. 下面就来讨论粒子的螺旋性问题.

3. 负能态与反粒子

螺旋性与能量本征值 我们可以定义粒子的螺旋性

$$\xi=\frac{\sigma\cdot\hat{p}}{p},$$

其中 p 是粒子动量的大小.容易证明,ξ 的本征值为 $+1$ 或 -1.螺旋性为 $+1$ 的态,粒子自旋与运动方向构成右手螺旋,称为*右旋态*.螺旋性为 -1 的态,粒子自旋与运动方向构成左手螺旋,称为*左旋态*.

从(3)式可以看出,

$$[\xi,\hat{H}]=0,$$

质量为 0 自旋 1/2 的粒子螺旋性守恒.对于质量为 0 的粒子,螺旋性守恒具有特殊的含意.从物理上看,无质量的粒子以光速运动,不可能通过参考系的 Lorentz 变换,把一个惯性系中的右旋态变成另一个惯性系的左旋态.由于螺旋性守恒,一定种类的零质量自旋 1/2 粒子,要么是右旋的,要么是左旋的.*螺旋性是零质量自旋 1/2 粒子的固有特征*.

我们可以用螺旋性算符 ξ 把 Hamilton 算符改写成

$$\hat{H}=\mp\,\xi pc,$$

相应地把粒子能量本征值写成

$$E=\mp\,\xi pc,$$

其中 $\xi=+1$ 或 -1.于是,在(3)式中取负号时,左旋态的粒子能量为正,右旋态的粒子能量为负;在(3)式中取正号时,右旋态的粒子能量为正,左旋态的粒子能量为负.

负能态问题与正反粒子 在实验上,只有通过一个量子态到其他量子态的跃迁,才能观测和研究这个量子态. Dirac 指出,实验上没有观测到粒子的负能态,这就意味着所有的负能态都被粒子填满了,由于 Pauli 原理,不可能发生粒子在负能态之间的跃迁.这些填满了所有负能态的粒子,被形象地称为 Dirac 海.按照

这个解释，真空并不是一无所有，而是一个负能态粒子的汪洋大海. 这种有物理内容的真空，称为*物理真空*. 当然，这种对于负能态的解释只能看作是物理的设想，而不是正式的理论. 负能态的问题，在量子场论中才得到解决(参阅第八章).

一个粒子从负能态跃迁到正能态，在 Dirac 海中就留出了一个负能态的空穴. 这个效应是可以观测的. 一个负能态的空穴，相当于一个正能态的粒子，具有与负能态相反的螺旋性以及其他物理性质. 这种与原来的粒子性质相反的粒子，称为原来粒子的*反粒子*. 相应地，原来的粒子就称为*正粒子*.

正反粒子变换　由于 $\hat{p}^* = -\hat{p}$ 和 $\sigma^2(\sigma^i)^* = -\sigma^i\sigma^2$，对 Weyl 方程(4)取复数共轭再乘以 σ^2，可以得到

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_C}{\partial t} = \pm c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\psi_C, \tag{7}$$

其中波函数的变换是

$$\psi \to \psi_C = \hat{C}\psi \equiv \eta_C\sigma^2\psi^*, \tag{8}$$

η_C 是一个模为 1 的常数，$\eta_C^*\eta_C=1$. 与 Weyl 方程(4)相比，方程(7)右方差一个负号，所以 ψ_C 态描述与 ψ 态能量相反的粒子，态矢量的变换(8)和方程的变换(4)→(7)是零质量自旋 1/2 的粒子的正反粒子变换. *Weyl 方程在正反粒子变换下没有不变性.*

4. 中微子物理与 CP 不变性

中微子物理　实验表明，中微子的质量为 0，自旋 1/2，是零质量自旋 1/2 的粒子，没有空间反射对称性，有中微子参与的过程宇称不守恒. 此外，实验还表明，*中微子是左旋的，反中微子是右旋的*. 于是，在 Hamilton 算符的表达式(3)中，应取负号，

$$\hat{H} = -c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}.$$

CP 不变性　在有中微子参与的弱相互作用过程中宇称不守恒的根源，在于中微子的螺旋性. 在空间反射变换下，右手坐标系

变成左手坐标系,右旋态变成左旋态,左旋态变成右旋态. 如果在空间反射的同时也把粒子变成反粒子,把反粒子变成粒子,那么,系统的态仍然有可能保持不变.

我们把正反粒子变换 C 与空间反射变换 P 的联合变换称为 CP 变换,而把 CP 变换下的不变性称为 CP 不变性. 我们可以看出, Weyl 方程(4)在空间反射下变号,在正反粒子变换下也变号,所以它在 CP 变换下不变. **Weyl 方程具有 CP 不变性.**

在上一章§4.6 我们已经提到,在中性 K 介子奇异数振荡中 CP 并不严格守恒,这是迄今发现的惟一的一个 CP 不守恒的事例.

§5.2 自由粒子的 Dirac 方程

为了更直接和清楚地显示 Dirac 方程所包含的物理,我们这里没有按照 Dirac 的方法来引入他的方程. 他的方法的主要精神和思路已经体现在上一节 Weyl 方程的引入过程之中. 不过,读者还是一定要去看一看 Dirac 的方法,其中所闪耀着的理性思维的光辉和数学的内在美,在物理学的众多经验中是罕见的.

1. 自由粒子的 Dirac 方程

方程的引入 我们上面得到的 Weyl 方程是描述质量为 0 的粒子的. 为了得到质量不为 0 的粒子的相对论性方程,我们来尝试推广 Weyl 方程. 这种推广了的相对论性方程应能描述质量不为 0 的自旋 1/2 的粒子,而在粒子质量为 0 时简化为 Weyl 方程.

上节已经指出,质量为 0 的粒子以光速运动,具有确定的螺旋性. 如果粒子获得了质量,螺旋性就不再是粒子的固有性质,而有可能在运动过程中发生改变. 这是因为,有质量的粒子运动速度小于光速,变换到沿着粒子运动方向而且比粒子速度更快的惯性系,粒子的螺旋性就会反转过来. **粒子在获得质量的同时,将丧失具有**

固定螺旋性的这一特征.换句话说,具有质量的粒子,既可以处于左旋态,也可以处于右旋态,或者更一般地处于左旋态与右旋态的叠加态.

Weyl 方程有两个,分别描写左旋态和右旋态的粒子.如果粒子没有确定的螺旋性,在左旋态与右旋态之间就会有某种耦合.所以,我们来尝试把两个 Weyl 方程耦合起来,写成

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}-c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)\psi_{\mathrm{R}}=C\psi_{\mathrm{L}},$$

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}+c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)\psi_{\mathrm{L}}=C\psi_{\mathrm{R}}.$$

其中 ψ_{R} 与 ψ_{L} 都是二分量波函数.容易看出,它们满足相同的方程

$$\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}-c^2\hat{p}^2\right)\psi_i=C^2\psi_i,\quad i=\mathrm{R},\mathrm{L}.$$

如果取耦合常数 $C=mc^2$,上式就给出相对论自由粒子的能量动量关系(1).代入 $C=mc^2$,ψ_{R} 与 ψ_{L} 的两个耦合方程可以合写成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\beta mc^2)\psi,\tag{9}$$

其中

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_{\mathrm{R}}\\ \psi_{\mathrm{L}}\end{pmatrix}\tag{10}$$

是两个二分量波函数的组合,共有 4 个分量. $\boldsymbol{\alpha}$ 与 β 是 4×4 的厄米矩阵,称为 Dirac 矩阵,

$$\boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & -\boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\tag{11}$$

其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 是 2×2 的 Pauli 矩阵,1 是 2×2 的单位矩阵,0 是 2×2 的 0 矩阵.方程(9)就是自由粒子的 Dirac 方程,相应的 Hamilton 算符为

$$\hat{H}=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\beta mc^2.\tag{12}$$

质量的物理 我们前面对于 Dirac 方程的引入方式,虽然只是十分简单的一种唯象的做法,但是它却向我们提出了一个基本

的问题：粒子的质量真的只是描述粒子特性的一个简单参数，而在它的背后并不包含某种更深层的物理吗？

经典物理学的质量概念，基于 Newton 力学. 在 Newton 力学里，质量作为描述物体惯性的参数，被看成是物体最基本的特征，是一切物理学分析的基础和出发点，而不能再对它进行分析，不包含任何更深层的物理. 在量子力学的动力学模型中，我们让质量作为模型参数出现在系统的模型 Hamilton 量之中，而不作任何解释，就是这种观念的表现. 关于质量的这种经典观念，在将近三百年的时间里，支配着物理学家们的思考. 只是到了 Einstein 的狭义相对论里，这种观念才开始受到冲击.

在狭义相对论里，质量的基本涵义已经不再是描述物体惯性的参数，而是物体能量动量 4 维矢量的不变长度的量度，是联系物体能量与动量的物理量. 特别是，当物体静止时，质量正比于物体的能量，这表明质量是物体静质能的量度. 而我们知道，能量总是某种动力学效应的表现. 所以，这就意味着，作为物体静质能的量度，质量很可能也是某种动力学效应的表现，包含着更深层的物理. 这就是关于质量的物理的问题.

在狭义相对论提出了半个多世纪之后，于 1967 年提出的 Weinberg-Salam 理论①，在统一弱相互作用与电磁相互作用的同时，也为质量的物理这个问题给出了一个理论的回答. Weinberg-Salam 理论的模型所具有的对称性，要求作为理论出发点的粒子是无质量的，包括中微子和电子等轻子. 在这个理论中，原本没有质量的电子之所以获得了质量，是由于它与某种特殊的场的耦合. 这种特殊的场被称为 Higgs 场，它的作用使得理论的这种对称性发生破缺. Weinberg-Salam 理论所取得的成功，自然地掀起了一股寻找 Higgs 粒子的实验热潮，粒子物理学家们把这种实验恰当

① S. Weinberg, *Phys. Rev. Lett.* **19**, (1967) 1264; A. Salam, *in Elementary Particle Theory*, ed. N. Svarthbolm (Almquist and Wiksell, Stockholm, 1968).

地称之为寻找质量的起源. 尽管这种 Higgs 粒子至今尚未找到, 但是人们开始认真地寻找 Higgs 粒子这件事本身, 就意味着质量的物理已经开始成为物理学家们研究的一个重要问题. 在这个意义上, Dirac 方程很可能也只是一个唯象的方程, 其中的粒子质量 m 只是用来笼统地描述某种更深层的物理的一个唯象的参数.

Dirac 表象 Dirac 方程的波函数(10)区分为上下两个分量, 这相当于一个新的内部自由度, 具有二维的表示空间. 在这个二维空间中, 我们可以选择不同的表象. Dirac 矩阵的上述形式(11)属于 Weyl 表象, 又称手征表象. 在 Weyl 表象中, 当粒子质量趋于 0 时, $m\to 0$, 波函数的上下分量 ψ_R 与 ψ_L 分别成为右旋态与左旋态. 在 $p\gg mc$ 的高能情形, 粒子的质量可以忽略时, 用 Weyl 表象比较方便.

更常用的是 Dirac 表象. 从 Weyl 表象到 Dirac 表象的表象变换是

$$\psi=\begin{pmatrix}\psi_R\\ \psi_L\end{pmatrix}\to\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\psi_R+\psi_L\\ \psi_R-\psi_L\end{pmatrix}.$$

这是一个 4 维空间的幺正变换, 变换矩阵为

$$U=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}, \tag{13}$$

其中的 1 是自旋空间的 2×2 的单位矩阵. 注意上述矩阵也是厄米的. 由此很容易算出在 Dirac 表象中的 Dirac 矩阵为

$$\boldsymbol{\alpha}=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix},\quad \beta=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}.$$

在 Dirac 表象中, Hamilton 算符(12)可以写成

$$\hat{H}=\begin{pmatrix}mc^2 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & -mc^2\end{pmatrix}.$$

相应地, 把 Dirac 方程写成上下分量的方程, 有

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}=c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\chi+mc^2\varphi,$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t}=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\varphi-mc^2\chi.$$

φ与χ都是自旋空间的二分量波函数，可以看出，它们的物理含意是：在 Dirac 表象中，当粒子的动量趋于 0 时，$p\to 0$，波函数的上下分量φ与χ分别成为正能态与负能态，亦即分别描述粒子与反粒子. 在能量不太高的$p\ll mc$情形，粒子的产生与湮没过程可以忽略时，用 Dirac 表象比较方便. 如果没有特别指出，以后的讨论在需要用具体表象的地方，都采用 Dirac 表象.

连续性方程 注意到 Dirac 矩阵是厄米矩阵，我们可以在坐标表象中把 Dirac 方程(9)及其共轭方程写成

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\psi+mc^2\beta\psi,$$

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}=\mathrm{i}\hbar c(\nabla\psi^\dagger)\cdot\boldsymbol{\alpha}+mc^2\psi^\dagger\beta,$$

其中$\psi^\dagger$是把列矢量ψ的 4 个分量取复数共轭以后再转置得到的行矢量，

$$\psi^\dagger=(\psi_1^*,\psi_2^*,\psi_3^*,\psi_4^*).$$

用$\psi^\dagger$从左边乘上述 Dirac 方程，用ψ从右边乘其共轭方程，把所得的结果相减，就有下列连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\boldsymbol{j}=0,$$

其中概率密度ρ与概率流密度$\boldsymbol{j}$分别为

$$\rho=\psi^\dagger\psi,\quad \boldsymbol{j}=\psi^\dagger c\boldsymbol{\alpha}\psi.$$

所以，Dirac 方程作为相对论性的 Schrödinger 方程，与波函数的统计诠释是一致的. 下面的演算表明上述概率流密度$\boldsymbol{j}$中的$c\boldsymbol{\alpha}$就是粒子的速度算符：

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{r}}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{\boldsymbol{r}},\hat{H}]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{\boldsymbol{r}},c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+mc^2\beta]$$

$$=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{\boldsymbol{r}},c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}]=c\boldsymbol{\alpha}.$$

在 Weyl 表象中，上式表明，上分量 ψ_R 具有速度 $c\boldsymbol{\sigma}$，下分量 ψ_L 具有速度 $-c\boldsymbol{\sigma}$，概率流密度是这两个流密度的代数和，$\boldsymbol{j}=\boldsymbol{j}_R+\boldsymbol{j}_L$.

守恒量 从 Hamilton 算符(12)容易证明，它具有平移不变性，动量守恒：

$$[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}]=0.$$

另外，注意到 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 与 $\hat{\boldsymbol{s}}$ 在 Dirac 表象中的表示就是它们各自直乘以单位矩阵，并利用上一节的结果，就可以证明粒子的轨道角动量与自旋角动量都不守恒，

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{l}},\hat{H}]&=\begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{l}} & 0\\ 0 & \hat{\boldsymbol{l}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}mc^2 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & -mc^2\end{pmatrix}\\&\quad-\begin{pmatrix}mc^2 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & -mc^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{l}} & 0\\ 0 & \hat{\boldsymbol{l}}\end{pmatrix}\\&=\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\alpha}\times\hat{\boldsymbol{p}},\\ [\hat{\boldsymbol{s}},\hat{H}]&=\begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{s}} & 0\\ 0 & \hat{\boldsymbol{s}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}mc^2 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & -mc^2\end{pmatrix}\\&\quad-\begin{pmatrix}mc^2 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & -mc^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\hat{\boldsymbol{s}} & 0\\ 0 & \hat{\boldsymbol{s}}\end{pmatrix}\\&=-\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\alpha}\times\hat{\boldsymbol{p}},\end{aligned}$$

而总角动量 $\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{l}}+\hat{\boldsymbol{s}}$ 是守恒的，

$$[\hat{\boldsymbol{J}},\hat{H}]=[\hat{\boldsymbol{l}},\hat{H}]+[\hat{\boldsymbol{s}},\hat{H}]=0.$$

同样地可以证明，粒子的螺旋性 ξ 也是守恒量，左旋态与右旋态都是粒子的本征态：

$$\begin{aligned}[\xi,\hat{H}]&=\begin{pmatrix}\xi & 0\\ 0 & \xi\end{pmatrix}\begin{pmatrix}mc^2 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & -mc^2\end{pmatrix}\\&\quad-\begin{pmatrix}mc^2 & c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\\ c\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & -mc^2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi & 0\\ 0 & \xi\end{pmatrix}=0.\end{aligned}$$

2. 自由粒子的平面波解

定态的量子数 上面已经指出，自由粒子的动量 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 和螺旋性

ξ 都与 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 对易，是守恒量. 此外还可以看出，$\hat{p}$ 与 ξ 也对易. 所以，自由粒子的 $(\hat{H},\hat{p},\xi)$ 构成一组相容观测量，具有共同本征态 $\{|E,p,\xi\rangle\}$. 对于一定的动量本征值 p，螺旋性有两个本征值，$\xi=+1$ 与 -1，分别相应于自旋投影与动量方向相同的右旋态和相反的左旋态. 另一方面，由下述关系

$$\hat{H}^2=\begin{pmatrix} mc^2 & c\sigma\cdot\hat{p} \\ c\sigma\cdot\hat{p} & -mc^2 \end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix} mc^2 & c\sigma\cdot\hat{p} \\ c\sigma\cdot\hat{p} & -mc^2 \end{pmatrix}$$
$$= p^2c^2+m^2c^4,$$

对于一定的动量 p，可以求出能量有正能和负能两个本征值

$$E=\pm E_p,$$

这里

$$E_p=\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}.$$

所以，对于一定的动量 p，有 4 个不同的本征态 $|E,p,\xi\rangle$：

	I	II	III	IV
p	p	p	p	p
E	E_p	E_p	$-E_p$	$-E_p$
ξ	$+1$	-1	$+1$	-1

Dirac 表象波函数 由于普通空间与内部空间是互相独立的，粒子波函数可以写成普通空间波函数与内部空间波函数之直积. 对于自由粒子的动量本征态，我们有

$$\psi=w(E,p,\xi)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(Et-p\cdot r)/\hbar},$$

其中 $w(E,p,\xi)$ 是内部空间波函数，由下列 4×4 的矩阵方程来确定：

$$(c\alpha\cdot p+\beta mc^2-E)w(E,p,\xi)=0.$$

在 Dirac 表象，上述方程成为

$$\begin{pmatrix} mc^2-E & c\sigma\cdot p \\ c\sigma\cdot p & -mc^2-E \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \zeta \\ \eta \end{pmatrix}=0, \tag{14}$$

其中 ζ 与 η 分别是波函数 $w(E,p,\xi)$ 的上分量与下分量，

$$w(E,\boldsymbol{p},\xi)=\begin{pmatrix}\zeta\\ \eta\end{pmatrix}.$$

在习惯上，把正能解和负能解分别记为 u 和 v，

$$u(\boldsymbol{p},\xi)=w(E_p,\boldsymbol{p},\xi),\quad v(\boldsymbol{p},\xi)=w(-E_p,-\boldsymbol{p},\xi).$$

由方程(14)不难解出

$$u(\boldsymbol{p},\xi)=N\begin{pmatrix}\zeta\\ \dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+mc^2}\zeta\end{pmatrix},$$

$$v(\boldsymbol{p},\xi)=N\begin{pmatrix}\dfrac{c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{E_p+mc^2}\eta\\ \eta\end{pmatrix},\tag{15}$$

其中 ζ 和 η 是粒子螺旋性 ξ 的本征态，N 是归一化常数. 取归一化条件

$$u^\dagger(\boldsymbol{p},\xi)u(\boldsymbol{p},\xi')=\delta_{\xi\xi'},\quad v^\dagger(\boldsymbol{p},\xi)v(\boldsymbol{p},\xi')=\delta_{\xi\xi'},$$

并且假设 ζ 与 η 在自旋空间是归一化的，$\zeta^\dagger\zeta=1,\eta^\dagger\eta=1$，则归一化常数 N 为

$$N=\sqrt{\frac{E_p+mc^2}{2E_p}}.$$

自旋空间的表象取$\{|s,s_z\rangle\}$为基矢. 在这个表象中，自旋角动量在 z 轴的投影 $\hat{s}_z$ 取本征值$\pm\hbar/2$. 另一方面，螺旋性 $\xi=\sigma_p$ 正比于自旋角动量在动量方向的投影，螺旋性为正的右旋态，是自旋角动量在动量方向投影为 $\hbar/2$ 的本征态，螺旋性为负的左旋态，是自旋角动量在动量方向的投影为$-\hbar/2$ 的本征态. 所以，把 z 轴转到动量 $\boldsymbol{p}$ 的方向(θ,ϕ)，我们就可以从 $\hat{s}_z$ 的本征态求得 ξ 的本征态. 用第三章 § 3.3 最后转动矩阵 $\mathscr{D}^{1/2}(\boldsymbol{n},\theta)$的公式，先绕 y 轴转 θ 角，再绕 z 轴转 ϕ 角，总的转动矩阵为

$$\mathscr{D}^{1/2}(\boldsymbol{n}_z\to\boldsymbol{n}_p)=\mathscr{D}^{1/2}(\boldsymbol{n}_z,\phi)\mathscr{D}^{1/2}(\boldsymbol{n}_y,\theta)$$

$$
= \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} & -e^{-i\phi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} & e^{i\phi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}.
$$

把它分别作用到 $\hat{s}_z$ 的两个本征态上，就得到螺旋性 ξ 的两个本征态：

$$
\xi_+ = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} & -e^{-i\phi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} & e^{i\phi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix},
$$

$$
\xi_- = \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} & -e^{-i\phi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} & e^{i\phi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
= \begin{pmatrix} -e^{-i\phi/2}\sin\dfrac{\theta}{2} \\ e^{i\phi/2}\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix}.
$$

于是，自由粒子 Dirac 方程的解一般地可以写成上述本征态的叠加：

$$
\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\xi}\int \frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\Big[a(\boldsymbol{p},\xi)u(\boldsymbol{p},\xi)e^{-i(E_p t-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}
+ b^*(\boldsymbol{p},\xi)v(\boldsymbol{p},\xi)e^{i(E_p t-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}\Big],
$$

其中 $a(\boldsymbol{p},\xi)$ 是粒子处于正能态 $(\boldsymbol{p},\xi)$ 的概率幅，$b^*(\boldsymbol{p},\xi)$ 是粒子处于负能态 $(-\boldsymbol{p},\xi)$ 的概率幅. 波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 的归一化条件给出

$$
\int d^3\boldsymbol{r}\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\xi}\int d^3\boldsymbol{p}\big[|a(\boldsymbol{p},\xi)|^2 + |b^*(\boldsymbol{p},\xi)|^2\big] = 1.
$$

§5.3 Dirac 方程的时空变换

1. γ 矩阵

Dirac 矩阵的性质 容易验证 Dirac 矩阵是厄米矩阵，有下列性质：

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij},$$
$$\{\alpha_i, \beta\} = 0,$$
$$\beta^2 = 1.$$

γ 矩阵的定义 在 Schrödinger 表象中，我们可以把自由粒子的 Dirac 方程(9)改写成

$$\left[\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t} + c\alpha^i \frac{\partial}{\partial x^i}\right) - \beta mc^2\right]\psi = 0.$$

于是，如果定义

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^i = \beta\alpha^i,$$

就可以把上述方程改写成相对论性时空分量对等的四维形式

$$(\mathrm{i}\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi = 0. \tag{16}$$

这样定义的 γ^0 是幺正的，γ^i 是反幺正的，

$$(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0, \quad (\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i.$$

在 Dirac 表象中，γ 矩阵的表示为

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

从 Dirac 矩阵的反对易关系容易证明 γ 矩阵的下列反对易关系：

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}.$$

γ 矩阵的代数 由 4 个 γ^μ 矩阵可以构成下表列出的 16 个线性独立的乘积：

乘积的重数	因子	个数
0	1	1
1	γ^μ	4
2	$\gamma^\mu\gamma^\nu(\mu\neq\nu)$	6
3	$\gamma^5\gamma^\mu$	4
4	γ^5	1

其中

$$\gamma^5=\gamma_5=\mathrm{i}\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}.$$

更高的重数,可以用 γ 矩阵的反对易关系化成较低的重数. 此外还有

$$(\gamma^5)^2=1,\quad \{\gamma^5,\gamma^\mu\}=0.$$

2. Dirac 方程的相对论协变性

Dirac 方程的相对论协变条件 我们来讨论 Dirac 方程(16)的 Lorentz 变换. 保持四维矢量长度不变的 Lorentz 变换可以写成

$$x^{\mu\prime}=a^\mu{}_\nu x^\nu, \tag{17}$$

a^μ_ν 是一个幺模正交矩阵,正交条件为

$$a_\lambda{}^\mu a^\lambda{}_\nu=g^\mu{}_\nu.$$

对于正规 Lorentz 变换,则还要求变换矩阵的行列式等于 1,

$$\| a^\mu{}_\nu \| =1.$$

与 Weyl 方程类似地,在 Lorentz 变换(17)的作用下,态矢量空间的变换仍然可以写成

$$\psi\to\psi'=\Lambda\psi,$$

只是现在的 ψ 是四分量波函数, Λ 是 4×4 的幺正矩阵. 上式是 ψ 在四维内部空间的转动,所以 ψ 又称为 Dirac 旋量,简称旋量.

用 Λ 作用于方程(16),并且代入 $\partial_\mu=a^\nu_\mu\partial'_\nu$,就有

$$(\mathrm{i}\hbar\Lambda\gamma^\mu\Lambda^{-1}a^\nu_\mu\partial'_\nu-mc)\psi'=0.$$

要求它与(16)式的形式一样，就有下述 Dirac 方程的相对论协变条件，

$$\Lambda\gamma^{\mu}\Lambda^{-1}a^{\nu}_{\mu}=\gamma^{\nu},$$

或者等价的

$$\Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\Lambda=a^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu}. \tag{18}$$

在四维内部空间，Λ 是 4×4 的幺正矩阵，有 16 个实参数，要由上述条件来确定.

正规 Lorentz 变换下的协变性 一个无限小正规 Lorentz 变换可以写成

$$a^{\mu}{}_{\nu}=g^{\mu}{}_{\nu}+\epsilon^{\mu}{}_{\nu},$$

由于正交条件 $a_{\lambda}{}^{\mu}a^{\lambda}{}_{\nu}=g^{\mu}{}_{\nu}$ 的限制，$\epsilon^{\mu\nu}$是反对称的，

$$\epsilon^{\mu\nu}=-\epsilon^{\nu\mu}.$$

与无限小正规 Lorentz 变换相应的 Λ 可以写成

$$\Lambda=1+a\epsilon_{\mu\nu}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}.$$

把它与上述 $a^{\mu}{}_{\nu}$ 代入(18)式，略去 $\epsilon_{\mu\nu}$的二次项，就有

$$a\epsilon_{\nu\lambda}(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}\gamma^{\lambda}-\gamma^{\nu}\gamma^{\lambda}\gamma^{\mu})=\epsilon^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu}.$$

运用 γ 矩阵的反对易关系和 $\epsilon_{\mu\nu}$的反对称性，可以从上式解得

$$a=\frac{1}{4}.$$

于是我们解得

$$\Lambda=1+\frac{1}{4}\epsilon_{\mu\nu}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}=1+\frac{1}{8}\epsilon_{\mu\nu}(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}-\gamma^{\nu}\gamma^{\mu}). \tag{19}$$

这就证明了 Dirac 方程在 Lorentz 变换下具有协变性.

Dirac 共轭和双线性协变量 旋量 ψ 的 Dirac 共轭 $\overline{\psi}$ 定义为

$$\overline{\psi}=\psi^{\dagger}\gamma^{0}.$$

由变换矩阵 Λ 的下述性质

$$\Lambda^{\dagger}=\gamma^{0}\Lambda^{-1}\gamma^{0},$$

可以求出共轭旋量 $\overline{\psi}$ 在 Lorentz 变换下的变换为

$$\bar{\psi}' = \psi'^{\dagger}\gamma^0 = (\Lambda\psi)^{\dagger}\gamma^0 = \psi^{\dagger}\Lambda^{\dagger}\gamma^0 = \bar{\psi}\Lambda^{-1}.$$

由 Dirac 旋量 $\psi,\bar{\psi}$ 及 γ 矩阵可以组成的 Lorentz 双线性协变量如下表所示：

协变量	$\bar{\psi}\psi$	$\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi$	$\bar{\psi}\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}\psi(\mu\neq\nu)$	$\bar{\psi}\gamma^5\psi$	$\bar{\psi}\gamma^5\gamma^{\mu}\psi$
协变性	标量	矢量	二阶反对称张量	赝标量	赝矢量

其中前三个协变量在正规 Lorentz 变换下的协变性证明如下：

$$\bar{\psi}'\psi' = \bar{\psi}\Lambda^{-1}\Lambda\psi = \bar{\psi}\psi,$$

$$\bar{\psi}'\gamma^{\mu}\psi' = \bar{\psi}\Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\Lambda\psi = a^{\mu}{}_{\nu}\bar{\psi}\gamma^{\nu}\psi,$$

$$\bar{\psi}'\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}\psi' = \bar{\psi}\Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\Lambda\Lambda^{-1}\gamma^{\nu}\Lambda\psi = a^{\mu}{}_{\lambda}a^{\nu}{}_{\rho}\bar{\psi}\gamma^{\lambda}\gamma^{\rho}\psi.$$

上表中后两个协变量在正规 Lorentz 变换下的变换性质如下：

$$\bar{\psi}'\gamma^5\psi' = \bar{\psi}\Lambda^{-1}\gamma^5\Lambda\psi = \bar{\psi}\gamma^5\psi,$$

$$\bar{\psi}'\gamma^5\gamma^{\mu}\psi' = \bar{\psi}\Lambda^{-1}\gamma^5\gamma^{\mu}\Lambda\psi = \bar{\psi}\gamma^5\Lambda^{-1}\gamma^{\mu}\Lambda\psi = a^{\mu}{}_{\nu}\bar{\psi}\gamma^5\gamma^{\nu}\psi.$$

我们在下一小节再来证明上述双线性协变量在空间反射下的变换性质.

例：流矢量 我们可以用双线性协变量把物理量的方程改写成具有明显的相对论协变性的形式. 例如连续性方程中的概率密度和概率流密度可以分别改写成

$$j^0 = c\rho = c\psi^{\dagger}\psi = c\psi^{\dagger}\gamma^0\gamma^0\psi = c\bar{\psi}\gamma^0\psi,$$

$$j^i = c\psi^{\dagger}\alpha^i\psi = c\psi^{\dagger}\beta\beta\alpha^i\psi = c\psi^{\dagger}\gamma^0\gamma^i\psi = c\bar{\psi}\gamma^i\psi.$$

于是连续性方程可以改写成

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = \partial_{\mu}j^{\mu} = 0.$$

∂_{μ} 是协变 4 矢量，流矢量 $j^{\mu}=c\bar{\psi}\gamma^{\mu}\psi$ 是逆变 4 矢量，所以 $\partial_{\mu}j^{\mu}$ 是标量，在 Lorentz 变换下不变.

3. Dirac 方程的时空对称性

空间转动与粒子的自旋 对于普通三维空间的无限小转动，

在 § 5.1 中已写出

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ijk}\theta^k,$$

此外，$\epsilon_{0i}=0$. 把它们代入(19)，就得到

$$\Lambda = 1 - \frac{i}{2}\Theta \cdot \Sigma,$$

其中 $\Theta=(\theta_x, \theta_y, \theta_z)$,

$$\Sigma^i = -\frac{i}{2}\epsilon^i_{\ jk}\gamma^j\gamma^k = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix}. \tag{20}$$

所以，$\hat{s}^i = \hbar\Sigma^i/2$ 就是粒子的自旋角动量算符，很容易证明 Σ^i 满足与 Pauli 矩阵同样的反对易关系，而 $\hat{s}^i$ 满足角动量算符的对易关系，

$$\{\Sigma^i, \Sigma^j\} = -2g^{ij}, \quad [\hat{s}^i, \hat{s}^j] = i\hbar\epsilon^{ij}_{\ \ k}\hat{s}^k.$$

可以看出，在空间转动下，Weyl 二分量波函数的转动矩阵的无限小算符是 σ^i，而两个二分量波函数的转动矩阵的无限小算符就是两个 σ^i 分别对每一个二分量波函数的作用. 实际上，用幺正矩阵(13)变回到 Weyl 表象，Σ 的表示仍旧是(20)式，而这里的 Λ 正是两个二分量的(6)分别作用到上下分量的结果.

空间反射 对于空间反射，四维时空变换矩阵为

$$(a^\mu_{\ \nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

它的行列式为 -1,

$$\| a^\mu_{\ \nu} \| = -1.$$

这是非正规 Lorentz 变换. 把这个变换矩阵代入(18)，就得到决定旋量转动矩阵 Λ 的方程

$$\Lambda^{-1}\gamma^0\Lambda = \gamma^0, \quad \Lambda^{-1}\gamma^i\Lambda = -\gamma^i.$$

由它们可以解出

$$\Lambda = \eta_P \gamma^0,$$

常数 η_P 可由幺正条件 $\Lambda^\dagger = \Lambda^{-1}$ 限制到只差一个相因子，$\eta_P^* \eta_P = 1$. 这就证明了 Dirac 方程具有空间反射不变性，宇称守恒.

由此我们可以求出双线性协变量在空间反射下的变换如下：

$$\bar{\psi}'\psi' = \bar{\psi}\Lambda^{-1}\Lambda\psi = \bar{\psi}\psi,$$

$$\bar{\psi}'\gamma^0\psi' = \bar{\psi}\Lambda^{-1}\gamma^0\Lambda\psi = \bar{\psi}\gamma^0\psi,$$

$$\bar{\psi}'\gamma^i\psi' = \bar{\psi}\Lambda^{-1}\gamma^i\Lambda\psi = -\bar{\psi}\gamma^i\psi,$$

$$\bar{\psi}'\gamma^i\gamma^j\psi' = \bar{\psi}\Lambda^{-1}\gamma^i\Lambda\Lambda^{-1}\gamma^j\Lambda\psi = \bar{\psi}\gamma^i\gamma^j\psi,$$

$$\bar{\psi}'\gamma^0\gamma^i\psi' = -\bar{\psi}\gamma^0\gamma^i\psi,$$

$$\bar{\psi}'\gamma^5\psi' = \bar{\psi}\Lambda^{-1}\gamma^5\Lambda\psi = -\bar{\psi}\gamma^5\psi,$$

$$\bar{\psi}'\gamma^5\gamma^0\psi' = \bar{\psi}\Lambda^{-1}\gamma^5\Lambda\Lambda^{-1}\gamma^0\Lambda\psi = -\bar{\psi}\gamma^5\gamma^0\psi,$$

$$\bar{\psi}'\gamma^5\gamma^i\psi' = \bar{\psi}\gamma^5\gamma^i\psi.$$

时间反演 时间反演也是 $\| a^\mu{}_\nu \| = -1$ 的非正规 Lorentz 变换，变换矩阵为

$$(a^\mu{}_\nu) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

我们在第三章 § 3.6 已经指出，时间反演是反幺正变换，所以我们的讨论应当从 Dirac 方程(16)的复数共轭出发，

$$(-\mathrm{i}\hbar\gamma^{\mu *}\partial_\mu - mc)\psi^* = 0.$$

把四个分量具体写出来，上式就成为

$$[\mathrm{i}\hbar(-\gamma^0\partial_0 - \gamma^1\partial_1 + \gamma^2\partial_2 - \gamma^3\partial_3) - mc]\psi^* = 0.$$

代入 $\partial_\mu = a^\nu{}_\mu\partial'_\nu$，就有

$$[\mathrm{i}\hbar(\gamma^0\partial'_0 - \gamma^1\partial'_1 + \gamma^2\partial'_2 - \gamma^3\partial'_3) - mc]\psi^* = 0.$$

用幺正矩阵 Λ 从左边作用于上述方程，

$$[\mathrm{i}\hbar(\Lambda\gamma^0\Lambda^{-1}\partial'_0 - \Lambda\gamma^1\Lambda^{-1}\partial'_1 + \Lambda\gamma^2\Lambda^{-1}\partial'_2 - \Lambda\gamma^3\Lambda^{-1}\partial'_3) - mc]\Lambda\psi^* = 0,$$

要求它具有 Dirac 方程(16)的形式

$$[\mathrm{i}\hbar(\gamma^0\partial_0' + \gamma^1\partial_1' + \gamma^2\partial_2' + \gamma^3\partial_3') - mc]\Lambda\psi^* = 0,$$

就得到下述关于矩阵 Λ 的条件：

$$\Lambda\gamma^0\Lambda^{-1} = \gamma^0, \quad \Lambda\gamma^1\Lambda^{-1} = -\gamma^1,$$

$$\Lambda\gamma^2\Lambda^{-1} = \gamma^2, \quad \Lambda\gamma^3\Lambda^{-1} = -\gamma^3.$$

从它们可以解出

$$\Lambda = \eta_T\gamma^1\gamma^3,$$

其中 η_T 是一个模等于 1 的常数，$\eta_T^*\eta_T=1$. 这就证明了 Dirac 方程具有时间反演不变性. 相应地，Dirac 旋量波函数的时间反演变换是

$$\psi \to \psi_T = \hat{T}\psi = \eta_T\gamma^1\gamma^3\psi^*,$$

这里的时间反演算符 $\hat{T}$ 是一个反幺正算符.

§5.4　有电磁场的 Dirac 方程

1. 规范不变性原理与有电磁场的 Dirac 方程

定域规范变换和规范不变性原理　我们来考虑波函数的变换

$$\psi \to \psi' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}f}\psi. \tag{21}$$

若 f 为一实常数，则此变换只把波函数的相位改变一个常数 f，并不改变它所描述的态，这种变换称为*整体规范变换*. 若 f 为一实函数，

$$f = f(x, y, z, t),$$

则波场各点的相对相位发生改变，这种变换称为*第一类规范变换*，或*定域规范变换*.

一般地说，在定域规范变换下，波函数所描述的态会发生改变. 只有在一定条件下，波函数所描述的态才不改变. *规范不变性原理要求波函数在定域规范变换下所描述的态不变，亦即决定波函数的方程在定域规范变换下形式不变.*

规范场和第二类规范变换 由于决定波函数 $\psi(x,y,z,t)$ 的波动方程中包含作用于 ψ 的微分算符 $-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu$，而

$$-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu(\mathrm{e}^{\mathrm{i}f}\psi)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}f}(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu+\hbar\partial_\mu f)\psi,$$

所以，为了使得决定波函数的方程在定域规范变换下形式不变，作用于 ψ 的算符应该取以下的代换：

$$-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu\to-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu+qA_\mu,$$

它们对于 ψ 的作用为

$$(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu+qA_\mu)(\mathrm{e}^{\mathrm{i}f}\psi)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}f}(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu+qA_\mu+\hbar\partial_\mu f)\psi,$$

其中

$$A_\mu=A_\mu(x,y,z,t)$$

是某种波场，q 是描述它与 ψ 场的相互作用的耦合常数。于是，如果在波函数 ψ 作定域规范变换(21)时场量 A_μ 同时作相应的变换

$$A_\mu\to A'_\mu=A_\mu-\frac{\hbar}{q}\partial_\mu f,$$

我们就有

$$(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu+qA'_\mu)\psi'=\mathrm{e}^{\mathrm{i}f}(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu+qA_\mu)\psi,$$

这就能使决定波函数 ψ 的方程在 ψ 的定域规范变换下形式不变.

于是，规范不变性原理表明，如果波函数 ψ 具有某种定域规范不变性，就必定相应地存在一种与它相互作用的场。这样引进的场称为规范场。我们这里引进的规范场 $A_\mu=(\Phi/c,-\boldsymbol{A})$，具有下述规范变换所容许的任意性：

$$A_\mu\to A'_\mu=A_\mu+\partial_\mu\chi,\tag{22}$$

其中

$$\chi=\chi(x,y,z,t)$$

可以是任意的实函数。波场 A_μ 的这一变换称为第二类规范变换.

所以，上述分析可以归纳为：**为了使波函数 ψ 的方程在第一类规范变换下不变，就要求存在与 ψ 耦合的规范场 A_μ；在 ψ 进行第一类规范变换(21)时，场 A_μ 要同时进行第二类规范变换(22)，并且**

满足

$$f = -\frac{q}{\hbar}\chi.$$

规范场 A_μ 的经典观测量 为了看出规范场 A_μ 的物理含意，我们来看下述具有规范不变性的非相对论性 Schrödinger 方程，

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\Phi\right)\psi = \frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A})^2\psi,$$

它描述一个质量为 m 的粒子在规范场 A_μ 中的运动，相应的 Hamilton 算符为

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(-\mathrm{i}\hbar\nabla - q\boldsymbol{A})^2 + q\Phi.$$

在经典极限下，Hamilton 函数就是

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2 + q\Phi.$$

于是，正则坐标 $\boldsymbol{r}$ 和正则动量 $\boldsymbol{p}$ 随时间变化的运动方程为

$$\boldsymbol{v} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} = \frac{1}{m}(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}),$$

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -\nabla H = q(\nabla\boldsymbol{A})\cdot\boldsymbol{v} - q\nabla\Phi.$$

写出第二式最后一步时，用到了第一式给出的粒子速度 $\boldsymbol{v}$ 的关系. 再从第一式和第二式，可得粒子所受的力为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{F} &= m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} - q\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t} \\ &= q\left[\left(-\nabla\Phi - \frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}\right) + \boldsymbol{v}\times(\nabla\times\boldsymbol{A})\right] \\ &= q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}).\end{aligned}$$

这正是电荷为 q 的粒子在电磁场中受到的 Lorentz 力，其中电场强度 $\boldsymbol{E}$ 和磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 分别为

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\Phi - \frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}, \quad \boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A}.$$

这里对于电磁场的表述采取国际单位制.

所以，在经典极限，或者说在宏观情形，规范场($\Phi/c, A$)的时空变化率表现为电磁场的强度，通过计算它们对时空坐标的微商可以得到电场强度 E 和磁感应强度 B. 由于这个原因，我们把 Φ 和 A 分别称为规范场 A_μ 的标量势和矢量势，简称标势和矢势.

有电磁场的 Dirac 方程 根据上述讨论，有电磁场的 Dirac 方程可以写成

$$[\gamma^\mu(\mathrm{i}\hbar\partial_\mu - qA_\mu) - mc]\psi = 0. \tag{23}$$

把它改写成 Schrödinger 方程的形式，就是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = [c\boldsymbol{\alpha}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}} - q\boldsymbol{A}) + \beta mc^2 + q\Phi]\psi,$$

相应的 Hamilton 算符为

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}} - q\boldsymbol{A}) + \beta mc^2 + q\Phi.$$

可以看出，在这里电磁场($\Phi/c, A$)表现为是与粒子相互作用的经典外场. 我们在第八章再来讨论场的量子化问题.

2. Dirac 方程的电荷共轭变换

与 Weyl 方程的正反粒子变换(8)相应地，Dirac 方程的正反粒子变换可以写成

$$\psi \to \psi_C = \hat{C}\psi = \eta_C\gamma^2\psi^*,$$

其中 η_C 是模为 1 的常数. 这里若取 $\eta=\mathrm{i}$，$\eta_C\gamma^2$ 就是幺正矩阵.

为了验证上述变换确实是正反粒子变换，我们写出 Dirac 方程(23)的复数共轭，

$$(\gamma^\mu)^*(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu - qA_\mu) - mc]\psi^* = 0,$$

注意其中电磁场 4 矢量势 A_μ 是实函数. 由于$(\gamma^2)^* = -\gamma^2$，其余的 γ 矩阵的复数共轭都等于它自己，于是用 $\eta_C\gamma^2$ 作用到上述方程，可以得到

$$\gamma^\mu(\mathrm{i}\hbar\partial_\mu + qA_\mu) - mc]\psi_C = 0.$$

与描述电荷为 q 的粒子的 Dirac 方程(23)相比，可以看出，上述方

程是描述电荷为 $-q$ 的粒子的 Dirac 方程. 所以，正反粒子变换 $\hat{C}$ 把电荷为 q 的粒子的态变到电荷为 $-q$ 的粒子的态. 因此，Dirac 方程的正反粒子变换也称为电荷共轭变换.

用幺正变换(13)把这里的电荷共轭变换 $\hat{C}$ 变到 Weyl 表象就可以看出，Weyl 方程的正反粒子变换 $\hat{C}$，就是这里的电荷共轭变换分别对于 Weyl 表象的上分量 ψ_R 和下分量 ψ_L 的作用.

3. Dirac 方程的低能近似

Dirac 波函数的低能近似 低能近似又称非相对论近似. 从 §5.2 的(15)式可以看出，在低能近似下，$pc \ll mc^2$，

$$\frac{|c\sigma \cdot p|}{E_p + mc^2} \ll 1,$$

自由粒子正能解 $u(p,\xi)$的上分量是大分量，下分量是小分量.

类似地，有电磁场时，能量本征值方程可以写成

$$\hat{H}\psi = \begin{pmatrix} mc^2 + q\Phi & c\sigma \cdot (\hat{p} - qA) \\ c\sigma \cdot (\hat{p} - qA) & -mc^2 + q\Phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix},$$

把它写开来就是

$$q\Phi\varphi + c\sigma \cdot (\hat{p} - qA)\chi = (E - mc^2)\varphi, \tag{24}$$

$$c\sigma \cdot (\hat{p} - qA)\varphi = (E + mc^2 - q\Phi)\chi. \tag{25}$$

由(25)式解出

$$\chi = \frac{1}{E + mc^2 - q\Phi} c\sigma \cdot (\hat{p} - qA)\varphi, \tag{26}$$

在低能近似下，$E \approx mc^2$，$mc^2 \gg q\Phi$，有

$$\chi \approx \frac{1}{2mc}\sigma \cdot (\hat{p} - qA)\varphi,$$

亦即，在低能近似下，正能解的上分量 φ 为大分量，下分量 χ 为小分量；相反地，负能解的上分量 φ 为小分量，下分量 χ 为大分量.

Pauli 方程和电子的磁矩 把上述近似的 χ 代回(24)式,可以得到正能解大分量 φ 的方程,整理后为

$$\left\{\frac{1}{2m}[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{A})]^2+q\Phi\right\}\varphi=E_k\varphi.$$

这就是非相对论的 Pauli 方程,其中

$$E_k=E-mc^2,$$

而方程左边花括号中的项就是系统的非相对论 Hamilton 算符,

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{N.R.}}&=\frac{1}{2m}[\boldsymbol{\sigma}\cdot(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{A})]^2+q\Phi\\&=\frac{1}{2m}(\hat{\boldsymbol{p}}-q\boldsymbol{A})^2+q\Phi-\frac{q\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}.\end{aligned}$$

上面最后一项表明电子具有磁矩

$$\boldsymbol{\mu}_s=\frac{e\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma}=g_s\frac{e}{2m}\hat{\boldsymbol{s}},$$

其中 $g_s=2$,$q=-e$,e 是基本电荷. 所以,Dirac 方程从相对论性的理论出发,推出了电子的自旋和磁矩,并且给出电子 Lande g 因子的值 $g_s=2$.

自旋轨道耦合及其他修正项 作为 Dirac 方程低能近似的另一重要结果,我们来考虑在静止中心场中的电子,$A_\mu=(\Phi/c,0)$. 为了考虑电子在这个场中的势能 $V(r)=q\Phi$,我们不再能忽略(26)式中的这一项,而要寻求较好的近似. 为此,我们把(26)式改写成

$$\chi=\frac{1}{2mc}f(r)\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\varphi,$$

其中

$$f(r)=\frac{1}{1+\dfrac{E_k-V(r)}{2mc^2}}.$$

把上述 χ 代入(24)式,可以得到大分量 φ 的方程

$$\left\{\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})f(r)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})+V(r)\right\}\varphi=E_k\varphi,$$

于是

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}(\sigma\cdot\hat{p})f(r)(\sigma\cdot\hat{p})+V(r). \tag{27}$$

其中

$$\begin{aligned}(\sigma\cdot\hat{p})f(r)(\sigma\cdot\hat{p})&=\{f(r)(\sigma\cdot\hat{p})+\sigma\cdot\hat{p}f(r)\}(\sigma\cdot\hat{p})\\&=f(r)\hat{p}^2-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}(\sigma\cdot\nabla r)(\sigma\cdot\hat{p})\\&=f(r)\hat{p}^2-\frac{\mathrm{i}\hbar}{r}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}[\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\mathrm{i}\sigma\cdot(\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}})]\\&=f(r)\hat{p}^2+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{s}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}-\hbar^2\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r}.\end{aligned}$$

在写出上面第二和第三个等式时，用到了 Pauli 矩阵的下述公式：

$$(\sigma\cdot A)(\sigma\cdot B)=A\cdot B+\mathrm{i}\sigma\cdot(A\times B),$$

其中 A 和 B 是与 σ 对易的任意两个三维矢量. 把上述 $(\sigma\cdot\hat{p})f(r)(\sigma\cdot\hat{p})$ 的结果代回(27)式，就有

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(r)+\frac{1}{2m}[f(r)-1]\hat{p}^2+\frac{1}{mr}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{s}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r},$$

前两项是非相对论的 Hamilton 算符，后 3 项则是相对论效应引起的修正. 作低能近似

$$f(r)=\frac{1}{1+\dfrac{E_k-V(r)}{2mc^2}}\approx 1-\frac{E_k-V(r)}{2mc^2},$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}\approx\frac{1}{2mc^2}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r},$$

就有

$$\hat{H}\approx\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(r)-\frac{\hat{p}^4}{8m^3c^2}+\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\boldsymbol{s}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\frac{\partial}{\partial r},$$

后面 3 项依次是动能修正项、自旋轨道耦合项和 Darwin 项.

§5.5 一维场中的 Dirac 方程

1. 一维场中的 Dirac 方程

旋量 ψ_u 与 ψ_l 的耦合方程 一维场中的 Dirac 方程可以写成

$$(\mathrm{i}\hbar c\gamma^\mu\partial_\mu - \gamma^0 V - mc^2)\psi = 0,$$

其中场 V 只依赖于空间一维坐标 z,

$$V = V(z).$$

把时间 t 分离出来,

$$\psi = \psi_E e^{-\mathrm{i}Et/\hbar},$$

则波函数 ψ_E 的方程可以用 Dirac 矩阵 α 和 β 写成

$$[\mathrm{i}\hbar c\alpha^k\partial_k + (E - V) - mc^2\beta]\psi_E = 0.$$

由于场 V 具有在(x,y)平面内的平移不变性,粒子动量 $\boldsymbol{p}$ 在(x,y)平面的投影 $\boldsymbol{p}_\perp=(p_x,p_y,0)$是守恒量,我们可以把 ψ_E 写成

$$\psi_E = e^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_\perp\cdot\boldsymbol{x}_\perp/\hbar}\begin{pmatrix}\psi_u\\ \psi_l\end{pmatrix},$$

其中 $\boldsymbol{x}_\perp=(x,y,0)$是粒子坐标 $\boldsymbol{x}$ 在(x,y)平面的投影. 把上式代入 ψ_E 的方程,就可以得到下列关于 ψ_u 与 ψ_l 的耦合方程:

$$c\left[\mathrm{i}(p_x\sigma_y - p_y\sigma_x) + \hbar\frac{\partial}{\mathrm{i}\partial z}\right]\psi_u = (E - V + mc^2)\sigma_z\psi_l,$$

$$c\left[\mathrm{i}(p_x\sigma_y - p_y\sigma_x) + \hbar\frac{\partial}{\mathrm{i}\partial z}\right]\psi_l = (E - V - mc^2)\sigma_z\psi_u.$$

自旋的表象 选择$(p_x\sigma_y-p_y\sigma_x)$为对角的自旋表象,能使上述方程简化①. 令这个自旋表象的波函数为 χ_λ,则有本征值方程

$$\frac{p_x\sigma_y - p_y\sigma_x}{p_\perp}\chi_\lambda = \lambda\chi_\lambda,$$

---

① J. Boguta and A. R. Bodmer, *Nucl. Phys.* **A292**, (1977) 413; D. Hofer and W. Stocker, *Nucl. Phys.* **A492**, (1991) 637.

其中 λ 为待定的本征值，而

$$p_\perp = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}.$$

在通常的 σ_z 为对角的自旋表象中，很容易求得 χ_λ 的表示和本征值 λ：

$$\chi_\lambda = \frac{1}{\sqrt{2p_\perp}} \begin{pmatrix} \sqrt{p_y + \mathrm{i}p_x} \\ -\lambda\sqrt{p_y - \mathrm{i}p_x} \end{pmatrix}, \quad \lambda = \pm 1.$$

可以看出，$(p_x\sigma_y - p_y\sigma_x)$是矢量 $\boldsymbol{p}_\perp \times \boldsymbol{\sigma}$ 的 z 分量. 此外，还可以表明$(p_x\sigma_y - p_y\sigma_x)/p_\perp$的长度为 1，

$$(p_x\sigma_y - p_y\sigma_x)^2 = p_\perp^2.$$

由于 σ 的长度为 1，这个结果表明，矢量 $\boldsymbol{\sigma}$ 是在(x,y)平面内，并且与 $\boldsymbol{p}_\perp$垂直.

另一个得出这一结论的方法，是计算 σ_x，σ_y 和 σ_z 在本征态 χ_λ 的平均值，并且表明

$$\langle\lambda|\sigma_z|\lambda\rangle = 0, \quad p_x\langle\lambda|\sigma_x|\lambda\rangle + p_y\langle\lambda|\sigma_y|\lambda\rangle = 0,$$

其中第一个方程表明 σ 在(x,y)平面内，第二个方程则表明 $\boldsymbol{p}_\perp \perp \boldsymbol{\sigma}$. 因此，矢量 $\boldsymbol{p}_\perp$，$\boldsymbol{\sigma}$ 和 z 轴方向的单位矢量 $\boldsymbol{e}_z$ 构成一个右手坐标系. 所以，本征态 χ_λ 是在与 $\boldsymbol{p}_\perp$和 $\boldsymbol{e}_z$ 垂直的方向上自旋具有本征值 $\lambda\hbar/2$ 的自旋态.

波函数 F 与 G 的方程　于是，我们在这里选择的表象是在其中 E，p_x 和 p_y 具有本征值，而且自旋 $\boldsymbol{\sigma}$ 在与 $\boldsymbol{p}_\perp$和 $\boldsymbol{e}_z$ 垂直的方向上. 在这个表象中，量子数的完备组为(E,p_x,p_y,λ).

用这个本征态 χ_λ，可以把 ψ_E 写成

$$\psi_E = e^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_\perp\cdot\boldsymbol{x}_\perp/\hbar}\begin{pmatrix} -F\chi_\lambda \\ \mathrm{i}G\chi_{-\lambda} \end{pmatrix},$$

其中 F 与 G 只是 z 的函数. 也就是说，我们取

$$\psi_u = -F\chi_\lambda, \quad \psi_l = \mathrm{i}G\chi_{-\lambda}.$$

把它们代入 ψ_u 与 ψ_l 的耦合方程，并且注意

$$\sigma_z\chi_\lambda = \chi_{-\lambda},$$

就得到下述 F 与 G 的耦合方程：

$$c\left(\hbar\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}z} - \lambda p_\perp F\right) = (E - V + mc^2)G, \tag{28}$$

$$c\left(\hbar\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}z} + \lambda p_\perp G\right) = -(E - V - mc^2)F. \tag{29}$$

波函数 F 与 G 的归一化条件是

$$\int \mathrm{d}^3x\psi_E^\dagger\psi_E = \int \mathrm{d}^3x(F^*F + G^*G) = 1.$$

2. 半无限大核物质体系

半无限大核物质体系的 V 和渐近方程 半无限大的核物质体系，是在理论上研究核物质表面性质的一个模型. 在一个半无限大的核物质体系中，核子所受到的场 V 在 z 轴方向上不均匀，存在一个表面区域. 可以把坐标原点 $z=0$ 选在这个表面处，令核物质处于原点的左边. 于是，在左边 $z\ll 0$ 的区域，V 趋于一个确定的值 V_0；在右边 $z\gg 0$ 的区域，V 趋于 0；而在 $z=0$ 附近的边界区域，V 很快地从 V_0 下降为 0. 我们有

$$V \to \begin{cases} V_0, & z \to -\infty, \\ 0, & z \to \infty. \end{cases}$$

在核物质的内部或外部区域，当 $|z|$ 很大时，由于 V 趋于常数，

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}z} \to 0, \quad |z| \to \infty,$$

F 与 G 的方程渐近成为

$$\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}z^2} = -\frac{1}{\hbar^2c^2}[(E-V)^2 - m^2c^4 - p_\perp^2c^2]F,$$

$$\frac{\mathrm{d}^2G}{\mathrm{d}z^2} = -\frac{1}{\hbar^2c^2}[(E-V)^2 - m^2c^4 - p_\perp^2c^2]G.$$

半无限大核物质体系核子波函数的渐近解 当 $z\to-\infty$ 时，$V\to V_0$，可以从 F 的渐近方程解出

$$F \xrightarrow{z\to-\infty} N\sin\left(\frac{p_z z}{\hbar}+\delta_\lambda\right),$$

其中 N 是归一化常数，δ_λ 是由边条件确定的常数，p_z 定义为

$$p_z^2c^2=(E-V_0)^2-m^2c^4-p_\perp^2c^2.$$

有了 F,就可以从方程(28)解出

$$G=\frac{1}{E-V+mc^2}\left(\hbar c\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}z}-\lambda p_\perp cF\right)$$

$$\xrightarrow{z\to-\infty}\frac{N}{E-V_0+mc^2}$$

$$\cdot\left[p_z c\cos\left(\frac{p_z z}{\hbar}+\delta_\lambda\right)-\lambda p_\perp c\sin\left(\frac{p_z z}{\hbar}+\delta_\lambda\right)\right],$$

其中

$$E=V_0+\sqrt{p^2c^2+m^2c^4}.$$

当 $z\to\infty$时，场趋于零，$V\to0$,类似地可以得到下面的解：

$$F\xrightarrow{z\to\infty}Be^{-\gamma z},$$

$$G=\frac{1}{E-V+mc^2}\left(\hbar c\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}z}-\lambda p_\perp cF\right)$$

$$\xrightarrow{z\to\infty}-\frac{\gamma\hbar c+\lambda p_\perp c}{E+mc^2}Be^{-\gamma z},$$

其中 B 是由边条件确定的常数，γ 定义为

$$\gamma=\frac{\sqrt{m^2c^4+p_\perp^2c^2-E^2}}{\hbar c}.$$

上述渐近解 F 和 G 依赖于量子数(E,p_x,p_y,λ).

§ 5.6 球对称场中的 Dirac 方程

1. 球对称场中的 Dirac 方程

守恒量与本征态$|ljm\rangle$ 我们现在要讨论的系统 Hamilton 算

符是

$$\hat{H}=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\beta mc^2+V(r).$$

这个 $\hat{H}$ 具有球对称性，在空间转动和反射下不变，系统的总角动量 $\hat{\boldsymbol{J}}$ 及宇称 $\hat{P}$ 是守恒量，我们可以有 $\{\hat{H},\hat{P},\hat{J}^2,\hat{J}_z\}$ 的共同本征态 $|EPjm\rangle$.

总角动量是轨道角动量与自旋角动量之和，$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{l}}+\hat{\boldsymbol{s}}$. Dirac 旋量是写在自旋表象的，所以我们需要用轨道角动量与自旋角动量的共同本征态 $|lm_lm_s\rangle$ 来耦合成总角动量本征态. 这样得到的是 $(\hat{l}^2,\hat{s}^2,\hat{J}^2,\hat{J}_z)$ 的共同本征态 $|ljm\rangle$，其中省略了常数 $s=1/2$ 没有写出. 具体写出来就是

$$|ljm\rangle=\sum_{m_l,m_s}|lm_lm_s\rangle\langle m_sm_ll|ljm\rangle,$$

其中 $m=m_l+m_s$，$m_s=\pm1/2$. 对于给定的 j，l 有两个取值，$l=j\pm1/2$.

下面我们先来证明，这个态 $|ljm\rangle$ 也是宇称本征态，本征值 $(-1)^l$. 由于 $|lm_l\rangle$ 的坐标表象波函数 $\mathrm{Y}_{lm_l}(\theta\phi)=\langle\phi\theta|lm_l\rangle$ 具有宇称 $(-1)^l$，

$$\begin{aligned}\langle\phi\theta|\hat{P}|lm_l\rangle&=\langle\phi+\pi,\pi-\theta|lm_l\rangle=\mathrm{Y}_{lm_l}(\pi-\theta,\phi+\pi)\\&=(-1)^l\mathrm{Y}_{lm_l}(\theta\phi)=(-1)^l\langle\phi\theta|lm_l\rangle,\end{aligned}$$

所以 $|lm_l\rangle$ 是宇称本征态，本征值 $(-1)^l$，

$$\hat{P}|lm_l\rangle=(-1)^l|lm_l\rangle.$$

由于 $|ljm\rangle$ 是 $|lm_lm_s\rangle$ 的线性叠加，从而 $|ljm\rangle$ 也是宇称本征态，本征值 $(-1)^l$，

$$\hat{P}|ljm\rangle=\sum_{m_l,m_s}(-1)^l|lm_lm_s\rangle\langle m_sm_ll|ljm\rangle=(-1)^l|ljm\rangle,$$

注意自旋态在空间反射下不变. 上式表明，l 相差 ±1 的两个态，宇称相反.

下面我们就来用这个态 $|ljm\rangle$ 构成本征态 $|Pjm\rangle$ 在球极坐标和自旋表象中的旋量波函数.

旋量波函数 把本征态$|ljm\rangle$在坐标和自旋表象的波函数记为

$$\mathcal{Y}_{ljm}(\theta\phi m_s) = \langle m_s\phi\theta|ljm\rangle,$$

它是一个二分量波函数，两个分量分别对应于自旋投影 $m_s = \pm 1/2$. 于是，四分量的 Dirac 波函数可以写成

$$\psi_{kjm} = \begin{pmatrix} \dfrac{F(r)}{r}\mathcal{Y}_{ljm} \\ \dfrac{\mathrm{i}G(r)}{r}\mathcal{Y}_{l'jm} \end{pmatrix}, \tag{30}$$

其中

$$k = \pm 1, \quad l = j + \frac{k}{2}, \quad l' = j - \frac{k}{2}.$$

宇称算符 $\hat{P}$ 对于 Dirac 旋量波函数 ψ_{kjm}的作用，是用 4×4 的矩阵 γ^0 作用于旋量，它会使得(30)中的下分量变号. 上面对于量子数 $l' = j - k/2$ 的选择，是为了使得 l' 与 l 相差 1，从而保证 ψ_{kjm}是宇称的本征态，本征值为$(-1)^{j+k/2}$:

$$\hat{P}\psi_{kjm} = \gamma^0 \begin{pmatrix} (-1)^l \dfrac{F(r)}{r}\mathcal{Y}_{ljm} \\ (-1)^{l'} \dfrac{\mathrm{i}G(r)}{r}\mathcal{Y}_{l'jm} \end{pmatrix} = (-1)^{j+k/2}\psi_{kjm},$$

这里我们已经令宇称算符中的 $\eta_P = 1$. 所以，(30)式的 ψ_{kjm}就是$|Pjm\rangle$态的旋量波函数. 如果我们选取归一化

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi\,\mathcal{Y}_{ljm}^{\dagger}\mathcal{Y}_{ljm} = 1,$$

则径向波函数 $F(r)$和 $G(r)$的归一化是

$$\int \mathrm{d}^3 r\,\psi_{kjm}^{\dagger}\psi_{kjm} = \int_0^{\infty}\mathrm{d}r(F^*F + G^*G) = 1. \tag{31}$$

本征值方程的球极坐标表示 (30)式中的径向波函数 $F(r)$和 $G(r)$以及系统能量本征值 E 由 $\hat{H}$ 的本征值方程来确定：

$$[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \beta mc^2 + V(r)]\psi_{kjm} = E\psi_{kjm}.$$

为了写出上述方程的球极坐标表示，我们需要求出 $\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$ 的球极坐标表示. 由于

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) &= \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) & 0 \\ 0 & (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) \end{pmatrix} \\
&= \boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \mathrm{i}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{l}} = r\hat{p}_r + \mathrm{i}\beta\hat{K},
\end{aligned}
$$

其中

$$
\hat{K} \equiv \beta(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{l}} + \hbar) = \frac{1}{\hbar}\beta\left(\hat{J}^2 - \hat{l}^2 + \frac{\hbar^2}{4}\right), \tag{32}
$$

所以

$$
\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = \alpha_r\left(\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \frac{\mathrm{i}}{r}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\hat{\boldsymbol{l}}\right) = \alpha_r\left(\hat{p}_r + \frac{\mathrm{i}}{r}\beta\hat{K}\right),
$$

其中 $\hat{p}_r$ 的定义见 §4.3，α_r 是 Dirac 矩阵在 $\boldsymbol{r}$ 方向的投影，

$$
\alpha_r = \boldsymbol{\alpha}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}, \quad \alpha_r^2 = 1.
$$

所以，本征值方程的球极坐标表示为

$$
\left[c\alpha_r\left(\hat{p}_r + \frac{\mathrm{i}}{r}\beta\hat{K}\right) + \beta mc^2 + V(r)\right]\psi_{kjm} = E\psi_{kjm}. \tag{33}
$$

α_r 对 ψ_{kjm} 的作用 α_r 对旋量 ψ_{kjm} 的作用会交换上下分量的位置，

$$
\alpha_r\psi_{kjm} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_r \\ \sigma_r & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \dfrac{F(r)}{r}y_{ljm} \\ \dfrac{\mathrm{i}G(r)}{r}y_{l'jm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{\mathrm{i}G(r)}{r}\sigma_r y_{l'jm} \\ \dfrac{F(r)}{r}\sigma_r y_{ljm} \end{pmatrix}.
$$

其中 $\sigma_r = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}/r$ 是 Pauli 矩阵在 $\boldsymbol{r}$ 方向的投影. σ_r 在空间转动下不变，在空间反射下变号，所以它对 y_{ljm} 的作用不改变 j 和 m，但使 l 改变 ± 1. 于是我们可以写出

$$
\sigma_r y_{l'jm} = Ay_{ljm},
$$
$$
\sigma_r y_{ljm} = By_{l'jm},
$$

其中 $l-l'=\pm 1$，A 与 B 与是待定常数. 由于 $\sigma_r^2=1$，而 y_{ljm} 是归一

化波函数，所以 $|A|=|B|=1$. 为了确定 A 与 B 的数值，我们可以利用下述公式（见第三章 § 3.4）

$$y_{ljm}=\sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}}Y_{l,m-1/2}\chi_{+}+\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}}Y_{l,m+1/2}\chi_{-},\quad j=l+1/2,$$

$$y_{ljm}=-\sqrt{\frac{l-m+1/2}{2l+1}}Y_{l,m-1/2}\chi_{+}+\sqrt{\frac{l+m+1/2}{2l+1}}Y_{l,m+1/2}\chi_{-},\quad j=l-1/2,$$

其中 χ_+ 与 χ_- 分别是自旋投影向上和向下的本征态. 当 r 在 z 轴方向时，$\sigma_r=\sigma_z$，$\theta=0$，当 $m_l\neq0$ 时 $Y_{lm_l}(0,\phi)=0$，当 $m_l=0$ 时 $Y_{l0}(0,\phi)=\sqrt{(2l+1)/4\pi}$，有

$$\sigma_z y_{l'jm}=-y_{ljm},$$

于是我们得到 $A=B=-1$. 运用上述结果，我们最后得到

$$\sigma_r\psi_{ljm}=-\begin{pmatrix}\dfrac{\mathrm{i}G(r)}{r}y_{ljm}\\ \dfrac{F(r)}{r}y_{l'jm}\end{pmatrix},\tag{34}$$

可以看出，它只是交换了上下分量中的径向波函数再改变符号，所以仍然属于本征态 $|Pjm\rangle$，具有同样的本征值.

径向方程 把(34)和(32)式代入(33)式，就得到关于径向波函数 $F(r)$ 与 $G(r)$ 的耦合方程

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{k(j+1/2)}{r}\right]F(r)+\frac{1}{\hbar c}[-mc^2-E+V(r)]G(r)=0,$$

$$\left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{k(j+1/2)}{r}\right]G(r)+\frac{1}{\hbar c}[mc^2-E+V(r)]F(r)=0.$$

进一步的讨论需要知道势能 $V(r)$ 的具体形式. 我们在下一小节来讨论 Coulomb 场中电子的束缚态问题.

2. Coulomb 场中电子的束缚态

Coulomb 场中的径向方程 考虑类氢离子 Coulomb 场的情形，

$$V(r) = -\frac{\kappa}{r},$$

在国际单位制中 $\kappa = Ze^2/4\pi\varepsilon_0$，$e$ 是基本电荷，ε_0 是真空介电常数，Z 是核电荷数. 用精细结构常数 α 以及电子的约化能量 ϵ 和 de Broglie 波长 λ，

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar c}, \quad \epsilon = \frac{E}{mc^2}, \quad \lambda = \frac{\hbar}{mc}\left(1 - \frac{E^2}{m^2c^4}\right)^{-1/2},$$

我们可以引入约化半径

$$\rho = \frac{r}{\lambda},$$

把径向波函数的耦合方程改写成下述约化形式

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} - 1 + \frac{K}{\rho}\right]f - \left[\left(\frac{1+\epsilon}{1-\epsilon}\right)^{1/2} + \frac{Z\alpha}{\rho}\right]g = 0,$$

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} - 1 - \frac{K}{\rho}\right]g - \left[\left(\frac{1-\epsilon}{1+\epsilon}\right)^{1/2} - \frac{Z\alpha}{\rho}\right]f = 0,$$

其中 $\quad f(\rho) = \mathrm{e}^{\rho}F, \quad g(\rho) = \mathrm{e}^{\rho}G, \quad K = k(j + 1/2).$

径向方程的级数解 我们可以令

$$f = \rho^{t}\sum_{\nu=0}^{\infty} a_{\nu}\rho^{\nu}, \quad g = \rho^{t}\sum_{\nu=0}^{\infty} b_{\nu}\rho^{\nu},$$

把它们代入上述径向波函数的约化耦合方程，按通常求级数解的程序，就得到系数的下述递推关系

$$(t + \nu + K)a_{\nu} - a_{\nu-1} - Z\alpha b_{\nu} - \left(\frac{1+\epsilon}{1-\epsilon}\right)^{1/2} b_{\nu-1} = 0,$$

$$(t + \nu - K)b_{\nu} - b_{\nu-1} + Z\alpha a_{\nu} - \left(\frac{1-\epsilon}{1+\epsilon}\right)^{1/2} a_{\nu-1} = 0.$$

对于 $\nu = 0$ 的特殊情形，上述递推关系给出非平庸解

$$t = \sqrt{K^2 - Z^2\alpha^2}, \tag{35}$$

我们这里抛弃了取负号的解，因为它在原点发散，不满足归一化条件(31).

用$[(1-\epsilon)/(1+\epsilon)]^{1/2}$乘第一个递推关系，然后减去第二个递推关系，可以得到

$$\frac{a_\nu}{b_\nu}=\frac{t+\nu-K+Z\alpha\sqrt{(1-\epsilon)/(1+\epsilon)}}{t+\nu+K-Z\alpha\sqrt{(1+\epsilon)/(1-\epsilon)}}\sqrt{\frac{1+\epsilon}{1-\epsilon}}\xrightarrow{\nu\to\infty}1. \tag{36}$$

于是，把它代回上述递推关系就有

$$a_{\nu+1}\xrightarrow{\nu\to\infty}\frac{2}{\nu}a_\nu,\quad b_{\nu+1}\xrightarrow{\nu\to\infty}\frac{2}{\nu}b_\nu.$$

因此，当$\rho\to\infty$时f和g都像$e^{2\rho}$一样发散，除非它们中断为多项式. 不难看出，这两个级数都将中断于ρ的同样幂次$\bar{\nu}$. 把$\nu=\bar{\nu}+1$代入上述递推关系，可以得到

$$b_{\bar{\nu}}=-\sqrt{\frac{1-\epsilon}{1+\epsilon}}a_{\bar{\nu}}. \tag{37}$$

把上式代入(36)式，并令$\nu=\bar{\nu}$，就有

$$t+\bar{\nu}-\frac{Z\alpha\epsilon}{\sqrt{1-\epsilon^2}}=0,$$

由此可以解出能量本征值

$$\epsilon=\frac{E}{mc^2}=\left[1+\frac{Z^2\alpha^2}{(\bar{\nu}+t)^2}\right]^{-1/2}.$$

需要指出，当$K>0$时$\bar{\nu}$不能为0，$\bar{\nu}\neq0$. 这是因为当$\nu=0$时递推关系给出一个附加条件

$$b_0=\frac{Z\alpha}{K-t}a_0, \tag{38}$$

当$K>0$时上式与(37)式符号相反.

能量本征值 由于$K=k(j+1/2)$，K的取值可以是非0的正负整数，

$$K=\pm1,\pm2,\pm3,\cdots.$$

所以，$|K|$的取值是非 0 的正整数，$|K|=1,2,3,\cdots$. 于是，我们可以方便地引入主量子数

$$n=\bar{\nu}+|K|,$$

从而把能量本征值写成

$$E_{nj}=mc^2\left[1+\frac{Z^2\alpha^2}{\{n+[(j+1/2)^2-Z^2\alpha^2]^{1/2}-(j+1/2)\}^2}\right]^{-1/2},$$

它依赖于量子数 n 与 j，对于总角动量投影量子数 m 是简并的. 此外，除了 $n=j+1/2$ ($\bar{\nu}=0$)以外，由于 K 有正负两个值，能级还有两重简并. K 的正负两个值，相应于 $k=\pm1$，也就是相应于宇称相反的两个态. 所以这两重简并是对于宇称的简并.

把能量本征值展开成 $Z\alpha$ 的级数，有

$$E_{nj}=mc^2-\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2}mc^2-\frac{Z^4\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{j+1/2}-\frac{3}{4}\right)mc^2+\cdots,$$

其中第一项是电子静质能，第二项是非相对论的结果，亦即 Bohr 公式，其余的项都来自相对论的修正，包括数量级为 α^2 的自旋轨道耦合项，相对论动能修正项和 Darwin 项.

径向波函数 根据递推关系，利用(35)和(36)式，我们可以用 a_0 与 b_0 来表示系数 a_ν 与 b_ν，而 a_0 与 b_0 则可以由波函数的归一化条件(31)确定. 对于基态，我们得到

$$F=\left(\frac{2Z}{a_B}\right)^{3/2}\left[\frac{1+\eta}{2\Gamma(1+2\eta)}\right]^{1/2}e^{-Zr/a_B}\left(\frac{2Zr}{a_B}\right)^{\eta-1},$$

$$G=-\left(\frac{1-\eta}{1+\eta}\right)^{1/2}F,$$

其中 a_B 是 Bohr 半径，$\Gamma(x)$是 Gamma 函数，η 是$|K|=1$ 时的 t，

$$a_B=\frac{1}{\alpha}\frac{\hbar}{mc},\quad \eta=(1-Z^2\alpha^2)^{1/2}.$$

这一结果表明，下分量与上分量之比 G/F 是 $Z\alpha$ 的数量级，与(38)式一致. 现在的情形，电子的运动基本上是非相对论的，下分量比上分量小是预料之中的事. 事实上，原点是波函数的奇点，下分量 G 比上分量 F 小，这是所有束缚态的特征. 但是，一般来说，G 与

F 并不像基态这样成比例.

与 Schrödinger 理论的基态径向波函数相比，Dirac 方程的解多一个因子

$$\left[\frac{1+\eta}{\Gamma(1+2\eta)}\right]^{1/2}\left(\frac{2Zr}{a_B}\right)^{\eta-1},$$

除了极小的 r 或很大的 r，这个因子与 1 相差很小. 而当 r 很大时，波函数几乎成为 0，这个因子也就不重要.

一般地说，径向波函数像在 Schrödinger 理论中一样趋于 0，主量子数越小，下降得越快. 当 ρ 的值小时，波函数的渐近式为

$$\psi \sim \begin{pmatrix} a_0\rho^{t-1} \\ b_0\rho^{t-1} \end{pmatrix}.$$

由于 $t=(K^2-Z^2\alpha^2)^{1/2}$，对于所有 $Z\alpha<1$ 的稳定核，当 $K=\pm2$，±3，…，也就是当 $j=3/2,5/2,\cdots$ 时，波函数 ψ 在 $\rho\to0$ 时趋于 0. 但是对于 $K=\pm1$，也就是对于 s 和 p 波的态，上述 Dirac 波函数对于所有的主量子数 n 在原点都是奇点. 当然，如果 $Z\alpha$ 很小，这种奇异性很弱. 而且，当 $K=\pm1$ 时在原点的这种奇异性在实际的原子中并不存在，因为原子核有一定大小，势能不同于 Coulomb 定律，当 $\rho\to0$ 时并不趋于无限.

与场强 $Z\alpha$ 有关的说明 上述计算只给出了能量的离散谱. 进一步的研究表明还存在从 $-\infty$ 到 $-mc^2$ 和从 mc^2 到 ∞ 的两个连续谱，后者联系于散射态波函数. 需要指出的是，只有当 $Z\alpha<1$ 时波函数全体才形成正交的完备组. 当 $Z\alpha>1$ 时，(35)式给出的 t 在某些 K 值成为纯虚数，随后的计算就没有意义，于是，不存在态的正交的完备组. 也就是说，对于 Dirac 方程来说，在足够强的 Coulomb 场中，粒子不存在正规的定态，这就像在非相对论的 Schrödinger 理论中奇异性比 $1/r^2$ 更强的吸引势一样①.

---

① D. R. Yennie, D. G. Ravenhall, and R. N. Wilson, *Phys. Rev.* **95** (1954) 500; H. Bethe and E. Salpeter, *Handb. Phys.* **35** (1957) 88.

第六章　形式散射理论

§6.1　射出本征态与射入本征态

1. 散射问题

散射问题的两种观点　散射的基本问题是，已知入射粒子与靶粒子相距很远还没有相互作用时的初态，求它们逐渐靠近发生相互作用，再散射分开到相距很远以后的末态。这是一个已知初态，求 Schrödinger 方程的散射态解的*动态问题*。它是不同于本征值问题的另一类问题。这个问题有几个特点。首先，散射系统的能量是已知的，要求解的是系统的散射态。其次，我们需要知道系统散射态在一个表象中的波函数，而不只是态矢量。第三，散射过程在坐标空间有直观和形象的图像，坐标表象是最直接和自然的选择。最后，我们关心的只是散射波在无限远处的渐近行为，因为这是波函数中实验能够测量的部分。

在实际的散射实验中，入射粒子具有确定的动量和能量，入射粒子与靶粒子构成的系统具有确定的能量。所以，问题又可以表述为：已知从无限远处入射的具有确定动量的平面波，求入射粒子与靶粒子系统具有确定能量的定态波函数中散射部分在无限远处的渐近行为。这是一个已知一定的边界条件，求 Schrödinger 方程散射态解的*定态问题*。把散射作为定态边值问题来处理的*定态观点*，与把散射作为动态初值问题来处理的*动态观点*是等价的。我们将采取动态观点。采取动态观点的理论显含时间，这种理论称为含时散射理论，它与不显含时间的定态理论给出相同的观测结果。

测量散射粒子的探测器，有的能测量出射粒子的动量，有的能测量出射粒子的角动量. 所以，除了坐标表象，有时也采用动量表象或角动量表象.

物理模型 我们只考虑入射粒子与靶粒子均无内部激发，它们的内部结构没有显示出来的两体碰撞. 对于这种情况，只需要考虑粒子的质心坐标和自旋，可以把入射粒子和靶粒子都看成没有结构的简单粒子，引起它们之间散射的相互作用只依赖于这两个粒子质心的相对坐标和它们的自旋. 我们这里暂不考虑自旋自由度.

对于两个简单粒子的散射，可以引进这两个粒子系统的质心坐标和它们之间的相对坐标 $\boldsymbol{r}$，从而把两体散射问题简化为一个具有约化质量 m 的粒子在中心力场中的单体散射问题. 系统的 Hamilton 算符可以写成

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

其中 $\hat{H}_0$ 是这两个粒子无相互作用时的 Hamilton 算符，$\hat{V}$ 是它们之间的相互作用势能算符，当 $r\to\infty$时足够快地趋于零，

$$\hat{V} \xrightarrow{r\to\infty} 0.$$

问题的表述 需要求解的 Schrödinger 方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{H}|\psi\rangle.$$

在粒子相距很远还没有相互作用的 $t=t_0$ 时，初态可以写成

$$|\psi(t_0)\rangle = |\psi_0(t_0)\rangle.$$

$|\psi_0\rangle$是下述无相互作用自由粒子 Schrödinger 方程的解，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi_0\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{H}_0|\psi_0\rangle. \tag{1}$$

自由粒子系统具有空间平移不变性，动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 与 $\hat{H}_0$ 对易，$[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}_0]=0$，可以有 $\hat{H}_0$ 与 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 的共同本征态，

$$\hat{H}_0|E\boldsymbol{p}\rangle = E(p)|E\boldsymbol{p}\rangle, \quad \hat{\boldsymbol{p}}|E\boldsymbol{p}\rangle = \boldsymbol{p}|E\boldsymbol{p}\rangle.$$

对于相对论性自由粒子，$\hat{H}_0$ 与动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 有下列关系（见第五章

§5.1 和 §5.2)

$$\hat{H}_0^2 = \hat{p}^2c^2 + m^2c^4, \tag{2}$$

我们有

$$E(p) = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}.$$

在习惯上,常用波矢量 $\boldsymbol{k}$ 及其大小 k 来标志 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 及 $\hat{H}_0$ 的本征态,

$$\boldsymbol{k} = \frac{\boldsymbol{p}}{\hbar}.$$

方程(1)具有特解

$$|\varphi_{\boldsymbol{p}}(t)) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar}|E\boldsymbol{p}) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E(p)t/\hbar}|E\boldsymbol{p}),$$

写在坐标表象,这就是 de Broglie 平面波

$$\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t) = (\boldsymbol{r}|\varphi_{\boldsymbol{p}}(t)) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[E(p)t-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}]/\hbar}.$$

方程(1)的通解 $|\psi_0(t))$ 可以写成上述特解的叠加,

$$|\psi_0(t)) = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{p}C(\boldsymbol{p})|\varphi_{\boldsymbol{p}}(t)). \tag{3}$$

把它写在坐标表象,就是上述 de Broglie 平面波的叠加,

$$\begin{aligned}\psi_0(\boldsymbol{r},t) &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{p}C(\boldsymbol{p})\varphi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t)\\ &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{p}C(\boldsymbol{p})\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[E(p)t-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}]/\hbar}.\end{aligned}$$

上式给出的是一个坐标和动量都有一定分布的波包.实际散射实验中的入射初态具有基本确定的动量 $\boldsymbol{p}_0$,$C(\boldsymbol{p})$只能是一个峰值位于 $\boldsymbol{p}_0$ 处宽度 $\Delta\boldsymbol{p}_0$ 很小的分布,当 $\Delta\boldsymbol{p}_0\to 0$ 时它趋于 δ 函数,

$$C(\boldsymbol{p}) \xrightarrow{\Delta\boldsymbol{p}_0\to 0} \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}_0),$$

这时

$$\psi_0(\boldsymbol{r},t) \xrightarrow{\Delta\boldsymbol{p}_0\to 0} \varphi_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{r},t).$$

波包的运动可以由下述相位极值条件确定:

$$\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}[E(p)t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}] = 0.$$

它给出波包的运动方程

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{v}t,$$

其中

$$\boldsymbol{v} = \frac{\partial E}{\partial \boldsymbol{p}} = \frac{\boldsymbol{p}}{E/c^2}$$

是波包运动的群速度. 所以,波包中心的速度是 $\boldsymbol{v}_0 = \boldsymbol{p}_0 c^2/E$,当 $t=0$ 时,波包中心到达 $\boldsymbol{r}=0$ 的原点处.

2. Møller 算符

算符 $\hat{U}(0,t_0)$ 运用时间发展算符,我们可以把 $|\psi(t)\rangle$ 的解形式地写成

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

于是,我们有

$$|\psi(0)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t_0/\hbar}|\psi(t_0)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t_0/\hbar}|\psi_0(t_0)\rangle.$$

$|\psi_0(t_0)\rangle$ 是初始时刻 t_0 的自由粒子态,按自由粒子的 Hamilton 算符变化,可以写成

$$|\psi_0(t_0)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t_0/\hbar}|\psi_0(0)\rangle.$$

把它代回上式,我们就得到

$$|\psi(0)\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t_0/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t_0/\hbar}|\psi_0(0)\rangle = \hat{U}(0,t_0)|\psi_0(0)\rangle, \tag{4}$$

其中算符 $\hat{U}(0,t_0)$ 的定义是

$$\hat{U}(0,t_0) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t_0/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t_0/\hbar},$$

它的作用是:把 $t=0$ 时刻的态 $|\psi_0(0)\rangle$ 先无相互作用地推到初始时刻 t_0,再引入相互作用,把它从 t_0 时刻开始在相互作用下发展到 $t=0$ 时刻的态 $|\psi(0)\rangle$.

对上述算符 $\hat{U}(0,t)$ 求对时间 t 的微商,有

$$\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{V}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0 t/\hbar},$$

从而我们得到算符 $\hat{U}(0,t_0)$ 的积分形式

$$\hat{U}(0,t_0)=1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{0}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{V}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}.$$

极限 $t_0\to-\infty$ 对上述算符 $\hat{U}(0,t_0)$ 取 $t_0\to-\infty$ 的极限，可以得到

$$\begin{aligned}\hat{U}(0,-\infty)&=1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^{0}\mathrm{d}t\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{V}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}\\&=1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\xi(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{V}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar},\end{aligned}$$

其中 $\xi(t)$ 是下述定义的阶跃函数，

$$\xi(t)=\begin{cases}0, & t>0,\\1, & t<0.\end{cases}$$

改写成对 E 的积分 利用下述等式，

$$\xi(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}=\lim_{\epsilon\to0^+}\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar}}{E-\hat{H}+\mathrm{i}\epsilon},$$

就有

$$\begin{aligned}\hat{U}(0,-\infty)&=1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\,\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\lim_{\epsilon\to0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}Et/\hbar}}{E-\hat{H}+\mathrm{i}\epsilon}\hat{V}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}\\&=1+\lim_{\epsilon\to0^+}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\,\frac{1}{E-\hat{H}+\mathrm{i}\epsilon}\hat{V}\delta(E-\hat{H}_0)\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\,\hat{\Omega}^+\,\delta(E-\hat{H}_0),\end{aligned}$$

其中

$$\hat{\Omega}^+(E)=\lim_{\epsilon\to0^+}\left[1+\frac{1}{E-\hat{H}+\mathrm{i}\epsilon}\hat{V}\right]=\lim_{\epsilon\to0^+}\hat{\Omega}_\epsilon^+(E).$$

类似地，可以有

$$\hat{U}(0,\infty)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\hat{\Omega}^-\,\delta(E-\hat{H}_0),$$

其中

$$\hat{\Omega}^-(E)=\lim_{\epsilon\to0^+}\left[1+\frac{1}{E-\hat{H}-\mathrm{i}\epsilon}\hat{V}\right]=\lim_{\epsilon\to0^+}\hat{\Omega}_\epsilon^-(E).$$

在上述 $\hat{\Omega}^{\pm}(E)$的公式中,取极限以前的 $\hat{\Omega}_{\epsilon}^{\pm}(E)$为

$$\hat{\Omega}_{\epsilon}^{\pm}(E)=1+\frac{1}{E-\hat{H}\pm\mathrm{i}\epsilon}\hat{V}.$$

算符 $\hat{U}(0,-\infty)$和 $\hat{U}(0,\infty)$称为 Møller 波算符,简称 Møller 算符.

3. 射出和射入本征态

定义 现在我们回到(4)式.从它可以看出,当 $t_0\to-\infty$时,用 Møller 算符 $\hat{U}(0,-\infty)$作用到自由粒子态$|\psi_0(0)\rangle$上,就得到$t=0$时刻的解$|\psi(0)\rangle$;当 $t_0\to\infty$时,用 Møller 算符 $\hat{U}(0,\infty)$作用到自由粒子态$|\psi_0(0)\rangle$上,也可以得到 $t=0$ 时刻的解$|\psi(0)\rangle$.于是,我们可以定义

$$|\psi^{\pm}\rangle\equiv\hat{U}(0,\mp\infty)|\psi_0(0)\rangle. \tag{5}$$

$|\psi^{+}\rangle$态的含义是:如果系统从 $t_0\to-\infty$时无相互作用地自由发展到$t=0$时刻的态是$|\psi_0(0)\rangle$,则它从 $t_0\to-\infty$时在相互作用支配下发展到 $t=0$ 时刻的态就是$|\psi^{+}\rangle$.所以,$|\psi^{+}\rangle$是由过去 $t_0\to-\infty$时的初条件确定的散射解.类似地,$|\psi^{-}\rangle$态的含义是:如果系统从 $t_0\to\infty$时无相互作用地自由退回到 $t=0$ 时刻的态是$|\psi_0(0)\rangle$,则它从 $t_0\to\infty$时在相互作用支配下退回到 $t=0$ 时刻的态就是$|\psi^{-}\rangle$.所以,$|\psi^{-}\rangle$是由将来 $t_0\to\infty$时的"初条件"确定的散射解.

本征态 在(5)式中代入(3)式,省去其中 p_0 的下标 0,当 $\Delta p_0\to0$ 时就得到

$$\begin{aligned}|\psi_{p}^{\pm}\rangle&=\hat{U}(0,\mp\infty)|\varphi_{p}\rangle\\&=\lim_{\epsilon\to0^{+}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\hat{\Omega}_{\epsilon}^{\pm}(E)\delta(E-\hat{H}_0)|\varphi_{p}\rangle=\hat{\Omega}^{\pm}(E_{p})|\varphi_{p}\rangle,\end{aligned}$$

其中 $E_p=E(p)$.下式表明$|\psi_{p}^{\pm}\rangle$是 $\hat{H}$ 的本征态,具有本征值 $E=E_p$:

$$(\hat{H}-E_{p})|\psi_{p}^{\pm}\rangle=(\hat{H}-E_{p})\hat{\Omega}^{\pm}(E_{p})|\varphi_{p}\rangle$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0^+} (\hat{H} - E_p)\left(1 + \frac{1}{E_p - \hat{H} \pm \mathrm{i}\varepsilon}\hat{V}\right)|\varphi_p\rangle$$
$$= (\hat{H} - E_p - \hat{V})|\varphi_p\rangle = (\hat{H}_0 - E_p)|\varphi_p\rangle = 0.$$

于是,我们在形式上得到散射解

$$|\psi_p^{\pm}(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}|\psi_p^{\pm}\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_p t/\hbar}|\psi_p^{\pm}\rangle.$$

无限远渐近式 在坐标表象中,可以求出下列无限远处的渐近式(见下一节)

$$\psi_p^{\pm}(\boldsymbol{r},t) = \langle \boldsymbol{r}|\psi_p^{\pm}(t)\rangle$$
$$\xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\left[\mathrm{e}^{-(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar} + f(\theta,\phi)\frac{\mathrm{e}^{-(E_p t \mp pr)/\hbar}}{r}\right],$$

其中(θ,ϕ)是相对于入射动量$\boldsymbol{p}$的方位角,$f(\theta,\phi)$是在这个方向的散射振幅.可以看出,右边第一项是入射的自由粒子平面波,第二项是球面散射波.本征态$\psi_p^{+}(\boldsymbol{r},t)$的球面散射波是从球心$r=0$向外扩张的,所以把它称为射出本征态.本征态$\psi_p^{-}(\boldsymbol{r},t)$的球面散射波是从外向球心$r=0$收缩的,所以把它称为射入本征态.通常处理散射问题的定态方法,就是求解具有射出渐近边条件的定态Schrödinger方程,得到射出本征态$\psi_p^{+}(\boldsymbol{r},t)$,从而得到散射振幅$f(\theta,\phi)$.

算符关系 我们来证明公式

$$\hat{H}\hat{U}(0,\mp\infty) = \hat{U}(0,\mp\infty)\hat{H}_0. \tag{6}$$

由于$|\psi_p^{\pm}\rangle = \hat{U}(0,\mp\infty)|\varphi_p\rangle$是$\hat{H}$的本征态,有

$$\hat{H}\hat{U}(0,\mp\infty)|\varphi_p\rangle = E_p\hat{U}(0,\mp\infty)|\varphi_p\rangle = \hat{U}(0,\mp\infty)E_p|\varphi_p\rangle$$
$$= \hat{U}(0,\mp\infty)\hat{H}_0|\varphi_p\rangle,$$

而$|\varphi_p\rangle$是完备的,于是公式得证.

正交归一性 现在来证明

$$\langle\psi_p^{\pm}|\psi_{p'}^{\pm}\rangle = \langle\varphi_p|\varphi_{p'}\rangle = \delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}').$$

运用(4)式,我们有

$$\langle\psi(0)|\psi'(0)\rangle = \langle\psi_0(0)|\hat{U}^{\dagger}(0,t_0)\hat{U}(0,t_0)|\psi_0'(0)\rangle$$

$$= \langle \psi_0(0) | e^{i\hat{H}_0 t_0/\hbar} e^{-i\hat{H} t_0/\hbar} e^{i\hat{H} t_0/\hbar} e^{-i\hat{H}_0 t_0/\hbar} | \psi_0'(0) \rangle$$

$$= \langle \psi_0(0) | \psi_0'(0) \rangle.$$

当 $\psi_0(0)$ 与 $\psi_0'(0)$ 中的动量分布宽度都趋于 0 时，$\Delta \boldsymbol{p}, \Delta \boldsymbol{p}' \to 0$，上式就成为

$$\langle \psi_{\boldsymbol{p}}^+ | \psi_{\boldsymbol{p}'}^+ \rangle = \langle \varphi_{\boldsymbol{p}} | \varphi_{\boldsymbol{p}'} \rangle = \delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}').$$

用 Møller 算符来表示，$|\psi_{\boldsymbol{p}}^+\rangle = \hat{U}(0, -\infty) |\varphi_{\boldsymbol{p}}\rangle$，上式给出

$$\hat{U}^\dagger(0, -\infty) \hat{U}(0, -\infty) = 1.$$

如果系统具有时间反演不变性，$[\hat{T}, \hat{H}] = 0$，则 Møller 算符 $\hat{U}(0, -\infty)$ 在时间反演下变成 $\hat{U}(0, \infty)$，从而还有

$$\hat{U}^\dagger(0, \infty) \hat{U}(0, \infty) = 1,$$

或者等价的

$$\langle \psi_{\boldsymbol{p}}^- | \psi_{\boldsymbol{p}'}^- \rangle = \langle \varphi_{\boldsymbol{p}} | \varphi_{\boldsymbol{p}'} \rangle = \delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}').$$

完备性问题 射出本征态组 $\{|\psi_{\boldsymbol{p}}^+\rangle\}$ 或射入本征态组 $\{|\psi_{\boldsymbol{p}}^-\rangle\}$ 都可以分别构成系统 $\hat{H}$ 的散射态的正交归一化完备组。但它们对于全体态矢量的空间并不完备，因为它们没有包括束缚态，

$$\int d^3 p |\psi_{\boldsymbol{p}}^+\rangle \langle \psi_{\boldsymbol{p}}^+| = \int d^3 p |\psi_{\boldsymbol{p}}^-\rangle \langle \psi_{\boldsymbol{p}}^-| \neq 1.$$

等价地，这就给出

$$\hat{U}(0, -\infty) \hat{U}^\dagger(0, -\infty) = \hat{U}(0, \infty) \hat{U}^\dagger(0, \infty) \neq 1.$$

所以，虽然算符 $\hat{U}(0, t)$ 是幺正的，但是 Møller 波算符 $\hat{U}(0, \pm\infty)$ **不是幺正的**.

§6.2 散射截面与光学定理

1. 散射截面

散射截面的定义 一般地，我们可以把散射问题的解写成两部分之和，

$$|\psi(t)\rangle = |\psi_0(t)\rangle + |\psi_S(t)\rangle,$$

其中$|\psi_0(t)\rangle$是入射波包，$|\psi_S(t)\rangle$是散射波. 入射波包中心的速度是$v_0 = p_0/m$，相应地，这个入射平面波的概率流密度是$v_0/(2\pi\hbar)^3$. 另一方面，在t时刻每单位时间内散射到动量范围$\boldsymbol{p}\to\boldsymbol{p}+\mathrm{d}\boldsymbol{p}$的相对概率为

$$w_{\boldsymbol{p}}\mathrm{d}^3p = \frac{\partial}{\partial t}|\langle\varphi_{\boldsymbol{p}}|\psi_S(t)\rangle|^2\mathrm{d}^3p.$$

于是，我们可以定义**微分散射截面**$\sigma(\theta,\phi)$为

$$\sigma(\theta,\phi)\mathrm{d}\Omega \equiv \frac{1}{v_0/(2\pi\hbar)^3}\mathrm{d}\Omega\int_0^\infty p^2\mathrm{d}p w_{\boldsymbol{p}},$$

其中(θ,ϕ)是动量$\boldsymbol{p}$的方位角，$\mathrm{d}\Omega$是动量空间的立体角元. 微分散射截面$\sigma(\theta,\phi)$简称**散射截面**，具有面积的量纲. 它的含义是：**单位时间内入射到单位靶面上的一个粒子被散射到(θ,ϕ)方向立体角$\mathrm{d}\Omega$内的概率.**

散射截面的公式 由上述散射截面的定义，我们有

$$\begin{aligned}\sigma(\theta,\phi) &= \frac{(2\pi\hbar)^3}{v_0}\int_0^\infty p^2\mathrm{d}p w_{\boldsymbol{p}} \\ &= \frac{(2\pi\hbar)^3E}{p_0c^2}\int_0^\infty p^2\mathrm{d}p\frac{\partial}{\partial t}|\langle\varphi_{\boldsymbol{p}}|\psi_S(t)\rangle|^2.\end{aligned}$$

我们可以把散射波$|\psi_S(t)\rangle$对时间的微商写成

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}|\psi_S(t)\rangle &= \frac{\partial}{\partial t}[|\psi(t)\rangle - |\psi_0(t)\rangle] \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{H}|\psi(t)\rangle - \hat{H}_0|\psi_0(t)\rangle] \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{V}|\psi(t)\rangle + \hat{H}_0|\psi_S(t)\rangle].\end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}|\langle\varphi_{\boldsymbol{p}}|\psi_S(t)\rangle|^2 &= \langle\psi_S(t)|\varphi_{\boldsymbol{p}}\rangle\langle\varphi_{\boldsymbol{p}}|\frac{\partial}{\partial t}|\psi_S(t)\rangle + \mathrm{c.c.} \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi_S(t)|\varphi_{\boldsymbol{p}}\rangle\{\langle\varphi_{\boldsymbol{p}}|\hat{V}|\psi(t)\rangle + \langle\varphi_{\boldsymbol{p}}|\hat{H}_0|\psi_S(t)\rangle\} + \mathrm{c.c.}\end{aligned}$$

$$= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi_S(t)|\varphi_p\rangle\langle\varphi_p|\hat{V}|\psi(t)\rangle + \text{c.c.}$$

$$\xrightarrow{\Delta p_0 \to 0} \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\varphi_{p_0}|[\Omega^+(E_{p_0})]^\dagger - 1|\varphi_p\rangle\langle\varphi_p|\hat{V}|\psi^+_{p_0}\rangle + \text{c.c.}, \tag{7}$$

其中 c.c. 代表前面的项的复数共轭，包含$\langle\varphi_p|\hat{H}_0|\psi_S(t)\rangle$的项与其复数共轭项抵消了，最后一式取 $t=0$. 经过简单的代数运算，我们可以从

$$\hat{\Omega}^+_\epsilon = 1 + \frac{1}{E - \hat{H} + \mathrm{i}\epsilon}\hat{V}$$

得到

$$\hat{\Omega}^+_\epsilon = 1 + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + \mathrm{i}\epsilon}\hat{V}\hat{\Omega}^+_\epsilon.$$

于是有

$$\langle\varphi_{p_0}|[\Omega^+(E_{p_0})]^\dagger - 1|\varphi_p\rangle$$

$$= \lim_{\epsilon\to 0^+}\langle\varphi_{p_0}|[\Omega^+_\epsilon(E_{p_0})]^\dagger\hat{V}\frac{1}{E_{p_0} - \hat{H}_0 - \mathrm{i}\epsilon}|\varphi_p\rangle$$

$$= \langle\psi^+_{p_0}|\hat{V}|\varphi_p\rangle\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{1}{E_{p_0} - E_p - \mathrm{i}\epsilon}$$

$$= \langle\psi^+_{p_0}|\hat{V}|\varphi_p\rangle\left[\frac{P}{E_{p_0} - E_p} + \mathrm{i}\pi\delta(E_{p_0} - E_p)\right],$$

其中 P 表示在积分中取主值，最后一个等式用到了下列积分公式（参阅第二章 § 2.1）：

$$\lim_{\epsilon\to 0^+}\frac{1}{x \pm \mathrm{i}\epsilon} = \frac{P}{x} \mp \mathrm{i}\pi\delta(x). \tag{8}$$

把上述结果代回(7)式，就有

$$\frac{\partial}{\partial t}|\langle\varphi_p|\psi_S(t)\rangle|^2 \xrightarrow{\Delta p_0 \to 0} \frac{2\pi}{\hbar}|\langle\varphi_p|\hat{V}|\psi^+_{p_0}\rangle|^2\delta(E_p - E_{p_0}),$$

其中积分取主值的项与它的复数共轭项抵消了. 于是我们最后得

到截面的公式

$$\sigma(\theta,\phi)=\frac{2\pi}{\hbar}\frac{(2\pi\hbar)^3E}{p_0c^2}\int p^2\mathrm{d}p\,|(\varphi_p|\hat{V}|\psi_{p_0}^+)|^2\delta(E_p-E_{p_0})$$

$$=\frac{16\pi^4\hbar^2E^2}{c^4}|(\varphi_p|\hat{V}|\psi_{p_0}^+)|^2_{p=p_0},$$

其中 $E=E_{p_0}=E_p$ 是入射粒子与靶粒子质心系的能量，在 $pc\ll E$ 的非相对论近似下，$E/c^2\approx m$. 注意 E 是相对论能量，我们在本章的所有讨论都没有做非相对论近似，所得的公式对于相对论性高能散射过程也适用. 此外，在不致于引起混淆时，我们总是把能量简单地写成 E，而只是在必需时才写出其下标 p 或 p_0.

2. Lippmann-Schwinger 方程与散射振幅

在这一小节我们用 Lippmann-Schwinger 方程与散射振幅法来推出上述散射截面公式. 在散射问题中，Lippmann-Schwinger 方程与 Schrödinger 方程等价.

Lippmann-Schwinger 方程 我们可以把射出本征态写成

$$|\psi_p^+)=\lim_{\epsilon\to0^+}|\psi_p^+(\epsilon)),$$

其中

$$|\psi_p^+(\epsilon))=\hat{\Omega}_\epsilon^+(E_p)|\varphi_p).$$

代入 $\hat{\Omega}_\epsilon^+(E_p)$的公式，我们就得到下列关于$|\psi_p^+(\epsilon))$的 Lippmann-Schwinger 方程

$$|\psi_p^+(\epsilon))=|\varphi_p)+\frac{1}{E_p-\hat{H}_0+\mathrm{i}\epsilon}\hat{V}|\psi_p^+(\epsilon)).\qquad(9)$$

坐标表象中的 Lippmann-Schwinger 方程 在坐标表象中写出上述方程，并把入射的初始动量记为 $\boldsymbol{p}_0$，就有

$$\psi_{p_0}^+(\epsilon,\boldsymbol{r})=\varphi_{p_0}(\boldsymbol{r})+\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'(\boldsymbol{r}|\frac{1}{E_{p_0}-\hat{H}_0+\mathrm{i}\epsilon}|\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\psi_{p_0}^+(\epsilon,\boldsymbol{r}').$$

用完备性公式$\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}|\boldsymbol{p})(\boldsymbol{p}|=1$ 和回路积分定理可得下列自由粒子

Green 函数

$$\langle \boldsymbol{r}|\frac{1}{E_{p_0}-\hat{H}_0+\mathrm{i}\epsilon}|\boldsymbol{r}'\rangle \xrightarrow{\epsilon\to 0^+} -\frac{E}{2\pi\hbar^2c^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|/\hbar}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}.$$

把它代回上述坐标表象中的 Lippmann-Schwinger 方程，就有

$$\psi^+_{p_0}(\boldsymbol{r})=\varphi_{p_0}(\boldsymbol{r})-\frac{E}{2\pi\hbar^2c^2}\int \mathrm{d}^3r'\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|/\hbar}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}V(\boldsymbol{r}')\psi^+_{p_0}(\boldsymbol{r}').$$

渐近解和散射截面 $V(\boldsymbol{r})$是短程势，故当 r 充分大时可以作近似

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\approx r-\frac{\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{r}}{r},\quad \frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\approx\frac{1}{r}.$$

把它们代入上述方程，完成对 $\boldsymbol{r}'$的积分，可以得到

$$\psi^+_{p_0}(\boldsymbol{r})\approx\varphi_{p_0}(\boldsymbol{r})+\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}f(\theta,\phi)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p_0r/\hbar}}{r},$$

其中散射振幅

$$f(\theta,\phi)=-\frac{4\pi^2\hbar E}{c^2}\langle\varphi_p|\hat{V}|\psi^+_{p_0}\rangle_{p=p_0},\tag{10}$$

(θ,ϕ)是散射动量 $\boldsymbol{p}$ 相对于入射动量 $\boldsymbol{p}_0$ 的方位角. 于是，我们最后得到微分散射截面的公式

$$\sigma(\theta,\phi)=|f(\theta,\phi)|^2=\frac{16\pi^4\hbar^2E^2}{c^4}|\langle\varphi_p|\hat{V}|\psi^+_{p_0}\rangle|^2_{p=p_0},$$

其中的第一个等式，是从射出本征态的无限远渐近式和微分散射截面的定义得出的一般公式.

3. 光学定理

微分散射截面 $\sigma(\theta,\phi)$对立体角元 $\mathrm{d}\Omega$ 积分，就给出散射总截面 σ_t，

$$\sigma_t=\int\mathrm{d}\Omega\sigma(\theta,\phi)=\frac{(2\pi\hbar)^3}{v_0}\int\mathrm{d}^3p\,w_p$$

$$=\frac{(2\pi\hbar)^3}{v_0}\frac{\partial}{\partial t}\int\mathrm{d}^3p\,|\langle\varphi_p|\psi_S(t)\rangle|^2$$

$$= \frac{(2\pi\hbar)^3}{v_0}\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_S(t)|\psi_S(t)\rangle.$$

其中

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_S(t)|\psi_S(t)\rangle &= \langle\psi_S(t)|\frac{\partial}{\partial t}|\psi_S(t)\rangle + \text{c.c.}\\ &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle\psi_S(t)|\{\hat{V}|\psi(t)\rangle + \hat{H}_0|\psi_S(t)\rangle\} + \text{c.c.}\\ &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\{\langle\psi(t)| - \langle\psi_0(t)|\}\hat{V}|\psi(t)\rangle + \text{c.c.}\\ &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle\psi_0(t)|\hat{V}|\psi(t)\rangle + \text{c.c.},\end{aligned}$$

其中第二行含 $\hat{H}_0$ 的项和第三行含 $\langle\psi(t)|$ 的项都分别与其复数共轭项抵消了. 于是,当入射波包的动量分布宽度趋于 0 时, $\Delta p_0 \to 0$,取 $t=0$,我们就有

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi_S(t)|\psi_S(t)\rangle \xrightarrow{\Delta p_0 \to 0} -\frac{2}{\hbar}\mathrm{Im}\langle\varphi_{p_0}|\hat{V}|\psi^+_{p_0}\rangle = \frac{c^2}{2\pi^2\hbar^2 E}\mathrm{Im}f(0),$$

从而得到总散射截面

$$\sigma_t = \frac{(2\pi\hbar)^3}{v_0}\frac{c^3}{2\pi^2\hbar^2 E}\mathrm{Im}f(0) = \frac{4\pi\hbar}{p_0}\mathrm{Im}f(0),$$

其中 $f(0)$ 为 $\boldsymbol{p}\parallel\boldsymbol{p}_0$ 时的向前弹性散射振幅. 上述结果称为光学定理,**它表明散射总截面与向前弹性散射振幅的虚部成正比,与入射动量成反比.**

§ 6.3 S 矩 阵

1. 相互作用绘景中的时间发展算符

相互作用绘景 前面的讨论是在 Schrödinger 绘景中进行的,现在我们换到相互作用绘景(见第一章 § 1.4). 不同的绘景,相当于不同类型的表象,给出的物理结果相同. 我们把系统在

Schrödinger 绘景中的 Hamilton 算符写成

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

并且假设它不显含时间 t. 从 Schrödinger 绘景到相互作用绘景的幺正变换是

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi_1(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}|\psi(t)\rangle,$$

$$\hat{A} \rightarrow \hat{A}_1 = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}.$$

在相互作用绘景中，态矢量 $|\psi_1(t)\rangle$ 和观测量算符 $\hat{A}_1$ 随时间变化的运动方程分别是

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_1(t)\rangle = \hat{V}_1|\psi_1(t)\rangle,$$

$$\frac{d\hat{A}_1}{dt} = \frac{\partial\hat{A}_1}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_1, \hat{H}_0],$$

其中 $\hat{V}_1$ 是在相互作用绘景中的相互作用算符，

$$\hat{V}_1 = \hat{V}_1(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{V}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}.$$

在第一章 § 1.4 中我们已经指出，在相互作用绘景中，观测量算符的变化由无相互作用的 Hamilton 算符 $\hat{H}_0$ 支配，而态矢量的变化由相互作用项 $\hat{V}_1(t)$ 支配. 在没有相互作用时，态矢量不随时间变化. 在没有相互作用时的态矢量已经知道的情况下，就可以用相互作用绘景来求由于相互作用引起的态矢量随时间的变化. 所以，相互作用绘景是用来处理散射问题的一个恰当的绘景.

时间发展算符　在相互作用绘景中的时间发展算符 $\hat{U}(t,t_0)$ 可以定义为

$$|\psi_1(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi_1(t_0)\rangle.$$

显然，它满足下列性质：

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

$$\hat{U}(t,t_1)\hat{U}(t_1,t_0) = \hat{U}(t,t_0).$$

此外，容易证明它是幺正的，

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

把$|\psi_1(t)\rangle=\hat{U}(t,t_0)|\psi_1(t_0)\rangle$代入态矢量的运动方程，可以得到关于$\hat{U}(t,t_0)$的方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0)=\hat{V}_1(t)\hat{U}(t,t_0),$$

它的积分形式为

$$\hat{U}(t,t_0)=1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\hat{V}_1(t')\hat{U}(t',t_0).$$

由它的厄米共轭和$\hat{U}(t,t_0)$的幺正性，还有

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t_0,t)=\hat{U}(t_0,t)\hat{V}_1(t),$$

$$\hat{U}(t,t_0)=1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\hat{U}(t,t')\hat{V}_1(t').$$

$\hat{U}$ 的形式表达式及与 Møller 算符的关系 用迭代法求解上述关于时间发展算符的积分方程，就可以得到$\hat{U}(t,t_0)$的具体表达式，它是关于$\hat{V}_1(t)$的一个级数．如果只限于形式上的讨论，则我们可以把 Schrödinger 绘景中的时间发展算符$\exp\{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar\}$变换到相互作用绘景，在形式上写出

$$\hat{U}(t,t_0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}(t-t_0)/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0t_0/\hbar}. \tag{11}$$

可以看出，当$t=0$时，上式给出本章§6.1中的$\hat{U}(0,t_0)$，而当$t=0$和$t_0\to\mp\infty$时，上式给出本章§6.1中的 Møller 算符，

$$\hat{U}(0,\mp\infty)=\lim_{t_0\to\mp\infty}\hat{U}(0,t_0).$$

2. S 矩阵的定义

散射算符 我们可以用下述散射算符来描述散射过程：

$$\hat{S}\equiv\hat{U}(\infty,-\infty)=\lim_{\substack{t\to\infty\\ t_0\to-\infty}}\hat{U}(t,t_0).$$

这样定义的散射算符，可以用 Møller 波算符表示为

$$\hat{S}=\hat{U}(\infty,0)\hat{U}(0,-\infty)=\hat{U}^{\dagger}(0,\infty)\hat{U}(0,-\infty).$$

在相互作用绘景中，态矢量随时间的变化受相互作用支配，时间发

展算符 $\hat{U}(t,t_0)$ 描述系统的态在 t_0 到 t 这一段时间内在相互作用下的发展变化，散射算符 $\hat{S}=\hat{U}(\infty,-\infty)$ 描述系统的态从入射时 $t_0\to-\infty$ 到出射时 $t\to\infty$ 的时间内在相互作用下的发展变化. 所以，散射算符包含了系统从入射初态到出射末态的散射过程全部可观测的实际信息. 散射问题的研究，也就是散射算符的研究.

S 矩阵 我们来求散射算符在散射初态与末态之间的矩阵元. 相互作用绘景中的初态 $|\psi_1(t_0)\rangle$，在 $t_0\to-\infty$ 时就等于 Schrödinger 绘景中无相互作用自由粒子系统 $t=0$ 时的态 $|\psi_0(0)\rangle$，

$$|\psi_1(t_0)\rangle=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0t_0/\hbar}|\psi(t_0)\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0(0-t_0)/\hbar}|\psi(t_0)\rangle$$

$$\xrightarrow{t_0\to-\infty}|\psi_0(0)\rangle.$$

在波包的动量宽度趋于 0 时，$\Delta p\to0$，上式趋于动量本征态，

$$|\psi_1(t_0)\rangle\xrightarrow{t_0\to-\infty}|\varphi_p\rangle.$$

所以，在相互作用绘景中求散射算符在散射初态与末态之间的矩阵元，也就是求散射算符在动量表象中的矩阵元 $\langle\varphi_p|\hat{S}|\varphi_{p_0}\rangle$. 由于 $\hat{S}=\hat{U}^\dagger(0,\infty)\hat{U}(0,-\infty)$，而 $\hat{U}(0,\mp\infty)|\varphi_p\rangle=|\psi_p^\pm\rangle$，于是我们得到

$$\langle\varphi_p|\hat{S}|\varphi_{p_0}\rangle=\langle\varphi_p|\hat{U}^\dagger(0,\infty)\hat{U}(0,-\infty)|\varphi_{p_0}\rangle=\langle\psi_p^-|\psi_{p_0}^+\rangle. \tag{12}$$

散射算符在动量表象的矩阵元，等于在射入本征态上测到射出本征态的概率幅. 反之，在射入本征态上测到射出本征态的概率幅，等于散射算符在动量表象的矩阵元. 由于这个关系，我们在习惯上把散射算符称为**散射矩阵**，简称 **S 矩阵**.

根据(12)式，只要求出了 S 矩阵，就可以从它的矩阵元算出散射问题全部可观测的结果. 而在前面我们已经指出，用迭代法求解关于时间发展算符的积分方程，可以得到 $\hat{U}(t,t_0)$ 依赖于 $\hat{V}_1(t)$ 的一个级数表达式. 对 $\hat{U}(t,t_0)$ 取 $t_0\to-\infty$ 和 $t\to\infty$ 的极限，就可以得到 S 矩阵依赖于 $\hat{V}_1(t)$ 的一个级数表达式. 于是，在相互作用

$\hat{V}_1(t)$可以当作微扰，这个级数收敛的情况下，我们就可以求出 S 矩阵，从而获得散射问题的解.

3. S 矩阵的性质

变换性质 首先，如果系统具有转动不变性，Hamilton 算符 $\hat{H}$ 在空间转动下不变，则 S 矩阵具有转动不变性. 其次，如果系统具有时间反演不变性，$\hat{H}$ 与时间反演算符对易，$[\hat{T},\hat{H}]=0$，则有

$$\hat{T}\hat{S} = \hat{T}\hat{U}(\infty,0)\hat{U}(0,-\infty) = \hat{U}(-\infty,0)\hat{U}(0,\infty)\hat{T},$$

于是有

$$\hat{T}\hat{S}\hat{T}^{-1} = \hat{S}^{\dagger}. \tag{13}$$

我们再来证明，S 矩阵与 $\hat{H}_0$ 对易，$[\hat{H}_0,\hat{S}]=0$. 前面我们已经证明了(6)式，由它还有

$$\hat{H}_0\hat{U}(\pm\infty,0) = \hat{U}(\pm\infty,0)\hat{H}.$$

于是我们有

$$\begin{aligned}\hat{H}_0\hat{S} &= \hat{H}_0\hat{U}(\infty,0)\hat{U}(0,-\infty) = \hat{U}(\infty,0)\hat{H}\hat{U}(0,-\infty)\\ &= \hat{U}(\infty,0)\hat{U}(0,-\infty)\hat{H}_0.\end{aligned}$$

最后，我们来证明 S 矩阵是幺正的. 利用前面 §6.2 中给出的

$$\hat{U}^{\dagger}(0,\pm\infty)\hat{U}(0,\pm\infty) = 1$$

和

$$\hat{U}(0,-\infty)\hat{U}^{\dagger}(0,-\infty) = \hat{U}(0,\infty)\hat{U}^{\dagger}(0,\infty),$$

我们就得到

$$\begin{aligned}\hat{S}^{\dagger}\hat{S} &= \hat{U}(-\infty,0)\hat{U}(0,\infty)\hat{U}(\infty,0)\hat{U}(0,-\infty)\\ &= \hat{U}(-\infty,0)\hat{U}(0,-\infty)\hat{U}(-\infty,0)\hat{U}(0,-\infty) = 1,\\ \hat{S}\hat{S}^{\dagger} &= \hat{U}(\infty,0)\hat{U}(0,-\infty)\hat{U}(-\infty,0)\hat{U}(0,\infty)\\ &= \hat{U}(\infty,0)\hat{U}(0,\infty)\hat{U}(\infty,0)\hat{U}(0,\infty) = 1.\end{aligned}$$

所以，虽然 Møller 算符不是幺正的，但是由两个 Møller 算符相乘得到的 S 矩阵却是幺正的.

S 矩阵元与散射振幅的关系 经过一些简单的代数运算，可

以把 Lippmann-Schwinger 方程(9)改写成

$$|\psi_p^+(\epsilon)\rangle = |\varphi_p\rangle + \frac{1}{E_p - \hat{H} + \mathrm{i}\epsilon}\hat{V}|\varphi_p\rangle.$$

类似地，可以写出

$$|\psi_p^-(\epsilon)\rangle = |\varphi_p\rangle + \frac{1}{E_p - \hat{H} - \mathrm{i}\epsilon}\hat{V}|\varphi_p\rangle.$$

于是，我们有

$$\begin{aligned}|\psi_p^-(\epsilon)\rangle &= |\psi_p^+(\epsilon)\rangle + \{|\psi_p^-(\epsilon)\rangle - |\psi_p^+(\epsilon)\rangle\}\\ &= |\psi_p^+(\epsilon)\rangle + \left(\frac{1}{E_p - \hat{H} - \mathrm{i}\epsilon} - \frac{1}{E_p - \hat{H} + \mathrm{i}\epsilon}\right)\hat{V}|\varphi_p\rangle\\ &= |\psi_p^+(\epsilon)\rangle + \mathrm{i}2\pi\delta(E_p - \hat{H})\hat{V}|\varphi_p\rangle,\end{aligned}$$

其中用到了公式(8). 于是我们可以算出

$$\begin{aligned}\langle\varphi_p|\hat{S}|\varphi_{p_0}\rangle &= \langle\psi_p^-|\psi_{p_0}^+\rangle\\ &= \langle\psi_p^+|\psi_{p_0}^+\rangle - \mathrm{i}2\pi\langle\varphi_p|\hat{V}\delta(E_p - \hat{H})|\psi_{p_0}^+\rangle\\ &= \langle\varphi_p|\varphi_{p_0}\rangle - \mathrm{i}2\pi\delta(E_p - E_{p_0})\langle\varphi_p|\hat{V}|\psi_{p_0}^+\rangle.\end{aligned}$$

从而有

$$\langle\varphi_p|\hat{S} - 1|\varphi_{p_0}\rangle = -\mathrm{i}2\pi\delta(E_p - E_{p_0})\langle\varphi_p|\hat{V}|\psi_{p_0}^+\rangle.$$

类似地还可以得到

$$\langle\varphi_p|\hat{S} - 1|\varphi_{p_0}\rangle = -\mathrm{i}2\pi\delta(E_p - E_{p_0})\langle\psi_p^-|\hat{V}|\varphi_{p_0}\rangle.$$

代入(10)式，最后得到

$$\langle\varphi_p|\hat{S} - 1|\varphi_{p_0}\rangle = \mathrm{i}\frac{c^2}{2\pi\hbar E}f(\theta,\phi)\delta(E_p - E_{p_0}), \qquad (14)$$

其中(θ,ϕ)是出射动量 $\boldsymbol{p}$ 相对于入射动量 $\boldsymbol{p}_0$ 的方位角.

互逆定理 从动量算符的时间反演变换 $\hat{T}\hat{\boldsymbol{p}} = -\hat{\boldsymbol{p}}\hat{T}$ 不难看出，动量本征态$|\varphi_p\rangle$的时间反演态为$|\varphi_{-p}\rangle$，

$$|\varphi_{-p}\rangle = \hat{T}|\varphi_p\rangle.$$

于是，用时间反演算符 $\hat{T}$ 作用到方程$|\psi_p^\pm\rangle = \hat{U}(0,\mp\infty)|\varphi_p\rangle$上，就

有

$$\hat{T}|\psi_{p}^{\pm}\rangle = \hat{T}\hat{U}(0, \mp\infty)|\varphi_{p}\rangle = \hat{U}(0, \pm\infty)\hat{T}|\varphi_{p}\rangle$$
$$= \hat{U}(0, \pm\infty)|\varphi_{-p}\rangle = |\psi_{-p}^{\mp}\rangle.$$

再利用 S 矩阵的(12)式和时间反演态的内积关系

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

我们就可以得到

$$\langle\varphi_{p}|\hat{S}|\varphi_{p_0}\rangle = \langle\psi_{p}^{-}|\psi_{p_0}^{+}\rangle = \{\langle\psi_{p_0}^{+}|\hat{T}^{\dagger}\}\cdot\{\hat{T}|\psi_{p}^{-}\rangle\}$$
$$= \langle\psi_{-p_0}^{-}|\psi_{-p}^{+}\rangle = \langle\varphi_{-p_0}|\hat{S}|\varphi_{-p}\rangle.$$

这个结果称为*互逆定理*或*倒易定理*，它表示互逆的两个过程的概率幅相等：

$$f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}_0)|_{p=p_0} = f(-\boldsymbol{p}_0, -\boldsymbol{p})|_{p=p_0},$$

其中写法 $f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}_0)$ 表示散射振幅 f 是 $\boldsymbol{p}$ 相对于 $\boldsymbol{p}_0$ 的方位角的函数. 于是，一个过程有没有时间反演不变性，就可以通过测量这个过程及其逆过程的概率幅来检验(参阅第三章 §3.6).

§6.4 角动量表象中的 S 矩阵

1. 无自旋的情形

角动量表象 我们可以选择$(\hat{H}_0, \hat{l}^2, \hat{l}_z)$的共同本征态组$\{|p,l,m\rangle\}$作为表象的基矢，$p$ 是与 $\hat{H}_0$ 的本征值 $E(p)$相应的自由粒子动量本征值的大小. 我们取正交归一化为

$$\langle mlp|p'l'm'\rangle = \delta(p-p')\delta_{ll'}\delta_{mm'}.$$

在球极坐标表象中，波函数 $\varphi_{plm}(r,\theta,\phi) = \langle r|plm\rangle$ 可以写成分离变量的形式，

$$\varphi_{plm}(r,\theta,\phi) = R(r)\mathrm{Y}_{lm}(\theta,\phi).$$

把它代入(2)式的本征值方程

$$-\hbar^2\nabla^2\varphi_{plm}(r,\theta,\phi) = \frac{E^2 - m^2c^4}{c^2}\varphi_{plm}(r,\theta,\phi),$$

可以得到确定径向波函数 $R(r)$的方程

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r)=0,$$

其中 k 为波矢量的大小，

$$k=\frac{p}{\hbar}=\sqrt{\frac{E^2-m^2c^4}{\hbar^2c^2}}.$$

于是我们得到

$$R(r)=N_l\mathrm{j}_l(kr),$$

$\mathrm{j}_l(x)$是 l 阶球 Bessel 函数，N_l 是归一化常数.

由于散射算符 $\hat{S}$ 与$(\hat{H}_0,\hat{l}^2,\hat{l}_z)$对易，$S$ 矩阵在这个表象中是对角的，

$$\hat{S}|plm\rangle=S_l(p)|plm\rangle.$$

$\hat{S}$ 的本征值 $S_l(p)$与量子数 m 无关，这是由于 $\hat{S}$ 具有空间转动不变性.

表象变换　我们来求从角动量表象$\{|plm\rangle\}$到动量表象$\{|\boldsymbol{p}\rangle\}$的变换. 变换矩阵$\langle\boldsymbol{p}'|plm\rangle$也就是在动量表象中的角动量波函数. 为此，我们利用展开式[①]

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\mathrm{i}^l\mathrm{j}_l(kr)\mathrm{Y}_{lm}^*(\boldsymbol{e}_k)\mathrm{Y}_{lm}(\boldsymbol{e}_r),$$

其中 $\boldsymbol{e}_k$ 与 $\boldsymbol{e}_r$ 分别是 $\boldsymbol{k}$ 与 $\boldsymbol{r}$ 方向的单位矢量. 上式左边正比于$\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{p}\rangle$，这里 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$. 右边求和号中的 $\mathrm{j}_l(kr)\mathrm{Y}_{lm}(\boldsymbol{e}_r)$正比于$\langle\boldsymbol{r}|plm\rangle$. 于是我们可以写出

$$|\boldsymbol{p}\rangle=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}C\mathrm{i}^l\mathrm{Y}_{lm}^*(\boldsymbol{p}/p)|plm\rangle,$$

由它可以给出

$$\langle\boldsymbol{p}|p_0lm\rangle=C'(-\mathrm{i})^l\mathrm{Y}_{lm}(\boldsymbol{p}/p)\delta(p-p_0).$$

利用正交归一化条件

---

① A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton, 1960, p. 81.

$$\langle mlp|p'l'm'\rangle = \int d^3\boldsymbol{p}_0 \langle mlp|\boldsymbol{p}_0\rangle\langle \boldsymbol{p}_0|p'l'm'\rangle$$
$$= \delta(p-p')\delta_{ll'}\delta_{mm'},$$

可以定出

$$C = \frac{1}{p}.$$

散射振幅与 $S_l(p)$ 的关系 利用上述变换矩阵 $\langle \boldsymbol{p}|p_0lm\rangle$，由(14)式可以得到

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}_0)|_{p=p_0} &= -\frac{\mathrm{i}2\pi\hbar E}{c^2}\int dE_p \langle \varphi_p|\hat{S}-1|\varphi_{p_0}\rangle \\ &= -\frac{\mathrm{i}2\pi\hbar E}{c^2}\int dE_p \\ &\quad \cdot \sum_{l,m}\int dp' \langle \varphi_p|\hat{S}-1|p'lm\rangle\langle mlp'|\varphi_{p_0}\rangle \\ &= -\frac{\mathrm{i}2\pi\hbar}{p}\sum_{l,m}[S_l(p)-1]\mathrm{Y}_{lm}(\boldsymbol{p}/p)\mathrm{Y}^*_{lm}(\boldsymbol{p}_0/p_0) \\ &= -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2p}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[S_l(p)-1]\mathrm{P}_l(\cos\theta), \end{aligned} \quad (15)$$

其中 θ 是 $\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{p}_0$ 之间的夹角. 上面最后一个等号用到了球谐函数的加法定理：

$$\sum_{m=-l}^{l}\mathrm{Y}_{lm}(\boldsymbol{p}/p)\mathrm{Y}^*_{lm}(\boldsymbol{p}_0/p_0) = \frac{2l+1}{4\pi}\mathrm{P}_l(\cos\theta).$$

相移与 $S_l(p)$ 的关系 取 z 轴在入射动量 $\boldsymbol{p}_0$ 方向，在射出本征态 $\psi^+_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{r})$ 的渐近式

$$\psi^+_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\left[e^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} + f(\theta)\frac{e^{\mathrm{i}kr}}{r}\right]$$

中代入上述 $f(\theta)$ 的公式(15)，以及平面波的下述展开式

$$e^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} = e^{\mathrm{i}kr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\mathrm{j}_l(kr)\mathrm{P}_l(\cos\theta),$$

和其中球 Bessel 函数 $\mathrm{j}_l(kr)$ 的渐近式

$$\mathrm{j}_l(kr) \xrightarrow{kr\to\infty} \frac{1}{\mathrm{i}2kr}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\pi/2)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\pi/2)}\right],$$

我们可以得到

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l \cdot \frac{1}{\mathrm{i}2kr}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\pi/2)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\pi/2)}\right]\mathrm{P}_l(\cos\theta),$$

$$\psi^+_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{r}) \xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l \cdot \frac{1}{\mathrm{i}2kr}\left[S_l(p)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-l\pi/2)} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(kr-l\pi/2)}\right]\mathrm{P}_l(\cos\theta).$$

比较上述二式可以看出，如果把 S 矩阵元 $S_l(p)$ 写成

$$S_l(p) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\delta_l(p)},$$

则 $\delta_l(p)$ 表示因为散射引起的 l 分波的相移. 由 $\hat{S}$ 的幺正性，保证了相移 $\delta_l(p)$ 是实数. 相移 $\delta_l(p)$ 的大小是由引起散射的相互作用 $\hat{V}$ 确定的. 无相互作用时，由(11)式可以看出 $\hat{S}=1$，从而 $S_l(p)=1$，$\delta_l(p)=0$，没有相移. 从(15)式可以看出，当 $S_l(p)=1$ 时，$f(\theta)=0$，没有散射，射出本征态成为平面波. 矩阵元 $S_l(p)$ 异于 1 的程度取决于相互作用 $\hat{V}$ 的大小. 对于短程势，$l\leqslant l_{\max}$，而 $l_{\max}$ 依赖于入射能量 E_p. 低能时，$l_{\max}$ 很小，只有很低的分波有贡献.

2. 有自旋的情形

角动量表象　对于有自旋的情形，如果相互作用 $\hat{V}$ 与粒子自旋无关，系统的轨道角动量和自旋角动量分别守恒，上一小节的结果仍然适用. 当相互作用 $\hat{V}$ 与粒子自旋有关时，一般地说系统的轨道角动量和自旋角动量不再守恒，需要考虑由它们耦合成的总角动量. 如果系统具有球对称性，在空间转动下不变，则系统的总角动量 $\hat{J}$ 及其投影 $\hat{J}_z$ 是守恒量，可以用 $(\hat{H}_0,\hat{J}^2,\hat{J}_z)$ 的共同本征态组 $\{|p,j,m\rangle\}$ 做表象的基矢，注意这里 m 是 $\hat{J}_z$ 的量子数，不是上一小节的 $\hat{L}_z$ 的量子数.

设系统的轨道角动量量子数为(l,m_l)，入射粒子与靶粒子的总自旋角动量量子数为(s,m_s). 注意这里的 m_l 是上一小节的 m. 我们可以用$(\hat{H}_0,\hat{l}^2,\hat{l}_z,\hat{s}^2,\hat{s}_z)$的共同本征态$|plm_lsm_s\rangle$耦合成$(\hat{H}_0,\hat{l}^2,\hat{s}^2,\hat{J}^2,\hat{J}_z)$的共同本征态$|plsjm\rangle$,

$$|plsjm\rangle = \sum_{m_l,m_s} |plm_lsm_s\rangle(m_sm_l|lsjm\rangle,$$

其中$(m_sm_l|lsjm\rangle=\langle m_ssm_llp|plsjm\rangle$为 C-G 系数. 取归一化为

$$\langle mjslp|p'l's'j'm'\rangle = \delta(p-p')\delta_{ll'}\delta_{ss'}\delta_{jj'}\delta_{mm'}.$$

由于 $\hat{S}$ 只与$(\hat{H}_0,\hat{J}^2,\hat{J}_z)$对易，一般不与 $\hat{l}$ 和 $\hat{s}$ 对易，S 矩阵可以写成

$$\langle mjslp|\hat{S}|p_0l_0s_0j_0m_0\rangle = S^j_{ls,l_0s_0}(p)\delta(p-p_0)\delta_{jj_0}\delta_{mm_0},$$

亦即 $\hat{S}$ 只作用于(p,j,m)一定的子空间(l,s). 注意上述写法包括了 $\hat{V}$ 是非中心力的情形，这时 $\hat{l}$ 不守恒，l 不是对角指标，可以有 $l\neq l_0$ 的矩阵元 $S^j_{ls,l_0s_0}(p)$. 如果系统的 $\hat{H}$ 有空间反射不变性，字称守恒，则只有 $\Delta l=l-l_0=$偶数时，矩阵元 $S^j_{ls,l_0s_0}(p)$才不为 0.

散射振幅与 $S^j_{ls,l_0s_0}(p)$的关系 考虑自旋后，可以得到与(14)类似的

$$\langle m_ssp|\hat{S}-1|p_0s_0m_{s_0}\rangle = \mathrm{i}\frac{c^2}{2\pi\hbar E}f_{m_ss,s_0m_{s_0}}(\theta,\phi)\delta(E_p-E_{p_0}),$$

其中

$$f_{sm_s,s_0m_{s_0}}(\theta,\phi) = -\frac{4\pi^2\hbar E}{c^2}\langle m_ssp|\hat{V}|\psi^+_{p_0s_0m_{s_0}}\rangle.$$

用从$|plsjm\rangle$到$|psm_s\rangle$的表象变换

$$\begin{aligned}|psm_s\rangle &= \frac{1}{p}\sum_{l,m_l}\mathrm{i}^l\mathrm{Y}^*_{lm_l}(\boldsymbol{p}/p)|plm_lsm_s\rangle \\ &= \frac{1}{p}\sum_{l,m_l}\sum_{j,m}\mathrm{i}^l\mathrm{Y}^*_{lm_l}(\boldsymbol{p}/p)\langle mjsl|m_lm_s\rangle|plsjm\rangle,\end{aligned}$$

取 z 轴在入射动量 $\boldsymbol{p}_0$ 方向，与无自旋的情形类似地可以得到

$$f_{sm_s,s_0m_{s_0}}(\theta,\phi) = -\frac{\mathrm{i}\sqrt{\pi}\,\hbar}{p}\sum_{j,m,l_0,l,m_l}\mathrm{i}^{l_0-l}\sqrt{2l_0+1}\,(m_sm_l|lsjm\rangle$$

$$\langle mjs_0l_0|0m_{s_0}\rangle[S^j_{ls,l_0s_0}(p)-\delta_{ll_0}\delta_{ss_0}]Y_{lm_l}(\theta,\phi). \tag{16}$$

射出本征态 $\psi^+_{p_0s_0m_{s_0}}(r)$的渐近式可以写成

$$\psi^+_{p_0s_0m_{s_0}}(r)\xrightarrow{r\to\infty}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\left[e^{ip_0\cdot r/\hbar}\chi_{s_0m_{s_0}}+\sum_{s,m_s}f_{m_s s,s_0m_{s_0}}(\theta,\phi)\chi_{sm_s}\frac{e^{ikr}}{r}\right],$$

其中 χ_{sm_s}是在自旋表象的自旋波函数. 与无自旋的情形类似地，把上述散射振幅的表达式(16)代入上式，就可以讨论 S 矩阵元 $S^j_{ls,l_0s_0}(p)$对于$(lsjm)$分波中球面散射波的影响，我们这里就不具体写出.

第七章　全同粒子体系

§7.1　Фок 空间

1. 一般性讨论

全同粒子体系　我们在本章讨论由大量全同粒子组成的系统，简称全同粒子体系. 我们可以按照通常量子力学处理多粒子体系的做法，先考虑全同粒子体系中每个粒子的自由度，系统的态矢量依赖于每个粒子的所有独立相容观测量. 然后，再考虑全同粒子体系的交换对称性. 由于粒子不可分辨，我们要对系统的态矢量附加上完全对称化或完全反对称化的限制，从所得到的各种态矢量中组合出符合完全对称化或完全反对称化的来，就像我们在第三章§3.7 中讨论过的那样.

这种做法，相当于先考虑一个维数大得多的态矢量空间，然后再从中选择具有完全对称性或完全反对称性的子空间. 在粒子数 N 不太大时，这样做并不困难，比如两个全同粒子的散射，原子中的电子体系，等等. 但是，如果粒子数 N 很大，比如金属中的电子体系，这样做就很不方便，甚至不现实. 对于这种情况，我们应当在考虑全同粒子交换对称性的基础上，一开始就把讨论限制在满足这种对称性的子空间. 这就是本节要讨论的 Фок 空间，又称粒子数空间. 对于粒子总数 N 一定的情形，粒子数空间与上述做法的结果相同. 不过，粒子数空间不受粒子数多少的限制，而且，不仅能处理粒子数确定的情形，还可以运用于粒子数可变的情形.

为了得到粒子数空间，可以采取不同的做法. 可以先考虑每个

粒子的自由度，然后再给态矢量加上完全对称化或完全反对称化的限制，最后得到只依赖于粒子数而与个别粒子自由度无关的粒子数空间. 也可以直接在单粒子态的基础上来建立粒子数空间. 我们将采取后一种做法. 在进入具体理论形式的讨论之前，我们先从物理上一般地分析一下全同粒子体系的特点.

全同粒子体系的特点 作为多粒子系统，全同粒子体系是一个多自由度系统，具有比单粒子系统要多得多的物理观测量. 与一般多粒子系统不同的是，全同粒子体系具有交换任意两个粒子的不变性，全同粒子是不可分辨的. 我们不可能分辨是哪个粒子的坐标，是哪个粒子的动量，或者是哪个粒子的自旋，是哪个粒子的能量. 所以，*个别粒子的自由度并不是独立的物理观测量，全同粒子体系的物理观测量反映了全同粒子体系的集体性质和全同粒子之间的关联*. 这是全同粒子体系不同于一般多粒子系统的第一个特点.

另一方面，在一个单粒子态上的全同粒子数是全同粒子体系的物理观测量. 实验能够测量在空间某一区域有几个全同粒子，或者动量在某一范围的全同粒子数有多少，自旋投影等于某一值的全同粒子数有多少，处于某一单粒子能级的全同粒子有多少，等等. *粒子数是物理观测量*，这是全同粒子体系不同于一般多粒子系统的第二个特点.

一般地说，一个系统的自由度数，也就是系统的独立相容观测量数. 例如一个无自旋粒子有 3 个自由度，这个系统的独立相容观测量有 3 个，它们可以是粒子的空间坐标$(\hat{x},\hat{y},\hat{z})$，或者是粒子的动量$(\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z)$，也可以是粒子的能量与轨道角动量大小及其投影$(\hat{H},\hat{l}^2,\hat{l}_z)$，等等. 对于一个有自旋的粒子，则有 4 个自由度，除了上述 3 个自由度以外，还要加上粒子自旋，系统的独立相容观测量有 4 个，除了上述相容观测量外，还要加上粒子自旋的投影 $\hat{s}_z$.

对于多粒子系统，它的自由度数一般等于每个粒子的自由度数之和，系统的独立相容观测量数等于系统的总自由度数. 全同粒

子体系不同. 全同粒子体系的独立相容观测量数,取决于实验测量所选择的单粒子态的性质. 如果我们选取坐标本征态作为单粒子态,则在空间每一点的全同粒子数都是独立的相容观测量,系统的独立相容观测量数是无限大. 如果我们选取单粒子的束缚态能级作为单粒子态,系统的独立相容观测量数等于单粒子束缚态能级数,它就可能是一个有限和确定的数. *全同粒子体系的独立相容观测量数一般都大于它的自由度数,甚至可能是无限大.* 这是全同粒子体系不同于一般多粒子系统的第三个特点.

最后,多粒子系统的粒子数一般都是给定的模型参数,它在理论中是固定不变的. 全同粒子体系不同. 如果用一般多粒子量子力学的理论方法来处理全同粒子体系,只是对系统的态矢量加上完全对称化或完全反对称化的约束,则粒子数也是给定的模型参数,在理论中是固定不变的. 但是,如果用本节将要讨论的粒子数空间来处理全同粒子体系,则*全同粒子体系的总粒子数在理论中不是由模型给定的参数,而是作为一个观测量的本征值,并不必须是固定不变的.* 为了使系统的态具有确定的粒子数,我们需要把总粒子数具有确定本征值这一点作为一个附加约束条件加给系统的态矢量. 这是全同粒子体系不同于一般多粒子系统的第四个特点.

鉴于上述特点,全同粒子体系的量子力学具有一些不同于一般多自由度系统量子力学的性质. 特别是由于上述第三和第四个特点,全同粒子体系的量子力学更接近于具有无限自由度的场的量子力学,亦即量子场论. 我们将在本章最后一节来讨论这个问题.

全同粒子体系的 Hamilton 算符和单粒子态 我们可以把全同粒子体系的模型 Hamilton 算符写成

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}(i) + \sum_{i>j=1}^{N} \hat{v}(i,j). \tag{1}$$

其中

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} \hat{h}(i), \tag{2}$$

$$\hat{V} = \sum_{i>j=1}^{N} \hat{v}(i,j). \tag{3}$$

$\hat{h}(i)$是单粒子 Hamilton 算符，只依赖于第 i 个粒子的物理量，其形式对于所有的粒子都相同. $\hat{v}(i,j)$是两体相互作用能，描述第 i 个粒子与第 j 个粒子之间的相互作用，只依赖于这两个粒子的量，与其他粒子无关，其形式对于所有的粒子对都相同，在粒子指标 i 与 j 的交换下不变，

$$\hat{v}(i,j) = \hat{v}(j,i).$$

N 是总粒子数. 在原则上，对于包含多体相互作用的模型也可以同样地处理. 这只增加麻烦. 为了阐明基本的原理和方法，我们在这里只考虑有两体相互作用的模型. 显然，这个模型 Hamilton 算符对于交换任意两个粒子的指标是不变的，满足粒子全同性原理的要求.

对于没有相互作用的系统，$\hat{V}=0$，Hamilton 算符成为(2)式的 $\hat{H}_0$. 考虑单粒子 Hamilton 算符 $\hat{h}$ 的本征态$|\varphi_n\rangle$，

$$\hat{h}|\varphi_n\rangle = \epsilon_n|\varphi_n\rangle,$$

其中 n 是标志单粒子态的指标，ϵ_n 是这个单粒子态的能量本征值. 显然，由于粒子之间没有相互作用，N 个粒子在这组单粒子态$\{|\varphi_n\rangle\}$中的一个分布$\{N_n\}$，给出全同粒子体系的一个能量本征态$|\psi\rangle$，而这些单粒子能量本征值之和给出这个能量本征态的本征值 E，

$$\hat{H}_0|\psi\rangle = E|\psi\rangle,$$

$$|\psi\rangle = |N_1 N_2 \cdots\rangle,$$

$$E = \sum_n N_n \epsilon_n,$$

其中 N_n 是在单粒子态$|\varphi_n\rangle$上的粒子数. 我们有

$$N = \sum_n N_n,$$

分布在各个单粒子态上的粒子数之和，应等于体系的总粒子数.

2. 粒子数空间

空间的基矢 我们只是为了有一个具体的图像，才考虑单粒子 Hamilton 算符的本征态组$\{|\varphi_n\rangle\}$. 其实，在原则上，任何一个单粒子态的完备组都可以用来构造全同粒子体系的态矢量空间，不必限制于单粒子 Hamilton 算符的本征态组. 所以，我们以下的讨论，除非特别指出，都不限制$\{|\varphi_n\rangle\}$为单粒子 Hamilton 算符的本征态组，只一般地假设它是单粒子态的一个正交归一化完备组，

$$\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \delta_{mn}.$$

全同粒子在这组单粒子态中的一个分布，给出了全同粒子体系的一个本征态$|N_1N_2\cdots\rangle$，它用粒子在单粒子态$\{|\varphi_n\rangle\}$中分布的数组$\{N_n\}$来标志. 这个全同粒子体系的本征态组$\{|N_1N_2\cdots\rangle\}$可以用来作为态矢量空间的基矢. 本征值 N_n 对于 Bose 子可以是 0 和正整数，

$$N_n = 0,1,2,\cdots,$$

对于 Fermi 子只能取 0 或 1，

$$N_n = 0,1,$$

而体系的总粒子数

$$N = \sum_n N_n. \tag{4}$$

$N=0$ 的态称为全同粒子体系的真空态，记为

$$|0\rangle = |000\cdots\rangle.$$

$N=1$ 的态称为体系的单粒子态，例如

$$|100\cdots\rangle, |010\cdots\rangle, |001\cdots\rangle, \cdots.$$

$N=2$ 的态称为体系的双粒子态，对于 Bose 子体系有

$$|110\cdots\rangle, |200\cdots\rangle, |101\cdots\rangle, \cdots,$$

对于 Fermi 子体系有

$$|110\cdots\rangle, |101\cdots\rangle, |011\cdots\rangle, \cdots,$$

等等.

根据第一章§1.3中的讨论,本征态组$\{|N_1N_2\cdots\rangle\}$具有正交归一化关系

$$\langle\cdots N_2'N_1'|N_1N_2\cdots\rangle=\delta_{N_1N_1'}\delta_{N_2N_2'}\cdots,$$

和完备性

$$\sum_{\{N_n\}}|N_1N_2\cdots\rangle\langle\cdots N_2N_1|=1,$$

可以用作态矢量空间的表象的基矢.全同粒子体系的态矢量$|\psi\rangle$可以用这组基矢展开成

$$|\psi\rangle=\sum_{\{N_n\}}\psi(N_1N_2\cdots)|N_1N_2\cdots\rangle,$$

其中

$$\psi(N_1N_2\cdots)=\langle\cdots N_2N_1|\psi\rangle$$

就是全同粒子体系的态在这个表象中的波函数.

本征态组$\{|N_1N_2\cdots\rangle\}$所张的空间,称为Фок空间或粒子数空间,它所给出的的表象则称为Фок表象或粒子数表象.粒子数空间或粒子数表象是在理论上系统地处理全同粒子体系的一个恰当的出发点.

如果体系的总粒子数N是给定的,则对本征值$\{N_n\}$有限制(4)式.这时,我们只用到整个粒子数空间中具有确定粒子数N的一个子空间.而粒子数空间本身,则是包含了各种粒子数的无限维空间.相应地,粒子数表象是一个无限维表象.

像任何量子力学问题一样,我们既可以在态矢量空间中讨论,也可以在一个表象中讨论.现在的情形,我们既可以在粒子数空间中讨论,也可以在粒子数表象中讨论.我们的讨论将在粒子数空间中进行,只涉及基矢$|N_1N_2\cdots\rangle$及态矢量$|\psi\rangle$,而不涉及波函数$\psi(N_1N_2\cdots)$.

粒子数算符$\hat{N}_n$ 我们在第一章§1.3中曾经给出一个普遍公式:如果$\{|l_n\rangle\}$是某一实验测量的本征态的正交归一化完备组,

l_n 是可以由测量确定的标志这个本征态的指标，则这个完备组对应于一个观测量，它的算符 $\hat{L}$ 可以表示成

$$\hat{L}=\sum_n |l_n\rangle l_n\langle l_n|.$$

我们现在来考虑全同粒子体系的本征态组 $\{|N_1N_2\cdots\rangle\}$，标志本征态的指标是粒子在单粒子态 $\{|\varphi_n\rangle\}$ 中分布的数组 $\{N_n\}$. 运用这个公式，我们就可以把在单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上测到的粒子数算符 $\hat{N}_n$ 写成

$$\hat{N}_n=\sum_{\{N_m\}} N_n|N_1N_2\cdots N_n\cdots\rangle\langle\cdots N_n\cdots N_2N_1|.$$

它有本征值方程

$$\hat{N}_n|N_1N_2\cdots N_n\cdots\rangle=N_n|N_1N_2\cdots N_n\cdots\rangle.$$

此外，由于本征值 N_n 是实数，所以 $\hat{N}_n$ 是厄米算符，

$$\hat{N}_n^\dagger=\hat{N}_n.$$

不同单粒子态上的粒子数算符互相对易，

$$[\hat{N}_m,\hat{N}_n]=0.$$

不同单粒子态上的粒子数算符，是全同粒子体系的独立的相容观测量，相当于全同粒子体系的不同的自由度.

这样引入的观测量组 $\{\hat{N}_n\}$，构成了全同粒子体系的一个观测量完全集，它定义于一定的单粒子本征态组. 对于不同的单粒子本征态组，我们有全同粒子体系的不同的观测量完全集，粒子数空间具有不同的物理含义. *在这个意义上，粒子数空间本身就是一种表象.*

产生和消灭算符 可以看出，在粒子数空间中，全同粒子体系的态的变化，表现为粒子在不同单粒子态之间的*转移或跃迁*. 粒子从一个单粒子初态 $|\varphi_m\rangle$ 转移或跃迁到另一个单粒子末态 $|\varphi_n\rangle$，相当于在初态消灭一个粒子而在末态产生一个粒子. 所以，为了描写粒子在不同单粒子态之间的这种转移或跃迁，我们还需要引入描写粒子在一个单粒子态上产生和消灭的算符. 对于 Bose 子体系和 Fermi 子体系，态矢量 $|N_1N_2\cdots\rangle$ 的性质不同，相应的产生和消灭

算符的性质和形式也就不同. 下面我们就分别进行讨论.

§7.2 Bose 子体系

1. Bose 子体系的产生和消灭算符

定义 由于 Bose 子体系中处于一个单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上的粒子数可以是 0 和任意正整数，$N_n=0,1,2,\cdots$，Bose 子体系的粒子数空间在数学结构上与第二章 §2.4 讨论的居位数表象的空间完全一样，粒子数空间中的粒子数算符相当于居位数表象空间中的居位数算符，粒子数空间中的产生和消灭算符相当于居位数表象空间中的升位和降位算符. 于是，仿照着居位数表象空间中的升位和降位算符，我们可以定义粒子数空间中在单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上的产生算符 $\hat{a}_n^\dagger$ 和消灭算符 $\hat{a}_n$ 分别为

$$\hat{a}_n^\dagger = \sum_{\{N_m\}} \sqrt{N_n+1}\,|N_1N_2\cdots(N_n+1)\cdots\rangle\langle\cdots N_n\cdots N_2N_1|,$$

$$\hat{a}_n = \sum_{\{N_m\}} \sqrt{N_n}\,|N_1N_2\cdots(N_n-1)\cdots\rangle\langle\cdots N_n\cdots N_2N_1|,$$

不难看出，它们是互为厄米共轭的. 用它们作用到基矢 $|N_1\cdots N_n\cdots\rangle$，有

$$\begin{aligned}\hat{a}_n^\dagger\,&|N_1\cdots N_n\cdots\rangle\\ &= \sum_{\{N_m'\}} \sqrt{N_n'+1}\,|N_1'\cdots(N_n'+1)\cdots\rangle\langle\cdots N_n'\cdots N_1'|N_1\cdots N_n\cdots\rangle\\ &= \sqrt{N_n+1}\,|N_1\cdots(N_n+1)\cdots\rangle,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{a}_n&|N_1\cdots N_n\cdots\rangle\\ &= \sum_{\{N_m'\}} \sqrt{N_n'}\,|N_1'\cdots(N_n'-1)\cdots\rangle\langle\cdots N_n'\cdots N_1'|N_1\cdots N_n\cdots\rangle\\ &= \sqrt{N_n}\,|N_1\cdots(N_n-1)\cdots\rangle.\end{aligned}$$

用单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上的产生或消灭算符作用于本征态 $|N_1\cdots N_n\cdots\rangle$ 的结果，使这个单粒子态上的粒子数增加或减少 1.

性质 首先，容易证明 $\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n$ 就是粒子数算符 $\hat{N}_n$：

$$\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n=\sum_{\{N_m\}}\sqrt{N_n+1}\,|N_1N_2\cdots(N_n+1)\cdots\rangle\langle\cdots N_n\cdots N_2N_1|$$

$$\cdot\sum_{\{N'_m\}}\sqrt{N'_n}\,|N'_1N'_2\cdots(N'_n-1)\cdots\rangle\langle\cdots N'_n\cdots N'_2N'_1|$$

$$=\sum_{\{N_m\}}N_n|N_1N_2\cdots N_n\cdots\rangle\langle\cdots N_n\cdots N_2N_1|=\hat{N}_n.$$

其次，同样地可以证明产生和消灭算符具有下列基本对易关系：

$$[\hat{a}_m,\hat{a}_n]=0,\quad[\hat{a}_m^\dagger,\hat{a}_n^\dagger]=0,\quad[\hat{a}_m,\hat{a}_n^\dagger]=\delta_{mn}.\tag{5}$$

根据这一组基本对易关系，还可以推出在第二章§2.4中给出的其他对易关系．特别是，可以推出粒子数算符 $\hat{N}_n=\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n$ 的本征值可以是 0 和任意正整数，

$$\hat{N}_n|N_1N_2\cdots N_n\cdots\rangle=N_n|N_1N_2\cdots N_n\cdots\rangle,$$

$$N_n=0,1,2,\cdots.$$

第三，粒子数表象的正交归一化基矢 $|N_1N_2\cdots\rangle$ 可以用产生算符表示为

$$|N_1N_2\cdots\rangle=\frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{N_1}}{\sqrt{N_1!}}\frac{(\hat{a}_2^\dagger)^{N_2}}{\sqrt{N_2!}}\cdots|0\rangle.$$

特别是，只在 $|\varphi_n\rangle$ 态上有一个粒子的单粒子态可以写成

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

可以看出，由于不同单粒子态的算符互相对易，系统的态矢量 $|N_1N_2\cdots\rangle$ 对于任意两个粒子的交换是对称的．例如，对于在两个不同单粒子态 $|\varphi_m\rangle$ 与 $|\varphi_n\rangle$ 上各有 1 个粒子的双粒子态

$$|\varphi_m\varphi_n\rangle=\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_n^\dagger|0\rangle,$$

我们有

$$|\varphi_n\varphi_m\rangle=\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_m^\dagger|0\rangle=\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_n^\dagger|0\rangle=|\varphi_m\varphi_n\rangle.$$

产生和消灭算符的对易关系(5)自动地保证了上述用产生算符表示的态矢量具有 Bose 子体系的性质：粒子数算符 $\hat{N}_n=\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n$ 的本征值可以是 0 和任意正整数，在一个单粒子态上能够填充的粒子数不受任何限制；体系的态矢量对于任意两个粒子的交换是对称的.

2. 基矢的变换

单粒子态的变换 上一节已经指出，全同粒子体系的粒子数空间是定义于一定的单粒子本征态组的，对于不同的单粒子本征态组，粒子数空间具有不同的物理含义. 上面讨论的粒子数空间定义于单粒子本征态组 $\{|\varphi_n\rangle\}$，它是正交归一化和完备的，在单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上的产生和消灭算符分别为 $\hat{a}_n^\dagger$ 和 $\hat{a}_n$. 我们现在来讨论从这个单粒子本征态组到另一个单粒子本征态组的变换.

设有另一个单粒子本征态组 $\{|\phi_n\rangle\}$，它是正交归一化和完备的，

$$\langle\phi_m|\phi_n\rangle=\delta_{mn},$$

$$\sum_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n|=1.$$

从 $\{|\varphi_n\rangle\}$ 到 $\{|\phi_n\rangle\}$ 的单粒子态的变换为

$$|\phi_n\rangle=\sum_m|\varphi_m\rangle\langle\varphi_m|\phi_n\rangle,$$

其中 $\langle\varphi_m|\phi_n\rangle$ 是相应的变换矩阵.

算符的变换 若把在单粒子态 $|\phi_n\rangle$ 上的产生和消灭算符记为 $\hat{b}_n^\dagger$ 和 $\hat{b}_n$，则 $|\phi_n\rangle=\hat{b}_n^\dagger|0\rangle$，上式可以改写成

$$\hat{b}_n^\dagger|0\rangle=\sum_m\hat{a}_m^\dagger|0\rangle\langle\varphi_m|\phi_n\rangle,$$

从而我们得到产生算符的变换

$$\hat{b}_n^\dagger=\sum_m\hat{a}_m^\dagger\langle\varphi_m|\phi_n\rangle.$$

它的厄米共轭给出消灭算符的变换

$$\hat{b}_n=\sum_m\hat{a}_m\langle\phi_n|\varphi_m\rangle.$$

运用上述变换关系和 $\hat{a}_m^\dagger$ 与 $\hat{a}_n$ 的对易关系(5)，我们可以得到 $\hat{b}_m^\dagger$ 与 $\hat{b}_n$ 的下列对易关系

$$[\hat{b}_m,\hat{b}_n]=0,\quad [\hat{b}_m^\dagger,\hat{b}_n^\dagger]=0,\quad [\hat{b}_m^\dagger,\hat{b}_n]=\delta_{mn},$$

以及粒子数算符的关系

$$\sum_n \hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n=\sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n=\hat{N}.$$

3. 单体和两体算符

单体算符 我们来考虑像(2)式的 $\hat{H}_0$ 这种类型的算符，把它一般地写成

$$\hat{F}=\sum_{i=1}^N \hat{f}(i),$$

其中单粒子算符 $\hat{f}(i)$ 只依赖于第 i 个粒子的物理量，其形式对所有的粒子都相同. 假设 $|\phi_n)$ 是 $\hat{f}$ 的本征态，有本征值方程

$$\hat{f}|\phi_n)=f_n|\phi_n),$$

其中 f_n 是 $\hat{f}$ 在本征态 $|\phi_n)$ 的本征值. 于是，在定义于单粒子态组 $\{|\phi_n)\}$ 的粒子数空间中，基矢 $|N_1\cdots N_n\cdots)$ 是单体算符 $\hat{F}$ 的本征态，具有本征值 $\sum_n N_n f_n$，我们有

$$\hat{F}|N_1N_2\cdots)=\sum_{i=1}^N \hat{f}(i)|N_1N_2\cdots)=\sum_n N_n f_n|N_1N_2\cdots)$$
$$=\sum_n f_n\hat{N}_n|N_1N_2\cdots).$$

由于 $\{|N_1N_2\cdots)\}$ 是完备组，所以

$$\hat{F}=\sum_n f_n\hat{N}_n=\sum_n f_n\hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n.$$

把上式变换到定义于单粒子态组 $\{|\varphi_n)\}$ 的粒子数空间，我们就得到

$$\hat{F}=\sum_{n,m,m'} f_n\hat{a}_m^\dagger(\varphi_m|\phi_n)\hat{a}_{m'}(\phi_n|\varphi_{m'})$$
$$=\sum_{m,m'}(\varphi_m|\hat{f}|\varphi_{m'})\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_{m'}.$$

特别是,总粒子数算符为

$$\hat{N} = \sum_{i=1}^{N} 1 = \sum_{n} \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n.$$

两体算符 我们再来考虑像(3)式的 $\hat{V}$ 这种类型的算符,把它一般地写成

$$\hat{G} = \sum_{i>j=1}^{N} \hat{g}(i,j) = \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N} \hat{g}(i,j),$$

其中双粒子算符 $\hat{g}(i,j)$ 只依赖于第 i 和第 j 个粒子的量,与其他粒子无关,其形式对于所有的粒子对都相同,在粒子指标 i 与 j 的交换下不变. 先考虑下列特殊情况:

$$\hat{g}(i,j) = \hat{u}(i)\hat{v}(j) + \hat{u}(j)\hat{v}(i),$$

上述写法已经保证了它在粒子指标 i 与 j 的交换下不变. 对于这种情况,我们有

$$\begin{aligned}\hat{G} &= \frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N} \{\hat{u}(i)\hat{v}(j) + \hat{u}(j)\hat{v}(i)\} \\ &= \sum_{i,j=1}^{N} \hat{u}(i)\hat{v}(j) - \sum_{i=1}^{N} \hat{u}(i)\hat{v}(i) = \hat{U}\hat{V} - \hat{W}.\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}\hat{U}\hat{V} &= \sum_{i} \hat{u}(i) \sum_{j} \hat{v}(j) \\ &= \sum_{k,l,m,n} (\varphi_k|\hat{u}|\varphi_l)(\varphi_m|\hat{v}|\varphi_n)\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \\ &= \sum_{k,l,m,n} (\varphi_k|\hat{u}|\varphi_l)(\varphi_m|\hat{v}|\varphi_n)\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_n + \sum_{k,n} (\varphi_k|\hat{u}\hat{v}|\varphi_n)\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n,\end{aligned}$$

$$\hat{W} = \sum_{i=1}^{N} \hat{u}(i)\hat{v}(i) = \sum_{k,n} (\varphi_k|\hat{u}\hat{v}|\varphi_n)\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n,$$

所以

$$\begin{aligned}\hat{G} = \hat{U}\hat{V} - \hat{W} &= \sum_{k,l,m,n} (\varphi_k|\hat{u}|\varphi_l)(\varphi_m|\hat{v}|\varphi_n)\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_n \\ &= \frac{1}{2}\sum_{k,l,m,n} (\varphi_m(j)\varphi_k(i)|\hat{g}(i,j)|\varphi_l(i)\varphi_n(j))\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_n.\end{aligned}$$

一般地,我们可以把 $\hat{g}(i,j)$ 写成

$$\hat{g}(i,j) = \sum_t \{\hat{u}_t(i)\hat{v}_t(j) + \hat{u}_t(j)\hat{v}_t(i)\}.$$

重复上述推导，只需要在关于 $\hat{U}$，$\hat{V}$ 和 $\hat{W}$ 的式子中包括对 t 的求和，最后仍然得到

$$\hat{G} = \frac{1}{2}\sum_{k,l,m,n} \langle \varphi_m(j)\varphi_k(i)|\hat{g}(i,j)|\varphi_l(i)\varphi_n(j)\rangle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_n.$$

4. Hamilton 算符和 Schrödinger 方程

我们现在可以把模型 Hamilton 算符(1)写在粒子数空间. 选取用单粒子 Hamilton 算符 $\hat{h}$ 的本征态组 $\{|\varphi_n\rangle\}$ 所定义的粒子数空间，$\hat{h}|\varphi_n\rangle = \varepsilon_n|\varphi_n\rangle$，就有

$$\hat{H} = \sum_n \varepsilon_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n + \frac{1}{2}\sum_{k,l,m,n} \langle \varphi_m(j)\varphi_k(i)|\hat{v}(i,j)|\varphi_l(i)\varphi_n(j)\rangle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_n.$$

于是，我们可以写出系统的态矢量满足的 Schrödinger 方程，

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

其中

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\{N_n\}} \psi(N_1 N_2 \cdots t)|N_1 N_2 \cdots\rangle.$$

此外，我们有总粒子数算符

$$\hat{N} = \sum_n \hat{N}_n = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n.$$

容易证明，总粒子数算符 $\hat{N}$ 与任何单体算符 $\hat{F}$ 和两体算符 $\hat{G}$ 对易，

$$[\hat{N},\hat{F}] = 0, \quad [\hat{N},\hat{G}] = 0.$$

所以，这个 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 描述的系统在每个单粒子态上的粒子数 N_n 虽然不守恒，但总粒子数 N 守恒，

$$[\hat{N},\hat{H}] = 0.$$

这就是说，如果 $t=t_0$ 时刻系统的态具有确定的粒子数 N，

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

则在任一时刻 t 系统的态总是具有确定的粒子数 N,

$$\hat{N}|\psi(t)\rangle = N|\psi(t)\rangle.$$

§7.3 Fermi 子体系

1. Fermi 子体系的产生和消灭算符

定义 Fermi 子体系的基矢 $|N_1N_2\cdots\rangle$ 有两点需要注意. 前面我们已经指出,在任一单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上最多只能填 1 个粒子,

$$N_n = 0,1. \tag{6}$$

此外,态矢量对于任意两个粒子的交换都是反对称的,也就是说,在任意两个粒子的交换下态矢量都要变号. 考虑到这两点,我们可以把在单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上的 Fermi 子产生算符定义成

$$\hat{a}_n^\dagger = \sum_{\{N_m\}_n'} (-1)^{P_n} |\cdots N_{n-1}1N_{n+1}\cdots\rangle\langle\cdots N_{n+1}0N_{n-1}\cdots|,$$

其中 $\{N_m\}_n'$ 表示在数组 $\{N_m\}$ 中除去 N_n, P_n 是在 $m<n$ 的所有单粒子态 $|\varphi_m\rangle$ 上的粒子填充数,

$$P_n = \sum_{m=1}^{n-1} N_m.$$

可以看出,这样定义的产生算符具有下述性质:

$$\hat{a}_n^\dagger |\cdots N_{n-1}0N_{n+1}\cdots\rangle = (-1)^{P_n}|\cdots N_{n-1}1N_{n+1}\cdots\rangle,$$

$$\hat{a}_n^\dagger |\cdots N_{n-1}1N_{n+1}\cdots\rangle = 0.$$

Fermi 子的产生算符 $\hat{a}_n^\dagger$ 作用到单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 为真空的态上,在这个单粒子态上产生一个粒子,而作用到单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上已经填有一个粒子的态上,结果为 0.

在单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上的 Fermi 子消灭算符为

$$\hat{a}_n = \sum_{\{N_m\}_n'} (-1)^{P_n} |\cdots N_{n-1}0N_{n+1}\cdots\rangle\langle\cdots N_{n+1}1N_{n-1}\cdots|,$$

它是产生算符 $\hat{a}_n^\dagger$ 的厄米共轭. 可以看出,消灭算符具有下述性质:

$$\hat{a}_n|\cdots N_{n-1}1N_{n+1}\cdots\rangle = (-1)^{P_n}|\cdots N_{n-1}0N_{n+1}\cdots\rangle,$$

$$\hat{a}_n|\cdots N_{n-1}0N_{n+1}\cdots\rangle = 0.$$

Fermi 子的消灭算符 $\hat{a}_n$ 作用到单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上已经填有一个粒子的态上,结果变为这个态的真空,而作用到单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 为真空的态上,结果为 0.

性质 容易证明, $\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n$ 就是在单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上的粒子数算符 $\hat{N}_n$:

$$\begin{aligned}
\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n = &\sum_{\{N_m\}'_n,\{N'_m\}'_n}(-1)^{P_n+P'_n}|\cdots N_{n-1}1N_{n+1}\cdots\rangle \\
&\cdot\langle\cdots N_{n+1}0N_{n-1}\cdots|\cdots N'_{n-1}0N'_{n+1}\cdots\rangle\langle\cdots N'_{n+1}1N'_{n-1}\cdots| \\
= &\sum_{\{N_m\}'_n}|\cdots N_{n-1}1N_{n+1}\cdots\rangle\langle\cdots N_{n+1}1N_{n-1}\cdots| \\
= &\sum_{\{N_m\}}N_n|\cdots N_{n-1}N_nN_{n+1}\cdots\rangle\langle\cdots N_{n+1}N_nN_{n-1}\cdots| = \hat{N}_n.
\end{aligned}$$

此外,可以证明产生和消灭算符具有下列基本反对易关系:

$$\{\hat{a}_m,\hat{a}_n\} = 0,\quad \{\hat{a}_m^\dagger,\hat{a}_n^\dagger\} = 0,\quad \{\hat{a}_m,\hat{a}_n^\dagger\} = \delta_{mn}, \tag{7}$$

它们称为 Jordan-Wigner 反对易关系,简称反对易关系. 由前两个反对易关系可以看出

$$(\hat{a}_n)^2 = \hat{a}_n\hat{a}_n = 0,\quad (\hat{a}_n^\dagger)^2 = \hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n^\dagger = 0.$$

于是,

$$\hat{N}_n^2 = \hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n = \hat{a}_n^\dagger(1-\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n)\hat{a}_n = \hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n = \hat{N}_n,$$

它可以改写成

$$\hat{N}_n(\hat{N}_n - 1) = 0.$$

上式表明,粒子数算符 $\hat{N}_n$ 的本征值只能是 0 或 1. 所以, Fermi 子产生和消灭算符的 Jordan-Wigner 反对易关系自动地保证了 Fermi 子在一个单粒子态上的填充数不能超过 1,有(6)式.

与 Bose 子体系类似地，我们可以用产生算符把粒子数空间的正交归一化基矢$|N_1N_2\cdots\rangle$表示为

$$|N_1N_2\cdots\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{N_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{N_2}\cdots|0\rangle.$$

特别是，在$|\varphi_n\rangle$态上有一个粒子的单粒子态可以写成

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

在两个不同的单粒子态$|\varphi_m\rangle$与$|\varphi_n\rangle$上各有一个粒子的双粒子态可以写成

$$|\varphi_m\varphi_n\rangle = \hat{a}_m^\dagger\hat{a}_n^\dagger|0\rangle.$$

由于$m\neq n$时算符$\hat{a}_m^\dagger$与$\hat{a}_n^\dagger$是反对易的，我们有

$$|\varphi_n\varphi_m\rangle = \hat{a}_n^\dagger\hat{a}_m^\dagger|0\rangle = -\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_n^\dagger|0\rangle = -|\varphi_m\varphi_n\rangle.$$

上式表明，系统的态矢量在两个粒子的交换下变号. 所以，Fermi 子产生和消灭算符的 Jordan-Wigner 反对易关系自动地保证了体系的态矢量对两个粒子的交换是反对称的.

归纳上述结果，我们可以看出，Fermi 子产生和消灭算符的 Jordan-Wigner 反对易关系自动地满足 Pauli 不相容原理.

2. 基矢的变换和 Hamilton 算符

基矢的变换 与 Bose 子体系一样，从单粒子态组$\{|\varphi_n\rangle\}$变换到$\{|\phi_n\rangle\}$，体系粒子数空间的产生和消灭算符的变换为

$$\hat{b}_n^\dagger = \sum_m \hat{a}_m^\dagger\langle\varphi_m|\phi_n\rangle,$$

$$\hat{b}_n = \sum_m \hat{a}_m\langle\phi_n|\varphi_m\rangle.$$

运用上述变换关系和$\hat{a}_m^\dagger$与$\hat{a}_n$的反对易关系(7)，我们可以得到$\hat{b}_m^\dagger$与$\hat{b}_n$的下列反对易关系

$$\{\hat{b}_m,\hat{b}_n\} = 0,\quad \{\hat{b}_m^\dagger,\hat{b}_n^\dagger\} = 0,\quad \{\hat{b}_m^\dagger,\hat{b}_n\} = \delta_{mn},$$

以及粒子数算符的关系

$$\sum_n \hat{b}_n^\dagger\hat{b}_n = \sum_n \hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n = \hat{N}.$$

单体和两体算符 与 Bose 子体系类似地，在粒子数空间中的单体和两体算符分别为

$$\hat{F}=\sum_{i=1}^{N}\hat{f}(i)=\sum_{m,m'}(\varphi_m|\hat{f}|\varphi_{m'})\hat{a}_m^{\dagger}\hat{a}_{m'},$$

$$\hat{G}=\sum_{i>j=1}^{N}\hat{g}(i,j)$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{k,l,m,n}(\varphi_m(j)\varphi_k(i)|\hat{g}(i,j)|\varphi_l(i)\varphi_n(j))\hat{a}_m^{\dagger}\hat{a}_k^{\dagger}\hat{a}_l\hat{a}_n.$$

上述两个公式在形式上与 Bose 子体系的完全一样，只是要注意其中产生和消灭算符的先后次序. 对于 Bose 子体系，不同单粒子态上的产生和消灭算符互相对易，交换它们的次序不引起任何改变. 但是对于 Fermi 子体系，不同单粒子态上的产生和消灭算符互相反对易，交换它们的次序要改变正负号.

Hamilton 算符和 Schrödinger 方程 在粒子数空间中 Fermi 子体系的 Hamilton 算符和 Schrödinger 方程在形式上与 Bose 子体系的一样，分别是

$$\hat{H}=\sum_n\varepsilon_n\hat{a}_n^{\dagger}\hat{a}_n$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{k,l,m,n}(\varphi_m(j)\varphi_k(i)|\hat{v}(i,j)|\varphi_l(i)\varphi_n(j))\hat{a}_m^{\dagger}\hat{a}_k^{\dagger}\hat{a}_l\hat{a}_n,$$

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

其中

$$|\psi(t))=\sum_{\{N_n\}}\psi(N_1N_2\cdots t)|N_1N_2\cdots).$$

此外，同样可以证明，总粒子数算符 $\hat{N}$ 与任何单体算符 $\hat{F}$ 和两体算符 $\hat{G}$ 对易，

$$\hat{N}=\sum_n\hat{a}_n^{\dagger}\hat{a}_n,$$

$$[\hat{N},\hat{F}]=0,\quad[\hat{N},\hat{G}]=0,$$

这个 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 描述的系统在每一个单粒子态上的粒子数

$\hat{N}_n$ 虽然不守恒，但总粒子数 $\hat{N}$ 守恒，

$$[\hat{N},\hat{H}] = 0,$$

其中

$$\hat{N} = \sum_n \hat{N}_n = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n.$$

所以，如果 $t=t_0$ 时刻系统的态具有确定的粒子数 N，$\hat{N}|\psi(t_0)\rangle = N|\psi(t_0)\rangle$，则在任一时刻 t 系统的态总是具有确定的粒子数 N，

$$\hat{N}|\psi(t)\rangle = N|\psi(t)\rangle.$$

3. 应用举例：Josephson 结

模型 Hamilton 算符 在两块金属 A 与 B 之间夹一薄绝缘层，就构成一个 Josephson 结. 由于隧道效应，一块金属中的电子会穿过绝缘层进入另一块金属. 在两块金属之间加上一个电势差，就会形成穿过绝缘层的电流. 这个过程，就是所谓的*超导量子干涉器件*的物理基础①.

这个系统的物理，可以用以下的模型 Hamilton 算符来描述②：

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B + \hat{H}_T,$$

其中 $\hat{H}_A$ 与 $\hat{H}_B$ 分别是金属 A 与 B 中电子体系的 Hamilton 算符，$\hat{H}_T$ 描述电子从一块金属穿过绝缘层进入另一块金属的跃迁过程.

金属中的电子，互相之间存在 Coulomb 相互作用，与晶格离子之间也存在 Coulomb 相互作用. 作为一个近似的简化模型，可以把它们当作在某个能带中运动的具有一定有效质量的自由粒子来处理(参阅第四章 § 4.2 中的例 2). 写在粒子数空间中，就是

$$\hat{H}_A = \sum_n \epsilon_{An} \hat{a}_{An}^\dagger \hat{a}_{An}, \quad \hat{H}_B = \sum_n \epsilon_{Bn} \hat{a}_{Bn}^\dagger \hat{a}_{Bn},$$

---

① Clarles Kittlel, *Introduction to Solid State Physics*, fifth edition, John Wiley & Sons, p. 388.

② M. H. Cohen, L. M. Falicov and J. C. Phillips, *Phys. Rev. Letters*, 8 (1962) 316.

其中 ε_{An} 与 ε_{Bn} 分别是金属 A 与 B 中的能带函数.

引起电子在两块金属之间跃迁的相互作用 $\hat{H}_T$ 可以写成

$$\hat{H}_T = \sum_{m,n} T_{mn} \hat{a}^\dagger_{Am} \hat{a}_{Bn} + \text{h.c.},$$

其中 h.c. 表示前一项的厄米共轭. 上式右边第一项表示在金属 B 中 $|\varphi_{Bn}\rangle$ 态的一个电子穿过绝缘层到了金属 A 中的 $|\varphi_{Am}\rangle$ 态，第二项表示与此相反的过程. 系数 T_{mn} 描述电子穿过绝缘层的概率大小，与绝缘层的物理性质和厚度以及电子的能量等因素有关，作为简化的近似，可以当成一个由实验来确定的常数.

运动方程和电流算符 我们把 $\hat{H}_T$ 当作相互作用项，

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_A + \hat{H}_B, \quad \hat{V} = \hat{H}_T.$$

容易证明，在没有相互作用时，两块金属中的电子数 $\hat{N}_A$ 与 $\hat{N}_B$ 分别守恒，

$$\hat{N}_A = \sum_n \hat{a}^\dagger_{An} \hat{a}_{An}, \quad \hat{N}_B = \sum_n \hat{a}^\dagger_{Bn} \hat{a}_{Bn},$$

$$[\hat{N}_A, \hat{H}_0] = [\hat{N}_B, \hat{H}_0] = 0.$$

考虑相互作用后，$\hat{N}_A$ 与 $\hat{N}_B$ 不再分别守恒，但总粒子数 $\hat{N} = \hat{N}_A + \hat{N}_B$ 仍然守恒，

$$[\hat{N}, \hat{H}] = [\hat{N}_A, \hat{H}_T] + [\hat{N}_B, \hat{H}_T] = 0.$$

在演算中，注意两块金属中电子的单粒子态分别属于不同自由度，它们的产生、消灭算符互相反对易.

在 Heisenberg 绘景中，计算一块金属中电子数的变化率，就给出电流算符 $\hat{j}$ 的表达式. 我们规定电流从 A 到 B 为正，则有

$$\begin{aligned} \hat{j} &= -e\frac{\mathrm{d}\hat{N}_B}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{i}e}{\hbar}[\hat{N}_B, \hat{H}] \\ &= -\frac{\mathrm{i}e}{\hbar}\sum_{m,n}(T_{mn}\hat{a}^\dagger_{Am}\hat{a}_{Bn} - T^*_{mn}\hat{a}^\dagger_{Bn}\hat{a}_{Am}), \end{aligned}$$

其中 $-e$ 为电子电荷. 求上式在两块金属电子态上的统计平均，就可以得到能够与实验进行比较的电流伏安曲线公式. 这要用到微扰论的级数展开，我们就不在这里具体讨论.

§7.4 二次量子化理论

1. 二次量子化

重新考察粒子数空间的结果 我们前面的讨论，是从由(1)式给出的物理模型出发，考虑全同粒子的交换对称性，构造粒子数空间和相应的产生、消灭算符，把系统的态矢量、观测量算符、Hamilton 算符和 Schrödinger 方程都在粒子数空间中用产生和消灭算符表示出来. 这个做法的关键，是把在各个单粒子态的粒子数 $\hat{N}_n$ 作为全同粒子体系的观测量，引进能使粒子数改变的产生和消灭算符，并根据全同粒子的物理性质来确定这些算符的性质和形式，在此基础上建立整个理论.

我们现在的目的，则是要重新考察前面所得到的粒子数空间的结果，看看能否从另外一个角度出发，来给出同样的公式. 为此目的，我们来把前面得到的结果写在单粒子的坐标本征态组$\{|\boldsymbol{r}\rangle\}$中. 需要说明，我们下面的讨论并不依赖于单粒子态是坐标本征态这一点，对于任何单粒子本征态都是适用的. 只是我们对坐标表象波函数比较熟悉，坐标表象波函数有直观形象的图像. 为了简化表述，我们不考虑粒子的自旋，只考虑粒子的 3 个空间自由度.

坐标表象 我们从单粒子态组$\{|\varphi_n\rangle\}$变换到$\{|\boldsymbol{r}\rangle\}$. 单粒子态矢量的变换是

$$|\boldsymbol{r}\rangle = \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|\boldsymbol{r}\rangle.$$

于是，若用 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$和 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$表示在$|\boldsymbol{r}\rangle$态的产生和消灭算符，产生算符的变换就是

$$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}) = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \langle\varphi_n|\boldsymbol{r}\rangle = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \varphi_n^*(\boldsymbol{r}). \tag{8}$$

它的厄米共轭给出消灭算符的变换，

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = \sum_n \hat{a}_n \langle\boldsymbol{r}|\varphi_n\rangle = \sum_n \hat{a}_n \varphi_n(\boldsymbol{r}). \tag{9}$$

注意 r 是单粒子态 $|r\rangle$ 的指标，它是连续的 3 维指标. 上述二式的逆变换是

$$\hat{a}_n^\dagger = \int d^3 r \hat{\psi}^\dagger(r)\langle r|\varphi_n\rangle, \tag{10}$$

$$\hat{a}_n = \int d^3 r \hat{\psi}(r)\langle \varphi_n|r\rangle. \tag{11}$$

在这个单粒子态的粒子数空间中，同样可以写出单体算符和两体算符的表达式. 我们可以把总粒子数算符写成

$$\hat{N} = \int d^3 r \hat{\psi}^\dagger(r)\hat{\psi}(r), \tag{12}$$

这里

$$\hat{N}(r) = \hat{\psi}^\dagger(r)\hat{\psi}(r) \tag{13}$$

是在 r 的粒子数密度算符. 体系的总动量算符 $\hat{P}$ 可以写成

$$\hat{P} = \sum_{i=1}^{N}\hat{p}(i) = \int d^3 r \hat{\psi}^\dagger(r)\hat{p}\hat{\psi}(r) = \int d^3 r \hat{\psi}^\dagger(r)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\hat{\psi}(r), \tag{14}$$

其中已经把单粒子动量算符写在坐标表象，

$$\hat{p} = -\mathrm{i}\hbar\nabla.$$

体系的单粒子总能量算符 $\hat{H}_0$ 可以写成

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_i \hat{h}(i) = \int d^3 r d^3 r' \hat{\psi}^\dagger(r)\langle r|\hat{h}|r'\rangle\hat{\psi}(r') \\ &= \int d^3 r \hat{\psi}^\dagger(r)\hat{h}(r)\hat{\psi}(r),\end{aligned} \tag{15}$$

其中 $\hat{h}(r)$ 是单粒子 Hamilton 算符 $\hat{h}$ 在坐标表象中的表示. 最后，体系的 Hamilton 算符(1)可以写成

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int d^3 r d^3 r' \hat{\psi}^\dagger(r)\langle r|\hat{h}|r'\rangle\hat{\psi}(r') \\ &\quad + \frac{1}{2}\int d^3 r d^3 r' d^3 r'' d^3 r''' \hat{\psi}^\dagger(r'')\hat{\psi}^\dagger(r) \\ &\quad \times \langle r''(2)r(1)|\hat{v}((1),(2))|r'(1)r'''(2)\rangle\hat{\psi}(r')\hat{\psi}(r''') \\ &= \int d^3 r \hat{\psi}^\dagger(r)\hat{h}(r)\hat{\psi}(r)\end{aligned}$$

$$+\frac{1}{2}\int d^3r d^3r' \hat{\psi}^\dagger(r)\hat{\psi}^\dagger(r')\hat{v}(r,r')\hat{\psi}(r')\hat{\psi}(r),\qquad(16)$$

其中 $\hat{v}(r,r')$是单粒子的两体相互作用势能 $\hat{v}(i,j)$在坐标表象中的表示.

二次量子化　如果把在 r 的消灭算符 $\hat{\psi}(r)$换成单粒子态的坐标表象波函数 $\psi(r)$，把产生算符 $\hat{\psi}^\dagger(r)$换成相应波函数的复数共轭 $\psi^*(r)$，上面的(12)式就是测量到这个粒子的总的概率，(13)式就是在 r 测到这个粒子的概率密度，(14)式就是测量这个粒子动量的平均值，(15)式就是在没有相互作用时测量这个粒子的能量平均值. (16)式中第二项涉及粒子之间的相互作用，不是单粒子的观测量，在 Hartree-Фок 自洽场近似下，亦即在全同粒子体系的单粒子近似下，可以解释为全同粒子体系中的一个粒子在其他所有粒子产生的平均场中的相互作用能.

所以，反过来看，我们前面对于全同粒子体系的粒子数空间的表述，相当于把单粒子态波函数 $\psi(r)$换成消灭算符 $\hat{\psi}(r)$，把它的复数共轭 $\psi^*(r)$换成产生算符 $\hat{\psi}^\dagger(r)$，而把在 r 测到粒子的概率密度 $\psi^*(r)\psi(r)$换成测到的粒子数密度 $\hat{\psi}^\dagger(r)\hat{\psi}(r)$，等等. 也就是说，我们前面对于**全同粒子体系**的粒子数空间的表述，相当于对**单个粒子**的量子力学公式作如下的代换，

$$\psi(r)\to\hat{\psi}(r),\quad \psi^*(r)\to\hat{\psi}^\dagger(r).\qquad(17)$$

单粒子态的坐标表象波函数，已经是量子力学的结果. 把它换成算符，在形式上就是第二次量子化. 所以，这个把单粒子态的量子力学波函数换成算符的做法(17)被称为二次量子化，而以二次量子化为基础的理论被称为二次量子化理论. 附带说一句，在一些书籍和文献上，也把前面讨论的粒子数空间的理论称为二次量子化理论.

建立二次量子化理论的关键，是需要有一个规则来确定这些算符的对易关系，从而确定这些算符的性质. 下面我们就分别讨论 Bose 子情形和 Fermi 子情形的二次量子化规则. 需要指出，我们

前面已经一般地表明，从任何单粒子本征态的完备组出发的讨论，都是等价的. 在这里，只是作为二次量子化的规则，我们选定了单粒子的坐标本征态.

2. 二次量子化规则

Bose 子的情形 利用公式(8)和(9)，以及对易关系(5)，我们可以得到产生算符 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$与消灭算符 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$的下列对易关系：

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')] = 0, \quad [\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')] = 0,$$
$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')] = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \tag{18}$$

上面的对易关系中，前两个是显而易见的. 第三个对易关系也很容易证明：

$$\begin{aligned}[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')] &= \sum_{m,n}[\hat{a}_m(\boldsymbol{r}|\varphi_m),\hat{a}_n^\dagger(\varphi_n|\boldsymbol{r}')] \\ &= \sum_{m,n}(\boldsymbol{r}|\varphi_m)(\varphi_n|\boldsymbol{r}')\delta_{mn} = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}').\end{aligned}$$

对易关系(18)可以作为 Bose 子情形的二次量子化规则. 利用公式(10)和(11)，以及对易关系(18)，我们可以得到产生算符 $\hat{a}_n^\dagger$ 与消灭算符 $\hat{a}_n$ 的对易关系(5). 所以，从对易关系(18)出发，可以得到前面讨论的 Bose 子体系粒子数空间的全部结果.

Fermi 子的情形 与 Bose 子的情形完全类似地，利用公式(8)和(9)，以及反对易关系(7)，我们可以得到产生算符 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$与消灭算符 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$的下列 Jordan-Wigner 反对易关系：

$$\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\} = 0, \quad \{\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\} = 0,$$
$$\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\} = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \tag{19}$$

这组反对易关系(19)可以作为 Fermi 子情形的二次量子化规则. 利用公式(10)和(11)，以及反对易关系(19)，我们可以得到产生算符 $\hat{a}_n^\dagger$ 与消灭算符 $\hat{a}_n$ 的反对易关系(7). 所以，从反对易关系(19)出发，可以得到前面讨论的 Fermi 子体系粒子数空间的全部结果.

3. 二次量子化理论及其场论的诠释

二次量子化理论 归纳起来，二次量子化理论包括以下三点.

首先，选定一个单粒子模型，写出这个单粒子问题的量子力学坐标表象波函数和观测量平均值公式. 单粒子模型也就是关于单粒子 Hamilton 算符 $\hat{h}$ 的具体假设. 给定了 $\hat{h}$ 的具体形式，就可以选择单粒子的的本征态组$\{|\varphi_n\rangle\}$，并且把单粒子态的坐标表象波函数写成

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_n a_n\langle\boldsymbol{r}|\varphi_n\rangle = \sum_n a_n\varphi_n(\boldsymbol{r}). \tag{20}$$

用这个波函数，可以把单粒子的任何观测量 $\hat{f}$ 的平均值写成

$$\langle\hat{f}\rangle = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{f}\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{m,n} a_m^*\langle\varphi_m|\hat{f}|\varphi_n\rangle a_n. \tag{21}$$

特别是，单粒子能量的平均值为

$$\begin{aligned}\langle\hat{h}\rangle &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r})\hat{h}\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{m,n} a_m^*\langle\varphi_m|\hat{h}|\varphi_n\rangle a_n \\ &= \sum_n a_n^* a_n\varepsilon_n,\end{aligned} \tag{22}$$

这里假设$|\varphi_n\rangle$是单粒子 Hamilton 算符 $\hat{h}$ 的本征态，有本征值方程

$$\hat{h}|\varphi_n\rangle = \varepsilon_n|\varphi_n\rangle.$$

同样，单粒子的动量平均值为

$$\langle\hat{\boldsymbol{p}}\rangle = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\psi^*(\boldsymbol{r})(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_{m,n} a_m^*\langle\varphi_m|\hat{\boldsymbol{p}}|\varphi_n\rangle a_n. \tag{23}$$

其次，按照代换(17)把这个单粒子波函数及其复数共轭分别换成算符及其厄米共轭，对于 Bose 子采用对易关系(18)，对于 Fermi 子采用反对易关系(19). 由(20)式我们可以写出

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = \sum_n \hat{a}_n\langle\boldsymbol{r}|\varphi_n\rangle = \sum_n \hat{a}_n\varphi_n(\boldsymbol{r}).$$

它的厄米共轭给出

$$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}) = \sum_n \hat{a}_n^\dagger\langle\varphi_n|\boldsymbol{r}\rangle = \sum_n \hat{a}_n^\dagger\varphi_n^*(\boldsymbol{r}).$$

关于它们的对易关系，对于 Bose 子，有

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}(\boldsymbol{r}')] = 0, \quad [\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')] = 0,$$

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')] = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'),$$

由此还可以推出

$$[\hat{a}_m, \hat{a}_n] = 0, \quad [\hat{a}_m^{\dagger}, \hat{a}_n^{\dagger}] = 0, \quad [\hat{a}_m, \hat{a}_n^{\dagger}] = \delta_{mn}.$$

由这些对易关系就可以证明，$\hat{N}_n = \hat{a}_n^{\dagger}\hat{a}_n$ 是在单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上的粒子数算符，本征值可以取 0 和任意正整数，$\hat{a}_n^{\dagger}$ 与 $\hat{a}_n$ 分别是在这个态上的产生和消灭算符，我们有观测量完全集 $\{\hat{N}_n\}$ 及其共同本征态组 $\{|N_1N_2\cdots\rangle\}$，和下述关系：

$$|N_1\cdots N_n\cdots\rangle = \frac{(\hat{a}_1^{\dagger})^{N_1}(\hat{a}_2^{\dagger})^{N_2}\cdots}{\sqrt{N_1!N_2!\cdots}}|0\rangle,$$

$$\hat{N}_n|N_1\cdots N_n\cdots\rangle = N_n|N_1\cdots N_n\cdots\rangle,$$

$$N_n = 0, 1, 2, \cdots,$$

$$\hat{a}_n^{\dagger}|N_1\cdots N_n\cdots\rangle = \sqrt{N_n + 1}|N_1\cdots(N_n + 1)\cdots\rangle,$$

$$\hat{a}_n|N_1\cdots N_n\cdots\rangle = \sqrt{N_n}|N_1\cdots(N_n - 1)\cdots\rangle.$$

产生和消灭算符的对易关系还保证了粒子数本征态 $|N_1\cdots N_n\cdots\rangle$ 对于任意两个粒子的交换是对称的.

对于 Bose 子的产生和消灭算符 $\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})$ 与 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$ 也可以同样地讨论. 特别是，$\hat{N}(\boldsymbol{r}) = \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$ 是在单粒子态 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 上的粒子数密度算符，$\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})$ 与 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$ 分别是在这个态上的产生与消灭算符.

对于 Fermi 子，有 Jordan-Wigner 反对易关系

$$\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\} = 0, \quad \{\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')\} = 0,$$

$$\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r}')\} = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'),$$

由此还可以推出

$$\{\hat{a}_m, \hat{a}_n\} = 0, \quad \{\hat{a}_m^{\dagger}, \hat{a}_n^{\dagger}\} = 0, \quad \{\hat{a}_m, \hat{a}_n^{\dagger}\} = \delta_{mn}.$$

由这些反对易关系就可以证明，$\hat{N}_n = \hat{a}_n^{\dagger}\hat{a}_n$ 是在单粒子态 $|\varphi_n\rangle$ 上的粒子数算符，本征值只可以取 0 和 1，$\hat{a}_n^{\dagger}$ 与 $\hat{a}_n$ 分别是在这个态上的产生和消灭算符，我们有观测量完全集 $\{\hat{N}_n\}$ 及其共同本征态组

$\{|N_1N_2\cdots\rangle\}$，和下述关系：

$$|N_1N_2\cdots\rangle = (\hat{a}_1^\dagger)^{N_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{N_2}\cdots|0\rangle,$$

$$\hat{N}_n|N_1\cdots N_n\cdots\rangle = N_n|N_1\cdots N_n\cdots\rangle,$$

$$N_n = 0,1,$$

$$\hat{a}_n^\dagger|\cdots N_{n-1}0N_{n+1}\cdots\rangle = (-1)^{P_n}|\cdots N_{n-1}1N_{n+1}\cdots\rangle,$$

$$\hat{a}_n^\dagger|\cdots N_{n-1}1N_{n+1}\cdots\rangle = 0,$$

$$\hat{a}_n|\cdots N_{n-1}1N_{n+1}\cdots\rangle = (-1)^{P_n}|\cdots N_{n-1}0N_{n+1}\cdots\rangle,$$

$$\hat{a}_n|\cdots N_{n-1}0N_{n+1}\cdots\rangle = 0.$$

产生和消灭算符的反对易关系还保证了粒子数本征态$|N_1\cdots N_n\cdots\rangle$对于任意两个粒子的交换是反对称的.

对于Fermi子的产生和消灭算符$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$与$\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$也可以同样地讨论. 特别是，$\hat{N}(\boldsymbol{r})=\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$是在单粒子态$|\boldsymbol{r}\rangle$上的粒子数密度算符，$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$与$\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$分别是在这个态上的产生与消灭算符.

第三，用这些算符写出全同粒子体系的观测量算符和Hamilton算符，并在此基础上求解. 为了看出前面所说的粒子数$\hat{N}_n$确实是粒子的数目，产生和消灭算符$\hat{a}_n^\dagger$与$\hat{a}_n$确实是粒子的产生和消灭算符，我们把(22)和(23)式写成算符，来看看它们的物理含义. 在不考虑粒子之间的相互作用的情况下，粒子是自由的，单粒子本征态$|\varphi_n\rangle$也是动量本征态，有本征值方程

$$\hat{\boldsymbol{p}}|\varphi_n\rangle = \boldsymbol{p}_n|\varphi_n\rangle.$$

于是，我们有

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{h}(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) \\ &= \sum_{m,n}\hat{a}_m^\dagger\langle\varphi_m|\hat{h}|\varphi_n\rangle\hat{a}_n = \sum_n \hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n\varepsilon_n,\end{aligned} \tag{24}$$

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{P}} &= \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) \\ &= \sum_{m,n}\hat{a}_m^\dagger\langle\varphi_m|\hat{\boldsymbol{p}}|\varphi_n\rangle\hat{a}_n = \sum_n \hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n\boldsymbol{p}_n.\end{aligned} \tag{25}$$

(24)式表示在系统的总能量中，$|\varphi_n\rangle$态提供$\hat{a}_n^\dagger\hat{a}_n$份能量，每一份

的能量是 ϵ_n. (25)式表示在系统的总动量中，$|\varphi_n\rangle$态提供 $\hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n$ 份动量，每一份的动量是 $\boldsymbol{p}_n$. 所以，数目算符 $\hat{N}_n = \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n$ 描述的对象带有一份能量 ϵ_n 和一份动量 $\boldsymbol{p}_n$，产生算符 $\hat{a}_n^\dagger$ 和消灭算符 $\hat{a}_n$ 分别描述产生和消灭一份能量 ϵ_n 和一份动量 $\boldsymbol{p}_n$. 换句话说，它们确实是描述在$|\varphi_n\rangle$态的粒子.

场论的诠释 我们前面在粒子数空间对全同粒子体系的讨论，出发点是由(1)式给出的物理模型. 这是一个具有有限自由度的离散的 N 体模型. 而二次量子化理论相当于选择了另一个物理模型. 单粒子态坐标表象波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$是一个波场. 把它换成场算符 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$，相当于假设了一个具有无限自由度的连续的场论模型. 这个模型的场量就是单粒子态的坐标表象波函数.

按照波函数的统计诠释，单粒子波函数的模方 $\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})$是在 $\boldsymbol{r}$ 测到粒子的概率密度，在多次测量的情况下，正比于测到的粒子数. 所以，在二次量子化理论中，把 $\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})$换成一个观测量算符 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$，描述在 $\boldsymbol{r}$ 测到的粒子数密度，这在物理上与单粒子系统的量子力学是一致的. 不过，在量子化以后，场论模型描述的系统具有无限自由度，系统的总粒子数也可以改变. 所以，场论模型所包含的物理比粒子数固定的全同粒子体系要多. 而在粒子数具有确定本征值的特殊情况下，场论模型则给出全同粒子体系的结果.

从物理上看，所谓的二次量子化，并非真的有第二次量子化，而是按照单粒子波函数的模式假设了一个场论模型. 当然，把单粒子的测量概率换成场的观测量粒子数，这里确实包含了新的物理. 场算符 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$与 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$的对易关系，也就是说，场的量子化规则，反映了这个新的物理的特性，需要特别进行讨论. 我们在这里遵循的原则，是全同粒子的交换对称性，以及在粒子数本征值等于 1 时理论的结果应该与单粒子量子力学一致. 在这个基础上建立的理论，就是量子场论. 我们将在下一章来简略地讨论量子场论的量子力学基础.

第八章 量子场论基础

微观粒子物理的基本现象，是在高能过程中伴随有各种粒子的产生、消灭与相互转化．粒子物理理论的基本特征，是粒子物理这一基本现象的反映．

首先，在粒子物理中，除了坐标、动量、角动量与能量等粒子的运动学和动力学观测量以外，还有粒子的自旋、宇称、同位旋、轻子数、重子数以及奇异数等等区别不同粒子特征的观测量．我们在第三章已经讨论过粒子的自旋和宇称，它们分别联系于粒子内部空间的转动对称性和反射对称性．类似地，粒子的同位旋、轻子数、重子数以及奇异数等观测量也是联系于粒子内部空间的某种对称性．所以，为了寻找和确定各种描述粒子特征的基本观测量，对称性分析在粒子物理的理论中具有基本的重要性．

其次，粒子物理的实验表明，具有共同基本特征的同一种粒子都是不可分辨的全同粒子，具有交换对称性．而且，由于有粒子的产生与消灭，粒子的数目也是基本观测量．为了描述各种全同粒子的产生与消灭过程，粒子物理的理论必定是具有无限自由度的场的量子理论．粒子的各种对称性，实际上就是场的各种对称性．

第三，在不同粒子之间发生的转化，表明在它们的场之间存在耦合，这是不同粒子之间相互作用的基本形式．在粒子物理现象中，系统的态的变化，主要表现为粒子的产生、消灭以及不同粒子之间的转化．所以，各种粒子的场之间的耦合，是粒子的动力学理论的核心．各种场之间的耦合就是它们之间的相互作用．所以，各种场之间的相互作用，构成了量子场论的核心．

量子场论的完整理论，包括上述三个方面的内容．具体地说，

首先,要讨论满足各种对称性要求的场的模型. 然后,讨论各种场的量子化. 接着,再讨论各种场之间的相互作用. 最后,把整个理论综合运用于各种实际问题,给出能与实验进行比较的结果.

量子场论已经和原子物理、量子化学、固体理论以及原子核理论一样,成为量子力学理论应用和发展的一个重要分支. 由于粒子物理是物质结构最深层次的物理,粒子物理的经验在我们对物质世界的探索中具有最基本的意义,量子场论又不仅仅是量子力学理论的一般应用和发展,而是属于在基本物理探索前沿的发展中的理论.

对量子场论全面和完整的讨论,超出了本书的主题和范围. 本章的目的,只是从量子力学基本原理的角度来简略地讨论几种场的量子化,指出在具体运用正则量子化规则时会遇到的问题和需要对它进行的修改,并在此基础上根据微观因果性原理讨论自旋与统计的关系和场的定域性问题. 在这个意义上,本章与第五章和第七章一样,都是第四章动力学模型的继续,又是第一章正则量子化和第七章二次量子化理论的深入和发展.

§8.1 标 量 场

1. 场的作用量原理与 Hamilton 正则方程

场的作用量原理 在空间分布的场,是一个无限自由度系统. 场变量 $\phi(\boldsymbol{r},t)$可以看作是系统的正则坐标,空间坐标 $\boldsymbol{r}$ 则是系统不同自由度的指标. 把第四章 §4.1 中有限自由度系统的 Lagrange 函数推广到无限自由度,注意不同自由度的 Lagrange 函数可以相加,就可以把系统的 Lagrange 函数写成

$$L(t)=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\mathscr{L}(\phi,\partial_\mu\phi).$$

其中 $\mathscr{L}(\phi,\partial_\mu\phi)$是系统的 Lagrange 密度. 上式的时间积分给出系统的作用量,

$$S = \int d^4x \mathscr{L}(\phi, \partial_\mu \phi),$$

$d^4x = c dt d^3 r$ 是 4 维时空体积元.

考虑场量的变分

$$\phi(x) \to \phi(x) + \delta\phi(x),$$

这里 $x=(ct, \mathbf{r})$. 场的作用量原理假设：对于场量在时空边界固定的变分，真实的场量将使系统作用量取极值. 在上述变分下，系统作用量的改变是

$$\delta S = \int d^4x \delta\mathscr{L} = \int d^4x \left[\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \phi}\delta\phi + \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)}\delta(\partial_\mu \phi)\right].$$

利用 $\delta(\partial_\mu \phi) = \partial_\mu \delta\phi$，对上式第二项做分部积分，考虑到在 4 维时空边界变分为 0，$\delta\phi = 0$，就有

$$\delta S = \int d^4x \left[\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)}\right]\delta\phi.$$

于是，作用量取极值 $\delta S = 0$ 的条件是

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu \phi)} = 0, \tag{1}$$

这就是场 ϕ 的 Euler-Lagrange 方程，它是场的运动方程.

Hamilton 正则方程 与场变量 ϕ 共轭的正则动量可以定义为

$$\pi = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\phi}},$$

而场的 Hamilton 函数可以定义为

$$H \equiv \int d^3 r \pi(\mathbf{r}, t)\dot{\phi}(\mathbf{r}, t) - L = \int d^3 \mathbf{r} \mathscr{H},$$

其中 $\mathscr{H}$ 是场的 Hamilton 密度.

$$\mathscr{H} = \pi\dot{\phi} - \mathscr{L}.$$

从 Euler-Lagrange 方程和 $\mathscr{H}$ 的定义，求 Hamilton 密度对于 ϕ 与 π 独立的变分，并且注意 $\mathscr{H}$ 出现在空间积分号下，就可以推出 Hamilton 正则方程

$$\dot{\pi} = -\frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \phi}, \quad \dot{\phi} = \frac{\partial \mathscr{H}}{\partial \pi},$$

它们与 Euler-Lagrange 方程是等价的.

由于 Hamilton 密度把时间放在一个特殊地位，不容易看出理论的相对论协变性，相对论的场论模型，一般都是从场的 Lagrange 密度出发. 一个场论的模型，就是关于场的 Lagrange 密度的一个具体假设. 知道了场的 Lagrange 密度，就可以从它的 Euler-Lagrange 方程得到场的运动方程，以及场的 Hamilton 函数和 Hamilton 正则方程.

2. 实标量场

模型 Lagrange 密度 我们从最简单的情况开始，考虑场量 $\phi(x)$ 是实标量的场. 从方程(1)可以看出，Lagrange 密度中的相加常数项对场的运动方程没有贡献. 同样，Lagrange 密度中场量 ϕ 及其微商 $\partial_\mu\phi$ 的相加一次项对运动方程也没有贡献. 所以，最简单的相对论不变性模型是

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}c^2(\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - \kappa^2\phi^2), \tag{2}$$

其中 $c^2/2$ 是习惯约定的因子. κ 是一个模型参数，下面我们将会看到它正比于场的粒子的质量 m. 上式第一项称为场的动能项，第二项称为场的质量项.

Lagrange 密度(2)的 Euler-Lagrange 方程给出场 ϕ 的波动方程

$$\partial_\mu\partial^\mu\phi + \kappa^2\phi = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} - \nabla^2\phi + \kappa^2\phi = 0. \tag{3}$$

这个方程称为 Klein-Gordon 方程，它是相对论不变的. 如果把场量 $\phi(\boldsymbol{r},t)$ 看成某个单粒子态的坐标表象波函数，则可以看出，它描述相对论性自由粒子. 实际上，Klein-Gordon 方程有平面波解

$$\varphi_p(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{-i(Et-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}, \tag{4}$$

其中 $E=\pm E_p$,

$$E_p=\sqrt{p^2c^2+m^2c^4},$$

粒子质量为

$$m=\frac{\hbar\kappa}{c},$$

参数 κ 则是粒子约化 Compton 波长 λ 的倒数,

$$\kappa=\frac{1}{\lambda},\quad \lambda=\frac{\hbar}{mc}.$$

所以,模型 Lagrange 密度(2)描述自由粒子的场,简称自由场. 在(2)式中没有场的势能项.

正则量子化 由(2)式可以算出场的正则动量

$$\pi=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\phi}}=\dot{\phi},$$

从而可以算出场的 Hamilton 密度

$$\begin{aligned}\mathscr{H}&=\pi\dot{\phi}-\mathscr{L}=\pi^2-\frac{1}{2}[\pi^2-c^2(\nabla\phi)^2-c^2\kappa^2\phi^2]\\&=\frac{1}{2}[\pi^2+c^2(\nabla\phi)^2+c^2\kappa^2\phi^2].\end{aligned}\tag{5}$$

可以看出,它是正定的.

把场的正则变量 ϕ 和 π 换成算符 $\hat{\phi}$ 和 $\hat{\pi}$,就得到场的算符的方程. 按照正则量子化规则,我们可以写出场的正则坐标算符 $\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t)$ 及与其共轭的正则动量算符 $\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t)$ 的 Heisenberg 对易关系

$$[\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t),\hat{\phi}(\boldsymbol{r}',t)]=0,\quad[\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t),\hat{\pi}(\boldsymbol{r}',t)]=0,$$

$$[\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t),\hat{\pi}(\boldsymbol{r}',t)]=\mathrm{i}\hbar\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'),\tag{6}$$

这里 $\boldsymbol{r}$ 是算符的三维连续指标. 注意其中各个算符的时间都是 t,所以这些对易关系称为**等时对易关系**. 由于这种等时性,上述对易关系没有相对论协变性,在 Lorentz 变换下不是不变的. 根据它们,可以进一步算出具有相对论协变性的对易关系,见本章 §8.4.

动量表象 为了看出场的量子化的物理含义，我们把上述结果写到动量表象．Klein-Gordon 方程(3)的一般解，可以用平面波展开为

$$\phi(\boldsymbol{r},t)=\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{\hbar}{\sqrt{2E_p}}[a_p(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}+a_p^*(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}],\quad(7)$$

其中第二项是第一项的复数共轭，以保证 $\phi(\boldsymbol{r},t)$ 是实函数．引入因子 $\hbar/\sqrt{2E_p}$，是为了使系数 $a_p(t)$ 有清楚的物理含义．时间因子已经吸收到 $a_p(t)$ 中：

$$a_p(t)=a_p\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_pt/\hbar},\quad a_p^*(t)=a_p^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_pt/\hbar},$$

$a_p(t)$ 是正能项，它的复数共轭 $a_p^*(t)$ 是负能项．由此，我们还可以写出

$$\begin{aligned}\pi(\boldsymbol{r},t)&=\dot{\phi}(\boldsymbol{r},t)\\&=-\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\sqrt{\frac{E_p}{2}}[a_p(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}-a_p^*(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}].\quad(8)\end{aligned}$$

从(7)与(8)式可以解出

$$a_p(t)=\frac{1}{2}\int\frac{\mathrm{d}^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\left[\frac{\sqrt{2E_p}}{\hbar}\phi(\boldsymbol{r},t)+\mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{E_p}}\pi(\boldsymbol{r},t)\right],$$

$$a_p^*(t)=\frac{1}{2}\int\frac{\mathrm{d}^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\left[\frac{\sqrt{2E_p}}{\hbar}\phi(\boldsymbol{r},t)-\mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{E_p}}\pi(\boldsymbol{r},t)\right].$$

量子化 $\phi\to\hat{\phi}$ 与 $\pi\to\hat{\pi}$，等价于 $a_p\to\hat{a}_p$ 与 $a_p^*\to\hat{a}_p^\dagger$．于是，我们可以把上述各式都改写成算符的式子．特别是，(7)与(8)式量子化为

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t)=\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{\hbar}{\sqrt{2E_p}}[\hat{a}_p\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}+\hat{a}_p^\dagger\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}],\tag{9}$$

$$\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t)=-\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\sqrt{\frac{E_p}{2}}[\hat{a}_p\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}-\hat{a}_p^\dagger\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}],\tag{10}$$

其中已经把时间因子明写出来. 由它们解出的 $\hat{a}_p$ 与 $\hat{a}_p^\dagger$ 为

$$\hat{a}_p = \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}\left[\frac{\sqrt{2E_p}}{\hbar}\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t) + \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{E_p}}\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t)\right],$$

$$\hat{a}_p^\dagger = \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}\left[\frac{\sqrt{2E_p}}{\hbar}\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t) - \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{E_p}}\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t)\right].$$

利用上述表达式和对易关系(6), 可以求出算符 $\hat{a}_p$ 与 $\hat{a}_p^\dagger$ 的下列对易关系

$$[\hat{a}_p, \hat{a}_{p'}] = 0, \quad [\hat{a}_p^\dagger, \hat{a}_{p'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_p, \hat{a}_{p'}^\dagger] = \delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}'). \tag{11}$$

这正是动量空间 Bose 子的产生与消灭算符的对易关系. $\hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p$ 是动量为 $\boldsymbol{p}$ 的粒子数密度算符, $\hat{a}_p^\dagger$ 和 $\hat{a}_p$ 是与之相应的产生和消灭算符. 注意在有些文献中用波矢量 $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{p}/\hbar$ 来标志单粒子态, 在(11)式中第三式的右方是 $\delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')$, 这样定义的产生、消灭算符与我们这里定义的差一个因子 $\hbar^{3/2}$.

场的 Hamilton 算符 把(5)式中的 ϕ 与 π 换成算符 $\hat{\phi}$ 与 $\hat{\pi}$, 代入(9)与(10)式, 并对空间积分, 利用上述对易关系(11), 可以得到场的 Hamilton 算符,

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r}\,\hat{\mathscr{H}} = \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{p} \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{p}' E_p \frac{1}{2}(\hat{a}_p \hat{a}_{p'}^\dagger + \hat{a}_{p'}^\dagger \hat{a}_p)\delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}') \\ &= \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{p} E_p\left[\hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p + \frac{1}{2}\delta(0)\right].\end{aligned}$$

从这个结果可以看出, 场的每个粒子带有一份能量 E_p, 场的能量是量子化的. 类似的讨论还表明, 场的每个粒子带有一份动量 $\boldsymbol{p}$. 上面方括号内的因子 $\delta(0)/2$, 是场的零点能. 它表明, 场在没有粒子的真空态也具有能量, 并且是无限大. 当然, 一个相加常数对于能量并没有意义. 但是在物理上, 这就暗示真空有复杂的结构, 具有无限自由度. 从理论上看, 这一项来自我们的模型假设. 如果假设在模型给出的 Hamilton 密度算符 $\hat{\mathscr{H}}$ 的乘积因子中, 产生算符

总是出现在消灭算符的左边,零点能这一项就不存在.基于这种考虑,我们可以把场的零点能去掉.

我们还可以看出,场的粒子所带的能量 E_p 总是正的,波动方程(3)的正能解和负能解分别对应于粒子的消灭和产生,单粒子理论中的负能解问题在这里不复存在(参阅第五章§5.1).

3. 复标量场

模型 Lagrange 密度 现在我们来讨论场量 ϕ 是复数的场. Lagrange 密度应该是实数,与(2)相应的模型是

$$\begin{aligned}\mathscr{L} &= c^2(\partial_\mu\phi^*\partial^\mu\phi - \kappa^2\phi^*\phi) \\ &= [\dot{\phi}^*\dot{\phi} - c^2(\nabla\phi^*)\cdot(\nabla\phi) - c^2\kappa^2\phi^*\phi].\end{aligned} \tag{12}$$

这里 ϕ^* 与 ϕ 是独立的场变量,它们的运动方程分别是

$$\partial_\mu\partial^\mu\phi + \kappa^2\phi = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} - \nabla^2\phi + \kappa^2\phi = 0,$$

$$\partial_\mu\partial^\mu\phi^* + \kappa^2\phi^* = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\phi^*}{\partial t^2} - \nabla^2\phi^* + \kappa^2\phi^* = 0.$$

与 ϕ 和 ϕ^* 共轭的正则动量分别是

$$\pi = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\phi}} = \dot{\phi}^*, \quad \pi^* = \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{\phi}^*} = \dot{\phi}.$$

场的 Hamilton 密度是

$$\mathscr{H} = [\pi^*\pi + c^2(\nabla\phi^*)\cdot(\nabla\phi) + c^2\kappa^2\phi^*\phi]. \tag{13}$$

显然,它是正定的.

整体规范不变性与守恒流密度 对于复数场 ϕ,我们可以考虑它的规范变换

$$\phi \to e^{i\alpha}\phi,$$

α 是一个实常数.这是一个整体规范变换.规范不变性原理假设场量在上述规范变换下描述的是同一个场.这就要求场的 Lagrange 密度在上述规范变换下不变.由 $\delta\phi = i\alpha\phi$, $\delta\phi^* = -i\alpha\phi^*$, $\delta\partial_\mu\phi = i\alpha\partial_\mu\phi$, $\delta\partial_\mu\phi^* = -i\alpha\partial_\mu\phi^*$,有

$$\delta\mathscr{L}=\mathrm{i}\alpha\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\phi}\phi-\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\phi^*}\phi^*+\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\partial_\mu\phi-\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi^*)}\partial_\mu\phi^*\right]$$

$$=\mathrm{i}\alpha\partial_\mu\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\phi-\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi^*)}\phi^*\right],$$

其中分别用到了 ϕ 与 ϕ^* 满足的 Euler-Lagrange 方程. 要求上式为 0,就有连续性方程

$$\partial_\mu j^\mu=0.$$

守恒的 4 维流矢量为

$$j^\mu=\frac{q}{\mathrm{i}\hbar}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi)}\phi-\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial_\mu\phi^*)}\phi^*\right],$$

q 是与这个守恒流矢量相应的守恒荷. 对于复标量场(12),有

$$j^\mu=\frac{qc^2}{\mathrm{i}\hbar}(\phi\partial^\mu\phi^*-\phi^*\partial^\mu\phi).\tag{14}$$

定域规范不变性与场的荷　我们在第五章 § 5.4 曾经指出,如果场 ϕ 具有某种定域规范不变性,就必定相应地存在一种与它相互作用的场 A_μ,在场的运动方程中采取如下的耦合形式,

$$(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu+qA_\mu)\phi,$$

其中 q 是场 ϕ 与 A_μ 之间的耦合常数. 考虑到 A_μ 是实数,上式的复数共轭是

$$-(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu-qA_\mu)\phi^*,$$

它表明,场 ϕ^* 与 A_μ 之间的耦合常数是 $-q$. 换句话说,如果场 ϕ 具有与场 A_μ 耦合的荷 q,则场 ϕ^* 具有与场 A_μ 耦合的荷 $-q$,它们的荷具有相反的符号. 如果 A_μ 是电磁场,这就意味着,场 ϕ 与其复数共轭场 ϕ^* 的电荷符号相反.

根据上述讨论,我们可以看出,实数场不能与电磁场耦合,它的电荷为 0,描述电中性粒子. 复数场可以与电磁场耦合,它的电荷有正负两种,描述荷电粒子(参阅第五章 § 5.1 的正反粒子变换和 § 5.4 的电荷共轭变换).

正则量子化　现在 ϕ 与 ϕ^* 都是场的独立的正则坐标. 把场的

正则变量 ϕ, ϕ^*, π 与 π^* 换成算符 $\hat{\phi}$，$\hat{\phi}^\dagger$，$\hat{\pi}$ 与 $\hat{\pi}^\dagger$，就得到场的算符的方程. 按照正则量子化规则，我们可以写出下列等时对易关系，

$$
\begin{gathered}
[\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t), \hat{\phi}(\boldsymbol{r}',t)] = 0, \quad [\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t), \hat{\pi}(\boldsymbol{r}',t)] = 0, \\
[\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t), \hat{\pi}(\boldsymbol{r}',t)] = \mathrm{i}\hbar\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \\
[\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r},t), \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r}',t)] = 0, \quad [\hat{\pi}^\dagger(\boldsymbol{r},t), \hat{\pi}^\dagger(\boldsymbol{r}',t)] = 0, \\
[\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r},t), \hat{\pi}^\dagger(\boldsymbol{r}',t)] = \mathrm{i}\hbar\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \\
[\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t), \hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r},t)] = 0, \quad [\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t), \hat{\pi}^\dagger(\boldsymbol{r}',t)] = 0, \\
[\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t), \hat{\pi}^\dagger(\boldsymbol{r}',t)] = 0.
\end{gathered} \tag{15}
$$

它们表明，场算符 $(\hat{\phi}, \hat{\pi})$ 与 $(\hat{\phi}^\dagger, \hat{\pi}^\dagger)$ 分别属于场的不同自由度. 可以看出，中间两行是前两行的厄米共轭. 所以，只要有了 $(\hat{\phi}, \hat{\pi})$，就可以求得 $(\hat{\phi}^\dagger, \hat{\pi}^\dagger)$.

动量表象与电荷量子化　与实标量场的做法类似地，我们可以把场算符 $\hat{\phi}$ 与 $\hat{\pi}$ 用 de Broglie 平面波展开. 不同的是，现在的场量 ϕ 与 π 是复数，相应算符展开式中的正能项与负能项不必互为厄米共轭. 于是我们有

$$
\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t) = \int \frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{\hbar}{\sqrt{2E_p}} [\hat{a}_p \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar} + \hat{b}_p^\dagger \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}], \tag{16}
$$

$$
\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t) = -\mathrm{i}\int \frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \sqrt{\frac{E_p}{2}} [\hat{b}_p \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar} - \hat{a}_p^\dagger \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}]. \tag{17}
$$

与实标量场的情形类似地，我们可以解出

$$
\hat{a}_p = \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar} \left[\frac{\sqrt{2E_p}}{\hbar}\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t) + \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{E_p}}\hat{\pi}^\dagger(\boldsymbol{r},t)\right],
$$

$$
\hat{b}_p = \frac{1}{2}\int \frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar} \left[\frac{\sqrt{2E_p}}{\hbar}\hat{\phi}^\dagger(\boldsymbol{r},t) + \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{E_p}}\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t)\right].
$$

利用上述表达式和对易关系(15)，可以求出算符 $\hat{a}_p, \hat{a}_p^\dagger, \hat{b}_p$ 与 $\hat{b}_p^\dagger$ 的

下列对易关系

$$[\hat{a}_p,\hat{a}_{p'}]=0,\quad [\hat{a}_p^\dagger,\hat{a}_{p'}^\dagger]=0,\quad [\hat{a}_p,\hat{a}_{p'}^\dagger]=\delta(p-p'),$$
$$[\hat{b}_p,\hat{b}_{p'}]=0,\quad [\hat{b}_p^\dagger,\hat{b}_{p'}^\dagger]=0,\quad [\hat{b}_p,\hat{b}_{p'}^\dagger]=\delta(p-p'),$$
$$[\hat{a}_p,\hat{b}_{p'}]=0,\quad [\hat{a}_p,\hat{b}_{p'}^\dagger]=0,\quad [\hat{a}_p^\dagger,\hat{b}_{p'}]=0,\quad [\hat{a}_p^\dagger,\hat{b}_{p'}^\dagger]=0. \tag{18}$$

它们表明，算符$(\hat{a}_p,\hat{a}_p^\dagger)$与$(\hat{b}_p,\hat{b}_p^\dagger)$分别描述两种 Bose 子，属于不同的自由度.

根据(13)式，我们可以把场的 Hamilton 密度算符写成

$$\hat{\mathscr{H}}=[\hat{\pi}^\dagger\hat{\pi}+c^2(\nabla\hat{\phi}^\dagger)\cdot(\nabla\hat{\phi})+c^2\kappa^2\hat{\phi}^\dagger\hat{\phi}],$$

它显然是厄米的. 代入(16)与(17)式，并利用对易关系(18)，可以算得场的 Hamilton 算符为

$$\hat{H}=\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\hat{\mathscr{H}}=\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}E_p[\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p+\hat{b}_p^\dagger\hat{b}_p+\delta(0)],$$

它表明复标量场的两种粒子每一个带有一份能量E_p. 与实标量场的情形类似地，我们可以把这里的零点能去掉. 类似的讨论表明每个粒子携带动量$\boldsymbol{p}$.

根据(14)式，我们可以把场的守恒流密度算符写成

$$\hat{j}^\mu=\frac{qc^2}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{\phi}\,\partial^\mu\hat{\phi}^\dagger-\hat{\phi}^\dagger\partial^\mu\hat{\phi}).$$

考虑到守恒流总是出现在空间积分中，并且在无限远边界上的值为0，就可以看出上述算符是厄米的. 由连续性方程

$$\partial_\mu\hat{j}^\mu=\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}+\nabla\hat{\boldsymbol{j}}=0,$$

我们有

$$\hat{\rho}=\frac{1}{c}\hat{j}^0=\frac{q}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\phi}\,\frac{\partial\hat{\phi}^\dagger}{\partial t}-\hat{\phi}^\dagger\,\frac{\partial\hat{\phi}}{\partial t}\right]=\frac{q}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{\phi}\,\hat{\pi}-\hat{\phi}^\dagger\hat{\pi}^\dagger),$$

$$\hat{\boldsymbol{j}}=-\frac{qc^2}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{\phi}\,\nabla\hat{\phi}^\dagger-\hat{\phi}^\dagger\,\nabla\hat{\phi}).$$

代入(16)与(17)式，并利用对易关系(18)，可以算得

$$\hat{Q}=\int \mathrm{d}^3 r \hat{\rho}=\int \mathrm{d}^3 p q(\hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p-\hat{b}_p^\dagger \hat{b}_p).$$

上述结果表明，对于场的总电荷 Q，每一个与$(\hat{a}_p,\hat{a}_p^\dagger)$相联系的粒子贡献一个 q，每一个与$(\hat{b}_p,\hat{b}_p^\dagger)$相联系的粒子贡献一个 $-q$，这两种粒子的电荷符号相反.

§8.2 电　磁　场

1. 自由电磁场的运动方程与规范条件

电磁场的4维矢量势 A_μ　用4维矢量势 $A^\mu=(\Phi/c,\boldsymbol{A})$作为电磁场的正则坐标，我们在第五章§5.4中已经给出电场强度 $\boldsymbol{E}$ 与磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 的表达式

$$\boldsymbol{E}=-\nabla\Phi-\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t},\quad \boldsymbol{B}=\nabla\times\boldsymbol{A}.$$

这两个3维矢量，是下述4维完全反对称电磁场张量的6个独立分量：

$$F_{\mu\nu}=\partial_\mu A_\nu-\partial_\nu A_\mu. \tag{19}$$

实际上，我们可以写成

$$F^{0i}=-\frac{1}{c}E^i,\quad F^{ij}=-\epsilon^{ijk}B_k.$$

写成矩阵的形式，就是

$$(F^{\mu\nu})=\begin{pmatrix}0 & -E^1/c & -E^2/c & -E^3/c\\ E^1/c & 0 & -B^3 & B^2\\ E^2/c & B^3 & 0 & -B^1\\ E^3/c & -B^2 & B^1 & 0\end{pmatrix}.$$

多余的自由度　4维矢量势 A^μ 的空间部分 $\boldsymbol{A}$ 有3个分量，表示电磁场的自旋为1，$s=1$，有3个投影，$m_s=0,\pm1$. 如果电磁场的粒子具有质量，我们就可以换到粒子静止的参考系，这三个投影之间可以通过空间转动相联系，都是可以观测到的. 但是在实际

上，作为电磁场的粒子，光子没有质量，以光速运动，我们不可能换到光子静止的参考系. 在自旋的 3 个投影中，只有在 1 与 −1 之间可以通过空间反射相联系. 如果选择光子运动方向 $\boldsymbol{p}$ 为 z 轴方向，则 $m_s=1$ 的态是右旋的，$m_s=-1$ 的态是左旋的，它们互为空间反射态. 所以，对于电磁场的情形，由于光子质量为 0，只有自旋投影与运动方向相同和相反的这两个态，*在 $\boldsymbol{A}$ 的 3 个分量中，只有两个是独立的，有一个非物理的多余自由度.*

这是从物理上分析. 下面，我们进一步从理论的数学结构上来分析，并给出解决的办法.

规范条件　从 $F_{\mu\nu}$ 的定义(19)可以看出，它在 4 矢势 A_μ 的下述规范变换下不变：

$$A_\mu \to A'_\mu = A_\mu + \partial_\mu \chi,$$

χ 是任意实函数，

$$\chi = \chi(\boldsymbol{r}, t).$$

所以，*在选择 4 矢势 A_μ 作为对电磁场进行动力学描述的正则坐标时，存在一定的任意性.* 这种任意性是一种非物理的自由度，它表明 A_μ 的 4 个分量不完全独立，我们可以给它们加上附加条件. 这种对于 A_μ 的附加条件称为*规范条件*.

不同的规范条件，给出不同的规范. 常用的规范有 Lorentz 规范，Coulomb 规范和辐射规范. Lorentz 规范条件是

$$\partial_\mu A^\mu = 0.$$

这个规范条件是相对论不变的，但是它不能消除所有的非物理自由度，在理论结果中含有非物理成分，需要设法排除.

Coulomb 规范条件是

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0 \tag{20}$$

和

$$\nabla^2 \Phi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0},$$

这里 ρ 是产生场的电荷密度，ε_0 是真空介电常数. 在 Coulomb 规

范里标量势 Φ 不是独立变量，而是由电荷分布确定的函数. 对于自由电磁场，$\rho=0$，可以选择

$$\Phi = 0. \tag{21}$$

它与条件(20)一起给出的规范，称为辐射规范.

我们不难看出，当矢量势 $\boldsymbol{A}$ 是平面波时，(20)式给出

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{A} = 0,$$

$\boldsymbol{A}$ 与波矢量 $\boldsymbol{k}$ 正交，只有在与 $\boldsymbol{k}$ 垂直的平面内的两个分量，没有沿着波矢量方向的分量. $\boldsymbol{A}$ 是横场，没有纵向分量. 所以，在 Coulomb 规范或辐射规范中，由于条件(20)，$\boldsymbol{A}$ 的 3 个分量中只有两个是独立的，能够完全消除非物理的自由度. 这样做的代价，是失去了理论在形式上的相对论协变性，对于最后得到的结果的相对论协变性，需要进行专门的讨论.

2. 电磁场的量子化

自由电磁场的 Lagrange 密度与运动方程 在国际单位制里，电磁场的 Lagrange 密度可以用 $F_{\mu\nu}$ 写成

$$\mathscr{L} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu},$$

这里 μ_0 是真空导磁率. 这个 $\mathscr{L}$ 的 Euler-Lagrange 方程给出电磁场的运动方程为

$$\partial^\nu F_{\mu\nu} = 0, \tag{22}$$

$$\partial_\lambda F_{\mu\nu} + \partial_\mu F_{\nu\lambda} + \partial_\nu F_{\lambda\mu} = 0. \tag{23}$$

(22)式给出自由电磁场的 Gauss 定律和 Maxwell 位移电流定律

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 0, \quad \nabla \times \boldsymbol{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t},$$

而(23)式给出 Faraday 定律与磁场无源定律

$$\nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}, \quad \nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0.$$

所以，(22)式与(23)式就是自由电磁场的 Maxwell 方程组. $\mathscr{L}$ 也

可以用 $\boldsymbol{E}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 表达成

$$\mathscr{L}=\frac{1}{2\mu_0}\left(\frac{1}{c^2}E^2-B^2\right).$$

与场的正则坐标 A_μ 共轭的正则动量 P^μ 是

$$P^\mu=\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\dot{A}_\mu}=\frac{1}{\mu_0c}(\partial^\mu A^0-\partial^0A^\mu),$$

也就是

$$P^0=0,\quad \boldsymbol{P}=\epsilon_0\boldsymbol{E}.$$

与标量势 A_0 共轭的正则动量为 0，$P^0=0$，这也是多余的非物理自由度的结果. 利用正则动量的上述关系，我们可以推出自由电磁场的 Hamilton 密度为

$$\begin{aligned}\mathscr{H}&=-\boldsymbol{P}\cdot\dot{\boldsymbol{A}}-\mathscr{L}=\frac{1}{2\mu_0}\left(\frac{1}{c^2}E^2+B^2\right)+\frac{1}{\mu_0c^2}\boldsymbol{E}\cdot\nabla\Phi\\&=\frac{1}{2\mu_0}\left(\frac{1}{c^2}E^2+B^2\right),\end{aligned}$$

其中去掉 $\boldsymbol{E}\cdot\nabla\Phi$ 项时用到了 $\mathscr{H}$ 在空间的分部积分和 Maxwell 方程 $\nabla\cdot\boldsymbol{E}=0$.

在辐射规范中，自由电磁场的 $\mathscr{L}$ 与 $\mathscr{H}$ 分别成为

$$\mathscr{L}=\frac{1}{2\mu_0}\left[\frac{1}{c^2}(\dot{\boldsymbol{A}})^2-(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\right],$$

$$\mathscr{H}=\frac{1}{2\mu_0}\left[\frac{1}{c^2}(\dot{\boldsymbol{A}})^2+(\nabla\times\boldsymbol{A})^2\right].$$

横场正则量子化规则　在 $\mathscr{L}$ 与 $\mathscr{H}$ 的表达式中把场量 A_μ 与 P^i 换成算符 $\hat{A}_\mu$ 与 $\hat{P}^i$，就得到相应的算符 $\hat{\mathscr{L}}$ 与 $\hat{\mathscr{H}}$. 由于没有与 $\dot{A}_0$ 共轭的 $\hat{P}^0$，按照正则量子化规则，$\hat{A}_0$ 与所有算符对易，它实际上不是算符，而是一个实函数. 场算符只有 $\hat{A}_i$ 与 $\hat{P}^i$. 注意 A_i 与 P^i 是实函数，所以相应的算符 $\hat{A}_i$ 与 $\hat{P}^i$ 是厄米的. 它们的等时对易关系是

$$[\hat{A}_i(\boldsymbol{r},t),\hat{A}_j(\boldsymbol{r}',t)]=0,\quad[\hat{P}^i(\boldsymbol{r},t),\hat{P}^j(\boldsymbol{r}',t)]=0,\tag{24}$$

$$[\hat{P}_i(\boldsymbol{r},t),\hat{A}_j(\boldsymbol{r}',t)]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}').\tag{25}$$

在写出上式时，要注意与 $\hat{A}_i$ 共轭的正则动量是 $\hat{P}^i$，而 $\hat{P}^i = -\hat{P}_i$.

在上述对易关系中，需要对(25)式作一点修改，因为它与 Maxwell 方程 $\nabla \cdot \boldsymbol{E}=0$ 不相容. Gauss 定律 $\nabla \cdot \boldsymbol{E}=0$ 不含时间微商，它是对电场的一个约束. 由于 $P^i=\epsilon_0 E^i$，我们有

$$\frac{\partial}{\partial x_i}[\hat{P}_i(\boldsymbol{r},t),\hat{A}_j(\boldsymbol{r}',t)] = \epsilon_0[\nabla \cdot \hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t),\hat{A}_j(\boldsymbol{r}',t)] = 0.$$

但是在另一方面，$\delta_{ij}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ 对于 $\boldsymbol{r}$ 的散度并不为 0，

$$\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i}\delta_{ij}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p^j \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')/\hbar} \neq 0.$$

所以，我们需要引入如下无散度 δ 函数

$$\delta^{\mathrm{tr}}_{ij}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \equiv \int \frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^3}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')/\hbar}\left[\delta_{ij} - \frac{p_i p_j}{p^2}\right],$$

而把对易关系(25)修改为

$$[\hat{A}_i(\boldsymbol{r},t),\hat{P}^j(\boldsymbol{r}',t)] = \mathrm{i}\hbar\delta^{\mathrm{tr}}_{ij}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \tag{26}$$

这个修改来自多余的非物理自由度，是技术性的. 在下面我们将要看到，在动量表象中只用横场的算符，得到的对易关系正是正则量子化给出的 Bose 子产生与消灭算符的对易关系.

这个对易关系除了与 $\nabla \cdot \boldsymbol{E}=0$ 相容以外，也要求 $\nabla \cdot \boldsymbol{A}$ 与所有的算符对易. 这就表明，$\nabla \cdot \boldsymbol{A}$ 与 A_0 确实都不是动力学变量. 通过适当的规范变换，可以使它们成为 0，而不出现在理论中[①]. 这就意味着是选择了辐射规范. 这样做，虽然失去了理论在形式上的相对论协变性，但优点是在理论的表述中只出现辐射场的两个横向自由度.

动量表象 在辐射规范里，$\boldsymbol{A}$ 满足的波动方程是

$$\partial_\mu \partial^\mu \boldsymbol{A} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2} - \nabla^2 \boldsymbol{A} = 0.$$

它也有 de Broglie 平面波解(4)，只是在上述方程中没有质量项，

---

① J. D. Bjorken & S. D. Drell, *Relativistic Quantum Fields*, McGraw-Hill, 1965.

它的能量动量关系是 $E=\pm E_p$，

$$E_p = pc.$$

于是，与实标量场类似地，我们可以把 $\hat{A}$ 展开成

$$\hat{A}(\boldsymbol{r},t)=\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{\hbar}{\sqrt{2\epsilon_0E_p}}\cdot\boldsymbol{e}_p^i[\hat{a}_{pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}+\hat{a}_{pi}^\dagger\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}],\qquad(27)$$

其中 $\boldsymbol{e}_p^i$是第 3 轴沿 $\boldsymbol{p}$ 方向的坐标架的 3 个单位矢量，

$$\boldsymbol{e}_p^i\cdot\boldsymbol{e}_p^j=\delta_{ij}.$$

在辐射规范中，$\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0$，在(27)式中对 i 的求和只有与 $i=1$ 和 2 相应的两个横场的分量，与纵场相联系的 $\boldsymbol{e}_p^3$不出现. 此外，我们约定

$$\boldsymbol{e}_{-p}^1=-\boldsymbol{e}_p^1,\quad \boldsymbol{e}_{-p}^2=\boldsymbol{e}_p^2.$$

由 $\boldsymbol{P}=\epsilon_0\boldsymbol{E}=-\epsilon_0\dot{\boldsymbol{A}}$和(27)式，可以得到

$$\hat{\boldsymbol{P}}(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\sqrt{\frac{\epsilon_0E_p}{2}}\boldsymbol{e}_p^i[\hat{a}_{pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}-\hat{a}_{pi}^\dagger\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}].\qquad(28)$$

从(27)与(28)式可以解出

$$\hat{a}_{pi}=\frac{1}{2}\int\frac{\mathrm{d}^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\boldsymbol{e}_p^i\cdot\left[\frac{\sqrt{2\epsilon_0E_p}}{\hbar}\hat{A}(\boldsymbol{r},t)-\mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\epsilon_0E_p}}\hat{P}(\boldsymbol{r},t)\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar},$$

$$\hat{a}_{pi}^\dagger=\frac{1}{2}\int\frac{\mathrm{d}^3r}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\boldsymbol{e}_p^i\cdot\left[\frac{\sqrt{2\epsilon_0E_p}}{\hbar}\hat{A}(\boldsymbol{r},t)+\mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\epsilon_0E_p}}\hat{P}(\boldsymbol{r},t)\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}.$$

利用场算符的对易关系(24)与(26)式，从上述表达式我们可以推出算符 $\hat{a}_{pi}$与 $\hat{a}_{pi}^\dagger$的下列对易关系：

$$[\hat{a}_{pi},\hat{a}_{p'j}]=0,\quad [\hat{a}^{\dagger}_{pi},\hat{a}^{\dagger}_{p'j}]=0,\quad [\hat{a}_{pi},\hat{a}^{\dagger}_{p'j}]=\delta_{ij}\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}').$$

这是在动量本征态的 Bose 子产生和消灭算符的对易关系，$i=1$ 与 2 相应于粒子的两个不同的偏振态. 把(27)式代入 Hamilton 算符的式子，可以推出

$$\hat{H}=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\hat{\mathscr{H}}=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\frac{1}{2\mu_0}\left[\frac{1}{c^2}(\dot{\hat{\boldsymbol{A}}})^2+(\nabla\times\hat{\boldsymbol{A}})^2\right]$$
$$=\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\sum_{i=1}^{2}E_p\left\{\hat{a}^{\dagger}_{pi}\hat{a}_{pi}+\frac{1}{2}\delta(0)\right\}.$$

与标量场类似地，可以把零点能去掉. 上式表明，**电磁场的能量是量子化的，电磁场的粒子光子是 Bose 子，具有两个不同的偏振态，每个光子携带能量 $E_p=pc$.** 类似的讨论还可以表明**每个光子携带动量 $\boldsymbol{p}$**，从而，**光子没有质量，以光速运动.**

§8.3 旋 量 场

1. 旋量场的 Lagrange 密度与观测量密度

旋量场的 Lagrange 密度 我们可以把 Dirac 旋量场的 Lagrange 密度写成

$$\mathscr{L}=c\,\bar{\psi}(\mathrm{i}\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-mc)\psi. \tag{29}$$

它的 Euler-Lagrange 方程给出自由粒子的 Dirac 方程

$$(\mathrm{i}\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-mc)\psi=0,$$

其共轭方程为

$$\mathrm{i}\hbar(\partial_{\mu}\bar{\psi})\gamma^{\mu}+mc\,\bar{\psi}=0.$$

把满足上述运动方程的 ψ 代入(29)式，有

$$\mathscr{L}=c\,\bar{\psi}(\mathrm{i}\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu}-mc)\psi=0.$$

所以，**自由旋量场的 Lagrange 密度对于真实的场量等于 0.** 这意味着作用量积分在 $\mathscr{L}=0$ 时达到极值.

旋量场的观测量密度 从 Lagrange 密度(29)，我们可以算出

与场的正则坐标 ψ 和 $\psi^\dagger$ 共轭的正则动量分别是

$$\pi_\psi = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\psi}} = \mathrm{i}\hbar\bar{\psi}\gamma^0 = \mathrm{i}\hbar\psi^\dagger,$$

$$\pi_{\psi^\dagger} = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\psi}^\dagger} = 0,$$

这意味着我们不能把 ψ 与 $\psi^\dagger$ 都作为独立的正则坐标. 在事实上，它们是互为共轭的. 一个是正则坐标，另一个就正比于与其共轭的正则动量. 只要当 Lagrange 密度对 $\dot{\psi}$ 是 1 阶时，就会出现这种情况.

由于 $\mathscr{L}=0$，自由旋量场的 Hamilton 密度为

$$\mathscr{H} = \pi_\psi\dot{\psi} - \mathscr{L} = \pi_\psi\dot{\psi} = \psi^\dagger\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi$$

$$= \psi^\dagger(-\mathrm{i}\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + mc^2\beta)\psi.$$

上述圆括号中的量，正是自由粒子 Dirac 方程的 Hamilton 算符. 类似地，还可以写出旋量场的动量密度

$$\mathscr{P} = \psi^\dagger(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\psi,$$

以及守恒荷密度

$$\mathscr{Q} = q\psi^\dagger\psi.$$

如果把 ψ 与 $\psi^\dagger$ 换成算符，上述 $\mathscr{H}$，$\mathscr{P}$ 与 $\mathscr{Q}$ 就与二次量子化理论中的 Hamilton 密度算符、动量密度算符与电荷密度算符相同（见第七章 §7.4）. 下面我们就来讨论旋量场的量子化.

2. 旋量场的量子化

正则量子化的困难 把旋量 ψ 及其厄米共轭 $\psi^\dagger$ 换成算符 $\hat{\psi}$ 与 $\hat{\psi}^\dagger$，我们就可以得到量子化的旋量场. 按照正则量子化规则，注意与正则坐标 $\hat{\psi}$ 共轭的正则动量是 $\mathrm{i}\hbar\hat{\psi}^\dagger$，就可以写出旋量场算符的对易关系

$$[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r},t),\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{r}',t)] = 0, \quad [\hat{\psi}^\dagger_\alpha(\boldsymbol{r},t),\hat{\psi}^\dagger_\beta(\boldsymbol{r}',t)] = 0,$$

$$[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r},t),\hat{\psi}_\beta^\dagger(\boldsymbol{r}',t)]=\delta_{\alpha\beta}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \tag{30}$$

其中 $\alpha,\beta=1,2,3,4$ 是 Dirac 旋量的 4 个分量的指标.

可以看出，(30)式是在坐标表象中 Bose 子的产生、消灭算符的对易关系，体系的态矢量对两个粒子的交换不变，t 时刻在 $\boldsymbol{r}$ 处的粒子数密度算符 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r},t)\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)$的本征值不受限制. 这与实验不符. 迄今为止的实验表明自旋 $s=1/2$ 的粒子是 Fermi 子，遵从 Pauli 不相容原理和 Fermi-Dirac 统计(见第三章 § 3.7).

除了与实验不符外，(30)式还会导致非物理的结果. 为了看出这一点，我们换到动量表象. 上面已经指出，$\hat{\psi}$ 满足自由粒子的 Dirac 方程，所以我们可以用自由粒子的平面波解把它及其厄米共轭展开为

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)&=\sum_\xi\int\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}[u(\boldsymbol{p},\xi)\hat{c}_{\boldsymbol{p}\xi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}\\&\qquad+v(\boldsymbol{p},\xi)\hat{d}^\dagger_{\boldsymbol{p}\xi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}],\\\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r},t)&=\sum_\xi\int\frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}[u^\dagger(\boldsymbol{p},\xi)\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{p}\xi}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}\\&\qquad+v^\dagger(\boldsymbol{p},\xi)\hat{d}_{\boldsymbol{p}\xi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}].\end{aligned}\tag{31}$$

利用 Dirac 旋量 $u(\boldsymbol{p},\xi)$与 $v(\boldsymbol{p},\xi)$的正交归一化关系(见第五章 § 5.2)，从它们可以解出

$$\hat{c}_{\boldsymbol{p}\xi}=\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}u^\dagger(\boldsymbol{p},\xi)\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar},$$

$$\hat{d}^\dagger_{\boldsymbol{p}\xi}=\int\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}v^\dagger(\boldsymbol{p},\xi)\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}.$$

再利用场算符的对易关系(30)，可以推出下列在动量表象中的 Bose 子对易关系：

$$[\hat{c}_{\boldsymbol{p}\xi},\hat{c}_{\boldsymbol{p}'\xi'}]=0,\quad[\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{p}\xi},\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{p}'\xi'}]=0,$$

$$[\hat{c}_{\boldsymbol{p}\xi},\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{p}'\xi'}]=\delta_{\xi\xi'}\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'),$$

$$[\hat{d}_{\boldsymbol{p}\xi},\hat{d}_{\boldsymbol{p}'\xi'}]=0,\quad[\hat{d}^\dagger_{\boldsymbol{p}\xi},\hat{d}^\dagger_{\boldsymbol{p}'\xi'}]=0,$$

$$[\hat{d}_{\boldsymbol{p}\xi},\hat{d}^\dagger_{\boldsymbol{p}'\xi'}]=-\delta_{\xi\xi'}\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'),$$

$$[\hat{c}_{p\epsilon},\hat{d}_{p'\epsilon'}]=0,\quad [\hat{c}^\dagger_{p\epsilon},\hat{d}^\dagger_{p'\epsilon'}]=0,$$
$$[\hat{c}_{p\epsilon},\hat{d}^\dagger_{p'\epsilon'}]=0,\quad [\hat{c}^\dagger_{p\epsilon},\hat{d}_{p'\epsilon'}]=0. \tag{32}$$

把场算符的展开式(31)代入 Hamilton 密度算符的表达式，可以得到

$$\hat{H}=\int d^3r\hat{\mathscr{H}}=\int d^3r\hat{\psi}^\dagger(r,t)\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(r,t)$$
$$=\sum_\epsilon\int d^3pE_p(\hat{c}^\dagger_{p\epsilon}\hat{c}_{p\epsilon}-\hat{d}_{p\epsilon}\hat{d}^\dagger_{p\epsilon}). \tag{33}$$

上面圆括号中的第二项是负的，这就使得体系的总能量成为非正定的. 对于自由场的能量，这个结果是非物理和不能接受的. 为了避免这种结果，我们不得不放弃正则量子化(30)，而寻求另外的量子化.

Jordan-Wigner 量子化 如果把场算符的对易关系(30)换成下列 Jordan-Wigner 反对易关系

$$\{\hat{\psi}_\alpha(r,t),\hat{\psi}_\beta(r',t)\}=0,\quad \{\hat{\psi}^\dagger_\alpha(r,t),\hat{\psi}^\dagger_\beta(r',t)\}=0,$$
$$\{\hat{\psi}_\alpha(r,t),\hat{\psi}^\dagger_\beta(r',t)\}=\delta_{\alpha\beta}\delta(r-r'), \tag{34}$$

重复上述推导，我们就可以得到下列在动量表象中的 Fermi 子反对易关系：

$$\{\hat{c}_{p\epsilon},\hat{c}_{p'\epsilon'}\}=0,\quad \{\hat{c}^\dagger_{p\epsilon},\hat{c}^\dagger_{p'\epsilon'}\}=0,$$
$$\{\hat{c}_{p\epsilon},\hat{c}^\dagger_{p'\epsilon'}\}=\delta_{\epsilon\epsilon'}\delta(p-p'),$$
$$\{\hat{d}_{p\epsilon},\hat{d}_{p'\epsilon'}\}=0,\quad \{\hat{d}^\dagger_{p\epsilon},\hat{d}^\dagger_{p'\epsilon'}\}=0,$$
$$\{\hat{d}_{p\epsilon},\hat{d}^\dagger_{p'\epsilon'}\}=\delta_{\epsilon\epsilon'}\delta(p-p'),$$
$$\{\hat{c}_{p\epsilon},\hat{d}_{p'\epsilon'}\}=0,\quad \{\hat{c}^\dagger_{p\epsilon},\hat{d}^\dagger_{p'\epsilon'}\}=0,$$
$$\{\hat{c}_{p\epsilon},\hat{d}^\dagger_{p'\epsilon'}\}=0,\quad \{\hat{c}^\dagger_{p\epsilon},\hat{d}_{p'\epsilon'}\}=0. \tag{35}$$

由于场算符是反对易的，在 Hamilton 算符的表达式(33)中，圆括号内的第二项可以用上述反对易关系改写成正的，

$$\hat{H}=\sum_\epsilon\int d^3pE_p\{\hat{c}^\dagger_{p\epsilon}\hat{c}_{p\epsilon}+\hat{d}^\dagger_{p\epsilon}\hat{d}_{p\epsilon}-\delta(0)\}, \tag{36}$$

其中 $\delta(0)$ 是场的零点能，与标量场和电磁场类似地可以把它去掉。于是，对旋量场采取 Jordan-Wigner 反对易关系量子化，自由场的总能量就是正定的。同时，Jordan-Wigner 反对易关系(34)与(35)是 Fermi 子产生消灭算符的反对易关系，它保证了体系的态矢量在两个粒子的交换下变号，是反对称的，在同一个单粒子态上最多只能填 1 个粒子，满足 Pauli 不相容原理。

粒子与反粒子 除了场的 Hamilton 算符 $\hat{H}$，我们还可以计算场的总动量算符 $\hat{P}$ 和总守恒荷算符 $\hat{Q}$，分别得到

$$\begin{aligned}\hat{P} &= \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \hat{\mathscr{P}} = \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \hat{\psi}^\dagger (\boldsymbol{r},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t) \\ &= \sum_\epsilon \int \mathrm{d}^3 p \boldsymbol{p} (\hat{c}^\dagger_{p\epsilon}\hat{c}_{p\epsilon} - \hat{d}_{p\epsilon}\hat{d}^\dagger_{p\epsilon}),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{Q} &= \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \hat{\mathscr{Q}} = \int \mathrm{d}^3 \boldsymbol{r} \hat{\psi}^\dagger (\boldsymbol{r},t)\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t) \\ &= \sum_\epsilon \int \mathrm{d}^3 p q (\hat{c}^\dagger_{p\epsilon}\hat{c}_{p\epsilon} + \hat{d}_{p\epsilon}\hat{d}^\dagger_{p\epsilon}).\end{aligned}$$

可以看出，如果采用正则量子化(30)与(32)式，则分别由 $(\hat{c}_{p\epsilon},\hat{c}^\dagger_{p\epsilon})$ 和 $(\hat{d}_{p\epsilon},\hat{d}^\dagger_{p\epsilon})$ 描述的两种粒子电荷相同动量相反，是同一种粒子。而采用 Jordan-Wigner 反对易关系(34)与(35)量子化，则旋量场的这两种粒子动量相同电荷相反，一种是正粒子，另一种就是反粒子。在这个意义上，Jordan-Wigner 量子化还保持了与单粒子 Dirac 方程相一致的物理诠释。而我们在上一章结束时已经指出，量子场论的结果在粒子数本征值等于 1 时应该与单粒子量子力学一致，这是我们在建造场的量子理论时应该遵循的一个基本的原则。

Jordan-Wigner 量子化与测不准原理 从形式上看，Jordan-Wigner 量子化(34)式不同于正则量子化(30)式。不过，这种不同只是在数学和形式上，不是在物理上，这当中并不包含新的物理原理。

测不准原理是关于物理观测量的原理，而描述物理观测量的算符必须是厄米算符(见第一章§1.3)。实标量场与电磁场的场算符都是厄米的。复标量场可以分解为两个实标量场，分别描述电荷

不同的两种粒子. 所以,我们对它们写出的正则量子化对易关系,确实是关于物理观测量的对易关系.

旋量场的情形不同. 旋量场的算符 $\hat{\psi}$ 与 $\hat{\psi}^{\dagger}$ 不是厄米的,它们并不代表物理观测量. 所以, Jordan-Wigner 量子化的反对易关系(34)并不是关于物理观测量的,它与测不准原理并不冲突. 或者反过来说,测不准原理并不意味着必须有对易关系(30)而不能有反对易关系(34). 事实上,旋量场的物理观测量,都可以表示为旋量的双线性型,两个相容观测量的算符,仍然是对易的. 在下一节,我们要对这一点作进一步的讨论.

§ 8.4 微观因果性原理

1. 协变对易关系和反对易关系

前面对标量场和电磁场给出的对易关系(6),(15),(24)和(26),以及旋量场的反对易关系(34),都是在同一个时刻 t 的场算符之间的关系,不是相对论协变的. 为了本节的讨论,我们需要与它们相应的具有相对论协变性的关系. 下面我们分别给出标量场的协变对易关系和旋量场的协变反对易关系. 电磁场的协变对易关系与标量场的类似,我们就不具体写出.

标量场的协变对易关系 对于实标量场,我们来计算

$$[\hat{\phi}(x), \hat{\phi}(x')] = \mathrm{i}\hbar\Delta(x - x'), \tag{37}$$

其中 x 是 (x^0, x^1, x^2, x^3) 的简写. 利用展开式(9)和(10)以及对易关系(11),可以算得

$$\begin{aligned}\Delta(x - x') &= -\mathrm{i}\hbar\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{2E_p} \\ &\quad\cdot\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[E_p(t-t')-\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]/\hbar} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}[E_p(t-t')-\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]/\hbar}\} \\ &= -\mathrm{i}\hbar\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\mathrm{d}p^0}{c}\bar{\varepsilon}(p^0)\delta(p_\mu p^\mu - m^2c^2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_\mu(x^\mu - x'^\mu)},\end{aligned} \tag{38}$$

其中

$$\int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{2E_p} = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3}\frac{dp^0}{c}\delta(p_\mu p^\mu - m^2c^2)\varepsilon(p^0),$$

$\varepsilon(\xi)$是在第二章§2.1中定义的阶跃函数，而 $\bar{\varepsilon}(\xi)=\varepsilon(\xi)-\varepsilon(-\xi)$ 是下列阶跃函数：

$$\bar{\varepsilon}(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi > 0, \\ -1, & \xi < 0. \end{cases}$$

由于场算符 $\hat{\phi}(x)$满足 Klein-Gordon 方程，从(37)式我们可以推知函数 $\Delta(x-x')$也是 Klein-Gordon 方程的解，并且是其宗量的奇函数：

$$(\partial_\mu\partial^\mu + \kappa^2)\Delta(x-x') = 0, \quad \Delta(x'-x) = -\Delta(x-x').$$

此外，由于 $\bar{\varepsilon}(p^0)$对类时间隔 $p_\mu p^\mu>0$ 在 Lorentz 变换下不变，对易函数 $\Delta(x)$从而对易关系(37)具有相对论协变性，在 Lorentz 变换下不变. 在等时的情况，$t=t'$，从(38)式可以看出

$$\Delta(\boldsymbol{r},0) = 0,$$

对易关系(37)成为(6)中的第一式. 而由于 $\Delta(x-x')$在 Lorentz 变换下不变，我们可以推知上式对于所有由类空间隔分开的两点 x 与 x' 也成立：

$$\Delta(x-x') = 0, \quad (x-x')^2 < 0, \tag{39}$$

其中$(x-x')^2$ 是$(x_\mu-x'_\mu)(x^\mu-x'^\mu)$的简写. 从(38)式我们还可以推出当 $t=t'$时有

$$\frac{\partial}{\partial t}\Delta(x-x')\big|_{t=t'} = -\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'),$$

于是从(37)式我们还可以得到(6)中的第三式.

对复标量场，类似地我们可以得到

$$[\hat{\phi}(x),\hat{\phi}(x')] = 0, \quad [\hat{\phi}^\dagger(x),\hat{\phi}^\dagger(x')] = 0,$$

$$[\hat{\phi}(x),\hat{\phi}^\dagger(x')] = i\hbar\Delta(x-x').$$

若把复标量场表示为两个实标量场 $\hat{\phi}_1$ 与 $\hat{\phi}_2$ 的组合，

$$\hat{\phi}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\phi}_1+\mathrm{i}\,\hat{\phi}_2),\quad \hat{\phi}^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\phi}_1-\mathrm{i}\,\hat{\phi}_2),$$

则有

$$[\hat{\phi}_i(x),\hat{\phi}_j(x')]=\mathrm{i}\,\hbar\delta_{ij}\Delta(x-x'),\quad i,j=1,2. \tag{40}$$

旋量场的协变反对易关系　为了计算 Dirac 旋量场的协变反对易关系，我们先来推导几个关于旋量的公式. 首先，从旋量 $w(E,\boldsymbol{p},\xi)$ 的方程（见第五章 § 5. 2）

$$(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+\beta mc^2-E)w=0,$$

及其共轭旋量 $\overline{w}=w^{\dagger}\gamma^0$ 的方程

$$\overline{w}(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}-\beta mc^2+E)=0,$$

用 w 从右边乘上式，并利用 w 的方程，有

$$\begin{aligned}&\overline{w}(E,\boldsymbol{p},\xi)(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}-\beta mc^2+E)w(E,\boldsymbol{p},\xi')\\&\quad=2\overline{w}(E,\boldsymbol{p},\xi)(E-\beta mc^2)w(E,\boldsymbol{p},\xi')=0,\end{aligned}$$

于是有

$$\overline{w}(E,\boldsymbol{p},\xi)w(E,\boldsymbol{p},\xi')=\frac{mc^2}{E}w^{\dagger}(E,\boldsymbol{p},\xi)w(E,\boldsymbol{p},\xi').$$

对于正能解和负能解分别写出来，就可以得到下列归一化关系：

$$\overline{u}(\boldsymbol{p},\xi)u(\boldsymbol{p},\xi')=\frac{mc^2}{E_p}u^{\dagger}(\boldsymbol{p},\xi)u(\boldsymbol{p},\xi')=\frac{mc^2}{E_p}\delta_{\xi\xi'},$$

$$\overline{v}(\boldsymbol{p},\xi)v(\boldsymbol{p},\xi')=-\frac{mc^2}{E_p}v^{\dagger}(\boldsymbol{p},\xi)v(\boldsymbol{p},\xi')=-\frac{mc^2}{E_p}\delta_{\xi\xi'}.$$

其次，我们定义 P_+ 和 P_-，

$$P_+=\sum_{\xi}u(\boldsymbol{p},\xi)\overline{u}(\boldsymbol{p},\xi),\quad P_-=\sum_{\xi}v(\boldsymbol{p},\xi)\overline{v}(\boldsymbol{p},\xi).$$

利用上述归一化关系以及正能解与负能解的正交关系，可以得到

$$(P_+)^2=\frac{mc^2}{E_p}P_+,\quad (P_-)^2=-\frac{mc^2}{E_p}P_-,\quad P_+P_-=P_-P_+=0. \tag{41}$$

另一方面，我们可以一般地写出

$$P_{\pm}=a_{\pm}+b_{\pm}\gamma_{\mu}p^{\mu}.$$

利用上述关系(41),可以定出系数 $a_\pm$ 和 $b_\pm$,从而得到

$$P_\pm = \frac{c}{2E_p}(\gamma_\mu p^\mu \pm mc).$$

最后,利用展开式(31)和反对易关系(35),以及上述公式,我们可以算得

$$\{\hat{\psi}_\alpha(x),\hat{\psi}_\beta(x')\} = 0, \quad \{\hat{\bar{\psi}}_\alpha(x),\hat{\bar{\psi}}_\beta(x')\} = 0,$$

$$\{\hat{\psi}_\alpha(x),\hat{\bar{\psi}}_\beta(x')\} = -\mathrm{i}\,\frac{c}{\hbar}S_{\alpha\beta}(x-x'), \tag{42}$$

其中

$$S_{\alpha\beta}(x-x') = (\mathrm{i}\,\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)_{\alpha\beta}\Delta(x-x').$$

2. 微观因果性原理及两个有关的问题

微观因果性原理 如果用连续的时空坐标$(t,\boldsymbol{r})$作为描述系统的参数,讨论一个场论模型,并要求理论的表述不依赖于惯性参考系的选择,在 Lorentz 变换下不变,我们就要求系统的相互作用在时空中的传播速度不大于光速 c. 按照这个要求,*在类空间隔分开的两点上,场的物理观测量一定是相容的*. 这是因为,由类空间隔分开的两点不能用光信号相联系,在这两点上进行的任何测量是互不相干的. 这个要求称为*微观因果性原理*.

场的物理观测量,例如前面讨论过的场的能量,动量,电荷,等等,一般来说都可以表示成场量的双线性型,

$$\hat{O} = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\hat{\mathscr{O}}(\boldsymbol{r},t),$$

$$\hat{\mathscr{O}}(x) = \hat{\varphi}_r(x)\hat{\varphi}_s(x),$$

其中 $\hat{\varphi}_r(x)$ 和 $\hat{\varphi}_s(x)$ 对于标量场代表 $\hat{\phi}$ 和 $\hat{\phi}^\dagger$ 以及它们的组合,对于旋量场代表旋量 $\hat{\psi}$ 和 $\hat{\psi}^\dagger$ 的各种分量的组合.

根据微观因果性原理和测不准定理,在类空间隔分开的两点上,场的观测量算符 $\hat{\mathscr{O}}(x)$ 必须互相对易:

$$[\hat{\mathscr{O}}(x),\hat{\mathscr{O}}(x')] = 0, \quad (x-x')^2 < 0. \tag{43}$$

这个条件称为微观因果性条件.一个场的算符,必须满足这个微观因果性条件,由它描述的场才具有确定的物理含义.

容易看出,如果在类空间隔分开的两点上场的算符 $\hat{\varphi}(x)$ 对易或反对易,则微观因果性条件(43)成立.更确切地说,微观因果性条件(43)成立的一般条件是

$$[\hat{\varphi}_r(x), \hat{\varphi}_s(x')] = 0, \quad (x - x')^2 < 0.$$

或

$$\{\hat{\varphi}_r(x), \hat{\varphi}_s(x')\} = 0, \quad (x - x')^2 < 0.$$

对于实标量场,场算符 $\hat{\phi}(x)$ 是厄米的,它本身就是物理观测量.从(37)式和(39)式,我们确实有

$$[\hat{\phi}(x), \hat{\phi}(x')] = 0, \quad (x - x')^2 < 0.$$

复标量场可以用两个实标量场来表示,它们分别都满足上述条件.

对于 Dirac 旋量场,除了(42)中前二式

$$\{\hat{\psi}_\alpha(x), \hat{\psi}_\beta(x')\} = 0, \quad \{\hat{\bar{\psi}}_\alpha(x), \hat{\bar{\psi}}_\beta(x')\} = 0,$$

从(39)式与(42)中第三式我们还有

$$\{\hat{\psi}_\alpha(x), \hat{\bar{\psi}}_\beta(x')\} = 0, \quad (x - x')^2 < 0,$$

这是因为 $\Delta(x-x')$ 对所有类空间隔都为 0,所以

$$S_{\alpha\beta}(x - x') = (\mathrm{i}\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)_{\alpha\beta}\Delta(x - x') = 0,$$

$$(x - x')^2 < 0.$$

下面我们来讨论可以从微观因果性条件(43)得出的两个重要的物理结论.

自旋与统计的关系 前面已经指出,用正则对易关系量子化的标量场满足微观因果性条件(43),用 Jordan-Wigner 反对易关系量子化的旋量场也满足微观因果性条件(43).现在我们来表明,如果对标量场用 Jordan-Wigner 反对易关系量子化,对旋量场用正则对易关系量子化,则不能满足微观因果性条件(43).

实际上,把对易关系(11)换成相应的反对易关系,重复上一小

节对(37)式的推导,我们就得到

$$\{\hat{\phi}(x),\hat{\phi}(x')\} = \hbar\Delta_1(x-x'), \tag{44}$$

其中

$$\Delta_1(x-x') = \hbar\int\frac{\mathrm{d}^3p}{(2\pi\hbar)^3}\frac{1}{2E_p}\{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[E_p(t-t')-\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]/\hbar}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}[E_p(t-t')-\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')]/\hbar}\}.$$

类似地,把反对易关系(35)换成相应的对易关系,重复上一小节对(42)式的推导,我们可以算得

$$[\hat{\psi}_\alpha(x),\bar{\hat{\psi}}_\beta(x')] = -\frac{c}{\hbar}S_{1\alpha\beta}(x-x'), \tag{45}$$

其中

$$S_{1\alpha\beta}(x-x') = (\mathrm{i}\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)_{\alpha\beta}\Delta_1(x-x').$$

$\Delta_1(x-x')$也满足 Klein-Gordon 方程,但是对于类空间隔$(x-x')^2<0$ 它不等于 0,

$$\Delta_1(x-x')\neq 0,\quad (x-x')^2<0.$$

实际上,当类空间隔大于粒子的约化 Compton 波长 $\lambda=\hbar/mc$ 时,有

$$\Delta_1(x-x')\sim\frac{1}{-(x-x')^2}\mathrm{e}^{-\sqrt{-(x-x')^2}/\lambda},\quad -(x-x')^2>\lambda^2.$$

所以,(44)和(45)式不满足微观因果性条件(43).

我们所讨论的场论模型,是定义在空间点上的定域场论模型.所以,**根据相对论的微观因果性原理和定域场论模型,对标量场只能采取对易关系的正则量子化,对 Dirac 旋量场只能采取反对易关系的 Jordan-Wigner 量子化.** 标量场的自旋为 0 或正整数.对易关系描述的粒子是 Bose 子,遵从 Bose-Einstein 统计法. Dirac 旋量场的自旋为 1/2,反对易关系描述的粒子是 Fermi 子,遵从 Fermi-Dirac 统计法,而所有半奇数自旋的场都可以看成是由 Dirac 旋量场复合而成.因此,上述结论也就是说,**根据相对论的微观因果性原理和定域场论模型,自旋为 0 或正整数的粒子是 Bose**

子，遵从 Bose-Einstein 统计法，自旋为半奇数的粒子是 Fermi 子，遵从 Fermi-Dirac 统计法.

在实验上，对于已经研究过的所有粒子，自旋和统计性质之间的这种关系都已得到证实. 自旋为 1/2 的粒子，如电子、质子和中子，都遵从 Fermi-Dirac 统计法，而自旋为 1 的光子遵从 Bose-Einstein 统计法①. 其他粒子的统计性质尚未确实判定，但有很强的证据表明自旋为 0 的 π 介子遵从 Bose-Einstien 统计法②.

在理论上，关于粒子自旋与统计性质之间的关系，上述论证是迄今为止我们所知道的最深层次的解释. 而这个解释的依据，只是最普遍的相对论原理和量子力学的测不准定理，以及量子场的定域性③. 而根据微观因果性原理，我们对于量子场的定域性也可以获得更深入的了解. 下面就来讨论这个问题.

量子场的定域性与粒子的定域性 在定域场论模型中，我们引进的场算符是定义在空间点 $\boldsymbol{r}$ 上的定域的算符. 而要这种定义有意义，它们就必须满足微观因果性条件. 反过来说，微观因果性条件给出了定域场论适用和有意义的范围和限制. 在理论原则上，微观因果性条件(43)应该对所有的类空间隔都成立，不管间隔有多小. 为此，我们必须假定场的算符在无限小的点上有定义. 在这个意义上，前面的讨论给出了破坏微观因果性条件的空间范围是粒子约化 Compton 波长的尺度. 而在另一方面，对于作为场的量子的粒子，我们对它的定域性进行分析，也得到这个尺度的限制. 下面我们就来对粒子的定域性作一个简单的分析.

我们已经指出，上一章讨论的二次量子化，在实质上也是一种场的量子化. 那是一种非相对论的场，我们可以把它称为 Schrödinger 场. 对于 Schrödinger 场，我们既可以采取对易关系的正则量子化，也可以采取反对易关系的 Jordan-Wigner 量子化. 而

---

① H. A. Bethe and R. F. Bacher, *Rev. Mod. Phys.* **8** (1936) 82.

② A. M. L. Messiah and O. W. Greenberg, *Phys. Rev.* **136** (1964) B248.

③ W. Pauli, *Phys. Rev.* **58** (1940) 716.

且,我们可以在坐标表象中给出在空间完全定域的粒子数表象和相应的各种观测量. 例如,我们可以定义在单粒子态$|\boldsymbol{r}\rangle$上的粒子数密度算符$\hat{\mathscr{N}}(\boldsymbol{r})$:

$$\hat{\mathscr{N}}(\boldsymbol{r}) = \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r})\hat{\psi}(\boldsymbol{r}).$$

这个定义有意义的前提,是它在空间不同位置的测量是相容的,

$$[\hat{\mathscr{N}}(\boldsymbol{r}), \hat{\mathscr{N}}(\boldsymbol{r}')] = 0. \tag{46}$$

无论$\hat{\psi}$与$\hat{\psi}^{\dagger}$是遵从 Bose 子的对易关系还是 Fermi 子的反对易关系,都很容易证明上式成立. 这就意味着,在非相对论的情形,测量一个粒子的空间位置的精度在原则上没有限制,粒子在空间是完全定域的. 这一点已经包含在 Heisenberg 测不准原理的表述之中.

相对论的场不同. 在相对论的场论中,场量子的定域性受到某种内在的限制. 例如,对于实标量场$\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t)$,我们可以尝试找出满足下式的$\hat{\mathscr{N}}(\boldsymbol{r})$:

$$\hat{N} = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,\mathscr{N}(\boldsymbol{r}) = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{p}\,\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}.$$

实际上,我们可以把(9)式改写成

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t) = \hat{\phi}^{(+)}(\boldsymbol{r},t) + \hat{\phi}^{(-)}(\boldsymbol{r},t),$$

其中$\hat{\phi}^{(+)}(\boldsymbol{r},t)$与$\hat{\phi}^{(-)}(\boldsymbol{r},t)$分别是场算符$\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t)$的正能与负能部分

$$\hat{\phi}^{(+)}(\boldsymbol{r},t) = \int \frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{\hbar}{\sqrt{2E_p}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_p t-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}\hat{a}_{\boldsymbol{p}},$$

$$\hat{\phi}^{(-)}(\boldsymbol{r},t) = \int \frac{\mathrm{d}^3\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{\hbar}{\sqrt{2E_p}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_p t-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^{\dagger}.$$

于是我们可以写出定域的厄米算符

$$\hat{\mathscr{N}}(\boldsymbol{r}) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\hat{\phi}^{(-)}(\boldsymbol{r},t)\frac{\partial}{\partial t}\hat{\phi}^{(+)}(\boldsymbol{r},t) - \frac{\partial}{\partial t}(\hat{\phi}^{(-)}(\boldsymbol{r},t))\hat{\phi}^{(+)}(\boldsymbol{r},t)\right].$$

但是，这个 $\mathscr{N}(\boldsymbol{r})$ 不满足(46)式. 实际上，详细的分析表明①，

$$[\hat{\mathscr{N}}(\boldsymbol{r}),\hat{\mathscr{N}}(\boldsymbol{r}')]\to\begin{cases}\infty, & |\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\to 0,\\ 0, & |\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|>\lambda,\end{cases}$$

其中 $\lambda=\hbar/mc$ 是粒子的约化 Compton 波长. 这就意味着，在空间两点上的粒子数密度不能同时测定，除非它们之间的距离大于粒子的约化 Compton 波长 $\hbar/mc$. 特别是，我们不能测定空间线度小于粒子约化 Compton 波长的范围内的粒子数.

在物理上，造成这种情形的原因在于，为了使得测量粒子位置的精度高于粒子的约化 Compton 波长，我们必须使用波长小于粒子约化 Compton 波长的外场. 这种波长小于粒子约化 Compton 波长的外场，其能量高到可以产生与被测量的粒子相同的新的粒子，而这种新产生的粒子与原来的粒子是不可分辨的. 相对论与量子力学相结合，对测量粒子位置的精度给出了一个内在的限制. 这个限制是在 Heisenberg 测不准原理之外的一个进一步的限制，它表明，现有的量子力学理论只是在大于粒子约化 Compton 波长的时空范围内才能为我们提供充分和自洽的物理描述，而在多小的时空尺度需要对理论作出定量的修正，则是必须由实验来回答的问题.

相对论与量子力学相结合对微观物理给出的另一重要论断，是关于空间坐标作为单个粒子观测量的可能性. 我们引进 Dirac 方程的推理，是在坐标表象中进行的. 这里隐含了一个假设：空间坐标是粒子的观测量. 对于有经典对应的系统，这个假设是自然成立的. 根据第五章的推理，有空间坐标的基本粒子必定是 Fermi 子，其自旋为 $\hbar$ 的半奇数倍. 反过来说，自旋为 0 或 $\hbar$ 的整数倍的 Bose 子不满足这个推理的前提，单个 Bose 子的系统没有经典对应，空间坐标不是单个 Bose 子的观测量. 对于单个 Bose 子来说，

---

① E. M. Henley and W. Thirring, *Elementary Quantum Field Theory*, McGraw-Hill, 1962.

没有严格意义上的 Schrödinger 表象，没有 Schrödinger 表象波函数[①]. 我们即便设法为单个 Bose 子引进一个包含坐标 x, y, z 的准波函数，它也不具有波函数的正确诠释，其模方不能诠释为概率密度. 这是从相对论和量子力学一般原理出发，对于不存在单个光子和介子的相对论波动方程所给出的理论解释. 对于这种粒子，仍然有动量表象，而对于实际目的来说，这已足够了. Bose 子的相对论量子理论必然是场的量子理论.

① P. A. M. 狄拉克，《量子力学原理》，陈咸亨译，科学出版社，北京，1979 年，273 页.

练 习 题

下面的这些练习题用两个数编号，第一个数是与题目的内容相应的章号，第二个数是章内的序号.

1.1 设 $\hat{F}$ 与 $\hat{G}$ 分别是由本征态组$\{|f\rangle_n\}$与$\{|g\rangle_m\}$定义的算符，$\hat{F}\equiv\sum_n|f_n\rangle f_n\langle f_n|$，$\hat{G}\equiv\sum_m|g_m\rangle g_m\langle g_m|$，试证明对于任意态$|A\rangle$与$|B\rangle$有以下性质：

① $\hat{F}(|A\rangle+|B\rangle)=\hat{F}|A\rangle+\hat{F}|B\rangle$，$\hat{G}(|A\rangle+|B\rangle)=\hat{G}|A\rangle+\hat{G}|B\rangle$.

② $\hat{F}(c|A\rangle)=c\hat{F}|A\rangle$，$\hat{G}(c|A\rangle)=c\hat{G}|A\rangle$，其中 c 是任一复数.

③ $(\hat{F}+\hat{G})|A\rangle=\hat{F}|A\rangle+\hat{G}|A\rangle$.

④ $\hat{F}(\hat{G}|A\rangle)=(\hat{F}\hat{G})|A\rangle$.

1.2 若算符 $\hat{L}$ 是厄米的，$\hat{L}^\dagger=\hat{L}$，试证明，对于从它的本征值方程解出的本征值谱$\{l_m\}$和本征态组$\{|l_m\rangle\}$，有以下性质：

① 本征值都是实数，$l_m^*=l_m$.

② 属于不同本征值的两个本征态是正交的，本征态组$\{|l_m\rangle\}$有正交归一性.

1.3 设观测量算符 $\hat{F}$ 可以写成坐标算符 $\hat{q}_r$ 和动量算符 $\hat{p}_r$ 的幂级数，试证明

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{q}_r,\hat{F}]=\frac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{p}_r},\quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{p}_r,\hat{F}]=-\frac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{q}_r}.$$

1.4 设体系的 Hamilton 算符为 $\hat{H}$，在本征态组$\{|n\rangle\}$上定义的系综的密度算符为 $\hat{\rho}=\sum_n|n\rangle P_n\langle n|$，试证明：密度算符的本

征值是非负的实数，在系综上测量到态 $|\psi\rangle$ 的概率为 $\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle$，以及密度算符随时间的变化满足下述量子 Liouville 方程

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{\rho}, \hat{H}].$$

2.1 根据 $\delta(x)$ 函数的定义，证明它具有下列性质：

$$\int f(x)\delta(x-a)\mathrm{d}x = f(a),$$

$$\delta(-x) = \delta(x),$$

$$x\delta(x) = 0,$$

$$x\delta'(x) = -\delta(x),$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x),$$

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2a}[\delta(x+a) + \delta(x-a)], \quad a > 0.$$

2.2 考虑由坐标算符 $\hat{q}_r$ 与动量算符 $\hat{p}_r$ 的线性组合定义的算符 $\hat{a}_r = (a_r\hat{q}_r + \mathrm{i}\hat{p}_r/\hbar a_r)/\sqrt{2}$ 与 $\hat{a}_r^\dagger = (a_r\hat{q}_r - \mathrm{i}\hat{p}_r/\hbar a_r)/\sqrt{2}$，以及 $\hat{n}_r = \hat{a}_r^\dagger \hat{a}_r$，$r = 1, 2, \cdots, N$. 其中 a_r 为正的实数. 试根据坐标算符与动量算符的对易关系证明下列对易关系：

$$[\hat{a}_r, \hat{a}_s] = 0, \quad [\hat{a}_r^\dagger, \hat{a}_s^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_r, \hat{a}_s^\dagger] = \delta_{rs},$$

$$[\hat{n}_r, \hat{a}_s^\dagger] = \hat{a}_r^\dagger\delta_{rs}, \quad [\hat{n}_r, \hat{a}_s] = -\hat{a}_r\delta_{rs},$$

$$[\hat{n}_r, (\hat{a}_s^\dagger)^m] = m(\hat{a}_r^\dagger)^m\delta_{rs}, \quad [\hat{n}_r, (\hat{a}_s)^m] = -m(\hat{a}_r)^m\delta_{rs},$$

$$[\hat{n}_r, (\hat{a}_s^\dagger)^l(\hat{a}_s)^m] = (l-m)(\hat{a}_r^\dagger)^l(\hat{a}_r)^m\delta_{rs}.$$

2.3 试求在居位数表象 $\{|n\rangle\}$ 中升位算符 $\hat{a}^\dagger$ 与降位算符 $\hat{a}$ 的表示矩阵.

2.4 在球极坐标表象 $\{|r\theta\phi\rangle\}$ 中，求与广义坐标 (r, θ, ϕ) 正则共轭的广义动量算符 $(\hat{p}_r, \hat{p}_\theta, \hat{p}_\phi)$ 的表示.

3.1 试证明下述与轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 有关的公式：

$$\hat{\boldsymbol{l}} \times \hat{\boldsymbol{A}} + \hat{\boldsymbol{A}} \times \hat{\boldsymbol{l}} = 2\mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{A}},$$

其中 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 可以是坐标算符 $\hat{\boldsymbol{r}}$，动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$，轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{l}}$，以及

$\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{l}},\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}}$.

3.2 试证明 Pauli 矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ 的下述公式：

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}),$$

其中 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的任意两个三维矢量.

4.1 定义 $\hat{r}\equiv\sqrt{\hat{x}^2+\hat{y}^2+\hat{z}^2}$，试证明这样定义的 $\hat{r}$ 与轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 对易，在空间转动下不变：

$$[\hat{r},\hat{l}_x]=[\hat{r},\hat{l}_y]=[\hat{r},\hat{l}_z]=0.$$

4.2 定义 $\hat{p}_r\equiv\frac{1}{2}\left(\frac{1}{\hat{r}}\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\frac{1}{\hat{r}}\right)$，试证明这样定义的 $\hat{p}_r$ 是厄米的，并且与 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 对易，在空间转动下不变，

$$[\hat{p}_r,\hat{l}_x]=[\hat{p}_r,\hat{l}_y]=[\hat{p}_r,\hat{l}_z]=0.$$

4.3 设系统的 Hamilton 算符为

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

试证明如下定义的矢量算符

$$\hat{\boldsymbol{e}}=\frac{\hat{\boldsymbol{r}}}{\hat{r}}-\frac{\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{l}}-\hat{\boldsymbol{l}}\times\hat{\boldsymbol{p}}}{2\kappa m}$$

是守恒的，$[\hat{\boldsymbol{e}},\hat{H}]=0$.

4.4 试证明上题的 $\hat{\boldsymbol{e}}$ 可以用轨道角动量算符 $\hat{\boldsymbol{l}}$ 与 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 表示为

$$\hat{\boldsymbol{e}}\cdot\hat{\boldsymbol{e}}=1+\frac{2}{\kappa^2m}\hat{H}(\hat{l}^2+\hbar^2),$$

$$\hat{\boldsymbol{e}}\times\hat{\boldsymbol{e}}=-\frac{2\mathrm{i}\hbar}{\kappa^2m}\hat{H}\hat{\boldsymbol{l}}.$$

4.5 同上两题，若定义

$$\hat{\boldsymbol{a}}=\sqrt{-\frac{\kappa^2m}{2\hat{H}}}\hat{\boldsymbol{e}},$$

以及 $\hat{\boldsymbol{I}}=(\hat{\boldsymbol{l}}+\hat{\boldsymbol{a}})/2$，$\hat{\boldsymbol{K}}=(\hat{\boldsymbol{l}}-\hat{\boldsymbol{a}})/2$，试证明有

$$\hat{I}^2=\hat{K}^2=\frac{1}{4}(\hat{l}^2+\hat{a}^2),$$

$$[\hat{I}_i, \hat{K}_j] = 0,$$
$$\hat{\boldsymbol{I}} \times \hat{\boldsymbol{I}} = \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{I}},$$
$$\hat{\boldsymbol{K}} \times \hat{\boldsymbol{K}} = \mathrm{i}\hbar\hat{\boldsymbol{K}}.$$

4.6 设在由正交归一化态矢量$|\mathrm{K}^0\rangle$和$|\overline{\mathrm{K}^0}\rangle$构成的子空间中，系统的唯象 Hamilton 算符可以写成

$$\hat{H} = \hat{M} - \mathrm{i}\frac{\hat{\Gamma}}{2} = \begin{pmatrix} A & p^2 \\ q^2 & A \end{pmatrix},$$

其中 A，p^2 和 q^2 可以是复数. 试求解在这个表象中的本征值方程

$$\hat{H}|\mathrm{K}\rangle = E|\mathrm{K}\rangle,$$

给出本征态$|\mathrm{K}\rangle$和相应的本征值 E 的表达式.

5.1 对于自由粒子 Dirac 方程的正能解 u 和负能解 v，试证明有下列关系：

$$\bar{u}(\boldsymbol{p},\xi)u(\boldsymbol{p},\xi') = \frac{mc^2}{E_p}u^\dagger(\boldsymbol{p},\xi)u(\boldsymbol{p},\xi'),$$

$$\bar{v}(\boldsymbol{p},\xi)v(\boldsymbol{p},\xi') = -\frac{mc^2}{E_p}v^\dagger(\boldsymbol{p},\xi)v(\boldsymbol{p},\xi'),$$

其中共轭旋量 $\bar{w}=w^\dagger\gamma^0$.

5.2 若自由粒子 Dirac 方程的正能解 u 和负能解 v 的归一化条件为

$$u^\dagger(\boldsymbol{p},\xi)u(\boldsymbol{p},\xi') = \delta_{\xi\xi'},$$
$$v^\dagger(\boldsymbol{p},\xi)v(\boldsymbol{p},\xi') = \delta_{\xi\xi'},$$

试证明有下述公式：

$$P_+ = \sum_\xi u(\boldsymbol{p},\xi)\bar{u}(\boldsymbol{p},\xi) = \frac{c}{2E_p}(\gamma_\mu p^\mu + mc),$$

$$P_- = \sum_\xi v(\boldsymbol{p},\xi)\bar{v}(\boldsymbol{p},\xi) = \frac{c}{2E_p}(\gamma_\mu p^\mu - mc).$$

5.3 对于自由粒子 Dirac 方程的正能解 u 和负能解 v，若取其归一化条件为

$$\bar{u}(\boldsymbol{p},\xi)u(\boldsymbol{p},\xi') = \delta_{\xi\xi'},$$

$$\bar{v}(\boldsymbol{p},\xi)v(\boldsymbol{p},\xi')=-\delta_{\xi\xi'},$$

试证明有下述完备性公式：

$$\sum_{\xi}[u(\boldsymbol{p},\xi)\bar{u}(\boldsymbol{p},\xi)-v(\boldsymbol{p},\xi)\bar{v}(\boldsymbol{p},\xi)]=1,$$

上式右边是 4×4 的单位矩阵.

5.4 在通常的 σ_z 为对角的自旋表象中，试求$(p_x\sigma_y-p_y\sigma_x)$的本征值和相应的本征态，其中 p_x 与 p_y 分别是动量 $\boldsymbol{p}$ 在 x 和 y 轴的投影.

5.5 试证明在$(p_x\sigma_y-p_y\sigma_x)$为对角的自旋表象中，矢量$(p_x,p_y,0)$，$\boldsymbol{\sigma}$ 和 z 轴方向的单位矢量 $\boldsymbol{e}_z$ 构成一个右手坐标系，$(p_x\sigma_y-p_y\sigma_x)$的本征态是在与$(p_x,p_y,0)$和 $\boldsymbol{e}_z$ 垂直的方向上自旋具有本征值的自旋态.

6.1 试证明

$$\left\langle\boldsymbol{r}\left|\frac{1}{E_p-\hat{H}_0+\mathrm{i}\epsilon}\right|\boldsymbol{r}'\right\rangle\xrightarrow{\epsilon\to 0^+}-\frac{E_p}{2\pi\hbar^2c^2}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}p|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|/\hbar}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|},$$

其中 $\hat{H}_0$ 是入射粒子与靶粒子系统无相互作用时的 Hamilton 算符，$E_p=E(p)$是此系统的动量大小为 p 时的能量，$\hat{H}_0|E\boldsymbol{p}\rangle=E(p)|E\boldsymbol{p}\rangle$，$\hat{\boldsymbol{p}}|E\boldsymbol{p}\rangle=\boldsymbol{p}|E\boldsymbol{p}\rangle$.

6.2 试证明坐标表象中的 Lippmann-Schwinger 方程可以写成

$$\psi^+_{\boldsymbol{p}_0}(\epsilon,\boldsymbol{r})=\varphi_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{r})+\int\mathrm{d}^3r'\langle\boldsymbol{r}|\frac{1}{E_{p_0}-\hat{H}+\mathrm{i}\epsilon}|\boldsymbol{r}'\rangle V(\boldsymbol{r}')\varphi_{\boldsymbol{p}_0}(\boldsymbol{r}').$$

6.3 光学定理表明：散射总截面与向前弹性散射振幅的虚部成正比，与入射动量成反比. 试问，在物理上，根据波动的观点，我们可以如何来理解这两点?

7.1 设 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$与 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$分别为粒子在$|\boldsymbol{r}\rangle$态的产生算符与消灭算符，$\hat{a}_n^\dagger$ 与 $\hat{a}_n$ 分别为粒子在$|\phi_n\rangle$态的产生算符与消灭算符，它们之间有变换关系

$$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})=\sum_n\hat{a}_n^\dagger\langle\varphi_n|\boldsymbol{r}\rangle=\sum_n\hat{a}_n^\dagger\varphi_n^*(\boldsymbol{r}),$$

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = \sum_n \hat{a}_n \langle \boldsymbol{r} | \varphi_n \rangle = \sum_n \hat{a}_n \varphi_n(\boldsymbol{r}).$$

若 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$ 与 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$ 满足下列对易关系

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}(\boldsymbol{r}')] = 0, \quad [\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')] = 0,$$
$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')] = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'),$$

试求 $\hat{a}_n^\dagger$ 与 $\hat{a}_n$ 满足的对易关系.

7.2 设 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$ 与 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$ 分别为粒子在 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 态的产生算符与消灭算符，$\hat{a}_n^\dagger$ 与 $\hat{a}_n$ 分别为粒子在 $|\phi_n\rangle$ 态的产生算符与消灭算符，它们之间有变换关系

$$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}) = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \langle \varphi_n | \boldsymbol{r} \rangle = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \varphi_n^*(\boldsymbol{r}),$$
$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}) = \sum_n \hat{a}_n \langle \boldsymbol{r} | \varphi_n \rangle = \sum_n \hat{a}_n \varphi_n(\boldsymbol{r}).$$

若 $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r})$ 与 $\hat{\psi}(\boldsymbol{r})$ 满足下列 Jordan-Wigner 反对易关系

$$\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}(\boldsymbol{r}')\} = 0, \quad \{\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\} = 0,$$
$$\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')\} = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'),$$

试求 $\hat{a}_n^\dagger$ 与 $\hat{a}_n$ 满足的反对易关系.

8.1 按照正则量子化规则，我们可以写出实标量场的正则坐标算符 $\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t)$ 及与其共轭的正则动量算符 $\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t)$ 的 Heisenberg 对易关系

$$[\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t), \hat{\phi}(\boldsymbol{r}',t)] = 0, \quad [\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t), \hat{\pi}(\boldsymbol{r}',t)] = 0,$$
$$[\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t), \hat{\pi}(\boldsymbol{r}',t)] = \mathrm{i}\,\hbar\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'),$$

试根据它们的下述展开式

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t) = \int \frac{\mathrm{d}^3 \boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \frac{\hbar}{\sqrt{2E_p}} [\hat{a}_p \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar} + \hat{a}_p^\dagger \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}],$$

$$\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t) = -\mathrm{i}\int \frac{\mathrm{d}^3 \boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \sqrt{\frac{E_p}{2}} [\hat{a}_p \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar} - \hat{a}_p^\dagger \mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_p t - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}],$$

算出其中的算符 $\hat{a}_p$ 与 $\hat{a}_p^\dagger$ 的下列对易关系

$$[\hat{a}_p, \hat{a}_{p'}] = 0, \quad [\hat{a}_p^\dagger, \hat{a}_{p'}^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_p, \hat{a}_{p'}^\dagger] = \delta(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}').$$

8.2 试证明复标量场的电荷算符为

$$\hat{Q}=\int \mathrm{d}^3 r\hat{\rho}=\int \mathrm{d}^3 p q(\hat{a}_p^{\dagger}\hat{a}_p-\hat{b}_p^{\dagger}\hat{b}_p),$$

已知其中场的电荷密度算符为

$$\hat{\rho}=\frac{q}{\mathrm{i}\hbar}(\hat{\phi}\hat{\pi}-\hat{\phi}^{\dagger}\hat{\pi}^{\dagger}),$$

场量 $\hat{\phi}$ 与 $\hat{\pi}$ 在动量空间的展开为

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{r},t)=\int\frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{\hbar}{\sqrt{2E_p}}[\hat{a}_p\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}+\hat{b}_p^{\dagger}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}],$$

$$\hat{\pi}(\boldsymbol{r},t)=-\mathrm{i}\int\frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\sqrt{\frac{E_p}{2}}[\hat{b}_p\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}-\hat{a}_p^{\dagger}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}],$$

算符$(\hat{a}_p^{\dagger},\hat{a}_p)$与$(\hat{b}_p^{\dagger},\hat{b}_p)$分别为两种 Bose 子的产生和消灭算符.

8.3 已知在辐射规范中自由电磁场的 Hamilton 密度 $\mathscr{H}$ 为

$$\mathscr{H}=\frac{1}{2\mu_0}\left[\frac{1}{c^2}(\dot{A})^2+(\nabla\times A)^2\right],$$

矢量势算符为

$$\hat{A}(\boldsymbol{r},t)=\int\frac{\mathrm{d}^3 p}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\frac{\hbar}{\sqrt{2\epsilon_0 E_p}}\boldsymbol{e}_p^i[\hat{a}_{pi}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}+\hat{a}_{pi}^{\dagger}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(E_pt-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}],$$

其中 $\boldsymbol{e}_p^i$ 是第 3 轴沿 $\boldsymbol{p}$ 方向的坐标架的单位矢量，$\hat{a}_{pi}^{\dagger}$与 $\hat{a}_{pi}$分别为光子的产生和消灭算符，试证明场的 Hamilton 算符 $\hat{H}$ 为

$$\hat{H}=\int\mathrm{d}^3 r\hat{\mathscr{H}}=\int\mathrm{d}^3 p\sum_{i=1}^{2}E_p\left\{\hat{a}_{pi}^{\dagger}\hat{a}_{pi}+\frac{1}{2}\delta(0)\right\}.$$

8.4 假设旋量场算符有对易关系

$$[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r},t),\hat{\psi}_\beta(\boldsymbol{r}',t)]=0,\quad[\hat{\psi}_\alpha^{\dagger}(\boldsymbol{r},t),\hat{\psi}_\beta^{\dagger}(\boldsymbol{r}',t)]=0,$$

$$[\hat{\psi}_\alpha(\boldsymbol{r},t),\hat{\psi}_\beta^{\dagger}(\boldsymbol{r}',t)]=\delta_{\alpha\beta}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'),$$

试计算场的总动量算符 $\hat{P}$ 和总守恒荷算符 $\hat{Q}$，

$$\hat{P}=\int\mathrm{d}^3 r\hat{\mathscr{P}}=\int\mathrm{d}^3 r\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r},t)(-\mathrm{i}\hbar\nabla)\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t),$$

$$\hat{Q}=\int\mathrm{d}^3 r\hat{\mathscr{Q}}=\int\mathrm{d}^3 r\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{r},t)\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t),$$

并讨论结果的物理含义.

8.5 试证明旋量场的协变反对易关系

$$\{\hat{\psi}_\alpha(x), \bar{\hat{\psi}}_\beta(x')\} = -\mathrm{i}\,\frac{c}{\hbar} S_{\alpha\beta}(x - x'),$$

其中

$$S_{\alpha\beta}(x - x') = (\mathrm{i}\,\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)_{\alpha\beta}\Delta(x - x'),$$

$$\Delta(x - x') = -\mathrm{i}\,\hbar\int \frac{\mathrm{d}^3 \boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\mathrm{d}p^0}{c}\bar{\epsilon}(p^0)\delta(p_\mu p^\mu - m^2c^2)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p_\mu(x^\mu - x'^\mu)},$$

$$\bar{\epsilon}(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi > 0, \\ -1, & \xi < 0. \end{cases}$$

附录　Heisenberg 提出测不准原理的经过

本文是我与胡济民先生合写的 Heisenberg 传中关于创立量子力学的部分，全文收在钱临照和许良英主编的《世界著名科学家传记》物理学家Ⅳ中，1995 年由科学出版社出版. 虽然是着重讲 Heisenberg，但从中也可以看出哥廷根学派与哥本哈根学派联手创立量子力学的主要脉络，特别是可以看出关于观测量的测量与测不准的概念是如何产生和逐步明确的，而把测不准原理作为一个基本的物理原理，则是这一探索研究过程的自然的结果. 了解在历史上提出和认识观测量的测量问题以及测不准原理的经过，无疑是有助于我们今天对于它们的理解和把握的. 这篇文章所持的对于量子力学的观点，也就是本书的基本观点. 胡济民先生已经过世，我只作了一点删节和文字上的修改，附在这里，作为本书的补充，以供对历史背景和发展有兴趣的读者参考.

Heisenberg 1920 年中学毕业后，进入慕尼黑大学，在 Sommerfeld 的指导下学习理论物理. 他很快就进入当时物理学研究的前沿，表现出出众的才华. 第一学期，为了解释反常 Zeeman 效应的谱线，他首先引进了半量子数. 这需要很大胆识，当时普遍认为量子数都是整数. 第二学期上流体力学课，Heisenberg 写了一篇关于 Kármán 涡流的绝对大小的论文，深得 Sommerfeld 的赞赏. 1922 年 6 月，Heisenberg 随 Sommerfeld 到哥廷根大学，参加由 Max Born 和 J. Franck 发起的关于原子物理的讨论. 这个讨论会是围绕 Niels Bohr 的一系列关于原子物理和元素周期律的演讲而展开的，Heisenberg 那次访问结识了 Born 和 Bohr. 在 1922

年冬至 1923 年春 Heisenberg 在哥廷根跟 Born 学习和工作. 1923 年夏 Heisenberg 回到慕尼黑,以论文《关于流体流动的稳定性和湍流》通过答辩,获得博士学位,导师是 Sommerfeld. 之后不久,在 Wolfgang Pauli 的推荐下,他受 Born 聘请,于 1923 年 10 月到哥廷根做 Born 的助手,一直到 1926 年夏天. 在此期间,他于 1924 年 7 月在哥廷根大学以论文《关于量子论的形式规则在反常 Zeeman 效应问题上的修改》升为讲师. 1924 年冬 Heisenberg 曾到哥本哈根的 Bohr 那里工作了一个学期, 1925 年初夏回到哥廷根. Heisenberg 在哥廷根和哥本哈根的这段经历,对于他在创立量子力学的过程中迈出关键性的一步来说,无疑具有决定性的意义.

1911 年 Ernest Rutherford 提出原子的有核模型并被实验证实以来,原子结构的研究就成为物理学研究的焦点和前沿. 1913 年 Bohr 提出的模型奇特地把 Planck 的量子概念与经典力学结合起来,成功地解释了氢原子光谱的线状结构. 由于经典物理的基础与量子概念完全不相容,Bohr 模型在原子结构和原子光谱问题上取得的惊人成就自然地促使物理学家去努力寻找和创建一个与量子概念相协调的全新的力学. 这个新的力学与 Newton 的经典力学之间应当存在对应,并且在量子效应趋于零的极限下过渡到经典力学. Bohr 在 1918 年的一篇论文中清晰地阐述了这个思想,尝试用它来解决谱线强度的计算问题,并在随后的论文中称之为对应原理. 在对应原理指导下对新力学的系统猜测和探索到 20 年代初已初见端倪. 1921 年 R. Ladenburg 迈出了重要的一步,他发现光谱的色散本领与原子的两个定态间的跃迁概率有关. 在此基础上, 1924 年 H. A. Kramers 成功地发现了一个完整的色散公式,其中只包含跃迁量,亦即只与原子的两个定态有关. 接着 Born 在 1924 年的一篇论文中迈出了第二步. 他发现为了从经典力学的公式过渡到对应的量子公式,可以在经典力学坐标与动量的 Fourier 展开式中, 把计算频率的公式中能量对角动量的微商换成相应的

差分的商. Born 这篇论文的计算得到了 Heisenberg 的许多建议和帮助，而在这篇论文中第一次使用了“量子力学”这一名称. 这年冬天 Heisenberg 在哥本哈根与 Kramers 合写了一篇关于原子折射和辐射的论文，用 Born 的上述方法推导出了 Kramers 的色散公式. Born 在他的工作中发现跃迁量总是对应于经典理论中振幅的平方，所以他在与 P. Jordan 和 Heisenberg 的讨论中提出了跃迁振幅的概念，指出这些跃迁振幅很可能是起核心作用的量，要用某种符号乘法来处理[1]. Heisenberg 于 1925 年夏天解开了这“符号乘法”之谜，迈出了创立量子力学的关键性的一步.

1925 年初夏 Heisenberg 从哥本哈根回到哥廷根后，考虑放弃电子轨道的经典图像，尝试直接由光谱频率和谱线强度(即跃迁振幅)这样一些可由实验观测的量入手，以解决氢原子谱线强度的计算问题. 由于氢原子的计算太繁，他先计算较简单的一维非谐振子. 正在这时他患了严重的枯草热，告假去北海寸草不生的赫尔戈兰(Helgoland)岛休养了十天左右. 这是 6 月中旬. 在这期间，他关于量子力学的模糊想法逐渐清晰起来. 回哥廷根的途中在汉堡 Heisenberg 见到 Pauli，随后于 6 月 21 日，24 日和 29 日他先后写信与 Pauli 讨论他的想法. 7 月初，Heisenberg 写成了开创量子力学的第一篇论文《从量子理论来重新解释运动学和力学关系》[2]，寄给 Pauli 征求意见，并请 Born 审阅和决定是否值得发表.

在这篇论文中，Heisenberg 着眼于光谱频率和跃迁振幅这样一些可由实验观测的量，尝试为它们之间的关系建立一个量子力学的理论基础. Kramers，Born 以及 Kramers 和 Heisenberg 的上述工作构成了这篇论文的出发点. 根据 Bohr 的对应原理，Heisenberg 从经典力学的动力学方程入手. 如果把其中的电子坐标换成跃迁振幅，像在色散公式中做的那样，就可得到跃迁振幅之间的一个关系. 问题在于这样得到的关系一般地包含了跃迁振幅的某种函数，于是需要对它们进行代数运算. 关键是乘法运算. 由于光谱频率和跃迁振幅都依赖于两个指标，它们的乘法不同于普

通数的乘法. Heisenberg从电子经典坐标和动量Fourier展开系数的运算得到启发,猜出了这种量的乘法规则,从而解答了Born提出的符号乘法问题. Heisenberg发现的这种量的乘法不服从通常的交换律,他利用Bohr的量子条件得到了它们之间的一个基本对易关系的主要部分.这就是坐标与动量的对易关系,后来被称为Heisenberg对易关系.

把经典力学方程中的坐标和动量换成跃迁振幅的形式,在数学上就是把普通的数换成相应的矩阵或算符.为了给这种替换寻找恰当的理由, Heisenberg在这篇文章中提出了一个原则,即在新的量子力学里有些经典力学量在原则上不再是可以观测的量,应该"尝试完全根据在原则上可以观测的量之间的关系,来建立量子力学理论的基础"[2]. Heisenberg的这一思想,对随后数十年间物理学的发展有莫大影响,而究其渊源,则还是三年前在与Bohr的讨论中就已萌生了. 1922年夏天Bohr在哥廷根的一次演讲中谈到了Kramers关于平方Stark效应的计算,在讨论中Heisenberg提出了异议.讨论结束后Bohr邀请Heisenberg到哥廷根外海因堡(Hainberg)树林中散步,他们边走边谈,深入讨论了近代原子理论中的基本物理问题和哲学问题.这次讨论对Heisenberg产生了决定性的影响,他发现Bohr与多数物理学家不同, Bohr对理论结构的敏锐洞察不是来自从基本假设出发所作的数学分析,而是基于他对实际现象的充分把握, Bohr可以从直觉而不是形式的推理来把握住关系.从此Heisenberg理解到,我们关于自然的知识最初正是这样获得的,下一步才是用数学的形式和逻辑的分析来巩固它[3].所以在论文的结尾Heisenberg指出,他在这里所建议的构造量子力学理论的方法,也许在原则上是满意的,也许只不过是一个十分粗略的做法,究竟如何,还需对它在数学上作更深入的研究才能作出判断.这种数学上的深入研究则是由Born,Jordan和Heisenberg在紧接着的合作研究中完成的. Heisenberg的这一思想常常被解释为要求在理论中剔除所有

不能直接观测的量. Born 后来在回忆这一段经历时指出,把原理表述得这么普遍和笼统,就一点用也没有,甚至还会招来误解,哪些量是多余的,这只有靠像 Heisenberg 这样的天才的直觉才能判断[1]. 当然,这种判断正确与否,只能靠实验来检验.

Heisenberg 的这篇论文已经勾画出量子力学结构的基本轮廓,接下来要做的事是进一步的精雕细刻和作出物理的诠释. 约在 7 月 11 或 12 日, Heisenberg 把论文的最后一稿交给 Born,同时向他告假提前离开哥廷根,因为他受邀去剑桥的卡文迪许(Cavendish)实验室讲演. 他告诉 Born 说,虽然已经尽了力,仍未能超出这篇文章的简单考虑而取得进一步的进展,请 Born 再试一试. Born 感觉到在 Heisenberg 的论文中包含了他们追求多年的某种基本的东西,在把论文寄给德国 *Zeitschfrift für Physik* 去发表之后,开始仔细考虑 Heisenberg 的符号乘法. 他发现 Heisenberg 的符号乘法不是别的,正是矩阵的运算. 从 Heisenberg 的结果中,他猜测坐标与动量的对易式应正比于单位矩阵,但无法证明. Born 的学生和助手 Jordan 想出了证明的方法,于是他们合写了一篇论文. 这是创立量子力学的第二篇论文,标题是《关于量子力学》,其中包含了矩阵力学的表述,上述对易关系,及对非简谐振子的运用和电磁场量子化的基本思想. 他们把论文的副本寄给了在剑桥演讲完后正在度假旅行的 Heisenberg, Heisenberg 写了一封热情的回信,于是他们决定假期结束后三人共同来完成这一工作. 这是在假期结束后的 9—10 月间完成的, Heisenberg 没有回到哥廷根而是留在了哥本哈根,只是在快完成时才回到哥廷根一同做论文的收尾工作,所以合作基本上是用通信的方式进行的. 这创立量子力学的第三篇论文标题是《关于量子力学 Ⅱ》[4],它包括了量子力学几乎所有的要点: 用不可对易符号表示物理量,把 Hamilton 力学推广到这种量,正则变换,微扰论,含时间的微扰论及其对光学色散理论的运用,简并概念,与厄米型本征值理论的联系,处理连续谱的纲要,动量及角动量定理,电磁

场量子力学及Einstein涨落公式的推导等.这三篇论文奠定了量子力学的基础,在物理学史上分别称为一个人的文章,两个人的文章,和三个人的文章.

Heisenberg的工作在剑桥立即引起了反响.他于1925年7月28日在剑桥的卡皮查(Kapitza)俱乐部演讲,题目是"谱项动物学和Zeeman植物学"(Termzoologie und Zeemanbotanik),既幽默又富哲理.光谱项和Zeeman效应是当时困扰物理学家们的问题,动物学和植物学的发展在当时还处于观察现象和进行分类的阶段,而Heisenberg则是要从谱项和Zeeman效应的观察分类中,找出内在的规律性.在私下的交谈中,他向英国物理学家解释了他关于量子力学的想法. 9月初,R. H. Fowler把Heisenberg的论文副本寄给他正在度假的研究生P. A. M. Dirac,使Dirac得以了解Heisenberg的工作. Dirac从Fowler的讲课和Sommerfeld的教科书《原子结构与光谱》(*Atombau und Spektrallinien*, Braunschweig, 1921)中已经学过Hamilton力学的变换理论,他立即在对应原理的指导下从与经典力学Poisson括号的对应得到了Heisenberg的对易关系,力学量的运动方程以及Bohr频率条件,独立地得到了与Born和Jordan两个人的文章相同的结果.接着Dirac进行了系统深入的研究,独立于Heisenberg,Born和Jordan小组,创立了量子力学,并使它具有更简洁更普遍的形式.

Heisenberg一开始就把注意力放在量子力学的物理图像和原理方面,力图使理论尽可能物理一些,使支配理论的原理尽可能清晰一些.他一个人的文章的标题就已经表明了他的这一目标.他已经认识到,把经典的电子坐标换成量子的跃迁振幅,相当于要从量子理论来重新解释运动学,亦即要从量子论的图像来重新描述电子的运动.在他为三个人的文章所写的引言[5]中说得更明确:"新理论的基本特征就在于,它既修改了运动学,也修改了力学"[6]. 1926年E. Schrödinger创立了波动力学,随后又证明了波动力学与量子力学完全等价.实际上,Heisenberg的量子力学选

择了力学量随时间改变而态不随时间改变的物理绘景，Schrödinger 的波动力学则选择了态随时间改变而力学量不随时间改变的物理绘景，它们是 Dirac 的更普遍的形式理论在不同物理绘景中的具体表现. 电子运动的量子特征在 Heisenberg 绘景中表现得很突出，而电子运动的波动特征在 Schrödinger 绘景中表现得十分清楚，电子运动的量子性和波动性已经被纳入了一个自洽和完整的理论体系. 紧接着 Schrödinger 的工作，Born 用 Schrödinger 波动方程研究量子力学的散射过程，提出了波函数的统计诠释，指出 Schrödinger 波函数是一种概率振幅，它的绝对值的平方对应于测量到电子的概率分布. 认识到了量子力学规律的统计性质，这就为 Heisenberg 提出量子力学的测不准原理在观念上奠定了基础.

使 Heisenberg 疑惑不解的是：既然在量子力学中不需要电子轨道的概念，那又怎么解释 Wilson 云室里观察到的粒子径迹呢？经过几个月的思索，1927 年初 Heisenberg 忽然想起，年前在一次讨论中，当他向 Einstein 表示"一个完善的理论必须以直接可观测量作依据"时，Einstein 向他指出："在原则上，试图单靠可观测量去建立理论那是完全错误的. 实际上正好相反，是理论决定我们能够观测到什么东西"[6]. 在这一回忆的启发下，Heisenberg 仿效 Einstein 在狭义相对论里对同时性的操作定义方法，马上领悟到：云室里的径迹不可能精确地表示出经典意义下的电子路径或轨道，它原则上至多给出电子坐标和动量的一种近似的、模糊的描写. 在这种想法指导下，他用 Gauss 型波函数来研究量子力学对于经典图像的限制，立即导出了同时测量粒子的坐标和动量所受到的限制：坐标的测不准与动量的测不准的乘积不小于约化 Planck 常数的一半. 这就是著名的 Heisenberg 测不准关系[7]. 1927 年秋，Bohr 在科莫（Como）会议上的发言中通过波粒二象性的论证也导出了测不准关系.

从量子力学理论的逻辑结构来看，波粒二象性或者粒子的测

不准关系都是 Heisenberg 对易关系的逻辑推论. Heisenberg 对易关系在量子力学的理论体系中处于关键地位,微观粒子的量子特征都是由它决定的,而 Heisenberg 测不准关系则揭示出这个对易关系所包含的一条基本的物理原理,这就是著名的 Heisenberg 测不准原理. 这是量子力学中最重要最基本的一条物理原理. 1929 年春天,Heisenberg 在芝加哥大学发表了题为《量子论的物理原理》[6]的一系列演讲,全面和深入地重新审定和阐述了这一原理. Heisenberg 在这里指出:"一般说来,任何一个测定某些物理量的实验,同时也就会改变以前所获得的另一些物理量的知识. 即使定量地追溯这种影响,我们仍会发现,在很多情况下,同时测量两个不同物理量总是存在一个不能再提高的精度下限. 相对论对经典概念进行批判的出发点,是假设不存在大于光速的信号速度. 类似地,我们可以把同时测量两个不同的物理量有一个精度下限,即所谓测不准关系,假设为一条自然定律,并以此作为量子论对经典概念进行批判的出发点. 这个'测不准关系'告诉我们,要对原子过程作出一致描述,必须在多大程度上摆脱经典概念的限制."作为测不准原理的结果,这种测量精度的下限不是来自实验和技术方面的限制,而是由理论本身在原则上决定的.

从测不准原理来看,量子力学对微观世界的描述只能是统计性的,必定有波函数的统计诠释,量子力学的基本方程实际上不再是联系可观测量的关系,而只是关于测量概率的规律. 所以,量子力学的基本定律必定包括两方面:一是从物理条件来决定测量概率的定律,即关于波函数的 Schrödinger 方程;再就是从波函数来计算测量某一组相容观测量的概率的规则,即波函数的统计诠释. 这里区分了两种不同的过程:一种是作为研究对象的客体在不受研究者干扰时的运动,这时波函数的变化遵从 Schrödinger 方程;另一种是作为研究主体的观测者对于观测对象的测量过程,这时波函数的变化过程被称之为"波包的缩编",根据波函数统计诠释的规则来计算. 波函数在哪一段过程中由 Schrödinger 方程来确

定,从什么时候开始发生波包的缩编,以及缩编到什么本征态,这都取决于实验者的安排和选择.这就造成了量子力学中区分主观与客观的困难或任意性. Heisenberg 指出量子力学的这种困难或任意性同样也是测不准原理这一物理原理的反映[8].

Heisenberg 这次演讲的讲稿后来分别用德文和英文同时发表,此后又多次再版,并被译成法文、日文、中文等多种文字,成为一部传播广泛影响深远的关于量子力学物理原理的经典著作.他在这本书中以及在此前后许多场合对上述物理原理所作的阐述,以及进一步在哲学上的发挥,形成了以 Bohr 和他为代表的哥本哈根学派的主要观点,引起了物理学和哲学界长期以来经久不息的争论.量子力学中的测量理论问题,这里主要是指用 Schrödinger 方程来描述测量过程的尝试,至今仍是一个没有完全解决的问题.

Einstein 和 Dirac 的思考方式与研究风格,是从第一性的原理出发,经过严密的逻辑推理和数学演绎,来获得对物理现象的深入和全新理解.这是理论物理学家思考方式与研究风格的一种类型.而 Heisenberg 的思考方式与研究风格更接近 Bohr,他们先从具体物理实验和现象的分析中发掘新的思想观念和物理原理,然后再在此基础上建立理论体系.这是理论物理学家思考方式与研究风格的又一种类型.他们熟悉具体的实验现象,强调新的实验现象蕴含着新的物理,而在研究工作中往往更依赖于过去的经验、对现象的综合和物理的直觉.多数获得了实际成果的理论研究都属于这后一种类型,所以 Heisenberg 的思想和哲学在西方物理学界有很大影响.

Heisenberg 具有一种能够从物理上把握问题关键的直觉,这使他成为 20 世纪最富于创造性和最成功的物理学家之一. Heisenberg 那与生俱有的对于从一般哲学的深度来提出和分析问题的偏爱,使他在关于量子力学的解释上成为哥本哈根学派仅次于 Bohr 的领袖人物.

参考文献

[1] M. Born, *My Life—Recollections of a Nobel Laureate*, Charles Scribner's Sons, New York, 1978 (其中第1部第19章的中文译文,见M.玻恩著,王正行译,在量子力学诞生的日子里,《科学史译丛》,1986年第1期第30页).

[2] W. Heisenberg, Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen, *Zeitschrift für Physik*, **33** (1925) 879.

[3] W. Heisenberg, 见 *Bohr Memorial Volume*, North-Holland Publishing Co. Amsterdam, 1967.

[4] M. Born, W. Heisenberg und P. Jordan, Zur Quantenmechanik Ⅱ, *Zeitschrift für Physik*, **35** (1926) 557.

[5] 见 Heisenberg 1925 年 11 月 7 日写给 Pauli 的信, B. L. Van der Waerden, *Sources of Quantum Mechanics*, North-Holland, Amsterdam, 1967, p. 56.

[6] W.海森伯:《原子物理学的发展和社会》,马名驹等译,北京,中国社会科学出版社,1985.第73,87页.

[7] W. Heisenberg, Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik, *Zeitschrift für Physik*, **43** (1927) 172.

[8] W. Heisenberg, *Die physikalischen Prinzipien der Quantentheorie*, Leipzig, S. Hirzel, 1930 (中译本: W.海森伯:《量子论的物理原理》,王正行等译,北京,科学出版社,1983.).