第四章 自由标量场量子化

经典量子力学中，场波函数是经典场，描述粒子的几率波函数。经典场的不足在于，K-G方程和电磁场方程所表示的场存在负能量和负几率困难，而经典场也不能描述粒子的产生与湮灭现象。为克服这两个困难，人们将场量子化。

量子化方法有两种：一种是正则量子化，另一种是路径积分量子化。正则量子化只适于电磁作用的Abel规范理论，路径积分量子化主要用于非阿贝尔规范理论，如弱电统一规范理论与强相互作用规范理论。

§4.1 正则量子化

场的量子化，就是将场视为算符。正则量子化，就是把拉格朗日形式的场变成哈密顿正则形式，找到场的正则坐标与正则动量，确定它们的对易关系，从而完成从经典场到算符的转化，实现量子化，又称二次量子化。本节先讨论经典力学系统到量子力学系统的正则量子化，然后讨论经典场的量子化。

一. n个自由度力学系统的正则量子化.

1.拉方

考虑一个经典的n个粒子构成的系统，其广义坐标是 q_i $(i=1,2,\cdots,N=3n)$，广义速度 $\dot{q}_i(t)$ $(i=1,2,\cdots N)$。拉朗格日量为 $L=L(q_i,\dot{q}_i)$。

由变分原理(作用量原理)

$$\delta S=\delta\int_{t_1}^{t_2}L\,dt=0$$

"连接 t_1 时刻的 $q_i(t_1)$ 和 t_2 时刻的 $q_i(t_2)$ 的所有路径中，物理路径使作用量取极值"

其中，边界条件是 $t=t_1$ 时 $\delta q_i=0$，$t=t_2$ 时 $\delta q_i=0$，得拉格朗日形式的运动方程：

$$\boxed{\frac{\partial L}{\partial q_i}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}=0}\qquad (i=1,2,\cdots,N)$$

2.哈密顿方程

引入正则动量 $\boxed{p_i\equiv\dfrac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}}$

则有哈密顿量(利用勒让德变换)

$$\boxed{H(p_i,q_i)\equiv\sum_i p_i\dot{q}_i-L\equiv p_i\dot{q}_i-L}$$

~~利用哈~~将H取全微分，利用 $p_i=\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$ 和E-L，得哈密顿正则方程：

$$\boxed{\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}}$$

3. 正则量子化　（经典力学过渡至量子力学时，物理可观测量变为厄米算符）

哈密顿正则量子化假定正则坐标和正则动量是Hilbert（希尔伯特）空间的厄米算符，并满足等时正则对易关系（定义 $[X, Y] \equiv XY - YX$, $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i=j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$）

$$\boxed{\begin{aligned} &[q_i(t), p_j(t)] = i\delta_{ij}, \qquad q_i^+ = q_i,\ p_i^+ = p_i,\ L = L^+,\ H = H^+ \\ &[q_i(t), q_j(t)] = 0, \qquad [p_i(t), p_j(t)] = 0. \end{aligned}}$$

经典力学中，q_i、p_i 的运动方程是哈密顿方程；在量子力学中，相应算符的正则运动方程是海森堡方程：

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{q}_i(t) &= i[H, q_i(t)] \\ \dot{p}_i(t) &= i[H, p_i(t)] \end{aligned}}$$

利用 $f(t, q_i, p_i)$ 对 t 求导数时，

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial q_i}\left(\frac{\partial q_i}{\partial t}\right) + \frac{\partial f}{\partial p_i}\left(\frac{\partial p_i}{\partial t}\right) \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} + \frac{\partial f}{\partial p_i}\left(-\frac{\partial H}{\partial q_i}\right) \\ &\equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\} \xrightarrow[\text{替换为量子力学 } \{A,B\} \to \frac{i}{\hbar}[A,B]]{\text{对经典泊松括号}} i[f, H] \end{aligned}$$

二、谐振子量子化

1. 哈方. 对一维谐振子系统 $L = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$，其中 $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

定义正则动量

$$p \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}$$

则

$$H = p\dot{q} - L = m\dot{q}^2 - \left(\frac{1}{2}m\dot{q}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2\right) = \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 = \frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega^2 q^2)$$

哈密顿正则方程

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -m\omega^2 q,$$

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

---

2. 量化. 假设 q, p 是希伯空间的算符，满足下列对易关系，<u>~~从而~~将谐振子系统量子化</u>。

$$[q, p] = i, \qquad [q, q] = [p, p] = 0.$$

由算符满海森堡方程，得

$$\dot{p} = i[H, p] = i\left[\frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega^2 q^2), p\right] = \frac{i}{2m}m^2\omega^2[q^2, p] = \frac{i}{2m}m^2\omega^2 2iq = -m\omega^2 q$$

$$\dot{q} = i[H, q] = i\left[\frac{1}{2m}(p^2 + m\omega^2 q^2), q\right] = \frac{i}{2m}[p^2, q] = \frac{i}{2m}2p(-i) = \frac{p}{m}$$

与哈密顿正则方程相同.

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega^2 x$$

3. 粒子数表象下的本征值、本征态

1) 为讨论本征值，引入产生、湮灭算符.

$$a \equiv \sqrt{\frac{1}{2m\omega}}\,(p - im\omega q), \qquad a^{+} \equiv \sqrt{\frac{1}{2m\omega}}\,(p + im\omega q)$$

则有

$$q = \frac{i}{\sqrt{2m\omega}}(a - a^{+}) \qquad p = \sqrt{\frac{m\omega}{2}}\,(a + a^{+})$$

$$[a, a^{+}] = 1,$$

$$[a, a] = [a^{+}, a^{+}] = 0$$

而哈密顿量

$$H = \frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega^2 q^2) = \frac{1}{2m}\left[\frac{m\omega}{2}(a+a^{+})(a+a^{+}) + m^2\omega^2\frac{-1}{2m\omega}(a-a^{+})(a-a^{+})\right]$$

$$= \frac{\omega}{2}(a^{+}a + aa^{+}) = \omega\left(a^{+}a + \frac{1}{2}\right)$$

令粒子数算符 $N \equiv a^{+}a$，则

$$H = \omega\left(N + \frac{1}{2}\right)$$

算符 N 是非负的。因为它在任一态矢 $|\psi\rangle$ 上的期待值是绝对值的平方.

$$\langle\psi|N|\psi\rangle = \langle\psi|a^{+}a|\psi\rangle = |a|\psi\rangle|^2 \geqslant 0.$$

从而 N 的所有本征值 $\geqslant 0$.

2) 哈密顿量的本征态 $|n\rangle$ 满足

本征态 $\quad H|n\rangle = \omega\left(n + \frac{1}{2}\right)|n\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$

本征值 $\quad E_n = \omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

令 $|0\rangle$ 是最小本征值的本征态 $H|0\rangle = \frac{1}{2}\omega|0\rangle$，则 $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^{+})^n|0\rangle$.

证明：

令 $|\rangle$ 是 N 的任一本征态 $N|\rangle = l|\rangle$，则 $H|\rangle = \omega(l+\frac{1}{2})|\rangle$，$l$ 为一常数。由于

$$Na^{+} = a^{+}aa^{+} = a^{+}(a^{+}a+1) = a^{+}(N+1).$$

$$Na = a^{+}aa = (aa^{+}-1)a = a(a^{+}a-1) = a(N-1)$$

则

$$Na^{+}|\rangle = a^{+}(N+1)|\rangle = (l+1)a^{+}|\rangle \qquad (\star 1)$$

$$Na|\rangle = a(N-1)|\rangle = (l-1)a|\rangle$$

将上式第一式中$|\rangle$换为$a^+|\rangle$，第二式中$|\rangle$换为$a|\rangle$，得

$$N a^+ a^+|\rangle = a^+a^+(N+2)|\rangle = (l+2)a^+a^+|\rangle$$

$$N a^+a^+a^+|\rangle = a^+a^+a^+(N+3)|\rangle = (l+3)a^+a^+a^+|\rangle \qquad (\bigstar 2)$$

$$\vdots$$

$$N(a^+)^m|\rangle = (a^+)^m(N+m)|\rangle = (l+m)(a^+)^m|\rangle$$

$$\vdots$$

同理

$$Naa|\rangle = aa(N-2)|\rangle = (l-2)aa|\rangle$$

$$Na^3|\rangle = a^3(N-3)|\rangle = (l-3)a^3|\rangle$$

$$\vdots$$

$$Na^m|\rangle = a^m(N-m)|\rangle = (l-m)a^m|\rangle$$

可见a^+使N的本征值$+1$，a使N的本征值-1，故称a^+产生算符，a湮灭算符。
不仅$|\rangle$是N的本征态，$(a^+)^m|\rangle$和$a^m|\rangle$也是N的本征态，本征值为$(l+m)$和$(l-m)$。

由于N的所有本征值≥ 0，故$l+m\geq 0$且$l-m\geq 0$。下面分析l的取值范围。
若$l\neq$整数，则当$Na^m|\rangle=(l-m)a^m|\rangle$之中$m>l$时，$N$的本征值$<0$，与$N$非负矛盾。故$a$使$N$本征值递减的过程必须到某一$m$时中断，从而$l$为非负整数。对于$l=m$时，有

$$Na^l|\rangle = (\overset{l=m}{m}-m)a^m|\rangle = 0 。$$

故令

$$|0\rangle \equiv a^l|\rangle ， \quad 则\ N|0\rangle = Na^l|\rangle = 0 ， \quad \langle 0|0\rangle = 1 .$$

即N的最小本征值必须为0。将($\bigstar$2)中的$|\rangle$用$|0\rangle$代替，得

$$N(a^+)^n|0\rangle = n(a^+)^n|0\rangle ， \qquad n为任意正整数.$$

或 $N|n\rangle = n|n\rangle$， 其中$|n\rangle$为归一化本征态$\langle n|n\rangle=1$。

下面求归一化本征态$|n\rangle$

$(a^+a+1)=N+1$　　$(a^+)^{n-1}(N+1+n-1)|0\rangle$　而$N|0\rangle = a^+a|0\rangle = 0$

$$\langle n|n\rangle \equiv \langle 0|a^n(a^+)^n|0\rangle = \langle 0|a^{n-1}aa^+(a^+)^{n-1}|0\rangle = \langle 0|a^{n-1}(N+1)(a^+)^{n-1}|0\rangle$$

$$= n\langle 0|a^{n-1}(a^+)^{n-1}|0\rangle = n(n-1)\langle 0|a^{n-2}(a^+)^{n-2}|0\rangle$$

$$= n(n-1)(n-2)\cdots 1\langle 0|0\rangle = n!$$

$\therefore$ 归一化本征态 $\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle}$. 满足 $\begin{cases}\langle n|n\rangle = 1 \\ H|n\rangle = \omega(n+\frac{1}{2})|n\rangle, \quad n=0,1,2\cdots \\ E_n = \omega(n+\frac{1}{2})\end{cases}$

其中，利用$N|0\rangle = a^+a|0\rangle = 0$，故真空态须 $\begin{cases}\langle 0|0\rangle = 1, \\ H|0\rangle = \frac{1}{2}\omega|0\rangle \\ E_0 = \frac{1}{2}\omega\end{cases}$ 真空态

$\boxed{a|0\rangle = 0 \quad \text{湮灭算符作用于真空态上为0}}$

3) $|n\rangle$ 的正交、完备性.

① $\langle n|N|n'\rangle = n\langle n|n'\rangle = n'\langle n|n'\rangle$. $\quad (n-n')\langle n|n'\rangle = 0$.

若 $n'\neq n$. $\langle n|n'\rangle = 0$; 若 $n'=n$. $\langle n|n'\rangle = 1$, 仍为 0.

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

② 完备性说明:

定义 $I \equiv \sum_n |n\rangle\langle n|$. 作用于 $|n'\rangle$.

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

由于 $|n'\rangle$ 是任意态, $\therefore I = 1$, 或 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$.

4) 矩阵表示

利用

$$a^+|n\rangle = a^+\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle = \frac{\sqrt{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}(a^+)^{n+1}|0\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

$$a|n\rangle = a\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle = aa^+\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^{n-1}|0\rangle = \frac{N+1}{\sqrt{n!}}(a^+)^{n-1}|0\rangle = (a^+)^{n-1}\frac{(N+1)}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

$$= \frac{n}{\sqrt{n!}}(a^+)^{n-1}|0\rangle = \sqrt{n}\frac{1}{\sqrt{(n-1)!}}(a^+)^{n-1}|0\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle. \quad 而 N|0\rangle = a^+a|0\rangle = 0$$

即 $\begin{cases} a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \\ a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \end{cases}$ $\Rightarrow \begin{cases} \langle n|a^+|n\rangle = \langle n|\sqrt{n+1}|n+1\rangle = 0, \\ \langle n+1|a^+|n\rangle = \langle n+1|\sqrt{n+1}|n+1\rangle = \sqrt{n+1}, 其它为 0; \\ \langle n|a|n\rangle = \langle n|\sqrt{n}|n-1\rangle = 0, \\ \langle n-1|a|n\rangle = \langle n-1|\sqrt{n}|n-1\rangle = \sqrt{n}, 其它为 0. \end{cases}$

引进实正交基 $|0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}$, $|1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}$, $|2\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}$,

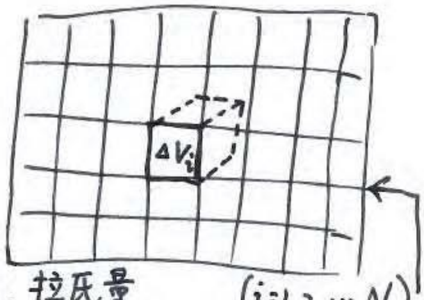
则 $N = \begin{pmatrix}0 & & & 0\\ & 1 & & \\ & & 2 & \\ & & & 3 \\ 0 & & & & \ddots\end{pmatrix}$, $a = \begin{array}{c|l} & \begin{array}{cccc} n=0 & n=1 & n=2 & \cdots \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} n=0 \\ n=1 \\ n=2 \\ \vdots \end{array} & \begin{pmatrix}0 & \sqrt{1} & & 0\\ & 0 & \sqrt{2} & \\ & & 0 & \sqrt{3}\\ 0 & & & 0\end{pmatrix} \end{array}$ $a^+ = \begin{pmatrix}0 & & 0\\ \sqrt{1} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0\end{pmatrix}$.

$$\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n| = \begin{pmatrix}1 & & 0\\ & 1 & \\ 0 & & \ddots\end{pmatrix}$$

三. 自由场的量子化

下面考虑定域场$\phi(x)$的量子化。

假定由定域场$\phi(x)$描述的系统封闭在一个有限的,大小为V的矩形盒内,假定ϕ满足周期性边界条件: $f(x)=f(x+L)$, 最后令$V\to\infty$。需强调的是,这种做法和一开始就把V设成是无限的做法在物理上是一样的.因为我们所认知的宇宙是有限的,因此让V按不同的方式趋向无穷应得到相同的理论结果。



为方便起见,将V分割成许多大小为ΔV_i的小立方体。设在每个指定的小立方体中$\phi(\vec{x},t)$的值由$\phi(\vec{x}_i,t)\equiv\phi_i(t)$来代表,其中$\vec{x}_i$是这个小立方体中任意选取的固定点坐标。则对第$i$个小立方格子,可以定义广义坐标,广义速度,广义拉氏密度,拉氏量 $(i=1,2,\cdots N)$.

$$\phi_i(t)=\frac{1}{\Delta V_i}\int_{\Delta V_i}\phi(x)\,d^3x,\qquad \dot{\phi}_i(t)=\frac{1}{\Delta V_i}\int_{\Delta V_i}\dot{\phi}(x)\,d^3x,$$

$$\mathcal{L}_i(t)=\frac{1}{\Delta V_i}\int_{\Delta V_i}\mathcal{L}[\phi(x),\dot{\phi}(x)]\,d^3x,\qquad L(t)=\sum_i\mathcal{L}_i(t)\,\Delta V_i=L[\phi_i(t),\dot{\phi}_i(t)],$$

其中, $i=1,2,\cdots,N$为小格子编号,这里可以看作是自由度的指标。

当$\Delta V_i\to0$时,小格子有无穷多个,从而V内的系统就具有无穷多个自由度。因此,场是具有无穷多自由度的力学系统。

引入正则动量和哈密顿量

$$P_i(t)\equiv\frac{\partial L}{\partial\dot{\phi}_i}=\frac{\partial\mathcal{L}_i}{\partial\dot{\phi}_i}\Delta V_i\equiv\pi_i(t)\Delta V_i,\quad H\equiv\sum P_i\dot{\phi}_i-L,$$

$$\frac{\partial\left(\sum_j\mathcal{L}_j(t)\Delta V_j\right)}{\partial\dot{\phi}_i}$$

假定$\phi_i(t)$和$P_i(t)$是希伯空间的算符,满足对易关系

$$[\phi_i(t),P_i(t)]=i\delta_{ij},$$
$$[\phi_i(t),\phi_j(t)]=[P_i(t),P_j(t)]=0,$$

及运动方程

$$\dot{\phi}_i(t)=i[H,\phi_i(t)],\quad \dot{P}_i(t)=i[H,P_i(t)],\quad \dot{F}_i(t)=i[H,F_i(t)].$$

上述对易关系即为量子化条件,运动方程即为量子化后的结果。

当每个小格子体积$\Delta V_i \to 0$时，上面各式回到连续情形

$$\begin{cases} \phi_i(t) \longrightarrow \phi(x) \\ \dot{\phi}_i(t) \longrightarrow \dot{\phi}(x) \\ \pi_i(t) = \dfrac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial \dot{\phi}_i} \to \boxed{\pi(x) = \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(x)}} \\ P_i(t) = \pi_i(t)\Delta V_i \to \pi(x)\, d^3x \end{cases} , \quad \begin{cases} L(t) = \sum\limits_i \mathcal{L}_i \Delta V_i \longrightarrow L(t) = \int \mathcal{L}(x)\, d^3x \\ H = \Sigma P_i \dot{\phi}_i - L \to \boxed{H = \int (\pi \dot{\phi} - \mathcal{L})\, d^3x} \\ \quad = (\Sigma\, \pi_i \dot{\phi}_i - \mathcal{L}_i)\Delta V_i \quad \equiv \int \mathcal{H}\, d^3x \\ \quad \text{其中}, \ \mathcal{H} \equiv \pi \dot{\phi} - \mathcal{L} \end{cases}$$

而量子化条件及结果变为

$$[\phi_i(t), P_j(t)] = [\phi_i(t), \pi_j(t)]\Delta V_j = i\,\delta_{ij} \longrightarrow \boxed{[\phi(\vec{x},t), \pi(\vec{x}',t)] = i\,\delta(\vec{x}-\vec{x}')},$$

$$[\phi_i(t), \phi_j(t)] = [\pi_i(t), \pi_j(t)] = 0 \longrightarrow \boxed{[\phi(\vec{x},t), \phi(\vec{x}',t)] = [\pi(\vec{x},t), \pi(\vec{x}',t)] = 0},$$

$$\begin{cases} \dot{\phi}_i(t) = i[H, \phi_i(t)] \\ \dot{P}_i(t) = i[H, P_i(t)] \end{cases} , \quad \longrightarrow \begin{cases} \dot{\phi}(x) = i[H, \phi(x)] \\ \pi(x) = i[H, \pi(x)] \end{cases}$$

$$\dot{F}_i(t) = i[H, F_i(t)] \qquad \longrightarrow \boxed{\dot{F}(x) = i[H, F(x)]}$$