



凝聚态物理：从量子力学到量子纠缠

Condensed Matter Physics : From Quantum Mechanics to Quantum Entanglement

作者：A & B & C

组织：Group 530

时间：2024/7/18

版本：1.0

当前进度：尚未完成

尚未完成!WIP!

目录

第一章 初识量子力学	2
1.1 狄拉克符号	2
1.1.1 右矢空间	2
1.1.2 左矢空间和内积	3
1.1.3 算符	4
1.1.4 结合公理	5
1.2 基矢与矩阵表示	6
1.2.1 可观测量的本征矢	6
1.2.2 本征矢作为基右矢	7
1.2.3 矩阵表示	7
1.2.4 自旋 $\frac{1}{2}$ 系统	9
1.3 测量, 不确定度关系	9
1.3.1 测量	9
1.3.2 再论自旋 $\frac{1}{2}$ 系统	11
1.3.3 相容可观测量	12
1.3.4 不相容可观测量	14
1.3.5 不确定度关系	15
1.4 表象变换	16
1.4.1 变换算符	16
1.4.2 变换矩阵	17
1.4.3 对角化	18
1.4.4 么正等价可观测量	18
1.5 位置, 动量和平移	19
1.5.1 连续谱	19
1.5.2 位置本征右矢和位置测量	20
1.5.3 平移	21
1.5.4 动量作为一个平移生成元	22
1.5.5 正则对易关系	24
1.6 坐标空间和动量空间下的波函数	25
1.6.1 位置空间波函数	25
1.6.2 位置基中的动量算符	26
1.6.3 动量空间波函数	27
1.6.4 高斯型波包	28
1.6.5 推广到三维	29
第一章 练习	30
第二章 量子动力学	33
2.1 时间演化和薛定谔方程	33
2.1.1 时间演化算符	33
2.1.2 薛定谔方程	35
2.1.3 能量本征右矢	36

2.1.4	期望的时间依赖	37
2.1.5	自旋进动	38
2.1.6	关联振幅和能量时间不确定度关系	39
2.2	薛定谔绘景和海森堡绘景	40
2.2.1	么正算符	40
2.2.2	薛定谔绘景和海森堡绘景中的态右矢和可观测量	41
2.2.3	海森堡运动方程	42
2.2.4	自由粒子及埃伦费斯特 (Ehrenfest) 定理	42
2.2.5	基右矢和跃迁振幅	44
2.3	简谐振子	45
2.3.1	能量本征右矢和能量本征值	45
2.3.2	谐振子的时间演化	49
2.4	薛定谔波动方程	50
2.4.1	时间相关的波函数	50
2.4.2	时间无关波动方程	51
2.4.3	波函数的解释	52
2.4.4	经典极限	53
2.5	薛定谔波动方程的基本解	53
2.5.1	三维自由粒子	53
2.5.2	简谐振子	55
2.6	传播子和费曼路径积分	57
2.6.1	波动力学中的传播子	57
2.6.2	传播子作为跃迁振幅	59
2.6.3	路径积分作为对路径的求和	60
2.6.4	费曼的公式化表述	61
2.7	位势和规范变换	64
2.7.1	恒定位势	64
2.7.2	电磁学中的规范变换	65
2.7.3	阿哈罗诺夫-玻姆效应	68
	第二章 练习	70
	第三章 李群 (Lie Group) 与李代数 (Lie Algebra)	77
3.1	李群 (Lie Group) 初步	77
3.1.1	群与李群 (Lie Group)	77
3.1.2	指数映射与对数映射	81
3.1.3	单参数子群	81
3.2	李群与李代数	83
3.2.1	李代数	83
3.2.2	李氏三定理和无穷小变换	86
3.2.3	李群的无穷小生成元	86
3.2.4	典型李群和李代数	86
3.3	角动量理论	86
3.3.1	量子力学中的无穷小转动	86
3.3.2	自旋 $\frac{1}{2}$ 的转动算符	88
3.3.3	再谈自旋进动	91

3.3.4 泡利二分量形式	92
3.3.5 二分量形式中的转动	94
3.4 角动量的本征值和本征态	95
3.4.1 对易关系和阶梯算符	96
3.4.2 \mathbf{J}^2 和 \mathbf{J}_z 的本征值	97
3.4.3 角动量算符的矩阵元	99
3.4.4 转动算符的表示	100
3.5 轨道角动量	102
3.5.1 作为转动生成元的轨道角动量	102
3.5.2 球谐函数	104
3.5.3 球谐函数作为转动矩阵	107
3.6 中心势的薛定谔方程	108
3.6.1 径向方程	108
3.6.2 自由粒子和无穷深球形势阱	110
3.6.3 各向同性谐振子	111
3.6.4 库仑 (Coulomb) 势	113
3.7 角动量的加法	115
3.7.1 角动量加法的一些简单例子	115
3.7.2 角动量加法的形式理论	118
3.7.3 克莱布什-戈丹系数的递推关系	121
3.7.4 克莱布什-戈丹系数和转动矩阵	125
3.8 李代数进阶	126
3.8.1 张量, 不可约张量	126
3.8.2 矢量算符	126
3.8.3 笛卡尔张量与不可约张量	127
3.8.4 张量积	129
3.8.5 张量算符的矩阵元及维格纳-埃卡特定理	131
3.8.6 卡西米尔算符 (Casimir operator)	134
3.8.7 典型李代数的二阶卡西米尔算符	134
3.9 对称性	134
3.9.1 诺特定理	134
3.9.2 库仑势中的 $SO(4)$ 对称性	134
3.9.3 分立对称性, 宇称	138
3.9.4 晶格平移作为一种分立对称性	139
3.9.5 时间反演分立对称性	142
3.9.6 时间反演算符	143
第四章 二次量子化	147
4.1 密度算符和纯系综与混合系综	147
4.1.1 极化束与非极化束	147
4.1.2 系综平均和密度算符	148
4.1.3 系综的时间演化	152
4.1.4 连续的推广	152
4.1.5 量子统计力学	153
4.2 自旋关联测量和贝尔不等式	156

4.2.1 自旋单态中的关联	156
4.2.2 爱因斯坦局域性原理和贝尔不等式	158
4.2.3 量子力学和贝尔不等式	159
第五章 格林函数	167
第六章 路径积分, 关联函数	168
第七章 铁磁类模型	169
第八章 重整化群方法 (RG)	170
第九章 量子纠缠与 QSL	171
第十章 前沿导读	172
附录 A 单位制	173
A.1 电磁单位制	173
A.2 自然单位制	174
A.2.1 普朗克单位制	174
A.2.2 “自然单位制”(粒子物理)	174
A.2.3 其他单位制	174
附录 B 固体物理中的一些概念	175
附录 C $\delta_{ij}, \varepsilon_{ijk}$ 和爱因斯坦求和约定与 δ 函数	176
C.1 克罗内克符号 δ_{ij}	176
C.2 列维西维塔符号 ε_{ijk}	176
C.3 爱因斯坦求和约定	177
C.4 δ 函数	177
C.4.1 定义	177
C.4.2 性质	177
附录 D mathematica 的基本用法	178
附录 E 临时章节	179
附录 F 答案及解析	181
F.1 第一章	181
F.2 第二章	185
附录 G 致谢/参考	186
G.1 致谢	186
G.2 参考	186

前言

学好这些物理必不可少的是学好线性代数和微积分, 本书的最低阅读门槛已经降到掌握线性代数和微积分就可以尝试阅读了. 对于部分数学物理方法和固体物理中的概念会尝试在附录补充.

我们可以把这些几乎所有的东西都算作线性空间里面的东西, 无论是态矢量, 算符, 群... 这些都没有脱离线性空间的框架, 所以本书的大部分内容都尽可能依托线性空间这个基本盘来诠释. 大多数诠释是更加物理的, 毕竟没有哪一本数学教材会把向量空间和线性空间模糊到一起 (不过在必要的情况下尽量修补数学上的漏洞, 在前几章尽量不会肆意使用晦涩的数学概念).

对于一些经典实验, 如盖拉赫实验, 这个实验可以让从未接触过这一方面的新手受益匪浅. 但是出于一些考虑 (更加强调线性空间, 能够提供更加深入的理解, 同时不必花大篇幅来讲解这一实验), 选择直接从线性空间来开始第一章的内容, 如果想要对这一方面加以了解的话, 可以参考这一篇文章[盖拉赫实验 \(知乎\)](#).

对于这一领域, 学到第九章其实就具备阅读期刊论文的能力了, 后面开始的章节前部分是面世已久的模型. 后部分是近些年才面世的新模型和新理论, 主要由个人经历写成, 方向较为前沿且范围较小, 故仅供参考.

目前打算写在最后的东西包括: 泛函重整化群, 一些较新的模型, 一些和纠缠相关的内容. 预计在这几个月初步写到第九章, 然后慢慢补充修正 (尤其是第九章之后的内容), 大部分重要的内容会尽量写在较前面, 不过可能为了贴合书名先写纠缠的部分.

目前进度: 第三章.

第一章 初识量子力学

内容提要

❑ 狄拉克符号与算符

❑ 厄米算符与么正算符

❑ 位置与动量

❑ 平移

对于量子力学部分, 本书并没有按照国内常见的教材的顺序逐步开始. 主要参考了 Sakurai 的现代量子力学中的前五章. 鉴于原书翻译年代较久且篇幅较长, 故对一些章节做了变动.

1.1 狄拉克符号

我们首先关注的是一个矢量空间¹. 在量子物理中, 我们通过把一个物理态抽象为该线性空间的一个元素 (即其中一个矢量) 来简化相关的研究. 而狄拉克所开发的一套符号系统很好的描述这些特殊矢量的相互作用, 使原本冗长的式子简洁起来, 这就是为什么我们要学习掌握狄拉克符号.

1.1.1 右矢空间

对于一个线性空间, 我们稍稍回忆线性代数中的内容: 显然, 这个线性空间的维度数是一个非常重要的参数. 但是, 如果把一个物理态用该线性空间的一个矢量来表示, 那么维度数该如何考虑?

例如, 对于一个拥有自旋自由度的电子 (忽略其他自由度). 我们想要在一个线性空间里面描述它, 至少需要二维的空间. 倘若要考虑这个电子的位置或动量, 那一个有限维的空间已经无法表述它了, 我们需要把这个线性空间扩展到无限维线性空间, 我们称其为希尔伯特空间 (注意这二者并不等价).

回到狄拉克符号, 我们再次考虑一个电子并忽略除自旋以外的自由度. 这样, 一个确定自旋的电子就可以用一个线性空间中的一个矢量 (我们称其为**态矢量**) 来表述, 并按照狄拉克符号的记法, 将其记为一个**右矢**, 以 $|\alpha\rangle$ 表示. 我们所关心的所有信息都包含在这个右矢里面 (本例中为该电子的自旋方向), 右矢可以相加.

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle \quad (1.1)$$

它们的和 $|\gamma\rangle$ 为另一个右矢. 对于任意一个复数 c , 它与任意右矢的积为另一个右矢, 且数在右矢左右没有区别.

$$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c \quad (1.2)$$

特别的, 当 $c = 0$ 时, 得到的右矢称为**零右矢**.

对于右矢, 我们约定 $|\alpha\rangle$ 和 $c|\alpha\rangle$ 在 $c \neq 0$ 时表示同一物理态. 这也是说, 对于这个线性空间中的任意矢量, 只有方向是存在意义的.

一个可观测量. 诸如动量和自旋的分量, 可用所涉线性空间中的算符, 比如 A 来表示. 较为具象的理解, 算符即一种操作 (变换), 将算符乘以右矢即对这个右矢相应的物理量进行变换 (如时间演化算符作用到一个右矢上, 那么表示这个右矢经历一段时间后的物理态). 总的来说, 一个算符从左边作用于一个右矢

$$A \cdot (|\alpha\rangle) = A|\alpha\rangle \quad (1.3)$$

不难发现结果仍是右矢.

注 事实上, 对于一个线性空间, 我们更容易联想到矩阵, 如果把右矢看作相应线性空间中的一个矩阵, 算符是具有物理意义的矩阵 (如同线性代数中经典的旋转矩阵那样), 算符和右矢的乘积相当于矩阵和矩阵的乘积, 只能左乘但不能右乘自然是矩阵维度的限制, 这一点将在下一节的矩阵表示中展示的更加清楚.

¹文中指线性空间, 下文统称线性空间. 其由于物理规律的限制, 它必须是复线性空间 (在线性代数有时也叫酉空间, 酉 *unitary* 为过去音译, 现物理常译作么正, 部分旧教科书会错译为么正).

本征态

在大多数情况下,算符 A 作用在右矢 $|\alpha\rangle$ 上往往并不意味着直接乘以一个常数,但是存在一些特殊的右矢 $|a'\rangle$ 使得算符 A 作用在该右矢后相当于直接乘以一个常数 a' ,此时我们称这个常数 a' 为本征值, $|a'\rangle$ 为本征右矢.

正如上一段所讲,我们可以直接把本征值和线性代数中的特征值联系起来,它们本质上是一致的,这下,我们又回到我们所熟知的线性代数的范畴了.

显然这些本征右矢根据定义有以下性质

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle, A|a''\rangle = a''|a''\rangle, \dots \quad (1.4)$$

根据定义,这些 $a', a'', a''' \dots$ 只是一些单纯的数字,且注意到算符 A 作用在一个本征右矢前后是仅相差一个常数的同一个右矢.算符 A 作用在全部本征右矢后所得出的本征值的集合 $\{a', a'', a''', \dots\}$, 写成更紧凑的形式为 $\{a'\}$ 被称为算符 A 的本征值集.使用中可以用数字角标替代 $', ', ''$ 的形式.并且我们把与一个本征右矢相对应的物理态称作本征态.

在前面我们并没有详细的探讨怎么确定该线性空间的维数,现在我们可以给出暂时的答案:这个线性空间是可观测测量(算符) A 的 N 个本征右矢所张成的一个 N 维线性空间,其中该空间中任一个右矢 $|\alpha\rangle$ 都可以用 A 所对应的本征右矢写成如下形式

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (1.5)$$

其中 $c_{a'}$ 为复系数,这个关系从矩阵角度也很容易得出.

1.1.2 左矢空间和内积

我们一直处理的线性空间是右矢空间.现在我们引入左矢空间的概念,它是一个与右矢空间对偶²的线性空间.我们假定对应于每个右矢 $|a\rangle$, 在这个对偶空间或左矢空间中都存在一个左矢,用 $\langle a|$ 表示.左矢空间由本征左矢 $\{\langle a'|\}$ 所张成,它们与本征右矢 $\{|a'\rangle\}$ 相对应.右矢空间与左矢空间的一一对应关系为

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &\xleftrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha| \\ |a'\rangle, |a''\rangle, \dots &\xleftrightarrow{\text{DC}} \langle a'|, \langle a''|, \dots \\ |a\rangle + |\beta\rangle &\xleftrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha| + \langle\beta|, \end{aligned} \quad (1.6)$$

其中 DC 代表对偶对应,简单来讲(但不严谨),左矢空间可以看作右矢空间的某种镜像(或者说是共轭).

特别的,我们需要注意的是,与 $c|\alpha\rangle$ 对偶的不是 $c\langle\alpha|$ 而是 $c^*\langle\alpha|$.即如下

$$c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle \xleftrightarrow{\text{DC}} c_\alpha^* \langle\alpha| + c_\beta^* \langle\beta| \quad (1.7)$$

我们现在定义一个左矢和一个右矢的内积³.左矢和右矢的内积要求为左矢左乘右矢,即如下形式

$$\langle\beta|\alpha\rangle = (\langle\beta|) \cdot (|\alpha\rangle) \quad (1.8)$$

正如同我们高中所学过的“向量点乘”那样,左右矢内积的结果也同样是一个数,不同的是,它一般是一个复数.这里还需要强调一下,构成一个内积的结果总是从左矢空间和右矢空间取一个矢量.

内积存在两个基本性质,首先

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* \quad (1.9)$$

即表明, $\langle\beta|\alpha\rangle$ 与 $\langle\alpha|\beta\rangle$ 互为复共轭.

注 虽然我们在前面数次将其类比为两个矢量间的“点乘”,但实际中还是存在差别,必须加以区分.这里我们可以

²我们可以粗浅的认为对偶是一类更深刻的对称性,更详细的说对偶空间就是一个赋范空间的所有线性有界泛函所组成的定义了范数的向量空间,更详细的探讨在后续章节

³可以类比高中所学的向量标量积(数量积),或者通俗来讲的向量“点乘”

发现其中显而易见的区别: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}$, 但是对于内积而言 $\langle \beta | \alpha \rangle \neq \langle \alpha | \beta \rangle$. 我们可以发现造成这个不同的主要原因是左右矢空间为复线性空间, 而通常的矢量被定义在三维欧氏空间中 (实空间), 我们在线性代数中接触的内积也大多定义在实空间内, 这是出现这一区别的核心因素.

从这个基本性质, 我们自然得到 $\langle \alpha | \alpha \rangle$ 一点为实数 (证明这个关系只需要让 $\langle \beta | \rightarrow \langle \alpha |$ 即可).

另一个性质为

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0 \quad (1.10)$$

其中当且仅当 $|\alpha\rangle$ 为零右矢时成立. 这个性质也称**正定度规假设**⁴, 这个概念对于量子力学中的概率解释是必要的.

如果两个右矢 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 满足

$$\langle \alpha | \beta \rangle = 0 \quad (1.11)$$

此时我们称这两个右矢为**正交的**. 我们特殊强调了是位于同一空间中的两个右矢直接的关系, 即使式子中存在左矢 $\langle \alpha |$.

我们前面提到过, 在一个物理态所处的线性空间 (右矢空间), 对于其中的右矢, 只有方向是存在意义的. 我们自然想到: 如果只有方向存在意义, 那我们可以把大小统一为一个标准 (通常为单位长度 1). 这样的操作在物理上被称为**归一化**, 一个归一化的右矢 $|\tilde{\alpha}\rangle$ 可以被构造为

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} \right) |\alpha\rangle \quad (1.12)$$

它存在以下性质⁵

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 \quad (1.13)$$

类似于欧氏空间中的长度 $\sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}} = |\mathbf{a}|, \sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}$ 被称为 $|\alpha\rangle$ 的**模长**, 简称**模**.

1.1.3 算符

正如我们前面所说, 类似动量, 自旋分量等可观测量可以用算符来表示, 在这一部分, 我们使用 A, B 表示这类算符. 相应的, 我们使用 X, Y 来表示更广泛的作用在右矢上的算符.

算符从左边作用在右矢上

$$X \cdot (|\alpha\rangle) = X|\alpha\rangle,$$

得到的乘积是另一个右矢. 如果对于所涉及右矢空间的任意一个右矢都有

$$X|\alpha\rangle = Y|\alpha\rangle$$

则称算符 X 和 Y 相等

$$X = Y$$

若对任意的右矢 $|\alpha\rangle$, 我们都有

$$X|\alpha\rangle = 0$$

则称算符 X 为**零算符**. 算符可以相加: 加法运算是可交换的和可结合的:

$$X + Y = Y + X$$

$$X + (Y + Z) = (X + Y) + Z$$

除了少数例外, 如最常见的时间反演算符为**非线性算符**, 我们所用到的算符大多都是**线性算符**, 即满足

$$X(c_\alpha |\alpha\rangle + c_\beta |\beta\rangle) = c_\alpha X|\alpha\rangle + c_\beta X|\beta\rangle \quad (1.14)$$

⁴也称黎曼度规, 详细内容会在涉及的时候重新论述.

⁵如果对度规有一定了解的话, 可以发现这里先给定正定度规是必要的.

算符 X 总是从右边作用在左矢上

$$(\langle\alpha|) \cdot X = \langle\alpha|X \quad (1.15)$$

得到的积是另一个左矢. 一般而言, 右矢 $X|\alpha\rangle$ 与左矢 $\langle\alpha|X$ 彼此并不相互对偶. 我们把符号 X^\dagger 定义为

$$X|\alpha\rangle \xleftrightarrow{\text{dC}} \langle\alpha|X^\dagger \quad (1.16)$$

算符 X^\dagger 称为 X 的厄米共轭或简称 X 的共轭算符. 如果一个算符满足

$$X = X^\dagger \quad (1.17)$$

它被称作厄米算符.

对于乘法, 算符 X 和 Y 可以相乘. 一般而言, 乘法运算是非对易的. 这就是说:

$$XY \neq YX \quad (1.18)$$

然而, 乘法运算是可结合的:

$$X(YZ) = (XY)Z = XYZ \quad (1.19)$$

我们还有

$$X(Y|\alpha\rangle) = (XY)|\alpha\rangle = XY|\alpha\rangle, \quad (\langle\beta|X)Y = \langle\beta|(XY) = \langle\beta|XY$$

可以注意到如下关系

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger \quad (1.20)$$

这是因为对偶关系的共轭性, 即

$$XY|\alpha\rangle = X(Y|\alpha\rangle) \xleftrightarrow{\text{dC}} (\langle\alpha|Y^\dagger)X^\dagger = \langle\alpha|Y^\dagger X^\dagger \quad (1.21)$$

至此, 我们考虑了左矢, 右矢和算符之间的大多数乘积关系, 最后, 我们考虑让 $|\beta\rangle$ 左乘 $\langle\alpha|$, 其结果

$$(|\beta\rangle) \cdot (\langle\alpha|) = |\beta\rangle\langle\alpha| \quad (1.22)$$

被称为 $|\beta\rangle$ 与 $\langle\alpha|$ 的外积, 其与内积不同, 它被视作一个算符 (正如两个行向量和列向量的内积和外积分别为数和矩阵那样).

其余的乘积大多数无意义的. 我们已经提到过, 一个算符必须放在一个右矢的左边或者一个左矢的右边. 换言之, $|\alpha\rangle X$ 和 $X|\alpha\rangle$ 都是不合法乘积的例子. 它们既不是右矢也不是左矢, 又不是算符, 它们只是一些毫无意义的东西. 当 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ ($\langle\alpha|$ 和 $\langle\beta|$) 是属于同一个右矢 (左矢) 空间的右矢 (左矢) 时, $|\alpha\rangle|\beta\rangle$ 和 $\langle\alpha|\langle\beta|$ 等这样的乘积也都是不合法的⁶.

1.1.4 结合公理

从我们之前所举出的乘法案例来看, 算符之间的乘法是可结合的. 事实上, 对于算符之间的合法乘法运算, 这一性质是普遍成立的, 即乘法的结合公理.

一个简单的例子, 如果 $X = |\beta\rangle\langle\alpha|$, 那么则有 $X^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|$. 这一例子同时作为第一章习题集的第一道题, 其中答案位于附录部分.

对于结合中的另一个重要组合, 我们注意到

$$\underbrace{(\langle\beta|)}_{\text{左矢}} \cdot \underbrace{(X|\alpha\rangle)}_{\text{右矢}} = (\underbrace{\langle\beta|X}_{\text{左矢}}) \cdot \underbrace{(|\alpha\rangle)}_{\text{右矢}}.$$

我们使用更加紧凑的符号来表示这一组合 $\langle\beta|(X|\alpha\rangle)$, 而对于一个厄米算符 X , 我们有

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle = \langle\alpha|X|\beta\rangle^* \quad (1.23)$$

这个关系利用之前所学可以较轻松的证明.

⁶倘若 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ ($\langle\alpha|$ 和 $\langle\beta|$) 是位于不同线性空间中的右矢 (左矢), 那 $|\alpha\rangle|\beta\rangle$ 和 $\langle\alpha|\langle\beta|$ 是存在意义的, 但是它们通常写作 $|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$ 和 $\langle\alpha| \otimes \langle\beta|$

证明 考虑结合公理和内积的基本性质1.9, 有

$$\begin{aligned}\langle\beta|X|\alpha\rangle &= \langle\beta|\cdot(X|\alpha\rangle) \\ &= \{(\langle\alpha|X^\dagger)\cdot|\beta\rangle\}^\dagger \\ &= \langle\alpha|X^\dagger|\beta\rangle^*\end{aligned}$$

1.2 基矢与矩阵表示

我们这里只讨论基右矢, 基左矢的相关性质是显然可以通过基右矢得出的.

1.2.1 可观测量的本征矢

由于通常在物理中, 可观测量的算符 A 一般为厄米算符, 于是我们考虑一个厄米算符 A 的本征右矢和本征值.

定理 1.2.1

厄米算符 A 的本征值均为实数; A 的相应于不同本征值的本征矢是正交的.

证明 首先, 我们回顾第一节的部分

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle$$

由于 A 是厄米算符, 我们自然得出

$$\langle a''|A = a''^*\langle a''|$$

其中 a', a'', \dots 都是 A 的本征值. 如果我们把第一式的两边都左乘以 $\langle a''|$, 第二式的两边都右乘以 $|a'\rangle$, 然后相减, 就可得到

$$(a' - a''^*)\langle a''|a'\rangle = 0$$

现在 a' 和 a'' 可以取相同的值也可以取不同的值.

让我们先将它们取相同的. 这可以推证出实数条件 (该定理的前半部分)

$$a' = a'^*$$

其中我们用到了 $|a'\rangle$ 不是一个零矢量的事实.

现在让我们假定 a' 与 a'' 不同. 因为刚刚证明了的实数条件, 则差 $a' - a''^*$ 等于 $a' - a''$, 根据假定, 它不可能是零. 于是内积 $\langle a''|a'\rangle$ 一定是零:

$$\langle a''|a'\rangle = 0, \quad (a' \neq a'')$$

由此证明了正交性 (定理的后半部分).

从定理1.2.1中得出: 厄米算符的本征值为实数. 这也意味着我们通常讨论的可观测量的本征值也是实数. 而正交关系意味着我们可以构造基矢.

我们通常把 $|\alpha\rangle$ 归一化, 使 $\{|\alpha'\rangle\}$ 构成一个正交集.

$$\langle a''|a'\rangle = \delta_{a''a'} \quad (1.24)$$

关于克罗内克符号 δ_{ij} 参考附录部分.

通过我们右矢空间的构造, A 的本征右矢必然构成一个完备集. 这是为了能够“推导”出薛定谔方程所采取的一类假设.

1.2.2 本征矢作为基右矢

我们已经看到 A 的归一化的本征右矢构成了一个完备正交集. 右矢空间的一个任意右矢可以用 A 的本征右矢展开. 换句话说, A 的本征右矢被用作基右矢就像一组相互正交的单位矢量被用作欧几里得空间的基矢量一样.

在 A 的本征右矢所张的右矢空间中给定一个任意右矢 $|\alpha\rangle$, 让我们试着将其展开如下:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (1.25)$$

用 $\langle a''|$ 左乘且利用正交性 1.24, 我们立即可以得到展开系数:

$$c_{a'} = \langle a' | \alpha \rangle$$

换句话说, 我们有

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \quad (1.26)$$

它类似于 (实) 欧几里得空间的一个矢量 \mathbf{V} 的展开:

$$\mathbf{V} = \sum_i \hat{\mathbf{e}}_i (\hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{V})$$

其中的 $\{\hat{\mathbf{e}}_i\}$ 形成一组单位矢量的正交集. 我们现在来回忆一下乘法的结合公理: $|a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle$ 既可以看作数 $\langle a' | \alpha \rangle$ 乘以 $|a'\rangle$, 或等价地, 也可以看成算符 $|a'\rangle \langle a'|$ 作用在 $|\alpha\rangle$ 上.

因为 1.26 中的 $|\alpha\rangle$ 是一个任意的右矢. 所以我们一定有:

$$\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| = \mathbf{1} \quad (1.27)$$

其中右边的 $\mathbf{1}$ 被理解为单位算符. 方程 1.27 称为完备性关系或封闭性.

1.27 是极为重要的式子, 有了它, 我们可以在任何需要的位置插入一个这个形式的单位算符, 这个式子在此后会经常看见.

例如: 对于 $\langle \alpha | \alpha \rangle$, 我们在 $\langle \alpha |$ 和 $|\alpha\rangle$ 之间插入一个这样的单位算符, 自然得出:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \alpha \rangle &= \langle \alpha | \cdot \left(\sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| \right) \cdot |\alpha\rangle \\ &= \sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 \end{aligned} \quad (1.28)$$

而对于 1.27 中的 $|a'\rangle \langle a'|$, 显然这是一个算符, 我们让它作用在 $|\alpha\rangle$ 上

$$(|a'\rangle \langle a'|) \cdot |\alpha\rangle = |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle = c_{a'} |a'\rangle \quad (1.29)$$

我们发现, $|a'\rangle \langle a'|$ 从右矢 $|\alpha\rangle$ 中筛选出来方向与 $|a'\rangle$ 平行的部分, 所以, 我们称 $|a'\rangle \langle a'|$ 为沿着基右矢 $|a'\rangle$ 的投影算符 $\Lambda_{a'}$

$$\Lambda_{a'} \equiv |a'\rangle \langle a'| \quad (1.30)$$

于是 1.27 现在可以写为

$$\sum_{a'} \Lambda_{a'} = \mathbf{1} \quad (1.31)$$

1.2.3 矩阵表示

在规定基右矢之后, 我们所构造的一套狄拉克符号系统与我们熟知的线性代数所构造的一套矩阵语言几乎一模一样. 事实上, 我们完全可以用矩阵的语言来表示这一部分, 同时也展示出狄拉克符号在叙述时的简洁.

首先我们连续利用两次 1.27, 可以把算符 X 写成

$$X = \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle \langle a'' | X | a' \rangle \langle a'| \quad (1.32)$$

这正是我们所熟知的线性代数中矩阵的形式, 其中共有 N^2 个形式为 $\langle a'' | X | a' \rangle$ 的数, N 为该右矢空间的维数.

我们把算符 X 写成矩阵的形式

$$X \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | X | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(1)} | X | a^{(2)} \rangle & \dots \\ \langle a^{(2)} | X | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(2)} | X | a^{(2)} \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.33)$$

其中 \doteq 代表“被表示为”的含义.

在之前的内容中, 我们有

$$\langle a'' | X | a' \rangle = \langle a' | X^\dagger | a'' \rangle^*$$

此时我们发现, 之前所定义的厄米共轭算符与我们所熟悉的共轭转置联系在一起, 特别的, 对于一个厄米算符 B 有

$$\langle a'' | B | a' \rangle = \langle a' | B | a'' \rangle^* \quad (1.34)$$

现在我们考虑如何用基右矢来表示右矢的关系式

$$|\gamma\rangle = X|\alpha\rangle \quad (1.35)$$

其中 $|\gamma\rangle$ 的展开系数可以通过使用 $\langle a' |$ 左乘来求得

$$\begin{aligned} \langle a' | \gamma \rangle &= \langle a' | X | \alpha \rangle \\ &= \sum_{a''} \langle a' | X | a'' \rangle \langle a'' | \alpha \rangle \end{aligned} \quad (1.36)$$

我们将 $|\alpha\rangle$ 和 $|\gamma\rangle$ 的展开系数排列为如下的列矩阵

$$|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \alpha \rangle \\ \langle a^{(2)} | \alpha \rangle \\ \langle a^{(3)} | \alpha \rangle \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad |\gamma\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \gamma \rangle \\ \langle a^{(2)} | \gamma \rangle \\ \langle a^{(3)} | \gamma \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (1.37)$$

则上式便可以认为是一个方阵 X 乘以一个列矩阵 $|\alpha\rangle$ 得到另一个列矩阵 $|\gamma\rangle$.

同样的, 给定

$$\langle \gamma | = \langle \alpha | X \quad (1.38)$$

不难把左矢表示为类似的行矩阵

$$\begin{aligned} \langle \gamma | &\doteq (\langle \gamma | a^{(1)} \rangle, \langle \gamma | a^{(2)} \rangle, \langle \gamma | a^{(3)} \rangle, \dots) \\ &= (\langle a^{(1)} | \gamma \rangle^*, \langle a^{(2)} | \gamma \rangle^*, \langle a^{(3)} | \gamma \rangle^*, \dots) \end{aligned} \quad (1.39)$$

我们注意到列矩阵元出现了复共轭, 并且我们可以立刻写出内积 $\langle \beta | \alpha \rangle$ 的矩阵形式

$$\begin{aligned} \langle \beta | \alpha \rangle &= \sum_{a'} \langle \beta | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle \\ &= (\langle a^{(1)} | \beta \rangle^*, \langle a^{(2)} | \beta \rangle^*, \dots) \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \alpha \rangle \\ \langle a^{(2)} | \alpha \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.40)$$

自然, 根据我们在线性代数的学习, 得到的结果的确是一个复数. 同样的, 对于外积 $|\beta\rangle\langle\alpha|$ 的矩阵形式, 不难猜测结果仍为一个矩阵, 并如下所示:

$$|\beta\rangle\langle\alpha| \doteq \begin{pmatrix} \langle \alpha^{(1)} | \beta \rangle \langle \alpha^{(1)} | \alpha \rangle^* & \langle \alpha^{(1)} | \beta \rangle \langle \alpha^{(2)} | \alpha \rangle^* & \dots \\ \langle \alpha^{(2)} | \beta \rangle \langle \alpha^{(1)} | \alpha \rangle^* & \langle \alpha^{(2)} | \beta \rangle \langle \alpha^{(2)} | \alpha \rangle^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (1.41)$$

如果我们直接使用可观测量 A 自身的本征右矢作为基右矢, 那么 A 的矩阵表示得到非常大的简化. 我们先插入两

个单位算符:

$$A = \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle \langle a''| A |a'\rangle \langle a'| \quad (1.42)$$

并且注意到 $\langle a''|A|a'\rangle$ 是对角矩阵 (为什么?).

$$\langle a''|A|a'\rangle = \langle a'|A|a'\rangle \delta_{a'a''} = a' \delta_{a'a''} \quad (1.43)$$

于是有

$$\begin{aligned} A &= \sum_{a'} a' |a'\rangle \langle a'| \\ &= \sum_{a'} a' \Lambda_{a'} \end{aligned} \quad (1.44)$$

1.2.4 自旋 $\frac{1}{2}$ 系统

为了更加深刻的理解我们这一部分所学的内容, 我们需要考虑一个简单的例子 $\frac{1}{2}$ 自旋系统, 对于一个粒子 (当然它应该是费米子), 其自旋角动量的 z 分量的取值是分立的: 只能从 $\{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\}$ 中取一个值, 对于这个值, 有相应的自旋角动量算符 S_z , 其基右矢可以表示为 $|S_z; \pm\rangle$, 简单起见, 我们把它表示为 $|\pm\rangle$, 在 $|\pm\rangle$ 所张成的右矢空间中, 出于简单的角度, 我们考虑一个最基本的算符—单位算符 $\mathbf{1}$, 按照之前所强调的 1.27, 可以写成

$$\mathbf{1} = |+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-| \quad (1.45)$$

根据式子, S_z 可以进一步写成如下形式

$$S_z = (\hbar/2) \left[(|+\rangle\langle+|) - (|-\rangle\langle-|) \right] \quad (1.46)$$

而根据 $|\pm\rangle$ 的正交性, 进一步可以得到本征右矢-本征值关系:

$$S_z |\pm\rangle = \pm(\hbar/2) |\pm\rangle \quad (1.47)$$

接下来我们尝试构造两个与其密切相关的算符 (注意这两个算符目前并不是有对应的可观测量, 换句话说, 这两个算符不一定是厄米算符), 并找出这两个算符所关联的物理意义.

$$S_+ \equiv \hbar |+\rangle\langle-|, \quad S_- \equiv \hbar |-\rangle\langle+| \quad (1.48)$$

显然, 这两个算符都不是厄米算符, 观察算符形式, 我们可以发现当算符 S_+ 作用在自旋向下的右矢 $|-\rangle$ 时, 其可以使右矢 $|-\rangle$ 变为自旋向上的右矢 $|+\rangle$ 并乘以一个系数 \hbar . 而另一方面, 我们将算符 S_+ 作用在自旋向上的右矢 $|+\rangle$ 时, 其变为一个零右矢. 自然, 我们得出算符 S_+ 的物理意义: 可以使自旋分量 S_z 升高 \hbar , 当 S_z 不能被继续升高时, 我们将得到一个零态. 同样的, 算符 S_- 可以解释为自旋分量降低 \hbar 的算符. 之后, 我们会证明 S_{\pm} 可以用 x, z 分量的自旋角动量算符来表示 ($S_x \pm S_y$).

而回到这一节的矩阵表示, 我们同样构造该系统的矩阵表示, 我们约定: 按照角动量依次减小的顺序标记列 (行) 指标. 在我们所关注的 $\frac{1}{2}$ 自旋系统中, 有

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.49)$$

$$S_z \doteq \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad S_+ \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.50)$$

在后续的泡利算符的二分量表示时, 将继续用到上述式子.

1.3 测量, 不确定度关系

1.3.1 测量

我们使用一句经典的描述来开始这一节的内容:



笔记 “测量总是导致系统跳到被测量的动力学变量的一个本征态上”——狄拉克.

“A measurement always causes the system to jump into an eigenstate of the dynamical variable that is being measured.”

对于这一段话, 我们可以尝试进行解读: 首先在对可观测量 A 测量之前, 我们可以假定系统被表示为一类线性组合.

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \quad (1.51)$$

现在我们开始测量, 此时系统坍缩为可观测量 A 的某一个本征态, 我们用 a' 来表示. 换句话说

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{测量}} |a'\rangle \quad (1.52)$$

我们再次以 $\frac{1}{2}$ 自旋系统为例: 考虑一个具有任意自旋取向的粒子, 当我们对其 z 分量进行测量时, 其将变为 $|S_z; +\rangle$ 或 $|S_z; -\rangle$, 因此, 测量常常使态矢量发生改变. 我们使用“常常”是因为当这个态矢量已经是待观测量的某个本征态时, 测量并不会使其变为其他的本征态.

当测量导致 $|\alpha\rangle$ 变成 $|a'\rangle$ 时, 我们称测量 A 得到 a' . 正是在这种意义上, 一次测量的结果产生了被测量的可观测量的某个本征值.

回到我们给定的用线性组合 1.52 表示的系统, 当它在被测量前是一个物理系统的态矢量 (右矢), 显然, 我们并不能知道当我们对这个系统进行测量后, 其会坍缩为哪一个本征态. 于是, 为了想办法解决这个问题, 我们退而求其次, 尝试求坍缩为某一本征态的概率来作为替代.

我们假定经过测量后, 该右矢坍缩为本征态 $|a'\rangle$, 我们需要令 $|\alpha\rangle$ 归一化, 其坍缩至 a' 的概率可以用下式来表示

$$|\langle a'|\alpha\rangle|^2 \quad (1.53)$$

到目前为止, 许多人很难理解为什么模的平方可以代表概率. 原因很简单: 它足够简单, 足够有效, 更足够正确. 紧接着又有一个问题: 这种表示是唯一的吗? 是否存在一种更好的表述方法? 答案是目前不存在⁷, 并且有一些人尝试解释这一假设⁸, 这种表示是无法被证明的, 它是量子力学的基本假设之一. 相应的, 为了在实验中对其进行验证, 我们需要定义一些较好的系统来方便我们研究 (就如同高中我们天天打交道的小木块那样), 这类系统要求由一个全同制备且以同样的右矢 $|\alpha\rangle$ 表征, 我们把这类系统的集合称作**纯系综**, 当然, 某类系统的集合我们称为**系综**.

当然, 我们在这里尚且不必要去穷追不舍探究这个假设是否是唯一准确的, 我们仅通过一些极端案例来探索这一假设的恰当性. 能被证明. 然而, 我们应该注意, 在一些极端的情况下它具有明确的意义.

假定在测量之前态右矢就是 $|a'\rangle$, 则按照假设将得到测量结果 a' , 或更精确地说, 坍缩为 $|a'\rangle$ 态的概率是 1. 再一次测量 A , 我们当然只能得到 $|a'\rangle$; 一般来说, 连续重复测量同一个可观测量得到的结果相同⁹. 另一方面, 我们考虑开始由 $|a'\rangle$ 表征的系统坍缩为某个具有 $a'' \neq a'$ 的本征右矢 $|a''\rangle$ 的概率, 我们能够发现, 因为 $|a'\rangle$ 和 $|a''\rangle$ 间存在正交性致使相应所取概率为零. 例如, 如果一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统处在 $|S_z; +\rangle$ 态, 它肯定不会处于 $|S_z; -\rangle$ 态.

我们在中学就知道, 概率的取值范围为 $[0, 1]$, 所有可能的概率加起来的和一定等于 1, 我们继续通过这一原理来验证上面所提出的假设:

我们定义 A 对于态右矢 $|\alpha\rangle$ 所取概率的**期望**为

$$\langle A \rangle \equiv \langle \alpha | A | \alpha \rangle \quad (1.54)$$

为了表明期望所对应的态, 我们有时采取角标 $\langle A \rangle_\alpha$ 来强调这一点. 由于我们将其称为期望, 那么它自然能够写成

⁷该假设又称**波恩定则**, 目前实验中尚未发现违背波恩定则的量子行为.

⁸Andrew M. Gleason, David Deutsch, Wojciech H. Zurek, Charles Sebens, Simon Saunders, 其中格里森定理为其提供了数学支撑. 其他人试图从更基本的角度证明波恩定则, 但事实上大多为循环论证.

⁹当然我们要求这两次测量是连续的, 中间不存在间隔, 不然对于随时间演化的系统所得到的结果往往是不同的.

期望定义的形式:

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \sum_{a'} \sum_{a''} \langle \alpha | a'' \rangle \langle a'' | A | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle \\
 &= \sum_{a'} \underbrace{a'}_{\text{测量值}} \underbrace{|\langle a' | \alpha \rangle|^2}_{\text{得到 } a' \text{ 的概率}}
 \end{aligned} \quad (1.55)$$

当然, 我们不能把期望和本征值搞混, 于是, 在第一章末尾习题中给出了几个简单判断题来帮助加深印象.

1.3.2 再论自旋 $\frac{1}{2}$ 系统

我们在这一节探讨了一些测量的内容, 现在, 我们回到自旋 $\frac{1}{2}$ 系统, 继续深入考虑一些内容.

我们认为自旋角动量算符 S 的每一次坍缩到不同本征态的概率是相等的. 具体来讲, 对于 x 分量的算符 S_x , 其位于 $|S_x; +\rangle$ 态上, 在经过一次对于 z 分量的测量后, $|S_x; +\rangle$ 坍缩为 $|S_z; \pm\rangle$ (对于 z 分量, 我们简记为 $|\pm\rangle$), 由于概率相等, 每一个态的概率都是 $\frac{1}{2}$, 因此有

$$|\langle + | S_x; + \rangle| = |\langle - | S_x; + \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (1.56)$$

我们不妨利用右矢的非零系数 (我们称其为整体相因子) 不影响实际右矢来重新构造右矢 $|S_x; +\rangle$

$$|S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\kappa_1}|-\rangle \quad (1.57)$$

其中 κ_1 为待定实数, 我们默认把 $|+\rangle$ 的系数选为正的和实的 (这不是必须的!). 我们知道, $|S_x; +\rangle$ 与 $|S_x; -\rangle$ 必须相互正交, 这样我们也能写出 $|S_x; -\rangle$ 的相应构造

$$|S_x; -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\kappa_1}|-\rangle \quad (1.58)$$

我们这次同样把 $|+\rangle$ 的系数选为正的和实的, 并利用 1.44, 我们可以继续构造 S_x 算符.

$$\begin{aligned}
 S_x &= \frac{\hbar}{2} [(|S_x; +\rangle \langle S_x; +|) - (|S_x; -\rangle \langle S_x; -|)] \\
 &= \frac{\hbar}{2} [e^{-i\kappa_1} (|+\rangle \langle -|) + e^{i\kappa_1} (|-\rangle \langle +|)]
 \end{aligned} \quad (1.59)$$

以同样的论证方法得到 S_y 的相关内容:

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\kappa_2}|-\rangle \quad (1.60)$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} [e^{-i\kappa_2} (|+\rangle \langle -|) + e^{i\kappa_2} (|-\rangle \langle +|)] \quad (1.61)$$

现在我们发现对于 κ_1 和 κ_2 , 这是两个待定系数, 我们需要其他更多的信息来帮助确定它们之间的关系. 事实上, 我们此前一直单独考虑单次的测量所导致的坍缩现象, 现在我们考虑连续两次的测量: 对于一束位于 $|S_z\rangle$ 的粒子, 我们在对其进行一次 x 分量的测量之后再接着进行一次对 y 分量的测量

$$|\langle S_y; \pm | S_x; + \rangle| = |\langle S_y; \pm | S_x; - \rangle| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (1.62)$$

由于物理系统在转动之下的不变性, 这一结果并不奇怪, 在之后我们会更深入的讨论这些对称性所具有的内涵. 把前面含有 κ_1 和 κ_2 的式子与其联立, 可以得到

$$\frac{1}{2} \left| 1 \pm e^{i(\kappa_1 - \kappa_2)} \right| = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (1.63)$$

且仅当

$$\kappa_1 - \kappa_2 = \frac{\pi}{2} \text{ 或 } -\frac{\pi}{2} \quad (1.64)$$

时, 上式才能够被满足. 于是我们看到, S_x 和 S_y 的矩阵元不可能都是实数. 如果 S_x 的矩阵元全部是实的, 那么 S_y 的矩阵元一定是纯虚的 (反之亦然). 正是从这个非常简单的例子中可以看到, 复数的引入是量子力学的一个必然选择. 我们以方便起见取 S_x 的矩阵元为实数并设 $\kappa_1 = 0$, 接着第二个相因子 κ_2 必须是 $-\pi/2$ 或 $\pi/2$. 出现正负号的

情况是很好理解的: 我们并没有规定选取的坐标系是左手系或者右手系, 在之后我们将使用右手坐标系讨论作为一个转动生成元的角动量, 那时可以证明 $\kappa_2 = \pi/2$ 是正确的选择.¹⁰

总结一下, 有

$$|S_x; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle \quad (1.65)$$

$$|S_y; \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle \pm \frac{i}{\sqrt{2}}|-\rangle \quad (1.66)$$

和

$$S_x = \frac{\hbar}{2} [(|+\rangle\langle-|) + (|-\rangle\langle+|)] \quad (1.67)$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} [-i(|+\rangle\langle-|) + i(|-\rangle\langle+|)] \quad (1.68)$$

此外, 前面所定义的非厄米算符 S_{\pm} 现在可以写成

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y \quad (1.69)$$

很容易证明算符 S_x 和 S_y 与较早给出的 S_z 一起满足对易关系

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar S_k \quad (1.70)$$

以及反对易关系

$$\{S_i, S_j\} = \frac{1}{2}\hbar^2\delta_{ij} \quad (1.71)$$

其中的对易子 $[,]$ 与反对易子 $\{, \}$ 被定义为

$$[A, B] \equiv AB - BA \quad (1.72)$$

$$\{A, B\} \equiv AB + BA \quad (1.73)$$

注 关于符号 δ_{ij} 和 ϵ_{ijk} 的讨论请参考附录内容.

我们还可以如下定义算符 $\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}$. 或简写为 \mathbf{S}^2 ,

$$\mathbf{S}^2 \equiv S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 \quad (1.74)$$

通过反对易关系, 可以证明这个算符只不过是一个单位算符的常数倍数

$$\mathbf{S}^2 = \left(\frac{3}{4}\right)\hbar^2 \quad (1.75)$$

显然, 我们有

$$[\mathbf{S}^2, S_i] = 0 \quad (1.76)$$

1.3.3 相容可观测量

现在回到普遍形式, 我们将对照讨论相容的和不相容的可观测量. 当相应的算符对易时, 即

$$[A, B] = 0 \quad (1.77)$$

可观测量 A 和 B 被定义为相容的, 而当

$$[A, B] \neq 0 \quad (1.78)$$

时, A 和 B 被定义为不相容的. 例如, \mathbf{S}^2 和 S_z 是相容的可观测量, 而 S_x 和 S_z 是不相容的可观测量.

让我们先来考虑相容可观测量 A 和 B 的情况. 像往常一样, 我们假定右矢空间是由 A 的本征右矢所张成的. 我们还可以把这个同样的右矢空间看作是由 B 的本征右矢所张成的. 现在我们要问: 当 A 和 B 是相容的可观测量时, A 的本征右矢与 B 的本征右矢有什么样的关系?

¹⁰对于 的选取的可行性和便捷性的说明, 我们可以在后文关于角动量理论的阐述的部分.

在回答这个问题之前, 我们必须涉及早些时候避开的非常重要的一点——**简并性**的概念. 假定存在两个 (或多个) 线性独立的 A 的本征右矢, 它们具有相同的本征值; 则这两个本征右矢的本征值就称为简并的. 在这样的情况下, 单仅用本征值标记本征右矢的符号 $|a'\rangle$ 无法给出一种完整的描述; 此外, 我们还可以回忆一下, 我们前面给出的关于不同本征右矢的正交性定理是在非简并的假设下证明的. 更糟糕的是, 当右矢空间的维数大于 A 的可区分本征值的个数时, 这个由 $\{|a'\rangle\}$ 张成右矢空间的整个概念似乎陷入了困境. 幸运的是, 在量子力学的实际应用中, 通常的情况是此时某个其他对易的可观测量 (比如 B) 的本征值, 可以用来标记这些简并的本征右矢.

现在我们准备表述一个重要的定理

定理 1.3.1

假定 A 和 B 是相容的可观测量, 而且 A 的本征值是非简并的. 则矩阵元 $\langle a'' | B | a' \rangle$ 是全对角的. (在这里回顾一下, 如果用 $\{|a'\rangle\}$ 作为基右矢, 则 A 的矩阵元已经是对角的.)

证明 这个重要定理的证明是极其简单的. 利用相容可观测量的定义式, 我们注意到

$$\langle a'' | [A, B] | a' \rangle = (a'' - a') \langle a'' | B | a' \rangle = 0 \quad (1.79)$$

因此, 除非 $a' = a''$ 的情况下, $\langle a'' | B | a' \rangle$ 一定是零, 这就证明了我们的论点.

我们可以把 B 的矩阵元写成

$$\langle a'' | B | a' \rangle = \delta_{a'a''} \langle a' | B | a' \rangle \quad (1.80)$$

于是, 使用同样的基右矢集合, A 和 B 都可以用对角矩阵表示. 那么我们可以把 B 写成

$$B = \sum_{a''} |a''\rangle \langle a'' | B | a''\rangle \langle a''| \quad (1.81)$$

假定这个算符作用在 A 的一个本征右矢上:

$$B | a' \rangle = \sum_{a''} |a''\rangle \langle a'' | B | a''\rangle \langle a'' | a' \rangle = (\langle a' | B | a' \rangle) | a' \rangle \quad (1.82)$$

然而, 这只不过是算符 B 的本征方程, 其本征值为

$$b' \equiv \langle a' | B | a' \rangle \quad (1.83)$$

因此, $|a'\rangle$ 是 A 和 B 的一个**共同本征右矢**. 为了突出强调这一点, 我们采取 $|a', b'\rangle$ 来表征这个共同本征右矢.

我们已经看到, 相容的可观测量具有共同本征右矢. 尽管这是在 A 的本征右矢是非简并的情况下证明的, 这个表述即使在 n 重简并存在时也成立. 这就是说,

$$A | a'^{(i)} \rangle = a' | a'^{(i)} \rangle \quad \text{对于 } i = 1, 2, \dots, n \quad (1.84)$$

其中 $|a'^{(i)}\rangle$ 是 A 的 n 个相互正交的本征右矢. 它们都有相同的本征值 a' . 为了看清这一点, 我们所需要的就是构造一个适当的 $|a'^{(i)}\rangle$ 的线性组合, 它能按照将在下一节讨论的对角化方法把 B 算符对角化.

前面我们说过 A 和 B 的共同本征右矢用 $|a', b'\rangle$ 表示, 它有下列性质:

$$A | a', b' \rangle = a' | a', b' \rangle \quad (1.85)$$

$$B | a', b' \rangle = b' | a', b' \rangle \quad (1.86)$$

当不存在任何简并时, 这个符号有点多余, 因为在前面的讨论中可明显看到, 如果确定了 a' , 我们就一定知道出现在 $|a', b'\rangle$ 中的 b' . 当有简并存在时, 符号 $|a', b'\rangle$ 要强有力得多. 可用一个简单的例子来说明这一点.

尽管在角动量理论那一章之前, 本书将不会完整地讨论轨道角动量, 读者可能从其他地方了解到 \mathbf{L}^2 (轨道角动量平方) 和 L_z (轨道角动量的 z 分量) 的本征值分别是 $\hbar^2 l(l+1)$ 和 $m_l \hbar$, 其中 l 是一个整数且 $m_l = -l, -l+1, \dots, +l$ ¹¹. 为了完整地表征一个轨道角动量态, 必须同时给定 l 和 m_l . 例如, 如果我们只是说 $l=1$, 则 m_l 的值仍然可以取 0, +1 或 -1; 如果只是说 $m_l=1$, 则 l 可以是 1, 2, 3, 4, 等等. 只有同时给定 l 和 m_l , 我们才能唯一确

¹¹实际上, 在很多地方都会粗略的提一嘴, 即所谓角量子数.

定一个轨道角动量态表征. 通常使用一个集体指标 K' 来表示 (a', b') , 使

$$|K'\rangle = |a', b'\rangle \quad (1.87)$$

显然可以把我们的考虑推广到有几个 (两个以上) 互相相容可观测量的情况, 即

$$[A, B] = [B, C] = [A, C] = \cdots = 0 \quad (1.88)$$

假定我们已经找到了一个对易可观测量的最大集合; 这就是说, 我们不可能在不破坏上式的情况下, 再在我们的已经给出的集合中继续添加可观测量. 各个算符 A, B, C, \cdots 的本征值可以有简并, 但是如果确定了组合 (a', b', c', \cdots) , 则 A, B, C, \cdots 的共同本征右矢就被唯一地确定了. 我们可以再一次利用一个集体指标 K' 表示 (a', b', c', \cdots) . 对于

$$|K'\rangle = |a', b', c', \cdots\rangle \quad (1.89)$$

其正交关系记为

$$\langle K'' | K' \rangle = \delta_{K'K''} = \delta_{aa'} \delta_{bb'} \delta_{cc'} \cdots \quad (1.90)$$

而完备性关系或封闭性可以写成

$$\sum_{K'} |K'\rangle \langle K'| = \sum_{a'} \sum_{b'} \sum_{c'} \cdots |a', b', c', \cdots\rangle \langle a', b', c', \cdots| = 1 \quad (1.91)$$

现在我们考虑当 A 和 B 是相容的可观测量时对它们的测量. 假定我们先测量 A , 得到结果 a' . 紧接着, 我们可以测量 B 而得到结果 b' . 最后, 我们再测量 A . 从我们的测量公式框架可得到第三次测量总是确定地给出 a' . 这就是说, 第二次 (B) 测量并不破坏以前在第一次 (A) 测量中得到的信息. 当 A 的本征值非简并时, 这个结果是非常明确的:

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{A \text{ 测量}} |a', b'\rangle \xrightarrow{B \text{ 测量}} |a', b'\rangle \xrightarrow{A \text{ 测量}} |a', b'\rangle. \quad (1.92)$$

当存在简并时, 情况应该是这样的: 第一次 (A) 测量得到 a' 之后, 系统坍缩变为某种线性组合

$$\sum_i^n c_{a'}^{(i)} |a', b^{(i)}\rangle \quad (1.93)$$

其中 n 是简并度. 并且就 A 而言, 所有的右矢 $|a', b^{(i)}\rangle$ 都有着同样的本征值 a' . 第二次 (B) 测量可能从上面的线性组合的诸项中只挑出一项——比如, $|a', b^{(j)}\rangle$. 一旦进行第三次 (A) 测量时, 仍得到 a' . 不管是否有简并存在, A 测量与 B 测量互不干涉. 的确可以认为术语相容是恰当的.

1.3.4 不相容可观测量

现在我们转向不相容可观测量, 此时情况就要复杂得多了. 第一点需要强调的是不相容可观测量没有共同本征右矢完备集. 为证明这一点, 我们使用反证法: 让我们首先假定其逆命题是对的. 那么就会存在一组共同本征右矢, 具有相容可观测量相应的性质. 显然有

$$AB |a', b'\rangle = Ab' |a', b'\rangle = a'b' |a', b'\rangle \quad (1.94)$$

同样

$$BA |a', b'\rangle = Ba' |a', b'\rangle = a'b' |a', b'\rangle \quad (1.95)$$

因此

$$AB |a', b'\rangle = BA |a', b'\rangle \quad (1.96)$$

于是有 $[A, B] = 0$, 它与假设矛盾. 所以, 一般而言, 对于不相容的可观测量, $|a', b'\rangle$ 没有什么意义. 然而, 存在一个有意思的例外: 在右矢空间中可能存在一个这样的子空间, 尽管 A 和 B 是不相容的可观测量, 但是上式对该子空间的所有元素都成立. 在这里, 我们再次引用轨道角动量理论中的一个例子来帮助理解. 假定我们考虑一个 $l = 0$ 的态 (s 态) 尽管 L_x 和 L_z 不对易, 这个态却是 L_x 和 L_z 的一个共同本征态 (对于这两个算符, 本征值均为零). 这种情况下的这个子空间是一维的.

1.3.5 不确定度关系

这一节要讨论的最后一个论题是不确定度关系. 给定一个可观测量 A , 我们定义一个算符

$$\Delta A \equiv A - \langle A \rangle \quad (1.97)$$

其中期望是针对所考虑的确定的物理态的. 而 $(\Delta A)^2$ 的期望称为 A 的弥散度. 因为我们有

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2) \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (1.98)$$

上式中最后的一个式子, 可作为弥散度的另一类定义. 当然, 根据我们概率论的所学知识, 这也是方差的形式, 于是自然, 我们可以定义其的方差为 A 的弥散度. 显然, 当所谈及的态是 A 的一个本征态时, 弥散度为零. 我们现在应当回想我们是如何引入概率诠释的, 然后思考方差在数学上的意义, 当弥散度为零时, 方差为零, 即我们所关注的态坍缩为某一本征态的概率是平均且清楚的, 易分辨的¹². 粗略地讲, 一个可观测量的弥散度表征着“模糊性”. 例如, 对于一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的 S_z 态, S_x 的弥散度可以计算出来, 结果为

$$\langle S_x^2 \rangle - \langle S_x \rangle^2 = \hbar^2/4 \quad (1.99)$$

相比之下, 对于 S_z 态, 弥散度 $\langle (\Delta S_z)^2 \rangle$ 显然为零. 因此, 对于 S_z 态, S_z 是清晰的, 或者说是可分辨的 (S_z 有零弥散度) 而 S_x 是模糊的.

我们现在来表述不确定度关系, 量子力学最广为人知的 $x-p$ 不确定度关系正是它的一个例子. 设 A 和 B 是两个可观测量. 那么, 对任意一个态, 我们一定有下列的不等式 (有些量子力学教科书会把它放在习题里):

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 \quad (1.100)$$

要证明该式, 我们先来表述三个引理.

引理 1.3.1 (施瓦茨 (Schwarz) 不等式)

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \quad (1.101)$$

它类似于实欧几里得空间中的

$$|\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2 \geq |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}|^2 \quad (1.102)$$

证明 首先, 注意到

$$(\langle \alpha | + \lambda^* \langle \beta |) \cdot (|\alpha \rangle + \lambda |\beta \rangle) \geq 0 \quad (1.103)$$

其中 λ 可以是一个任意复数. 当令 $\lambda = -\langle \beta | \alpha \rangle / \langle \beta | \beta \rangle$ 时, 不等式

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle - |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \geq 0 \quad (1.104)$$

一定成立, 它与待证式子是一样的.

引理 1.3.2

厄米算符的期望是纯实数.

证明 利用定义即可得到, 证明是平凡的.

引理 1.3.3

定义为 $C = -C^\dagger$ 的反厄米算符, 其期望是纯虚数.

证明 同样是平凡的.

有了这些引理, 我们就能够证明不确定度关系式. 利用引理 1 并取

$$|\alpha \rangle = \Delta A |\rangle \quad (1.105)$$

¹² 樱井纯的现代量子力学的中译本称其为“尖锐的”, 原文为 sharp, 但文中意义更贴近于与模糊性对比.

$$|\beta\rangle = \Delta B|\rangle \quad (1.106)$$

其中空的右矢 $|\rangle$ 强调了我们的考虑可用于任意右矢的事实, 我们得到

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq |\langle\Delta A\Delta B\rangle|^2 \quad (1.107)$$

在那里用到了 ΔA 和 ΔB 的厄米性. 为了求出式子右边的值, 我们注意到

$$\Delta A\Delta B = \frac{1}{2}[\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2}\{\Delta A, \Delta B\} \quad (1.108)$$

其中, 对易关系 $[\Delta A, \Delta B]$ 就等于 $[A, B]$, 显然它是反厄米的.

$$([A, B])^\dagger = (AB - BA)^\dagger = BA - AB = -[A, B] \quad (1.109)$$

相反, 反对易关系 $\{\Delta A, \Delta B\}$ 显然是厄米的, 于是,

$$\langle\Delta A\Delta B\rangle = \frac{1}{2}\langle[A, B]\rangle + \frac{1}{2}\langle\{\Delta A, \Delta B\}\rangle \quad (1.110)$$

于是我们注意到前面一项和后面一项分别是纯虚数和纯实数, 自然想到利用引理 2 和引理 3. 现在 1.107 式的右边变成

$$|\langle\Delta A\Delta B\rangle|^2 = \frac{1}{4}|\langle[A, B]\rangle|^2 + \frac{1}{4}|\langle\{\Delta A, \Delta B\}\rangle|^2 \quad (1.111)$$

由于忽略掉上式的第二项 (反对易项) 只会使不等关系更强一些, 现在不确定度关系就自然被证明了¹³.

1.4 表象变换

1.4.1 变换算符

假定我们有两个不相容的可观测量 A 和 B . 论及的右矢空间既可以看作为集合 $\{|a'\rangle\}$ 所张, 也可看作为集合 $\{|b'\rangle\}$ 所张. 例如, 对于自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统, $|S_i\pm\rangle$ 可以用作基右矢. 此外, $|S_i\pm\rangle$ 也可以用作我们的基右矢. 当然, 这两个不同的基右矢集合张着同一个右矢空间. 我们感兴趣的是找到这两种不同的表述方法是怎样关联着的. 基矢集合的改变称之为**基矢的改变**或者**表象的改变**. 由 $\{|a'\rangle\}$ 给定基本征右矢的基被称为 A 表象, 有时也称为 A 对角表象, 因为在这个基中 A 所对应的方阵是对角矩阵.

我们的基本任务是构造一个变换算符, 它把老的正交归一集合 $\{|a'\rangle\}$ 和新的正交归一集合 $\{|b'\rangle\}$ 联系起来. 为此, 我们首先证明下述定理.

定理 1.4.1

给定两个基右矢的集合, 它们都满足正交归一性和完备性, 则存在这样的一个么正算符 U , 使得

$$|b^{(1)}\rangle = U|a^{(1)}\rangle, |b^{(2)}\rangle = U|a^{(2)}\rangle, \dots, |b^{(N)}\rangle = U|a^{(N)}\rangle \quad (1.112)$$

作为一个么正算符, 我们指的是一个算符满足条件

$$U^\dagger U = \mathbf{1} \quad (1.113)$$

$$UU^\dagger = \mathbf{1} \quad (1.114)$$

证明 我们通过具体地构建来证明这个定理. 我们构建算符

$$U = \sum_k |b^{(k)}\rangle\langle a^{(k)}| \quad (1.115)$$

使其满足这一要求, 并把这个 U 作用于 $|a^{(l)}\rangle$ 上. 显然, $\{|a'\rangle\}$ 的正交归一性保障了

$$U|a^{(l)}\rangle = |b^{(l)}\rangle \quad (1.116)$$

¹³许多作者用 ΔA 取代我们的 $\sqrt{\langle(\Delta A)^2\rangle}$, 因此不确定度关系被写成 $\Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle[A, B]\rangle|$.

另外, U 是幺正的:

$$U^\dagger U = \sum_k \sum_l |a^{(l)}\rangle \langle b^{(l)}| b^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}| = \sum_k |a^{(k)}\rangle \langle a^{(k)}| = \mathbf{1} \quad (1.117)$$

其中, 我们用到了 $\{|b'\rangle\}$ 的正交归一性和 $\{|a'\rangle\}$ 的完备性. 用类似的方式我们得到关系式 $UU^\dagger = \mathbf{1}$ 式.

1.4.2 变换矩阵

下面我们将研究算符 U 在老的基 $\{|a'\rangle\}$ 中的矩阵表示. 我们有

$$\langle a^{(k)} | U | a^{(l)} \rangle = \langle a^{(k)} | b^{(l)} \rangle \quad (1.118)$$

它显然来自于1.116式. 换言之, U 算符的矩阵元由老的基左矢和新的基右矢的内积构成. 我们还记得在三维空间中, 把一组单位基矢量 $(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{z}})$ 变为另一组单位基矢量 $(\hat{\mathbf{x}}', \hat{\mathbf{y}}', \hat{\mathbf{z}}')$ 的转动矩阵可以写成如下所示

$$R = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{x}}' & \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{y}}' & \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{z}}' \\ \hat{\mathbf{y}} \cdot \hat{\mathbf{x}}' & \hat{\mathbf{y}} \cdot \hat{\mathbf{y}}' & \hat{\mathbf{y}} \cdot \hat{\mathbf{z}}' \\ \hat{\mathbf{z}} \cdot \hat{\mathbf{x}}' & \hat{\mathbf{z}} \cdot \hat{\mathbf{y}}' & \hat{\mathbf{z}} \cdot \hat{\mathbf{z}}' \end{pmatrix} \quad (1.119)$$

由 $\langle a^{(k)} | U | a^{(l)} \rangle$ 组成的方矩阵称为从基 $\{|a'\rangle\}$ 到基 $\{|b'\rangle\}$ 的**变换矩阵**.

给定一个任意右矢 $|\alpha\rangle$, 它在老的基中的展开系数 $\langle a' | \alpha \rangle$ 是已知的, 即

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \quad (1.120)$$

怎样得到它在新基中的展开系数 $\langle b' | \alpha \rangle$ 呢? 答案非常简单: 只要用 $\langle b^{(k)} |$ 乘以上式 (为了避免混淆用 $a^{(l)}$ 代替了 a'):

$$\langle b^{(k)} | \alpha \rangle = \sum_l \langle b^{(k)} | a^{(l)} \rangle \langle a^{(l)} | \alpha \rangle = \sum_l \langle a^{(k)} | U^\dagger | a^{(l)} \rangle \langle a^{(l)} | \alpha \rangle \quad (1.121)$$

如果采用用矩阵符号, 上式表明, 只要用方矩阵 U^\dagger 作用在老的基中的列矩阵上, 即可得到新的基中的列矩阵:

$$(\text{新}) = (U^\dagger)(\text{老}) \quad (1.122)$$

老矩阵元和新矩阵元之间的关系也很容易得到:

$$\begin{aligned} \langle b^{(k)} | X | b^{(l)} \rangle &= \sum_m \sum_n \langle b^{(k)} | a^{(m)} \rangle \langle a^{(m)} | X | a^{(n)} \rangle \langle a^{(n)} | b^{(l)} \rangle \\ &= \sum_m \sum_n \langle a^{(k)} | U^\dagger | a^{(m)} \rangle \langle a^{(m)} | X | a^{(n)} \rangle \langle a^{(n)} | U | a^{(l)} \rangle \end{aligned} \quad (1.123)$$

这只不过是线性代数中所熟知的**相似变换**.

$$X' = U^\dagger X U \quad (1.124)$$

一个算符 X 的**迹**定义为对角矩阵元之和:

$$\text{tr}(X) = \sum_{a'} \langle a' | X | a' \rangle \quad (1.125)$$

尽管在定义中使用了一组特定的基右矢, 但可以证明 $\text{tr}(X)$ 是不依赖于表象的, 如下所示:

$$\begin{aligned} \sum_{a'} \langle a' | X | a' \rangle &= \sum_{a'} \sum_{b'} \sum_{b''} \langle a' | b' \rangle \langle b' | X | b'' \rangle \langle b'' | a' \rangle \\ &= \sum_{b'} \sum_{b''} \langle b'' | b' \rangle \langle b' | X | b'' \rangle \\ &= \sum_{b'} \langle b' | X | b' \rangle \end{aligned} \quad (1.126)$$

我们还可以证明:

$$\begin{aligned}
 \text{tr}(XY) &= \text{tr}(YX) \\
 \text{tr}(U^\dagger XU) &= \text{tr}(X) \\
 \text{tr}(|a'\rangle\langle a''|) &= \delta_{a'a''} \\
 \text{tr}(|b'\rangle\langle a'|) &= \langle a'|b'\rangle
 \end{aligned} \tag{1.127}$$

1.4.3 对角化

到此为止我们还没有讨论: 假定一个算符 B 在老的基 $\{|a'\rangle\}$ 中的矩阵元已知, 如何找到这个算符的本征值和本征矢. 这个问题等价于寻找能够对角化 B 的幺正矩阵. 尽管读者可能已经熟悉线性代数中的对角化方法, 但再次使用狄拉克的左矢-右矢符号解答这个问题仍是必要的.

我们感兴趣的是求得本征值 b' 和本征右矢 $|b'\rangle$, 它们有下列性质

$$B|b'\rangle = b'|b'\rangle \tag{1.128}$$

首先, 我们把上式改写成

$$\sum_{a'} \langle a''|B|a'\rangle \langle a'|b'\rangle = b' \langle a''|b'\rangle \tag{1.129}$$

当 1.128 式中的 $|b'\rangle$ 代表 B 的第 l 个本征右矢时, 我们可以用矩阵符号把上式重写成如下形式

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & \cdots \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1^{(l)} \\ C_2^{(l)} \\ \vdots \end{pmatrix} = b^{(l)} \begin{pmatrix} C_1^{(l)} \\ C_2^{(l)} \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{1.130}$$

其中的

$$B_{ij} = \langle a^{(i)}|B|a^{(j)}\rangle \tag{1.131}$$

和

$$C_k^{(l)} = \langle a^{(k)}|b^{(l)}\rangle \tag{1.132}$$

而 i, j, k 从 1 取到右矢空间的维数 N . 正如我们从线性代数中知道的, 仅当特征方程

$$\det(B - \lambda \mathbf{1}) = 0 \tag{1.133}$$

成立时, $C_k^{(l)}$ 才可能有非平庸解. 这是一个关于 λ 的 N 次代数方程, 解得的 N 个根就等同于我们试图确定的各个 $b^{(l)}$. 知道了 $b^{(l)}$, 我们就可以解得相应的 $C_k^{(l)}$ 直至一个由归一化条件确定的整体常数因子. 将 1.131 式与 1.128 式对比, 我们看到 $C_k^{(l)}$ 恰恰就是 $\{|a'\rangle\} \rightarrow \{|b'\rangle\}$ 基变换所涉及的幺正矩阵的矩阵元.

对于这种解法, B 的厄米性很重要. 例如, 考虑前面所讨论的 S_+ . 这个算符显然是非厄米的. 用 S_z 基写出来的相应的矩阵

$$S_+ \doteq \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{1.134}$$

不可能用任何幺正矩阵对角化. 在下一章我们将遇到一个与简谐振子相干态相关的一个非厄米算符的本征右矢. 然而, 现在我们已经知道这样的本征右矢不能形成一个完备的正交归一基, 因此, 我们在这一节所发展的公式框架就不能直接使用.

1.4.4 幺正等价可观测量

我们通过讨论可观测量幺正变换的一个著名定理来结束这一节.

定理 1.4.2

再一次考虑由 1.115 式的 U 算符联系着的两组正交归一基 $\{|a'\rangle\}$ 和 $\{|b'\rangle\}$. 知道了 U , 我们可以构造 A 的一个么正变换, UAU^{-1} ; 则称 A 和 UAU^{-1} 为么正等价可观测量. A 的本征值方程

$$A|a^{(l)}\rangle = a^{(l)}|a^{(l)}\rangle \quad (1.135)$$

显然意味着

$$UAU^{-1}U|a^{(l)}\rangle = a^{(l)}U|a^{(l)}\rangle \quad (1.136)$$

但是该式可以改写为

$$(UAU^{-1})|b^{(l)}\rangle = a^{(l)}|b^{(l)}\rangle \quad (1.137)$$

这个看似简单的结果是相当深奥的. 它告诉我们, 这些 $|b'\rangle$ 是 UAU^{-1} 的本征右矢, 它们有着与 A 的本征值完全相同的本征值. 换言之, 么正等价可观测量具有**全同的谱**.

根据定义, 本征右矢 $|b^{(l)}\rangle$ 满足关系

$$B|b^{(l)}\rangle = b^{(l)}|b^{(l)}\rangle \quad (1.138)$$

根据我们刚才所做得出的定理, 我们推断 B 和 UAU^{-1} 是可以同时对角化的. 一个自然的问题是: UAU^{-1} 和 B 本身是相同的吗? 答案通常是“是的”. 例如, 取 S_x 和 S_z , 它们通过一个么正算符关联在一起, 正如我们在角动量理论那一章中将要讨论的, 这个么正算符实际上是绕 y 轴转动 $\pi/2$ 角的转动算符. 在这种情况下, S_x 自身就是 S_z 的么正变换. 因为我们知道 S_x 和 S_z 展示了相同的本征值——即, $+\hbar/2$ 和 $-\hbar/2$ 可看到在这个特定的例子中, 我们的定理是成立的.

1.5 位置, 动量和平移

1.5.1 连续谱

到目前为止, 所考虑的可观测量都被假定具有分立的本征值谱. 然而, 量子力学中有一些可观测量具有连续的本征值. 例如, 取动量的 z 分量 p_z . 在量子力学中这个量再一次用一个厄米算符来表示. 然而, 与 S_z 大不相同, p_z 的本征值 (在适当的单位下) 可以取 $-\infty$ 到 ∞ 之间的任何实数值.

注 实际上, 我们现在应当考虑一个希尔伯特空间 $l^2(-\infty, +\infty)$, 其相关数学性质将在后续章节再深入讨论.

连续谱本征右矢所张矢量空间的严格数学目前是相当靠不住的. 这样的空间的维数显然是无穷大的. 幸运的是, 很多从具有分立本征值的有限维矢量空间中得到的结果都可以立即推广. 在直接推广不适用的地方, 我们会格外强调 (正如我们常常不去首先考虑级数与积分的换序是否可行那样).

我们从与本征值方程类似的方程开始, 在连续谱的情况下它被写成

$$\xi|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle \quad (1.139)$$

其中, ξ 是一个算符, 而 ξ' 只是个数. 换句话说, 右矢 $|\xi'\rangle$ 是算符 ξ 的一个本征右矢, 其本征值为 ξ' , 就像 $|a'\rangle$ 是算符 A 的一个本征右矢, 其本征值为 a' 一样.

在追求这一类比时, 我们用狄拉克的 δ 函数替代克罗内克 (Kronecker) 符号——用对连续变量 ξ' 的积分代替

对本征值 $\{a'\}$ 的分立求和——因此,

$$\begin{aligned}
 \langle a' | a'' \rangle &= \delta_{a' a''} \rightarrow \langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi'') \\
 \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'| &= 1 \rightarrow \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi'| = 1 \\
 |\alpha\rangle &= \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \rightarrow |\alpha\rangle = \int d\xi' |\xi'\rangle \langle \xi' | \alpha \rangle \\
 \sum_{a'} |\langle a' | \alpha \rangle|^2 &= 1 \rightarrow \int d\xi' |\langle \xi' | \alpha \rangle|^2 = 1 \\
 \langle \beta | \alpha \rangle &= \sum_{a'} \langle \beta | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle \rightarrow \langle \beta | \alpha \rangle = \int d\xi' \langle \beta | \xi' \rangle \langle \xi' | \alpha \rangle \\
 \langle a'' | A | a' \rangle &= a' \delta_{a' a''} \rightarrow \langle \xi'' | \xi | \xi' \rangle = \xi' \delta(\xi'' - \xi')
 \end{aligned} \tag{1.140}$$

1.5.2 位置本征右矢和位置测量

在上一节我们强调量子力学中的一次测量实质上是一个筛选过程. 为了把这种想法扩展到具有连续谱的可观测量的测量, 最好的做法是处理一个特殊的例子. 为此我们来考虑一维的位置 (或坐标) 算符.

位置算符 x 的本征右矢 $|x'\rangle$ 满足

$$x |x'\rangle = x' |x'\rangle \tag{1.141}$$

人们假定它形成一个完备集. 这里 x' 只是一个有着长度量纲的数, 例如 0.23 cm , 而 x 是个算符. 一个任意物理态的态右矢可以用 $\{|x'\rangle\}$ 展开:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle \tag{1.142}$$

现在我们考虑对于位置可观测量的一个高度理想化的选择性测量. 假定我们安放了一个非常微小的探测器, 仅当粒子精确地处于 x' 处而不在任何其他地方时, 该探测器才发出咔嚓声. 一经探测器发出咔嚓声, 我们就可以说, 所谈及的态由 $|x'\rangle$ 表示. 换句话说, 当该探测器发出咔嚓声时, $|\alpha\rangle$ 突然“跳入”了 $|x'\rangle$.

但实际上, 探测器最多能做的是把粒子定位于 x' 附近的一个很窄的间隔. 当观测到一个粒子位于某个很窄的区间 $(x' - \Delta/2, x' + \Delta/2)$ 时, 一个实际的探测器就会发出咔嚓声. 当该探测器显出一次计数时, 态右矢突然改变如下:

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx'' |x''\rangle \langle x'' | \alpha \rangle \xrightarrow{\text{测量}} \int_{x'-\Delta/2}^{x'+\Delta/2} dx'' |x''\rangle \langle x'' | \alpha \rangle \tag{1.143}$$

假定在这个狭窄的区间内, $\langle x'' | \alpha \rangle$ 没有可以察觉的变化, 探测器发出响声的概率由下式给出

$$|\langle x' | \alpha \rangle|^2 dx' \tag{1.144}$$

其中我们把 Δ 写成 dx' . 这与测量 A 时 $|\alpha\rangle$ 跳到 $|a'\rangle$ 的概率为 $|\langle a' | \alpha \rangle|^2$ 类似. 在 $-\infty$ 和 ∞ 之间的某个地方记录到粒子的概率为:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx' |\langle x' | \alpha \rangle|^2 \tag{1.145}$$

它是归一到 1 的, 只要 $|\alpha\rangle$ 是归一化的, 即

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \alpha | x' \rangle \langle x' | \alpha \rangle = 1 \tag{1.146}$$

这时熟悉波动力学的读者可能已经看到, $\langle x' | \alpha \rangle$ 就是由 $|\alpha\rangle$ 表示的物理态的波函数. 在下一节我们将更多地谈到把这种展开系数确定为波函数的 x 表象.

位置本征右矢的概念可以扩充到三维. 在非相对论量子力学中人们假定位置的本征右矢 $|\mathbf{x}'\rangle$ 是完备的. 因此, 一个忽略了内部自由度 (比如自旋) 的粒子的态右矢可以用 $\{|\mathbf{x}'\rangle\}$ 做如下展开:

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle \tag{1.147}$$

其中 \mathbf{x}' 代表 x', y' 和 z' ; 换句话说, $|\mathbf{x}'\rangle$ 是可观测量 x, y 和 z 的共同本征右矢:

$$|\mathbf{x}'\rangle \equiv |x', y', z'\rangle \quad (1.148)$$

$$x|\mathbf{x}'\rangle = x'|\mathbf{x}'\rangle, y|\mathbf{x}'\rangle = y'|\mathbf{x}'\rangle, z|\mathbf{x}'\rangle = z'|\mathbf{x}'\rangle \quad (1.149)$$

既然能够考虑这样的一个共同本征右矢, 我们就隐含地假定了位置矢量的三个分量能在任意精度下同时测量. 因此, 我们一定有

$$[x_i, x_j] = 0 \quad (1.150)$$

其中 x_1, x_2 和 x_3 分别表示 x, y 和 z .

1.5.3 平移

现在我们引入非常重要的平移或空间位移的概念. 假定开始时我们有一个准确地处于 \mathbf{x}' 周围的态. 让我们考虑一种操作, 它把这个态改变为另一个准确定位的态, 这一次它位于 $\mathbf{x}' + \mathbf{dx}'$ 周围, 而其他的一切 (例如自旋方向) 都不变. 这样一种操作被定义为无穷小平移 \mathbf{dx}' , 实现这种操作的算符用 $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')$ 表示, 即

$$\mathcal{G}(\mathbf{dx}')|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + \mathbf{dx}'\rangle \quad (1.151)$$

其中按照约定, 将一个可能的任意相因子设为 1. 注意, 式子的右边仍是一个位置本征右矢, 但是这一次, 其本征值为 $\mathbf{x}' + \mathbf{dx}'$. 显然, $|\mathbf{x}'\rangle$ 不是无穷小平移算符的一个本征右矢.

用位置本征右矢把一个任意态的右矢 $|\alpha\rangle$ 展开, 可以考查无穷小平移对于 $|\alpha\rangle$ 的影响:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{G}(\mathbf{dx}')|\alpha\rangle = \mathcal{G}(\mathbf{dx}') \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}' + \mathbf{dx}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle \quad (1.152)$$

我们还可以把式子的右边写成

$$\int d^3x' |\mathbf{x}' + \mathbf{dx}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}' - \mathbf{dx}'|\alpha\rangle \quad (1.153)$$

因为积分是对全空间进行的, 而 \mathbf{x}' 只是一个积分变量. 这表明, 平移态 $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')|\alpha\rangle$ 可以通过把 $\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle$ 中的 \mathbf{x}' 替换成 $\mathbf{x}' - \mathbf{dx}'$ 得到.

在文献中有一种经常用来处理平移的等价方法. 代替考虑物理系统本身的无穷小平移, 我们考虑对于坐标系作这样一种变化, 即坐标原点沿相反的方向移动 $-\mathbf{dx}'$. 从物理上讲, 在这样一种替代做法中我们要问, 对于其坐标系移动了 $-\mathbf{dx}'$ 的另一位观察者, 同一个态右矢看上去会是怎么样的. 显然, 我们不要把这两种方法混在一起.

现在, 我们列出无穷小平移算符 $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')$ 的一些性质. 我们要求的第一个性质是由概率守恒所强加的么正性.

性质 [么正性] 如果右矢 $|\alpha\rangle$ 归一为 1, 要求平移后的右矢 $(\mathbf{dx}')|\alpha\rangle$ 也被归一为 1. 因此

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = \langle \alpha|\mathcal{G}^\dagger(\mathbf{dx}')\mathcal{G}(\mathbf{dx}')|\alpha\rangle \quad (1.154)$$

这个性质通过要求无穷小平移是么正的

$$\mathcal{G}^\dagger(\mathbf{dx}')\mathcal{G}(\mathbf{dx}') = \mathbf{1} \quad (1.155)$$

这个条件可以得到保障. 总的说来, 在么正变换下右矢的模保持不变.

性质 [可加性] 对于第二个性质, 我们假定考虑两个相继的无穷小平移——首先平移 \mathbf{dx}' , 接着再平移 \mathbf{dx}'' , 其中 \mathbf{dx}' 和 \mathbf{dx}'' 不必沿同一个方向. 我们预期最终的结果就是一个通过矢量之和 $\mathbf{dx}' + \mathbf{dx}''$ 的单一的平移操作, 于是我们要求

$$\mathcal{G}(\mathbf{dx}'')\mathcal{G}(\mathbf{dx}') = \mathcal{G}(\mathbf{dx}' + \mathbf{dx}'') \quad (1.156)$$

性质 [可加性] 第三个性质是, 假定考虑一个沿相反方向的平移, 我们预期这个反方向的平移与原来平移的逆相同

$$\mathcal{G}(-\mathbf{dx}') = \mathcal{G}^{-1}(\mathbf{dx}') \quad (1.157)$$

性质 [化一性] 第四个性质要求, 当 $\mathbf{dx}' \rightarrow 0$ 时, 平移算符约化为恒等算符

$$\lim_{\mathbf{dx}' \rightarrow 0} \mathcal{G}(\mathbf{dx}') = \mathbf{1} \quad (1.158)$$

并且 $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')$ 与单位算符之差是 \mathbf{dx}' 的一级小量.

我们现在证明, 如果把无穷小平移算符取为

$$\mathcal{G}(\mathbf{dx}') = \mathbf{1} - i\mathbf{K} \cdot \mathbf{dx}' \quad (1.159)$$

其中 \mathbf{K} 的分量 K_x, K_y 和 K_z 都是厄米算符, 则上述所有的性质都能得到满足. 第一个性质 [即 $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')$ 的么正性] 的检验如下

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^\dagger(\mathbf{dx}') \mathcal{G}(\mathbf{dx}') &= (\mathbf{1} + i\mathbf{K}^\dagger \cdot \mathbf{dx}') (\mathbf{1} - i\mathbf{K} \cdot \mathbf{dx}') \\ &= \mathbf{1} - i(\mathbf{K} - \mathbf{K}^\dagger) \cdot \mathbf{dx}' + 0 \left[(\mathbf{dx}')^2 \right] \\ &\simeq \mathbf{1} \end{aligned} \quad (1.160)$$

其中对于无穷小变换, 我们忽略了 \mathbf{dx}' 的二级项. 第二个性质也可以证明如下

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\mathbf{dx}'') \mathcal{G}(\mathbf{dx}') &= (\mathbf{1} - i\mathbf{K} \cdot \mathbf{dx}'') (\mathbf{1} - i\mathbf{K} \cdot \mathbf{dx}') \\ &\simeq \mathbf{1} - i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{dx}' + \mathbf{dx}'') \\ &= \mathcal{G}(\mathbf{dx}' + \mathbf{dx}'') \end{aligned} \quad (1.161)$$

第三个和第四个性质的显然成立.

若认为 1.159 式为 $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')$ 的正确形式, 我们就能推导出一个算符 \mathbf{K} 与算符 \mathbf{x} 之间的非常基本的关系. 首先注意到

$$\mathbf{x} \mathcal{G}(\mathbf{dx}') |\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x} |\mathbf{x}' + \mathbf{dx}'\rangle = (\mathbf{x}' + \mathbf{dx}') |\mathbf{x}' + \mathbf{dx}'\rangle \quad (1.162)$$

和

$$\mathcal{G}(\mathbf{dx}') \mathbf{x} |\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}' \mathcal{G}(\mathbf{dx}') |\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}' |\mathbf{x}' + \mathbf{dx}'\rangle \quad (1.163)$$

因此,

$$[\mathbf{x}, \mathcal{G}(\mathbf{dx}')] |\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{dx}' |\mathbf{x}' + \mathbf{dx}'\rangle \simeq \mathbf{dx}' |\mathbf{x}'\rangle \quad (1.164)$$

在上式最后一步的近似中产生的误差是 \mathbf{dx}' 的二级小量. 这里, $|\mathbf{x}'\rangle$ 可以是任意的位位置本征右矢, 并且知道位位置本征右矢形成了一个完备集. 因此我们一定有一个算符恒等式

$$[\mathbf{x}, \mathcal{G}(\mathbf{dx}')] = \mathbf{dx}' \quad (1.165)$$

或

$$-i\mathbf{x}\mathbf{K} \cdot \mathbf{dx}' + i\mathbf{K} \cdot \mathbf{dx}'\mathbf{x} = \mathbf{dx}' \quad (1.166)$$

其中, 在上两个式子的右边, \mathbf{dx}' 被认为是一个数 \mathbf{dx}' 乘以一个由 $|\mathbf{x}'\rangle$ 所张的右矢空间中的单位算符. 取 \mathbf{dx}' 沿 $\hat{\mathbf{x}}_j$ 方向并且取它与 $\hat{\mathbf{x}}_i$ 的标量积, 我们得到

$$[x_i, K_j] = i\delta_{ij} \quad (1.167)$$

其中, δ_{ij} 再次被认为乘上一个单位算符.

1.5.4 动量作为一个平移生成元

方程 (1.6.27) 式是位置算符 x, y, z 和 K 算符 K_x, K_y, K_z 之间的基本对易关系. 记住, 到此为止, K 算符是借助无穷小平移算符通过 1.159 式定义的. 我们可以赋予 \mathbf{K} 什么样的物理意义呢?

施温格讲授量子力学时曾经谈到: “……对于一些基本性质, 我们将仅仅从经典物理中借用一些名字.” 在目前的情况中, 我们希望从经典力学借用如下概念: 动量是一个无穷小平移的生成元. 经典力学中的一个无穷小平移可以看作是一个正则变换

$$\mathbf{x}_{\text{新}} \equiv \mathbf{X} = \mathbf{x} + \mathbf{dx}, \quad \mathbf{p}_{\text{新}} \equiv \mathbf{P} = \mathbf{p} \quad (1.168)$$

它可以从生成函数

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{P}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{dx} \quad (1.169)$$

求得, 其中 \mathbf{p} 和 \mathbf{P} 涉及相应的动量.

这个方程与量子力学中的无穷小平移算符 1.159 式有着惊人的相似性, 特别是如果我们回想上式中的 $\mathbf{x} \cdot \mathbf{P}$ 是恒等变换 ($\mathbf{X} = \mathbf{x}, \mathbf{P} = \mathbf{p}$) 的生成函数. 由此导致我们猜测算符 \mathbf{K} 在某种意义上与量子力学中的动量算符有关.

可以把算符 \mathbf{K} 视为与动量算符本身等同吗? 不幸的是, 如果尝试进行量纲分析的话, 我们会发现量纲完全不对, 算符 \mathbf{K} 具有 $1/(\text{长度})$ 的量纲, 因为 $\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}'$ 必须是无量纲的. 但是令

$$\mathbf{K} = \frac{\mathbf{p}}{\text{量纲为作用量的普适常数}} \quad (1.170)$$

似乎是合法的. 虽然我们没有任何办法从量子力学的基本假设确定这个普适常数的实际数值. 但这个数值的确是需要在这里出现的, 现在我们知道式中出现的普适常数结果与在 1924 年写下的德布罗意关系

$$\frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} \quad (1.171)$$

中出现的常数 \hbar 是相同的, 式中的 λ 是一个“粒子波”的波长. 换句话说, 算符 \mathbf{K} 是与波数 (2π 乘以波长的倒数, 通常用 k 表示) 相对应的量子力学算符. 采用这种规定, 无穷小平移算符 $\mathcal{G}(d\mathbf{x}')$ 可写为

$$\mathcal{G}(d\mathbf{x}') = 1 - i\mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}'/\hbar \quad (1.172)$$

其中的 \mathbf{p} 是动量算符. 于是对易关系式现在变成

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (1.173)$$

上面的对易关系意味着, 例如, x 和 p_x (而不是 x 和 p_y) 是不相容的可观测量. 因此不可能找到 x 和 p_x 的共同本征右矢. 自然关于那节的普遍形式可以用在这里, 并求得海森堡的位置与动量的不确定度关系

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p_x)^2 \rangle \geq \hbar^2/4 \quad (1.174)$$

该式的一些应用将在之后见到.

到此为止, 我们仅限于无穷小平移. 一个有限的平移 (即一个有限大小的空间平行移动) 可以通过相继地组合无穷小平移得到. 让我们考虑沿 x 方向平移一段 $\Delta x'$ 距离的有限平移:

$$\mathcal{G}(\Delta x' \hat{\mathbf{x}}) |\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}' + \Delta x' \hat{\mathbf{x}}\rangle \quad (1.175)$$

通过组合 N 次无穷小平移, 其中的每一次都由一个沿 x 方向的空间平移 $\Delta x'/N$ 所表征, 并且令 $N \rightarrow \infty$, 我们得到

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\Delta x' \hat{\mathbf{x}}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{ip_x \Delta x'}{N\hbar} \right)^N \\ &= \exp \left(-\frac{ip_x \Delta x'}{\hbar} \right) \end{aligned} \quad (1.176)$$

这里的 $\exp(-ip_x \Delta x'/\hbar)$ 被认为是算符 p_x 的一个函数; 一般而言, 对于任何算符 X 我们都有 (类似矩阵):

$$\exp(X) \equiv 1 + X + \frac{X^2}{2!} + \dots \quad (1.177)$$

平移的一个基本性质是沿不同方向的相继平移, 比如沿 x 方向和 y 方向的平移是对易的, 正如同到达某点的路径不影响起点到终点的距离那样. 从数学上看,

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\Delta y' \hat{\mathbf{y}}) \mathcal{G}(\Delta x' \hat{\mathbf{x}}) &= \mathcal{G}(\Delta x' \hat{\mathbf{x}} + \Delta y' \hat{\mathbf{y}}) \\ \mathcal{G}(\Delta x' \hat{\mathbf{x}}) \mathcal{G}(\Delta y' \hat{\mathbf{y}}) &= \mathcal{G}(\Delta x' \hat{\mathbf{x}} + \Delta y' \hat{\mathbf{y}}) \end{aligned} \quad (1.178)$$

这一点并不像它可能从表面上看的那么平庸, 在角动量理论的部分我们将证明, 绕不同轴的转动不对易. 对于 $\Delta x'$ 和 $\Delta y'$ 做展开并保留到第二阶, 我们得到

$$\begin{aligned} [\mathcal{G}(\Delta y' \hat{\mathbf{y}}), \mathcal{G}(\Delta x' \hat{\mathbf{x}})] &= \left[\left(1 - \frac{ip_y \Delta y'}{\hbar} - \frac{p_y^2 (\Delta y')^2}{2\hbar^2} + \dots \right), \left(1 - \frac{ip_x \Delta x'}{\hbar} - \frac{p_x^2 (\Delta x')^2}{2\hbar^2} + \dots \right) \right] \\ &\simeq -\frac{(\Delta x')(\Delta y') [p_y, p_x]}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (1.179)$$

由于 $\Delta x'$ 和 $\Delta y'$ 都是任意的, 按 1.178 式的要求, 有

$$[\mathcal{G}(\Delta y' \hat{\mathbf{y}}), \mathcal{G}(\Delta x' \hat{\mathbf{x}})] = 0 \quad (1.180)$$

立即导致

$$[p_x, p_y] = 0 \quad (1.181)$$

或更普遍地,

$$[p_i, p_j] = 0 \quad (1.182)$$

这个对易关系是沿不同方向平移相互对易的直接后果. 在任何情况下平移的生成元都互相对易, 相应的群被称为是**阿贝尔 (Abel) 群**. 三维平移群是阿贝尔群. 我们将在后续的章节讨论群, Lie 群及其生成元, Lie 代数等内容.

方程也意味着 p_x, p_y 和 p_z 是彼此相容的可观测量. 因此, 我们可以构想一个 p_x, p_y 和 p_z 的共同本征右矢, 即

$$|\mathbf{p}'\rangle \equiv |p'_x, p'_y, p'_z\rangle \quad (1.183)$$

$$p_x |\mathbf{p}'\rangle = p'_x |\mathbf{p}'\rangle, p_y |\mathbf{p}'\rangle = p'_y |\mathbf{p}'\rangle, p_z |\mathbf{p}'\rangle = p'_z |\mathbf{p}'\rangle \quad (1.184)$$

求出 $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')$ 在这样一个动量本征右矢上的效应是有意义的

$$\mathcal{G}(\mathbf{dx}') |\mathbf{p}'\rangle = \left(1 - \frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{dx}'}{\hbar}\right) |\mathbf{p}'\rangle = \left(1 - \frac{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{dx}'}{\hbar}\right) |\mathbf{p}'\rangle \quad (1.185)$$

我们看到尽管遇到了一个微小的相位变化, 这个动量的本征右矢仍保持不变, 所以, 与 $|\mathbf{x}'\rangle$ 不同, $|\mathbf{p}'\rangle$ 是 $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')$ 的一个本征右矢, 这一点我们已经预料到了, 因为

$$[\mathbf{p}, \mathcal{G}(\mathbf{dx}')] = 0 \quad (1.186)$$

然而, 要注意, $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')$ 的本征值是复数; 在这里, 我们不可能期待一个实的本征值, 因为尽管 $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')$ 是幺正的, 但却不是厄米的.

1.5.5 正则对易关系

我们总结一下通过研究平移的性质导出的对易关系:

$$[x_i, x_j] = 0, [p_i, p_j] = 0, [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad (1.187)$$

这些关系构成了量子力学的基石. 在狄拉克的书中, 他把它称之为“基本的量子条件”. 通常, 它们以正则对易关系或基本对易关系闻名于世.

在 1925 年, 狄拉克注意到只要把经典的泊松 (Poisson) 括号用对易关系作如下的替换, 则各种量子力学关系都可以从相应的经典关系得到¹⁴:

$$[,]_{\text{经典}} \rightarrow \frac{[,] }{i\hbar} \quad (1.188)$$

在那里我们可以回想, 作为 q 和 p 的函数, 经典泊松括号被定义为

$$[A(q, p), B(q, p)]_{\text{经典}} \equiv \sum_s \left(\frac{\partial A}{\partial q_s} \frac{\partial B}{\partial p_s} - \frac{\partial A}{\partial p_s} \frac{\partial B}{\partial q_s} \right) \quad (1.189)$$

例如, 在经典力学中我们有

$$[x_i, p_j]_{\text{经典}} = \delta_{ij} \quad (1.190)$$

在量子力学中它变成了 $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$.

狄拉克所注意到的关系似乎很合理, 因为经典泊松括号和量子力学对易关系满足类似的代数性质. 特别地,

¹⁴当然, 我们在后续会接触到 Lie 乘积, 也称 Lie 括号/

不管 $[,]$ 被理解为经典的泊松括号还是量子力学的对易关系, 都可以证明下列的关系式:

$$\begin{aligned}
 [A, A] &= 0 \\
 [A, B] &= -[B, A] \\
 [A, c] &= 0 \quad (c \text{ 只是一个数}) \\
 [A + B, C] &= [A, C] + [B, C] \\
 [A, BC] &= [A, B]C + B[A, C] \\
 [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] &= 0
 \end{aligned} \tag{1.191}$$

其中, 最后一个关系式称为**雅可比 (Jacobi) 恒等式**. 然而, 存在着一些重要的差别. 首先, 经典泊松括号的量纲不同于量子力学对易关系的量纲, 因为在经典泊松括号中出现了 q 和 p 的微商. 其次, q 和 p 的实函数的泊松括号是纯实的, 而两个厄米算符的对易关系是反厄米的^{1.3.3}. 考虑到这些差别, 狄拉克采取插入因子 $i\hbar$ 的方式.

1.6 坐标空间和动量空间下的波函数

1.6.1 位置空间波函数

在这一节将对位置与动量空间波函数性质进行系统研究. 为了简单起见, 让我们回到一维情况. 使用的基右矢是位置右矢, 它满足

$$x|x'\rangle = x'|x'\rangle \tag{1.192}$$

它以这样的一种方式归一化, 即使正交条件表示为

$$\langle x''|x'\rangle = \delta(x'' - x') \tag{1.193}$$

我们已经指出过, 代表一个物理态的右矢可以用 $|x'\rangle$ 展开

$$|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \tag{1.194}$$

而展开系数 $\langle x'|\alpha\rangle$ 以这样的一种方式解释, 即

$$|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx' \tag{1.195}$$

是在 x' 附近一个狭窄间隔 dx' 内找到粒子的概率. 在我们的形式中, 内积 $\langle x'|\alpha\rangle$ 就是通常所说的 $|\alpha\rangle$ 态的波函数 $\psi_\alpha(x')$ ¹⁵

$$\langle x'|\alpha\rangle = \psi_\alpha(x') \tag{1.196}$$

考虑内积 $\langle\beta|\alpha\rangle$. 利用 $|x'\rangle$ 的完备性, 我们有

$$\begin{aligned}
 \langle\beta|\alpha\rangle &= \int dx' \langle\beta|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \\
 &= \int dx' \psi_\beta^*(x') \psi_\alpha(x')
 \end{aligned} \tag{1.197}$$

所以 $\langle\beta|\alpha\rangle$ 表征两个波函数之间的重叠度. 注意, 我们并不是把 $\langle\beta|\alpha\rangle$ 定义为重叠积分, 确认 $\langle\beta|\alpha\rangle$ 为重叠积分是由我们对 $|x'\rangle$ 的完备性假定推知的. $\langle\beta|\alpha\rangle$ 更为一般的、不依赖于表象的解释是, 它表示在 $|\beta\rangle$ 态中找到 $|\alpha\rangle$ 态的概率振幅.

这一次让我们用波函数语言解释展开式

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \tag{1.198}$$

¹⁵在初等波动力学中展开系数 $c_{a'} (= \langle a'|\alpha\rangle)$ 以及波函数 $\psi_\alpha(x') (= \langle x'|\alpha\rangle)$ 的概率解释经常作为各自独立的假定给出的. 我们的形式来源于狄拉克, 它的主要优点之一是, 这两类概率解释是统一的, 与 $c_{a'}$ 基本一样, $\psi_\alpha(x')$ 也是一个展开系数.

我们就用位置本征右矢 $\langle x' |$ 左乘式子的两边. 这样

$$\langle x' | \alpha \rangle = \sum_{a'} \langle x' | a' \rangle \langle a' | \alpha \rangle \quad (1.199)$$

用通常的波动力学符号, 可以看出该式为

$$\psi_\alpha(x') = \sum_{a'} c_{a'} u_{a'}(x') \quad (1.200)$$

在那里我们引入了本征值为 a' 的算符 A 的本征函数:

$$u_{a'}(x') = \langle x' | a' \rangle \quad (1.201)$$

现在让我们研究怎么使用 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 的波函数写出 $\langle \beta | A | \alpha \rangle$. 显然, 我们有

$$\begin{aligned} \langle \beta | A | \alpha \rangle &= \int dx' \int dx'' \langle \beta | x' \rangle \langle x' | A | x'' \rangle \langle x'' | \alpha \rangle \\ &= \int dx' \int dx'' \psi_\beta^*(x') \langle x' | A | x'' \rangle \psi_\alpha(x'') \end{aligned} \quad (1.202)$$

因此, 为了能够求出 $\langle \beta | A | \alpha \rangle$, 我们必须知道矩阵元 $\langle x' | A | x'' \rangle$, 一般来说, 它是 x' 和 x'' 两个变量的函数. 如果可观测测量 A 是位置算符 x 的函数就会出现极大的简化. 特别是, 考虑

$$A = x^2 \quad (1.203)$$

它实际出现于将要讨论的简谐振子问题的哈密顿量中. 我们有

$$\langle x' | x^2 | x'' \rangle = (\langle x' |) \cdot (x''^2 | x'' \rangle) = x'^2 \delta(x' - x'') \quad (1.204)$$

二重积分式现在约化为一个单重积分:

$$\begin{aligned} \langle \beta | x^2 | \alpha \rangle &= \int dx' \langle \beta | x' \rangle x'^2 \langle x' | \alpha \rangle \\ &= \int dx' \psi_\beta^*(x') x'^2 \psi_\alpha(x') \end{aligned} \quad (1.205)$$

一般地说,

$$\langle \beta | f(x) | \alpha \rangle = \int dx' \psi_\beta^*(x') f(x') \psi_\alpha(x') \quad (1.206)$$

注意, 左边的 $f(x)$ 是一个算符, 而右边的 $f(x')$ 不是算符.

1.6.2 位置基中的动量算符

现在我们研究在位置基中, 即在位置本征右矢作为基矢的表象中, 动量算符看起来是什么样的. 我们的出发点是动量作为无穷小平移生成元的定义

$$\begin{aligned} \left(1 - \frac{ip\Delta x'}{\hbar}\right) |\alpha\rangle &= \int dx' \mathcal{G}(\Delta x') |x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle \\ &= \int dx' |x' + \Delta x'\rangle \langle x' | \alpha \rangle \\ &= \int dx' |x'\rangle \langle x' - \Delta x' | \alpha \rangle \\ &= \int dx' |x'\rangle \left(\langle x' | \alpha \rangle - \Delta x' \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle \right) \end{aligned} \quad (1.207)$$

比较两边得到

$$p|\alpha\rangle = \int dx' |x'\rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle \right) \quad (1.208)$$

或

$$\langle x' | p | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle \quad (1.209)$$

在那里我们用到了正交性质. 对 x 表象中的 p 矩阵元, 我们得到

$$\langle x' | p | x'' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x'') \quad (1.210)$$

从前面我们得到一个非常重要的恒等式:

$$\begin{aligned} \langle \beta | p | \alpha \rangle &= \int dx' \langle \beta | x' \rangle \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle \right) \\ &= \int dx' \psi_{\beta}^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \psi_{\alpha}(x') \end{aligned} \quad (1.211)$$

在我们的形式中, 上面的式子不是一个假定, 在一定程度上, 它是利用动量的基本性质推导出来的. 我们还可以求得

$$\langle x' | p^n | \alpha \rangle = (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n} \langle x' | \alpha \rangle \quad (1.212)$$

$$\langle \beta | p^n | \alpha \rangle = \int dx' \psi_{\beta}^*(x') (-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x'^n} \psi_{\alpha}(x') \quad (1.213)$$

1.6.3 动量空间波函数

到目前为止, 我们所做的都只是在 x 基中进行的. 但在 x 和 p 之间 (除了偶然的负号之外) 实际上存在着完全的对称性, 我们可以从正则对易关系推知这一点. 现在我们改用 p 基, 即在动量表象进行处理.

为了简单, 我们仍取一维空间. 在 p 基中的基本征右矢规定

$$p |p'\rangle = p' |p'\rangle \quad (1.214)$$

以及

$$\langle p' | p'' \rangle = \delta(p' - p'') \quad (1.215)$$

动量的本征右矢 $\{|p'\rangle\}$ 以和位置空间本征右矢 $\{|x'\rangle\}$ 大体相同的方式张成右矢空间. 于是, 一个任意的态矢量 $|\alpha\rangle$ 可展开如下

$$|\alpha\rangle = \int dp' |p'\rangle \langle p' | \alpha \rangle \quad (1.216)$$

对于展开系数 $\langle p' | \alpha \rangle$ 我们可以给出一种概率解释, 测量 p 给出的本征值 p' 处于一个狭窄间隔 dp' 内的概率为 $|\langle p' | \alpha \rangle|^2 dp'$. 按照惯例, 称 $\langle p' | \alpha \rangle$ 为**动量空间波函数**, 通常采用符号 $\phi_{\alpha}(p')$:

$$\langle p' | \alpha \rangle = \phi_{\alpha}(p') \quad (1.217)$$

如果 $|\alpha\rangle$ 已被归一化了, 则我们得到

$$\int dp' \langle \alpha | p' \rangle \langle p' | \alpha \rangle = \int dp' |\phi_{\alpha}(p')|^2 = 1 \quad (1.218)$$

现在让我们建立 x 表象与 p 表象之间的联系. 我们回忆一下, 在分立谱的情况下, 从老的基 $\{|a'\rangle\}$ 到新的基 $\{|b'\rangle\}$ 的基的改变是用变换矩阵表征的. 同样地, 我们预期, 欲求的信息包含在 $\langle x' | p' \rangle$ 中, 它是 x' 和 p' 的函数, 通常称之为从 x 表象到 p 表象的**变换函数**. 为了推导出 $\langle x' | p' \rangle$ 的显示表达式, 首先回忆一下 1.209 式, 令 $|\alpha\rangle$ 为动量本征右矢 $|p'\rangle$, 我们得到

$$\langle x' | p | p' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | p' \rangle \quad (1.219)$$

或

$$p' \langle x' | p' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | p' \rangle \quad (1.220)$$

$\langle x' | p' \rangle$ 的这个微分方程的解是

$$\langle x' | p' \rangle = N \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \quad (1.221)$$

其中 N 是马上就要确定的归一化常数. 尽管变换函数 $\langle x' | p' \rangle$ 是两个变量 x' 和 p' 的函数, 我们可以暂时把它看作是 p' 取固定值时的 x' 的函数. 那么, 它可以看作是在位置 x' 处找到由 p' 确定的动量本征态的概率振幅; 换句话

说,它就是动量本征态 $|p'\rangle$ 的波函数,通常称之为动量本征函数(仍在 x 空间).所以,式子只不过是说一个动量本征态是一个平面波.有趣的是,我们在没有求解薛定谔方程(它还没有被写出来)的情况下就已经得到了这个平面波解.

为了得到归一常数 N , 让我们首先考虑

$$\langle x'|x''\rangle = \int dp' \langle x'|p'\rangle \langle p'|x''\rangle \quad (1.222)$$

左边正是 $\delta(x' - x'')$; 右边可以利用 $\langle x'|p'\rangle$ 的显示表示式计算出来

$$\begin{aligned} \delta(x' - x'') &= |N|^2 \int dp' \exp\left[\frac{ip'(x' - x'')}{\hbar}\right] \\ &= 2\pi\hbar|N|^2 \delta(x' - x'') \end{aligned} \quad (1.223)$$

按照惯例,选 N 为纯实数且取正值,最后我们得到

$$\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \quad (1.224)$$

现在来论证坐标空间波函数与动量空间波函数是如何联系起来的. 我们所要做的就是

$$\langle x'|\alpha\rangle = \int dp' \langle x'|p'\rangle \langle p'|\alpha\rangle \quad (1.225)$$

和

$$\langle p'|\alpha\rangle = \int dx' \langle p'|x'\rangle \langle x'|\alpha\rangle \quad (1.226)$$

改写成

$$\psi_\alpha(x') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \int dp' \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right) \phi_\alpha(p') \quad (1.227)$$

和

$$\phi_\alpha(p') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right] \int dx' \exp\left(\frac{-ip'x'}{\hbar}\right) \psi_\alpha(x') \quad (1.228)$$

这一对方程式恰恰是人们从傅里叶 (Fourier) 反演定理预期的结果. 显然, 我们所发展的数学莫名其妙地 “知道” 了傅里叶的积分变换工作.

1.6.4 高斯型波包

通过观察一个物理实例来阐述我们的基本形式是有益的. 我们考虑一个所谓的高斯型波包, 它的 x 空间波函数由下式给定

$$\langle x'|\alpha\rangle = \left[\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{d}} \right] \exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right] \quad (1.229)$$

这是一个被中心位于原点的高斯型轮廓线调制的, 波数为 k 的平面波. 对于 $|x'| > d$, 观测到这个粒子的概率迅速地变为零; 更定量地讲, 概率密度 $|\langle x'|\alpha\rangle|^2$ 具有宽度为 d 的高斯型形状.

我们现在计算 x, x^2, p 和 p^2 的期望. 根据对称性, x 的期望显然是零:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle \alpha|x' \rangle x' \langle x'|\alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |\langle x'|\alpha \rangle|^2 x' = 0 \quad (1.230)$$

对于 x^2 我们求得

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 |\langle x'|\alpha \rangle|^2 \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}d} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx' x'^2 \exp\left[\frac{-x'^2}{d^2}\right] \\ &= \frac{d^2}{2} \end{aligned} \quad (1.231)$$

它导致位置算符的弥散度为

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{d^2}{2} \quad (1.232)$$

p 和 p^2 的期望也可以计算如下

$$\langle p \rangle = \hbar k \quad (1.233)$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2 k^2 \quad (1.234)$$

因此, 动量的弥散度由下式给出

$$\langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2} \quad (1.235)$$

我们现在可以检验海森堡的不确定度关系, 在这种情况下, 不确定度乘积由下式给出

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \quad (1.236)$$

它不依赖于 d , 因此对于一个高斯型波包, 我们实际上有一个等式的关系式而不是更为普遍的不等式关系式. 由于这个缘故, 一个高斯型波包经常被称为最小不确定度波包.

我们现在转向动量空间. 通过直接的积分, 只要把指数部分配成平方, 我们求得

$$\begin{aligned} \langle p' | \alpha \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \right) \left(\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{d}} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \exp \left(\frac{-ip'x'}{\hbar} + ikx' - \frac{x'^2}{2d^2} \right) \\ &= \sqrt{\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}} \exp \left[\frac{-(p' - \hbar k)^2 d^2}{2\hbar^2} \right] \end{aligned} \quad (1.237)$$

这个动量空间波函数提供了获得 $\langle p \rangle$ 和 $\langle p^2 \rangle$ 的替代方法.

找到动量为 p' 的粒子的概率也是高斯型的 (在动量空间), 其中心位于 $\hbar k$, 就像在 x' 点找到该粒子的概率是高斯型的 (在位置空间), 其中心位于零点一样. 而且, 两个高斯型的宽度彼此成反比, 这是用另一种方式表述不确定度乘积 $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle$ 的恒定性. 在 p 空间的弥散得越宽, 在 x 空间就弥散得越窄, 反之亦然.

作为一个极端的例子, 假设我们令 $d \rightarrow \infty$. 那么, 位置空间波函数就变成了一个扩展到全空间的平面波, 找到粒子的概率正好是个常数, 不依赖于 x' . 相比之下, 动量空间的波函数是个类 δ 函数, 在 $\hbar k$ 处有一个尖锐的峰. 在相反的极端情况下, 通过令 $d \rightarrow 0$, 我们得到一个类 δ 函数的定域位置空间波函数, 但动量空间波函数只是一个常数, 不依赖于 p' .

我们已经看到, 一个极好的定域 (在 x 空间) 态可以看作是具有所有可能动量值的动量本征态的叠加. 甚至那些动量与 mc 可比或更大的动量本征态也必须被包括在叠加中. 然而, 在这样高动量值的情况下, 基于非相对论量子力学的描述肯定不再适用. 尽管有这种局限, 在位置本征右矢 $|x'\rangle$ 存在的基础上建立的我们的形式有着广泛的应用空间.

1.6.5 推广到三维

至此, 为简单起见, 在这一节中我们的工作都只是在—维空间进行的, 但是只要做一些必要的改变, 我们所做的一切都可以推广到三维空间. 所用的基右矢既可以取满足

$$\mathbf{x} |\mathbf{x}'\rangle = \mathbf{x}' |\mathbf{x}'\rangle \quad (1.238)$$

的位置本征右矢, 也可以取满足

$$\mathbf{p} |\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}' |\mathbf{p}'\rangle \quad (1.239)$$

的动量本征右矢. 它们遵从归一化条件

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{x}'' \rangle = \delta^3 (\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \quad (1.240)$$

和

$$\langle \mathbf{p} | \mathbf{p}'' \rangle = \delta^3 (\mathbf{p}' - \mathbf{p}'') \quad (1.241)$$

其中的 δ^3 代表三维 δ 函数

$$\delta^3 (\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') = \delta (x' - x'') \delta (y' - y'') \delta (z' - z'') \quad (1.242)$$

完备性关系为

$$\int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'| = 1 \quad (1.243)$$

和

$$\int d^3p' |\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}'| = 1 \quad (1.244)$$

它们可以用来展开一个任意的态右矢

$$|\alpha\rangle = \int d^3x' |\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle \quad (1.245)$$

$$|\alpha\rangle = \int d^3p' |\mathbf{p}'\rangle \langle \mathbf{p}'|\alpha\rangle \quad (1.246)$$

展开系数 $\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle$ 和 $\langle \mathbf{p}'|\alpha\rangle$ 被分别视为位置空间的波函数 $\psi_\alpha(\mathbf{x}')$ 和动量空间的波函数 $\phi_\alpha(\mathbf{p}')$. 把动量算符置于 $|\beta\rangle$ 和 $|\alpha\rangle$ 之间时, 动量算符变成

$$\langle \beta|\mathbf{p}|\alpha\rangle = \int d^3x' \psi_\beta^*(\mathbf{x}') (-i\hbar\nabla') \psi_\alpha(\mathbf{x}') \quad (1.247)$$

变换函数是

$$\langle \mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \right] \exp\left(\frac{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}\right) \quad (1.248)$$

所以有

$$\psi_\alpha(\mathbf{x}') = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \right] \int d^3p' \exp\left(\frac{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}\right) \phi_\alpha(\mathbf{p}') \quad (1.249)$$

和

$$\phi_\alpha(\mathbf{p}') = \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \right] \int d^3x' \exp\left(\frac{-i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'}{\hbar}\right) \psi_\alpha(\mathbf{x}') \quad (1.250)$$

核对一下波函数的量纲是很有意思的. 在一维问题中, 归一化条件意味着 $|\langle x'|\alpha\rangle|^2$ 具有长度倒数的量纲, 因此, 波函数本身必须有 (长度) $^{-1/2}$ 的量纲. 与之相比, 三维问题中的波函数一定有 (长度) $^{-3/2}$ 的量纲, 因为 $|\langle \mathbf{x}'|\alpha\rangle|^2$ 对全空间体积积分之后必须为 1 (无量纲).

第一章 练习

1. 证明: 如果 $X = |\beta\rangle\langle\alpha|$, 那么则有 $X^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|$.
2. 判断
 - (a). 对于一个 $\frac{1}{2}$ 自旋系统, S_z 的期望可以取 $0.233\hbar$.
 - (b). 对于一个 $\frac{1}{2}$ 自旋系统, S_z 的本征值可以取 $0.233\hbar$.
 - (c). 本征值取值往往是几个特定的值, 而期望往往是范围内的实数.
3. 证明:

$$[AB, CD] = -AC\{D, B\} + A\{C, B\}D - C\{D, A\}B + \{C, A\}DB.$$

4. 假定一个 2×2 矩阵 X (不一定是厄米或么正矩阵) 被写成

$$X = a_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a},$$

其中 a_0 和 $a_{1,2,3}$ 都是数.

- (a). a_0 和 a_k ($k = 1, 2, 3$) 与 $\text{tr}(X)$ 和 $\text{tr}(\sigma_k X)$ 有什么样的关系?
- (b). 利用矩阵元 X_{ij} 求出 a_0 和 a_k .
5. 证明一个 2×2 矩阵 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}$ 的行列式在如下变换中不变:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \rightarrow \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}' \equiv \exp\left(\frac{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right).$$

当 $\hat{\mathbf{n}}$ 沿 z 正方向时, 利用 a_k 求出 a'_k 并解释你的结果.

6. 利用左矢-右矢代数规则证明或计算下列各式

(a). $\text{tr}(XY) = \text{tr}(YX)$, 其中 X 和 Y 都是算符.

(b). $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$, 其中 X 和 Y 都是算符.

(c). 在左矢-右矢形式下 $\exp[if(A)] = ?$ 其中 A 是厄米算符, 其本征值是已知的.

(d). $\sum a' \psi'_a(\mathbf{x}') \psi_a(\mathbf{x}'')$, 其中 $\psi_a(\mathbf{x}') = \langle \mathbf{x}' | a' \rangle$

7. (a). 考虑两个右矢 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$. 假定 $\langle \alpha' | \alpha \rangle, \langle \alpha'' | \alpha \rangle, \dots$ 和 $\langle \alpha' | \beta \rangle, \langle \alpha'' | \beta \rangle, \dots$ 均为已知, 其中 $|a'\rangle, |a''\rangle, \dots$ 组成基右矢的完备集. 求在该基下算符 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ 的矩阵表示.

(b). 现在考虑一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统, 设 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 分别为 $|s_z = \hbar/2\rangle$ 和 $|s_x = \hbar/2\rangle$ 态. 写出在通常 (s_z 对角) 的基下, 与 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ 对应的方阵的显示式.

8. 假定 $|i\rangle$ 和 $|j\rangle$ 都是某厄米算符 A 的本征右矢. 在什么条件下 $|i\rangle + |j\rangle$ 也是 A 的一个本征右矢. 证明答案的正确性.

9. 利用 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 的正交性证明

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar S_k, \quad \{S_i, S_j\} = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right)\delta_{ij},$$

其中

$$S_x = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| + |- \rangle\langle+|), \quad S_y = \frac{i\hbar}{2}(-|+\rangle\langle-| + |- \rangle\langle+|),$$

$$S_z = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle+| - |- \rangle\langle-|).$$

10. 一个双态系统其哈密顿算符由下式给出

$$H = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|),$$

其中 a 是一个数, 其量纲为能量. 求能量的本征值和相应的能量本征右矢 (作为 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 的线性组合).

11. 已知一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统处于 $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 的一个本征态, 其本征值为 $\hbar/2$, 其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 为 xz 平面上的一个单位矢量, 与正 z 轴夹 γ 角.

(a). 假定已测得 S_x . 得到 $+\hbar/2$ 的概率是什么? S_x 的弥散度, 即

$$\langle (S_x - \langle S_x \rangle)^2 \rangle.$$

(为了让你自己放心起见, 验证在 $\gamma = 0, \pi/2$ 和 π 等特殊情况下的答案.)

12. 设 A 和 B 是两个可观测量. 假定 A 和 B 的共同本征右矢 $\{|a', b'\rangle\}$ 构成一组正交完备的基右矢集合. 我们是否总可以得出结论

$$[A, B] = 0?$$

如果你的答案是可以, 证明这一论断. 如果你的答案是不可以, 举出一个反例.

13. 两个厄米算符反对易

$$\{A, B\} = AB + BA = 0.$$

能够存在一个 A 和 B 的同时 (即, 共同) 的本征右矢吗? 证明或举例说明你的论断.

14. 已知两个可观测量 A_1 和 A_2 均不显含时间, 且相互不对易

$$[A_1, A_2] \neq 0,$$

我们还知道 A_1 和 A_2 均与哈密顿量对易:

$$[A_1, H] = 0. \quad [A_2, H] = 0.$$

证明, 在一般情况下, 能量本征态是简并的. 存在例外吗?

15. 找出使不确定度乘积

$$\langle (\Delta S_x)^2 \rangle \langle (\Delta S_y)^2 \rangle$$

取最大值的右矢 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 的线性组合. 直接证明, 你所找到的这个线性组合不破坏 S_x 和 S_y 的不确定度关

系.

16. 对于一个禁闭于两个刚性壁之间的一维粒子,

$$V = \begin{cases} 0 & \text{对于 } 0 < x < a, \\ \infty & \text{其他} \end{cases}$$

求出 $x-p$ 不确定度乘积 $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle$ 的值. 对基态和激发态都进行求解.

17. 考虑一个三维右矢空间. 如果某一组正交的右矢集合, 比如 $|1\rangle, |2\rangle$ 和 $|3\rangle$, 用作基右矢, 算符 A 和 B 由

$$A \doteq \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}, \quad B \doteq \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix}$$

表示, 其中 a 和 b 都是实数.

- (a). 显然, A 展示了一个简并的谱. B 也展示了简并的谱吗?
 (b). 证明 A 和 B 对易.
 (c). 找到一组新的正交归一右矢集合, 它们是 A 和 B 的共同本征右矢. 具体确定在这三个本征右矢的每一个本征右矢上 A 和 B 的本征值. 你确定的本征值能完全地表征每个本征右矢吗?
18. 构造一个变换矩阵, 它把 S_z 对角的基和 S_x 对角的基联系起来. 证明你的结果与下列的普遍关系式自治:

$$U = \sum_r |b^{(r)}\rangle \langle a^{(r)}|.$$

19. 一个有限的 (空间) 位移的平移算符由

$$\mathcal{T}(\mathbf{I}) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{I}}{\hbar}\right),$$

给出, 其中 \mathbf{p} 是动量算符.

- (a). 求

$$[x_i, f(1)].$$

- (b). 利用上一问, 展示期望 $\langle \mathbf{x} \rangle$ 在平移下如何改变.

20. (a). 证明下列各式:

I. $\langle p' | x | \alpha \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p' | \alpha \rangle$

II. $\langle \beta | x | \alpha \rangle = \int dp' \phi_\beta(p') i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')$. 其中 $\phi_\alpha(p') = \langle p' | \alpha \rangle$ 和 $\phi_\beta(p') = \langle p' | \beta \rangle$ 都是动量空间波函数.

- (b).

$$\exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)$$

的物理意义是什么, 其中 x 是位置算符, 而 Ξ 是某个量纲为动量的数? 证明你的答案的正确性.

第二章 量子动力学

内容提要

- 时间演化算符
- 薛定谔方程
- 两种绘景
- 波动方程
- 传播子
- 路径积分

到此为止, 我们还没有讨论物理系统如何随时间改变. 本章专门阐述态右矢和/或可观测量的动力学演化. 换言之, 在这一章我们所关心的是牛顿, 或拉格朗日 (Lagrange) 和哈密顿运动方程的量子力学类似方程.

2.1 时间演化和薛定谔方程

我们应当记住的首要之点是: 时间在量子力学中只是一个参量而不是一个算符. 特别地, 时间不是前一章所说的可观测量. 像谈论位置算符一样谈论时间算符是无意义的. 具有讽刺意味的是, 在波动力学发展的历史过程中, 德布罗意也好, 薛定谔也罢都受到过能量与时间为一方及动量与位置 (空间坐标) 为另一方的二者之间协变类比的启发. 然而, 我们现在来看量子力学的最终形式时, 已见不到在时间与空间之间对称处理的踪迹. 场的相对论量子理论确实平等地处理了时间与空间坐标, 但它只是在做出了牺牲, 把位置从可观测量的地位降低到只是一个参量的情况下做到这一点的.

当然, 简单来说, 时间与空间并不对偶或平权, 我们对于时间更多是客观的演化, 而不是主观的操纵.

2.1.1 时间演化算符

在这一节我们关注的基本点是: 一个态右矢如何随时间改变? 假定我们有一个物理系统, 它的态右矢在 t_0 时刻由 $|\alpha\rangle$ 表示. 在稍后的时刻, 一般而言, 该系统不会保持在同样的状态 $|\alpha\rangle$. 让我们把某稍后时刻与该状态相对应的右矢表示为

$$|\alpha, t_0; t\rangle, \quad (t > t_0) \quad (2.1)$$

其中标出 α, t_0 是为了强调该系统在某个较早的参考时刻 t_0 曾经处于态 $|\alpha\rangle$. 由于时间被认为是一个连续参量, 我们预期存在

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha\rangle \quad (2.2)$$

但是, 我们也可以用一种简化符号 (正如同之前常做的那样)

$$|\alpha, t_0; t_0\rangle = |\alpha, t_0\rangle \quad (2.3)$$

来代替它. 我们现在这一节的基本任务是研究一个态右矢的时间演化过程:

$$|\alpha, t_0\rangle = |\alpha\rangle \xrightarrow{\text{时间演化}} |\alpha, t_0; t\rangle \quad (2.4)$$

或者说, 我们感兴趣的是, 探寻在时间平移变换 $t_0 \rightarrow t$ 下, 态右矢如何变化.

就像平移的情况一样, 这两个右矢由一个被称之为时间演化算符的 $\mathcal{U}(t, t_0)$ 联系起来:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (2.5)$$

我们希望描述时间演化算符的哪些性质呢? 第一个重要的性质源于概率守恒对 $\mathcal{U}(t, t_0)$ 的么正性的要求. 假定在 t_0 时刻态右矢用某个可观测量 A 的本征右矢展开:

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) |a'\rangle \quad (2.6)$$

同样地, 在稍后某个时刻, 我们有

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t) |a'\rangle \quad (2.7)$$

一般来说, 我们无法指望各个展开系数的模保持相同¹:

$$|c_{a'}(t)| \neq |c_{a'}(t_0)| \quad (2.8)$$

例如, 考虑一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统, 其自旋磁矩受到一个沿 z 方向的均匀磁场的作用. 为确定起见, 假定 t_0 时刻该自旋沿正 x 方向, 即发现该系统处在 S_x 的一个本征态上, 其本征值为 $\hbar/2$. 正如稍后将在本节中定量证明的, 随着时间的推移, 该自旋在 xy 平面上进动. 这意味着, 在 $t > t_0$ 时刻观测到 $S_x +$ 的概率不再是 1, 还有有限的概率观测到 $S_x -$. 而在所有的时刻, 观测到 $S_x +$ 和 $S_x -$ 的概率之和都保持为 1. 尽管对于各个展开系数有上式, 现在我们采用本征右矢展开的符号, 一般我们一定有

$$\sum_{a'} |c_{a'}(t_0)|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}(t)|^2 \quad (2.9)$$

另一种表述方式是, 如果态右矢初始时归一到了 1, 则在所有以后的时刻它一定保持归一到 1:

$$\langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1 \Rightarrow \langle \alpha, t_0; t | \alpha, t_0; t \rangle = 1 \quad (2.10)$$

就像在平移的情况一样, 如果时间演化算符取为么正算符, 我们就能确保这一性质成立. 为此, 我们将么正性,

$$\mathcal{U}^\dagger(t, t_0) \mathcal{U}(t, t_0) = 1 \quad (2.11)$$

取为 \mathcal{U} 算符基本性质中的一个. 这个性质使得许多作者把么正性视为概率守恒的同义词.

我们要求 \mathcal{U} 算符具有的另外一个特征是它的结合性:

$$\mathcal{U}(t_2, t_0) = \mathcal{U}(t_2, t_1) \mathcal{U}(t_1, t_0), \quad (t_2 > t_1 > t_0) \quad (2.12)$$

这个方程是说, 如果对获得从 t_0 到 t_2 的时间演化感兴趣, 我们则可以通过考虑先从 t_0 到 t_1 , 再从 t_1 到 t_2 的时间演化得到相同的结果 (当然, 如果你已经对群论有所了解, 很容易发现其构成了一个群).

类比在平移算符时我们的做法, 现在考虑一个无穷小时间演化算符 $\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0)$:

$$|\alpha, t_0; t_0 + dt\rangle = \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (2.13)$$

由于连续性, 当 dt 趋于零时, 该无穷小时间演化算符一定约化为单位算符,

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 \quad (2.14)$$

而且, 就像在平移情况中那样, 我们预期 $\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0)$ 与 1 之差为 dt 的量级.

我们断言, 下式满足所有这些要求

$$\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\Omega dt \quad (2.15)$$

其中 Ω 是一个厄米算符, 则显然有

$$\Omega^\dagger = \Omega \quad (2.16)$$

该无穷小时间平移算符同样满足结合性

$$\mathcal{U}(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0) = \mathcal{U}(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0 + dt_1) \mathcal{U}(t_0 + dt_1, t_0) \quad (2.17)$$

它与单位算符只相差一个 dt 量级的项. 么正性还可以在 $(dt)^2$ 或更高阶的项可以忽略的

$$\mathcal{U}^\dagger(t_0 + dt, t_0) \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = (1 + i\Omega^\dagger dt)(1 - i\Omega dt) \simeq 1 \quad (2.18)$$

算符 Ω 具有频率或者反比于时间的量纲. 那么存在我们熟悉的具有频率量纲的可观测量吗? 回忆一下, 在旧量子论中, 假定角频率 ω 通过普朗克关系

$$E = \hbar\omega \quad (2.19)$$

与能量联系起来. 现在让我们借用经典力学中哈密顿量是时间演化成元的概念. 那时自然可以把 Ω 与哈密顿量

¹然而, 稍后我们将证明, 如果哈密顿量与 A 对易, 则 $|c_{a'}(t)|$ 的确等于 $|c_{a'}(t_0)|$.

算符 H 联系起来:

$$\Omega = \frac{H}{\hbar} \quad (2.20)$$

综上所述, 无穷小时间演化算符可写为:

$$\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = \mathbf{1} - \frac{iH dt}{\hbar} \quad (2.21)$$

其中假定了哈密顿量算符 H 是厄米的. 读者可能要问, 这里引入的 \hbar 是否与出现在平移算符表达式中的 \hbar 相同. 我们可通过稍后导出的量子力学运动方程与经典运动方程做比较回答这个问题. 结果表明, 除非这两个 \hbar 是一样的, 否则就不能够得到作为相应量子力学关系式的经典极限关系式

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m} \quad (2.22)$$

2.1.2 薛定谔方程

我们现在能够推导时间演化算符 $\mathcal{U}(t, t_0)$ 满足的基本微分方程. 在 2.12 中令 $t_1 \rightarrow t, t_2 \rightarrow t + dt$, 利用时间演化算符的结合性:

$$\mathcal{U}(t + dt, t_0) = \mathcal{U}(t + dt, t) \mathcal{U}(t, t_0) = \left(\mathbf{1} - \frac{iH dt}{\hbar} \right) \mathcal{U}(t, t_0) \quad (2.23)$$

其中的时间差 $t - t_0$ 不必为无穷小. 我们有

$$\mathcal{U}(t + dt, t_0) - \mathcal{U}(t, t_0) = -i \left(\frac{H}{\hbar} \right) dt \mathcal{U}(t, t_0) \quad (2.24)$$

它可以写成微分方程形式:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = H \mathcal{U}(t, t_0) \quad (2.25)$$

这就是时间演化算符的薛定谔方程. 随时间推移发生的每件事都一定遵从这个基本方程.

方程 2.25 立刻导致了一个态右矢满足的薛定谔方程. 用 $|\alpha, t_0\rangle$ 右乘 2.25 的两边得到

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle = H \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (2.26)$$

但是 $|\alpha, t_0\rangle$ 不依赖于 t , 所以该式与

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle \quad (2.27)$$

是相同的, 其中用到了 2.25.

如果 $\mathcal{U}(t, t_0)$ 已经给出, 并进一步知道了 $\mathcal{U}(t, t_0)$ 如何作用于初始态右矢 $|\alpha, t_0\rangle$, 就没有必要为求解态右矢的薛定谔方程操心. 我们所须做的就是将 $\mathcal{U}(t, t_0)$ 作用在 $|\alpha, t_0\rangle$ 上, 用这种方法我们可以求得任意时刻 t 的态右矢. 因此, 我们的第一个任务就是推导出时间演化算符的薛定谔方程的形式解. 存在三种需要分别处理的情况:

情况 1. 哈密顿量算符不依赖时间. 这时我们指的是, 甚至当参量 t 改变时, 哈密顿量算符也保持不变. 比如, 一个自旋磁矩与一个时间无关的磁场相互作用的哈密顿量就是这种情况. 在这种情况下的解由下式给出:

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp \left[\frac{-iH(t - t_0)}{\hbar} \right] \quad (2.28)$$

为了证明这一点, 让我们将该指数展开如下 (幂级数展开):

$$\exp \left[\frac{-iH(t - t_0)}{\hbar} \right] = 1 + \frac{-iH(t - t_0)}{\hbar} + \left[\frac{(-i)^2}{2} \right] \left[\frac{H(t - t_0)}{\hbar} \right]^2 + \cdots \quad (2.29)$$

由于这个展开式对时间微商为

$$\frac{\partial}{\partial t} \exp \left[\frac{-iH(t - t_0)}{\hbar} \right] = \frac{-iH}{\hbar} + \left[\frac{(-i)^2}{2} \right] 2 \left(\frac{H}{\hbar} \right)^2 (t - t_0) + \cdots \quad (2.30)$$

我们所得出的解显然满足微分方程 2.25. 因为 $t \rightarrow t_0$ 时, 求出的解约化为单位算符, 边界条件也被同时满足. 求解的另一种方法是相继地组合无穷小时间演化算符:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[\mathbf{1} - \frac{(iH/\hbar)(t - t_0)}{N} \right]^N = \exp \left[\frac{-iH(t - t_0)}{\hbar} \right] \quad (2.31)$$

情况 2. 哈密顿量算符与时间相关, 但不同时间的 H 对易. 作为一个例子, 让我们考虑一个自旋磁矩受到一个强度随时间改变但方向保持不变的磁场的作用. 此时 2.25 式的形式解为

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp \left[- \left(\frac{i}{\hbar} \right) \int_{t_0}^t dt' H(t') \right] \quad (2.32)$$

它可以用类似的方法证明. 我们只要把情况一中的 $H(t - t_0)$ 换成 $\int_{t_0}^t dt' H(t')$ 即可.

情况 3. 不同时刻的 H 不对易. 继续用与自旋磁矩相关的例子, 这一次我们假定磁场的方向也随着时间改变: $t = t_1$ 时沿 x 方向, $t = t_2$ 时沿 y 方向等. 因为 S_x 与 S_y 不对易, 所以 $H(t_1)$ 和 $H(t_2)$ 的行为像 $\mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$, 也不对易. 在这种情况下, 形式解由下式给出:

$$\mathcal{U}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n) \quad (2.33)$$

该式有时称为戴森 (Dyson) 级数, 它以 F. J. 戴森的名字命名, 因为他在量子场论中发展了这种形式的微扰展开. 我们现在不证明这个式子, 因为其证明非常类似于在后续所提到的相互作用绘景中时间演化算符的证明.

在初等应用中, 只有情况 1 是实际感兴趣的. 在本章余下的部分, 我们假定 H 算符是时间无关的.

2.1.3 能量本征右矢

为了能够计算时间演化算符作用于一个一般初始右矢 $|\alpha\rangle$ 的效应, 我们必须首先知道它如何作用于展开 $|\alpha\rangle$ 时使用的基右矢. 如果所用的基右矢是满足

$$[A, H] = 0 \quad (2.34)$$

的 A 的本征右矢, 那就简单了. 那时, A 的本征右矢也是 H 的本征右矢, 称之为**能量本征右矢**, 它的本征值用 $E_{a'}$ 表示:

$$H|a'\rangle = E_{a'}|a'\rangle \quad (2.35)$$

我们现在可以用 $|a'\rangle\langle a'|$ 展开时间演化算符. 为简单起见, 取 $t_0 = 0$, 我们得到

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) &= \sum_{a'} \sum_{a''} |a''\rangle\langle a''| \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) |a'\rangle\langle a'| \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \langle a'| \end{aligned} \quad (2.36)$$

一旦初始右矢利用 $\{|a'\rangle\}$ 的展开知道了, 则写成这种形式的时间演化算符就使我们能够求解任何初值问题. 作为例子, 假定初始右矢的展开为

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (2.37)$$

则我们就有

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) |\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \quad (2.38)$$

换句话说, 展开系数随时间变化如下

$$c_{a'}(t = 0) \rightarrow c_{a'}(t) = c_{a'}(t = 0) \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \quad (2.39)$$

其模保持不变. 注意, 各分量之间的相对位相的确是随时间改变, 因为振荡的频率各不相同.

一种有意思的特殊情况是, 初态碰巧是 $\{|a'\rangle\}$ 自身中的一个. 初始时, 我们有

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = |a'\rangle \quad (2.40)$$

而在一个稍后的时刻

$$|a, t_0 = 0; t\rangle = |a'\rangle \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \quad (2.41)$$

因此, 如果初始时系统是 A 和 H 的一个共同本征态, 它在所有的时刻都将保持如此. 最多可能发生的是相位

的调制, 即 $\exp(-iE_{a'}t/\hbar)$. 在这个意义上说, 一个与 H 相容的可观测量是一个运动常数. 当讨论海森堡运动方程时, 我们将再次遇到这种联系的不同形式.

在前面的讨论中, 量子力学的基本任务被简化为寻找一个与 H 对易的可观测量并计算它的本征值. 一旦完成了这一步, 我们就可以用那个观测量的本征右矢展开初始右矢, 然后只要用时间演化算符去作用即可. 最后的这一步只不过意味着改变每个展开系数的相位.

尽管我们解决了只有一个与 H 对易的可观测量 A 的情况, 当存在几个相互相容且均与 H 对易的可观测量时:

$$[A, B] = [B, C] = [A, C] = \cdots = 0 \quad (2.42)$$

$$[A, H] = [B, H] = [C, H] = \cdots = 0 \quad (2.43)$$

我们的考虑能够很容易地被推广. 我们有

$$\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) = \sum_{K'} |K'\rangle \exp\left(\frac{-iE_{K'}t}{\hbar}\right) \langle K'| \quad (2.44)$$

其中只要 a', b', c', \dots 被确定了, $E_{K'}$ 也就唯一地被确定了. 因此, 找到一个相互相容而且还与 H 对易的可观测量的完备集是关键. 只要找到这样的一个集合, 我们就可以把这个初始右矢表示为 A, B, C, \dots 与 H 的共同本征右矢的叠加. 最后一步只是使用了写成上面形式的时间演化算符. 用这样一种方法, 我们可以求解具有时间无关 H 的最普遍的初值问题.

2.1.4 期望的时间依赖

接下来我们要开始研究一个观测量的期望作为关于时间函数如何变化. 假定 $t = 0$ 时初态是一个与 H 对易的可观测量 A 的一个本征态. 我们现在看一下某个不必与 A 或 H 对易的可观测量 B 的期望. 因为在稍后的时刻这个态右矢为

$$|a', t_0 = 0; t\rangle = \mathcal{U}(t, 0) |a'\rangle \quad (2.45)$$

故 $\langle B \rangle$ 由下式给出

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \left(\langle a' | \mathcal{U}^\dagger(t, 0) \right) \cdot B \cdot \left(\mathcal{U}(t, 0) |a'\rangle \right) \\ &= \left\langle a' \left| \exp\left(\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right) B \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \right| a' \right\rangle \\ &= \langle a' | B | a' \rangle \end{aligned} \quad (2.46)$$

它是不依赖于 t 的. 所以一个可观测量对于能量本征态的期望不随时间变化. 由于这个原因, 能量的本征态经常被称为定态.

对能量本征态的一个叠加或一个非定态取期望的时候, 情况更为有趣. 假定初始时有

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (2.47)$$

很容易算出 B 的期望为

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \left[\sum_{a'} c_{a'} \left\langle a' \left| \exp\left(\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right) \right| \right] \cdot B \cdot \left[\sum_{a''} c_{a''} \exp\left(\frac{-iE_{a''}t}{\hbar}\right) \right] |a''\rangle \right] \\ &= \sum_{a'} \sum_{a''} c_{a'}^* c_{a''} \langle a' | B | a'' \rangle \exp\left[\frac{-i(E_{a''} - E_{a'})t}{\hbar}\right] \end{aligned} \quad (2.48)$$

于是, 这时期望是由一些振荡项组成, 它们的角频率由波尔频率条件

$$\omega_{a'a'} = \frac{(E_{a''} - E_{a'})}{\hbar} \quad (2.49)$$

确定.

2.1.5 自旋进动

在这里最恰当的是给出一个例子. 我们考虑一个极为简单、然而却能阐明我们所发展的基本形式框架的系统.

我们从一个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的系统的哈密顿量

$$H = -\left(\frac{e}{m_e c}\right) \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \quad (2.50)$$

(对于电子 $e < 0$) 出发, 该系统具有 $e\hbar/2m_e c$ 的磁矩, 受到一个外磁场 \mathbf{B} 作用. 此外, 我们取 \mathbf{B} 为一个沿 z 方向的均匀静磁场. 这时我们可把 H 记为

$$H = -\left(\frac{eB}{m_e c}\right) S_z \quad (2.51)$$

因为 S_z 与 H 只差一个常数因子, 所以它们显然对易. S_z 的本征态也是能量本征态, 其相应的本征值为

$$E_{\pm} = \mp \frac{e\hbar B}{2m_e c}, \quad \text{对于 } S_z \pm \quad (2.52)$$

最方便的做法是以下述方式定义一个 ω

$$\omega \equiv \frac{|e|B}{m_e c} \quad (2.53)$$

它使两个能量本征值之差为 $\hbar\omega$. 然后我们就可以把算符 H 简单地改写为

$$H = \omega S_z \quad (2.54)$$

此时所有随时间演化的信息全都包含在时间演化算符中

$$\mathcal{U}(t, 0) = \exp\left(\frac{-i\omega S_z t}{\hbar}\right) \quad (2.55)$$

我们将其作用于初态. 展开初始右矢所必须使用的基右矢显然是 S_z 的本征右矢 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$, 它们也是能量本征右矢. 假定 $t = 0$ 时刻该系统由下式描写

$$|\alpha\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle \quad (2.56)$$

将时间演化算符作用在上面, 我们看到, 态右矢在稍后某时刻为

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = c_+ \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right)|+\rangle + c_- \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right)|-\rangle \quad (2.57)$$

其中我们用到了

$$H|\pm\rangle = \left(\frac{\pm\hbar\omega}{2}\right)|\pm\rangle \quad (2.58)$$

具体地说, 让我们假定该初始右矢 $|\alpha\rangle$ 表示自旋向上 (或更精确地说, $S_z +$) 的态 $|+\rangle$, 它意味着

$$c_+ = 1, \quad c_- = 0 \quad (2.59)$$

这告诉我们, 在一个稍后的时刻, 它仍处于自旋向上的态, 这并不奇怪, 因为该态是一个定态.

接下来, 让我们假定初始时该系统处在 $S_x +$ 态. 我们知道

$$c_+ = c_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (2.60)$$

可直截了当地求出在稍后某个时刻 t 系统处于 $S_x \pm$ 态的概率:

$$\begin{aligned} |\langle S_x \pm | \alpha, t_0 = 0; t \rangle|^2 &= \left| \left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \langle + | \pm \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \langle - | \right] \cdot \left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right) | + \rangle + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right) | - \rangle \right] \right|^2 \\ &= \left| \frac{1}{2} \exp\left(\frac{-i\omega t}{2}\right) \pm \frac{1}{2} \exp\left(\frac{+i\omega t}{2}\right) \right|^2 \\ &= \cos^2 \frac{\omega t}{2} \quad \text{对于 } S_x + \\ &= \sin^2 \frac{\omega t}{2} \quad \text{对于 } S_x - \end{aligned} \quad (2.61)$$

尽管初始时自旋沿正 x 方向, 但沿 z 方向的磁场导致它旋转, 结果我们得到了在稍后某时刻找到 S_x 一的有限的概

率. 可以看到, 这两个概率之和在所有的时刻都是 1, 它与时间演化算符的么正性相符.

我们可以把 S_x 的期望写成

$$\begin{aligned}\langle S_x \rangle &= \left(\frac{\hbar}{2} \right) \cos^2 \left(\frac{\omega t}{2} \right) + \left(\frac{-\hbar}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\omega t}{2} \right) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2} \right) \cos \omega t\end{aligned}\quad (2.62)$$

故此量随时间振荡, 其角频率为相应的两个能量本征值之差除以 \hbar , 它与我们的普遍公式是一致的. 对 S_y 和 S_z 做类似的操作表明

$$\langle S_y \rangle = \left(\frac{\hbar}{2} \right) \sin \omega t \quad (2.63)$$

和

$$\langle S_z \rangle = 0 \quad (2.64)$$

物理上这意味着自旋在 xy 平面上进动. 在后续中讨论转动算符时, 我们将进一步评述自旋进动.

自旋进动已被实验严格确证. 事实上, 它被用作研究其他基本量子力学现象的工具.

2.1.6 关联振幅和能量时间不确定度关系

我们以探讨不同时刻的态右矢如何彼此关联来结束这一节. 假定一个物理系统在 $t = 0$ 时刻的初态右矢由 $|\alpha\rangle$ 定. 它随时间变成 $|\alpha, t_0 = 0; t\rangle$, 我们可使用时间演化算符的作用得到它. 我们关心在稍后时刻 t 该态右矢与 $t = 0$ 时刻的态右矢的相似程度, 因此, 我们构造一个在不同时刻的两个态右矢之间的内积:

$$\begin{aligned}C(t) &\equiv \langle \alpha | \alpha, t_0 = 0; t \rangle \\ &= \langle \alpha | \mathcal{U}(t, 0) | \alpha \rangle\end{aligned}\quad (2.65)$$

它被称为**关联振幅**. $C(t)$ 的模给出了不同时刻态右矢间“相似程度”的一种定量的测量.

作为一个极端的例子, 考虑一个非常特殊的情况, 在那里初始右矢 $|\alpha\rangle$ 是 H 的本征右矢; 因此我们有:

$$C(t) = \langle a' | a', t_0 = 0; t \rangle = \exp \left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar} \right) \quad (2.66)$$

所以这个关联振幅的模在所有的时刻都是 1, 对于一个定态, 这并不奇怪. 在更普遍的情况下, 初始右矢被表示为 $\{|a'\rangle\}$ 的叠加, 我们有

$$\begin{aligned}C(t) &= \left(\sum_{a'} c_{a'}^* \langle a' | \right) \left[\sum_{a''} c_{a''} \exp \left(\frac{-iE_{a''}t}{\hbar} \right) |a''\rangle \right] \\ &= \sum_{a'} |c_{a'}|^2 \exp \left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar} \right)\end{aligned}\quad (2.67)$$

由于我们要对许多具有不同频率的振荡时间相关项求和, 对于适当的大的 t 值, 就可能会有强烈地相消. 我们预期关联振幅从 $t = 0$ 时的 1 开始随着时间减小. 为了更具体地估算上式, 让我们假定这个态右矢可以看作是如此多的有类似能量的能量本征右矢的叠加, 以至我们可以把它们视为实质上显示的一个准连续谱. 于是可以合理地用积分代替求和

$$\sum_{a'} \rightarrow \int dE \rho(E), \quad c_{a'} \rightarrow g(E)|_{E \approx E_{a'}} \quad (2.68)$$

其中 $\rho(E)$ 表示能量本征态的密度. 现在表示式变成

$$C(t) = \int dE |g(E)|^2 \rho(E) \exp \left(\frac{-iEt}{\hbar} \right) \quad (2.69)$$

并服从归一化条件

$$\int dE |g(E)|^2 \rho(E) = 1 \quad (2.70)$$

在真实的物理情况下, $|g(E)|^2 \rho(E)$ 可能会有一个以 $E = E_0$ 为中心、宽度为 ΔE 的峰. 把式子写成

$$C(t) = \exp\left(\frac{-iE_0 t}{\hbar}\right) \int dE |g(E)|^2 \rho(E) \exp\left[\frac{-i(E - E_0)t}{\hbar}\right] \quad (2.71)$$

我们看到, 随着 t 变大, 除非 $|E - E_0|$ 小到与 \hbar/t 可比, 否则被积函数振荡得非常剧烈. 如果使 $|E - E_0| \simeq \hbar/t$ 成立的间隔比 $|g(E)|^2 \rho(E)$ 的宽度 ΔE 窄得多, 则由于强烈的相消, 基本上得不到对 $C(t)$ 的贡献. 关联振幅的模开始明显异于 1 的特征时间由下式给定:

$$t \simeq \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (2.72)$$

尽管这个方程是针对具有准连续能谱的叠加态求得的, 但对于两能级系统也是有意义的. 在前面考虑过的自旋进动问题中, 初始处于 $|S_x+\rangle$ 的态右矢在大约 $1/\omega = \hbar/(E_+ - E_-)$ 之后开始失去它的身份.

总之, 作为时间演化的结果, 一个物理系统的态右矢在量级为 $\hbar/\Delta E$ 的一段时间间隔之后, 不再保持它的原始形式. 在文献中, 这一点经常被说成阐明了时间-能量不确定度关系

$$\Delta t \Delta E \simeq \hbar \quad (2.73)$$

然而, 这个时间-能量不确定度关系与之前讨论的两个不相容的可观测量间的不确定度关系有着非常不同的本质. 在后面, 我们将回顾这部分内容以便与时间相关微扰论相关联.

2.2 薛定谔绘景和海森堡绘景

2.2.1 么正算符

在上一节通过考虑影响态右矢的时间演化算符, 我们引入了时间演化的概念, 这种量子动力学的方法称为薛定谔绘景. 另外还有一种量子动力学的公式框架, 在那里可观测量而不是态右矢随时间改变, 这第二种方法称为海森堡绘景. 在讨论这两种方法间区别的细节之前, 我们离开本题对么正算符做一些一般性的论述.

在量子力学中, 么正算符被用于许多不同的目的. 在本书中, 我们引入了一个满足么正性性质的算符. 在那一节我们关心的是, 一个表象中的基右矢如何与一些其他表象中的基右矢联系. 我们假定: 当我们转换到一个不同的基右矢集合时, 态右矢自身不会改变, 尽管在不同的表象中, $|\alpha\rangle$ 展开系数的数值是显然不同的. 随后, 我们引入实际上改变了态右矢的两个么正算符, 平移算符和的时间演化算符. 我们有

$$|\alpha\rangle \rightarrow U|\alpha\rangle \quad (2.74)$$

其中 U 可以是 $\mathcal{G}(\mathbf{dx})$ 或者 $\mathcal{U}(t, t_0)$. 这里 $U|\alpha\rangle$ 是一个实际经受了平移或时间演化的物理系统的态右矢. 重要的是要记住, 在改变态右矢的么正变换下, 一个态左矢和一个态右矢的内积保持不变:

$$\langle\beta|\alpha\rangle \rightarrow \langle\beta|U^\dagger U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle \quad (2.75)$$

利用这些变换只影响态右矢而不影响算符这一事实, 我们可以推知 $\langle\beta|X|\alpha\rangle$ 会如何变化:

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle \rightarrow \left(\langle\beta|U^\dagger\right) \cdot X \cdot (U|\alpha\rangle) = \langle\beta|U^\dagger X U|\alpha\rangle \quad (2.76)$$

我们现在做一个由乘法的结合公理推出的非常简单的数学推断:

$$\left(\langle\beta|U^\dagger\right) \cdot X \cdot (U|\alpha\rangle) = \left\langle\beta\right| \cdot \left(U^\dagger X U\right) \cdot \left|\alpha\right\rangle \quad (2.77)$$

在这个推断中有什么物理内涵吗? 这个数学等式暗示着么正变换的两种方法:

方法 1:

$$|\alpha\rangle \rightarrow U|\alpha\rangle, \text{ 而算符不变.} \quad (2.78)$$

方法 2

$$X \rightarrow U^\dagger X U, \text{ 而态右矢不变.} \quad (2.79)$$

在经典物理中我们没有引入态右矢, 然而谈到了平移、时间演化等等. 这是可能的, 因为这些操作实际上改变的是诸如 \mathbf{x} 和 \mathbf{L} 等量, 它们都是经典力学的可观测量. 因此, 我们猜测, 如果我们按照方法 2 去做, 与经典物理更紧密

的联系就可能建立起来.

这里举一个简单的例子可能会有帮助. 我们回顾无穷小平移算符 $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')$ 中阐述的形式是基于方法 1 的, $\mathcal{G}(\mathbf{dx}')$ 只影响态右矢而不影响位置算符:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \left(1 - \frac{i\mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right) |\alpha\rangle \quad (2.80)$$

$$\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} \quad (2.81)$$

相比之下, 如果按照方法 2, 我们得到

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &\rightarrow |\alpha\rangle \\ \mathbf{x} &\rightarrow \left(1 + \frac{i\mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right) \mathbf{x} \left(1 - \frac{i\mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}\right) \\ &= \mathbf{x} + \left(\frac{i}{\hbar}\right) [\mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}', \mathbf{x}] \\ &= \mathbf{x} + d\mathbf{x}' \end{aligned} \quad (2.82)$$

2.2.2 薛定谔绘景和海森堡绘景中的态右矢和可观测量

现在我们回到时间演化算符 $\mathcal{U}(t, t_0)$. 前一节我们考查了态右矢如何随时间演化. 这意味着我们遵照方法 1, 当它应用于时间演化时称为薛定谔绘景. 此外, 我们也可以遵照方法 2, 当它应用于时间演化时称为海森堡绘景.

在薛定谔绘景中, 正如前一节指出的, 对应于诸如 x, p_y 和 S_z 等可观测量的算符不随时间变化, 而态右矢则随着时间变化. 相比之下, 在海森堡绘景中, 对应于可观测量的算符随着时间改变; 态右矢则固定, 可以说是冻结, 在 t_0 时刻所处的态. 为简单起见, 方便的做法是令 $\mathcal{U}(t, t_0)$ 中的 t_0 为零, 而改用 $\mathcal{U}(t)$, 其定义为

$$\mathcal{U}(t, t_0 = 0) \equiv \mathcal{U}(t) = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) \quad (2.83)$$

受到方法 2 的启发, 我们定义海森堡绘景的可观测量为

$$A^{(H)}(t) \equiv \mathcal{U}^\dagger(t) A^{(S)} \mathcal{U}(t) \quad (2.84)$$

其中上标 H 和 S 分别表示海森堡和薛定谔. 在 $t = 0$ 时, 海森堡绘景的可观测量与薛定谔绘景对应的可观测量相重合:

$$A^{(H)}(0) = A^{(S)} \quad (2.85)$$

在 $t = 0$ 时, 两个绘景的态右矢也相重合; 在稍后的 t 时刻, 海森堡绘景态右矢被冻结在 $t = 0$ 时所处的状态

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle_H = |\alpha, t_0 = 0\rangle \quad (2.86)$$

与时间无关. 这与薛定谔绘景的态右矢形成巨大的反差,

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle_S = \mathcal{U}(t) |\alpha, t_0 = 0\rangle \quad (2.87)$$

在两个绘景中期望 $\langle A \rangle$ 显然是相同的

$$\begin{aligned} {}_S\langle \alpha, t_0 = 0; t | A^{(S)} | \alpha, t_0 = 0; t \rangle_S &= \langle \alpha, t_0 = 0 | \mathcal{U}^\dagger A^{(S)} \mathcal{U} | \alpha, t_0 = 0 \rangle \\ &= {}_H\langle \alpha, t_0 = 0; t | A^{(H)}(t) | \alpha, t_0 = 0; t \rangle_H \end{aligned} \quad (2.88)$$

2.2.3 海森堡运动方程

我们现在推导海森堡绘景中的基本运动方程. 假定 $A^{(S)}$ 不显含时间, 许多感兴趣的物理情况正是这样的, 我们得到

$$\begin{aligned}\frac{dA^{(H)}}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{U}^\dagger}{\partial t} A^{(S)} \mathcal{U} + \mathcal{U}^\dagger A^{(S)} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger A^{(S)} \mathcal{U} + \frac{1}{i\hbar} \mathcal{U}^\dagger A^{(S)} \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U} \\ &= \frac{1}{i\hbar} [A^{(H)}, \mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U}]\end{aligned}\quad (2.89)$$

其中我们用到了

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H \mathcal{U} \quad (2.90)$$

$$\frac{\partial \mathcal{U}^\dagger}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \mathcal{U}^\dagger H \quad (2.91)$$

由于最初的 H 是在薛定谔绘景中引入的, 我们可能会想到依照之前的定义

$$H^{(H)} = \mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U} \quad (2.92)$$

不过, 在之前给出的 \mathcal{U} 的一些初等应用中, \mathcal{U} 与 H 明显对易; 作为结果

$$\mathcal{U}^\dagger H \mathcal{U} = H \quad (2.93)$$

于是把上式写成

$$\frac{dA^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A^{(H)}, H] \quad (2.94)$$

是合理的. 这个方程称为**海森堡运动方程**. 注意, 推导该式时我们用到了时间演化算符的性质和 $A^{(H)}$ 的定义式.

将上式与泊松括号形式的经典运动方程相比较是有益的. 在经典物理中, 对于一个不显含时间的 q 和 p 的函数 A , 我们有

$$\frac{dA}{dt} = [A, H]_{\text{经典}} \quad (2.95)$$

我们再一次看到狄拉克的量子化规则导致了量子力学中的正确方程. 然而, 值得注意的是不管 $A^{(H)}$ 是否有经典类比, 这个式子都是有意义的. 例如, 在海森堡绘景中, 自旋算符满足

$$\frac{dS_i^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [S_i^{(H)}, H] \quad (2.96)$$

它可以用来讨论自旋进动, 但是这个方程没有任何经典的对应物, 因为 S_z 不可能被写成为 q 和 p 的函数. 与其说是坚持狄拉克规则, 倒不如说我们可以论证, 对于具有经典对照物的那些量, 正确的经典方程可以借助拟设²

$$\frac{[.,.]}{i\hbar} \rightarrow [.,.]_{\text{经典}} \quad (2.97)$$

从相应的量子力学方程得到. 经典力学可以从量子力学推导出来, 反过来却不行.

2.2.4 自由粒子及埃伦费斯特 (Ehrenfest) 定理

不管我们是在薛定谔绘景还是在海森堡绘景中工作, 为了能够使用运动方程, 我们必须先要知道, 如何构造合适的哈密顿量算符. 对于一个有经典类比的物理系统, 我们假设哈密顿量是和经典物理中的哈密顿量有同样的形式, 我们只要把经典的 x_i 和 p_i 代之以相应的量子力学算符即可. 采用这一假设, 我们可以在经典极限下重新产生正确的经典方程. 每当由于非对易可观测量的存在而出现歧义时, 我们可试着要求 H 是厄米的来解决它; 例如, 我们把经典乘积 xp 的量子力学类比写成 $\frac{1}{2}(xp + px)$. 当所讨论的物理系统没有任何经典类比时, 我们只能猜测哈密顿量算符的结构. 我们可尝试各种形式, 直至得到一个能使结果与实验观测一致的哈密顿量为止.

²ansatz, 一种先猜测再试图证明的方法.

实际应用中,经常必须要做的是计算 x_i (或 p_i) 与 x_j 及 p_j 的函数的对易关系. 为此,下列的一些公式很有用:

$$[x_i, F(\mathbf{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p_i} \quad (2.98)$$

和

$$[p_i, G(\mathbf{x})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial x_i} \quad (2.99)$$

其中, F 和 G 分别为可用 x_j 和 p_j 的幂展开的函数.

现在我们能将海森堡运动方程用于一个质量为 m 的自由粒子. 哈密顿量取经典力学中的形式:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)}{2m} \quad (2.100)$$

我们来看一下可观测量 p_i 和 x_i , 它们可被理解为海森堡绘景中的动量与位置算符, 尽管我们省略了上标 (H). 因为 p_i 与任何 p_j 的函数都对易, 所以我们有

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_i, H] = 0 \quad (2.101)$$

于是对于一个自由粒子, 动量算符是一个运动常数, 它意味着, 在任何时刻 $p_i(t)$ 都与 $p_i(0)$ 相同. 通常从海森堡运动方程可明显看到: 只要 $A^{(H)}$ 与哈密顿量对易, $A^{(H)}$ 就是一个运动常数. 其次,

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [x_i, H] = \frac{1}{i\hbar} \frac{1}{2m} i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\sum_{j=1}^3 p_j^2 \right) \\ &= \frac{p_i}{m} = \frac{p_i(0)}{m} \end{aligned} \quad (2.102)$$

于是我们求得解

$$x_i(t) = x_i(0) + \left(\frac{p_i(0)}{m} \right) t \quad (2.103)$$

它与匀速直线运动的经典轨道方程相似. 重要的是要注意, 尽管在相等时刻我们有

$$[x_i(0), x_j(0)] = 0 \quad (2.104)$$

处于不同时刻的 x_i 间的对易关系不为零. 特别是,

$$[x_i(t), x_i(0)] = \left[\frac{p_i(0)t}{m}, x_i(0) \right] = \frac{-i\hbar t}{m} \quad (2.105)$$

把不确定度关系应用于这个对易子, 可得

$$\langle (\Delta x_i)^2 \rangle_t \langle (\Delta x_i)^2 \rangle_{t=0} \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2} \quad (2.106)$$

此外, 这个关系意味着即使粒子的位置在 $t=0$ 时是严格确定的, 它的位置随着时间变得越来越不确定, 这个结论还可以通过研究波动力学中自由粒子波包随时间演化行为求得.

我们现在把一个位势 $V(\mathbf{x})$ 添加到我们前述的自由粒子哈密顿量中:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \quad (2.107)$$

这里的 $V(\mathbf{x})$ 被理解为 x, y 和 z 算符的函数. 这时我们得到

$$\frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [p_i, V(\mathbf{x})] = -\frac{\partial}{\partial x_i} V(\mathbf{x}) \quad (2.108)$$

另一方面, 我们看到因为 x_i 与新添加的 $V(\mathbf{x})$ 项对易,

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{p_i}{m} \quad (2.109)$$

仍然成立. 我们可以再一次利用海森堡运动方程推导出:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 x_i}{dt^2} &= \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{dx_i}{dt}, H \right] = \frac{1}{i\hbar} \left[\frac{p_i}{m}, H \right] \\ &= \frac{1}{m} \frac{dp_i}{dt} \end{aligned} \quad (2.110)$$

我们最后得到矢量形式的

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} = -\nabla V(\mathbf{x}) \quad (2.111)$$

这是类似于牛顿第二定律的量子力学公式. 在不随时间变动的海森堡态右矢上对该式的两边取期望, 我们得到

$$m \frac{d^2 \langle \mathbf{x} \rangle}{dt^2} = \frac{d \langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = -\langle \nabla V(\mathbf{x}) \rangle \quad (2.112)$$

该式称为埃伦费斯特定理, 以 P. 埃伦费斯特的名字命名, 他在 1927 年利用波动力学形式推导出这个公式. 当把这个定理写成这种期望形式时, 它的适用性与是否用海森堡绘景还是薛定谔绘景无关, 毕竟在这两个绘景中期望是相同的. 我们注意到在式中, \hbar 完全消失了. 因此, 一个波包中心像一个受到 $V(\mathbf{x})$ 支配的经典粒子那样运动就不奇怪了.

2.2.5 基右矢和跃迁振幅

至此, 我们一直回避回答基右矢如何随时间演化. 一个通常的错误概念是随着时间的推移, 所有的右矢在薛定谔绘景中都是运动的, 而在海森堡绘景中都是固定的. 正如我们不久就将阐明的, 情况并非如此. 重要之处在于区分态右矢的行为与基右矢的行为.

在最开始, 通过阐述可观测量的本征右矢将被用作基右矢, 我们开始着手关于右矢空间的讨论. 对于所定义的本征方程

$$A |a'\rangle = a' |a'\rangle \quad (2.113)$$

而言, 随着时间会有什么事情发生呢? 在薛定谔绘景中, A 不改变, 所以, 例如, 作为该本征方程在 $t = 0$ 时刻的解而得到的基右矢, 必须保持不变. 与态右矢不一样, 在海森堡绘景中基右矢不变.

在海森堡绘景中, 整个情况就完全不同了, 在那里我们必须研究的本征值方程是针对时间相关的算符

$$A^{(H)}(t) = \mathcal{U}^\dagger A(0) \mathcal{U} \quad (2.114)$$

通过由两个绘景一致时的 $t = 0$ 时刻得到的式子, 我们推导出

$$\mathcal{U}^\dagger A(0) \mathcal{U} \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle = a' \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle \quad (2.115)$$

它意味着对于 $A^{(H)}$ 的一个本征值方程:

$$A^{(H)}(\mathcal{U}^\dagger |a'\rangle) = a' (\mathcal{U}^\dagger |a'\rangle) \quad (2.116)$$

如果我们继续坚持使用可观测量的本征右矢构建基右矢的观点, 那么在海森堡绘景中 $\{\mathcal{U}^\dagger |a'\rangle\}$ 必然用作基右矢. 随着时间的推移, 用 $|a', t\rangle_H$ 表示的海森堡绘景的基右矢将按照下式运动:

$$|a', t\rangle_H = \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle \quad (2.117)$$

由于是 \mathcal{U}^\dagger 而不是 \mathcal{U} 出现在上式中, 所以与薛定谔绘景的态右矢相比, 所看到的海森堡绘景的基右矢沿相反方向转动. 特别是, $|a', t\rangle_H$ 满足“错误符号的薛定谔方程”

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |a', t\rangle_H = -H |a', t\rangle_H \quad (2.118)$$

至于本征值本身, 我们可以看到, 它们不随时间改变. 这之前讨论的么正等价可观测量的定理是一致的. 还要注意, 基于海森堡绘景的基右矢与基左矢, $A^{(H)}(t)$ 的展开

$$\begin{aligned} A^{(H)}(t) &= \sum_{a'} |a', t\rangle_H a'_H \langle a', t| \\ &= \sum_{a'} \mathcal{U}^\dagger |a'\rangle a' \langle a'| \mathcal{U} \\ &= \mathcal{U}^\dagger A^{(S)} \mathcal{U} \end{aligned} \quad (2.119)$$

表明一切都是完全自洽的.

我们看到, 一个态右矢借助基右矢的展开系数在两个绘景中是一样的:

$$c_{a'}(t) = \underbrace{\langle a' |}_{\text{基左矢}} \cdot \underbrace{(\mathcal{U}|\alpha, t_0=0\rangle)}_{\text{态右矢}} \quad (\text{薛定谔绘景}) \quad (2.120)$$

$$c_{a'}(t) = \underbrace{\langle a' | \mathcal{U}}_{\text{基左矢}} \cdot \underbrace{|\alpha, t_0=0\rangle}_{\text{态右矢}} \quad (\text{海森堡绘景}) \quad (2.121)$$

我们可以形象化地说, 不管我们是把态右矢反时针方向转动还是把基右矢顺时针转动, 态右矢与基右矢之间夹角的余弦总是相同的. 这些考虑同样也适用于显示连续谱的基右矢, 特别是, 波函数 $\langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle$ 可以看作是 (1) 固定的位置本征左矢与运动的态右矢 (薛定谔绘景) 的内积, 或者是 (2) 运动的位置本征左矢与固定的态右矢 (海森堡绘景) 的内积. 在后面, 我们将讨论波函数的时间相关性, 在那里, 我们将导出著名的薛定谔波动方程.

为了进一步证明两个绘景之间的等价性, 我们研究跃迁振幅, 它将在后续起着重要的作用. 假定在 $t=0$ 时制备的一个物理系统处在可观测量 A 的一个本征态上, 其本征值为 a' . 在稍后的某个时刻 t 我们可以问: 在本征值为 b' 的可观测量 B 的本征态上找到该系统的概率振幅, 即所谓的**跃迁振幅**, 是什么? 这里的 A 与 B 可以是相同的也可以是不同的. 在薛定谔绘景中, t 时刻的态右矢由 $\mathcal{U}|a'\rangle$ 给出, 而基右矢 $|a'\rangle$ 和 $|b'\rangle$ 不随时间变化, 因此, 该跃迁振幅为

$$\underbrace{\langle b' |}_{\text{基左矢}} \cdot \underbrace{(\mathcal{U}|a'\rangle)}_{\text{态右矢}} \quad (2.122)$$

与之相比, 在海森堡绘景中态右矢是固定不变的. 这就是说, 在所有时刻它都保持为 $|a'\rangle$, 但是, 基左矢反方向演化. 因此跃迁振幅是:

$$\underbrace{(\langle b' | \mathcal{U})}_{\text{基左矢}} \cdot \underbrace{|a'\rangle}_{\text{态右矢}} \quad (2.123)$$

显然, 这两个式子是相同的. 它们都可以写成

$$\langle b' | \mathcal{U}(t, 0) | a' \rangle \quad (2.124)$$

从某种意义上讲, 这就是从态 $|a'\rangle$ 到态 $|b'\rangle$ 的跃迁振幅.

表 2.1: 薛定谔绘景与海森堡绘景的对比

	薛定谔绘景	海森堡绘景
态右矢	运动的 2.5, 2.27	固定的
可观测量	固定的	运动的 2.84, 2.94
基右矢	固定的	反向运动的 2.117, 2.118

2.3 简谐振子

简谐振子是量子力学中最重要的问题之一. 它不仅诠释了量子力学的许多基本概念和方法, 而且还具有许多实用价值. 本质上, 任何势阱都可以用一个简谐振子来近似, 因此它能描写从分子振动到核结构的各种现象. 而且, 因为哈密顿量基本上是两个正则共轭变量的平方和, 所以也是量子场论中许多问题的重要出发点.

2.3.1 能量本征右矢和能量本征值

利用狄拉克的简洁算符方法开始讨论, 并求出简谐振子的能量本征右矢和能量本征值. 基本的哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (2.125)$$

其中 ω 是经典谐振子的角频率, 按照胡克 (Hooke) 定律它与弦常数 k 的关系为 $\omega = \sqrt{k/m}$. 算符 x 和 p 当然是厄米的. 方便的做法是定义两个非厄米算符

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right), \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right) \quad (2.126)$$

它们分别称为湮灭算符和产生算符, 其理由不久就会证明. 利用正则对易关系, 我们很容易得到

$$[a, a^\dagger] = \left(\frac{1}{2\hbar} \right) (-i[x, p] + i[p, x]) = 1 \quad (2.127)$$

我们还定义了粒子数算符

$$N = a^\dagger a \quad (2.128)$$

它显然是厄米的. 可直接证明

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \left(\frac{m\omega}{2\hbar} \right) \left(x^2 + \frac{p^2}{m^2\omega^2} \right) + \left(\frac{i}{2\hbar} \right) [x, p] \\ &= \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (2.129)$$

于是, 我们得到粒子数算符与哈密顿算符之间的一个重要关系:

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (2.130)$$

因为 H 只不过是 N 的一个线性函数, 所以 N 与 H 可以同时对角化. 我们用 N 的本征值 n 标记它的能量本征态, 于是有

$$N|n\rangle = n|n\rangle \quad (2.131)$$

稍后我们将证明 n 一定是一个非负整数. 我们还有

$$H|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega|n\rangle \quad (2.132)$$

它意味着能量本征值为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (2.133)$$

为了解 a, a^\dagger 和 N 的物理意义, 我们首先注意到

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a = -a \quad (2.134)$$

同样地, 我们可以导出

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger \quad (2.135)$$

作为结果, 我们有

$$Na^\dagger|n\rangle = ([N, a^\dagger] + a^\dagger N)|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle \quad (2.136)$$

和

$$Na|n\rangle = ([N, a] + aN)|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \quad (2.137)$$

这些关系式意味着 $a^\dagger|n\rangle$ ($a|n\rangle$) 也是 N 的本征值加 (减) 1 的本征右矢. 因为 n 增加 (减少) 1 相当于产生 (湮灭) 一个量子单位的能量 $\hbar\omega$, 所以, a^\dagger (a) 的术语为产生算符 (湮灭算符) 是十分恰当的.

上面的方程意味着 $a|n\rangle$ 与 $|n-1\rangle$ 相同, 至多差一个常数因子. 我们记为

$$a|n\rangle = c|n-1\rangle \quad (2.138)$$

其中 c 是通过要求 $|n\rangle$ 和 $|n-1\rangle$ 均为归一的时候所确定的一个数值常数. 首先, 注意到

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = |c|^2 \quad (2.139)$$

通过注意到 $a^\dagger a$ 只是个粒子数算符, 我们能够计算其左边, 故有

$$n = |c|^2 \quad (2.140)$$

按照约定, 取 c 为的正实数, 我们最后得到

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (2.141)$$

很容易类似地证明

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (2.142)$$

假定我们持续地把湮灭算符 a 作用于式子的两边

$$\begin{aligned} a^2|n\rangle &= \sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle \\ a^3|n\rangle &= \sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle \\ &\vdots \end{aligned} \quad (2.143)$$

我们可以得到粒子数算符的本征右矢, 其本征值 n 越来越小, 直到这个序列中断, 这是每当从一个正整数 n 开始后将出现的边界. 人们可能争辩, 如果我们从一个非整数 n 出发, 这个序列将不会中断, 它将导致一个负 n 本征值的本征右矢. 然而, 我们还有对于 $a|n\rangle$ 模的正定性要求:

$$n = \langle n|N|n\rangle = \left(\langle n|a^\dagger\right) \cdot (a|n\rangle) \geq 0 \quad (2.144)$$

它意味着 n 绝不可能为负! 所以, 我们得出结论: 这个序列必须中断于 $n=0$, 而且 n 所允许的值非负的整数.

由于 n 的最小可能值为零, 所以谐振子的基态有

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (2.145)$$

我们现在可以相继地把产生算符 a^\dagger 作用在基态 $|0\rangle$ 上. 我们求得

$$\begin{aligned} |1\rangle &= a^\dagger|0\rangle \\ |2\rangle &= \left(\frac{a^\dagger}{\sqrt{2}}\right)|1\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^2}{\sqrt{2}}\right]|0\rangle \\ |3\rangle &= \left(\frac{a^\dagger}{\sqrt{3}}\right)|2\rangle = \left[\frac{(a^\dagger)^3}{\sqrt{3!}}\right]|0\rangle \\ &\vdots \\ |n\rangle &= \left[\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\right]|0\rangle \end{aligned} \quad (2.146)$$

用这种方法, 我们成功地构造出 N 和 H 的共同本征态, 其能量本征值为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (n=0, 1, 2, 3, \dots) \quad (2.147)$$

从上面的式子以及对 $\{|n\rangle\}$ 的正交性要求, 我们求得矩阵元

$$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1}, \quad \langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} \quad (2.148)$$

利用这些结果以及

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger), \quad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-a + a^\dagger) \quad (2.149)$$

我们推导出算符 x 和 p 的矩阵元:

$$\langle n'|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}) \quad (2.150)$$

$$\langle n'|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-\sqrt{n}\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}) \quad (2.151)$$

注意, 在我们采用的 N 表象中, x 和 p 都不是对角的. 这并不奇怪, 因为就像 a 和 a^\dagger 一样, x 和 p 与 N 不对易.

这种算符方法还可以用于求位置空间的能量波函数. 让我们由定义为

$$a|0\rangle = 0 \quad (2.152)$$

的基态开始, 在 x 表象中它记为

$$\langle x' | a | 0 \rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \langle x' | \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right) | 0 \rangle = 0 \quad (2.153)$$

我们可以把上式看成基态波函数 $\langle x' | 0 \rangle$ 满足的一个微分方程:

$$\left(x' + x_0^2 \frac{d}{dx'} \right) \langle x' | 0 \rangle = 0 \quad (2.154)$$

其中我们引入了

$$x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (2.155)$$

它设定了谐振子的长度标度. 我们看到其归一化的解为

$$\langle x' | 0 \rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{x_0}} \right) \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x'}{x_0} \right)^2 \right] \quad (2.156)$$

我们还可以通过下列计算求得激发态的能量本征函数

$$\begin{aligned} \langle x' | 1 \rangle &= \langle x' | a^\dagger | 0 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0} \right) \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right) \langle x' | 0 \rangle \\ \langle x' | 2 \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \langle x' | (a^\dagger)^2 | 0 \rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}!} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}x_0} \right)^2 \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right)^2 \langle x' | 0 \rangle, \dots \end{aligned} \quad (2.157)$$

其通式为

$$\langle x' | n \rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{2^n n!}} \right) \left(\frac{1}{x_0^{n+1/2}} \right) \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right)^n \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x'}{x_0} \right)^2 \right] \quad (2.158)$$

查看 x^2 和 p^2 在基态上的期望是有帮助的. 首先, 注意到

$$x^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right) (a^2 + a^{\dagger 2} + a^\dagger a + a a^\dagger) \quad (2.159)$$

当我们取 x^2 的期望时, 上式中只有最后一项有非零的贡献

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{x_0^2}{2} \quad (2.160)$$

同样地,

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \quad (2.161)$$

由此得出, 动能和势能的期望分别为

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\langle H \rangle}{2} \text{ 和 } \left\langle \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right\rangle = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{\langle H \rangle}{2} \quad (2.162)$$

这正像维里 (virial) 定理所预期的那样:

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0 \quad (2.163)$$

它们对于激发态也成立. 因此我们有

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \text{ 和 } \langle (\Delta p)^2 \rangle = \langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} \quad (2.164)$$

而且我们看到不确定度关系以最小不确定度乘积

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.165)$$

的形式被满足. 这并不奇怪, 因为基态波函数具有高斯形状. 相比之下, 激发态不确定度的乘积更大一些:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 \hbar^2 \quad (2.166)$$

2.3.2 谐振子的时间演化

至此, 我们还没有讨论谐振子态右矢或者诸如 x 和 p 等可观测量的时间演化. 我们已经做的一切都是假定在某个瞬时, 比如 $t = 0$, 成立; 而算符 x, p, a 和 a^\dagger 都被看作是薛定谔绘景的算符 (在所有时刻) 或者是在 $t = 0$ 时的海森堡绘景的算符. 在本节剩下的部分, 我们专门在海森堡绘景中工作, 它意味着 x, p, a 和 a^\dagger 都是时间相关的, 虽然我们没有明显地写成 $x^{(H)}(t)$, 等等.

我们知道 p 和 x 的海森堡运动方程为

$$\frac{dp}{dt} = -m\omega^2 x \quad (2.167)$$

和

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m} \quad (2.168)$$

a 和 a^\dagger 满足的两个无耦合微分方程, 即

$$\frac{da}{dt} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\frac{p}{m} - i\omega x \right) = -i\omega a \quad (2.169)$$

和

$$\frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger \quad (2.170)$$

它们的解是

$$a(t) = a(0) \exp(-i\omega t) \text{ 和 } a^\dagger(t) = a^\dagger(0) \exp(i\omega t) \quad (2.171)$$

碰巧的是, 正如所必须的那样, 这些关系式清楚地表明了, 即使是在海森堡绘景, N 和 H 也都是时间无关的算符. 借助于 x 和 p , 我们可以把上式改写为

$$x(t) + \frac{ip(t)}{m\omega} = x(0) \exp(-i\omega t) + i \left[\frac{p(0)}{m\omega} \right] \exp(-i\omega t) \quad (2.172)$$

$$x(t) - \frac{ip(t)}{m\omega} = x(0) \exp(i\omega t) - i \left[\frac{p(0)}{m\omega} \right] \exp(i\omega t) \quad (2.173)$$

令两边的厄米和反厄米部分各自相等, 我们导出

$$x(t) = x(0) \cos \omega t + \left[\frac{p(0)}{m\omega} \right] \sin \omega t \quad (2.174)$$

和

$$p(t) = -m\omega x(0) \sin \omega t + p(0) \cos \omega t \quad (2.175)$$

看上去, 它们的样子与经典运动方程一样. 我们看到, x 和 p 算符恰如它们经典的相似量一样“振动”.

我们现在给出另一种可选的推导方式. 代替求解海森堡运动方程, 我们尝试求解

$$x(t) = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) x(0) \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) \quad (2.176)$$

为此, 我们引入一个非常有用的公式

$$\exp(iG\lambda) A \exp(-iG\lambda) = A + i\lambda [G, A] + \left(\frac{i^2\lambda^2}{2!}\right) [G, [G, A]] + \cdots + \left(\frac{i^n\lambda^n}{n!}\right) [G, [G, [G, \cdots [G, A]]] \cdots] + \cdots, \quad (2.177)$$

其中, G 是一个厄米算符, λ 是一个实参数. 现在应用这个公式, 我们求得

$$\begin{aligned} & \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) x(0) \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) \\ &= x(0) + \left(\frac{it}{\hbar}\right) [H, x(0)] + \left(\frac{i^2 t^2}{2! \hbar^2}\right) [H, [H, x(0)]] + \cdots \end{aligned} \quad (2.178)$$

(2.179)

通过重复使用

$$[H, x(0)] = \frac{-i\hbar p(0)}{m} \quad (2.180)$$

和

$$[H, p(0)] = i\hbar m\omega^2 x(0) \quad (2.181)$$

上式右边的每一项都可以简化为 x 或者简化为 p 。于是,

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)x(0)\exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) &= x(0) + \left[\frac{p(0)}{m}\right]t - \left(\frac{1}{2!}\right)t^2\omega^2x(0) - \left(\frac{1}{3!}\right)\frac{t^3\omega^2p(0)}{m} + \dots \\ &= x(0)\cos\omega t + \left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\sin\omega t \end{aligned} \quad (2.182)$$

从刚才推出的式子, 可能会诱使人们得出结论: $\langle x \rangle$ 和 $\langle p \rangle$ 总是以角频率 ω 振动. 然而, 这个推断是不对的. 取任何一个由确定的 n 标记的能量本征态, 因为算符 $x(0)$ 和 $p(0)$ 使 n 改变 ± 1 , 且 $|n\rangle$ 和 $|n \pm 1\rangle$ 是正交的, 期望 $\langle n|x(t)|n\rangle$ 为零. 这一点无疑可从我们早些时候得到的结论 (参见第 2.1 节): 即一个可观测量对一个定态所取的期望不随时间改变得到. 要观测到像经典振子一样的振动, 我们必须看一看诸如

$$|\alpha\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle \quad (2.183)$$

这样的能量本征态的叠加态. $x(t)$ 对于上式的期望确实振动, 这一点读者可以很容易证明.

我们已经看到, 一个能量本征态的行为并不像经典振子, 就 x 和 p 的振动的期望而言, 不管 n 可能有多大. 逻辑上可以问: 我们怎样才能构造一个能量本征态的叠加态, 它能最好地模拟经典振子呢? 用波动力学的语言讲, 我们想要一个这样的波包, 它来回地反弹而形状不弥散. 结果表明, 由一般具有复本征值 λ 的非厄米湮灭算符 a 的本征值方程

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \quad (2.184)$$

定义的相干态的确满足上述的要求. 这个相干态有许多其他不寻常的性质:

性质 当把它表示为能量 (或 N) 的本征态叠加时

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n)|n\rangle \quad (2.185)$$

$|f(n)|^2$ 对 n 的分布是关于某个平均值 \bar{n} 的泊松型分布

$$|f(n)|^2 = \left(\frac{\bar{n}^n}{n!}\right)\exp(-\bar{n}) \quad (2.186)$$

[平均值为 μ 的、整数阶 n 的泊松分布为 $P_n(\mu) = e^{-\mu}\mu^n/n!$]

性质 它可以通过把振子基态平移某个有限距离得到.

性质 它在所有的时间都满足最小不确定度乘积关系.

2.4 薛定谔波动方程

2.4.1 时间相关的波函数

我们现在转向薛定谔绘景, 并考查在 x 表象中 $|\alpha, t_0; t\rangle$ 的时间演化. 换句话说, 我们的任务是研究波函数

$$\psi(\mathbf{x}', t) = \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \quad (2.187)$$

作为时间函数的行为, 其中 $|\alpha, t_0; t\rangle$ 是薛定谔绘景中时刻 t 的一个态右矢, 而 $\langle \mathbf{x}' |$ 是一个时间无关的本征值为 \mathbf{x}' 的位置本征左矢. 取哈密顿算符为

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \quad (2.188)$$

位势 $V(\mathbf{x})$ 是一个厄米算符. 在 \mathbf{x} 表象我们有

$$\langle \mathbf{x}'' | V(\mathbf{x}) | \mathbf{x}' \rangle = V(\mathbf{x}') \delta^3(\mathbf{x}' - \mathbf{x}'') \quad (2.189)$$

在这个意义上它还是定域的, 其中 $V(\mathbf{x}')$ 是 \mathbf{x}' 的一个实函数. 在本书稍后一些, 我们将考虑更复杂的哈密顿量: 一个时间相关的 $V(\mathbf{x}, t)$; 一个非定域但可分离的势, 其中把上式的右边用 $v_1(\mathbf{x}'')v_2(\mathbf{x}')$ 代替; 一个形为 $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ 的动量相关相互作用, 其中的 \mathbf{A} 是电动力学中的矢量势, 等等.

现在我们推导薛定谔时间相关波动方程. 首先在 \mathbf{x} 表象写出态右矢的薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle = \langle \mathbf{x}' | H | \alpha, t_0; t \rangle \quad (2.190)$$

其中我们用到了在薛定谔绘景中位置本征左矢不随时间变化的事实. 我们可以把动能对上式右边的贡献写成

$$\langle \mathbf{x}' | \frac{\mathbf{p}^2}{2m} | \alpha, t_0; t \rangle = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \quad (2.191)$$

至于 $V(\mathbf{x})$, 我们只利用

$$\langle \mathbf{x}' | V(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x}' | V(\mathbf{x}') \quad (2.192)$$

其中 $V(\mathbf{x}')$ 不再是一个算符. 把所有的这一切结合在一起, 我们推出

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle + V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \quad (2.193)$$

我们认出它就是著名的薛定谔时间相关波动方程, 通常写作

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}', t) = - \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \psi(\mathbf{x}', t) + V(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t) \quad (2.194)$$

在波动方程的基础上建立的量子力学称为波动力学. 这个方程事实上是许多量子力学教科书的出发点. 然而, 在我们的形式框架中, 它只是在 x 基中明显写出的态右矢的薛定谔方程.

2.4.2 时间无关波动方程

我们现在推导能量本征函数满足的偏微分方程. 在 2.1 节我们证明了定态的时间依赖关系由 $\exp(-iE_a t/\hbar)$ 给出. 这使我们能够把它的波函数写成

$$\langle \mathbf{x}' | a', t_0; t \rangle = \langle \mathbf{x}' | a' \rangle \exp \left(\frac{-iE_a t}{\hbar} \right) \quad (2.195)$$

该式可以理解为, 初始时制备该系统处于 A 和 H 的共同本征态, 其本征值分别为 a' 和 $E_{a'}$. 现在让我们把式子代入时间相关的薛定谔方程. 之后我们有

$$- \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 \langle \mathbf{x}' | a' \rangle + V(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | a' \rangle = E_{a'} \langle \mathbf{x}' | a' \rangle \quad (2.196)$$

这是一个能量本征值为 $E_{a'}$ 的能量本征函数 $\langle \mathbf{x}' | a' \rangle$ 所满足的偏微分方程. 实际上, 在波动力学中, 哈密顿量算符是由 \mathbf{x} 和 \mathbf{p} 的函数给出的, 没有必要显式地表明与 H 对易的可观测量 A , 因为我们总可以把 A 选成是与 H 本身一致的、可观测量 \mathbf{x} 和 \mathbf{p} 的函数. 因此, 我们可以不再提到 a' , 而简单地把上式写成能量本征函数 $u_E(\mathbf{x}')$ 满足的偏微分方程

$$- \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 u_E(\mathbf{x}') + V(\mathbf{x}') u_E(\mathbf{x}') = E u_E(\mathbf{x}') \quad (2.197)$$

为了解这个式子, 必须强加一些边界条件. 假定我们寻求具有

$$E < \lim_{|\mathbf{x}'| \rightarrow \infty} V(\mathbf{x}') \quad (2.198)$$

性质的解, 其中该不等式对沿任何方向的 $|\mathbf{x}'| \rightarrow \infty$ 都成立. 在这种情况下将被使用的适宜的边界条件为

$$u_E(\mathbf{x}') \rightarrow 0 \text{ 当 } |\mathbf{x}'| \rightarrow \infty \quad (2.199)$$

物理上, 这意味着粒子被束缚或被禁闭在一个有限的空间区域内. 我们从偏微分方程理论知道, 在边界条件约束下, 式子只对 E 值的分立集合有非平凡的解. 在这个意义上, 时间无关的薛定谔方程产生了能级的量子化. 一旦写出了偏微分方程, 则求解微观物理系统能级的问题就像求解振动的弦或膜的特征频率一样简单. 在这两种情况下, 我们都是求解数学物理的边值问题.

我们假定, 本书的读者具有求解时间相关和时间无关波动方程的一些经验. 也就是常见量子力学书往往要花

一整章来解决, 这里直接略过了.

2.4.3 波函数的解释

我们现在转而讨论波函数的物理解释. 在前面, 我们评述了 $|\psi|^2$ 的概率解释, 这种解释源于把 $\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle$ 看作是 $|\alpha, t_0; t\rangle$ 用位置本征右矢 $\{|\mathbf{x}'\rangle\}$ 展开的系数. 因此, 由

$$\rho(\mathbf{x}', t) = |\psi(\mathbf{x}', t)|^2 = |\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle|^2 \quad (2.200)$$

定义的量 $\rho(\mathbf{x}', t)$, 在波动力学中被视为概率密度. 具体地说, 当我们使用一个探测器确认在 \mathbf{x}' 附近一个小体积元 d^3x' 内存在粒子时, 在 t 时刻记录到一个肯定结果的概率由 $\rho(\mathbf{x}', t) d^3x'$ 给出.

在本节余下的部分中, 因为位置算符将不出现, 我们用 \mathbf{x} 取代 \mathbf{x}' . 利用薛定谔时间相关波动方程, 可以直接推导出连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (2.201)$$

其中 $\rho(\mathbf{x}, t)$ 像前面一样代表 $|\psi|^2$, 而 $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ 称作概率流, 由下式给出

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) &= -\left(\frac{i\hbar}{2m}\right) [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi] \\ &= \left(\frac{\hbar}{m}\right) \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) \end{aligned} \quad (2.202)$$

位势 V 的实数性 (或算符 V 的厄米性) 在我们求得上述结果时起着决定性作用. 相反, 一个复的位势可唯象地解释一个粒子的消失, 这样的位势经常用在核反应中, 在那里入射的粒子被原子核吸收了.

我们可以凭直觉预期概率流 \mathbf{j} 与动量相关. 对于全空间积分的 \mathbf{j} 来说, 情况的确如此. 由上式我们求得

$$\int d^3x \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{\langle \mathbf{p} \rangle_t}{m} \quad (2.203)$$

其中 $\langle \mathbf{p} \rangle_t$ 是动量算符在 t 时刻的期望.

上面的连续性方程让人想起流体力学中的连续性方程, 它描述流体在一个无源、无漏区域的流体动力学流动的特征. 的确, 历史上薛定谔是最早的一个把 $|\psi|^2$ 解释为实际物质密度, 或者把 $e|\psi|^2$ 解释为实际电荷密度的人. 如果我们采纳了这样的观点, 就会把我们引导到某些奇异的结果. 为了理解波函数的物理意义, 把它写成

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{x}, t)} \exp\left[\frac{iS(\mathbf{x}, t)}{\hbar}\right] \quad (2.204)$$

其中 S 为实的并且 $\rho > 0$, 对于 \mathbf{x} 和 t 的任何一个复函数总可以这么写. ρ 的意义已经给出了. S 的物理意义又是什么呢? 注意到

$$\psi^* \nabla \psi = \sqrt{\rho} \nabla (\sqrt{\rho}) + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \rho \nabla S \quad (2.205)$$

我们可以把概率流写成

$$\mathbf{j} = \frac{\rho \nabla S}{m} \quad (2.206)$$

我们现在看到这个波函数具有比把 $|\psi|^2$ 视为概率密度更多的内涵, 相位 S 的梯度包含一个极为重要的信息. 从上面的式子可见, 波函数相位的空间变化描绘了概率流的特征, 相位变化越剧烈, 概率流越强. 在某点 \mathbf{x} 处 \mathbf{j} 的方向可以看作是通过该点的等相位面的法线. 在特别简单的平面波 (动量本征函数) 的例子中

$$\psi(\mathbf{x}, t) \propto \exp\left(\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar} - \frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (2.207)$$

其中 \mathbf{p} 代表动量算符的本征值. 所有的结果都是显然的, 因为

$$\nabla S = \mathbf{p} \quad (2.208)$$

更一般地讲, 使人感兴趣的是把 $\nabla S/m$ 看作是某种“速度”,

$$\text{“}\mathbf{v}\text{”} = \frac{\nabla S}{m} \quad (2.209)$$

而且把连续性方程写成

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (2.210)$$

它恰与流体动力学相同。然而, 我们愿意提醒读者不要太拘泥于字面上把 \mathbf{j} 解释为 ρ 乘以在空间每一点定义的速度, 因为位置与速度的同时精确测量必然会破坏不确定度原理。

2.4.4 经典极限

我们现在讨论波动力学的经典极限。首先, 我们把写成 (2.4.18) 式形式的 ψ 代入到时间相关波动方程的两边。直接求微商导致

$$\begin{aligned} & -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \times \left[\nabla^2 \sqrt{\rho} + \left(\frac{2i}{\hbar}\right) (\nabla \sqrt{\rho}) \cdot (\nabla S) - \left(\frac{1}{\hbar^2}\right) \sqrt{\rho} |\nabla S|^2 + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \sqrt{\rho} \nabla^2 S \right] + \sqrt{\rho} V \\ & = i\hbar \left[\frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \sqrt{\rho} \frac{\partial S}{\partial t} \right] \end{aligned} \quad (2.211)$$

至此一切都是精确的。现在让我们假定, 在某种意义上, 可以把 \hbar 看成一个小量。这种近似的精确物理意义现在还不明显, 稍后我们还要回到这一点, 但是让我们假定

$$\hbar |\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2 \quad (2.212)$$

等等。接着我们可以收集式中那些不显含 \hbar 的项, 得到一个 S 满足的非线性偏微分方程:

$$\frac{1}{2m} |\nabla S(\mathbf{x}, t)|^2 + V(\mathbf{x}) + \frac{\partial S(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = 0 \quad (2.213)$$

我们看到该式正是最早于 1836 年写出的经典力学中的哈密顿-雅可比 (Hamilton-Jacobi) 方程, 其中 $S(\mathbf{x}, t)$ 是哈密顿主函数。因此, 在 $\hbar \rightarrow 0$ 的极限下, 经典力学被包含在薛定谔波动力学中就不奇怪了。我们有一个关于波函数相位的半经典解释: \hbar 乘以相位等于哈密顿主函数, 只要 \hbar 可被视为一个小量。

现在让我们来看看一个有着时间依赖关系 $\exp(-iEt/\hbar)$ 的定态。这种时间依赖关系可由这样的事实预料到, 即对于具有一个恒定哈密顿量的经典系统, 哈密顿量主函数是可分离的:

$$S(x, t) = W(x) - Et \quad (2.214)$$

其中 $W(x)$ 称为哈密顿特征函数。随着时间推移, S 为常数的曲面向前推移, 很像波动光学中相位恒定的曲面——波前的推移。经典哈密顿-雅可比理论中的动量由下式给出

$$\mathbf{P}_{\text{经典}} = \nabla S = \nabla W \quad (2.215)$$

它与前面我们已确认 $\nabla S/m$ 为某类速度是一致的。在经典力学中, 速度矢量是粒子轨道的切线, 因此作为结果, 我们通过连续地追踪速度矢量的方向就可以追踪这条轨道。粒子的轨道就像几何光学中的一条光线, 因为追踪轨道的 ∇S 垂直于由常数 S 定义的波前。在这个意义上, 几何光学对波动光学, 就如同经典力学对波动力学。

事后来看, 人们或许感到好奇, 为什么这种光-力学类比在十九世纪没被充分探讨。理由就在于没有任何动机把哈密顿主函数看作某个传播波的相位。直到二十世纪二十年代, 一个物质粒子的波动性才变得清晰。此外, 由于量纲的原因必须参与进来的作用量的基本单位 \hbar 在十九世纪的物理学中也还没有出现。

2.5 薛定谔波动方程的基本解

在这一节, 我们选择了一些例子, 它们诠释了当代物理学, 并且/或者将对本书以后的几章是有用的。

2.5.1 三维自由粒子

$V(\mathbf{x}) = 0$ 的情况有重要意义。这里我们将在三维情况下利用笛卡儿坐标考虑薛定谔方程的解。方程变成

$$\nabla^2 u_E(\mathbf{x}) = -\frac{2mE}{\hbar^2} u_E(\mathbf{x}) \quad (2.216)$$

定义一个矢量 \mathbf{k} , 使

$$\mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{\mathbf{p}^2}{\hbar^2} \quad (2.217)$$

这就是说, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. 利用所谓的“分离变量”技术, 微分方程可以很容易求解. 取

$$u_E(\mathbf{x}) = u_x(x) u_y(y) u_z(z) \quad (2.218)$$

我们得到

$$\left[\frac{1}{u_x} \frac{d^2 u_x}{dx^2} + k_x^2 \right] + \left[\frac{1}{u_y} \frac{d^2 u_y}{dy^2} + k_y^2 \right] + \left[\frac{1}{u_z} \frac{d^2 u_z}{dz^2} + k_z^2 \right] = 0 \quad (2.219)$$

这导致三个单独的平面波解: $u_w(w) = c_w e^{ik_w w}$, 其中 $w = x, y, z$. 注意对于 $\pm k_w$ 值, 人们得到相同的能量 E .

把这些解收集起来并与归一常数组合在一起, 我们得到

$$u_E(\mathbf{x}) = c_x c_y c_z e^{ik_x x + ik_y y + ik_z z} = C e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (2.220)$$

归一常数 C 呈现出通常遇到的困难, 我们一般利用 δ 函数的归一条件来进行处理. 然而, 在很多情况下, 最方便的是利用一个“大箱子”归一化, 在那里整个空间被包含在边长为 L 的立方体中. 我们在箱子上强加周期边界条件, 从而求得一个有限的归一常数 C . 对任何实际的计算, 我们只要在计算末尾让箱子的大小 $L \rightarrow \infty$ 即可.

强加了条件 $u_x(x+L) = u_x(x)$, 我们就有 $k_x L = 2\pi n_x$, 其中 n_x 是整数. 这就是说,

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z \quad (2.221)$$

而归一化的判据变成

$$1 = \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^L dz u_E^*(\mathbf{x}) u_E(\mathbf{x}) = L^3 |C|^2 \quad (2.222)$$

在这种情况下, $C = 1/L^{3/2}$ 而

$$u_E(\mathbf{x}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \quad (2.223)$$

能量的本征值是

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (2.224)$$

我们早先提到过的六重简并对应于 $(\pm n_x, \pm n_y, \pm n_z)$ 的六种组合, 但是实际上简并度可能要大得多, 因为, 在某些情况下, 存在着 n_x, n_y 和 n_z 的各种组合, 它们都能给出相同的 E . 事实上, 在 L 非常大的 (实际的) 极限下, 可能会有大量的 N 的状态, 能量都在 E 到 $E + dE$ 之间. 这个“态密度” dN/dE 对含有自由粒子过程的计算是一个重要的量.

为了计算态密度, 设想 \mathbf{k} 空间中的一个球壳, 其半径为 $|\mathbf{k}| = 2\pi |\mathbf{n}|/L$, 厚度为 $d|\mathbf{k}| = 2\pi d|\mathbf{n}|/L$. 在这个球壳内的所有的态都具有能量 $E = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$. 在这个球壳内态的数目 dN 为 $4\pi \mathbf{n}^2 d|\mathbf{n}|$. 因此

$$\begin{aligned} \frac{dN}{dE} &= \frac{4\pi \mathbf{n}^2 d|\mathbf{n}|}{\hbar^2 |\mathbf{k}| d|\mathbf{k}| / m} = \frac{4\pi}{\hbar^2} m \left(\frac{L}{2\pi} \right)^2 |\mathbf{k}| \frac{L}{2\pi} \\ &= \frac{m^{3/2} E^{1/2} L^3}{\sqrt{2\pi^2} \hbar^3} \end{aligned} \quad (2.225)$$

在一个典型的“真实”计算中, 态密度将被乘以某个含有 $u_E^*(\mathbf{x}) u_E(\mathbf{x})$ 的概率. 在这种情况下, 因子 L^3 将被明显地消掉了, 因此极限 $L \rightarrow \infty$ 就没有意义了. 这种“大箱子”归一化也产生了概率流的答案. 用这个归一化重写式子, 我们有

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{L^{3/2}} \exp \left(\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar} - \frac{iEt}{\hbar} \right) \quad (2.226)$$

在这种情况下我们发现

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \frac{1}{L^3} = \mathbf{v} \rho \quad (2.227)$$

其中 $\rho = 1/L^3$ 的确是概率密度.

2.5.2 简谐振子

我们看到了 $V(x) = m\omega^2 x^2/2$ 情况的一个漂亮的解, 它给出了能量本征值, 本征态和波函数. 这里, 我们演示一种不同的方法求解这个微分方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} u_E(x) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 u_E(x) = E u_E(x) \quad (2.228)$$

我们的方法将引入生成函数的概念, 这是一个在许多微分本征值问题的处理中见到的普遍有用的技术.

首先, 将式子用一个无量纲的位置变量 $y \equiv x/x_0$ 做变量变换, 其中 $x_0 \equiv \sqrt{\hbar/m\omega}$. 再引进一个无量纲的能量变量 $\varepsilon \equiv 2E/\hbar\omega$. 因此, 我们需要求解的微分方程变成

$$\frac{d^2}{dy^2} u(y) + (\varepsilon - y^2) u(y) = 0 \quad (2.229)$$

对于 $y \rightarrow \pm\infty$, 解必须趋向于零; 否则波函数不是可归一的, 因而是非物理的. 微分方程 $w''(y) - y^2 w(y) = 0$ 有解 $w(y) \propto \exp(\pm y^2/2)$, 所以我们不得不选负号. 然后, 通过取

$$u(y) = h(y) e^{-y^2/2} \quad (2.230)$$

“消除”波函数的渐近行为, 其中, 函数 $h(y)$ 满足微分方程

$$\frac{d^2 h}{dy^2} - 2y \frac{dh}{dy} + (\varepsilon - 1) h(y) = 0 \quad (2.231)$$

到此为止, 我们一直遵循简谐振子的传统解法, 它在许多教科书中都可以找到. 典型的做法是, 人们现在会寻找 $h(y)$ 的级数解, 而且发现, 仅当这个级数中断, 一个可归一的解才是可能的. 人们通过强加 $\varepsilon - 1$ 是非负偶整数 $2n, n = 0, 1, 2, \dots$ 的条件迫使它中断. 然后, 使用得到的多项式 $h_n(y)$ 写出这个解. 当然, $\varepsilon - 1 = 2n$ 等价于 $E = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega$, 即量子化关系.

让我们采用一种不同的方法. 考虑由“生成函数” $g(x, t)$ 通过

$$\begin{aligned} g(x, t) &\equiv e^{-t^2 + 2tx} \\ &\equiv \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{t^n}{n!} \end{aligned} \quad (2.232)$$

定义的“厄米 (Hermite) 多项式”³ $H_n(x)$. $H_n(x)$ 的某些性质显而易见. 例如, $H_0(x) = 1$. 再有, 因为

$$g(0, t) = e^{-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} t^{2n} \quad (2.233)$$

显然, 若 n 为奇数, 则 $H_n(0) = 0$, 因为这个级数仅含有 t 的偶次幂. 另一方面, 如果限于偶数值的 n , 则有

$$g(0, t) = e^{-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{(n/2)}}{(n/2)!} t^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{(n/2)}}{(n/2)!} \frac{n!}{n!} t^n \quad (2.234)$$

所以 $H_n(0) = (-1)^{n/2} n! / (n/2)!$. 并且, 因为 $g(-x, t)$ 仅反转 t 的奇次幂项的符号, 故 $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$.

我们可以取 $g(x, t)$ 的微商, 并使用在它们与它们的微商之间的递推关系来构建厄米多项式. 这个技巧就是, 我们可以对生成函数的解析形式或级数形式求微商, 然后比较所得的结果. 例如, 如果我们对解析形式求微商, 则

$$\frac{\partial g}{\partial x} = 2tg(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} 2H_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} 2(n+1) H_n(x) \frac{t^{n+1}}{(n+1)!} \quad (2.235)$$

其中, 在取微商之后, 我们插入了生成函数的级数定义. 另一方面, 我们可以直接取级数形式的微商, 在这种情况下有

$$\frac{\partial g}{\partial x} = \sum_{n=0}^{\infty} H'_n(x) \frac{t^n}{n!} \quad (2.236)$$

比较给出

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x) \quad (2.237)$$

³在数学物理方法的课上我们常称其为厄尔米特多项式

以下是我们构建厄米多项式所需的足够的信息

$$\begin{aligned}
 H_0(x) &= 1 \\
 \text{于是 } H'_1(x) &= 2, & \text{因此 } H_1(x) &= 2x \\
 \text{于是 } H'_2(x) &= 8x, & \text{因此 } H_2(x) &= 4x^2 - 2 \\
 \text{于是 } H'_3(x) &= 24x^2 - 12, & \text{因此 } H_3(x) &= 8x^3 - 12x \\
 & \vdots
 \end{aligned} \tag{2.238}$$

至此为止, 这只是一个奇妙的数学练习. 要看到为什么它与简谐振子有关, 考虑生成函数对 t 的微商. 如果我们从解析形式开始, 则

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g}{\partial t} &= -2tg(x, t) + 2xg(x, t) \\
 &= -\sum_{n=0}^{\infty} 2H_n(x) \frac{t^{n+1}}{n!} + \sum_{n=0}^{\infty} 2xH_n(x) \frac{t^n}{n!} \\
 &= -\sum_{n=0}^{\infty} 2nH_{n-1}(x) \frac{t^n}{n!} + \sum_{n=0}^{\infty} 2xH_n(x) \frac{t^n}{n!}
 \end{aligned} \tag{2.239}$$

或者, 如果我们微商级数形式, 则我们有

$$\frac{\partial g}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty} nH_n(x) \frac{t^{n-1}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_{n+1}(x) \frac{t^n}{n!} \tag{2.240}$$

相比较, 给出递推关系

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x) \tag{2.241}$$

我们把它与厄米多项式组合在一起, 得到

$$\begin{aligned}
 H''_n(x) &= 2n \cdot 2(n-1)H_{n-2}(x) \\
 &= 2n[2xH_{n-1}(x) - H_n(x)] \\
 &= 2xH'_n(x) - 2nH_n(x)
 \end{aligned} \tag{2.242}$$

换句话说, 厄米多项式满足微分方程

$$H''_n(x) - 2xH'_n(x) + 2nH_n(x) = 0 \tag{2.243}$$

其中, n 是个非负整数. 这就是说, 简谐振子的波函数由下式给出

$$u_n(x) = c_n H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) e^{-m\omega x^2/2\hbar} \tag{2.244}$$

至多差一个归一化常数 c_n . 这个常数可以从正交关系

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} = \pi^{1/2} 2^n n! \delta_{mn} \tag{2.245}$$

确定, 该式很容易利用生成函数证明.

生成函数具有实用性, 它远超出我们这里的有限应用范围. 尤其是, 很多源于求解不同位势的薛定谔方程的正交多项式都可以从生成函数推导出来. 我们鼓励有兴趣的读者可从许多优秀的数学物理教科书中任选一本继续研习, 或者去听一位优秀的老师的数学物理方法的课程.

2.6 传播子和费曼路径积分

2.6.1 波动力学中的传播子

在 2.1 节我们指出了, 一旦我们把初始右矢借助一个与 H 对易的可观测量的本征右矢展开, 具有时间无关哈密顿量的最普遍的时间演化问题是如何求解的. 让我们把这种说法翻译成波动力学语言. 我们开始有

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0; t\rangle &= \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] |\alpha, t_0\rangle \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha, t_0\rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right] \end{aligned} \quad (2.246)$$

把上式的两边都左乘 $\langle \mathbf{x}'|$, 我们有

$$\langle \mathbf{x}'|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'|a'\rangle \langle a'|\alpha, t_0\rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right] \quad (2.247)$$

它具有如下的形式

$$\psi(\mathbf{x}', t) = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) u_{a'}(\mathbf{x}') \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right] \quad (2.248)$$

其中

$$u_{a'}(\mathbf{x}') = \langle \mathbf{x}'|a'\rangle \quad (2.249)$$

表示本征值为 a' 的算符 A 的本征函数. 还要注意

$$\langle a'|\alpha, t_0\rangle = \int d^3x' \langle a'|\mathbf{x}'\rangle \langle \mathbf{x}'|\alpha, t_0\rangle \quad (2.250)$$

看得出来, 该式就是波动力学中求初态展开系数的常用规则

$$c_{a'}(t_0) = \int d^3x' u_{a'}^*(\mathbf{x}') \psi(\mathbf{x}', t_0) \quad (2.251)$$

上述这一切应当是简单而且熟悉的. 现在这两个式子一起还可以视为某种积分算符作用于初始波函数上产生终态波函数

$$\psi(\mathbf{x}'', t) = \int d^3x' K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) \psi(\mathbf{x}', t_0) \quad (2.252)$$

这里的这个积分算符的核, 称为波动力学中的**传播子**, 由下式给出

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \sum_{a'} \langle \mathbf{x}''|a'\rangle \langle a'|\mathbf{x}'\rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar}\right] \quad (2.253)$$

在任何已知的问题中传播子只依赖于位势而不依赖于初始波函数. 一旦能量本征函数和它们的本征值给定, 就可以把它构造出来.

显然, 如果已知 $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$, 且初始时给定了 $\psi(\mathbf{x}', t_0)$, 则完全可以预言波函数的时间演化. 在这个意义上, 薛定谔的波动力学是一个完美的因果理论. 只要系统保持不受扰动, 受某个位势约束的波函数的时间演化, 就像经典力学中任何其他的现象一样是“确定性的”. 唯一独特的地方, 如果有的话, 就是当一次测量介入时, 波函数以一个不可控制的方式突然变成被测可观测量的本征函数中的一个.

传播子有两个性质值得在这里指明. 首先, 对于 $t > t_0$, $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$ 满足以 \mathbf{x}'' 和 t 为变量、而 \mathbf{x}' 和 t_0 取固定值的薛定谔时间相关波动方程. 这一点从上式看是很明显的, 因为 $\langle \mathbf{x}''|a'\rangle \exp[-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar]$ 作为与 $\mathcal{U}(t, t_0)|a'\rangle$ 相对应的波函数, 满足波动方程. 第二,

$$\lim_{t \rightarrow t_0} K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \delta^3(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}') \quad (2.254)$$

该式也是显然的. 当 $t \rightarrow t_0$ 时, 由于 $\{|a'\rangle\}$ 的完备性, 式子的求和正好约化为 $\langle \mathbf{x}''|\mathbf{x}'\rangle$.

由于这两个性质, 作为 \mathbf{x}'' 函数的传播子, 就是一个在较早的某时刻 t_0 精确定位于 \mathbf{x}' 的粒子在 t 时刻的波函

数. 的确, 注意到该式还可以写成

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \langle \mathbf{x}'' | \exp \left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar} \right] | \mathbf{x}' \rangle \quad (2.255)$$

其中时间演化算符作用在 $|\mathbf{x}'\rangle$ 上恰好是 $t_0 (< t)$ 时刻曾经精确定位于 \mathbf{x}' 的系统在 t 时刻的态右矢, 或许由此给出的解释更为漂亮. 如果希望求解一个更为普遍的问题, 在那里初态波函数扩展到一个有限的空间区域, 我们必须做的就是用传播子 $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$ 去乘 $\psi(\mathbf{x}', t_0)$, 然后在全空间 (即, 对 \mathbf{x}') 求积分. 以这种方式, 我们可以把来自不同位置 (\mathbf{x}') 的各种贡献加起来. 这种情况与静电学类似, 如果我们希望得到由一个普遍的电荷分布 $\rho(\mathbf{x}')$ 产生的静电势, 我们首先求解点电荷问题, 然后用电荷分布乘上点电荷的解, 再求积分:

$$\phi(\mathbf{x}) = \int d^3x' \frac{\rho(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \quad (2.256)$$

熟悉格林函数理论的读者这时一定已经认出, 这个传播子就是时间相关波动方程的**格林函数**, 满足

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 + V(\mathbf{x}'') - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = -i\hbar \delta^3(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}') \delta(t - t_0) \quad (2.257)$$

其边界条件为

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = 0, \text{ 对于 } t < t_0 \quad (2.258)$$

式子的右边需要 δ 函数 $\delta(t - t_0)$ 是因为在 $t = t_0$ 时 K 的变化不连续.

传播子的特殊的形式当然依赖于粒子所遭受的特殊位势. 作为一个例子, 考虑一个一维自由粒子. 明显与 H 对易的可观测量是动量; $|p'\rangle$ 是算符 p 与 H 的一个共同本征态:

$$p|p'\rangle = p'|p'\rangle \quad H|p'\rangle = \left(\frac{p'^2}{2m} \right) |p'\rangle \quad (2.259)$$

动量本征函数正是前面所讲的变换函数, 它是平面波形式. 把上述各项组合在一起, 我们有

$$K(x'', t; x', t_0) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dp' \exp \left[\frac{ip'(x'' - x')}{\hbar} - \frac{ip'^2(t - t_0)}{2m\hbar} \right] \quad (2.260)$$

通过把指数上的项配成平方可以计算出积分. 这里只列出结果:

$$K(x'', t; x', t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t - t_0)}} \exp \left[\frac{im(x'' - x')^2}{2\hbar(t - t_0)} \right] \quad (2.261)$$

例如, 这个表示式可以用于研究一个高斯型波包作为时间函数如何弥散.

对于简谐振子, 能量本征态的波函数为

$$u_n(x) \exp \left(\frac{-iE_n t}{\hbar} \right) = \left(\frac{1}{2^{n/2} \sqrt{n!}} \right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp \left(\frac{-m\omega x^2}{2\hbar} \right) \times H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left[-i\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) t \right] \quad (2.262)$$

传播子由下式给出

$$K(x'', t; x', t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin[\omega(t - t_0)]}} \exp \left\{ \left[\frac{im\omega}{2\hbar \sin[\omega(t - t_0)]} \right] \times \left\{ (x''^2 + x'^2) \cos[\omega(t - t_0)] - 2x''x' \right\} \right\} \quad (2.263)$$

证明该式的一种方法是利用

$$\left(\frac{1}{\sqrt{1 - \zeta^2}} \right) \exp \left[\frac{-(\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta\zeta)}{(1 - \zeta^2)} \right] = \exp \left[-(\xi^2 + \eta^2) \right] \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\zeta^n}{2^n n!} \right) H_n(\xi) H_n(\eta) \quad (2.264)$$

它可以在关于特殊函数的书中找到. 它还可以利用 a, a^\dagger 算符方法, 或者, 作为另一种选择, 利用稍后将要描述的路径积分方法求得. 注意, 该式是一个 t 的角频率为 ω 的周期函数, 这里 ω 是经典振子频率. 此外, 这还意味着, 一个初始时精确定位于 x' 的粒子在 $2\pi/\omega$ ($4\pi/\omega$, 等等) 之后将确定无疑地返回到原来位置.

从 $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$ 导出的某些空间和时间积分是相当有趣的. 不失普遍性, 在下面我们令 $t_0 = 0$. 我们所考虑

的第一个积分可以通过令 $\mathbf{x}'' = \mathbf{x}'$ 并对全空间求积分得到. 我们有

$$\begin{aligned} G(t) &\equiv \int d^3\mathbf{x}' K(\mathbf{x}', t; \mathbf{x}', 0) \\ &= \int d^3\mathbf{x}' \sum_{a'} |\langle \mathbf{x}' | a' \rangle|^2 \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \\ &= \sum_{a'} \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \end{aligned} \quad (2.265)$$

这个结果是预料得到的: 回顾之前, 我们注意到令 $\mathbf{x}' = \mathbf{x}''$ 和求积分等价于在 \mathbf{x} 表象对时间演化算符求迹. 然而求迹是不依赖于表象的; 利用基 $\{|a'\rangle\}$ 计算可能更容易, 在那里时间演化算符是对角的, 它立即导致上式的最后结果. 现在我们看到上式恰为“对态求和”, 它让人联想到统计力学中的配分函数. 事实上, 如果我们把 t 变量解析延拓, 且取 t 为纯虚数, 利用由

$$\beta = \frac{it}{\hbar} \quad (2.266)$$

定义的正实数 β , 我们可以把其与配分函数联系起来:

$$Z = \sum_{u'} \exp(-\beta E_{u'}) \quad (2.267)$$

由于这个缘故, 在研究量子力学中的传播子时遇到的某些技巧在统计力学中也是有用的.

其次, 让我们考虑 $G(t)$ 的拉普拉斯-傅里叶变换:

$$\begin{aligned} \tilde{G}(E) &\equiv -i \int_0^\infty dt G(t) \exp(iEt/\hbar) / \hbar \\ &= -i \int_0^\infty dt \sum_{a'} \exp(-iE_{a'}t/\hbar) \exp(iEt/\hbar) / \hbar \end{aligned} \quad (2.268)$$

这里的被积函数是一直振荡的. 但是我们可以通过让 E 有一个小的正虚部:

$$E \rightarrow E + i\varepsilon \quad (2.269)$$

使这个积分有意义. 于是, 我们在极限 $\varepsilon \rightarrow 0$ 的情况下求得

$$\tilde{G}(E) = \sum_{a'} \frac{1}{E - E_{a'}} \quad (2.270)$$

现在看到, 完整的能谱被显示为 $\tilde{G}(E)$ 在 E 的复平面上的单极点. 如果我们希望知道一个物理系统的能谱, 只要研究 $\tilde{G}(E)$ 的解析性质就足够了⁴.

2.6.2 传播子作为跃迁振幅

为了更深刻地理解传播子的物理意义, 我们希望把它和之前引入的跃迁振幅概念联系起来. 但首先回忆一下, 波函数作为固定的位置左矢 $\langle \mathbf{x}' |$ 与运动的态右矢 $|\alpha, t_0; t\rangle$ 的内积, 还可以看作是随时间“相反”运动的海森堡绘景的位置左矢 $\langle \mathbf{x}', t |$ 与海森堡绘景中时间固定的态右矢 $|\alpha, t_0\rangle$ 的内积. 同样地, 传播子也可以写为

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) &= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle \exp\left[\frac{-iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar}\right] \\ &= \sum_{a'} \left\langle \mathbf{x}'' \left| \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) \right| a' \right\rangle \left\langle a' \left| \exp\left(\frac{iHt_0}{\hbar}\right) \right| \mathbf{x}' \right\rangle \\ &= \langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle \end{aligned} \quad (2.271)$$

其中 $|\mathbf{x}', t_0\rangle$ 和 $|\mathbf{x}'', t\rangle$ 被理解为海森堡绘景中位置算符的一个本征右矢和一个本征左矢. 在之前我们证明了, 海森堡绘景的符号 $\langle b', t | a' \rangle$, 是一个系统在初始 $t_0 = 0$ 时刻被制备的本征值为 a' 的 A 的一个本征态在稍后的 t 时刻在本征值为 b' 的 B 的本征态上被找到的概率振幅, 我们称它为从态 $|a'\rangle$ 到态 $|b'\rangle$ 的跃迁振幅. 因为 t_0 的选取不存在任何特殊性: 只有时间差 $t - t_0$ 是重要的, 我们可以确认 $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$ 为 t_0 时制备的具有位置本征值 \mathbf{x}' 的粒子将

⁴当然, 我们也会在后面讲以 Lie 群和 Lie 代数的角度来计算能谱.

在稍后的 t 时刻在 \mathbf{x}'' 处被发现的概率振幅。粗略地讲, $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$ 是粒子从时空点 (\mathbf{x}', t_0) 到另一个时空点 (\mathbf{x}'', t) 的振幅, 因此, 术语跃迁振幅对于这个表示式是非常恰当的, 当然, 这个解释与早些时候我们对 $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$ 的解释完全一致。

还有如下的另一种解释 $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$ 的方法。正如早些时候我们强调指出的, $|\mathbf{x}', t_0\rangle$ 是海森堡绘景中 t_0 时刻本征值为 \mathbf{x}' 的位置本征右矢。因为在任何给定时刻, 一个可观测量的海森堡绘景本征右矢都可以选作基右矢, 我们可以把 $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$ 看作联系不同时刻两组基矢的变换函数。因此, 在海森堡绘景中, 时间演化在使基改变的意义上可以看作是一个么正变换, 它把一组形式为 $\{|\mathbf{x}', t_0\rangle\}$ 的基右矢与另一组形式为 $\{|\mathbf{x}'', t\rangle\}$ 的基右矢联系起来。这让我们想起经典物理, 一个经典动力学变量随时间的变化, 比如 $\mathbf{x}(t)$, 被看作是由经典哈密顿量生成的正则 (或相切) 变换。

结果表明, 使用更为对称地处理空间和时间坐标的符号会很方便。为此, 我们用 $\langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle$ 代换 $\langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle$ 。因为在任何给定时刻, 海森堡绘景中的位置右矢构成完备集, 所以, 在我们任何需要的地方插入一个写成

$$\int d^3x'' |\mathbf{x}'', t''\rangle \langle \mathbf{x}'', t''| = \mathbf{1} \quad (2.272)$$

形式的恒等算符是合理的。例如, 考虑从 t' 到 t'' 的时间演化; 通过把时间间隔 (t', t'') 分割成 (t', t'') 和 (t'', t''') 两部分, 我们有

$$\langle \mathbf{x}''', t''' | \mathbf{x}', t' \rangle = \int d^3x'' \langle \mathbf{x}''', t''' | \mathbf{x}'', t'' \rangle \langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle, \quad (t''' > t'' > t') \quad (2.273)$$

我们称上式为跃迁振幅的结合性。显然, 我们可以把时间间隔按我们的希望分成许多更小的子间隔。我们有

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}''', t''' | \mathbf{x}', t' \rangle &= \int d^3x''' \int d^3x'' \langle \mathbf{x}''', t''' | \mathbf{x}''', t'' \rangle \langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle \\ &\times \langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle, \quad (t''' > t'' > t' > t') \end{aligned} \quad (2.274)$$

等等。如果我们以某种方式猜出了无穷小间隔 (在 t' 与 $t'' = t' + dt$ 之间) 的 $\langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle$ 的形式, 我们就应当能够通过把无穷小间隔的那些适当的跃迁振幅以类似于 (2.6.29) 式的方式结合起来, 求得有限时间间隔的振幅 $\langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle$ 。

2.6.3 路径积分作为对路径的求和

我们目前仅限于讨论一维问题。而且, 通过利用诸如 x_N 的符号, 来避免像

$$x'''' \cdots x'''' N \text{ 次} \quad (2.275)$$

这样的笨拙表示式。用这个符号我们考虑对于一个粒子从初始时空点 (x_1, t_1) 到终了时空点 (x_N, t_N) 的跃迁振幅。把 t_1 与 t_N 之间的整个时间间隔分成 $N-1$ 个相等的部分:

$$t_j - t_{j-1} = \Delta t = \frac{(t_N - t_1)}{(N-1)} \quad (2.276)$$

利用结合性, 我们得到⁵

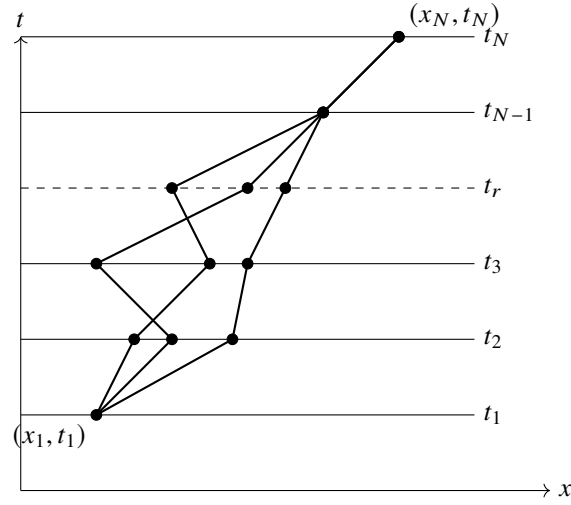
$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \\ &\times \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_{N-2}, t_{N-2} \rangle \cdots \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle \end{aligned} \quad (2.277)$$

为了把上式用图形形象地表示出来, 我们考虑一个时空平面, 如图所示。初始的和终了的时空点分别固定为 (x_1, t_1) 和 (x_N, t_N) 。对于每一个时间段, 比如 t_{n-1} 和 t_n 之间的一段, 我们遵照指令考虑从 (x_{n-1}, t_{n-1}) 到 (x_n, t_n) 的跃迁振幅, 然后我们对 x_2, x_3, \dots, x_{N-1} 求积分。这意味着我们必须对这个时空平面上具有固定端点的所有可能路径求和。

在进一步进行之前, 在这里评述一下在经典力学中这些路径怎么出现是很有用的。假定有一个受到可由位势 $V(x)$ 导出的力场作用的粒子。经典的拉格朗日量记为

$$L_{\text{经典}}(x, \dot{x}) = \frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \quad (2.278)$$

⁵虽然形式比较复杂, 但是当我们再次接触它的时候会学到其简化符号。

图 2.1: 在 xt 平面上的路径

给定了端点 (x_1, t_1) 和 (x_N, t_N) 的拉格朗日量, 在经典力学中并不去考虑任何连接 (x_1, t_1) 和 (x_N, t_N) 的路径. 相反, 存在一条唯一的路径对应于经典粒子的实际运动. 例如, 给定

$$V(x) = mgx, (x_1, t_1) = (h, 0), (x_N, t_N) = (0, \sqrt{\frac{2h}{g}}) \quad (2.279)$$

其中 h 可以代表 Pisa 斜塔的高度, 在 xt 平面上的经典路径只能是

$$x = h - \frac{gt^2}{2} \quad (2.280)$$

更为普遍的是, 按照哈密顿原理, 这条唯一的路径是使经典拉格朗日量的时间积分定义的作用量取最小值的路径

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} dt L_{\text{经典}}(x, \dot{x}) = 0 \quad (2.281)$$

由它可以求得拉格朗日运动方程.

2.6.4 费曼的公式化表述

经典力学与量子力学之间的基本差别现在应当清晰了. 在经典力学中, 在 xt 平面上有一条确定的路径与粒子的运动联系在一起, 而相比之下, 在量子力学中所有可能的路径都不可避免地起作用, 包括那些与经典路径没有任何共同之处的路径. 然而, 在 $\hbar \rightarrow 0$ 的极限下, 我们必须设法能够以光滑的方式重新产生经典力学. 我们如何实现这一点呢?

作为普林斯顿大学的一名年轻的研究生, 费曼试图攻克这一难题. 在寻找可能的线索时, 据说他被 Dirac 书中一段不可思议的评注迷住了, 用我们的记号, 它相当于下列说法

$$\exp \left[i \int_{t_1}^{t_2} \frac{dt L_{\text{经典}}(x, \dot{x})}{\hbar} \right] \text{ 对应于 } \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle \quad (2.282)$$

费曼试图理解这个评注. “对应于”与“等于”或者“正比于”是一回事吗? 这种做法导致他构想出了一种基于路径积分的量子力学时空方法.

在费曼的公式化表述中, 经典作用量起着非常重要的作用. 为了简洁起见, 我们引进一种新的记号:

$$S(n, n-1) \equiv \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt L_{\text{经典}}(x, \dot{x}) \quad (2.283)$$

由于 $L_{\text{经典}}$ 是 x 和 \dot{x} 的函数, 只有在规定了一条沿着它做积分的确定的路径之后, 才能把 $S(n, n-1)$ 确定下来. 因此, 尽管在这个记号中路径相关性并不明显, 人们相信在计算这个积分时, 我们正在考虑一条特殊的路径. 现在想象我们正沿着某条指定的路径. 我们把注意力集中在沿着这条路径的一小分段上, 比如在 (x_{n-1}, t_{n-1}) 和 (x_n, t_n)

之间的一段. 按照狄拉克的做法, 要求我们把 $\exp[iS(n, n-1)/\hbar]$ 与这一小段联系起来. 沿着这条准备跟踪的确定路径, 我们把这类表示式依次相乘得到

$$\prod_{n=2}^N \exp\left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar}\right] = \exp\left[\left(\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{n=2}^N S(n, n-1)\right] = \exp\left[\frac{iS(N, 1)}{\hbar}\right] \quad (2.284)$$

该式还没有给出 $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$; 更确切地讲, 这个方程是我们已考虑的特殊路径对 $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ 的贡献. 我们还必须对 x_2, x_3, \dots, x_{N-1} 求积分. 与此同时, 利用结合性, 我们让 t_{n-1} 和 t_n 之间的时间间隔为无穷小. 于是在某种意义上, $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ 的候选表示式可以写成

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle \sim \sum_{\text{所有路径}} \exp\left[\frac{iS(N, 1)}{\hbar}\right] \quad (2.285)$$

其中求和跑遍一个不可数的无穷大的路径集合⁶!

在给出更精确的公式表示之前, 让我们看一下顺着这条思路的考虑在经典极限下是否有意义. 当 $\hbar \rightarrow 0$ 时, 上式中的指数项振荡得非常剧烈, 因此来自相邻路径的各种贡献间有着相消的倾向. 这是因为, 作为 \hbar 很小的结果, 某个确定路径的 $\exp[iS/\hbar]$ 与稍微不同路径的 $\exp[iS/\hbar]$ 有着非常不同的相位. 因此, 当 \hbar 可以看作一个小量时, 绝大多数路径没有贡献. 但是, 有一个重要的例外.

假定我们考虑一条路径, 它满足

$$\delta S(N, 1) = 0 \quad (2.286)$$

其中 S 的变化是由于在保持端点固定情况下路径的略微形变. 这正是由哈密顿原理所决定的经典路径. 我们把满足上式的 S 表示为 $S_{\text{最小}}$. 现在试着把经典路径做一点小的形变. 得到的 S 在形变的第一级仍然等于 $S_{\text{最小}}$. 这意味着即使 \hbar 很小, 当我们稍微偏离经典路径时, $\exp[iS/\hbar]$ 的相位也不会变得太大. 作为一个结果, 只要我们停留在经典路径附近, 则相邻路径之间的相干相加就有可能. 在 $\hbar \rightarrow 0$ 的极限下, 主要的贡献一定来自包含经典路径的一条非常狭窄的带子 (或者在更高维时的一根管子). 基于狄拉克不可思议的评注, 我们 (或费曼) 的猜测很有道理, 因为在 $\hbar \rightarrow 0$ 的极限下, 经典路径被挑选了出来. 为了更精确地阐述费曼的猜测, 让我们回到 $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$, 其中的时间差 $t_n - t_{n-1}$ 被假定为无穷小. 我们写出

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \left[\frac{1}{w(\Delta t)} \right] \exp\left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar}\right] \quad (2.287)$$

其中的 $S(n, n-1)$ 马上就在 $\Delta t \rightarrow 0$ 的极限下计算. 注意, 我们插入了一个权重因子 $1/w(\Delta t)$, 并假定它只依赖于时间间隔 $t_n - t_{n-1}$, 而不依赖于 $V(x)$. 由量纲分析可清楚地看到需要这样一个因子, 按照我们把位置本征右矢归一化的方法, $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$ 必须具有 $1/(\text{长度})$ 的量纲.

现在我们看一下式中的指数. 我们的任务是计算 $S(n, n-1)$ 在 $\Delta t \rightarrow 0$ 时的极限. 因为时间间隔如此之小, 可以合理地连接 (x_{n-1}, t_{n-1}) 和 (x_n, t_n) 的路径做直线近似:

$$\begin{aligned} S(n, n-1) &= \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \left[\frac{m\dot{x}^2}{2} - V(x) \right] \\ &= \Delta t \left\{ \left(\frac{m}{2} \right) \left[\frac{(x_n - x_{n-1})}{\Delta t} \right]^2 - V\left(\frac{(x_n + x_{n-1})}{2} \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.288)$$

作为一个例子, 我们具体考虑自由粒子的情况, 此时 $V = 0$. 现在方程式变成

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \left[\frac{1}{w(\Delta t)} \right] \exp\left[\frac{im(x_n - x_{n-1})^2}{2\hbar\Delta t}\right] \quad (2.289)$$

我们看到, 这里出现的指数与自由粒子传播子表示式中的指数完全一样. 对于简谐振子, 读者可做出类似的比较. 早些时候我们曾指出过, 在式中出现权重因子 $1/w(\Delta t)$ 被假定不依赖于 $V(x)$, 因此我们也可以用自由粒子求出它. 注意到, 在 δ 函数的意义上, 海森堡绘景中等时位置本征右矢的正交归一性

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle |_{t_n=t_{n-1}} = \delta(x_n - x_{n-1}) \quad (2.290)$$

⁶当然, 这在数学上不太好说的通, 至于如何合理化, 那就变成了数学家的问题了.

我们得到

$$\frac{1}{w(\Delta t)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \quad (2.291)$$

其中我们用到了

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right) = \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \Delta t}{m}} \quad (2.292)$$

和

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right) = \delta(\xi) \quad (2.293)$$

当然, 这个权重因子可以从自由粒子传播子表示式预料得到.

概括起来, 当 $\Delta t \rightarrow 0$ 时, 我们得到

$$\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp\left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar}\right] \quad (2.294)$$

在 $t_N - t_1$ 有限的情况下, 跃迁振幅的最后表示式为

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{(N-1)/2} \\ &\times \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \prod_{n=2}^N \exp\left[\frac{iS(n, n-1)}{\hbar}\right] \end{aligned} \quad (2.295)$$

其中, x_N 和 t_N 是固定的并取了 $N \rightarrow \infty$ 的极限. 通常定义一类新的多维 (事实上, 无穷维) 积分算符

$$\int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}\right)^{(N-1)/2} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \quad (2.296)$$

并把其写成

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int_{x_1}^{x_N} \mathcal{D}[x(t)] \exp\left[i \int_{t_1}^{t_N} dt \frac{L_{\text{经典}}(x, \dot{x})}{\hbar}\right] \quad (2.297)$$

这个表达式称为**费曼路径积分**. 它作为对所有可能的路径求和的意义应当从式中清晰地看到.

我们求得上式的步骤并不意味着是一种推导. 相反, 我们 (遵循费曼) 尝试了一种基于路径概念的量子力学新形式, 它是以狄拉克不可思议的评注为动机的. 我们从常规量子力学形式那里借用的仅有的一些思想是: (1) 叠加原理 (用在各种可选路径贡献的求和); (2) 跃迁振幅结合性; (3) 在 $\hbar \rightarrow 0$ 极限时的经典对应.

尽管我们对于自由粒子情况求得的结果与常规理论的结果相同, 但从迄今为止我们已经做的一切明显可见: 费曼形式完全等价于薛定谔波动方程. 我们通过证明费曼的 $\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle$ 表达式确实满足以 x_N, t_N 为变量的薛定谔时间相关波动方程, 就如同之前所定义的传播子所做的那样, 来结束这一节.

我们由

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \int dx_{N-1} \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1 \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx_{N-1} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp\left[\left(\frac{im}{2\hbar}\right) \frac{(x_N - x_{N-1})^2}{\Delta t} - \frac{iV\Delta t}{\hbar}\right] \\ &\times \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_1, t_1 \rangle \end{aligned} \quad (2.298)$$

开始, 其中我们假定了 $t_N - t_{N-1}$ 是无穷小. 引入

$$\xi = x_N - x_{N-1} \quad (2.299)$$

且设 $x_N \rightarrow x$ 和 $t_N \rightarrow t + \Delta t$, 我们得到

$$\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t} - \frac{iV\Delta t}{\hbar}\right) \langle x - \xi, t | x_1, t_1 \rangle \quad (2.300)$$

正如显而易见的, 在 $\Delta t \rightarrow 0$ 的极限下, 对该积分的主要贡献来自 $\xi \simeq 0$ 的区域. 因此可以合理地使用 ξ 的幂来展

开 $\langle x - \xi, t | x_1, t_1 \rangle$. 我们还用 Δt 的幂来展开 $\langle x, t + \Delta t | x_1, t_1 \rangle$ 和 $\exp(-iV\Delta t/\hbar)$, 于是

$$\begin{aligned} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right) \left(1 - \frac{iV\Delta t}{\hbar} + \dots\right) \\ &\times \left[\langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \left(\frac{\xi^2}{2}\right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + \dots \right] \end{aligned} \quad (2.301)$$

其中我们丢掉了 ξ 的线性项, 因为当对 ξ 求积分时它为零. 由于 (2.6.45a) 式, 上式左边的 $\langle x, t | x_1, t_1 \rangle$ 项正好与右边的领头项相对应. 把 Δt 的一级项收集在一起, 我们得到

$$\Delta t \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle = \left(\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}}\right) (\sqrt{2\pi}) \left(\frac{i\hbar\Delta t}{m}\right)^{3/2} \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle - \left(\frac{i}{\hbar}\right) \Delta t V \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \quad (2.302)$$

其中我们用到了

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \xi^2 \exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right) = \sqrt{2\pi} \left(\frac{i\hbar\Delta t}{m}\right)^{3/2} \quad (2.303)$$

就这样, 我们看到 $\langle x, t | x_1, t_1 \rangle$ 满足薛定谔时间相关波动方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \langle x, t | x_1, t_1 \rangle + V \langle x, t | x_1, t_1 \rangle \quad (2.304)$$

由此我们可以得到结论: 按照费曼的规定构建的 $\langle x, t | x_1, t_1 \rangle$ 和薛定谔波动力学中的传播子是相同的.

费曼基于路径积分的时空方法对于处理非相对论量子力学的实际问题并不太方便. 甚至对于简谐振子, 要明显地求出有关的路径积分也是相当麻烦的. 然而, 他的做法从概念观点上看是十分令人满意的. 通过把一组必然的合乎情理的要求强加到一个物理理论中, 我们必然被引导到一种等价于通常量子力学公式表示的形式.

2.7 位势和规范变换

2.7.1 恒定位势

在经典力学中众所周知位势的零点是没有物理意义的. 动力学变量随时间的变化, 诸如 $\mathbf{x}(t)$ 和 $\mathbf{L}(t)$, 不依赖于我们使用的是 $V(\mathbf{x})$ 还是 $V(\mathbf{x}) + V_0$, 其中的 V_0 对空间和时间都是常数. 在牛顿第二定律中出现的力只依赖于位势的梯度, 一个可加的常数显然是没有关系的. 在量子力学中, 类似的情况是什么呢?

我们来看一下受位势约束的薛定谔绘景态右矢的时间演化. 令 $|\alpha, t_0; t\rangle$ 是 $V(\mathbf{x})$ 存在时的一个态右矢, 并且令 $|\alpha, t_0; t\rangle$ 是适合于

$$\tilde{V}(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x}) + V_0 \quad (2.305)$$

的相应的态右矢. 确切地说, 让我们约定, 初始条件是在 $t = t_0$ 时, 这两个右矢都与 $|\alpha\rangle$ 一致. 如果它们代表着同样的物理情况, 这总可以通过适当地选择相位实现. 回忆一下, t 时刻的态右矢可以通过把时间演化算符 $\mathcal{U}(t, t_0)$ 作用在 t_0 时刻的态右矢上求得, 于是我们得到

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0; t\rangle &= \exp\left[-i\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) + V_0\right)\frac{(t - t_0)}{\hbar}\right] |\alpha\rangle \\ &= \exp\left[\frac{-iV_0(t - t_0)}{\hbar}\right] |\alpha, t_0; t\rangle \end{aligned} \quad (2.306)$$

换句话说, 在 \tilde{V} 的影响下计算的右矢, 其时间依赖关系仅差一个相因子 $\exp[-iV_0(t - t_0)/\hbar]$. 对于定态, 这意味着, 如果用 $V(\mathbf{x})$ 算得的时间依赖关系为 $\exp[-iE(t - t_0)/\hbar]$, 则用 $V(\mathbf{x}) + V_0$ 算得的相应的时间依赖关系为 $\exp[-i(E + V_0)(t - t_0)/\hbar]$. 换句话说, 用 \tilde{V} 代替 V 只意味着下列改变:

$$E \rightarrow E + V_0 \quad (2.307)$$

这一点, 或许读者马上就能猜到. 可观测量受到的影响, 比如期望 $\langle \mathbf{x} \rangle$ 和 $\langle \mathbf{S} \rangle$ 的时间演化, 总是依赖于能量差; 不管我们是用 $V(\mathbf{x})$ 还是用 $V(\mathbf{x}) + V_0$, 表征着期望的正弦时间依赖关系的波尔频率都是一样的. 一般来说, 倘若世界上每一个态右矢都乘上一个共同的因子 $\exp[-iV_0(t - t_0)/\hbar]$, 则可观测量的期望可能没有任何差别.

虽然看上去这可能是很平庸的, 但这里我们看到了称之为规范变换的一类变换的第一个例子. 在我们约定中

势能零点能的变化

$$V(\mathbf{x}) \rightarrow V(\mathbf{x}) + V_0 \quad (2.308)$$

一定伴随着态右矢的一个变化

$$|\alpha, t_0; t\rangle \rightarrow \exp\left[\frac{-iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right] |\alpha, t_0; t\rangle \quad (2.309)$$

当然, 这个变化意味着波函数有下列改变:

$$\psi(\mathbf{x}', t) \rightarrow \exp\left[\frac{-iV_0(t-t_0)}{\hbar}\right] \psi(\mathbf{x}', t) \quad (2.310)$$

接下来, 我们考虑, V_0 是空间均匀但随时间变化的. 我们很容易看到与其类似的表达式

$$|\alpha, t_0; t\rangle \rightarrow \exp\left[-i \int_{t_0}^t dt' \frac{V_0(t')}{\hbar}\right] |\alpha, t_0; t\rangle \quad (2.311)$$

物理上, 用 $V(\mathbf{x}) + V_0$ 代替 $V(\mathbf{x})$ 只不过意味着, 在每个瞬间我们都选择了一个新的能量标度零点⁷.

2.7.2 电磁学中的规范变换

现在让我们回到电磁学中出现的势. 我们考虑从时间无关的标量势和矢量势, $\phi(\mathbf{x})$ 和 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$, 导出的电场与磁场:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.312)$$

一个电荷为 e (对于电子 $e < 0$) 受到电磁场作用的粒子, 由经典物理给出的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 + e\phi \quad (2.313)$$

在量子力学中 ϕ 和 \mathbf{A} 被认为是带电粒子的位置算符 \mathbf{x} 的函数. 因为 \mathbf{p} 和 \mathbf{A} 不对易, 在解释时需要小心点. 最安全的做法是写成

$$\left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 \rightarrow p^2 - \left(\frac{e}{c} \right) (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \mathbf{A}^2 \quad (2.314)$$

在这种形式下, 哈密顿量显然是厄米的.

为了研究一个受到 ϕ 和 \mathbf{A} 作用的带电粒子的动力学, 让我们首先在海森堡绘景中操作. 我们可以直接计算 \mathbf{x} 的时间微商

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{[x_i, H]}{i\hbar} = \frac{(p_i - eA_i/c)}{m} \quad (2.315)$$

它显示本书中定义为平移生成元的算符 \mathbf{p} 与 $m d\mathbf{x}/dt$ 不同. \mathbf{p} 经常称为正则动量, 以示与运动学 (或力学) 动量的区别, 后者用 Π 标记:

$$\Pi \equiv m \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \quad (2.316)$$

尽管对于正则动量我们有

$$[p_i, p_j] = 0 \quad (2.317)$$

力学动量的类似对易关系不为零. 相反, 我们有

$$[\Pi_i, \Pi_j] = \left(\frac{ihe}{c} \right) \varepsilon_{ijk} B_k \quad (2.318)$$

这一点, 读者可以很容易证明. 把哈密顿量改写为

$$H = \frac{\Pi^2}{2m} + e\phi \quad (2.319)$$

并利用基本对易关系, 我们可以导出量子力学版本的洛伦兹 (Lorentz) 力, 即

$$m \frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} = \frac{d\Pi}{dt} = e \left[\mathbf{E} + \frac{1}{2c} \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \frac{d\mathbf{x}}{dt} \right) \right] \quad (2.320)$$

⁷ 尽管势能绝对标度的选取是任意的, 但势能差具有非平庸的物理意义.

这就是海森堡绘景中, 当 \mathbf{E} 和 \mathbf{B} 存在时, 带电粒子的埃伦费斯特定理.

现在, 我们研究具有 ϕ 和 \mathbf{A} 的薛定谔波动方程. 我们的第一个任务是在 $\langle \mathbf{x}' |$ 和 $|\alpha, t_0; t\rangle$ 之间夹入 H . 唯一需要加以小心的项是

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{x}' \left| \left[\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{c} \right]^2 \right| \alpha, t_0; t \right\rangle &= \left[-i\hbar\nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \left\langle \mathbf{x}' \left| \left[\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x})}{c} \right] \right| \alpha, t_0; t \right\rangle \\ &= \left[-i\hbar\nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \cdot \left[-i\hbar\nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \end{aligned} \quad (2.321)$$

需要强调的是, 在最后一行中的第一个 ∇' 既要是对 $\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle$ 微商, 也要对 $\mathbf{A}(\mathbf{x}')$ 微商. 把这一切组合起来, 我们有

$$\frac{1}{2m} \left[-i\hbar\nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \cdot \left[-i\hbar\nabla' - \frac{e\mathbf{A}(\mathbf{x}')}{c} \right] \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle + e\phi(\mathbf{x}') \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle \quad (2.322)$$

从这个表达式我们很容易得到连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla' \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (2.323)$$

在那里, 像以前一样 ρ 是 $|\psi|^2$, $\langle \mathbf{x}' | \alpha, t_0; t \rangle$ 是 ψ , 而对概率流 \mathbf{j} 我们有

$$\mathbf{j} = \left(\frac{\hbar}{m} \right) \text{Im}(\psi^* \nabla' \psi) - \left(\frac{e}{mc} \right) \mathbf{A} |\psi|^2 \quad (2.324)$$

它正是我们由代换

$$\nabla' \rightarrow \nabla' - \left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \mathbf{A} \quad (2.325)$$

所预期的. 若把波函数写成 $\sqrt{\rho} \exp(iS/\hbar)$, 我们得到 \mathbf{j} 的一个替代形式, 即

$$\mathbf{j} = \left(\frac{\rho}{m} \right) \left(\nabla S - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \quad (2.326)$$

相比较, 我们将发现, 这种形式在讨论超导、通量量子化等问题时是方便的. 我们还注意到, 除去 $1/m$ 外, \mathbf{j} 的空间积分就是运动学动量 (而不是正则动量) 的期望

$$\int d^3x' \mathbf{j} = \frac{\langle \mathbf{p} - e\mathbf{A}/c \rangle}{m} = \langle \Pi \rangle / m \quad (2.327)$$

现在我们是讨论电磁学中规范变换问题的时候了. 首先, 考虑

$$\phi \rightarrow \phi + \lambda, \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} \quad (2.328)$$

其中的 λ 是个常数, 这就是说, 不依赖于 \mathbf{x} 和 t . \mathbf{E} 和 \mathbf{B} 二者显然都保持不变. 这个变换只意味着能量标度零点的变化, 它是在本节开始时用过的一种可能性; 我们只不过用 $e\phi$ 代替了 V . 我们已经讨论过了态右矢所需要的伴随变化, 因此, 我们不再赘述这个变换.

更有趣的是变换

$$\phi \rightarrow \phi, \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad (2.329)$$

其中 Λ 是 \mathbf{x} 的函数. 在上面的变换下, 静电磁场 \mathbf{E} 和 \mathbf{B} 是不变的. 都是

$$\phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad (2.330)$$

的特殊情况, 它们保持由

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.331)$$

给出的 \mathbf{E} 和 \mathbf{B} 不变, 但下面我们不考虑时间相关的场和势. 在本节的余下部分, 术语规范变换指的都是这类变换.

在经典物理中, 诸如带电粒子轨道这样的可观测量效应不依赖所使用的规范——即我们碰巧采用的特别选择的 Λ . 考虑一个带电粒子处于沿 z 方向的均匀磁场中

$$\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}} \quad (2.332)$$

这个磁场可以从

$$A_x = \frac{-By}{2}, \quad A_y = \frac{Bx}{2}, \quad A_z = 0 \quad (2.333)$$

推导出来. 或者也可以从

$$A_x = -By, A_y = 0, A_z = 0 \quad (2.334)$$

推导出来. 第二种形式是通过

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} - \nabla \left(\frac{Bxy}{2} \right) \quad (2.335)$$

从第一种形式中求得的, 它的确是规范变换的形式. 不管我们可能会用哪个 \mathbf{A} , 具有一组给定初始条件的带电粒子的轨道都是相同的, 它就是一条螺旋线——投影到 xy 平面时的一个匀速圆周运动, 同时叠加上沿 z 方向的一个匀速直线运动. 然而, 如果我们看一下 p_x 和 p_y , 结果则是很不一样的. 首先, 当使用第二种形式时, p_x 是个运动常数, 而当使用第一种形式时它就不再是运动常数.

回顾哈密顿运动方程:

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x}, \frac{dp_y}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial y}, \dots \quad (2.336)$$

一般说来, 正则动量 \mathbf{p} 不是一个规范不变量, 即使我们针对的是同一个物理情况, 它的数值仍依赖于所采用的特殊规范. 相比之下, 跟踪粒子轨迹的运动学动量 Π , 或 $m \mathbf{dx}/dt$, 是一个规范不变量, 这一点可以明确证明. 因为 \mathbf{p} 和 $m \mathbf{dx}/dt$ 相关联, \mathbf{p} 必须改变以补偿 \mathbf{A} 的变化.

现在我们回到量子力学. 我们相信, 在规范变换下要求量子力学中的期望具有类似于相应的经典量的行为方式是合理的, 所以在规范变换下, 预期 $\langle \mathbf{x} \rangle$ 和 $\langle \Pi \rangle$ 不变, 而 $\langle \mathbf{p} \rangle$ 会变化.

让我们用 $|\alpha\rangle$ 表示 \mathbf{A} 存在时的态右矢; 当用

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad (2.337)$$

代替 \mathbf{A} 时, 同样物理情况下的态右矢用 $|\tilde{\alpha}\rangle$ 表示. 这里的 Λ , 和 \mathbf{A} 一样, 是位置算符 \mathbf{x} 的函数. 我们的基本要求是

$$\langle \alpha | \mathbf{x} | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \mathbf{x} | \tilde{\alpha} \rangle \quad (2.338)$$

和

$$\langle \alpha | \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \left(\mathbf{p} - \frac{e\tilde{\mathbf{A}}}{c} \right) | \tilde{\alpha} \rangle \quad (2.339)$$

此外, 像往常一样, 我们要求态右矢的模保持不变:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle \quad (2.340)$$

我们必须构建一个把 $|\tilde{\alpha}\rangle$ 和 $|\alpha\rangle$ 如下联系起来的算符 \mathcal{G}

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \mathcal{G} |\alpha\rangle \quad (2.341)$$

倘若

$$\mathcal{G}^\dagger \mathbf{x} \mathcal{G} = \mathbf{x} \quad (2.342)$$

和

$$\mathcal{G}^\dagger \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} - \frac{e\nabla\Lambda}{c} \right) \mathcal{G} = \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \quad (2.343)$$

则不变性都能得到保障. 我们断言

$$\mathcal{G} = \exp \left[\frac{ie\Lambda(\mathbf{x})}{\hbar c} \right] \quad (2.344)$$

能满足这个要求. \mathcal{G} 是幺正的且 \mathbf{x} 与 \mathbf{x} 的任意函数对易, 则前面的式子显然满足. 至于最后一个式子, 只需指出

$$\begin{aligned} \exp \left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c} \right) \mathbf{p} \exp \left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c} \right) &= \exp \left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c} \right) \left[\mathbf{p}, \exp \left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c} \right) \right] + \mathbf{p} \\ &= -\exp \left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c} \right) i\hbar \nabla \left[\exp \left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c} \right) \right] + \mathbf{p} \\ &= \mathbf{p} + \frac{e\nabla\Lambda}{c} \end{aligned} \quad (2.345)$$

规范变换下的量子力学不变性还可以通过直接观察薛定谔方程来展示. 设 $|\alpha, t_0; t\rangle$ 是 \mathbf{A} 存在时薛定谔方程的一

个解:

$$\left[\frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m} + e\phi \right] |\alpha, t_0; t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle \quad (2.346)$$

在 $\tilde{\mathbf{A}}$ 存在时, 相应的解必须满足

$$\left[\frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c - e\nabla\Lambda/c)^2}{2m} + e\phi \right] |\alpha, \tilde{t}_0; t\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, \tilde{t}_0; t\rangle \quad (2.347)$$

我们看到, 如果 = 把新的右矢取为

$$|\alpha, \tilde{t}_0; t\rangle = \exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right) |\alpha, t_0; t\rangle \quad (2.348)$$

则上面新的薛定谔方程将得到满足; 我们必须注意的是

$$\exp\left(\frac{-ie\Lambda}{\hbar c}\right) \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} - \frac{e\nabla\Lambda}{c} \right)^2 \exp\left(\frac{ie\Lambda}{\hbar c}\right) = \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 \quad (2.349)$$

相应的波函数通过

$$\psi(\mathbf{x}', t) = \exp\left[\frac{ie\Lambda(\mathbf{x}')}{\hbar c}\right] \psi(\mathbf{x}', t) \quad (2.350)$$

关联起来, 其中的 $\Lambda(\mathbf{x}')$ 现在是位置矢量本征值 \mathbf{x}' 的一个实函数. 当然, 通过直接代入以 $\mathbf{A} + \nabla\Lambda$ 代替 \mathbf{A} 的薛定谔波动方程, 也可以证明这一点. 从 ρ 和 S 的角度来讲, 我们看到, ρ 是不变的, 而 S 被修改为

$$S \rightarrow S + \frac{e\Lambda}{c} \quad (2.351)$$

这一点是非常合理的, 因为我们发现所给出的概率流是规范不变的.

总之, 当对同样的物理情况使用不同规范下的矢量势时, 相应的态右矢 (或波函数) 必定是不同的. 然而, 仅仅需要简单的改变; 只要把老的右矢 (或老的波函数) 乘以 $\exp[ie\Lambda(\mathbf{x})/\hbar c]$ ($\exp[ie\Lambda(\mathbf{x}')/\hbar c]$), 就可以从由 \mathbf{A} 确定的规范变到另一个由 $\mathbf{A} + \nabla\Lambda$ 确定的规范. 在其期望依赖于特殊规范的这样一种意义上, 定义为平移生成元的正则动量显然是规范相关的, 而运动学动量和概率流都是规范不变的.

考虑在 \mathbf{x} 处的某个位置的函数 $F(\mathbf{x})$. 在相邻的点我们显然有

$$F(\mathbf{x} + d\mathbf{x}) \simeq F(\mathbf{x}) + (\nabla F) \cdot d\mathbf{x} \quad (2.352)$$

但是假定当我们从 \mathbf{x} 到 $\mathbf{x} + d\mathbf{x}$ 时做了一个标度变化如下:

$$1|_{\text{在 } \mathbf{x} \text{ 处}} \rightarrow \left[1 + \sum (\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x} \right] |_{\text{在 } \mathbf{x} + d\mathbf{x} \text{ 处}} \quad (2.353)$$

那么, 我们必须重新标度 $F(\mathbf{x})$

$$F(\mathbf{x} + d\mathbf{x})|_{\text{重新标度后}} \simeq F(\mathbf{x}) + \left[\left(\nabla + \sum \right) F \right] \cdot d\mathbf{x} \quad (2.354)$$

组合 $\nabla + \sum$ 类似于在之前见到过的规范不变组合

$$\nabla - \left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \mathbf{A} \quad (2.355)$$

除不存在 i 之外. 我们坚持了术语规范不变性, 尽管其的量子力学类比

$$1|_{\text{在 } \mathbf{x} \text{ 处}} \rightarrow \left[1 - \left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \right] |_{\text{在 } \mathbf{x} + d\mathbf{x} \text{ 处}} \quad (2.356)$$

将实际对应于“相位改变”而不是“标度改变”.

2.7.3 阿哈罗诺夫-玻姆效应

在量子力学中矢量势的使用有很多深远影响, 我们现在准备讨论其中的一些. 我们从一个看似平淡无奇的问题开始.

考虑一个中空的圆柱形壳. 我们假定一个电荷为 e 的粒子能够完全地被禁闭在这个刚性壁壳的内部. 要求波函数在内壁 ($\rho = \rho_a$) 和外壁 ($\rho = \rho_b$) 上为零, 在顶部和底部也为零. 这是一个数学物理中求解能量本征值的简单的边值问题.

让我们现在考虑一个修改过的装置, 在那里一个圆柱壳把一个均匀磁场包围了起来, 如图 2.11b 所示. 特别是, 你可以想象一个非常长的螺线管插到中间的孔中, 以致没有任何磁场泄漏到 $\rho \geq \rho_a$ 的区域. 波函数的边界条件取为与以前的一样; 并且假定壁是刚性的. 凭直觉, 我们可以猜测到能谱不会改变, 因为 $\mathbf{B} \neq 0$ 的区域完全不可能达到被禁闭在壳内的带电粒子. 然而, 量子力学告诉我们这个猜测不对.

尽管磁场在内部区域为零, 那里的矢量势不为零. 利用斯托克斯 (Stokes) 定理, 我们可以推知要产生磁场 $\mathbf{B} (= B\hat{\mathbf{z}})$ 所需的矢量势为

$$\mathbf{A} = \left(\frac{B\rho_a^2}{2\rho} \right) \hat{\phi} \quad (2.357)$$

其中的 $\hat{\phi}$ 是沿方位角增加方向的单位矢量. 在试图求解薛定谔方程以找到这个新问题的能量本征值时, 我们仅需要用 $\nabla - (ie/\hbar c) \mathbf{A}$ 代替梯度 ∇ ; 我们可以在柱坐标系中对 ϕ 的偏微商做如下代换来实现这一点:

$$\frac{\partial}{\partial \phi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \phi} - \left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \frac{B\rho_a^2}{2} \quad (2.358)$$

这里要回顾柱坐标系中梯度的表示式:

$$\nabla = \hat{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} + \hat{\phi} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (2.359)$$

图 2.11 空心圆柱壳 (a) 没有磁场, (b) 有一个均匀磁场.

(2.7.63) 式的代换导致了能谱可观测的变化, 这一点读者可以明显地证明. 这是非常引人瞩目的, 因为粒子从来没有“接触”到磁场; 在这个问题中粒子受到的洛伦兹力恒为零, 然而能级却取决于粒子不可达到的孔区内的磁场是否有限.

我们刚刚处理的这个问题是通常被称作阿哈罗诺夫-玻姆效应* 的束缚态版本. 现在我们着手讨论阿哈罗诺夫-玻姆效应自身的原始形式. 考虑一个电荷为 e 的粒子, 经过一个非常长的不可穿透的圆柱体之上或之下, 如图 2.12 所示. 圆柱体内部是一个平行于圆柱体轴的磁场, 而该轴垂直于图 2.12 的平面. 所以粒子的上路径和下路径包围了磁通量. 我们的目标是研究在相互作用区 \mathbf{B} 找到粒子的概率如何依赖于磁通量.

图 2.12 阿哈罗诺夫-玻姆效应

尽管可以通过比较 \mathbf{B} 存在和不存在时薛定谔方程的解来处理这个问题, 为了便于教学, 我们宁可采用费曼路径积分方法. 设 \mathbf{x}_1 和 \mathbf{x}_N 分别是源区 \mathbf{A} 和干涉区 \mathbf{B} 中的两个有代表性的点. 从经典力学得知, 存在磁场时的拉格朗日量可从不存在磁场时的拉格朗日量 (用 $L_{\text{经典}}^{(0)}$ 表示) 得到

$$L_{\text{经典}}^{(0)} = \frac{m}{2} \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right)^2 \rightarrow L_{\text{经典}}^{(0)} + \frac{e}{c} \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \mathbf{A} \quad (2.360)$$

然后, 对于从 $(\mathbf{x}_{n-1}, t_{n-1})$ 到 (\mathbf{x}_n, t_n) 的某段确定的路径单元, 作用量相应的改变由下式给出

$$S^{(0)}(n, n-1) \rightarrow S^{(0)}(n, n-1) + \frac{e}{c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right) \cdot \mathbf{A} \quad (2.361)$$

而最后的这个积分可以写成

$$\frac{e}{c} \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right) \cdot \mathbf{A} = \frac{e}{c} \int_{\mathbf{x}_{n-1}}^{\mathbf{x}_n} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \quad (2.362)$$

其中的 $d\mathbf{s}$ 是沿着这段路径单元的微分线元, 因此当我们考虑从 \mathbf{x}_1 到 \mathbf{x}_N 的全部贡献时, 有下列的改变

$$\prod \exp \left[\frac{iS^{(0)}(n, n-1)}{\hbar} \right] \rightarrow \left\{ \prod \exp \left[\frac{iS^{(0)}(n, n-1)}{\hbar} \right] \right\} \exp \left(\frac{ie}{\hbar c} \int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right) \quad (2.363)$$

所有这一切只是对于一条特殊的路径, 比如从圆柱体上部通过的路径. 我们还必须对所有的可能路径求和, 这似乎是一个令人生畏的任务. 幸运的是, 我们从电磁学理论知道, $\int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}$ 的线积分与路径无关. 即, 只要一对不同的路径形成的圈不包围磁通量, 它就仅依赖于两个端点. 作为结果, 由于 $\mathbf{A} \neq 0$ 所有从圆柱体上部通过的路径的贡献都由一个共同的相位因子给出; 类似地, 来自所有从圆柱体下部通过的路径的贡献都将乘以另一个共同的相位因

子. 用路径积分符号, 对于整个跃迁振幅我们有

$$\begin{aligned} & \int_E [\mathbf{x}(t)] \exp \left[\frac{iS^{(0)}(N, 1)}{\hbar} \right] + \int_F [\mathbf{x}(t)] \exp \left[\frac{iS^{(0)}(N, 1)}{\hbar} \right] \\ & \rightarrow \int_E [\mathbf{x}(t)] \exp \left[\frac{iS^{(0)}(N, 1)}{\hbar} \right] \left\{ \exp \left[\left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right]_E \right\} \\ & + \int_F [\mathbf{x}(t)] \exp \left[\frac{iS^{(0)}(N, 1)}{\hbar} \right] \left\{ \exp \left[\left(\frac{ie}{\hbar c} \right) \int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right]_F \right\} \end{aligned} \quad (2.364)$$

在干涉区 **B** 找到粒子的概率依赖于整个跃迁振幅模的平方, 因此依赖于来自上部和下部路径贡献的相位差. 由于 **B** 的存在, 这个相位差正好是

$$\left[\left(\frac{e}{\hbar c} \right) \int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right]_E - \left[\left(\frac{e}{\hbar c} \right) \int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right]_F = \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \Phi_B \quad (2.365)$$

其中的 Φ_B 代表不可穿透的圆柱体内部磁通量. 这意味着, 当我们改变磁场强度时, 在 **B** 区观测粒子的概率中存在一个正弦分量, 其周期用磁通量的基本单位给出, 即

$$\frac{2\pi\hbar c}{|e|} = 4.135 \times 10^{-7} \text{ 高斯} \cdot \text{厘米}^2 \quad (2.366)$$

我们强调这里讨论的干涉效应是纯粹量子力学的. 经典上, 带电粒子的运动只由牛顿第二定律再加上洛伦兹力定律确定. 这里, 像前面的束缚态问题一样, 粒子绝不可能进入到 **B** 为有限的区域; 在粒子波函数有限的所有区域内洛伦兹力恒为零. 然而有一组引人瞩目的干涉条纹, 它依赖于在不可穿透的圆柱体内部存在还是不存在磁场. 这一点曾导致一些人得出结论: 在量子力学中与其说 **B** 倒不如说 **A** 是基本的. 然而, 值得注意的是, 这两个例子中的观测效应都仅仅依赖于 Φ_B , 它可以直接用 **B** 来表示. 实验家们利用一根称为触须的铁的磁化细丝, 实现了证明阿哈罗诺夫-玻姆效应的实验.

第二章 练习

1. 1

2.1 考虑正文中讨论的自旋进动问题. 它还可以在海森堡绘景中求解. 利用哈密顿量

$$H = - \left(\frac{eB}{mc} \right) S_z = \omega S_z,$$

写出时间相关算符 $S_x(t)$, $S_y(t)$ 和 $S_z(t)$ 的海森堡运动方程. 求解它们以得到作为时间函数的 $S_{x,y,z}$.

Thus C is a union of blocks of $A_{pA}\mathcal{H}$.

$$H = H_{11} |1\rangle \langle 1| + H_{22} |2\rangle \langle 2| + H_{12} |1\rangle \langle 2|.$$

现在什么原理被破坏了? 通过尝试利用这类不合法的哈密顿量求解最一般的问题 (为了简单, 你可以假定 $H_{11} = H_{22} = 0$), 阐明你的观点.

2.3 一个电子受到一个时间无关的、强度为 B 的沿正 z 方向的均匀磁场的作用. 在 $t = 0$ 时已知电子处在 $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 的本征态上, 本征值为 $\hbar/2$, 其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 是一个单位矢量, 位于 xz 平面上, 与 z 轴夹 β 角.

(a) 求找到电子处在 $s_x = \hbar/2$ 态上作为时间函数的概率.

(b) 求作为时间函数的 S_r 的期望.

(c) 为让你自己放心, 在 (i) $\beta \rightarrow 0$ 和 (ii) $\beta \rightarrow \pi/2$ 的极端情况下证明你的答案是有意义的.

2.4 导出中微子振荡概率 (2.1.65) 式, 并与图 2.2 中的数据一起使用它估算 $\Delta m^2 c^4$ (以 eV^2 为单位) 和 θ 的值.

2.5 设 $x(t)$ 是一维自由粒子在海森堡绘景中的坐标算符. 求

$$[x(t), x(0)].$$

2.6 考虑一个一维粒子, 其哈密顿量由下式给出

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

通过计算 $[[H, x], x]$, 证明

$$\sum_{a'} |\langle a'' | x | a' \rangle|^2 (E_{a'} - E_{a''}) = \frac{\hbar^2}{2m},$$

其中 $|a'\rangle$ 是一个能量本征态, 本征值为 $E_{a'}$.

2.7 考虑一个三维粒子, 其哈密顿量由下式给出

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

通过计算 $[\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}, H]$, 求

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{x} \cdot \mathbf{p} \rangle = \left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right\rangle - \langle \mathbf{x} \cdot \nabla V \rangle.$$

为了使我们能把上面的关系式等同于维里定理的量子力学类似物, 左边等于零是必要的. 这会在什么条件下发生?

2.8 考虑一个一维自由粒子的波包. $t = 0$ 时它满足最小不确定度关系

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \quad (t = 0).$$

此外, 我们知道

$$\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0 \quad (t = 0).$$

利用海森堡绘景, 当 $\langle (\Delta x)^2 \rangle_{t=0}$ 给定时, 求作为 t ($t \geq 0$) 的函数的 $\langle (\Delta x)^2 \rangle_t$. (提示: 利用你在第 1 章习题 1.18 中得到的最小不确定度波包的性质.)

2.9 设 $|a'\rangle$ 和 $|a''\rangle$ 是厄米算符 A 的本征态, 本征值分别为 a' 和 a'' ($a' \neq a''$). 哈密顿量算符由下式给出

$$H = |a'\rangle \delta \langle a''| + |a''\rangle \delta \langle a'|,$$

其中 δ 只是个实数.

(a) 显然, $|a'\rangle$ 和 $|a''\rangle$ 不是这个哈密顿量的本征态. 写出该哈密顿量的本征态. 它们的能量本征值是什么?

(b) 假定已知 $t = 0$ 时系统处在 $|a'\rangle$ 态上. 在薛定谔绘景中写出 $t > 0$ 时的态矢量.

(c) 如果已知 $t = 0$ 时系统处在 $|a'\rangle$ 态上, 在 $t > 0$ 时找到该系统在 $|a''\rangle$ 态的概率是多少?

(d) 你能想出与这个问题相对应的一种物理情况吗?

2.10 含有一个粒子的一个盒子用一个薄的隔板分成左右两个隔间. 如果已知该粒子确定无疑地处在右(左)边, 则状态用 $|R\rangle$ ($|L\rangle$) 表示, 在那里我们忽略了在盒子的每一半中的空间变量. 然后, 最一般的态矢量可以写成

$$|\alpha\rangle = |R\rangle \langle R|\alpha\rangle + |L\rangle \langle L|\alpha\rangle,$$

其中 $\langle R|\alpha\rangle$ 和 $\langle L|\alpha\rangle$ 可以看作“波函数”. 该粒子可以隧穿过隔板; 这种隧道效应由哈密顿量

$$H = \Delta (|L\rangle \langle R| + |R\rangle \langle L|),$$

表征, 其中的 Δ 是个有能量量纲的实数.

(a) 求归一化的能量本征右矢. 相应的能量本征值是什么?

(b) 在薛定谔绘景中基右矢 $|R\rangle$ 和 $|L\rangle$ 是固定不变的, 而态矢量随时间运动. 假定系统就由上面在 $t = 0$ 时给定的 $|\alpha\rangle$ 表示. 通过用适当的时间演化算符作用于 $|\alpha\rangle$, 求 $t > 0$ 时的态矢量 $|\alpha, t_0 = 0; t\rangle$.

(c) 假定 $t = 0$ 时粒子确定无疑地处在右边. 观测到粒子在左边的、作为时间函数的概率是多少?

(d) 写出波函数 $\langle R|\alpha, t_0 = 0; t\rangle$ 和 $\langle L|\alpha, t_0 = 0; t\rangle$ 的耦合薛定谔方程. 证明该耦合薛定谔方程的解正是你在 (b) 中所预期的.

(e) 假定打印机出了个错, 把 H 写成了

$$H = \Delta |L\rangle\langle R|.$$

通过明显地求解具有该哈密顿量的最普遍的时间演化问题, 证明概率守恒被破坏了.

2.11 以一维简谐振子为例, 阐明海森堡绘景与薛定谔绘景之间的差别. 特别是, 讨论 (a) 动力学变量 x 和 p 以及 (b) 最一般的态矢量, 分别在这两个绘景中如何随时间演化.

2.12 考虑一个处在一维简谐振子位势中的粒子. 假定在 $t = 0$ 时态矢量为

$$\exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right)|0\rangle,$$

其中 p 是动量算符, 而 a 是某个具有长度量纲的数. $|0\rangle$ 是这样的一个态, 它使 $\langle x\rangle = 0 = \langle p\rangle$. 利用海森堡绘景求 $t \geq 0$ 时的期望 $\langle x\rangle$.

2.13 (a) 写出 $t = 0$ 时习题 2.12 中确定的态的波函数 (在坐标空间). 你可以利用

$$\langle x'|0\rangle = \pi^{-1/4} x_0^{-1/2} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right], \quad \left(x_0 \equiv \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}\right).$$

(b) 求在 $t = 0$ 时的基态中找到该状态概率的简单表示式. $t > 0$ 时这个概率改变吗?

2.14 考虑一个一维简谐振子.

(a) 利用

$$\left. \begin{matrix} a \\ a^+ \end{matrix} \right\} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x \pm \frac{ip}{m\omega} \right), \quad \left. \begin{matrix} a|n\rangle \\ a^*|n\rangle \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} \sqrt{n}|n-1\rangle \\ \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{matrix} \right\},$$

计算 $\langle m|x|n\rangle$, $\langle m|p|n\rangle$, $\langle m|x^2|n\rangle$ 和 $\langle m|p^2|n\rangle$.

(b) 维里定理可表述为

$$\left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right\rangle = \langle \mathbf{x} \cdot \nabla V \rangle \quad \text{三维时, 或} \quad \left\langle \frac{p^2}{m} \right\rangle = \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle \quad \text{一维时.}$$

检验对于动能和势能在一个能量本征态上的期望, 维里定理成立. (按勘误表要求, 这里给出了维里定理. 一译者注)

2.15 (a) 利用

$$\langle x'|p'\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{ip'x'/\hbar} \quad (\text{一维}),$$

证明

$$\langle p'|x|\alpha\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p'|\alpha\rangle.$$

(b) 考虑一个一维简谐振子. 从态矢量的薛定谔方程出发, 推导出动量空间波函数满足的薛定谔方程 (一定要区分开算符 p 和本征值 p'). 你能猜出动量空间的能量本征函数吗?

2.16 考虑一个称为关联函数的函数, 其定义为

$$C(t) = \langle x(t)x(0) \rangle,$$

其中 $x(t)$ 是海森堡绘景中的位置算符. 对一个一维简谐振子的基态明显地求出该关联函数.

2.17 再一次考虑一个一维简谐振子. 用代数方法, 即不用波函数做下列几件事:

(a) 构造 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的这样的一个线性组合, 使得 $\langle x \rangle$ 尽可能的大.

(b) 假定该振子在 $t=0$ 时处于 (a) 中所构造的态上. 在薛定谔绘景中 $t>0$ 时的态矢量是什么?

利用 (i) 薛定谔绘景和 (ii) 海森堡绘景, 求 $t>0$ 时作为时间函数的期望 $\langle x \rangle$.

(c) 利用两个绘景中的任何一个求作为时间函数的 $\langle (\Delta x)^2 \rangle$.

2.18 证明对于一维简谐振子,

$$\langle 0|e^{ikx}|0\rangle = \exp[-k^2 \langle 0|x^2|0\rangle/2],$$

其中 x 是坐标算符.

2.19 一个一维简谐振子的相干态定义为 (非厄米的) 湮灭算符 a 的一个本征态:

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle,$$

其中的 λ , 一般地说, 是个复数.

(a) 证明

$$|\lambda\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} e^{\lambda a^\dagger} |0\rangle$$

是一个归一化的相干态.

(b) 证明对这样的一个态有最小不确定度关系.

(c) 把 $|\lambda\rangle$ 写成

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} f(n) |n\rangle$$

证明 $|f(n)|^2$ 对 n 的分布是泊松形式的. 求最可几的 n 值, 以及对应的 E 值.

(d) 证明一个相干态也可以通过将一个平移 (有限的位移) 算符 $e^{-ip'h}$ (其中 p 是动量算符, 而 l 是位移的距离) 作用于基态上得到. 还请见 Gottfried 1966, 262 ~ 264 页. 2. 20 设

$$J_{\pm} = \hbar a_{\pm}^\dagger a_{\pm}, \quad J_{\pm} = \frac{\hbar}{2} (a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-), \quad N = a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_-,$$

其中 a_{\pm} 和 a_{\pm}^\dagger 是两个独立的简谐振子的湮灭和产生算符, 它们满足通常简谐振子的对易关系. 证明

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm \hbar J_{\pm}, \quad [\mathbf{J}^2, J_z] = 0, \quad \mathbf{J}^2 = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right) N \left[\left(\frac{N}{2}\right) + 1\right].$$

其中 \mathbf{J}^2 为

$$\mathbf{J}^2 \equiv J_z^2 + \left(\frac{1}{2}\right) (J_+ J_- + J_- J_+).$$

2.21 通过使用生成函数推导正交关系 (2.5.29) 式, 导出 (2.5.28) 式中的归一常数 c_n . 从计算出积分

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} g(x, t) g(x, s) e^{-t^2} dx,$$

出发, 之后借助于厄米多项式的级数再一次利用生成函数考虑这个积分.

2.22 考虑一个质量为 m 的粒子处于下列形式的一维势中:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}kx^2 & \text{对于 } x > 0 \\ \infty & \text{对于 } x < 0. \end{cases}$$

(a) 其基态能量是什么?

(b) 对于该基态的期望 $\langle x^2 \rangle$ 是什么?

2.23 一个一维粒子约束在两个刚性壁之间. 即:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{对于 } 0 < x < L \\ \infty, & \text{对于 } x < 0, x > L. \end{cases}$$

$t = 0$ 时确知该粒子准确地处在 $x = L/2$ 处. 在能量的各种本征态上找到该粒子的相对概率是什么? 写出 $t \geq 0$ 时的波函数. (你无需担心绝对归一化、收敛性和其他的一些数学细节).

2.24 考虑一维粒子被一个 δ 函数势

$$V(x) = -v_0\delta(x), \quad (v_0 \text{ 为正实数})$$

束缚于一个固定的中心位置处. 求波函数和基态束缚能. 有激发的束缚态吗?

2.25 一个一维的质量为 m 的粒子被一个吸引的 δ 函数势

$$V(x) = -\lambda\delta(x), \quad (\lambda > 0)$$

束缚于一个固定的中心. 在 $t = 0$ 时该势突然被撤掉 (即: $t > 0$ 时, $V = 0$). 求 $t > 0$ 时的波函数. (要定量地求解! 但是你不必试图计算可能出现的积分).

2.26 一个一维粒子 ($-\infty < x < \infty$) 受到一个可从

$$V = \lambda x,$$

($\lambda > 0$)

导出的恒力的作用.

(a) 其能谱是连续的还是分立的? 写出由 E 所确定的能量本征函数的近似表示式. 然后粗略地画出其示意图.

(b) 简略地讨论, 如果用

$$V = \lambda |x|.$$

代替 V , 什么地方需要改动?

2.27 推导二维自由粒子态密度表示式. 它是用在一个边长为 L 的盒子中的周期性边界条件归一的.

2.28 考虑限制在一个中空的圆柱壳内的一个电子, 该圆柱的轴与 z 轴相吻合. 要求波函数在内壁 $\rho = \rho_u$. 外壁 $\rho = \rho_b$, 以及底部 $z = 0$ 和顶部 $z = L$ 等处均为零.

(a) 求能量本征函数. (不必担心归一化.) 证明能量本征值由下式给出:

$$E_{lmn} = \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \right) \left[k_{mn}^2 + \left(\frac{l\pi}{L} \right)^2 \right] \quad (l = 1, 2, 3, \dots, m = 0, 1, 2, \dots),$$

其中 k_{nm} 是如下超越方程的第 n 个根

$$J_m(k_{mn}\rho_b) N_m(k_{mn}\rho_a) - N_m(k_{mn}\rho_b) J_m(k_{mn}\rho_a) = 0,$$

(b) 当 $0 < \rho < \rho_a$ 区域存在一个均匀磁场 $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ 时, 重复求解同样的问题. 注意, 尽管电子从未“触及”该磁场, 能量本征值仍会受到磁场的影响.

(c) 特别是, 比较 $B = 0$ 与 $B \neq 0$ 问题中的基态. 如果我们要求在 B 存在时的基态能量不变, 展示我们求得的“磁通量子化”为

$$\pi \rho_a^2 B = \frac{2\pi N \hbar c}{e}, \quad (N = 0, \pm 1, \pm 2, \dots).$$

2.29 考虑一个在位势 $V(x)$ 的影响下做一维运动的粒子. 假定它的波函数可以写成 $\exp[iS(x, t)/\hbar]$. 证明在某种意义上 k 可以视为小量的范围内, $S(x, t)$ 满足经典的哈密顿-雅可比方程. 展示从 $V(x)$ 等于零的经典哈密顿-雅可比方程的解出发, 人们怎样可以求得一个平面波的正确波函数. 为什么在这种特殊情况下我们能得到精确的波函数?

2.30 使用球坐标, 求解氢原子基态和激发态 \mathbf{j} 的表示式. 特别是证明, 对于 $m_l \neq 0$ 的态, 在这样的一种意义上存在一个环形通量, 即 \mathbf{j} 是沿着 ϕ 增加还是减小的方向取决于 m_l 是正还是负.

2.31 导出 (2.6.16) 式. 并求得 (2.6.16) 式的三维推广.

2.32 如同在 (2.6.20) - (2.6.22) 式中那样, 定义配分函数为

$$Z = \int d^3x' K(\mathbf{x}', t; \mathbf{x}', 0) |_{\beta=i\hbar},$$

证明通过取

$$-\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta}, \quad (\beta \rightarrow \infty)$$

可求得基态能量. 以一维盒子中的一个粒子为例说明这个结果.

2.33 类似于 (2.6.26) 式, 动量空间的传播子由 $\langle \mathbf{p}'', t | \mathbf{p}', t_0 \rangle$ 给出. 推导对自由粒子的 $\langle \mathbf{p}'', t | \mathbf{p}', t_0 \rangle$ 显式表示式.

2.34 (a) 写出一个简谐振子对于一个有限时间间隔的经典作用量.

(b) 对于一个简谐振子, 利用费曼方法构造出微小的 $t_n - t_{n-1} = \Delta t$ 情况下的 $\langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle$. 只保留到 $(\Delta t)^2$ 量级的项, 证明它与由 (2.6.26) 式给出的传播子在 $t - t_0 \rightarrow 0$ 时的极限完全一致.

2.35 陈述施温格作用原理 (见 Finkelstein 1973, 155 页). 通过把施温格原理求积分求出 $\langle x_2 t_2 | x_1 t_1 \rangle$, 并将其与对于 $\langle x_2 t_2 | x_1 t_1 \rangle$ 相应的费曼表达式比较. 描述这两个表达式的经典极限.

2.36 证明在 2.7 节讨论的引力诱导问题上波动力学方法也会给出相位差表达式 (2.7.17) 式.

2.37 (a) 证明 (2.7.25) 式和 (2.7.27) 式的正确性.

(b) 证明具有由 (2.7.31) 式给定的 \mathbf{j} 的连续性方程 (2.7.30) 的正确性.

2.38 考虑一个电荷为 e 的无自旋粒子的哈密顿量. 在静磁场存在时, 相互作用项可以通过

$$\mathbf{p}_{\text{算符}} \rightarrow \mathbf{p}_{\text{算符}} - \frac{e\mathbf{A}}{c}.$$

生成, 其中 \mathbf{A} 是适当的矢量势. 为了简单起见, 假定磁场 \mathbf{B} 是均匀的, 且沿 z 的正方向. 证明上述做法的确导致轨道磁矩 $(e/2mc)\mathbf{L}$ 与磁场 \mathbf{B} 相互作用的正确表示式. 证明还存在一个正比于 $B^2(x^2 + y^2)$ 的多余的项. 并简略地解释它的物理意义.

2.39 一个电子在一个均匀的、沿 z 方向的磁场 ($\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$) 中运动.

(a) 求

$$[\Pi_x, \Pi_y],$$

其中

$$\Pi_x \equiv p_x - \frac{eA_x}{c}, \quad \Pi_y \equiv p_y - \left(\frac{eA_y}{c} \right).$$

(b) 通过将哈密顿量及 (a) 中得到的对易关系与一维谐振子问题中相应的结果比较, 展示我们怎样能够立即写出能量本征值

$$E_{k,n} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \left(\frac{|eB| \hbar}{m} \right) \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

其中 $\hbar k$ 是算符 p_z 的连续本征值, 而 n 是包括零在内的非负整数.

2.40 考虑中子干涉仪证明在计数率中产生两个相继极大值的磁场差由下式给出

$$\Delta B = \frac{4\pi\hbar c}{|e| g_n \bar{\lambda} l}.$$

其中 $g_n (= -1.91)$ 是中子磁矩, 单位为 $-e\hbar/2m_n c$. (假如你在 1967 年解出了这个问题的话, 你将会在 Physical Review Letters 上发表你的解!)

第三章 李群 (Lie Group) 与李代数 (Lie Algebra)

内容提要

□ Lie 群与 Lie 代数

□ Casimir 算子

□ 张量

□ Lie 代数的表示

这一章大部分内容聚焦在群论, 尤其是李群李代数部分, 事实上, 恐怕到最后的章节也不会继续大篇幅的讲数学内容了, 这些数学已经足够支撑你初步的了解这门学科.

虽然这一章的主要内容是数学, 但会逐步把相对应的物理内容穿插进来, 这样既有助于加深印象, 也有助于构建所谓“物理图像”.

3.1 李群 (Lie Group) 初步

3.1.1 群与李群 (Lie Group)

我们或许听说过一个说法:“物理学的关键是对称和守恒”, 而诺特定理给出了对称性与守恒性的联系, 例如, 时间平移不变性意味着能量守恒; 空间平移不变性意味着动量守恒; 转动不变性意味着角动量守恒; 电势和向量势的规范不变性得出电荷的守恒等. 而描述对称性的语言就是群论.

我们可以认为群是一类拥有特殊结构的集合, 即满足如下关系的集合¹:

定义 3.1.1 (群的定义)

设 G 是一个集合, 若满足下面 4 个条件, 则称 G 为一个群 (Group)

1. G 中存在一种运算规则, 对 G 中的任意两个元素 $g, h \in G$, 存在对应 G 中的一个元素, 记为

$$k = g \circ h (k = gh) \quad (3.1)$$

2. 运算规则满足交换律, 对 G 中的任意三个元素 $g, h, k \in G$, 存在

$$(gh)k = g(hk) \quad (3.2)$$

3. G 中存在一个幺元 e (有时也称单位元), 使得对于 G 中任意元素 g , 均有

$$ge = eg = g \quad (3.3)$$

4. G 中每一个元素 g , 均存在一逆元 g^{-1} , 使得

$$gg^{-1} = g^{-1}g = e \quad (3.4)$$

我们可以发现, 群的运算规则通常不满足交换律, 特殊的, 我们把满足交换律的群称为阿贝尔群 (Abel Group)².

定义 3.1.2 (子群的定义)

设 G 是一个群, H 为 G 的一个子集 ($H \subseteq G$), 若 H 按照 G 的运算规则仍是一个群, 则称 H 是 G 的子群.

例题 3.1 全体实数 \mathbb{R} (或复数 \mathbb{C}), 对加法构成一个阿贝尔群.

我们知道有理数全体是 \mathbb{R} 的子群, 而全体偶数是有理数的子群, 自然也是 \mathbb{R} 的子群, 那么存在一个问题: 无理数全

¹当然, 这里会忽略对于主线无用的那些群论内容, 所以如果和数学系的抽象代数对比, 你甚至可能会感觉到学的不是同一个东西

²关于这个有一个经典笑话: 一位美国数学教授来到法国, 见路边有一小孩, 遂上前问到: “小朋友, 你知道 $1+2$ 等于几吗?” 小孩摇摇头说: “不知道.” 教授正想感叹法国数学教育如此之落后, 却听到小孩接着说: “虽然我不知道 $1+2$ 等于几, 但是我知道 $1+2$ 等于 $2+1$, 因为整数加法群是阿贝尔群!”

体, 或奇数全体是否是 \mathbb{R} 的子群?

解 都不是, 首先对于无理数我们注意到 $\pi + (-\pi) = 0$, 而 0 不是无理数, 故无理数不构成加法群. 同样的, 我们注意到 $1 + (-1) = 0$, 0 同样也不是奇数, 故奇数也不构成加法群.

例题 3.2 全体实数除去零 $\mathbb{R}/0$ 或全体复数除去零 $\mathbb{C}/0$ 对乘法构成阿贝尔群.

同样的, 我们有个问题: 为什么要除去 0?

解 答案是显然的, 群中幺元为 1, 但 $0/0$ 无意义.

例题 3.3 $G = \{1, -1, i, -i\}$ 对复数乘法运算构成一有限阿贝尔群. 这里 1 是 G 的幺元, 而 -1 的逆元就是 -1, i 与 $-i$ 互为逆元.

例题 3.4 行列式不为零的 n 阶实矩阵全体对矩阵乘法构成一个群, n 阶全线性群, 其记为 $GL(n, \mathbb{R})$, 它的元素由 n^2 个独立实参数所确定. 其是一个 n^2 维 (不可交换) 李群, 在后面我们会再次讨论它.

例题 3.5 行列式为 1 的 2 阶实矩阵全体对矩阵乘法构成一个群: 二阶 (实) 特殊线性群 $SL(2, \mathbb{R})$. 因为二阶实矩阵 $\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ 由四个实数 a, b, c, d 构成, 由于行列式为 1 的要求, 使他们必须满足条件: $ad - bc = 1$. 所以 $SL(2, \mathbb{R})$ 中的元素由 3 个独立的实参数所确定. 按照下面将要给出的定义可见 $SL(2, \mathbb{R})$ 是一个三维 (不可交换) 李群, 而且它是 $GL(2, \mathbb{R})$ 的子群.

例题 3.6 行列式为 1 的 n 阶实矩阵全体对矩阵乘法构成一个群: n 阶特殊线性群 $SL(n, \mathbb{R})$, 这是一个 $n^2 - 1$ 维 (不可交换) 李群, 而且它是 $GL(n, \mathbb{R})$ 的子群.

例题 3.7 行列式不为 0 的 n 阶复矩阵全体对矩阵乘法构成一个群: n 阶 (复) 全线性群 $GL(n, \mathbb{C})$, 行列式为 1 的 n 阶复矩阵全体对矩阵乘法构成一个群: n 阶 (复) 特殊线性群 $SL(n, \mathbb{C})$.

$GL(n, \mathbb{C})$ 是一个 $2n^2$ 维 (不可交换) 李群, $SL(n, \mathbb{C})$ 是一个 $2n^2 - 2$ 维 (不可交换) 李群.

我们发现, 所举的例子 (除第一个外) 都存在共同点: 元素都是矩阵 (实数和复数可看作一阶矩阵), 群的运算法则都是矩阵乘法. 我们把这类群统称为线性群, 线性群也是最具代表性的一类李群, 今后所使用的李群基本上都是线性群.

注 事实上, 从现在开始, 我们就已经走上物理的道路上了, 实际上, 哪怕你掌握了这一章的全部内容, 可能对于数学上的抽象代数那一套仍非常陌生, 但早已足够应付物理上的内容了. 在上一段, 我们给出了一个断言: “今后所使用的李群基本上都是线性群”, 实际上, 我们完全可以这么说, 如果不去碰高能 and 那些 fancy 的理论 (例如弦论, AdS/CFT 等), 哪怕仅掌握 $U(1), SU(2), SU(4), SO(2), SO(3)$ 这几个群和其表示论就足够了.

下面我们正式进入李群这一部分的内容.

定义 3.1.3 (Lie 群的定义)

设 G 是一个 r 维流形, 同时 G 又是一个群, 并将其幺元记为 e , 因 e 又是流形 G 中的一点, 所以可取定一个包含 e 的局部坐标邻域 U ; 在 U 中取定坐标系 $\{U, \varphi\}$. 设取 e 为坐标原点, 有

$$\varphi(e) = (0, 0, \dots, 0) \quad (3.5)$$

任取 U 中的三个元素 g, h, k , 并设其坐标为

$$\begin{aligned} \varphi(g) &= (x_1, x_2, \dots, x_r) \\ \varphi(h) &= (y_1, y_2, \dots, y_r) \\ \varphi(k) &= (z_1, z_2, \dots, z_r) \end{aligned} \quad (3.6)$$

而群乘法 $k = gh$ 则可以被定义为以下形式:

$$\begin{aligned} z_1 &= f_1(x_1, \dots, x_r; y_1, \dots, y_r) \\ z_2 &= f_2(x_1, \dots, x_r; y_1, \dots, y_r) \\ &\vdots \\ z_r &= f_r(x_1, \dots, x_r; y_1, \dots, y_r) \end{aligned} \quad (3.7)$$

我们要求这 r 个函数 f_1, f_2, \dots, f_r 是无限次可导的 (光滑的). 我们把这 r 个函数 f_1, f_2, \dots, f_r 称为 G 的乘法函数. 其完全确定了群 G 的结构. 我们把这样的群 G 叫做一个 r 维李群.



我们现在根据群的定义来给出几个自然性质

1. 第一个定义是显然的, 因为李群的定义建立在这种运算规则上, 我们只需要对另外 3 个条件进行讨论.
2. 我们现在给出交换律所导出的性质, 为方便表述, 我们简记群乘法关系为 $z = f(x, y)$:

$$f(f(x, y), z) = f(x, f(y, z)) \quad (3.8)$$

3. 对于幺元 e , 其坐标为 $(0, 0, \dots, 0)$, 所以有 $ex = xe = x$.

$$f(x, 0) = f(0, x) = x \quad (3.9)$$

4. 对于逆元 g^{-1} , 我们设其坐标为 $(\tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_r)$, 于是有

$$f(x, \tilde{x}) = f(\tilde{x}, x) = 0 \quad (3.10)$$

我们很容易看出, 乘法函数是很抽象的, 只有乘法函数来研究李群往往是无处下手的 (更何况我们是学物理的), 于是有了李代数的理论. 不过在展开李代数之前, 我们使用几个实际的李群的例子来帮助建立对于李群的理解.

例题 3.8 $T_2 = \left\{ \begin{bmatrix} e^{x_1} & x_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \mid x_1, x_2 \in \mathbb{R} \right\}$. 这个群的元素由两个独立实参数 x_1, x_2 决定. 所以, T_2 是一个二维流形³. 我们现在来逐个验证其满足群的要求.

解

1. 首先我们验证其封闭性

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} e^{x_1} & x_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{y_1} & y_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} e^{x_1} e^{y_1} & e^{x_1} y_2 + x_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} e^{x_1+y_1} & e^{x_1} y_2 + x_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{z_1} & z_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \in T_2 \end{aligned} \quad (3.11)$$

并同时写出其乘法函数, 不难发现其乘法函数是无限次可微的.

$$\begin{aligned} z_1 &= f_1(x_1, x_2; y_1, y_2) = x_1 + y_1, \\ z_2 &= f_2(x_1, x_2; y_1, y_2) = e^{x_1} y_2 + x_2. \end{aligned} \quad (3.12)$$

2. T_2 的乘法运算为矩阵乘法, 自然满足结合律.
3. 对于幺元, 我们注意到

$$\begin{bmatrix} e^0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

4. 我们注意到有

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} e^{-x_1} & -x_2 e^{-x_1} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{x_1} & x_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} e^{x_1} & x_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-x_1} & -x_2 e^{-x_1} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.14)$$

所以逆元为 $\begin{bmatrix} e^{-x_1} & -x_2 e^{-x_1} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ 并容易验证其不满足交换律.

例题 3.9 我们的下一个实例是绕定轴转动的旋转群 $SO(2)$, 显然, 我们只需要一个变量 (转动角 θ) 就可以表述一个转动变换, 所以我们表示群元为 $g(\theta)$, 其中 θ 的取值范围是 $[0, 2\pi)$. 而群的运算法则可以被规定为相继的两个转动, 即转动角相加, 但需要保持转动角始终在取值范围内. 我们可以使用公式表达:

$$g(\theta_1)g(\theta_2) = g(\theta_{12}), \quad \theta_{12} = (\theta_1 + \theta_2) \mod 2\pi \quad (3.15)$$

我们容易验证其满足对应的 4 条性质. 不过我们在关于线性代数的学习中, 我们知道: 我们也可以使用旋转矩阵来

³流形: 一句话来表述是将一个空间的局部近似为一个欧氏空间, 我们把这个欧氏空间称为流形 (manifold), 你可以把它当做一种空间.

表述定轴转动.

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \xrightarrow{g(\theta)} \begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \cos \theta - y \sin \theta \\ x \sin \theta + y \cos \theta \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

我们发现, 旋转矩阵是 $SO(2)$ 群的群元. 我们在下一个例子会更加深入讨论这部分内容.

例题 3.10 现在我们需要讨论三维旋转群 $SO(3)$, 其群元表示三维空间中绕某个固定点的一个转动 $g \in SO(3)$, 为了方便表述 $SO(3)$, 我们使用如图所示的欧拉 (Euler) 角 (α, β, γ) 来表示一个转动.

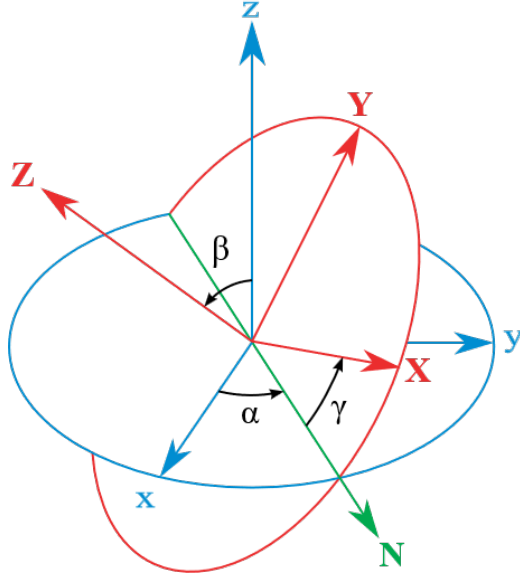


图 3.1

我们依次写出绕 z 轴旋转 α 角; 绕 x 轴旋转 β 角; 绕 z 轴旋转 γ 角的三个群元的矩阵表示:

$$g_z^\alpha = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}; g_x^\beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \beta & -\sin \beta \\ 0 & \sin \beta & \cos \beta \end{bmatrix}; g_z^\gamma = \begin{bmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

我们给出最终群元的表示:

$$g = g_z^\alpha g_x^\beta g_z^\gamma = \begin{bmatrix} \cos \alpha \cos \gamma - \cos \beta \sin \alpha \sin \gamma & -\cos \alpha \sin \gamma - \cos \beta \sin \alpha \cos \gamma & \sin \beta \sin \alpha \\ \sin \alpha \cos \gamma + \cos \beta \cos \alpha \sin \gamma & -\sin \alpha \sin \gamma + \cos \beta \cos \alpha \cos \gamma & -\sin \beta \cos \alpha \\ \sin \beta \sin \gamma & \sin \beta \cos \gamma & \cos \beta \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

因此, $SO(3)$ 的元素可以通过三个独立参量 α, β, γ 来确定, 因此不难验证 $SO(3)$ 是一个三维李群.

现在我们给出另一种表述 $SO(3)$ 的方法.

我们对于两个矢量 $x = (x_1, x_2, x_3), y = (y_1, y_2, y_3)$ 给出三维欧式空间 \mathbb{R}_3 的内积:

$$\langle x, y \rangle = \sum_{j=1}^3 x_j y_j = x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3 \quad (3.19)$$

我们定义一个线性变换算符 $g = (g_{ij})$, 存在关系

$$x \xrightarrow{g} x' = gx = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \quad g \in SO(3) \Leftrightarrow \langle gs, gy \rangle = \langle x, y \rangle \quad \forall x, y \in \mathbb{R}_3 \quad \text{且 } \det g > 0 \quad (3.20)$$

而且我们发现 $\langle gs, gy \rangle = \langle x, g^T gy \rangle$, 其中 g^T 表示 g 的转置, 即 $g_{ij}^T = g_{ji}$, 我们根据刚才所给出的关系发现 $\langle x, g^T gy \rangle = \langle x, y \rangle$, 即 $g^T g = \mathbf{1}$, 我们把满足关系 $g^T g = gg^T$ 的线性变换构成的群称为正交群.

对于 3 阶矩阵 g , 存在 9 个元素, 但为了满足特殊正交群的特殊性 ($\det g = 1$) 和正交性 ($g^T g = gg^T$), 共有 6 个方程需要满足. 所以, 我们可以拿出 3 个作为独立参数, 这再次证明了 g 可以表述 $SO(3)$ 这个三维李群.

3.1.2 指数映射与对数映射

在前面的部分, 我们强调了群的乘法一般不可交换, 这直接导致了刻画李群的乘法函数变得非常复杂, 这意味着想通过研究乘法函数来研究李群是不现实的. 而为了研究李群的各种结构, 我们可以对李群在么元处的无穷小变换进行研究, 而 Lie 证明了李群的主要特征可以通过无穷小变换来得到, 这就是为什么现在称这类群为李群的原因. 对于无穷小变换, 它是一个拥有特殊结构的线性空间, 我们称它构成的代数结构为李代数.

这里, 我们再次强调, 后面默认所有的群都是线性群, 群的运算规则都是矩阵乘法!

我们回到这一节前面所提到的, 由于矩阵乘法不可交换, 导致运算变得复杂, 那么有没有一种办法, 可以让复杂的运算变为较简单的运算呢 (最好还是物理中最喜欢的线性运算)?

答案是肯定的, 我们高中就学过一种特殊的运算: 指数运算, 它可以把较为复杂的乘法变为较为简单的加法, 即对于给出的 $y_1 = e^{x_1}, y_2 = e^{x_2}$, 我们有

$$y_1 y_2 = e^{x_1} e^{x_2} = e^{x_1 + x_2} \quad (3.21)$$

这样, 我们就实现了运算的“降级”, 并且还是线性运算. 现在, 问题变为, 我们能否同样应用这种方式, 将矩阵乘法转变为某种加法呢?

答案同样是肯定的, 但由于矩阵乘法比代数乘法更为复杂, 相应的“加法”自然也更加复杂. 而为了得到这种简单的“加法”运算, 我们首先对 n 阶矩阵 A 定义幂指数:

$$e^A = \exp(x) = \mathbf{1} + A + \frac{A^2}{2!} + \frac{A^3}{3!} + \cdots \quad (3.22)$$

易证此级数对于任意的矩阵 A 都是收敛的. 并且对于零矩阵 O , 显然有

$$e^O = \mathbf{1} \quad (3.23)$$

并且, 前面我们多次提到矩阵乘法相比代数乘法是不可交换的, 那么, 反应到对应的“加法”运算上, 自然也有区分加法的性质, 即当且仅当 A, B 对易的时候, 才有 $e^A e^B = e^{A+B}$, 这是主要的困难点, 那么我们的主要问题就集中在 $e^A e^B = e^?$ 上, 这也就是我们将要学习的李代数的内容. 不过, 在正式开始李代数的内容之前, 我们先讨论一下其他同样有价值的内容.

我们仅了解了和指数函数对应的运算, 而我们高中还知道, 指数函数的逆运算是取对数函数, 接下来我们效仿之前的内容, 对对数函数应用同样的定义方法:

同样对于 n 阶矩阵 A , 我们定义⁴

$$\log A = (A - \mathbf{1}) - \frac{(A - \mathbf{1})^2}{2} + \frac{(A - \mathbf{1})^3}{3} - \frac{(A - \mathbf{1})^4}{4} + \cdots \quad (3.24)$$

不同于指数函数, 为了保证级数收敛, 我们要求 $A - \mathbf{1}$ 的每一个元素的绝对值均小于 $\frac{1}{n}$, 即要求 A 是与么元邻近的元素. 并且指数函数与对数函数互为逆运算的关系对于这个定义同样适用 (仅需泰勒展开即可证明, 留给读者自行尝试).

3.1.3 单参数子群

在前面, 我们通过代数方法初步建立了一些对应关系, 这一小节, 我们通过几何的角度再次考虑这个对应关系.

定义 3.1.4 (单参数子群)

设 G 为一个李群, 并且 $\gamma(t) (-\infty < t < \infty)$ 为 g 中过么元 e 的一条曲线, 则对每一取定的 $t_0 \in \mathbb{R}$, $\gamma(t_0)$ 是 G 中的一个元素. 并设参数 t 满足:

$$\gamma(t_1 + t_2) = \gamma(t_1) \gamma(t_2) \quad (3.25)$$

则称 $\gamma(t)$ 是 G 中的一个单参数李群.



⁴在物理的语境中, \log 通常仅指 \ln , 同样的, 本文中采取该写法.

现在我们通过几何的角度思考问题.

我们将李群 G 的一个单参数子群看成流形 G (对二维 Lie 群, 可将 G 看成为一张曲面) 中过 e 处的一条曲线. 从微积分知道这只要对 $\gamma(t)$ 在 $t=0$ 处求导即得 $\gamma(t)$ 在 $t=0$ 处的切向量, $\gamma'(0) = \frac{d\gamma(t)}{dt}$. (因为我们只讨论线性群, 所以 $\gamma(t)$ 是矩阵, 其元素是 t 的函数, $\gamma'(t)$ 表示对 $\gamma(t)$ 的每一元素求导所得的矩阵). 由于:

$$\gamma(t+s) = \gamma(t)\gamma(s) \quad (3.26)$$

两边对 s 求导, 同时令 $s=0$, 得到一个微分方程

$$\gamma'(t) = \gamma(t)\gamma'(0) \quad (3.27)$$

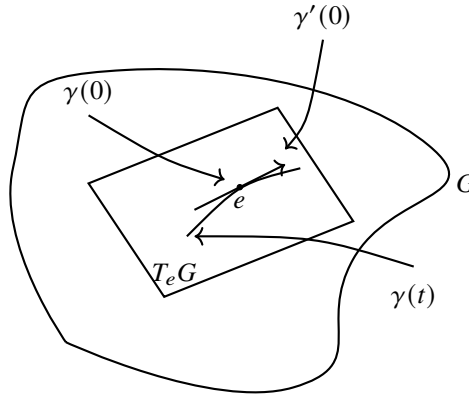
对于这类微分方程, 我们知道其解为

$$\gamma(t) = \exp(t\gamma'(0)) \quad (3.28)$$

由此, 我们知道, 单参数子群必能表达为指数映射的形式.

由解的形式可见, 对于 G 在幺元处的切空间 $T_e G$ 的任意一个向量 $A = \gamma'(0)$, 就有 G 中的一元素 $\gamma(1) = \exp(\gamma'(0))$

图 3.2: 二维李群与其单参数子群



与之对应. 现在我们稍微总结一下: 对于李群 G 这个流形, 我们可以找到其单参数子群 $T_e G$ 作为其切空间, 并且我们可以找到一个指数映射从切空间到原空间, 很快, 当我们学会李代数的时候, 我们会再次使用李代数的语言来总结: “李代数就是李群的切空间所导出的代数”.

我们再次回到群 G 和它的单参数子群, 我们发现, 如果给定 G 中与幺元邻近的一个元素⁵ g , 并定义向量 $A = \log g$, 则由 $e^A = g$ 知, A 为 G 在 e 处之切向量, $e^t A$ 为以 A 为单位切向量的单参数子群. 因此, 对 G 中与幺元 e 邻近的一个元素就有 $T_e(G)$ (G 在幺元处的切空间) 中一向量 A 与之对应, 也就是说, 设 $U \subset G$ 中包含 e 的一个适当邻域, 我们建立了一种对应关系

$$\begin{aligned} G \supset U &\xleftrightarrow[\exp]{\log} T_e(G) \\ g &\rightarrow A = \log g \\ e^A &\leftarrow A \end{aligned} \quad (3.29)$$

这种对应关系可以使我们对李群的研究转化到与其对应的在幺元 e 处的切空间 $T_e(G)$. 而我们知道, $T_e(G)$ 是由向量组成的线性空间, 其线性结构具有先天优势, 拥有远比李群简单的结构和运算. 但由于我们前面所提到的, 由于矩阵乘法相比于数乘的不可交互性, 自然由此导出的切空间的运算自然也不能简单用普通加减法来表述, 即如下

⁵当然, 由于我们研究线性群, 幺元为单位矩阵.

关系

$$\begin{aligned}
 T_e(G) & \quad G \\
 A & \longrightarrow e^A \\
 B & \longrightarrow e^B \\
 A+B & \longrightarrow e^{A+B} \neq e^A e^B
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

为此, 我们迫切需要引入一种新的代数结构来反映 G 中的不可交换性, 而具有这种新结构的线性空间 $T_e(G)$, 就是我们下一节所要讲的李代数.

3.2 李群与李代数

3.2.1 李代数

由上面的讨论, 我们现在知道 $e^A e^B \neq e^{A+B}$, 那么, 问题自然变为: $e^A e^B = e^?$, 或者表述为, G 的单参数子群的代数结构是什么样的?

为了解决这个问题, 我们设 $A, B \in T_e(G)$, 取一个参数 t , 并要求 $|t|$ 适当小, 从而能够保证 e^{tA} 与 e^{tB} 均为李群 G 中与幺元 e 邻近的元素⁶. 现在我们构造一个函数:

$$g(t) = e^{tA} e^{tB} e^{-tA} e^{-tB} \tag{3.31}$$

显然, 对于特例, 即如果 e^{tA} 与 e^{tB} 可交换, $g(t) = e = \mathbf{1}$, 对于不可交换的情况, $g(t)$ 与幺元 e 的偏离程度反映了 e^{tA} 与 e^{tB} 的乘法与可交换的乘法之间的差异大小. 现在我们具体分析 $g(t)$.

$$\begin{aligned}
 g(t) &= e^{tA} e^{tB} e^{-tA} e^{-tB} \\
 &= (1 + tA + \frac{t^2}{2!} A^2 + \frac{t^3}{3!} A^3 + \cdots)(1 + tB + \frac{t^2}{2!} B^2 + \frac{t^3}{3!} B^3 + \cdots) \\
 &\quad (1 - tA + \frac{t^2}{2!} A^2 - \frac{t^3}{3!} A^3 + \cdots)(1 - tB + \frac{t^2}{2!} B^2 - \frac{t^3}{3!} B^3 + \cdots) \\
 &= \{1 + t(A+B) + t^2(\frac{A^2}{2} + AB + \frac{B^2}{2}) + t^3(\frac{A^3}{6} + \frac{A^2 B}{2} + \frac{AB^2}{2} + \frac{B^3}{6}) + O(t^4)\} \\
 &\quad \{1 - t(A+B) + t^2(\frac{A^2}{2} + AB + \frac{B^2}{2}) - t^3(\frac{A^3}{6} + \frac{A^2 B}{2} + \frac{AB^2}{2} + \frac{B^3}{6}) + O(t^4)\} \\
 &= 1 + t(A+B-A-B) + t^2(AB-BA) + t^3(\frac{A^2 B}{2} - \frac{AB^2}{2} - \\
 &\quad - \frac{B^2 A}{2} + \frac{BA^2}{2} - ABA + BAB) + O(t^4) \\
 &= 1 + t^2[A, B] + \frac{t^3}{2}([A, [A, B]] - [B, [B, A]]) + O(t^4)
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

这里我们使用了对易子记号 $[,]$, 不过对于李代数, 它也称为李括号, 李乘法⁷. 对于函数 $g(t)$, 我们有

$$\frac{g(t) - \mathbf{1}}{t^2} = [A, B] + O(t) \tag{3.33}$$

因此, 考虑极限 $t \rightarrow 0$ 时,

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{g(t) - \mathbf{1}}{t^2} = [A, B] \tag{3.34}$$

由此, 我们发现李群 G 的元素 e^{tA} 与 e^{tB} 的乘法的不可交换程度在 $|t|$ 很小时主要取决于 $[A, B]$

现在我们做变量代换 $t = \sqrt{s}$, 则

$$\frac{g(\sqrt{s}) - g(0)}{s} = [A, B] + O(\sqrt{s}) \tag{3.35}$$

⁶这个要求是必要的, 我们需要满足后续使用级数的收敛性.

⁷事实上, 对于线性群它等同于对易子, 后面会加以区分的使用对易子和李括号.

并因此

$$\lim_{s \rightarrow 0} \frac{g(\sqrt{s}) - g(0)}{s} = [A, B] \quad (3.36)$$

这也说明 $[A, B]$ 是李群 G 中过幺元的曲线 $g(\sqrt{s})$ 在幺元处的切向量, 即 $[A, B] \in T_e(G)$, 这也意味着我们证明了如下关系

$$\forall A, B \in T_e(G), [A, B] \in T_e(G) \quad (3.37)$$

即对易子 (李括号) 对向量空间 $T_e(G)$ 的封闭性.

此时, 我们可以回答开头所提到的问题了, 不妨设 $e^{tA}e^{tB} = e^{tC}$, 则

$$\begin{aligned} tC &= \log e^{tC} = \log e^{tA}e^{tB} \\ &= \log\left\{\left(1 + t(A+B) + \frac{t^2}{2}(A^2 + 2AB + B^2) + \frac{t^3}{6}(A^3 + 3A^2B + 3AB^2 + B^3) + O(t^4)\right)\right\} \\ &= t(A+B) + \frac{t^2}{2}(A^2 + 2AB + B^2) + \frac{t^3}{6}(A^3 + 3A^2B + 3AB^2 + B^3) + O(t^4) \\ &\quad - \left\{t(A+B) + \frac{t^2}{2}(A^2 + 2AB + B^2) + O(t^3)\right\}^2/2 + \\ &\quad + \left\{t(A+B) + \frac{t^2}{2}(A^2 + 2AB + B^2) + O(t^3)\right\}^3/3 + O(t^4) \\ &= t(A+B) + \frac{t^2}{2}(AB - BA) + \frac{t^3}{12}(A^2B - ABA - ABA + BA^2 \\ &\quad - B^2A + BAB + BAB - AB^2) + O(t^4) \\ &= (tA + tB) + \frac{1}{2}[tA, tB] + \frac{1}{12}[tA, [tA, tB] - tB, [tB, tA]] + O(t^4) \end{aligned} \quad (3.38)$$

由此可见, 只要给出李括号, $T_e(G)$ 中知道了与 e^{tA}, e^{tB} 相对应的元素 tA, tB 即可求得 $T_e(G)$ 中与 $e^{tA}e^{tB}$ 相对应的元素. 因此, 我们认为李括号可以表述李群切空间的代数结构, 并对于李括号有下列性质 (事实上完全类似在第一章给出过的对于对易子的同样性质).

$$\begin{aligned} [A, A] &= 0 \\ [A, B] &= -[B, A] \\ [A, c] &= 0 \quad (c \text{ 只是一个数}) \\ [A+B, C] &= [A, C] + [B, C] \\ [A, BC] &= [A, B]C + B[A, C] \\ [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] &= 0 \end{aligned} \quad (3.39)$$

我们称有了李括号的向量空间 $T_e(G)$ 构成一个李代数, 更准确的来讲是李群 G 的李代数, 并记为 \mathfrak{g} .

李群的李代数完全刻画了李群在幺元附近的结构, 而要研究李群在幺元附近的性质只需要研究李代数即可, 但是需要注意的是, 李代数仅刻画了李群在幺元附近的局部性质, 不能反映其整体性质, 一个李群对应一个李代数, 而一个李代数可以对应多个李群.

定义 3.2.1 (结构常数)

设 G 是一个 r 维李群, 取定幺元 e 的一个邻域 U , 在 U 中取定坐标系 $\{U, \varphi\}$ 并取 e 为坐标原点:

$$\varphi(e) = (0, 0, \dots, 0) \quad (3.40)$$

对于其的单参数子群, 我们有

$$\begin{cases} \gamma_j(t), & j = 1, 2, \dots, r \\ \varphi(\gamma_j(t)) = \underbrace{(0, \dots, 0, t, 0, \dots, 0)}_{(j-1)\text{个零}} \end{cases} \quad (3.41)$$

为其 r 条坐标曲线.

以 $X_j = \gamma'_j(0), j = 1, 2, \dots, r$ 记为其在幺元处的切向量. 即 $X_j \in T_e(G) = \mathfrak{g}, j = 1, 2, \dots, r$. 显然, $\{X_1, X_2, \dots, X_r\}$ 可取作为向量空间 $T_e(G)$ 的基—— $T_e(G)$ 中任一向量可用它们的线性组合表出. 由于 $[X_i, X_j] \in \mathfrak{g}$, 所以

$$[X_i, X_j] = \sum_{k=1}^r C_{ij}^k X_k \quad i, j = 1, 2, \dots, r \quad (3.42)$$

这 r^3 个数 $\{C_{ij}^k\}, k, i, j = 1, 2, \dots, r$ 称为李群以 $\{X_1, X_2, \dots, X_r\}$ 为基的结构常数.

对于李代数 \mathfrak{g} 中任意向量 X, Y , 有

$$\begin{aligned} X &= \sum_{j=1}^r \xi^j X_j & Y &= \sum_{j=1}^r \eta^j X_j \\ X &\sim (\xi^1, \xi^2, \dots, \xi^r) & Y &\sim (\eta^1, \eta^2, \dots, \eta^r) \\ Z &= [X, Y] = \left[\sum_{j=1}^r \xi^j X_j, \sum_{k=1}^r \eta^k X_k \right] = \sum_{i=1}^r \sum_{j,k=1}^r C_{jk}^i \xi^j \eta^k X_i \end{aligned} \quad (3.43)$$

将 Z 也用坐标表示

$$Z = \sum_{i=1}^r \zeta^i X_i, \quad Z \sim (\zeta^1, \zeta^2, \dots, \zeta^r) \quad (3.44)$$

此时易求出结构常数

$$\zeta^i = \sum_{j,k=1}^r C_{jk}^i \xi^j \eta^k, \quad i = 1, 2, \dots, r \quad (3.45)$$

由此可见, 结构常数可以完全确定一个李代数.

需要强调的是, 结构常数与基的选取有关, 而李代数的一个重要的问题就是如何选取适当的基使结构常数最简单.

或许到此, 你可能还对结构常数一头雾水, 在再次讲解结构常数之前, 我们还是先给出一些基本性质, 并实际算一下结构常数.

$$\begin{aligned} C_{ij}^k &= -C_{ji}^k & i, j, k &= 1, 2, \dots, r \\ \sum_{l=1}^r (C_{ij}^l C_{lk}^m + C_{jk}^l C_{li}^m + C_{ki}^l C_{lj}^m) &= 0 & i, j, k, m &= 1, 2, \dots, r. \end{aligned} \quad (3.46)$$

例题 3.11 我们再次考虑由例题 3.8 给出的群 $T_2 = \left\{ \begin{bmatrix} e^{x_1} & x_2 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \middle| x_1, x_2 \in \mathbb{R} \right\}$, 我们知道 $\gamma_1(t) = \begin{bmatrix} e^t & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \infty < t < \infty$

与 $\gamma_2(t) = \begin{bmatrix} 1 & t \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - \infty < t < \infty$ 是 T_2 的两个单参数子群, 同时也是过幺元的两条曲线, 我们给出在幺元处的切向

量 $X_1 = \gamma'_1(0) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$, $X_2 = \gamma'_2(0) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$, 因此李群 T_2 的李代数 \mathfrak{t}_2 的基由 X_1, X_2 组成, 现在来求结构常数.

$$\begin{aligned} [X_1, X_1] &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} & [X_2, X_2] &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \\ [X_1, X_2] &= \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = X_2. \end{aligned} \quad (3.47)$$

所以, $C_{11}^1 = C_{11}^2 = C_{22}^1 = C_{22}^2 = 0$, $C_{12}^1 = -C_{21}^1 = 0$, $C_{12}^2 = 1$, $C_{21}^2 = -1$.

例题 3.12 我们再次回到 $SO(3)$ 群, 现在我们来求其李代数 $\mathfrak{so}(3)$ 及其结构常数.

我们列出其群元 (绕 x, y, z 的转动)

$$g_x(t) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos t & -\sin t \\ 0 & \sin t & \cos t \end{bmatrix}, \quad g_y(t) = \begin{bmatrix} \cos t & 0 & \sin t \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin t & 0 & \cos t \end{bmatrix}, \quad g_z(t) = \begin{bmatrix} \cos t & -\sin t & 0 \\ \sin t & \cos t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.48)$$

此时, 我们发现, 这是其的三个单参数子群, 而它们在么元处的切向量一并给出

$$I_1 = g'_x(0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad I_2 = g'_y(0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad I_3 = g'_z(0) = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.49)$$

于是 $\{I_1, I_2, I_3\}$ 构成 $SO(3)$ 的李代数 $\mathfrak{so}(3)$ 的一组基, 其李括号为:

$$[I_1, I_2] = I_1 I_2 - I_2 I_1 = I_3, \quad [I_2, I_3] = I_1, \quad [I_3, I_1] = I_2 \quad (3.50)$$

同时得出结构常数 $C_{12}^1 = 0, C_{12}^2 = 0, C_{12}^3 = 1, \dots$.

我们可以发现, 对于这个李括号, 其还等价于三维欧式空间的向量乘法, 我们就得到了简单情况下的李括号的退化情况.

3.2.2 李氏三定理和无穷小变换

1

3.2.3 李群的无穷小生成元

1

3.2.4 典型李群和李代数

1

3.3 角动量理论

3.3.1 量子力学中的无穷小转动

到此为止, 我们还没有用到量子力学概念. 矩阵 R 只是一个 3×3 的正交矩阵, 它作用于写成列矩阵形式的矢量 \mathbf{V} 上. 现在我们必须弄清如何表征量子力学中的转动.

因为转动影响物理系统, 预期转动后系统的态右矢与原来未经转动系统的态右矢有所不同. 给定由一个 3×3 正交矩阵 R 表征的一个转动算符 R , 我们将其与适当的右矢空间里的一个算符 $\mathcal{D}(R)$ 这样联系起来, 使得:

$$|\alpha\rangle_R = \mathcal{D}(R) |\alpha\rangle, \quad \text{tag 3.1.10}$$

其中 $|\alpha\rangle_R$ 和 $|\alpha\rangle$ 分别代表转动后系统和原始系统的右矢^{**}. 注意, 3×3 正交矩阵 R 作用在一个由经典矢量的三个分量构成的一个列矩阵上, 然而, 算符 $\mathcal{D}(R)$ 作用在右矢空间的态矢量上. $\mathcal{D}(R)$ 的矩阵表示一将在随后几节非常详细地研究——依赖所涉及的特定的右矢空间的维数 N . 对于 $N = 2$, 适用于描写没有其他自由度的自旋 $\frac{1}{2}$ 系统, $\mathcal{D}(R)$ 用一个 2×2 矩阵表示; 而对于自旋为 1 的系统, 适当的表示是一个 3×3 的幺正矩阵, 等等.

* 在基础力学中有一个熟悉的例子. 角速度矢量 ω , 它表征转动角在一个无穷小时间间隔内的一个无穷小改变. 遵从矢量加法的通常规则, 包括矢量加法的交换性. 然而, 我们不能认为一个有限的角变化具有这一矢量性质.

** 符号 \mathcal{D} 来自德文的 *Drehung*, 意思是“转动”.

要构建转动算符 $\mathcal{D}(R)$, 最有效的方法仍然是先考查它在一个无穷小转动下的性质. 我们几乎可以猜到必须怎样通过类比来进行. 在我们于 1.6 节和 2.1 节分别研究的平移与时间演化这两种情况下, 适用的无穷小算符都可以用一个厄米算符 G 写成

$$U_\varepsilon = 1 - iG\varepsilon \quad 3.1.11$$

具体说来, 对于沿 x 方向位移 dx' 的无穷小平移取

$$G \rightarrow \frac{p_x}{\hbar}, \quad \varepsilon \rightarrow dx' \quad 3.1.12$$

而对于时间平移 dt 的无穷小时间演化取

$$G \rightarrow \frac{H}{\hbar}, \quad \varepsilon \rightarrow dt \quad 3.1.13$$

由经典力学我们知道角动量是转动的生成元, 就像动量和哈密顿量分别为平移与时间演化的生成元一样. 因此, 我们以这样的方式来定义角动量算符 J_k , 通过在 (3.1.11) 式中让

$$G \rightarrow \frac{J_k}{\hbar}, \quad \varepsilon \rightarrow d\phi \quad 3.1.14$$

得到一个绕第 k 个轴转 $d\phi$ 角的无穷小转动算符. 若 J_k 是厄米的, 无穷小转动算符保证是幺正的, 而且在 $d\phi \rightarrow 0$ 的极限下约化为单位算符. 更普遍地, 对一个绕着由单位矢量 $\hat{\mathbf{n}}$ 表征的方向转无穷小 $d\phi$ 角的转动, 我们有

$$\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, d\phi) = 1 - i \left(\frac{\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\hbar} \right) d\phi \quad 3.1.15$$

在本书中, 我们强调并没有把角动量算符定义为 $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$. 这一点很重要, 因为自旋角动量——我们的普遍形式也适用于它——与 x_i 和 p_j 毫无关系. 换个方式讲, 在经典力学中, 可以证明定义为 $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 的角动量是转动的生成元; 相比之下, 在量子力学中我们定义 \mathbf{J} 使得一个无穷小转动算符取 (3.1.15) 式形式.

一个有限转动可以通过组合相继地绕同一个轴的无穷小转动得到. 例如, 如果我们对于一个绕 z 轴转 ϕ 角的有限转动感兴趣, 我们考虑

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_z(\phi) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - i \left(\frac{J_z}{\hbar} \right) \left(\frac{\phi}{N} \right) \right]^N \\ &= \exp \left(\frac{-iJ_z\phi}{\hbar} \right) \quad 3.1.16 \\ &= 1 - \frac{iJ_z\phi}{\hbar} - \frac{J_z^2\phi^2}{2\hbar^2} + \dots \end{aligned}$$

为了求得角动量对易关系, 我们还需要一个概念. 正如我们前面评注的, 对每个用 3×3 正交矩阵 R 表示的转动 R , 在恰当的右矢空间中都存在一个转动算符 $\mathcal{D}(R)$. 我们进一步假设 $\mathcal{D}(R)$ 与 R 有相同的群性质

$$\text{单位元: } R \cdot 1 = R \Rightarrow \mathcal{D}(R) \cdot 1 = \mathcal{D}(R) \quad \text{tag 3.1.17a}$$

$$\text{封闭性: } R_1 R_2 = R_3 \Rightarrow \mathcal{D}(R_1) \mathcal{D}(R_2) = \mathcal{D}(R_3) \quad (3.1.17b)$$

$$\text{逆: } R R^{-1} = 1 \Rightarrow \mathcal{D}(R) \mathcal{D}^{-1}(R) = 1$$

(3.1.17c)

$$R^{-1} R = 1 \Rightarrow \mathcal{D}^{-1}(R) \mathcal{D}(R) = 1$$

$$\text{结合律: } R_1 (R_2 R_3) = (R_1 R_2) R_3 = R_1 R_2 R_3$$

$$\Rightarrow \mathcal{D}(R_1) [\mathcal{D}(R_2) \mathcal{D}(R_3)] \quad \text{tag 3.1.17d}$$

$$= [\mathcal{D}(R_1) \mathcal{D}(R_2)] \mathcal{D}(R_3)$$

$$= \mathcal{D}(R_1) \mathcal{D}(R_2) \mathcal{D}(R_3).$$

现在让我们返回到基于 R 矩阵写成的转动操作 (3.1.9) 式的基本对易关系. 它的转动算符类似公式为

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{iJ_x \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) \left(1 - \frac{iJ_y \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) \quad \text{tag 3.1.18} \\ & - \left(1 - \frac{iJ_y \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_y^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) \left(1 - \frac{iJ_x \varepsilon}{\hbar} - \frac{J_x^2 \varepsilon^2}{2\hbar^2}\right) = 1 - \frac{iJ_z \varepsilon^2}{\hbar} - 1. \end{aligned}$$

ε 量级的项已自动地消掉了. 让 (3.1.18) 式两边的 ε^2 量级的项相等, 我们得到

$$[J_x, J_y] = i\hbar J_z, \quad \text{tag 3.1.19}$$

将这种做法重复用于绕其他轴的转动可得到

$$[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k, \quad \text{tag 3.1.20}$$

该式称为角动量的基本对易关系.

一般说来, 当无穷小变换的生成元不对易时, 相应操作的群称为非阿贝尔群. 基于 (3.1.20) 式, 三维转动群是非阿贝尔的. 相比之下, 三维平移群是阿贝尔的, 因为即使 $i \neq j$, p_i 和 p_j 也是对易的.

注意在获得对易关系 (3.1.20) 时, 使用了以下两个概念

1. J_k 是绕第 k 轴转动的生成元.
2. 绕不同轴的转动不对易.

毫不夸张地说, 对易关系 (3.1.20) 式以一种紧凑的方式归纳了三维转动的一切基本性质.

3.3.2 自旋 $\frac{1}{2}$ 的转动算符

角动量对易关系 (3.1.20) 可以实现的最低维数 $N = 2$. 在第 1 章的习题 1.8 中读者已经核对过. 由

$$S_x = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \{(|+\rangle\langle-|) + (|- \rangle\langle+|)\},$$

$$S_y = \left(\frac{i\hbar}{2}\right) \{- (|+\rangle\langle-|) + (|- \rangle\langle+|)\}, \text{tag3.2.1}$$

$$S_z = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \{(|+\rangle\langle+|) - (|- \rangle\langle-|)\}$$

定义的算符满足把 J_k 换成 S_k 的对易关系 (3.1.20) 式. 自然界利用 (3.1.20) 式的最低维实现不是先验显然的, 但许多实验——从原子光谱到核磁共振——足以让我们相信这就是实际的情况.

考虑一个绕 z 轴转有限角度 ϕ 的转动. 如果一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的右矢在转动前由 $|\alpha\rangle$ 给定, 则转动后的右矢为

$$|\alpha\rangle_R = D_z(\phi)|\alpha\rangle \text{tag3.2.2}$$

其中

$$D_z(\phi) = \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right). \text{tag3.2.3}$$

为了看到这个算符真的转动了这个物理系统, 让我们看一看它对于 $\langle S_x \rangle$ 的影响. 转动之下这个期待值变化如下

$$\langle S_x \rangle \rightarrow_R \langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle \alpha | D_z^\dagger(\phi) S_x D_z(\phi) | \alpha \rangle, \text{tag3.2.4}$$

因此我们必须计算

$$\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) S_x \exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right). \text{tag3.2.5}$$

为了教学原因, 我们用两种不同的方法计算它.

推导 1: 这里我们使用由 (3.2.1) 式给出的 S_x 的具体形式. 于是对 (3.2.5) 式, 我们得到

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\hbar}{2}\right) \exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) \{(|+\rangle\langle-|) + (|- \rangle\langle+|)\} \exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\right) \left(e^{i\phi/2} |+\rangle \langle-| e^{i\phi/2} + e^{-i\phi/2} |- \rangle \langle+| e^{-i\phi/2} \right) \text{tag3.2.6} \\ &= \frac{\hbar}{2} [\{(|+\rangle\langle-|) + (|- \rangle\langle+|)\} \cos \phi + i\{(|+\rangle\langle-|) - (|- \rangle\langle+|)\} \sin \phi] \\ &= S_x \cos \phi - S_y \sin \phi. \end{aligned}$$

推导 2: 换一种做法, 我们可以使用 (2.3.47) 式计算 (3.2.5) 式:

$$\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) S_x \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) = S_x + \left(\frac{i\phi}{\hbar}\right) \underbrace{[S_z, S_x]}_{i\hbar S_y}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{1}{2!} \right) \left(\frac{i\phi}{\hbar} \right)^2 \underbrace{\left[S_z, \underbrace{[S_z, S_x]}_{i\hbar S_y} \right]}_{h^2 S_x} + \left(\frac{1}{3!} \right) \left(\frac{i\phi}{\hbar} \right) \underbrace{\left[S_z, \underbrace{[S_z, [S_x, [S_x]]}_{h^2 S_x} \right]}_{ih^3 S_y} + \cdots \\
& = S_x \left[1 - \frac{\phi^2}{2!} + \cdots \right] - S_y \left[\phi - \frac{\phi^3}{3!} + \cdots \right] \\
& = S_x \cos \phi - S_y \sin \phi. \text{tag3.2.7}
\end{aligned}$$

注意, 在推导 2 中我们只用到了 S_i 的对易关系, 所以这个方法可被推广到角动量高于 $\frac{1}{2}$ 的系统的转动. 对于自旋 $\frac{1}{2}$, 这两种方法都给出

$$\langle S_x \rangle \rightarrow_R \langle \alpha | S_x | \alpha \rangle_R = \langle S_x \rangle \cos \phi - \langle S_y \rangle \sin \phi, \text{tag3.2.8}$$

其中, 无下标的期待值被理解是对 (老的) 未转动的系统取的. 类似地,

$$\langle S_y \rangle \rightarrow \langle S_y \rangle \cos \phi + \langle S_x \rangle \sin \phi. \text{tag3.2.9}$$

至于 S_z 的期待值, 由于 S_z 与 $\mathcal{D}_z(\phi)$ 对易, 因而无变化

$$\langle S_z \rangle \rightarrow \langle S_z \rangle. \text{tag3.2.10}$$

关系式 (3.2.8)、(3.2.9) 和 (3.2.10) 是十分合理的. 它们表明当转动算符 (3.2.3)

作用于态右矢时, 它的确把 \mathbf{S} 的期待值绕 z 轴转动了 ϕ 角. 换句话说, 自旋算符期待值的行为仿佛是在旋转

$$\langle S_k \rangle \rightarrow \sum_l R_{kl} \langle S_l \rangle, \text{tag3.2.11}$$

之下的经典矢量, 其中 R_{kl} 是所涉及问题中确定转动的 3×3 正交矩阵 R 的矩阵元. 从我们的推导 2 应该很清楚, 这个性质不只限于自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的自旋算符. 一般地说, 在转动下, 我们有

$$\langle J_k \rangle \rightarrow \sum_l R_{kl} \langle J_l \rangle \text{tag3.2.12}$$

其中 J_k 是满足角动量对易关系 (3.1.20) 式的转动生成元. 稍后, 将证明这种关系可以进一步推广到任何矢量算符.

至此每件事情都在预料之中. 但现在, 准备给你一个惊喜! 稍微仔细地考查一下转动算符 (3.2.3) 式在一般的态右矢

$$|\alpha\rangle = |+\rangle\langle + | \alpha \rangle + |-\rangle\langle - | \alpha \rangle, \text{tag3.2.13}$$

上的效应. 我们看到

$$\exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right)|\alpha\rangle = e^{-i\phi/2}|+\rangle\langle + | \alpha \rangle + e^{i\phi/2}|-\rangle\langle - | \alpha \rangle. \text{tag3.2.14}$$

在这里, 半角 $\phi/2$ 的出现具有一个很意思的后果.

让我们考虑一个转 2π 角的转动. 那时我们有

$$|\alpha\rangle_{R_z(2\pi)} \rightarrow -|\alpha\rangle. \text{tag3.2.15}$$

因此, 转了 360° 以后的态右矢与原来的右矢差了一个负号. 我们需要一个 720° ($\phi = 4\pi$) 的转动, 才能回到具有正号的同样的右矢. 注意, 对于 \mathbf{S} 的期待值, 这个负号消失了, 因为 \mathbf{S} 被 $|\alpha\rangle$ 和 $\langle\alpha|$ 夹在中间, 而这两个右矢和左矢都改变了符号. 这个负号能被观测到吗? 在讨论自旋进动之后, 我们将给出这个有趣问题的答案.

3.3.3 再谈自旋进动

现在用一种新的观点来处理在 2.1 节已经讨论过的自旋进动问题. 回想一下这个问题的基本哈密顿量为

$$H = -\left(\frac{e}{m_e c}\right) \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \omega S_z, \text{tag3.2.16}$$

其中

$$\omega \equiv \frac{|e| B}{m_e c}. \text{tag3.2.17}$$

基于该哈密顿量的时间演化算符由

$$u(t, 0) = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{-iS_z \omega t}{\hbar}\right). \text{tag3.2.18}$$

给出. 把这个方程与 (3.2.3) 式比较, 我们看到在 (3.2.3) 式中令 ϕ 等于 ωt , 这个时间演化算符就与 (3.2.3) 式中的转动算符精确地相同. 这样, 我们就可立即看到为什么这个哈密顿量引起自旋进动. 重新改写 (3.2.8) 式、(3.2.9) 式和 (3.2.10) 式, 我们得到

$$\langle S_x \rangle_t = \langle S_x \rangle_{t=0} \cos \omega t - \langle S_y \rangle_{t=0} \sin \omega t, \quad (3.2.19a)$$

$$\langle S_y \rangle_t = \langle S_y \rangle_{t=0} \cos \omega t + \langle S_x \rangle_{t=0} \sin \omega t, \quad (3.2.19b)$$

$$\langle S_z \rangle_t = \langle S_z \rangle_{t=0}. \quad (3.2.19c)$$

在 $t = 2\pi/\omega$ 之后, 自旋回到原始方向.

这组方程可以用于讨论一个 μ 子的自旋进动, 该粒子是一个类电子的粒子, 其重量是电子的 210 倍. μ 子的磁矩可以从其他一些实验——例如, μ 子偶素, 一个正的 μ 子与一个电子的束缚态的超精细分裂——确定, 结果正如自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的狄拉克相对论理论所预期的那样为 $e\hbar/2m_\mu c$. (在这里我们将忽略非常小的、来自量子场论效应的修正.) 知道了磁矩我们就能预言进动的角频率. 因此, (3.2.19) 式就可以, 事实上已经, 被实验检验 (见图 2.1). 实际上, 当外磁场引起自旋进动时, 可利用来自 μ 衰变的电子倾向于优先沿 μ 子自旋反方向发射来分析自旋的方向.

现在让我们来看一下态右矢自身的时间演化. 假定初始时 ($t = 0$) 右矢由 (3.2.13) 式给定, 在 t 时刻之后我们得到

$$|\alpha, t = 0; t\rangle = e^{-i\omega t/2} |+\rangle \langle + | \alpha \rangle + e^{+i\omega t/2} |-\rangle \langle - | \alpha \rangle. \text{tag3.2.20}$$

表示式 (3.2.20) 在 $t = 2\pi/\omega$ 得到了一个负号, 我们必须等到 $t = 4\pi/\omega$ 时才能回到有同样符号的原始的态右矢. 总之, 态右矢的周期是自旋进动周期的两倍长:

$$\tau_{\text{进动}} = \frac{2\pi}{\omega},$$

(3. 2.21a)

$$\tau_{\text{态右矢}} = \frac{4\pi}{\omega}, \text{tag3.2.21b}$$

3.3.4 泡利二分量形式

利用泡利在 1926 年引入的二分量旋量形式, 可以很方便地处理自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的态右矢. 在 1.3 节我们学会了怎样使用一个列 (行) 矩阵表示一个右矢 (左矢); 我们所要做的是把基于某个指定基右矢的展开系数安排到一个列 (行) 矩阵中. 在自旋 $\frac{1}{2}$ 的情况下, 对于基右矢和基左矢, 我们有

$$\begin{vmatrix} + \rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_+ \quad \begin{vmatrix} - \rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_- \end{vmatrix} \text{tag3.2.26}$$

$$\langle + | \doteq (1, 0) = \chi_+^\dagger \quad \langle - | \doteq (0, 1) = \chi_-^\dagger$$

和对一个任意的态右矢和相应的态左矢有

$$|\alpha\rangle = |+\rangle\langle +|\alpha\rangle + |-\rangle\langle -|\alpha\rangle \doteq \begin{pmatrix} \langle +|\alpha\rangle \\ \langle -|\alpha\rangle \end{pmatrix} \text{tag3.2.27a}$$

和

$$\langle \alpha | = \langle \alpha | + \rangle \langle + | + \langle \alpha | - \rangle \langle - | \doteq (\langle \alpha | + \rangle, \langle \alpha | - \rangle) \text{tag3.2.27b}$$

列矩阵 (3.2.27a) 式称为二分量旋量, 记为

$$\begin{aligned} \chi &= \begin{pmatrix} \langle +|\alpha\rangle \\ \langle -|\alpha\rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} c_+ \\ c_- \end{pmatrix} \\ &= c_+\chi_+ + c_-\chi_-, \text{tag3.2.28} \end{aligned}$$

其中 c_+ 和 c_- 一般都是复数. 对于 χ^\dagger 我们有

$$\chi^\dagger = (\langle \alpha | + \rangle, \langle \alpha | - \rangle) = (c_+^*, c_-^*), \text{tag3.2.29}$$

矩阵元 $\langle \pm | S_k | \pm \rangle$ 和 $\langle \pm | S_k | - \rangle$, 除去 $\hbar/2$ 之外, 被设定等于那些 2×2 的、以泡利矩阵著称的矩阵 σ_k . 我们确定

$$\langle \pm | S_k | \pm \rangle \equiv \left(\frac{\hbar}{2}\right) (\sigma_k)_{\pm, \pm}, \quad \langle \pm | S_k | - \rangle \equiv \left(\frac{\hbar}{2}\right) (\sigma_k)_{\pm, -}. \text{tag3.2.30}$$

现在我们可以用 χ 和 σ_k 写出期待值 $\langle S_k \rangle$

$$\begin{aligned} \langle S_k \rangle &= \langle \alpha | S_k | \alpha \rangle = \sum_{a'=\pm, -} \sum_{a''=\pm, -} \langle \alpha | a' \rangle \langle a' | S_k | a'' \rangle \langle a'' | \alpha \rangle \text{tag3.2.31} \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\right) \chi^\dagger \sigma_k \chi \end{aligned}$$

其中在最后一行用到了矩阵乘法的常用规则. 显然我们可从 (3.2.1) 和 (3.2.30) 式看到

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \text{tag3.2.32}$$

其中下标 1, 2 和 3 分别代表 x, y 和 z .

下面列出泡利矩阵的一些性质. 首先,

$$\sigma_i^2 = 1$$

(3. 2.33a)

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0, \text{ 对于 } i \neq j,$$

(3. 2.33 b)

其中 (3.2.33a) 式的右边被理解为 2×2 单位矩阵. 当然, 这两个关系式等价于反对易关系

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}, \text{tag3.2.34}$$

还有对易关系

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \text{tag3.2.35}$$

可以看出, 它显然就是角动量对易关系 (3.1.20) 的 2×2 矩阵实现. 比较 (3.2.34) 式和 (3.2.35) 式, 我们可以得到

$$\sigma_1 \sigma_2 = -\sigma_2 \sigma_1 = i\sigma_3 \cdots \text{tag3.2.36}$$

还要注意

$$\sigma_i^\dagger = \sigma_i,$$

(3. 2.37a)

$$\det(\sigma_i) = -1, \text{tag3.2.37b}$$

$$\text{Tr}(\sigma_i) = 0.$$

(3. 2.37c)

现在考虑 $\sigma \cdot \mathbf{a}$, 其中 \mathbf{a} 是一个三维矢量. 要把这个量理解为实际上是一个 2×2 矩阵. 于是

$$\begin{aligned} \sigma \cdot \mathbf{a} &\equiv \sum_k a_k \sigma_k \\ &= \begin{pmatrix} +a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & -a_3 \end{pmatrix} \text{tag3.2.38} \end{aligned}$$

还有一个非常重要的恒等式

$$(\sigma \cdot \mathbf{a})(\sigma \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\sigma \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}). \text{tag3.2.39}$$

为证明该式, 所需的是反对易关系和对易关系, 它们分别为 (3.2.34) 式与 (3.2.35) 式:

$$\begin{aligned}\sum_j \sigma_j a \sum_k \sigma_k b_k &= \sum_j \sum_k \left(\frac{1}{2} \{ \sigma_j, \sigma_k \} + \frac{1}{2} [\sigma_j, \sigma_k] \right) a_j b_k \\ &= \sum_j \sum_k (\delta_{jk} + i \varepsilon_{jkl} \sigma_l) a_j b_k \tag{3.2.40} \\ &= \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}).\end{aligned}$$

如果 \mathbf{a} 的分量都是实的, 我们有

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})^2 = |\mathbf{a}|^2, \tag{3.2.41}$$

其中 $|\mathbf{a}|$ 是矢量 \mathbf{a} 的长度.

3.3.5 二分量形式中的转动

现在研究转动算符 $\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, \phi)$ 的 2×2 矩阵表示. 如下

$$\exp\left(\frac{-i\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right) \doteq \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right). \tag{3.2.42}$$

利用从 (3.2.41) 式得到的

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}})^n = \begin{cases} 1 & \text{对于偶数的 } n, \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} & \text{对于奇数的 } n, \end{cases} \tag{3.2.43}$$

我们可以写出

$$\begin{aligned}\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right) &= \left[1 - \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2}{2!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^2 + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}})^4}{4!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^4 - \dots \right] \\ &\quad - i \left[(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \frac{\phi}{2} - \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}})^3}{3!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^3 + \dots \right] \tag{3.2.44} \\ &= 1 \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} \sin\left(\frac{\phi}{2}\right).\end{aligned}$$

显然, 以 2×2 形式我们有

$$\exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i n_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (-i n_x - n_y) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ (-i n_x + n_y) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + i n_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix}, \tag{3.2.45}$$

正像算符 $\exp(-i\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi/\hbar)$ 作用在态右矢 $|\alpha\rangle$ 上一样, 2×2 矩阵 $\exp(-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi/2)$ 作用于一个二分量旋量 χ 上. 在转动之下, 我们使 χ 发生如下改变:

$$\chi \rightarrow \exp\left(\frac{-i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right) \chi \tag{3.2.46}$$

另一方面, σ_k 自身在转动下保持不变. 因此, 严格地说, 尽管 $\boldsymbol{\sigma}$ 的外貌像矢量, 人们却不把它看成一个矢量; 而是把遵从矢量的变换性质的 $\chi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \chi$ 看成一个矢量:

$$\chi^\dagger \sigma_k \chi \rightarrow \sum_l R_{kl} \chi^\dagger \sigma_l \chi \quad \text{tag 3.2.47}$$

它的明确证明可以利用

$$\exp\left(\frac{i\sigma_3\phi}{2}\right) \sigma_1 \exp\left(\frac{-i\sigma_3\phi}{2}\right) = \sigma_1 \cos \phi - \sigma_2 \sin \phi \quad \text{tag 3.2.48}$$

等给出, 它是 (3.2.6) 式的 2×2 矩阵类比.

在利用右矢形式讨论 2π 转动时, 我们曾经看到一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的右矢 $|\alpha\rangle$ 变成了 $-|\alpha\rangle$. 这个说法的 2×2 类比是

$$\exp\left(\frac{-i\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right) \Big|_{\phi=2\pi} = -1, \quad \text{对任何 } \hat{\mathbf{n}}, \quad \text{tag 3.2.49}$$

它从 (3.2.44) 式显然可得.

作为转动矩阵 (3.2.45) 式的一个有益的应用, 让我们看一下怎样构建本征值为 $+1$ 的 $\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 的本征旋量, 其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 是某特定方向的一个单位矢量. 我们的目的是构建一个满足

$$\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}} \chi = \chi \quad \text{tag 3.2.50}$$

的 χ . 换句话说, 我们要寻找由

$$\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} \left| \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}; + \right\rangle = \left(\frac{\hbar}{2} \right) \left| \mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}; + \right\rangle. \quad \text{tag 3.2.51}$$

定义的 $|\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}; +\rangle$ 的二分量列矩阵表示. 实际上, 该式可作为一个直接的本征值问题来求解 (见第 1 章的习题 1.9), 但是这里, 我们给出另一种可选的基于转动矩阵 (3.2.45) 的方法.

图 3.3 构建 $\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 的本征旋量

设表征 $\hat{\mathbf{n}}$ 的极角与方位角分别为 β 和 α . 我们从表示自旋向上态的二分量旋量 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 开始. 给定这个旋量之后, 我们先绕 y 轴转 β 角; 随后绕 z 轴转 α 角. 然后我们看到, 所期待的自旋态就得到了, 见图 3.3. 用泡利旋量语言, 这一系列操作等价于把 $\exp(-i\sigma_2\beta/2)$ 作用于 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, 然后再用 $\exp(-i\sigma_3\alpha/2)$ 作用. 净结果是

$$\begin{aligned} \chi &= \left[\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i\sigma_3 \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \right] \left[\cos\left(\frac{\beta}{2}\right) - i\sigma_2 \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) - i \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) + i \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) e^{-i\alpha/2} \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}. \quad \text{tag 3.2.52} \end{aligned}$$

如果我们意识到上分量和下分量的共同相位是没有什么物理意义的话, 则上式与第 1 章的习题 1.9 是完全一致的.

3.4 角动量的本征值和本征态

到现在为止, 关于角动量的讨论仅限于维数 $N = 2$ 的自旋 $\frac{1}{2}$ 系统. 在这一节以及其后的几节, 研究更一般的角动量态. 为此, 首先求出 \mathbf{J}^2 和 J_z 的本征值和本征右矢, 然后推导角动量算符矩阵元的表示式, 它们最早由玻恩, 海森伯和约当在 1926 年的文章中给出.

3.4.1 对易关系和阶梯算符

将要做的每一件事都是由角动量对易关系 (3.1.20) 式推出来的, 在那里我们可回顾 J_i 被定义为无穷小转动的生成元. 从这些基本对易关系导出的第一个重要性质是存在一个新的算符 \mathbf{J}^2 , 它的定义为

$$\mathbf{J}^2 \equiv J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z, \text{tag3.5.1}$$

它与每一个 J_k 都对易:

$$[\mathbf{J}^2, J_k] = 0, (k = 1, 2, 3). \text{tag3.5.2}$$

为了证明上式, 看一下 $k = 3$ 的情况:

$$[J_x J_x + J_y J_y + J_z J_z, J_z] = J_x [J_x, J_z] + [J_x, J_z] J_x + J_y [J_y, J_z] + [J_y, J_z] J_y$$

$$= J_x (-i\hbar J_y) + (-i\hbar J_y) J_x + J_y (i\hbar J_x) + (i\hbar J_x) J_y$$

$$= 0. \text{tag3.5.3}$$

对 $k = 1$ 或 2 情况的证明可以从指标的循环置换 ($1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 1$) 得到. 因为 J_x, J_y 和 J_z 彼此不对易, 所以只能选其中之一作为与 \mathbf{J}^2 同时对角化的可观测量. 按照惯例, 我们选取 J_z ...

接下来求 \mathbf{J}^2 和 J_z 的共同本征右矢. 用 a 和 b 分别代表 \mathbf{J}^2 和 J_z 的本征值:

$$\mathbf{J}^2 |a, b\rangle = a |a, b\rangle$$

(3.5.4a)

$$J_z |a, b\rangle = b |a, b\rangle$$

(3.5.4b)

要确定 a 和 b 的允许值, 最方便的是使用被称为阶梯算符的非厄米算符

$$J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y \text{tag3.5.5}$$

而不用 J_x 和 J_y . 它们满足对易关系

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$$

(3.5.6a)

和

$$[J_z, J_{\pm}] = \pm\hbar J_{\pm},$$

(3.5.6b)

上述二式可以很容易由 (3.1.20) 式得到. 还要注意

$$[\mathbf{J}^2, J_{\pm}] = 0, \text{tag3.5.7}$$

它是 (3.5.2) 式的明显结果.

J_{\pm} 的物理意义是什么呢? 要回答这个问题, 先考查 J_z 如何作用于 $J_{\pm}|a, b\rangle$:

$$\begin{aligned} J_z (J_{\pm}|a, b\rangle) &= ([J_z, J_{\pm}] + J_{\pm} J_z) |a, b\rangle \tag{3.5.8} \\ &= (b \pm \hbar) (J_{\pm}|a, b\rangle), \end{aligned}$$

其中用到了 (3.5.6b) 式. 换句话说, 如果把 J_+ (J_-) 作用于 J_z 的一个本征右矢上, 作为结果的右矢仍然是 J_z 的一个本征右矢, 除了其本征值增加 (减少) 了一个 \hbar 单位. 所以现在明白了为什么 J_{\pm} 一它在 J_z 本征值的“阶梯”上向上 (向下) 迈了一步——以阶梯算符著称.

现在先离题回忆一下, (3.5.6b) 式中的对易关系让人想起在前几章遇到的一些对易关系. 在讨论平移算符 $\mathcal{T}(1)$ 时, 我们有

$$[x_i, \mathcal{T}(\mathbf{I})] = l_i \mathcal{T}(\mathbf{I}), \tag{3.5.9}$$

而在讨论简谐振子时, 有

$$[N, a^{\dagger}] = a^{\dagger}, [N, a] = -a. \tag{3.5.10}$$

可以看到 (3.5.9) 式和 (3.5.10) 式都有着类似于 (3.5.6b) 式的结构. 平移算符的物理解释是, 它把位置算符 \mathbf{x} 的本征值改变了 1, 这种作用方式与阶梯算符 J_+ 使 J_z 本征值的改变了一个单位 \hbar 的方式差不多相同. 同样地, 简谐振子的产生算符 a^{\dagger} 使粒子数算符 N 的本征值增加了一个单位.

尽管 J_{\pm} 使 J_z 的本征值改变了一个 \hbar 的单位, 它并不改变 \mathbf{J}^2 的本征值:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 (J_{\pm}|a, b\rangle) &= J_{\pm} \mathbf{J}^2 |a, b\rangle \tag{3.5.11} \\ &= a (J_{\pm}|a, b\rangle), \end{aligned}$$

其中用到了 (3.5.7) 式. 总而言之, $J_{\pm}|a, b\rangle$ 是 \mathbf{J}^2 和 J_z 的共同本征右矢, 其本征值为 a 和 $b \pm \hbar$. 可以写成

$$J_{\pm}|a, b\rangle = c_{\pm}|a, b \pm \hbar\rangle, \tag{3.5.12}$$

其中比例常数 c_{\pm} 将稍后由角动量本征右矢的归一化要求确定.

3.4.2 \mathbf{J}^2 和 J_z 的本征值

现在有了构造角动量本征右矢并研究它们的本征值谱所需要的工具. 假定我们把 J_+ 连续地, 比如 n 次, 作用于 \mathbf{J}^2 和 J_z 的共同本征右矢上. 则得到 \mathbf{J}^2 和 J_z 的另一个本征右矢, 其 J_z 本征值增加了 $n\hbar$, 同时 \mathbf{J}^2 的本征值不变. 然而这个过程不可能无限地继续下去. 结果是, 对于一个给定的 (\mathbf{J}^2 本征值) a , 存在一个 b (J_z 本征值) 的上限:

$$a \geq b^2. \tag{3.5.13}$$

为证明这一说法, 首先注意

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 - J_z^2 &= \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) \tag{3.5.14} \\ &= \frac{1}{2} (J_+ J_+^{\dagger} + J_+^{\dagger} J_+). \end{aligned}$$

既然因为

$$J_+^+ |a, b\rangle \stackrel{DC}{\leftrightarrow} \langle a, b | J_+, J_+ | a, b\rangle \stackrel{DC}{\leftrightarrow} \langle a, b | J_+^+ \tag{3.5.15}$$

$J_+ J_+^+$ 和 $J_+^+ J_+$ 必须有非负的期待值, 于是

$$\langle a, b | (\mathbf{J}^2 - J_z^2) | a, b \rangle \geq 0, \tag{3.5.16}$$

反过来, 它暗含着 (3.5.13) 式. 因此, 一定存在一个 b , 使

$$J_+ |a, b_{\text{最大}}\rangle = 0. \tag{3.5.17}$$

换句话说, b 的本征值不可能增加到超过 $b_{\mathbf{R}\star}$ 的值. 现在, (3.5.17) 还意味着

$$J_- J_+ |a, b_{\text{最大}}\rangle = 0. \tag{3.5.18}$$

但是

$$\begin{aligned} J_- J_+ &= J_x^2 + J_y^2 - i(J_y J_x - J_x J_y) \tag{3.5.19} \\ &= \mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z, \end{aligned}$$

因此

$$(\mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z) |a, b_{\text{最大}}\rangle = 0. \tag{3.5.20}$$

因为 $|a, b\rangle$ 本身不是一个零矢量, 这个关系仅当下式被满足时才是可能的:

$$a - b_{\text{最大}}^2 - b_{\text{最大}} \hbar = 0 \tag{3.5.21}$$

或

$$a = b_{\text{最大}} (b_{\text{最大}} + \hbar). \tag{3.5.22}$$

以类似的方式, 从 (3.5.13) 式推断, 一定还存在一个 $b_{\text{最小}}$, 使得

$$J_- |a, b_{\text{最小}}\rangle = 0. \tag{3.5.23}$$

与 (3.5.19) 式类似, 通过把 $J_+ J_-$ 写作

$$J_+ J_- = \mathbf{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z \tag{3.5.24}$$

得到:

$$a = b_{\text{最小}} (b_{\text{最小}} - \hbar), \tag{3.5.25}$$

比较 (3.5.22) 式与 (3.5.25) 式, 得出

$$b_{\text{最大}} = -b_{\text{最小}}, \tag{3.5.26}$$

由于 $b_{\text{最大}}$ 为正值, 于是 b 的允许值处在以下范围之内:

$$-b \leq b \leq b_{\text{最大}} \quad \text{tag3.5.27}$$

显然通过把 J_+ 连续作用于 $|a, b_{\text{最小}}\rangle$ 有限次, 一定能够达到 $|a, b_{\text{最大}}\rangle$. 因此有

$$b_{\text{最大}} = b_{\text{最小}} + n\hbar, \quad \text{tag3.5.28}$$

其中 n 是某个整数. 作为结果, 我们得到

$$b_{\text{最大}} = \frac{n\hbar}{2}. \quad \text{tag3.5.29}$$

更为传统的做法是代替 $b_{\text{最大}}$ 使用定义为 $b_{\text{最大}}/\hbar$ 的 j , 所以

$$j = \frac{n}{2}. \quad \text{tag3.5.30}$$

J_z 的最大本征值为 $j\hbar$, 其中 j 既可以是一个整数, 也可以是一个半奇数. (译者注: 原书为半整数. 显然不够确切.) 方程 (3.5.22) 式意味着 \mathbf{J}^2 的本征值由

$$a = \hbar^2 j(j+1). \quad \text{tag3.5.31}$$

给定. 还定义一个 m , 使得

$$b \equiv m\hbar. \quad \text{tag3.5.32}$$

若 j 是一个整数, 则所有的 m 值都是整数; 若 j 是一个半奇数, 则所有的 m 值都是半奇数. 对于一个给定的 j , 允许的 m 值为

$$m = \underbrace{-j, j+1, \dots, j-1, j}_{2j+1 \text{ 个态}}. \quad \text{tag3.5.33}$$

代替 $|a, b\rangle$, 更方便的是用 $|j, m\rangle$ 表示 \mathbf{J}^2 和 J_z 的共同本征右矢. 基本的本征值方程现在为

$$\mathbf{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle$$

(3.5.34a)

和

$$J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle, \quad \text{tag3.5.34b}$$

其中 j 或者为一个整数, 或者为一个半奇数, 而 m 由 (3.5.33) 给定. 非常重要是回忆起为了获得这些结果, 仅用到对易关系 (3.1.20) 式. 在 (3.5.34) 式中显示的角动量量子化, 是角动量对易关系的一个直接后果, 该对易关系又是由转动的性质以及作为转动生成元 J_k 的定义一起推导出来的.

3.4.3 角动量算符的矩阵元

下面来求各种角动量算符的矩阵元. 假定 $|j, m\rangle$ 已被归一化, 由 (3.5.34) 式显然有

$$\langle j', m' | \mathbf{J}^2 | j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 \delta_{j'j} \delta_{m'm}$$

(3. 5.35a)

和

$$\langle j', m' | J_z | j, m \rangle = m \hbar \delta_{j'j} \delta_{m'm} . \text{tag3.5.35b}$$

为了获得 J_{\pm} 的矩阵元, 首先考虑

$$\begin{aligned} \langle j, m | J_+ J_+ | j, m \rangle &= \langle j, m | (\mathbf{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z) | j, m \rangle \text{tag3.5.36} \\ &= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 - m] . \end{aligned}$$

由于 $J_+ | j, m \rangle$ 必须和 $| j, m+1 \rangle$ (已归一) 在最多差一个常数因子的情况下相同 [见 (3.5.12) 式], 因此

$$J_+ | j, m \rangle = c_{jm}^+ | j, m+1 \rangle . \text{tag3.5.37}$$

与 (3.5.36) 式的比较将导致

$$\begin{aligned} |c_{jm}^+|^2 &= \hbar^2 [j(j+1) - m(m+1)] \text{tag3.5.38} \\ &= \hbar^2 (j-m)(j+m+1) . \end{aligned}$$

这样, 在最多差一个任意相因子的情况下确定了 c_{jm}^+ . 通常的惯例是选 c_{jm}^+ 为正实数, 于是

$$J_+ | j, m \rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \hbar | j, m+1 \rangle . \text{tag3.5.39}$$

可以类似地导出

$$J_- | j, m \rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \hbar | j, m-1 \rangle . \text{tag3.5.40}$$

最后, J_{\pm} 的矩阵元确定为

$$\langle j', m' | J_{\pm} | j, m \rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \hbar \delta_{j'j} \delta_{m'm \pm 1} . \text{tag3.5.41}$$

3.4.4 转动算符的表示

得到了 J_z 和 J_{\pm} 的矩阵元之后, 就能够研究转动算符 $\mathcal{D}(R)$. 如果一个转动 R 由 $\hat{\mathbf{n}}$ 和 ϕ 确定, 就可以用

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) = \left\langle j, m' \left| \exp \left(\frac{-i \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}} \phi}{\hbar} \right) \right| j, m \right\rangle . \text{tag3.5.42}$$

定义它的矩阵元. 这些矩阵元有时被称为维格纳函数, 它对量子力学中转动的群论性质作出了开拓性贡献的维格纳的名字命名. 这里要注意, 在 (3.5.42) 式中相同的 j 值出现在右矢和左矢中, 不需要考虑不同 j 值的态之间的 $\mathcal{D}(R)$ 矩阵元, 因为它们显而易见都是零. 这是因为 $\mathcal{D}(R) | j, m \rangle^2$ 仍是 \mathbf{J}^2 的具有相同本征值 $j(j+1) \hbar^2$ 的本征态:

$$\mathbf{J}^2 \mathcal{D}(R) | j, m \rangle = \mathcal{D}(R) \mathbf{J}^2 | j, m \rangle \text{tag3.5.43}$$

$$= j(j+1) \hbar^2 [\mathcal{D}(R) | j, m \rangle] ,$$

该式可以直接由 \mathbf{J}^2 与 J_k (因此与 J_k 的任何函数) 对易得到. 简单地说, 转动不改变 j 值, 这是一个非常有用的结果.

在文献中经常把 $\mathcal{D}_{m,m}^{(j)}(R)$ 构成的 $(2j+1) \times (2j+1)$ 矩阵称为转动算符 $\mathcal{D}(R)$ 的 $2j+1$ 维不可约表示. 这意味着, 使用一组适当选择的基, 在不一定由一个单一的 j 值表征的右矢空间上, 对应一个任意转动算符的矩阵可以具有分块对角形式:(3.5.44)

其中有阴影的方块是由 $\mathcal{D}_{m|m}^{(j)}(R)$ 构成的、具有某个确定 j 值的 $(2j+1) \times (2j+1)$ 方阵. 而且, 每个方阵本身不可能通过任何基的选择, 破缺成更小的块.(3.5.45)

由确定的 j 表征的转动矩阵构成一个群. 首先, 单位矩阵是一个群元, 因为对应于没有任何转动 ($\phi = 0$) 的转动矩阵是 $(2j+1) \times (2j+1)$ 的单位矩阵. 其次, 逆也是一个群元, 只不过在不改变转动轴 $\hat{\mathbf{n}}$ 的情况下, 反转了转角 $\phi \rightarrow -\phi$. 第三, 任何两个元的乘积也是一个群元, 明确地有

$$\sum_{m'} \mathcal{D}_{m'm'}^{(j)}(R_1) \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R_2) = \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R_1 R_2), \text{tag3.5.46}$$

其中, 乘积 $R_1 R_2$ 代表一个单一的转动. 注意, 因为相应的转动算符是幺正的, 所以转动矩阵是幺正的, 显然有

$$\mathcal{D}_{m'm}(R^{-1}) = \mathcal{D}_{mm'}^*(R). \text{tag3.5.47}$$

为了领会转动矩阵的物理意义, 从 $|j, m\rangle$ 所代表的一个态出发. 现在转动它:

$$|j, m\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R)|j, m\rangle. \text{tag3.5.48}$$

尽管这个转动操作并不改变 j , 但一般将得到一些不同于原来 m 的 m 值态. 为了得到发现处于 $|j, m'\rangle$ 态的振幅, 只要把转动后的态展开如下

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(R) \begin{vmatrix} j, m \end{vmatrix} &= \sum_{m'} \begin{vmatrix} j, m' \end{vmatrix} \langle j, m' | \mathcal{D}(R) | j, m \rangle \text{tag3.5.49} \\ &= \sum_{m'} |j, m'\rangle \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R), \end{aligned}$$

其中, 在使用完备性关系时, 利用了 $\mathcal{D}(R)$ 只联系具有相同 j 态的特性. 所以, 当原始未转动态由 $|j, m\rangle$ 给出时, 矩阵元 $\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$ 只不过是找到转动后态处于 $|j, m'\rangle$ 的振幅.

在 3.3 节曾看到怎样利用欧拉角表征最一般的转动. 现在考虑一个任意 j (不一定是 $\frac{1}{2}$) 的 (3.3.20) 式的矩阵实现:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \left\langle j, m' \left| \exp\left(\frac{-iJ_z\alpha}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{-iJ_z\gamma}{\hbar}\right) \right| j, m \right\rangle \text{tag3.5.50} \\ &= e^{-i(m'\alpha+m\gamma)} \left\langle j, m' \left| \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) \right| j, m \right\rangle. \end{aligned}$$

注意, 唯一非平庸的部分是中间绕 y 轴的转动, 它混合了不同 m 值的态. 方便的做法是把一个新矩阵 $d^{(j)}(\beta)$ 定义为

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) \equiv \left\langle j, m' \left| \exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) \right| j, m \right\rangle. \text{tag3.5.51}$$

最后, 转向一些实例. $j = \frac{1}{2}$ 的情况已经在 3.3 节求解出. 请参见 (3.3.21) 式的中间矩阵

$$d^{1/2} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix}. \text{tag3.5.52}$$

下一个最简单的是 $j = 1$ 的情况, 将较为详细考虑. 显然, 首先必须求出 J_y 的 3×3 矩阵表示. 因为由 J_{\pm} 定义方程 (3.5.5) 有

$$J_y = \frac{(J_+ - J_-)}{2i}, \text{tag3.5.53}$$

可以利用 (3.5.41) 式得到

$$m = 1 \quad m = 0 \quad m = -1$$

$$J_y^{(j=1)} = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2}i & 0 \\ \sqrt{2}i & 0 & -\sqrt{2}i \\ 0 & \sqrt{2}i & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} m' = 1 \\ m' = 0 \\ m' = -1 \end{matrix} \quad \text{tag3.5.54}$$

下一个任务是求 $\exp(-iJ_y\beta/\hbar)$ 的泰勒 (Taylor) 展开. 与 $j = \frac{1}{2}$ 的情况不同, $[J_y^{(j=1)}]^2$ 不依赖于 1 和 $J_y^{(j=1)}$. 然而, 很容易求出:

$$\left(\frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}\right)^3 = \frac{J_y^{(j=1)}}{\hbar}. \text{tag3.5.55}$$

于是, 仅对 $j = 1$, 可合理地做如下替换

$$\exp\left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar}\right) \rightarrow 1 - \left(\frac{J_y}{\hbar}\right)^2 (1 - \cos\beta) - i\left(\frac{J_y}{\hbar}\right) \sin\beta, \text{tag3.5.56}$$

读者可以详细地证明它. 具体有

$$d^{(1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2}\right)(1 + \cos\beta) & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1 - \cos\beta) \\ \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \cos\beta & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta \\ \left(\frac{1}{2}\right)(1 - \cos\beta) & \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sin\beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1 + \cos\beta) \end{pmatrix} \text{tag3.5.57}$$

显然, 这种方法对于大的 j 值会很耗时. 别的一些更容易的方法是有可能的, 但是在本书中将不继续讨论它们.

3.5 轨道角动量

通过定义角动量为一个无穷小转动的生成元引入了角动量的概念. 当自旋角动量为零或者可以忽略时, 还有另一种处理角动量问题的方法. 那时, 一个单粒子的角动量 \mathbf{J} 与定义为

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} \text{tag3.6.1}$$

的轨道角动量是一样的. 本节来探讨这两种方法之间的联系.

3.5.1 作为转动生成元的轨道角动量

首先注意到, 由于 \mathbf{x} 和 \mathbf{p} 各分量之间的对易关系, 定义为 (3.6.1) 式的轨道角动量算符满足角动对易关系

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar L_k \text{tag3.6.2}$$

这一点很容易证明如下:

$$[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z]$$

$$= [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z]$$

$$= yp_x [p_z, z] + p_y x [z, p_z] \text{tag3.6.3}$$

$$= i\hbar (xp_y - yp_x)$$

$$= i\hbar L_z$$

$$\vdots$$

其次令

$$1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z = 1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)(xp_y - yp_x) \text{tag3.6.4}$$

作用于一个任意的位本征右矢 $|x', y', z'\rangle$, 以考察它是否可以解释为绕 z 轴旋转 $\delta\phi$ 角的无穷小转动算符. 利用动量是平移生成元, 得到 [见 (1.6.32) 式]

$$\left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right]|x', y', z'\rangle = \left[1 - i\left(\frac{p_y}{\hbar}\right)(\delta\phi x') + i\left(\frac{p_x}{\hbar}\right)(\delta\phi y')\right]|x', y', z'\rangle$$

$$= |x' - y'\delta\phi, y' + x'\delta\phi, z'\rangle. \text{tag3.6.5}$$

如果 L_z 生成一个绕 z 轴的无穷小转动, 则上式正是所预期的结果. 所以, 证明了如果 \mathbf{p} 生成平移, 则 \mathbf{L} 生成转动.

假定一个无自旋粒子的任意物理态的波函数由 $\langle x', y', z' | \alpha \rangle$ 给定. 在绕 z 轴做一个无穷小转动之后, 转动后态的波函数为

$$\langle x', y', z' | \left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right] | \alpha \rangle = \langle x' + y'\delta\phi, y' - x'\delta\phi, z' | \alpha \rangle. \text{tag3.6.6}$$

实际上改变坐标基

$$\langle x', y', z' | \alpha \rangle \rightarrow \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle. \text{tag3.6.7}$$

会更为清楚. 按照 (3.6.6) 式, 转动后的态为

$$\left\langle r, \theta, \phi \left| \left[1 - i\left(\frac{\delta\phi}{\hbar}\right)L_z\right] \right| \alpha \right\rangle = \langle r, \theta, \phi - \delta\phi | \alpha \rangle \text{tag3.6.8}$$

$$= \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle - \delta\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \langle r, \theta, \phi | \alpha \rangle.$$

因为 $\langle r, \theta, \phi |$ 是一个任意的位罝本征左矢, 可以确认

$$\langle \mathbf{x}' | L_z | \alpha \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle, \text{tag3.6.9}$$

它是一个众所周知的波动力学结果. 尽管这个关系也可轻易地利用动量算符的位罝表象求得, 这里给出的推导强调了 L_z 作为转动生成元的作用.

其次考虑一个绕 x 轴旋转 $\delta\phi_x$ 角的转动. 与 (3.6.6) 式类似, 有

$$\left\langle x', y', z' \left| \left[1 - i \left(\frac{\delta\phi_x}{\hbar} \right) L_x \right] \right| \alpha \right\rangle = \langle x', y' + z' \delta\phi_x, z' - y' \delta\phi_x | \alpha \rangle. \text{tag3.6.10}$$

通过把 x', y' 和 z' 用球坐标表示, 可以证明

$$\langle \mathbf{x}' | L_x | \alpha \rangle = -i\hbar \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle. \text{tag3.6.11}$$

同样地,

$$\langle \mathbf{x}' | L_y | \alpha \rangle = -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle. \text{tag3.6.12}$$

利用 (3.6.11) 式和 (3.6.12) 式, 对于由 (3.5.5) 式定义的阶梯算符 L_{\pm} , 有

$$\langle \mathbf{x}' | L_{\pm} | \alpha \rangle = -i\hbar e^{\pm i\phi} \left(\pm i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot\theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle. \text{tag3.6.13}$$

最后, 利用

3.5.2 球谐函数

考虑一个受到球对称势的作用的无自旋粒子. 已知波动方程在球坐标系中是可分离变量的, 能量本征函数可以写成

$$\langle \mathbf{x}' | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi), \text{tag3.6.22}$$

其中位罝矢量 \mathbf{x}' 由球坐标 r, θ 和 ϕ 确定, 而 n 表示 l 和 m 之外的某个量子数——例如, 束缚态问题的径向量子数或一个自由粒子球面波的能量. 正如将在 3.11 节看得更清楚的, 这种形式可以被视为该问题转动不变的直接后果. 当哈密顿量是球对称的时候, H 与 L 和 L^2 对易, 因而预期能量本征右矢也是 L^2 和 L_z 的本征右矢. 因为在 $k = 1, 2, 3$ 时 L_k 满足角动量对易关系, 预期 L^2 和 L_z 的本征值分别为 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $mh = [-l\hbar, (-l+1)\hbar, (l-1)\hbar, l\hbar]$.

因为角度的依赖关系对于所有球对称的问题是共同的, 可以把它孤立出来考虑

$$\langle \hat{\mathbf{n}} | l, m \rangle = Y_l^m(\theta, \phi) = Y_l^m(\hat{\mathbf{n}}), \text{tag3.6.23}$$

其中, 定义了一个方向本征右矢 $|\hat{\mathbf{n}}\rangle$. 基于此观点, $Y_l^m(\theta, \phi)$ 就是在 θ 和 ϕ 所规定的方向 $\hat{\mathbf{n}}$ 上找到 l, m 表征的态的振幅.

假定有一个包含轨道角动量本征右矢的关系式, 能够立即写出包含球谐函数的相应的关系式. 例如, 取本征值方程

$$L_z |l, m\rangle = m\hbar |l, m\rangle. \text{tag3.6.24}$$

左乘 $\langle \hat{\mathbf{n}} |$, 并且利用 (3.6.9) 式, 得到

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \hat{\mathbf{n}} | l, m \rangle = m\hbar \langle \hat{\mathbf{n}} | l, m \rangle. \text{tag3.6.25}$$

这个方程就是

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi), \text{tag3.6.26}$$

它意味着 $Y_l^m(\theta, \phi)$ 的 ϕ 依赖行为必然像 $e^{im\phi}$. 同样, 对应于

$$\mathbf{L}^2 |l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle, \text{tag3.6.27}$$

有 [见 (3.6.15) 式]

$$\left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + l(l+1) \right] Y_l^m = 0, \text{tag3.6.28}$$

它只不过是 Y_l^m 自身满足的偏微分方程. 正交性关系

$$\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \text{tag3.6.29}$$

导致

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos \theta) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \text{tag3.6.30}$$

其中用到了方向本征矢的完备性关系

公式

为得到 Y_l^m , 从 $m=l$ 出发, 有

$$L_+ |l, l\rangle = 0, \text{tag3.6.32}$$

由于 (3.6.13) 式, 上式导致

$$-i\hbar e^{i\phi} \left[i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right] \langle \hat{\mathbf{n}} | l, l \rangle = 0. \text{tag3.6.33}$$

记住 ϕ 依赖的行为一定是 $e^{it\phi}$, 可以容易地证明

$$\langle \hat{\mathbf{n}} | l, l \rangle = Y_l^l(\theta, \phi) = c_l e^{il\phi} \sin^l \theta \text{tag3.6.34}$$

满足这个偏微分方程, (3.6.33), 其中的 c_l 是由 (3.6.30) 式确定的归一化常数 *

* 当然, 归一化条件 (3.6.30) 式确定不了 c_l 的相因子. 插入一个因子 $(-1)^l$, 这样当连续使用 L_- 算符达到了 $m=0$ 的态时, 得到的 Y_l^0 有着与勒让德多项式 $P_l(\cos \theta)$ 相同的符号, 而后的相位是由 $P_l(1) = 1$ 确定的, 见公式

(3.6.39).

$$c_l = \left[\frac{(-1)^l}{2^l l!} \right] \sqrt{\frac{[(2l+1)(2l)!]}{4\pi}}. \text{tag3.6.35}$$

从 (3.6.34) 式出发, 可以连续运用

$$\langle \hat{\mathbf{n}} | l, m-1 \rangle = \frac{\langle \hat{\mathbf{n}} | L_- | l, m \rangle}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)\hbar}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}} e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \langle \hat{\mathbf{n}} | l, m \rangle \tag{3.6.36}$$

以得到所有固定 l 的 Y_l^m . 因为这在许多初等量子力学教科书中都做过 (例如, Townsend, 2000), 在这里不准备给出其细节. $m \geq 0$ 时的结果为

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \tag{3.6.37}$$

并且用

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \phi)]^* \tag{3.6.38}$$

定义 Y_l^{-m} . 无论 m 是正还是负, $Y_l^m(\theta, \phi)$ 的 θ 相关部分是 $[\sin \theta]^{|m|}$ 乘以一个最高幂为 $l - |m|$ 的 $\cos \theta$ 的多项式. 对于 $m = 0$, 我们得到

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \tag{3.6.39}$$

单从角动量对易关系的观点来看, 为什么 l 不能是半整数好像不是显然的. 事实表明, 几种理由都不利于半整数 l 值. 首先, 对于半整数的 l , 并因此对于半整数的 m , 在 2π 转动下的波函数会获得一个负号,

$$e^{im(2\pi)} = -1, \tag{3.6.40}$$

结果, 波函数就会不是单值的. 在 2.4 节曾经指出, 波函数必须是单值的, 这是由于要求一个态右矢用位置的本征右矢的展开是唯一的. 可以证明, 如果定义为 $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 的 \mathbf{L} 被确认为转动的生成元, 那么在 2π 转动下的波函数必须获得一个正号. 这是由于一个 2π 转动后的态的波函数就是没有符号改变的、原始的波函数:

$$\begin{aligned} \left\langle \mathbf{x}' \left| \exp \left(\frac{-iL_z 2\pi}{\hbar} \right) \alpha \right. \right\rangle &= \langle x' \cos 2\pi + y' \sin 2\pi, y' \cos 2\pi - x' \sin 2\pi, z' \rangle \alpha \tag{3.6.41} \\ &= \langle \mathbf{x}' | \alpha \rangle, \end{aligned}$$

其中用到了有限角度情况下的 (3.6.6) 式. 其次, 假设倘若具有半整数 l 的 $Y_l^m(\theta, \phi)$ 是可能的. 为确定起见, 选择最简单的情况, $l = m = \frac{1}{2}$. 按照 (3.6.34) 式, 就会有

$$Y_{1/2}^{1/2}(\theta, \phi) = c_{1/2} e^{i\phi/2} \sqrt{\sin \theta} \tag{3.6.42}$$

由 L_- 的性质 [见 (3.6.36) 式], 就会得到

$$\begin{aligned} Y_{1/2}^{-1/2}(\theta, \phi) &= e^{-i\phi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) (c_{1/2} e^{i\phi/2} \sqrt{\sin \theta}) \\ &= -c_{1/2} e^{-i\phi/2} \cot \theta \sqrt{\sin \theta} \tag{3.6.43} \end{aligned}$$

这个表示式是不允许的, 因为在 $\theta = 0, \pi$ 处它是奇异的. 更糟糕的是, 由偏微分方程

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{\mathbf{n}} | L_- | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= -i\hbar e^{-i\phi} \left(-i \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \left\langle \hat{\mathbf{n}} | \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \tag{3.6.44} \\ &= 0 \end{aligned}$$

直接得

$$Y_{1/2}^{-1/2} = c'_{1/2} e^{-i\phi/2} \sqrt{\sin \theta} \tag{3.6.45}$$

它与 (3.6.43) 式有尖锐的矛盾. 最后, 从微分方程的斯特姆-刘维尔 (Sturm-Liouville) 理论知道, (3.6.28) 式的 l 为整数的解构成一个完备集. θ 和 ϕ 的任意函数都可以用只取整数 l 和 m 的 Y_l^m 展开. 由于所有这些理由, 苦思冥想半整数 l 值的轨道角动量是徒劳的. (这里的半整数, 确切地讲, 应为半奇数, 因为半偶数仍为整数, 显然不会产生这些矛盾. 遵照作者的原文, 这里没有改正. ——译者注)

3.5.3 球谐函数作为转动矩阵

通过用上一节引入的转动矩阵的观点讨论球谐函数来结束关于轨道角动量的这一节. 通过将适当的转动算符作用于沿正的 z 方向的方向本征右矢 $|\hat{z}\rangle$ 上, 构造最普遍的方向本征右矢 $|\hat{n}\rangle$, 可以很容易地建立所想要的、两种方法间的联系. 希望找到这样的 $\mathcal{D}(R)$, 使得

$$|\hat{n}\rangle = \mathcal{D}(R) |\hat{z}\rangle \tag{3.6.46}$$

可以采用在 3.2 节构造 $\sigma \cdot \hat{n}$ 的本征旋量时使用过的技巧. 首先绕 y 轴转 θ 角, 然后绕 z 轴转 ϕ 角, 见图 3.3, 取 $\beta \rightarrow \theta, \alpha \rightarrow \phi$. 用欧拉角的符号, 有

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \tag{3.6.47}$$

把 (3.6.46) 式写成

$$|\hat{n}\rangle = \sum_l \sum_m \mathcal{D}(R) |l, m\rangle \langle l, m | \hat{z}\rangle \tag{3.6.48}$$

可以看到, 当用 $|l, m\rangle$ 展开时, $|\hat{n}\rangle$ 包含了所有可能的 l 值. 然而, 当用 $\langle l, m' |$ 左乘上述方程时, 在 l 求和中只有一项有贡献, 即

$$\langle l, m' | \hat{n}\rangle = \sum_m \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \langle l, m | \hat{z}\rangle \tag{3.6.49}$$

此时 $\langle l, m | \hat{z}\rangle$ 只是一个数. 事实上, 它就是在 $\theta = 0$, 但 ϕ 不确定时算出的 $Y_l^m \cdot (\theta, \phi)$. 在 $\theta = 0$ 时, $m \neq 0$ 时的 Y_l^m 为零, 它也可以直接从 $|\hat{z}\rangle$ 是 L_z (它等于 $x p_y - y p_x$) 的本征值为零的本征右矢看到. 所以可以写出

$$\begin{aligned} \langle l, m | \hat{z}\rangle &= Y_l^m(\theta = 0, \phi \text{ 不确定}) \delta_{m0} \\ &= \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \Big|_{\cos \theta=1} \delta_{m0} \tag{3.6.50} \\ &= \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} \delta_{m0}. \end{aligned}$$

返回到 (3.6.49) 式, 有

$$Y_l^{m'}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} D_{m'0}^{(l)}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \tag{3.6.51}$$

或

$$D_{m0}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma = 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)}} Y_l^m(\theta, \phi) \Big|_{\theta=\beta, \phi=\alpha} \quad \text{tag3.6.52}$$

注意 $m = 0$ 的情况是特别重要的:

$$d_{00}^{(l)}(\beta) \Big|_{\beta=0} = P_l(\cos \theta) \quad \text{tag3.6.53}$$

3.6 中心势的薛定谔方程

由下列形式的哈密顿量

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(r) \quad \text{tag3.7.1}$$

描述的问题是物理世界中许多情况的基础. 这个哈密顿量的基本重要性在于它是球对称的. 在经典物理中, 预期轨道角动量在这样的一个系统中是守恒的. 在量子力学中这也是对的, 因为很容易证明

$$[\mathbf{L}, \mathbf{p}^2] = [\mathbf{L}, \mathbf{x}^2] = 0 \quad \text{tag3.7.2}$$

因此, 如果 H 由 (3.7.1) 式给定, 则

$$[\mathbf{L}, H] = [\mathbf{L}^2, H] = 0 \quad \text{tag3.7.3}$$

把这样的问题称之为中心势或中心力问题. 即使哈密顿量并不严格地是这种形式, 当考虑构建在对中心势问题做“微小”修正的近似方案时, 它经常是一个很好的出发点.

在这一节将讨论由 (3.7.1) 式导致的本征函数的一些一般性质以及几个有代表性的中心势问题. 为了解更多的细节, 建议读者参考诸多非常深入地探讨了这些问题的优秀教材.

3.6.1 径向方程

方程 (3.7.3) 清晰地表明, 应寻找能量本征态 $|\alpha\rangle = |Elm\rangle$, 其中

$$H|Elm\rangle = E|Elm\rangle, \quad \text{tag3.7.4}$$

$$\mathbf{L}^2|Elm\rangle = l(l+1)\hbar^2|Elm\rangle, \quad \text{tag3.7.5}$$

$$L_z|Elm\rangle = m\hbar|Elm\rangle. \quad \text{tag3.7.6}$$

最容易做到这一点的是, 利用坐标表象并且借助 (3.6.22) 式所示的径向函数 $R_{El}(r)$ 和球谐函数求解适当的本征函数的微分方程. 把 (3.7.1)、(3.7.4)、(3.7.5) 与 (3.6.21)、(3.6.22) 式结合在一起, 得到径向方程 *

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] R_{El}(r) = E R_{El}(r) \quad \text{tag3.7.7}$$

取决于 $V(r)$ 的具体形式, 可用这个方程或者它的一些变形来确定本征函数的径向部分 $R_{El}(r)$ 和/或能量本征值 E .

事实上, 通过代换

$$R_{El}(r) = \frac{u_{El}(r)}{r}, \text{tag 3.7.8}$$

可以马上获得有关角动量对本征函数影响的某些深刻理解, 该代换把 (3.7.7) 式约化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{El}}{dr^2} + \left[\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] u_{El}(r) = E u_{El}(r). \text{tag 3.7.9}$$

把上式与球谐函数是单独归一的实际情况结合在一起, 使得整体归一化条件变成

$$1 = \int r^2 dr R_{El}^*(r) R_{El}(r) = \int dr u_{El}^*(r) u_{El}(r), \text{tag 3.7.10}$$

我们看到, $u_{El}(r)$ 可以解释为一个在“等效势”

$$V_{\text{等效}}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \text{tag 3.7.11}$$

* 非常抱歉用 m 既表示了“质量”, 又表示了角动量量子数. 然而, 从本节上下文应当清楚哪个是哪个.

中运动的粒子的一维波函数. 方程 (3.7.11) 展示, 如果 $l \neq 0$, 则存在一个“角动量势垒”, 如图 3.5 所示. 从量子力学讲, 这意味着除了 s 态, 粒子定位在原点附近的振幅 (因此概率) 是很小的. 正如稍后将看到的, 例如, 这件事在原子中有重要的物理后果.

可以做更为定量的解释. 假定势能函数 $V(r)$ 并不是这样奇异, 以致 $\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0$. 于是, 对于很小的 r 值, (3.7.9) 式变成

$$\frac{d^2 u_{El}}{dr^2} = \frac{l(l+1)}{r^2} u_{El}(r) \quad (r \rightarrow 0), \text{tag 3.7.12}$$

它的通解为 $u(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}$. 很容易想到马上取 $B = 0$, 因为 $1/r^l$ 在 $r \rightarrow 0$ 时产生严重的奇异性, 特别是当 l 较大时. 然而, 取 $B = 0$ 还有更好的理由, 该理由是源于量子力学的基础.

图 3.5 控制“径向波函数” $u_{El}(r)$ 行为的“等效势”. 如果势能 $V(r)$ (如图虚线所示) 在原点不太奇异, 则对所有 $l \neq 0$ 的态都存在一个角动量位垒, 它使得一个粒子定位于原点附近是极不可能的.

考虑由 (2.4.16) 式给出的概率流. 这是一个矢量, 它的径向分量为

$$j_r = \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial r} \psi \right) \text{tag 3.7.13}$$

$$= \frac{\hbar}{m} R_{El}(r) \frac{d}{dr} R_{El}(r).$$

现在, 如果当 $r \rightarrow 0$ 时, $R_{El}(r) \rightarrow r^l$, 则 $j_r \propto l r^{2l-1}$. 于是, 就像它应该的那样, 从中心位于原点附近的一个小球“泄漏”出去的概率, 对于所有的 l 值都是 $4\pi r^2 j_r \propto l r^{2l+1} \rightarrow 0$.

然而, 如果当 $r \rightarrow 0$ 时, $R_{El}(r) \rightarrow r^{-(l+1)}$, 则 $j_r \propto (l+1) r^{-2l-3}$, 并且当 $r \rightarrow 0$ 时从小球流出的概率是 $4\pi r^2 j_r \propto (l+1) r^{-2l-1} \rightarrow \infty$, 甚至 $l = 0$ 时也是如此. 于是, 作为 (3.7.12) 式的解, 必须只选择 $u(r) \propto r^{l+1}$; 否则, 就会破坏量子力学振幅的概率解释.

所以, 有

$$R_{El}(r) \rightarrow r^l \text{ 当 } r \rightarrow 0. \text{tag 3.7.14}$$

这个关系式有深远的影响. 首先, 它体现了图 3.5 所示的“角动量势垒”, 因为除了 s 态, 波函数都趋向于零. 更实际地说, 它意味着, 比如, 在原子核的区域内找到一个原子的电子的概率遵循 $(R/a_0)^{2l}$, 其中 $R \ll a_0$ 是原子

核的大小, 而 a_0 是波尔半径. 当进入原子结构研究时, 这些概念将变得明确了.

在研究大 r 处趋于零的势能函数 $V(r)$ 的束缚态时, 有另一种形式的径向方程可以考虑. 对于 $r \rightarrow \infty$, (3.7.9) 式变成

$$\frac{d^2 u_E}{dr^2} = \kappa^2 u \quad \kappa^2 \equiv -2mE/\hbar^2 > 0 \quad r \rightarrow \infty, \text{tag3.7.15}$$

因为对于束缚态 $E < 0$. 这个方程的解简单地就是 $u_E(r) \propto e^{-\kappa r}$. 它也表明, 无量纲变量 $\rho \equiv \kappa r$ 对重写径向方程将是有益的. 于是, 既消除波函数短距离的奇异行为, 又消除长距离的奇异行为, 而写成

$$u_{El}(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} w(\rho), \text{tag3.7.16}$$

其中函数 $w(\rho)$ 是“行为很好的”, 且满足方程

$$\frac{d^2 w}{d\rho^2} + 2 \left(\frac{l+1}{\rho} - 1 \right) \frac{dw}{d\rho} + \left[\frac{V}{E} - \frac{2(l+1)}{\rho} \right] w = 0. \text{tag3.7.17}$$

(导出这个方程的处理方法留给读者.) 随后, 将集中精力对于特定的函数 $V(r = \rho/\kappa)$ 的 (3.7.17) 式求解 $w(\rho)$

3.6.2 自由粒子和无穷深球形势阱

在 2.5 节已经利用笛卡尔坐标, 得到了三维自由粒子问题的解. 当然可以利用球对称性和角动量处理同样的问题. 从 (3.7.7) 式出发, 写出

$$E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{和} \quad \rho \equiv \kappa r \text{tag3.7.18}$$

然后得到修改后的径向方程

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0. \text{tag3.7.19}$$

这个方程是一个著名的微分方程, 它的解称之为球贝塞尔 (Bessel) 函数 $j_l(\rho)$ 和 $n_l(\rho)$, 其中

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l \left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right]^l \left(\frac{\sin \rho}{\rho} \right), \text{tag3.7.20a}$$

$$n_l(\rho) = -(-\rho)^l \left[\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right]^l \left(\frac{\cos \rho}{\rho} \right). \text{tag3.7.20b}$$

很容易证明, 当 $\rho \rightarrow 0$ 时, $j_l(\rho) \rightarrow \rho^l$ 而 $n_l(\rho) \rightarrow \rho^{-l-1}$. 因此, $j_l(\rho)$ 对应着 (3.7.14) 式, 该解是在这里唯一考虑的解 * 指出球贝塞尔函数定义在整个复平面也是有用的, 而且可以证明

$$j_l(z) = \frac{1}{2i^l} \int_{-1}^1 ds e^{izs} P_l(s). \text{tag3.7.21}$$

前几个球贝塞尔函数为

$$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}. \text{tag3.7.22}$$

$$j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}, \text{tag3.7.23}$$

$$j_2(\rho) = \left[\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right] \sin \rho - \frac{3 \cos \rho}{\rho^2}. \text{tag3.7.24}$$

* 在处理“硬球散射”问题时, 原点显然被排除了, 因而解 $n_l(\rho)$ 也被保留了下来. 对于一个给定的 l , 这两个解的相对相位称为相移.

这个结果立即可以应用到一个粒子被禁闭在一个无穷深球势阱中的情况, 即, 在 $r < a$ 区域内其势能函数 $V(r) = 0$, 但波函数在 $r = a$ 处被约束为零. 对于任何给定的 l 值, 这些约束将导致“量子化条件” $j_l(ka) = 0$, 即 ka 等于球贝塞尔函数零点的集合. 对 $l = 0$, 这些值显然是 $ka = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots$. 对于其他的 l 值, 能计算零点的计算机程序是很容易使用的. 可以发现

$$E_{l=0} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} [\pi^2, (2\pi)^2, (3\pi)^2, \dots], \text{tag3.7.25}$$

$$E_{l=1} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} [4.49^2, 7.73^2, 10.90^2, \dots], \text{tag3.7.26}$$

$$E_{l=2} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} [5.84^2, 8.96^2, 12.25^2, \dots]. \text{tag3.7.27}$$

应当注意, 这一系列的能级显示没有 l 的简并. 的确, 除了不同阶的球贝塞尔函数零点之间偶然的相等之外, 这样的简并能级是不可能的.

3.6.3 各向同性谐振子

确定哈密顿量

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \text{tag3.7.28}$$

的能量本征值是很简单的. 用下式引入无量纲能量 λ 和径向坐标 ρ

$$E = \frac{1}{2}\hbar\omega\lambda \quad \text{和} \quad r = \left[\frac{\hbar}{m\omega} \right]^{1/2} \rho, \text{tag3.7.29}$$

把 (3.7.9) 式变换为

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} u(\rho) + (\lambda - \rho^2) u(\rho) = 0. \text{tag3.7.30}$$

虽然因为大 r 处的 $V(r)$ 不趋于零因而不能使用 (3.7.16) 式, 但明确地移除大 (和小) ρ 处的奇异行为仍然是值得做的. 代替该式, 写出

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho^2/2} f(\rho). \text{tag3.7.31}$$

这就产生了函数 $f(\rho)$ 的下列微分方程:

$$\rho \frac{d^2 f}{d\rho^2} + 2[(l+1) - \rho^2] \frac{df}{d\rho} + [\lambda - (2l+3)] \rho f(\rho) = 0. \text{tag3.7.32}$$

通过把 $f(\rho)$ 写成一个无穷级数, 即

$$f(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho^n. \text{tag3.7.33}$$

来求解方程 (3.7.32). 把这个级数插入到微分方程中, 并置 ρ 的各次幂都等于零. 唯一留存下来的 ρ^0 项是 $2(l+1)a_1$, 所以

$$a_1 = 0. \text{tag3.7.34}$$

正比于 ρ^1 的项允许把 a_2 与 a_0 联系起来, 接下来它们可以通过归一条件确定. 继续做下去, (3.7.32) 式变成

$$\sum_{n=2}^{\infty} \{(n+2)(n+1)a_{n+2} + 2(l+1)(n+2)a_{n+2} - 2na_n + [\lambda - (2l+3)]a_n\} \rho^{n+1} = 0, \text{tag3.7.35}$$

最终, 它导致递推关系

$$a_{n+2} = \frac{2n+2l+3-\lambda}{(n+2)(n+2l+3)} a_n. \text{tag3.7.36}$$

立即看到, $f(\rho)$ 只包含 ρ 的偶次幂, 因为 (3.7.34) 式和 (3.7.36) 式意味着对于奇数的 n 有 $a_n = 0$. 另外, 当 $n \rightarrow \infty$ 时, 有

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} \rightarrow \frac{2}{n} = \frac{1}{q}, \text{tag3.7.37}$$

其中 $q = n/2$ 既包括奇整数也包括偶整数. 因此, 对于大 ρ , (3.7.33) 式变成

$$f(\rho) \rightarrow \text{常数} \times \sum_q \frac{1}{q!} (\rho^2)^q \propto e^{\rho^2}. \text{tag3.7.38}$$

换言之, 由 (3.7.31) 式给出的 $u(\rho)$ 在大 ρ 时将按指数增长 (因此将不能满足归一条件), 除非该级数中断. 所以, 对于某个偶数值的 $n = 2q$ 有

$$2n+2l+3-\lambda = 0. \text{tag3.7.39}$$

并且能量本征值为

$$E_{ql} = \left(2q + l + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega \equiv \left(N + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega. \text{tag3.7.40}$$

其中 $q = 0, 1, 2, \dots, l = 0, 1, 2, \dots$ 和 $N \equiv 2q + l$. 人们经常称 N 为“主”量子数. 可以证明, q 给出径向波函数的节点数.

完全不像方势阱, 三维各向同性谐振子具有对量子数 l 简并的能量本征值. 对 $N = 1$ 有三个态 (都是 $l = 1$). 对 $N = 2$, 有五个 $l = 2$ 的态, 加上一个 $q = 1$ 且 $l = 0$ 的态, 总共给出六个态. 注意, 对于偶数 (奇数) 的 N , 只有偶数 (奇数) 的 l 值是允许的. 因此, 波函数的宇称是偶还是奇是随着 N 值来确定的.

当势能函数是一个某种有限大小的阱时, 这些波函数是计算各种自然现象的最流行的基态. 这类方法的最大成就之一是原子核壳模型, 单独的质子和中子被描绘成在一个势能函数的势阱中独立运动, 而该势能函数是由原子核中所有核子的累积效应产生的. 图 3.6 将原子核内观测到的能级与对于各向同性谐振子和无穷深球势阱求得的能级做了比较.

把哈密顿量 (3.7.28) 式的本征态标记为 $|qlm\rangle$ 或 $|Nlm\rangle$ 是很自然的. 然而, 这个哈密顿量还可以写成

$$H = H_x + H_y + H_z, \text{tag3.7.41}$$

其中 $H_i = a_i^\dagger a_i + \frac{1}{2}$ 是一个沿 $i = x, y, z$ 方向的独立的一维谐振子. 在这种方法中, 把本征态标记为 $|n_x, n_y, n_z\rangle$, 能量本征值为

$$E = \left(n_x + \frac{1}{2} + n_y + \frac{1}{2} + n_z + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \tag{3.7.42}$$

$$= \left(N + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega$$

其中, $N = n_x + n_y + n_z$. 很容易从数值上证明, 不管使用哪种基, 对于前几个能级简并都一样. 总的说来, 证明这一点并推导出从一个基变到另一个基的幺正变换矩阵 $\langle n_r, n_y, n_z | qlm \rangle$ 是一个有趣的练习. (见本章末尾的习题 3.21.)

图 3.6 原子核壳模型中的能级, 取自 Haxel, Jensen 和 Suess, *Zeitschrift für Physik* 128 (1950) 295. 左边一列是三维各向同性谐振子的能级, 紧随着的一列是无穷深球形势阱时的能级. 其右边的两列是修改了的无穷深方势阱的能级, 先是有限壁高势阱的情况, 然后是“磨圆了角的”方势阱的情况. 最右边能级图显示了包括了核子的自旋与轨道角动量相互作用的势阱的能级. 最后一列标出了总角动量子数.

3.6.4 库仑 (Coulomb) 势

或许物理学中最重要的势能函数是

$$V(\mathbf{x}) = -\frac{Ze^2}{r}, \tag{3.7.43}$$

很明显, 选择常数 Ze^2 是为了使 (3.7.43) 式能表示原子序数为 Z 的一个单电子原子的势能. 除了库仑力以及经典引力外, 它广泛地用在适用于很多物理系统的模型中*. 在这里, 考虑基于这样一个函数的径向方程以及得出的能量本征值.

$1/r$ 势满足导出 (3.7.17) 式的所有要求. 因此, 通过确定函数 $w(\rho)$, 寻找形式为

—

* 的确, $1/r$ 势能函数源于任意一个中间交换无质量粒子的、空间维度为三维的量子场论. 见 Zee (2010) 中的 1.6 章.

—

(3.7.16) 式的解. 定义

$$\rho_0 = \left[\frac{2m}{-E} \right]^{1/2} \frac{Ze^2}{\hbar} = \left[\frac{2mc^2}{-E} \right]^{1/2} Z\alpha, \tag{3.7.44}$$

其中 $\alpha \equiv e^2/\hbar c \approx 1/137$ 是精细结构常数, 则 (3.7.17) 式变成

$$\rho \frac{d^2 w}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dw}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)] w(\rho) = 0. \tag{3.7.45}$$

当然能够利用一种级数方法开始求解 (3.7.45) 式, 并导出系数的递推关系, 就像对 (3.7.32) 式所做的那样. 然而, 事实证明这个解实际上已经为众所周知.

方程 (3.7.45) 可以写成库默尔 (Kummer) 方程:

$$x \frac{d^2 F}{dx^2} + (c-x) \frac{dF}{dx} - aF = 0, \tag{3.7.46}$$

其中

$$x = 2\rho,$$

$$c = 2(l + 1),$$

和 $2a = 2(l + 1) - \rho_0$. (3.7.47)

(3.7.46) 式的解称为合流超几何函数, 它被写成为级数

$$F(a; c; x) = 1 + \frac{a}{c} \frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{x^2}{2!} + \cdots. \text{tag3.7.48}$$

因此,

$$w(\rho) = F\left(l + 1 - \frac{\rho_0}{2}; 2(l + 1); 2\rho\right). \text{tag3.7.49}$$

注意, 对于大的 ρ , 有

$$\begin{aligned} w(\rho) &\approx \sum_{k \text{ 的 } N} \frac{a(a+1) \cdots (2\rho)^N}{c(c+1) \cdots N!} \\ &\approx \sum_N \frac{(N/2)^N (2\rho)^N}{N^N N!} \approx \sum_N \frac{(\rho)^N}{N!} \approx e^\rho. \end{aligned}$$

于是, (3.7.16) 式再一次给出一个会无限增长的径向波函数, 除非级数 (3.7.48) 式中中断. 因此, 对某个整数 N , 必须有 $a + N = 0$, 它导致

$$\rho_0 = 2(N + l + 1), \text{tag3.7.50}$$

其中 $N = 0, 1, 2, \dots$

和 $l = 0, 1, 2, \dots$

按照惯例 (并且, 正如将看到的, 这样做是有益的), 定义主量子数 n 为

$$n \equiv N + l + 1 = 1, 2, 3, \dots, \text{tag3.7.51}$$

其中 $l = 0, 1, \dots, n - 1$.

可以看出, 利用 2.5 节曾描述过的生成函数技巧求解库仑势的径向方程是可能的. 见本章末尾的习题 3.22. 通过把 (3.7.44) 式和 (3.7.50) 式组合在一起, 根据主量子数推出能量本征值, 即

$$\rho_0 = \left[\frac{2mc^2}{-E} \right]^{1/2} Z\alpha = 2n, \text{tag3.7.52}$$

它导致

$$E = -\frac{1}{2}mc^2 \frac{Z^2\alpha^2}{n^2} = -13.6\text{eV} \frac{Z^2}{n^2}, \text{tag3.7.53}$$

其中的数值结果是对一个单电子原子的结果, 即 $mc^2 = 511\text{keV}$. 方程 (3.7.53) 当然就是熟知的巴耳末 (Balmer) 公式.

现在是整理各种观点的时候了. 首先, 现代量子力学预言能级性质与波尔的旧原子模型的结果存在明显的不一致. 波尔模型在角动量本征值 l 与主量子数 n 之间是一一对应的, 事实上, 基态对应于 $n = l = 1$. 相反, 对 $n = 1$

, 只有 $l = 0$ 是允许的; 而对更高的能级, 一些不同的 l 值也都是允许的.

其次, 出现了一个自然的长度标度 a_0 . 因为 $\rho = \kappa r$, 其中 $\kappa = \sqrt{-2mE/\hbar^2}$ [见 (3.7.15) 式], 有

$$\frac{1}{\kappa} = \frac{\hbar}{mc\alpha} \frac{n}{Z} \equiv a_0 \frac{n}{Z}, \text{tag3.7.54}$$

其中

$$a_0 = \frac{\hbar}{mc\alpha} = \frac{\hbar^2}{me^2} \text{tag3.7.55}$$

被称为波尔半径. 对于一个电子, $a_0 = 0.53 \times 10^{-8} \text{ cm} = 0.53 \text{ \AA}$. 它的确是典型的原子尺度.

最后, 能量本征值 (3.7.35) 式显示了一种有趣的简并. 本征值只依赖于 n , 而不依赖于 l 和 m . 因此, 对于一个 $|nlm\rangle$ 态, 能级的简并度为

$$\text{简并度} = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \text{tag3.7.56}$$

实际上, 这个简并度并不是偶然的, 而是反映了库仑势的微妙对称性. 在第 4 章将回到这个问题.

现在, 可以写出氢原子波函数的显示表达式. 回到 (3.6.22) 式, 并且引入适当的归一因子, 有

$$\psi_{nlm}(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | nlm \rangle = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi), \text{tag3.7.57}$$

其中

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{(2l+1)!} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l e^{-Zr/na_0} \left[\left(\frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n+l)!}{2n(n-l-1)!} \right]^{1/2} \\ \times F(-n+l+1; 2l+2; 2Zr/na_0). \text{tag3.7.58}$$

图 3.7 库仑势情况的径向波函数, 其主量子数 $n = 1$ (左) 和 $n = 2$ (右).

图 3.7 画出了 $n = 1$ 和 $n = 2$ 的径向波函数. 正如曾讨论过的, 只有 $l = 0$ 的波函数在原点不为零. 还要注意, $l = 0$ 的波函数有 $n - 1$ 个节点, 而满足 $l = n - 1$ 的波函数没有节点.

3.7 角动量的加法

角动量加法在现代物理的所有领域——从原子光谱学到原子核与粒子碰撞——都有重要的应用. 此外, 角动量加法的研究提供一个很好的阐明基改变概念的机会, 在第 1 章曾广泛地讨论过.

3.7.1 角动量加法的一些简单例子

在研究角动量加法的形式理论之前, 值得看一下读者可能熟悉的两个简单例子; (1) 如何把轨道角动量与自旋角动量加在一起, 以及 (2) 如何把两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的自旋角动量加在一起.

前面既研究了忽略除自旋以外的一切量子力学自由度 (诸如位置和动量) 的自旋 $\frac{1}{2}$ 系统, 也研究考虑了空间自由度 (诸如位置和动量), 但忽略了内部自由度 (比如自旋) 的量子力学粒子. 一个具有自旋的粒子的实际描述当然必须既考虑空间自由度也要考虑内部自由度. 对于一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子, 其基右矢可以视为由位置本征右矢 $\{|\mathbf{x}'\rangle\}$ 所张的无穷维右矢空间和由 $|+\rangle$ 与 $|-\rangle$ 所张的二维自旋空间的直积空间. 更明确地说, 对这种基右矢, 有

$$|\mathbf{x}', \pm\rangle = |\mathbf{x}'\rangle \otimes |\pm\rangle, \text{tag3.8.1}$$

其中, 由 $\{|\mathbf{x}'\rangle\}$ 所张空间中的任何算符与由 $|\pm\rangle$ 所张的二维空间中的任何算符都对易.

转动算符仍取 $\exp(-i\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi/\hbar)$ 的形式, 但是转动生成元 \mathbf{J} 现在由两部分构成, 即

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \text{tag3.8.2}$$

实际上, 更明显地是把 (3.8.2) 式写成

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} \otimes 1 + 1 \otimes \mathbf{S}, \text{tag3.8.3}$$

在 $\mathbf{L} \otimes 1$ 中的 1 表示自旋空间中的单位算符, 而在 $1 \otimes \mathbf{S}$ 中的 1 表示由位置本征右矢所张的无穷维右矢空间中的单位算符. 因为 \mathbf{L} 和 \mathbf{S} 对易, 可以写成

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}^{(\text{轨道})}(R) \otimes \mathcal{D}^{(\text{自旋})}(R) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{L} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right) \otimes \exp\left(\frac{-i\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right), \text{tag3.8.4}$$

一个有自旋的粒子的波函数可以写成

$$\langle \mathbf{x}', \pm | \alpha \rangle = \psi_{\pm}(\mathbf{x}'), \text{tag3.8.5}$$

两个分量 ψ_{\pm} 经常被排布成如下形式的列矩阵

$$\begin{pmatrix} \psi_{+}(\mathbf{x}') \\ \psi_{-}(\mathbf{x}') \end{pmatrix}, \text{tag3.8.6}$$

其中, $|\psi_{\pm}(\mathbf{x}')|^2$ 表示在 \mathbf{x}' 处找到该粒子自旋分别为向上和向下的概率密度. 代替 $|\mathbf{x}'\rangle$ 作为空间部分的基右矢, 可以使用 $|n, l, m\rangle$, 它是 \mathbf{L}^2 和 L_z 的本征右矢, 本征值分别为 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $m_l\hbar$. 对于自旋部分, $|\pm\rangle$ 是 \mathbf{S}^2 和 S_z 的本征右矢, 本征值分别为 $3\hbar^2/4$ 和 $\pm\hbar/2$. 然而正如稍后将证明的, 可以利用 $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2$ 和 \mathbf{S}^2 的本征右矢作为基矢. 换句话说, 可以把一个有自旋的粒子的态右矢或者用 $\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, L_z$ 和 S_z 的共同本征态展开, 或者用 $\mathbf{J}^2, J_z, \mathbf{L}^2$ 和 \mathbf{S}^2 的共同本征态展开. 下面将详细地研究这两种描述是如何关联的.

作为第二个例子, 研究两个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子——比方说两个电子——同时略去它们的轨道自由度. 总自旋算符通常写成

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2, \text{tag3.8.7}$$

但是再一次将其理解为

$$\mathbf{S}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \mathbf{S}_2, \text{tag3.8.8}$$

其中, 在第一(第二)项中 1 代表电子 2(1) 的自旋空间中的单位算符. 当然有

$$[S_{1x}, S_{2y}] = 0, \text{tag3.8.9}$$

等. 在电子 1(2) 的空间内, 有通常的对易关系

$$[S_{1x}, S_{1y}] = i\hbar S_{1z}, [S_{2x}, S_{2y}] = i\hbar S_{2z}, \dots, \text{tag3.8.10}$$

作为 (3.8.9) 式和 (3.8.10) 式的直接结果. 对总自旋算符有

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \text{tag3.8.11}$$

等.

各种自旋算符的本征值表示如下

$$\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 : s(s+1)\hbar^2$$

$$S_z = S_{1z} + S_{2z} : \text{tag3.8.12}$$

$$S_{1z} : m_1\hbar$$

$$S_{2z} : m_2\hbar$$

同样地, 可以把与两个电子任意自旋态对应的右矢, 用 \mathbf{S}^2 和 S_z 的本征右矢或者 S_{1z} 和 S_{2z} 的本征右矢展开. 这两种可能性如下:

1. 基于 S_{1z} 和 S_{2z} 的本征右矢的表示 $\{m_1, m_2\}$:

$$|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle \text{ 和 } |--\rangle, \text{tag3.8.13}$$

其中 $|+-\rangle$ 表示 $m_1 = \frac{1}{2}, m_2 = -\frac{1}{2}$, 以及等等.

2. 基于 \mathbf{S}^2 和 S_z 的本征右矢的表示 (或三重态-单态表示) $\{s, m\}$:

$$|s=1, m=\pm 1, 0\rangle, |s=0, m=0\rangle, \text{tag3.8.14}$$

其中 $s=1$ ($s=0$) 被称为自旋三重态 (或单态).

注意, 每一集合有四个基右矢. 两组基右矢之间的关系如下:

$$|s=1, m=1\rangle = |++\rangle, \text{tag3.8.15a}$$

$$|s=1, m=0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|+-\rangle + |-+\rangle), \text{tag3.8.15b}$$

$$|s=1, m=-1\rangle = |--\rangle, \text{tag3.8.15c}$$

$$|s=0, m=0\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|+-\rangle - |-+\rangle). \text{tag3.8.15d}$$

由 (3.8.15a) 式的右边得知, 有两个自旋都向上的电子, 这种情况只对应于 $s=1, m=1$. 通过把阶梯算符

$$S_- \equiv S_{1-} + S_{2-} \text{tag3.8.16}$$

$$= (S_{1x} - iS_{1y}) + (S_{2x} - iS_{2y})$$

作用于 (3.8.15a) 式的两边, 由 (3.8.15a) 式得到 (3.8.15b) 式. 在这么做的时候, 必须记住, 像 S_{1-} 这样一个电子 1 的算符仅影响到 $|++\rangle$ 中的第一个量等. 可以把

$$S_- |s=1, m=1\rangle = (S_{1-} + S_{2-})|++\rangle \text{tag3.8.17}$$

写成

$$\sqrt{(1+1)(1-1+1)} \left| s=1, m=0 \right\rangle = \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} \times \left| -+\right\rangle \tag{3.8.18}$$

$$+ \sqrt{\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} + 1\right)} \left| +- \right\rangle,$$

它立即导致 (3.8.15b) 式. 同样地, 通过把 (3.8.16) 式再次作用于 (3.8.15b) 式, 可得到 $|s=1, m=-1\rangle$. 最后, 通过要求它与其他三个右矢, 特别是与 (3.8.15b) 式正交, 可得到 (3.8.15d) 式.

出现在 (3.8.15) 各式右边的系数是克莱布-戈丹 (Clebsch-Gordan) 系数最简单的例子, 稍后将进一步讨论. 它们只不过是一些把 $\{m_1, m_2\}$ 基与 $\{s, m\}$ 基联系起来的变换矩阵的矩阵元. 用另一种方法导出这些系数是有益的. 假定, 利用 $\{m_1, m_2\}$ 基写出对应于

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \tag{3.8.19}$$

$$= \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2S_{1z}S_{2z} + S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}$$

的 4×4 矩阵. 这个方阵显然不是对角的, 因为 S_{1+} 这样的算符把 $| -+ \rangle$ 与 $| ++ \rangle$ 联系了起来. 把这个矩阵对角化的么正矩阵使基右矢 $|m_1, m_2\rangle$ 变成基右矢 $|s, m\rangle$. 这个么正矩阵的矩阵元就是这个问题的克莱布-戈丹系数. 本书鼓励读者详细地算出所有这些系数.

3.7.2 角动量加法的形式理论

通过考虑这些简单例子获得了一些物理的理解之后, 现在能够更系统地研究角动量加法形式理论. 考虑在不同子空间的两个角动量算符 \mathbf{J}_1 和 \mathbf{J}_2 . \mathbf{J}_1 (\mathbf{J}_2) 的各分量满足通常的角动量对易关系:

$$[J_{1i}, J_{1j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_{1k} \tag{3.8.20a}$$

和

$$[J_{2i}, J_{2j}] = i\hbar \epsilon_{ijk} J_{2k} \tag{3.8.20b}$$

然而, 任何一对取自不同子空间的算符之间有

$$[J_{1k}, J_{2l}] = 0 \tag{3.8.21}$$

既影响子空间 1 又影响子空间 2 的无穷小转动算符可写为

$$\left(1 - \frac{i\mathbf{J}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}\delta\phi}{\hbar}\right) \otimes \left(1 - \frac{i\mathbf{J}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}}\delta\phi}{\hbar}\right) = 1 - \frac{i(\mathbf{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \mathbf{J}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}}\delta\phi}{\hbar} \tag{3.8.22}$$

把总角动量定义为

$$\mathbf{J} \equiv \mathbf{J}_1 \otimes 1 + 1 \otimes \mathbf{J}_2, \tag{3.8.23}$$

更常见地被写成

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2, \tag{3.8.24}$$

有限角度下的 (3.8.22) 式为

$$\mathcal{D}_1(R) \otimes \mathcal{D}_2(R) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{J}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right) \otimes \exp\left(\frac{-i\mathbf{J}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right). \text{tag3.8.25}$$

注意相同的转动轴和同样的转角的出现.

极为重要的是要注意, 作为 (3.8.20) 式和 (3.8.21) 式的一个直接后果, 总的 \mathbf{J} 满足角动量对易关系

$$[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k \text{tag3.8.26}$$

换句话说, \mathbf{J} 是一个 3.1 节意义上的角动量. 这在物理上是合理的, 因为 \mathbf{J} 是整个系统的生成元. 在 3.5 节所得的一切——例如, \mathbf{J}^2 和 J_z 的本征值谱以及阶梯算符的矩阵元——对总的 \mathbf{J} 也都成立.

至于基右矢, 有两种选择.

选择 A: $\mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2, J_{1z}$ 和 J_{2z} 的共同本征右矢. 把这些右矢表示为 $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$, 显然, 这四个算符彼此对易. 定义它们的方程为

$$\mathbf{J}_1^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle, \text{tag3.8.27a}$$

$$J_{1z} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = m_1\hbar |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle, \text{tag3.8.27b}$$

$$\mathbf{J}_2^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle,$$

(3.8.27c)

$$J_{2z} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = m_2\hbar |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle.$$

(3.8.27 d)

选择 B: $\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2, \mathbf{J}_2^2$ 和 J_z 的共同本征右矢. 首先注意到这一组算符相互对易. 特别是, 有

$$[\mathbf{J}^2, \mathbf{J}_1^2] = 0, \text{tag3.8.28}$$

只要把 \mathbf{J}^2 写成

$$\mathbf{J}^2 = \mathbf{J}_1^2 + \mathbf{J}_2^2 + 2J_{1z}J_{2z} + J_{1+}J_{2-} + J_{1-}J_{2+}. \text{tag3.8.29}$$

(3.8.28) 式就很容易证明. 用 $|j_1, j_2; jm\rangle$ 代表选择 B 的基右矢:

$$\mathbf{J}_1^2 |j_1 j_2; jm\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2 |j_1 j_2; jm\rangle, \text{tag3.8.30a}$$

$$\mathbf{J}_2^2 |j_1 j_2; jm\rangle = j_2(j_2 + 1)\hbar^2 |j_1 j_2; jm\rangle, \text{tag3.8.30b}$$

$$\mathbf{J}^2 |j_1 j_2; jm\rangle = j(j + 1)\hbar^2 |j_1 j_2; jm\rangle, \text{tag3.8.30c}$$

$$J_z |j_1 j_2; jm\rangle = m\hbar |j_1 j_2; jm\rangle. \text{tag3.8.30d}$$

通常 j_1, j_2 是不言自明的, 因而基右矢简单地写成 $|j, m\rangle$.

非常重要的是要注意, 尽管

$$[\mathbf{J}^2, J_z] = 0, \text{tag3.8.31}$$

却有

$$[\mathbf{J}^2, J_{1z}] \neq 0, [\mathbf{J}^2, J_{2z}] \neq 0, \text{tag3.8.32}$$

实际上读者利用 (3.8.29) 式很容易证明它们. 这意味着, 不能把 \mathbf{J}^2 添加到选择 A 的算符集合中. 同样, 不能把 J_{1z} 和/或 J_{2z} 添加到选择 B 的算符集合中. 有两个可能的基右矢集合, 它们对应着已经构造的相互相容可观测量的两个极大集合.

考虑在 1.5 节意义上联系着两组基的么正变换:

$$|j_1 j_2; jm\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle, \text{tag3.8.33}$$

其中用到了

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2| = 1 \text{tag3.8.34}$$

该式右边是给定 j_1 和 j_2 的右矢空间中的单位算符. 这个变换矩阵矩阵元 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle$ 就是克莱布什-戈丹系数.

现在准备研究的克莱布什-戈丹系数具有许多重要的性质. 首先, 除非

$$m = m_1 + m_2, \text{tag3.8.35}$$

否则该系数为零. 要证明这一点, 注意到,

$$(J_z - J_{1z} - J_{2z}) |j_1 j_2; jm\rangle = 0. \text{tag3.8.36}$$

用 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2|$ 左乘上式, 得到

$$(m - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm\rangle = 0, \text{tag3.8.37}$$

它证明了上述论断. 钦佩狄拉克符号的能力! 正如已经做到的那样, 用狄拉克括号形式写出克莱布什-戈丹系数真的是很值得的.

其次, 除非满足

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2, \text{tag3.8.38}$$

否则该系数为零. 从角动量加法的矢量模型看来, 这个性质似乎很显然, 在我们把 \mathbf{J} 视为 \mathbf{J}_1 与 \mathbf{J}_2 的矢量和. 然而, 通过如下方法核实一下这一点还是值得的, 即: 证明若 (3.8.38) 式成立, 则 $\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\}$ 所张空间的维数与 $\{|j_1 j_2; jm\rangle\}$ 所张空间的维数是相同. 通过对 (m_1, m_2) 计数的方式, 得到

$$N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \text{tag3.8.39}$$

因为对给定的 j_1 , 有 $2j_1 + 1$ 个可能的 m_1 值; 类似的说法对另一个角动量 j_2 也是对的. 至于对 (j, m) 的计数方式, 注意到对每个 j , 有 $2j + 1$ 个态, 而按照 (3.8.38) 式, j 本身从 $j_1 - j_2$ 变到 $j_1 + j_2$, 其中不失普遍性假定了 $j_1 \geq j_2$. 因此, 得到

$$\begin{aligned}
N &= \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) \\
&= \frac{1}{2} [\{2(j_1-j_2)+1\} + \{2(j_1+j_2)+1\}] (2j_2+1) \tag{3.8.40} \\
&= (2j_1+1)(2j_2+1).
\end{aligned}$$

因为这两种计数方法给出了相同的 N 值, 得出 (3.8.38) 式是完全自洽*.

克莱布什-戈丹系数形成一个幺正矩阵. 另外, 按照约定, 该矩阵的矩阵元都取作实数. 它的直接结果是逆系数 $\langle j_1 j_2; jm | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle$ 与 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle$ 相同. 一个实的幺正矩阵是正交矩阵, 所以, 有正交条件

$$\sum_j \sum_m \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; jm \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}, \tag{3.8.41}$$

由 $\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\}$ 的正交性与克莱布什-戈丹系数的实数性, 上式显然成立. 同样, 还有

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j' m' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'}. \tag{3.8.42}$$

作为上式的特殊情况, 可以设 $j' = j, m' = m = m_1 + m_2$. 那么, 得到

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} |\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle|^2 = 1, \tag{3.8.43}$$

它正是 $|j_1 j_2; jm\rangle$ 的归一化条件.

一些作者采用了略微不同的克莱布什-戈丹系数符号. 代替 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle$, 有时用 $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm \rangle, C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m)$ 等. 它们还可以用维格纳 $3-j$ 符号写出来, 在文献中偶尔会见到:

$$\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle = (-1)^{j_1-j_2+m} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}. \tag{3.8.44}$$

3.7.3 克莱布什-戈丹系数的递推关系

在 j_1, j_2 和 j 固定的情况下, 具有不同的 m_1 和 m_2 的系数彼此通过递推关系联系起来. 从

$$J_{\pm} |j_1 j_2; jm\rangle = (j_{1\pm} + j_{2\pm}) \sum_{m_1} \sum_{m_2} |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle. \tag{3.8.45}$$

出发. 利用 (3.5.39) 式和 (3.5.40) 式, 得到 (在 $m_1 \rightarrow m'_1, m_2 \rightarrow m'_2$ 的情况下)

$$\begin{aligned}
&\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j_1 j_2; j, m \pm 1\rangle \\
&= \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} \left(\sqrt{(j_1 \mp m'_1)(j_1 \pm m'_1 + 1)} |j_1 j_2; m'_1 \pm 1, m'_2\rangle \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{(j_2 \mp m'_2)(j_2 \pm m'_2 + 1)} |j_1 j_2; m'_1, m'_2 \pm 1\rangle \right) \\
&\quad \times \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; jm \rangle.
\end{aligned} \tag{3.8.46}$$

下一步是左乘 $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 |$ 并使用正交归一性, 它意味着, 右边第一项的非零贡献只可能为

$$m_1 = m'_1 \pm 1, m_2 = m'_2 \quad (3.8.47)$$

而第二项的非零贡献为

$$m_1 = m'_1, m_2 = m'_2 \pm 1 \quad (3.8.48)$$

用这种方式, 得到所要求的递推关系:

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \pm 1 \rangle \\ &= \sqrt{(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)} \langle j_1 j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j_1 j_2; j, m \rangle \quad (3.8.49) \\ &+ \sqrt{(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)} \langle j_1 j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j_1 j_2; j, m \rangle. \end{aligned}$$

重要的是要注意, 因为 J_z 算符移动了 m 值, 克莱布什-戈丹系数的非零条件 (3.8.35) 式现在变成 [当作用于 (3.8.49) 式时]

$$m_1 + m_2 = m \pm 1 \quad (3.8.50)$$

通过在 $m_1 m_2$ 平面上观察 (3.8.49) 式, 可以领会递推关系的意义. J_+ 的递推关系 (取上面的符号) 说明, 在 (m_1, m_2) 处的系数与在 $(m_1 - 1, m_2)$ 及 $(m_1, m_2 - 1)$ 处的系数有关, 如图 3.8a 所示. 同样地, J_- 的递推关系 (取下面的符号) 也把三个系数联系起来, 它们的 m_1, m_2 值在图 3.8b 中给出.

递推关系 (3.8.49) 和归一化条件 (3.8.43) 一起几乎唯一地确定了所有的克莱布什-戈丹系数*. (“几乎唯一”是因为某些符号约定还必须规定.) 策略如下, 返回到 $m_1 m_2$ 平面, 仍然对固定的 j_1, j_2 和 j , 画出允许区的边界, 它由

$$|m_1| \leq j_1, |m_2| \leq j_2, -j \leq m_1 + m_2 \leq j \quad (3.8.51)$$

确定, (见图 3.9a). 从右上角出发, 用 A 表示它. 因为在 A 附近开始工作, 一个更详细地“地图”已就绪; 见图 3.9b. 由 $(m_1, m_2 + 1)$ 对应的 A 开始, 使用 J_- 递推关系

—
* 克莱布什-戈丹和拉卡 (Racah) 系数、重耦合以及类似的系数的详细讨论已经给出, 例如, Edmonds(1960) 的书.

图 3.8 显示通过递推关系 (3.8.49) 式关联的克莱布什-戈丹系数的 $m_1 m_2$ 平面

图 3.9 用递推关系求克莱布什-戈丹系数

(3.8.49) 式 (靠下的符号). 现在观察到这个递推关系只把 A 与 B 联系起来, 因为对应于 $(m_1 + 1, m_2)$ 的点是 $m_1 \leq j_1$ 禁戒的. 作为结果, 可以借助 A 的克莱布什-戈丹系数求得 B 的克莱布什-戈丹系数. 下一步, 构建一个由 A, B 和 D 组成的 J_+ 三角形. 这使得一经确定了 A 的系数, 就能够得到 D 的系数. 可以用这种方式继续做下去: 知道了 B 和 D , 可以得到 E ; 知道了 B 和 E , 可以得到 C , 等等. 只要有足够的耐心, 就可借助出发点 A 的系数, 得到每一点的克莱布什-戈丹系数. 对于整体的归一化, 使用 (3.8.43) 式. 最后的整体符号按照惯例固定下来 (见下面的例子).

作为一个重要的实例, 考虑一个自旋 $\frac{1}{2}$ 单粒子的轨道和自旋角动量相加的问题. 有

$$j_1 = l \text{ (整数)}, m_1 = m_l,$$

$$j_2 = s = \frac{1}{2}, m_2 = m_s = \pm \frac{1}{2}. \text{tag3.8.52}$$

j 的允许值由

$$j = l \pm \frac{1}{2}, l > 0; j = \frac{1}{2}, l = 0, \text{tag3.8.53}$$

给定, 所以, 对于每个 l , 有两个可能的 j 值. 例如, 对于 $l = 1$ (p 态), 得到用光谱学符号表示的 $p_{3/2}$ 和 $p_{1/2}$, 其中的下脚标指的是 j . 这个问题的 $m_l m_s$ 平面, 或许用 $m_l m_s$ 平面更好一些, 特别简单. 可允许的点只形成两行: 上面一行对应于 $m_s = \frac{1}{2}$, 而下面一行对应于 $m_s = -\frac{1}{2}$; 见图 3.10. 具体地说, 计算 $j = l + \frac{1}{2}$ 的情形. 因为 m_s 不可能超过 $\frac{1}{2}$, 能够这样使用 J_- 递推关系, 确保总是留在上面的一行 ($m_2 = m_s = \frac{1}{2}$), 同时每当 m_l 改变一个单位时, 考虑一个新的 J_- 三角形. 在书写克莱布什-戈丹系数时忽略掉 $j_1 = l, j_2 = \frac{1}{2}$, 从 (3.7.49) 式 (靠下的符号) 得到

$$\begin{aligned} & \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} + m + 1\right)\left(l + \frac{1}{2} - m\right)} \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid l + \frac{1}{2}, m \right\rangle \text{tag3.8.54} \\ & = \sqrt{\left(l + m + \frac{1}{2}\right)\left(l - m - \frac{1}{2}\right)} \left\langle m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid l + \frac{1}{2}, m + 1 \right\rangle, \end{aligned}$$

其中用到了

$$m_1 = m_l = m - \frac{1}{2}, m_2 = m_s = \frac{1}{2}. \text{tag3.8.55}$$

图 3.10 求解 $j_1 = l$ 和 $j_2 = s = \frac{1}{2}$ 的克莱布什-戈丹系数用到的递推关系

用这种方式, 可以水平移动一个单位:

$$\left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid l + \frac{1}{2}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{l + m + \frac{3}{2}}} \left\langle m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid l + \frac{1}{2}, m + 1 \right\rangle. \text{tag3.8.56}$$

反过来, 可用 $\{m + \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \mid l + \frac{1}{2}, m + 2\}$ 表示出 $\{m + \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid l + \frac{1}{2}, m + 1\}$ 等. 显然, 这个程序可以继续下去, 直到 m_l 达到最大的可能的值 l :

$$\begin{aligned} \left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \mid l + \frac{1}{2}, m \right\rangle &= \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{l + m + \frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{l + m + \frac{3}{2}}{l + m + \frac{5}{2}}} \left\langle m + \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \mid l + \frac{1}{2}, m + 2 \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{l + m + \frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{l + m + \frac{3}{2}}{l + m + \frac{5}{2}}} \sqrt{\frac{l + m + \frac{5}{2}}{l + m + \frac{7}{2}}} \\ &\quad \times \left\langle m + \frac{5}{2}, \frac{1}{2} \mid l + \frac{1}{2}, m + 3 \right\rangle \end{aligned}$$

\vdots

$$= \sqrt{\frac{l + m + \frac{1}{2}}{2l + 1}} \left\langle l, \frac{1}{2} \mid l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle. \text{tag3.8.57}$$

考虑 m_l 和 m_s 都取最大值的角动量组态——即分别为 l 和 $\frac{1}{2}$. 总的 $m = m_l + m_s$ 是 $l + \frac{1}{2}$, 它仅当 $j = l + \frac{1}{2}$ 而不是 $j = l - \frac{1}{2}$ 时才是可能的. 所以 $|m_l = l, m_s = \frac{1}{2}\rangle$ 一定在最多差一个相因子的情况下等于 $|j = l + \frac{1}{2}, m = l + \frac{1}{2}\rangle$. 按照惯例, 取这个相种选择, 有

$$\left\langle l, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, l + \frac{1}{2} \right\rangle = 1 \text{tag3.8.58}$$

返回到 (3.8.57) 式, 最终得到

$$\left\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \left| l + \frac{1}{2}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \cdot \text{tag3.8.59}$$

但是这还只是这个故事的四分之一, 仍须确定下式中问号的值:

$$\left| j = l + \frac{1}{2}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \left| m_l = m - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2} \right| \\ + ? \left| m_l = m + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle,$$

$$j = l - \frac{1}{2}, m \rangle = ? \left| m_l = m - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle + ? \left| m_l = m + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle. \text{tag3.8.60}$$

注意到, 由于正交性, 预期具有固定 m 值的、从 (m_l, m_s) 基到 (j, m) 基的变换矩阵有下列形式:

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}. \text{tag3.8.61}$$

与 (3.8.60) 式对照表明, $\cos \alpha$ 就是 (3.8.59) 式本身, 所以可以很容易地确定 $\sin \alpha$, 至多有一个符号有歧义:

$$\sin^2 \alpha = 1 - \frac{\left(l+m+\frac{1}{2}\right)}{(2l+1)} = \frac{\left(l-m+\frac{1}{2}\right)}{(2l+1)}. \text{tag3.8.62}$$

要求 $\left\{ m_l = m + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \left| j = l + \frac{1}{2}, m \right\rangle \right.$ 必须是正的, 因为所有的 $j = l + \frac{1}{2}$ 的态都可以通过 J_- 算符逐次作用于 $\left| j = l + \frac{1}{2}, m = l + \frac{1}{2} \right\rangle$ 得到, 而按照惯例, J_- 的矩阵元总是正的. 所以这个 2×2 变换矩阵 (3.8.61) 只能为

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} & \sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \\ -\sqrt{\frac{l-m+\frac{1}{2}}{2l+1}} & \sqrt{\frac{l+m+\frac{1}{2}}{2l+1}} \end{pmatrix}. \text{tag3.8.63}$$

把二分量的自旋角函数定义如下:

$$y_l^{j=l\pm 1/2, m} = \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m-1/2}(\theta, \phi) \chi_+ \\ + \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m+1/2}(\theta, \phi) \chi_- \text{tag3.8.64} \\ = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm \sqrt{\frac{l \pm m + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m-1/2}(\theta, \phi) \\ \sqrt{\frac{l \mp m + \frac{1}{2}}{2l+1}} Y_l^{m+1/2}(\theta, \phi) \end{pmatrix}.$$

通过它们的结构可看到, 它们是 $\mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, \mathbf{J}^2$ 和 J_z 的共同本征函数. 它们还是 $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ 的本征函数, 但是 $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ 只不过是

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \left(\frac{1}{2}\right) (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2), \text{tag 3.8.65}$$

因此是不独立的. 的确, 它的本征值可以很容易地计算

$$\left(\frac{\hbar^2}{2}\right) \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] = \begin{cases} \frac{l\hbar^2}{2} & \text{对于 } j = l + \frac{1}{2}, \\ -\frac{(l+1)\hbar^2}{2} & \text{对于 } j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \text{tag 3.8.66}$$

3.7.4 克莱布什-戈丹系数和转动矩阵

可以从转动矩阵观点出发讨论角动量加法. 在本征值为 j_1 的角动量本征右矢所张的右矢空间中考虑转动算符 $\mathcal{D}^{(j_1)}(R)$. 同样, 考虑 $\mathcal{D}^{(j_2)}(R)$. 在适当选择了基右矢之后的意义上, 乘积 $\mathcal{D}^{(j_1)} \otimes \mathcal{D}^{(j_2)}$ 是可约的, 它的矩阵表示可以取如下形式

(3.8.67)

用群论符号, 可以将其写成

$$\mathcal{D}^{(j_1)} \otimes \mathcal{D}^{(j_2)} = \mathcal{D}^{(j_1+j_2)} \oplus \mathcal{D}^{(j_1+j_2-1)} \oplus \dots \oplus \mathcal{D}^{(j_1-j_2)}. \text{tag 3.8.68}$$

(原书该式有重要错误, 等式右边也写成了张量积的形式. 现已订正. 一译者注) 借助于转动矩阵的矩阵元, 有一个称之为克莱布什-戈丹级数的重要展开:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(R) \mathcal{D}_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(R) &= \sum_j \sum_m \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \text{tag 3.8.69} \\ &\times \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j m' \rangle \mathcal{D}_{m m'}^{(j)}(R) \end{aligned}$$

其中对 j 的求和从 $|j_1 - j_2|$ 到 $j_1 + j_2$. 这个方程的证明如下. 首先, 注意 (3.8.69) 式的左边与

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \mathcal{D}(R) | j_1 j_2; m'_1 m'_2 \rangle &= \langle j_1 m_1 | \mathcal{D}(R) | j_1 m'_1 \rangle \langle j_2 m_2 | \mathcal{D}(R) | j_2 m'_2 \rangle \\ &= \mathcal{D}_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(R) \mathcal{D}_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(R). \text{tag 3.8.70} \end{aligned}$$

是一样的. 但是, 同样的矩阵元也可以通过插入在 (j, m) 基中的态的完备集来计算. 于是

$$\begin{aligned} &\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | \mathcal{D}(R) | j_1 j_2; m'_1 m'_2 \rangle \\ &= \sum_j \sum_m \sum_{j'} \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \langle j_1 j_2; j m | \mathcal{D}(R) | j_1 j_2; j' m' \rangle \\ &\quad \times \langle j_1 j_2; j' m' | j_1 j_2; m'_1 m'_2 \rangle \\ &= \sum_j \sum_m \sum_{j'} \sum_{m'} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \mathcal{D}_{m m'}^{(j)}(R) \delta_{j j'} \\ &\quad \times \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; j' m' \rangle, \text{tag 3.8.71} \end{aligned}$$

它正是 (3.8.69) 式的右边.

作为 (3.8.69) 式的一个有趣的应用, 推导一个包含三个球谐函数的重要积分公式. 首先, 回忆一下由 (3.6.52) 式给出的 $D_{m0}^{(l)}$ 和 Y_l^{m*} 间的联系. 令 (3.8.69) 式中的 $j_1 \rightarrow l_1, j_2 \rightarrow l_2, m'_1 \rightarrow 0, m'_2 \rightarrow 0$ (因此, $m' \rightarrow 0$), 在求复共轭之后, 得到,

$$Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) = \frac{\sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)}}{4\pi} \sum_{l'} \sum_{m'} \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l' m' \rangle$$

* 非常抱歉用 m 既表示了“质量”, 又表示了角动量量子数. 然而, 从本节上下文应当清楚哪个是哪个. $tag3.8.72$ 式子的两边乘以 $Y_l^{m*}(\theta, \phi)$, 然后对立体角求积分. 由于球谐函数的正交性, 求和消失了, 留下的是

$$\begin{aligned} & \int d\Omega Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_{l_1}^{m_1}(\theta, \phi) Y_{l_2}^{m_2}(\theta, \phi) \tag{3.8.73} \\ &= \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)}} \langle l_1 l_2; 00 | l_1 l_2; l0 \rangle \langle l_1 l_2; m_1 m_2 | l_1 l_2; lm \rangle. \end{aligned}$$

平方根因子乘以第一个克莱布什-戈丹系数不依赖于取向——即 m_1 和 m_2 . 第二个克莱布什-戈丹系数是一个适用于 l_1 和 l_2 相加得到总 l 的系数. 结果表明, 方程 (3.8.73) 是 3.11 节推导出的维格纳-埃卡特 (Wigner-Eckart) 定理的一种特殊情况. 这个公式在计算原子及原子核光谱学中的多极矩阵元时极为有用.

3.8 李代数进阶

3.8.1 张量, 不可约张量

1

3.8.2 矢量算符

书中已经使用了诸如 $\mathbf{x}, \mathbf{p}, \mathbf{S}$ 和 $\mathbf{1}$ 等符号, 但到目前为止, 还没有系统地讨论过它们的转动性质. 它们都是矢量算符, 但在转动之下它们有什么样的性质呢? 在本节, 基于矢量算符与角动量算符的对易关系, 给出它们精确的量子力学定义. 然后推广到具有更复杂变换性质的张量算符, 并推导出关于矢量算符和张量算符矩阵元的一个重要定理.

大家都知道, 经典物理中的矢量是一个具有三个分量的量, 在转动之下根据定义像 $V_i \rightarrow \sum_j R_{ij} V_j$ 一样变换. 合理的做法是, 要求量子力学中的一个矢量算符 V 的期待值在转动之下像一个经典矢量一样变换. 具体地说, 假定在转动之下当态右矢按照

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R)|\alpha\rangle, \tag{3.11.1}$$

变化时, \mathbf{V} 的期待值变化如下:

$$\langle \alpha | V_i | \alpha \rangle \rightarrow \langle \alpha | \mathcal{D}^\dagger(R) V_i \mathcal{D}(R) | \alpha \rangle = \sum_j R_{ij} \langle \alpha | V_j | \alpha \rangle, \tag{3.11.2}$$

这必须对任意的一个右矢都对. 因此, 作为一个算符方程式

$$\mathcal{D}^\dagger(R) V_i \mathcal{D}(R) = \sum_j R_{ij} V_j \tag{3.11.3}$$

必须成立, 其中 R_{ij} 是与转动对应的 3×3 矩阵.

下面考虑一种具体的情况, 即一个无穷小转动. 当转动是无穷小时, 有

$$\mathcal{D}(R) = 1 - \frac{i\varepsilon \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\hbar}. \text{tag3.11.4}$$

可以把 (3.11.3) 式写成

$$V_i + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_i, \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}] = \sum_j R_{ij}(\hat{\mathbf{n}}; \varepsilon) V_j, \text{tag3.11.5}$$

特别是, 对于沿 z 轴的 $\hat{\mathbf{n}}$, 有

$$R(\hat{\mathbf{z}}; \varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \text{tag3.11.6}$$

所以

$$i=1: V_x + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_x, J_z] = V_x - \varepsilon V_y, \text{tag3.11.7a}$$

$$i=2: V_y + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_y, J_z] = \varepsilon V_x + V_y, \text{tag3.11.7b}$$

$$i=3: V_z + \frac{\varepsilon}{i\hbar} [V_z, J_z] = V_z. \text{tag3.11.7c}$$

这意味着, \mathbf{V} 必须满足对易关系:

$$[V_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} \hbar V_k. \text{tag3.11.8}$$

显然, 在一个有限转动下 \mathbf{V} 的行为完全由上述对易关系确定; 只要将目前已非常熟悉的公式 (2.3.47) 应用于

$$\exp\left(\frac{iJ_j\phi}{\hbar}\right) V_i \exp\left(\frac{-iJ_j\phi}{\hbar}\right). \text{tag3.11.9}$$

只需计算

$$[J_j, [J_j, [\dots [J_j, V_i] \dots]]] \text{tag3.11.10}$$

就像自旋情况下的 (3.2.7) 式一样, 多重对易关系仍然返回 V_i 或者 V_k ($k \neq i, j$).

用 (3.11.8) 式作为一个矢量算符的定义属性. 注意, 角动量对易关系是 (3.11.8) 式中令 $V_i \rightarrow J_i, V_k \rightarrow J_k$ 的一种特殊情况. 其他的一些特殊情况是 $[y, L_z] = i\hbar x, [x, L_z] = -i\hbar y, [p_x, L_z] = -i\hbar p_y$ 和 $[p_y, L_z] = i\hbar p_x$, 这些都可以直接证明.

3.8.3 笛卡尔张量与不可约张量

在经典物理中, 通常在 3×3 正交矩阵 R 所规定的转动下, 通过把 $V_i \rightarrow \sum_j R_{ij} V_j$ 推广成:

$$T_{ijk} \dots \rightarrow \sum_{i'} \sum_{j'} \sum_{k'} \dots R_{ii'} R_{jj'} R_{kk'} \dots T_{i'j'k'} \dots \text{tag3.11.11}$$

来定义一个张量 $T_{yk} \dots$ 指标的数目称为张量的秩. 这样的张量叫笛卡尔张量.

最简单的秩为 2 的笛卡尔张量的例子是由两个矢量 \mathbf{U} 和 \mathbf{V} 构成的并矢. 人们只要取 \mathbf{U} 的一个笛卡尔分量和 \mathbf{V} 的一个笛卡尔分量, 然后把它们放到一起:

$$T_{ij} \equiv U_i V_j. \text{tag3.11.12}$$

注意, 总共有九个分量, 在转动下显然像 (3.11.11) 式那样变换.

像 (3.11.12) 式那样的一个笛卡尔张量遇到的麻烦是, 它是可约的——即它可以分解为几个成员, 它们在转动下的变换是不同的. 具体地说, 对 (3.11.12) 式中的并矢, 有

$$U_i V_j = \frac{\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{3} \delta_{ij} + \frac{(U_i V_j - U_j V_i)}{2} + \left(\frac{U_i V_j + U_j V_i}{2} - \frac{\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{3} \delta_{ij} \right). \text{tag3.11.13}$$

其右边的第一项 $\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}$ 是一个在转动下不变的标量积. 第二项是一个反对称张量, 它可以写成一个矢量积 $\varepsilon_{ijk}(\mathbf{U} \times \mathbf{V})_k$. 它一共有 3 个独立的分量. 最后一项是一个有 5 (= 6 - 1, 其中的 1 来自无迹条件) 个独立分量的 3×3 对称无迹张量. 核对独立分量的个数:

$$3 \times 3 = 1 + 3 + 5. \text{tag3.11.14}$$

注意到, 在 (3.11.14) 式右边出现的数恰好是角动量分别为 $l = 0, l = 1$ 和 $l = 2$ 成员的多重数. 这就表明并矢已被分解成能像 $l = 0, l = 1$ 和 $l = 2$ 的球谐函数一样变换的张量. 事实上, (3.11.13) 式是一个演示笛卡尔张量约化成不可约球张量的最简单的非平凡实例.

在介绍球张量的精确定义之前, 先给出一个秩为 k 的球张量的例子. 假定取球谐函数 $Y_l^m(\theta, \phi)$. 它可以写成 $Y_l^m(\hat{\mathbf{n}})$, 其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 的取向由 θ 和 ϕ 来表征. 现在用某个矢量 \mathbf{V} 代替 $\hat{\mathbf{n}}$. 结果是, 有了一个秩为 k (代替 l) 磁量子数为 q (代替 m) 的球张量, 即

$$T_q^{(k)} = Y_{l=k}^{m=q}(\mathbf{V}). \text{tag3.11.15}$$

具体地说, 在 $k = 1$ 的情况下, 取 $l = 1$ 的球谐函数, 并用 V_z 代替 $(z/r) = (\hat{\mathbf{n}})_z$, 等等.

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \rightarrow T_0^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} V_z, \text{tag3.11.16}$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{x \pm iy}{\sqrt{2}r} \rightarrow T_{\pm 1}^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \left(\mp \frac{V_x \pm iV_y}{\sqrt{2}} \right).$$

显然. 这可以推广到更高的 k . 例如

$$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{(x \pm iy)^2}{r^2} \rightarrow T_{\pm 2}^{(2)} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (V_x \pm iV_y)^2. \text{tag3.11.17}$$

$T_q^{(k)}$ 像 $Y_l^{(m)}$ 一样是不可约的. 由于这个原因, 用球张量比用笛卡尔张量更令人满意.

要看这样构造的球张量的变换, 先来评述在转动下 Y_l^m 如何变换. 首先, 对于方向本征右矢. 有

$$|\hat{\mathbf{n}}\rangle \rightarrow \mathcal{D}(R)|\hat{\mathbf{n}}\rangle \equiv |\hat{\mathbf{n}}'\rangle, \text{tag3.11.18}$$

它定义了转动后的本征右矢 $|\hat{\mathbf{n}}'\rangle$. 希望检查 $Y_l^m(\hat{\mathbf{n}}') = \langle \hat{\mathbf{n}}' | l, m \rangle$ 怎样用 $Y_l^m(\hat{\mathbf{n}})$ 表示. 从

$$\mathcal{D}(R^{-1}) \left| l, m \right\rangle = \sum_{m'} \left| l, m' \right\rangle \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(R^{-1}) \text{tag3.11.19}$$

出发, 用 $\langle \hat{\mathbf{n}} |$ 从左边收缩, 并利用 (3.11.18) 式, 很容易看到:

$$Y_l^m(\hat{\mathbf{n}}') = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\hat{\mathbf{n}}) \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(R^{-1}) \quad \text{tag 3.11.20}$$

如果有一个算符能像 $Y_l^m(\mathbf{V})$ 那样作用, 则预期

$$\mathcal{D}^\dagger(R) Y_l^m(\mathbf{V}) \mathcal{D}(R) = \sum_{m'} Y_l^{m'}(\mathbf{V}) \mathcal{D}_{mm'}^{(l)}(R) \quad \text{tag 3.11.21}$$

是合理的, 这里用转动算符的么正性重写了 $\mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(R^{-1})$

所有这些工作就是为了诱导出球张量的定义. 现在考虑量子力学中的球张量. 受 (3.11.21) 式的启发, 定义一个有 $2k+1$ 个分量的 k 秩球张量算符

$$\mathcal{D}^\dagger(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}(R) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{qq'}^{(k)*} T_{q'}^{(k)} \quad \text{tag 3.11.22a}$$

或等价地

$$\mathcal{D}(R) T_q^{(k)} \mathcal{D}^\dagger(R) = \sum_{q'=-k}^k \mathcal{D}_{q'q}^{(k)}(R) T_{q'}^{(k)} \quad \text{tag 3.11.22b}$$

不管 $T_q^{(k)}$ 是否可以写成 $Y_{l=k}^{m=q}(\mathbf{V})$, 这个定义都成立. 例如, 尽管 $(U_x + iU_y)(V_x + iV_y)$ 是一个二秩球张量的 $q = +2$ 分量, 与 $(V_x + iV_y)^2$ 不同, 它不能写成 $Y_k^q(\mathbf{V})$.

通过考虑 (3.11.22b) 式的无穷小形式, 可以得到球张量更为方便的定义, 即

$$\left(1 + \frac{i\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}\varepsilon}{\hbar}\right) T_q^{(k)} \left(1 - \frac{i\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}\varepsilon}{\hbar}\right) = \sum_{q'=-k}^k T_{q'}^{(k)} \left\langle kq' \left| \left(1 + \frac{i\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}\varepsilon}{\hbar}\right) \right| kq \right\rangle \quad \text{tag 3.11.23}$$

或

$$[\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}, T_q^{(k)}] = \sum_{q'} T_{q'}^{(k)} \langle kq' | \mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}} | kq \rangle \quad \text{tag 3.11.24}$$

取 $\hat{\mathbf{n}}$ 沿 $\hat{\mathbf{z}}$ 和 $(\hat{\mathbf{x}} \pm i\hat{\mathbf{y}})$ 方向, 并且利用 J_z 和 J_\pm 的非零矩阵元 [见 (3.5.35b) 和 (3.5.41) 式], 得到

$$[J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)} \quad \text{tag 3.11.25a}$$

和

$$[J_\pm, T_q^{(k)}] = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} T_{q\pm 1}^{(k)} \quad \text{tag 3.11.25b}$$

代替 (3.11.22) 式, 这些对易关系可看作球张量的定义.

3.8.4 张量积

书中已经多次用到了笛卡尔张量的语言. 的确, 用它们构造了标量、矢量、反对称张量和无迹对称张量. 例如, 请见 (3.11.13) 式. 当然, 也可以利用球张量语言 (Baym 1969, 第 17 章), 例如

$$T_0^{(0)} = \frac{-\mathbf{U} \cdot \mathbf{V}}{3} = \frac{(U_{+1}V_{-1} + U_{-1}V_{+1} - U_0V_0)}{3},$$

$$T_q^{(1)} = \frac{(\mathbf{U} \times \mathbf{V})_q}{i\sqrt{2}},$$

$$T_{\pm 2}^{(2)} = U_{\pm 1} V_{\pm 1}, \text{tag 3.11.26}$$

$$T_{\pm 1}^{(2)} = \frac{U_{\pm 1} V_0 + U_0 V_{\pm 1}}{\sqrt{2}},$$

$$T_0^{(2)} = \frac{U_{+1} V_{-1} + 2U_0 V_0 + U_{-1} V_{+1}}{\sqrt{6}},$$

其中 $U_q (V_q)$ 是一秩球张量的第 q 个分量, 对应着矢量 $\mathbf{U} (\mathbf{V})$. 通过与 Y_l^m 比较并记住 $U_{+1} = -(U_x + iU_y)/\sqrt{2}$, $U_{-1} = (U_x - iU_y)/\sqrt{2}$, $U_0 = U_z$, 可以检验前述的变换性质. 对 $V_{\pm 1,0}$ 可做类似的检验. 例如

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{3z^2 - r^2}{r^2},$$

其中 $3z^2 - r^2$ 可以写成

$$2z^2 + 2 \left[-\frac{(x+iy)}{\sqrt{2}} \frac{(x-iy)}{\sqrt{2}} \right],$$

因此, Y_2^0 正是 $T_0^{(2)}$ 在 $\mathbf{U} = \mathbf{V} = \mathbf{r}$ 时的特例.

一个更为系统的构成张量积的方法如下所示. 从一个定理开始:

定理 3.1 令 $X_{q_1}^{(k_1)}$ 和 $Z_{q_2}^{(k_2)}$ 分别为 k_1 秩和 k_2 秩的不可约球张量. 则

$$T_q^{(k)} = \sum_{q_1} \sum_{q_2} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k q \rangle X_{q_1}^{(k_1)} Z_{q_2}^{(k_2)} \text{tag 3.11.27}$$

是一个 k 秩球 (不可约) 张量.

证明必须证明在转动下 $T_q^{(k)}$ 一定按照 (3.11.22) 式变换.

$$\mathcal{D}^+ (R) T_q^{(k)} \mathcal{D} (R) = \sum_{q_1} \sum_{q_2} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k q \rangle$$

$$\times \mathcal{D}^\dagger (R) X_{q_1}^{(k_1)} \mathcal{D} (R) \mathcal{D}^\dagger (R) Z_{q_2}^{(k_2)} \mathcal{D} (R)$$

$$= \sum_{q_1} \sum_{q_2} \sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k q \rangle$$

$$\times X_{q_1^{(1)}}^{(k_1)} \mathcal{D}_{q_1^{(1)} q_1}^{(k_1)} (R^{-1}) Z_{q_2^{(2)}}^{(k_2)} \mathcal{D}_{q_2^{(2)} q_2}^{(k_2)} (R^{-1})$$

$$= \sum_{k'} \sum_{q_1} \sum_{q_2} \sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \sum_{q'} \sum_{q''} \sum_{q'} \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k q \rangle$$

$$\times \langle k_1 k_2; q'_1 q'_2 | k_1 k_2; k'' q' \rangle$$

$$\times \langle k_1 k_2; q_1 q_2 | k_1 k_2; k'' q'' \rangle \mathcal{D}_{q' q''}^{(k'')} (R^{-1}) X_{q'_1}^{(k_1)} Z_{q'_2}^{(k_2)},$$

其中用到了克莱布什-戈丹系数公式 (3.8.69) 式. 上述表达式变成

$$= \sum_{k'} \sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \sum_{q''} \sum_{q'} \delta_{kk''} \delta_{qq''} \langle k_1 k_2; q'_1 q'_2 | k_1 k_2; k'' q' \rangle \mathcal{D}_{q' q''}^{(k'')} (R^{-1}) X_{q'_1}^{(k_1)} Z_{q'_2}^{(k_2)}$$

其中用到了克莱布什-戈丹系数的正交性 (3.8.42) 式. 最后, 这个表达式约化为

$$\begin{aligned} &= \sum_{q'} \left(\sum_{q'_1} \sum_{q'_2} \langle k_1 k_2; q'_1 q'_2 | k_1 k_2; k q' \rangle X_{q'_1}^{(k_1)} Z_{q'_2}^{(k_2)} \right) D_{q' q}^{(k)} (R^{-1}) \\ &= \sum_{q'} T_q^{(k)} D_{q' q}^{(k)} (R^{-1}) = \sum_{q'} D_{q q'}^{(k)} (R) T_q^{(k)}. \end{aligned}$$

上述表明, 可以通过把两个张量算符相乘构造更高或更低秩的张量算符. 此外, 用两个张量构造张量积的方式完全类似于把两个角动量相加构造一个角动量本征态的方式, 如果令 $k_{1,2} \rightarrow j_{1,2}$ 和 $q_{1,2} \rightarrow m_{1,2}$, 则出现完全相同的克莱布什-戈丹系数.

3.8.5 张量算符的矩阵元及维格纳-埃卡特定理

在考虑电磁场与原子和原子核相互作用时, 经常需要计算张量算符对于角动量本征态的矩阵元. 一些这类的例子将在第 5 章给出. 一般来说, 计算这样的矩阵元是一件艰巨的动力学任务. 然而, 这些矩阵元具有一些纯粹来自运动学或几何学考虑的性质, 现在来讨论它们.

首先, 有一个非常简单的 m 选择定则:

$$\langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle = 0, \text{ 除非 } m' = q + m. \text{tag 3.11.28}$$

证明利用 (3.11.25a) 式, 有

$$\begin{aligned} \langle \alpha', j' m' | \left([J_z, T_q^{(k)}] - \hbar q T_q^{(k)} \right) | \alpha, j m \rangle &= [(m' - m) \hbar - \hbar q] \\ &\times \langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle = 0, \end{aligned}$$

因此

$$\langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle = 0, \text{ 除非 } m' = q + m.$$

另一种看到这种性质的方法是注意 $T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle$ 在转动下的变换性质, 即 (3.11.29)

如果现在令 \mathbf{D} 为绕 z 轴的一个转动算符, 得到 [请见 (3.11.22b) 式和 (3.1.16) 式]

$$\mathcal{D}(\hat{\mathbf{z}}, \phi) T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle = e^{-iq\phi} e^{-im\phi} T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle, \text{tag 3.11.30}$$

除非 $q + m = m'$, 否则它与 $|\alpha', j' m'\rangle$ 正交.

下面将证明量子力学中的最重要的定理之一, 维格纳-埃卡特定理.

定理 3.2 维格纳-埃卡特定理. 张量算符对于角动量本征态的矩阵元满足

$$\langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle = \langle j k; m q | j k; j' m' \rangle \frac{\langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle}{\sqrt{2j+1}}, \text{tag 3.11.31}$$

其中的双线矩阵元不依赖于 m, m' 和 q .

在阐述该定理的证明之前,先看一下它的意义.首先,可以看到这个矩阵元被写成两个因子之积.第一个因子是一个关于 j 和 k 相加得到 j' 的克莱布什-戈丹系数.它只依赖于几何学—即依赖系统相对于 z 轴的取向方式.不涉及张量算符任何特殊的性质.第二个因子确实依赖于动力学,例如, α 可以表示径向量子数,因而它的计算可能包含求径向积分.另一方面,它完全不依赖于确定该物理系统取向的磁量子数 m, m' 和 q . 要计算具有 m, m' 和 q' 各种组合的 $\langle \alpha', j' m' | T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle$, 只要知道它们中的一个就够了, 所有其他的矩阵元都能用几何学关联起来, 因为它们都正比于克莱布什-戈丹系数, 后者是已知的. 共同的比例因子是 $\langle \alpha' j' || T^{(k)} || \alpha j \rangle$, 它不涉及任何几何特点.

张量算符矩阵元的选择定则可以马上从角动量相加的选择定则中读取出来. 的确, 从克莱布什-戈丹系数非零的要求, 立即得到前面导出的 m 选择定则 (3.11.28) 式, 以及三角形关系

$$|j - k| \leq j' \leq j + k \quad \text{tag 3.11.32}$$

下面证明这个定理.

证明利用 (3.11.25b) 式, 有

$$\langle \alpha', j' m' | [J_{\pm}, T_q^{(k)}] | \alpha, j m \rangle = \hbar \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j' m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j m \rangle, \quad \text{tag 3.11.33}$$

或者利用 (3.5.39) 式和 (3.5.40) 式, 有

$$\begin{aligned} & \sqrt{(j' \pm m')(j' \mp m' + 1)} \langle \alpha', j', m' \mp 1 | T_q^{(k)} | \alpha, j m \rangle \\ &= \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} \langle \alpha', j', m' | T_q^{(k)} | \alpha, j, m \pm 1 \rangle \\ &+ \sqrt{(k \mp q)(k \pm q + 1)} \langle \alpha', j', m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j m \rangle. \quad \text{tag 3.11.34} \end{aligned}$$

把该式与克莱布什-戈丹系数的递推关系 (3.8.49) 式比较. 注意如果做代换 $j' \rightarrow j, m' \rightarrow$

$m, j \rightarrow j_1, m \rightarrow m_1, k \rightarrow j_2$ 和 $q \rightarrow m_2$, 则有惊人的相似性. 这两个递推关系都具有 $\sum_j a_{ij} x_j = 0$ 形式, 即它们都是一阶齐次线性方程组, 而且有相同的系数 a_{ij} . 每当

$$\sum_j a_{ij} x_j = 0, \quad \sum_j a_{ij} y_j = 0, \quad \text{tag 3.11.35}$$

不能把 x_j (或 y_j) 的解分别都求出来, 但可以求解它们的比, 所以

$$\frac{x_j}{x_k} = \frac{y_j}{y_k} \quad \text{或} \quad x_j = c y_j. \quad \text{tag 3.11.36}$$

其中 c 是一个普适的比例因子. 注意到克莱布什-戈丹系数的递推关系 (3.8.49) 式中的 $\langle j_1 j_2; m_1, m_2 \pm 1 | j_1 j_2; j m \rangle$ 对应于 $\langle \alpha', j' m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j m \rangle$, 得到

$$\langle \alpha', j' m' | T_{q \pm 1}^{(k)} | \alpha, j m \rangle = (\text{不依赖于 } m, q \text{ 和 } m' \text{ 的普适比例常数})$$

$$\langle j k; m q \pm 1 | j k; j' m' \rangle, \quad \text{tag 3.11.37}$$

于是证明了该定理.

现在看一下维格纳-埃卡特定理的两个简单例子.

例 3.5.0 秩张量, 即标量 $T_0^{(0)} = S$. 一个标量算符的矩阵元满足

$$\langle \alpha', j' m' | S | \alpha, j m \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \frac{\langle \alpha' j' \| S \| \alpha j \rangle}{\sqrt{2j+1}} \quad \text{tag3.11.38}$$

因为 S 作用于 $|\alpha, j m\rangle$ 就像加上一个零角动量. 于是, 标量算符不可能改变 j, m 的值.

例 3.6 利用球张量语言, 矢量算符是一个一秩张量. \mathbf{V} 的球分量可以写成 $V_{q=\pm 1, 0}$, 所以有选择定则

$$\Delta m \equiv m' - m = \pm 1, 0 \quad \Delta j \equiv j' - j = \begin{cases} \pm 1 \\ 0 \end{cases} \quad \text{tag3.11.39}$$

此外, $0 \rightarrow 0$ 的跃迁是禁戒的. 这个选择定则在辐射理论中是非常重要的. 它是在发射光子的长波极限下求得的偶极选择定则.

$j = j'$ 时的维格纳-埃卡特定理——当将其用于矢量算符时——有特别简单的形式, 由于一些明显的理由, 它经常被称之为投影定理.

定理 3.3 投影定理

$$\langle \alpha', j m' | V_q | \alpha, j m \rangle = \frac{\langle \alpha', j m | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, j m \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle j m' | J_q | j m \rangle, \quad \text{tag3.11.40}$$

其中, 类似在 (3.11.26) 式之后的讨论, 选择

$$J_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (J_x \pm i J_y) = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} J_{\pm}, \quad J_0 = J_z. \quad \text{tag3.11.41}$$

证明注意 (3.11.26) 式, 使用维格纳-埃卡特定理 (3.11.31) 式, 有

$$\langle \alpha', j m | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, j m \rangle = \langle \alpha', j m | (J_0 V_0 - J_{+1} V_{-1} - J_{-1} V_{+1}) | \alpha, j m \rangle$$

$$= m \hbar \langle \alpha', j m | V_0 | \alpha, j m \rangle + \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

$$\times \langle \alpha', j m - 1 | V_{-1} | \alpha, j m \rangle \quad \text{tag3.11.42}$$

$$- \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \langle \alpha', j m + 1 | V_{+1} | \alpha, j m \rangle$$

,

$$= c_{jm} \langle \alpha' j \| \mathbf{V} \| \alpha j \rangle$$

其中 c_{jm} 不依赖于 α, α' 和 \mathbf{V} , 并且 $V_{0,\pm 1}$ 的矩阵元都正比于双线矩阵元 (有时也称为约化矩阵元). 此外, c_{jm} 不依赖于 m , 因为 $\mathbf{J} \cdot \mathbf{V}$ 是一个标量算符, 所以也可以把它写做 c_j . 因为 c_j 不依赖于 \mathbf{V} , 即使令 $\mathbf{V} \rightarrow \mathbf{J}$ 和 $\alpha' \rightarrow \alpha$, (3.11.42) 式仍成立, 即

$$\langle \alpha, j m | \mathbf{J}^2 | \alpha, j m \rangle = c_j \langle \alpha j \| \mathbf{J} \| \alpha j \rangle. \quad \text{tag3.11.43}$$

返回到应用于 V_q 和 J_q 的维格纳-埃卡特定理, 有

$$\frac{\langle \alpha', j m' | V_q | \alpha, j m \rangle}{\langle \alpha, j m' | J_q | \alpha, j m \rangle} = \frac{\langle \alpha' j \| \mathbf{V} \| \alpha j \rangle}{\langle \alpha j \| \mathbf{J} \| \alpha j \rangle} \quad \text{tag3.11.44}$$

但是我们可以利用 (3.11.42) 式和 (3.11.43) 式把 (3.11.44) 式的右边写成 $\langle \alpha', j m | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, j m \rangle / \langle \alpha, j m | \mathbf{J}^2 | \alpha, j m \rangle$

. 此外,(3.11.43) 式的左边正是 $j(j+1)\hbar^2$. 所以

$$\langle \alpha', jm' | V_q | \alpha, jm \rangle = \frac{\langle \alpha', jm | \mathbf{J} \cdot \mathbf{V} | \alpha, jm \rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle jm' | J_q | jm \rangle, \text{tag 3.11.45}$$

投影定理得证.

3.8.6 卡西米尔算符 (Casimir operator)

1

3.8.7 典型李代数的二阶卡西米尔算符

1

3.9 对称性

3.9.1 诺特定理

1

3.9.2 库仑势中的 SO(4) 对称性

量子力学中连续对称性的一个很好例子是由氢原子问题以及库仑势的解提供的. 在 3.7 节完成了这个问题的求解, 在那里能量本征值 (3.7.53) 式表明了 (3.7.56) 式所总结的显著的简并. 假如这一简并只是一种偶然, 则会更加引人注目, 但事实上, 它是 $1/r$ 势束缚态问题特有的一种附加对称性的结果.

在这样的位势中轨道的经典问题, 即开普勒问题, 当然在量子力学之前很早就已经充分研究过了. 它的解导致椭圆轨道都是闭合的, 这一事实意味着应当存在某个保持椭圆主轴取向不变的 (矢量) 运动常数. 即使对于 $1/r$ 只有一个小的偏离也会导致这个轴的进动, 所以我们预期, 要找的这个运动常数事实上是 $1/r$ 势所特有的.

经典上. 这个新的运动常数是

$$\mathbf{M} = \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{L}}{m} - \frac{Ze^2}{r} \mathbf{r} \text{tag 4.1.19}$$

其中引用了 3.7 节用过的符号. 这个量一般称为楞次矢量或者有时候称为龙格-楞次 (Runge-Lenz) 矢量. 与在这里反复讨论经典处理, 不如转向根据作为这个运动常数起因的对称性的量子力学处理.

这个新的对称性, 被称为 SO(4), 完全类似于 3.3 节研究过的 SO(3) 对称性. 这就是说, SO(4) 是四维空间的转动算符群. 等价地, 它是行列式为 1 的 4×4 正交矩阵群. 逐步建立起导致楞次矢量作为一个运动常数的这个对称性的性质, 那时我们将看到这些性质正是由 SO(4) 预期的.

所用的方法密切遵循席夫 (1968), pp. 235–239 给出的方法*. 首先需要修改 (4.1.19) 式, 以构造一个厄米算符. 对于两个厄米的矢量算符 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} , 易证 $(\mathbf{A} \times \mathbf{B})^+ = -\mathbf{B} \times \mathbf{A}$. 因此, 一个厄米版本的楞次矢量是

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - \frac{Ze^2}{r} \mathbf{r}. \text{tag 4.1.20}$$

可以证明, \mathbf{M} 与哈密顿量

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r} \text{tag 4.1.21}$$

对易. 即

$$[\mathbf{M}, H] = 0, \text{tag4.1.22}$$

因此, \mathbf{M} 的确是一个 (量子力学) 运动常数. 可以证明其他一些有用的关系, 即

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{M} = 0 = \mathbf{M} \cdot \mathbf{L} \text{tag4.1.23}$$

$$\text{和 } \mathbf{M}^2 = \frac{2}{m} H (\mathbf{L}^2 + \hbar^2) + Z^2 e^4. \text{tag4.1.24}$$

为了确认作为这个运动常数起源的对称性, 评述一下这个对称性的生成代数是很有意义的. 已知的这个代数的一部分

$$[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k, \text{tag4.1.25}$$

早些时候曾用这种符号把它写成 (3.6.2) 式, 其中重复指标 (在这种情况下是 k) 表示对于分量的自动求和. 还可以证明

$$[M_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} M_k, \text{tag4.1.26}$$

它事实上确立 \mathbf{M} 为一个 (3.11.8) 式意义上的矢量算符. 最后, 能够导出

$$[M_i, M_j] = -i\hbar \varepsilon_{ijk} \frac{2}{m} H L_k, \text{tag4.1.27}$$

无疑, (4.1.25) 式、(4.1.26) 式和 (4.1.27) 式构不成一个封闭代数, 原因在于在 (4.1.27) 式中存在 H , 这使得很难把这些算符看作是一个连续对称性的生成元. 然而, 可以考虑特定的束缚态问题. 在这种情况下, 矢量空间被删减为只有 H 的本征态的那部分, 其能量 $E < 0$. 在那种情况下, 用 (4.1.27) 式中的 E 取代 H , 于是这个代数就封闭了. 富有启发的做法是, 把 \mathbf{M} 代之以重新标度的矢量算符

$$\mathbf{N} \equiv \left(-\frac{m}{2E}\right)^{1/2} \mathbf{M}. \text{tag4.1.28}$$

在这种情况下, 有封闭的代数

$$[L_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k,$$

(4.1.29a)

$$[N_i, L_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} N_k, \text{tag4.1.29b}$$

$$[N_i, N_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} L_k.$$

(4.1.29c)

那么, 由 (4.1.29) 式中的算符 \mathbf{L} 和 \mathbf{N} 生成的对称性操作是什么呢? 尽管还远非显然, 但答案是“四维空间的转动”. 第一个线索是生成元的个数, 即六个, 它们中的每一个都应当对应于绕某个轴的转动. 把转动设想为一种将两个正交的轴混合起来的操作. 那么, n 维空间中转动生成元的个数应该是 n 个东西每次取两个的组合数, 即 $n(n-1)/2$. 结果, 二维转动要求一个生成元, 即 L_z . 三维转动要求三个生成元, 即 \mathbf{L} , 而四维转动要求六个生成元.

很难看到, (4.1.29) 式是这类转动的合适的代数, 但是按如下步骤操作. 在三维空间中, 轨道角动量算符 (3.6.1) 式生成转动. 在 (3.6.6) 式中清楚地看到了这一点, 在那里 $|\alpha\rangle$ 态上绕 z 轴的一个无穷小转动在 $|x, y, z\rangle$ 基的一个转

动后的版本中表示了出来. 这恰是动量算符作为空间平移生成元的一种后果. 事实上, 像 $L_z = xp_y - yp_x$ 的这样一种组合的确把 x 轴与 y 轴混合起来, 正如人们从绕 z 轴转动的生成元本应期待的那样.

为了把这个做法推广到四维空间, 首先把 (x, y, z) 和 (p_x, p_y, p_z) 视为 (x_1, x_2, x_3) 和 (p_1, p_2, p_3) . 它导致把生成元改写成 $L_3 = \tilde{L}_{12} = x_1 p_2 - x_2 p_1$, $L_1 = \tilde{L}_{23}$ 和 $L_2 = \tilde{L}_{31}$. 然

后, 如果虚构一个空间维度 x_4 以及它的共轭动量 p_4 (具有通常的对易关系), 则可以定义

$$\tilde{L}_{11} = x_1 p_4 - x_4 p_1 \equiv N_1, \text{tag4.1.30a}$$

$$\tilde{L}_{24} = x_2 p_4 - x_4 p_2 \equiv N_2, \text{tag4.1.30b}$$

$$\tilde{L}_{34} = x_3 p_4 - x_4 p_3 \equiv N_3,$$

(4. 1.30c)

易证, 这些算符 N_i 遵从代数 (4.1.29) 式. 例如,

$$\begin{aligned} [N_1, L_2] &= [x_1 p_1 - x_1 p_1, x_3 p_1 - x_1 p_3] \\ &= p_4 [x_1, p_1] x_3 + x_4 [p_1, x_1] p_3 \text{tag4.1.31} \\ &= i\hbar (x_3 p_4 - x_4 p_3) = i\hbar N_3. \end{aligned}$$

换句话说, 这是四维空间的代数. 稍后将回到这个符号, 但是现在, 将继续讨论由 (4.1.14) 式所隐含的库伦势中的简并性.

定义算符

$$\mathbf{I} \equiv (\mathbf{L} + \mathbf{N})/2, \text{tag4.1.32}$$

$$\mathbf{K} \equiv (\mathbf{L} - \mathbf{N})/2, \text{tag4.1.33}$$

可以容易地证明下列代数:

$$[I_i, I_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} I_k,$$

(4. 1.34a)

$$[K_i, K_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} K_k, \text{tag4.1.34b}$$

$$[I_i, K_j] = 0.$$

(4. 1.34c)

因此, 这些算符遵从独立的角动量代数. 而且显然还有 $[\mathbf{I}, H] = [\mathbf{K}, H] = 0$. 所以, 这些“角动量”都是守恒量, 于是, 算符 \mathbf{I}^2 和 \mathbf{K}^2 的本征值分别用 $i(i+1)\hbar^2$ 和 $k(k+1)\hbar^2$ 代表, 其中 $i, k = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$.

因为根据 (4.1.23) 和 (4.1.28), $\mathbf{I}^2 - \mathbf{K}^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{N} = 0$, 一定有 $i = k$. 另一方面, 算符

$$\mathbf{I}^2 + \mathbf{K}^2 = \frac{1}{2} (\mathbf{L}^2 + \mathbf{N}^2) = \frac{1}{2} \left(\mathbf{L}^2 - \frac{m}{2E} \mathbf{M}^2 \right) \tag{4.1.35}$$

和 (4.1.24) 一起, 导致数值关系

$$2k(k+1)\hbar^2 = \frac{1}{2} \left(-\hbar^2 - \frac{m}{2E} Z^2 e^4 \right) \tag{4.1.36}$$

解出 E , 得知

$$E = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(2k+1)^2} \tag{4.1.37}$$

这个结果与 (3.7.53) 相同, 只是主量子数 n 用 $2k+1$ 代替. 我们现在看到库仑问题的简并来源于由算符 \mathbf{I} 和 \mathbf{K} 表示的两个“转动”对称性. 事实上, 简并度是 $(2i+1)(2k+1) = (2k+1)^2 = n^2$. 除了很显然这个简并不是偶然的之外, 它正是我们在 (3.7.56) 式中所得到的结果.

值得注意的是, 刚刚解出了氢原子的本征值, 没有像过去那样诉诸求解薛定谔方程. 相反, 利用了内在的对称性, 得到了同样的答案. 这个解显然是泡利最早得到的.

用 3.3 节开始发展的连续群理论的语言, 可得知代数 (4.1.29) 式对应于 $\text{SO}(4)$ 群. 此外, 把这个代数改写为 (4.1.34) 式表明, 它还可以视为两个独立的 $\text{SU}(2)$ 群, 即 $\text{SU}(2) \times \text{SU}(2)$. 尽管把群论的介绍包括进来不是本书的目的, 但仍将稍微地推进一步, 以表明人们如何从形式上实现 n 维空间的转动, 即 $\text{SO}(n)$ 群.

推广 3.3 节中的讨论, 考虑实施 n 维转动的 $n \times n$ 正交矩阵 R . 它们可以参量化为

$$R = \exp \left(i \sum_{q=1}^{n(n-1)/2} \phi^q \tau^q \right) \tag{4.1.38}$$

其中 τ^q 是纯虚的反对称 $n \times n$ 矩阵, 即 $(\tau^q)^T = -\tau^q$, 而 ϕ^q 是广义转角. 反对称条件保证 R 是正交的. 整体的因子 i 意味着虚的矩阵 τ^q 也是厄米的.

τ^q 显然与转动算符的生成元有关. 事实上, 它们的对易关系应当由这些生成元的对易关系模仿得到. 像 3.1 节那样接着做下去, 把先绕 q 轴做无穷小转动, 然后绕 p 轴转动, 同相反次序的转动的作用结果作比较. 那么

$$(1 + i\phi^p \tau^p) (1 + i\phi^q \tau^q) - (1 + i\phi^q \tau^q) (1 + i\phi^p \tau^p)$$

$$= -\phi^p \phi^q [\tau^p, \tau^q] \tag{4.1.39}$$

$$= 1 - \left(1 + i\phi^p \phi^q \sum_r f_r^{pq} \tau^r \right),$$

其中 (4.1.39) 式的最后一行确认, 这个结果一定是一个绕这两个轴的二级转动, 且带有生成元的某种线性组合. f_r^{pq} 称为这个转动群的结构常数. 于是有对易关系

$$[\tau^p, \tau^q] = i \sum_r f_r^{pq} \tau^r \tag{4.1.40}$$

进一步需要确定这个结构常数 f_r^{pq} , 这些细节留给专门的群论教科书. 然而不难证明, 在三维如所预期的 $f_r^{pq} = \varepsilon_{pqr}$.

3.9.3 分立对称性, 宇称

至此, 连续对称性操作已经考虑了, 即可以通过相继应用无穷小对称性操作得到的那些. 并非所有的在量子力学有用的对称性操作都一定是这种形式的. 在本章将考虑三种与连续性操作相反的、可以认为是分立的对称性操作——宇称、晶格平移和时间反演.

图 4.1 右手 (RH) 和左手 (LH) 坐标系

第一个要考虑的操作是宇称, 或空间反射. 宇称操作应用于坐标系变换时, 把一个右手 (RH) 坐标系变成一个左手 (LH) 坐标系, 如图 4.1 所示. 然而本书中考虑的是对于态右矢的变换, 而不是对于坐标系的变换. 给定 $|\alpha\rangle$, 考虑一个空间反射态, 假定它是通过一个所谓的宇称算符的么正算符 π 的作用得到的, 如下所示:

$$|\alpha\rangle \rightarrow \pi|\alpha\rangle \tag{4.2.1}$$

要求 \mathbf{x} 对于空间反射后的态所取的期待值有相反的符号

$$\langle\alpha|\pi^\dagger \mathbf{x} \pi|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\mathbf{x}|\alpha\rangle, \tag{4.2.2}$$

这是一个非常合理的要求. 如果

$$\pi^\dagger \mathbf{x} \pi = -\mathbf{x} \tag{4.2.3}$$

或

$$\mathbf{x} \pi = -\pi \mathbf{x}, \tag{4.2.4}$$

则该要求可以实现, 其中用到了 π 是么正的这一事实. 换句话说, \mathbf{x} 和 π 必须反对易. 位置算符的本征右矢在宇称之下如何变换? 可以断言

$$\pi|\mathbf{x}'\rangle = e^{i\delta} |-\mathbf{x}'\rangle, \tag{4.2.5}$$

其中 $e^{i\delta}$ 是一个相位因子 (δ 为实数). 为了证明这一说法成立, 注意

$$\mathbf{x} \pi|\mathbf{x}'\rangle = -\pi \mathbf{x}|\mathbf{x}'\rangle = (-\mathbf{x}') \pi|\mathbf{x}'\rangle. \tag{4.2.6}$$

这个方程是说, $\pi|\mathbf{x}'\rangle$ 是 \mathbf{x} 的一个本征右矢, 其本征值为 $-\mathbf{x}'$, 因此它一定与位置本征右矢 $|-\mathbf{x}'\rangle$ 相同, 至多差一个相因子.

按惯例, 取 $e^{i\delta} = 1$ 作为约定. 把它带入到 (4.2.5) 式中, 有 $\pi^2|\mathbf{x}'\rangle = |\mathbf{x}'\rangle$. 因此, $\pi^2 = 1$, 这就是说, 用 π 作用两次, 回到了原来的态. 从 (4.2.5) 式易见, π 现在不只是么正的, 而且也是厄米的:

$$\pi^{-1} = \pi^\dagger = \pi \tag{4.2.7}$$

它的本征值只能是 +1 或者 -1.

动量算符怎么样呢? 动量 \mathbf{p} 与 $m d\mathbf{x}/dt$ 是一样的, 所以自然地预期它在宇称作用之下, 像 \mathbf{x} 一样, 是奇的. 更满意的论证把动量算符认为是平移生成元, 正如可以从图 4.2 可以看出, 平移之后紧接着宇称等价于宇称之后紧接着沿反方向的平移, 因此

$$\pi \mathcal{J}(d\mathbf{x}') = \mathcal{J}(-d\mathbf{x}') \pi \tag{4.2.8}$$

$$\pi \left(1 - \frac{i\mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}'}{\hbar} \right) \pi^\dagger = 1 + \frac{i\mathbf{p} \cdot d\mathbf{x}'}{\hbar}, \tag{4.2.9}$$

于是有

$$\{\pi, \mathbf{p}\} = 0 \text{ 或 } \pi^\dagger \mathbf{p} \pi = -\mathbf{p}. \text{tag4.2.10}$$

图 4.2 平移紧接着宇称或反过来

现在讨论在宇称之下 \mathbf{J} 的行为. 首先, 对于轨道角动量显然有

$$[\pi, \mathbf{L}] = 0 \text{tag4.2.11}$$

因为

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}. \text{tag4.2.12}$$

(4.2.33) 动生成元的事实. 对于 3×3 正交矩阵, 有

$$R^{(\text{宇称})} R^{(\text{转动})} = R^{(\text{转动})} R^{(\text{宇称})} \text{tag4.2.13}$$

其中明确地写出来

$$R^{(\text{宇称})} = \begin{pmatrix} -1 & & 0 \\ & -1 & \\ 0 & & -1 \end{pmatrix}; \text{tag4.2.14}$$

这就是说宇称和转动算符对易. 在量子力学中, 自然地假设对于么正算符有相应的关系, 因此

$$\pi \mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(R) \pi, \text{tag4.2.15}$$

其中, $\mathcal{D}(R) = 1 - i\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}\varepsilon/\hbar$. 从 (4.2.15) 式得出结论

$$[\pi, \mathbf{J}] = 0 \text{ 或 } \pi^\dagger \mathbf{J} \pi = \mathbf{J}. \text{tag4.2.16}$$

该式与 (4.2.11) 式一起意味着自旋算符 \mathbf{S} (导致总角动量 $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$) 也和 \mathbf{L} 一样的相同方式变换.

在转动下, \mathbf{x} 和 \mathbf{J} 以相同方式变换, 所以它们都是矢量, 或秩为 1 的球张量. 然而 \mathbf{x} (或 \mathbf{p}) 在宇称下为奇, [见 (4.2.3) 式和 (4.2.10) 式], 而 \mathbf{J} 在宇称下是偶的 [见 (4.2.16) 式]. 在宇称下为奇的矢量称为极矢量, 而宇称下为偶的矢量称为轴矢量或赝矢量.

现在考虑像 $\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}$ 这样的算符. 在转动下, 它们像普通标量一样的变换, 比如 $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ 或 $\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}$ 那样. 而在空间反射下有

$$\pi^{-1} \mathbf{S} \cdot \mathbf{x} \pi = -\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}, \text{tag4.2.17}$$

然而, 对于通常的标量有

$$\pi^{-1} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \pi = \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \text{tag4.2.18}$$

等. 算符 $\mathbf{S} \cdot \mathbf{x}$ 是赝标量的一个例子.

3.9.4 晶格平移作为一种分立对称性

现在考虑另一类分立对称性操作, 即晶格平移. 这一主题在固体物理中有极为重要的应用.

考虑一个一维周期势, 其中 $V(x \pm a) = V(x)$, 如图 4.7 所示. 但实际上, 可以考虑在一个空间位置等间隔排列的正离子链中一个电子的运动. 一般而言, 这个哈密顿量在 l 取任意值时由 $\tau(l)$ 所表示的一个平移之下不是不变的, 其中 $\tau(l)$ 有如下性质 (见 1.6 节)

$$\tau^\dagger(l) x \tau(l) = x + l, \quad \tau(l) |x'\rangle = |x' + l\rangle. \text{tag4.3.1}$$

然而, 当 l 与晶格间距 a 相符时, 会有

$$\tau^\dagger(a) V(x) \tau(a) = V(x + a) = V(x). \text{tag4.3.2}$$

因为哈密顿量的动能部分在任何位移的平移下都是不变的, 所以整个哈密顿量满足

$$\tau^\dagger(a) H \tau(a) = H. \text{tag4.3.3}$$

因为 $\tau(a)$ 是幺正的, 从 (4.3.3) 式有

$$[H, \tau(a)] = 0, \text{tag4.3.4}$$

因此该哈密顿量与 $\tau(a)$ 可以同时对角化. 尽管 $\tau(a)$ 是幺正的, 但不是厄米的, 所以它的本征值预期是一个模为 1 的复数.

图 4.7 (a) 周期为 a 的一维周期势. (b) 当相邻两个格点之间势垒高度变成无穷大时的周期势

在确定 $\tau(a)$ 的本征右矢和本征值并考察它们的物理意义之前, 富有启发意义的是, 看一看如图 4.7 b 所示的、当相邻两个格点之间势垒高度趋向无穷大时的周期势的特殊情况. 4.7 b 位势的基态是什么呢? 显然, 粒子完全定位于晶格中的一个格点的态可能是基态的一个候选者. 为确定起见, 假设粒子定位于第 n 个格点, 并且用 $|n\rangle$ 代表相应的右矢. 这是一个能量本征右矢, 其能量本征值为 E_0 , 即 $H|n\rangle = E_0|n\rangle$. 它的波函数 $\langle x'|n\rangle$ 仅在第 n 个格点处有限. 然而, 注意到, 定位于某另一格点的一个类似的态也有同样的能量 E_0 , 因此实际上有可数的无穷多个基态 n , 其中的 n 从 $-\infty$ 到 ∞ .

显然, $|n\rangle$ 不是一个晶格平移算符的本征右矢, 因为当晶格平移算符作用于它时, 得到 $|n+1\rangle$:

$$\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle. \text{tag4.3.5}$$

所以, 尽管事实上 $\tau(a)$ 与 H 对易, $|n\rangle$ 是 H 的一个本征右矢——却不是 $\tau(a)$ 的一个本征右矢. 这一点与早些时候的对称性定理完全自洽, 因为有一个无穷维简并. 当存在这样的简并时, 这个世界的对称性不需要是能量本征态的对称性. 现在的任务是找到 H 与 $\tau(a)$ 的共同本征右矢.

在这里, 可以回忆一下如何处理前一节有点类似的对称双阱势情况. 注意到, 尽管 $|R\rangle$ 和 $|L\rangle$ 都不是 π 的本征右矢, 却能够容易地构成 $|R\rangle$ 和 $|L\rangle$ 的一个对称组合与一个反对称组合, 它们都是宇称的本征右矢. 这种情况与这里类似. 下面具体地构成一个线性组合

$$|\theta\rangle \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} |n\rangle, \text{tag4.3.6}$$

其中的 θ 是一个实参量, 取值为 $-\pi \leq \theta \leq \pi$. 可以断定 $|\theta\rangle$ 是 H 和 $\tau(a)$ 的一个共同本征右矢. 它是 H 的一个本征右矢是显然的, 因为 $|n\rangle$ 是能量的一个本征右矢, 本征值为 E_0 , 它不依赖于 n . 为了证明它也是晶格平移算符的一个本征右矢, 用 $\tau(a)$ 如下作用

$$\begin{aligned} \tau(a)|\theta\rangle &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} |n+1\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(n-1)\theta} |n\rangle \text{tag4.3.7} \\ &= e^{-i\theta} |\theta\rangle \end{aligned}$$

注意, H 和 $\tau(a)$ 的这个共同本征右矢用一个连续参量 θ 参量化. 此外, 能量本征值 E_0 不依赖于 θ .

现在回到图 4.7a 所示的更为现实的情况, 在那里两个相邻格点之间的势垒不是无穷高. 可以构造一个局域的本征右矢 $|n\rangle$, 它恰和前面一样, 具有性质 $\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle$. 然而, 这一次可以预期, 由于量子力学穿透的结果, 存在一些可能进入到相邻格点的泄漏. 换言之, 波函数 $\langle x' | n \rangle$ 有一个尾巴延伸到第 n 个格点之外的一些格点中. 因为平移不变性, 所以在基 $\{|n\rangle\}$ 中 H 的对角元都相等. 即

$$\langle n | H | n \rangle = E_0, \text{tag4.3.8}$$

如前一样, 它不依赖于 n . 然而, 我们怀疑, 作为泄漏的一个后果, 在基 $\{|n\rangle\}$ 中 H 不能完全对角化. 现在, 假定相邻格点之间的势垒很高 (但不是无限高). 那么可以预期, 在距离远的格点之间 H 的矩阵元完全可以忽略. 假设唯一重要的一些非对角元连接最近邻. 这就是说

$$\langle n' | H | n \rangle \neq 0 \text{ 反当 } n' = n \text{ 或 } n' = n \pm 1, \text{tag4.3.9}$$

在固体物理中, 这种假设被称为紧束缚近似. 定义

$$\langle n \pm 1 | H | n \rangle = -\Delta \text{tag4.3.10}$$

显然, 再一次由于哈密顿量的平移不变性, Δ 不依赖于 n . 在 $n \neq n'$ 时 $|n\rangle$ 和 $|n'\rangle$ 正交的范围内, 得到

$$H|n\rangle = E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle. \text{tag4.3.11}$$

注意, $|n\rangle$ 不再是一个能量本征右矢.

正如图 4.7b 所示的位势情况下所做的, 构成一个线性组合

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} |n\rangle \text{tag4.3.12}$$

显然, $|\theta\rangle$ 是平移算符 $\tau(a)$ 的本征右矢, 因为 (4.3.7) 式中的那些步骤仍然成立. 一个自然的问题是, $|\theta\rangle$ 是一个能量本征右矢吗? 为了回答这个问题, 用 H 作用:

$$\begin{aligned} H \sum e^{in\theta} |n\rangle &= E_0 \sum e^{in\theta} |n\rangle - \Delta \sum e^{in\theta} |n+1\rangle - \Delta \sum e^{in\theta} |n-1\rangle \\ &= E_0 \sum e^{in\theta} |n\rangle - \Delta \sum \left(e^{in\theta-i\theta} + e^{in\theta+i\theta} \right) |n\rangle \text{tag4.3.13} \\ &= (E_0 - 2\Delta \cos \theta) \sum e^{in\theta} |n\rangle, \end{aligned}$$

该式与以前的情况之间的最大差别是, 能量本征值现在依赖于连续的实参量 θ . 当 Δ 变成有限时, 简并解除了, 而且在 $E_0 - 2\Delta$ 和 $E_0 + 2\Delta$ 之间有了一个能量本征值的连续分布. 图 4.8 形象化地显示了随着 Δ 从零增大, 能级如何开始形成一个连续的能带.

为了理解参量 θ 的物理意义, 研究波函数 $\langle x' | \theta \rangle$. 对于晶格平移后的态 $\tau(a)|\theta\rangle$ 的波函数, 通过让 $\tau(a)$ 作用在 $\langle x' |$ 上, 有

$$\langle x' | \tau(a) | \theta \rangle = \langle x' - a | \theta \rangle. \text{tag4.3.14}$$

也可以让 $\tau(a)$ 作用在 $|\theta\rangle$ 上, 然后利用 (4.3.7) 式. 于是

$$\langle x' | \tau(a) | \theta \rangle = e^{-i\theta} \langle x' | \theta \rangle, \text{tag4.3.15}$$

所以,

$$\langle x' - a | \theta \rangle = \langle x' | \theta \rangle e^{-i\theta} \text{tag4.3.16}$$

通过设

$$\langle x' | \theta \rangle = e^{ikx'} u_k(x'), \text{tag4.3.17}$$

且取 $\theta = ka$, 求解上述方程, 其中 $u_k(x')$ 是一个周期函数, 周期为 a , 通过明显地代换容易证明这一点, 即

$$e^{ik(x'-a)} u_k(x'-a) = e^{ikx'} u_k(x') e^{-ika}. \text{tag4.3.18}$$

图 4.8 随着 Δ 从零增大, 能级形成一个连续的能带

这样, 得到布洛赫 (Bloch) 定理的重要条件: 作为 $\tau(a)$ 的一个本征右矢, $|\theta\rangle$ 的波函数可以写成一个平面波 $e^{ikx'}$ 乘以一个周期为 a 的周期函数. 注意, 利用的唯一的的事实是 $|\theta\rangle$ 是 $\tau(a)$ 的一个本征右矢, 本征值为 $e^{-i\theta}$ [见 (4.3.7) 式]. 特别是, 即使紧束缚近似 (4.3.9) 式被破坏了, 这个定理仍然成立.

图 4.9 在布里渊区 $|k| \leq \pi/a$ 中 $E(k)$ 对 k 的色散曲线

现在解释对于 $|\theta\rangle$ 给出的较早一些的结果 (4.3.13) 式. 我们知道, 这个波函数是一个平面波, 由受到了一个周期函数 $u_k(x')$ 调制的、传播的波矢量 k 所表征 [见 (4.3.17)]. 当 θ 从 $-\pi$ 变到 π 时, 波矢量 k 从 $-\pi/a$ 变到 π/a . 而能量本征值 E 现在对 k 的依赖关系如下:

$$E(k) = E_0 - 2\Delta \cos ka. \text{tag4.3.19}$$

注意, 只要紧束缚近似适用, 这个能量本征值方程不依赖于位势的具体形状. 还要注意, 布洛赫波函数 (4.3.17) 式的波矢量 k 中存在一个截断, 由 $|k| = \pi/a$ 给出. 方程 (4.3.19) 式定义了一条色散曲线, 如图 4.9 所示. 作为穿透的一个结果, 可数的无穷多重简并现在完全解除了, 而可允许的能量值在 $E_0 - 2\Delta$ 和 $E_0 + 2\Delta$ 之间形成, 一个连续的带, 所谓的布里渊区.

到此为止, 我们仅仅考虑了一个粒子在周期势中运动. 在更为现实的情况下, 必须考虑多个电子在这样的位势中运动. 实际上, 电子满足泡利不相容原理, 正如将在第 7 章更系统地讨论的那样, 它们开始填充能带. 以这种方式, 金属、半导体以及类似的材料定性特点可以被理解为平移不变性加上不相容原理的一个推论.

读者可能已经注意到了 4.2 节的对称双阱问题与本节的周期势之间的相似性. 比较图 4.3 与图 4.7, 注意到, 它们可以看成是具有有限数目谷底的位势的两个相反的极端 (2 与无限大).

3.9.5 时间反演分立对称性

在这一节将研究另一种分立对称算符, 所谓的时间反演. 对于初学者, 这是一个困难的问题, 部分原因是术语时间反演是一个误称, 令人想起科幻小说. 在这一节所要做的, 可以更合适地用术语运动反演来表征. 的确, 这是由维格纳使用的短语, 1932 年, 他写的一篇非常基本的文章中明确表述了时间反演.

为使目的明确, 来看一看经典力学. 假定有一条遭受到某一力场作用的粒子的运动轨道, 见图 4.10. $t = 0$ 时, 让粒子停止, 然后反演它的运动: $\mathbf{p}|_{t=0} \rightarrow -\mathbf{p}|_{t=0}$. 则该粒子反向遍历同样的轨道. 假如像 (b) 中那样向后倒着播放这个轨道 (a) 的运动图片, 可能很难讲清楚这是否是正确的顺序.

更正式地讲, 如果 $\mathbf{x}(t)$ 是下列方程的一个解:

$$m\ddot{\mathbf{x}} = -\nabla V(\mathbf{x}), \text{tag4.4.1}$$

则 $\mathbf{x}(-t)$ 也是在由 V 导出的同样的力场中一个可能的解. 当然, 特别要注意, 在这里我们没有耗散力. 桌面上的一个滑块 (由于摩擦力) 逐渐减速并最终停了下来. 但是, 你见过桌面上的滑块会自动开始运动并逐渐加速吗?

图 4.10 (a) $t = 0$ 时停止的经典轨道, 和 (b) 反演了它的运动, $\mathbf{p}|_{t=0} \rightarrow -\mathbf{p}|_{t=0}$

在有磁场存在的情况下,或许能够讲出这种差别.设想正在拍摄在磁场中的一个做螺旋运动电子轨迹的运动图片.通过比较旋转相对于标记为 N, S 磁极的感觉,或许能够辨别出运动图片是向前放还是向后倒着放.然而,从微观观点看, \mathbf{B} 是由移动的电荷通过电流产生的;假如能把引起 \mathbf{B} 的电流也反演的话,则情况就会是完全对称的了.依据图 4.11 所示的图像,你或许会已经猜测出 N 和 S 标错了!另外一种叙述这一切的更正式的方式是,麦克斯韦方程,例如

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho, \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{4\pi\mathbf{j}}{c}, \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \text{tag4.4.2}$$

和洛伦兹力方程 $\mathbf{F} = e [\mathbf{E} + (1/c) (\mathbf{v} \times \mathbf{B})]$ 在 $t \rightarrow -t$ 之下是不变的,只要令

$$\mathbf{E} \rightarrow \mathbf{E}, \mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B}, \rho \rightarrow \rho, \mathbf{j} \rightarrow -\mathbf{j}, \mathbf{v} \rightarrow -\mathbf{v}. (4.4\text{tag}4.4.3)$$

现在看一看波动力学的基本方程,即薛定谔方程为

假定 $\psi(\mathbf{x}, t)$ 是一个解. 容易证明 $\psi(\mathbf{x}, -t)$ 不是一个解, 因为出

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi. \text{tag4.4.4}$$

能量本征态说服自己相信这一点,即通过把

$$\psi(\mathbf{x}, t) = u_n(\mathbf{x}) e^{-iE_n t/\hbar}, \psi^*(\mathbf{x}, -t) = u_n^*(\mathbf{x}) e^{-iE_n t/\hbar} \text{tag4.4.5}$$

图 4.11 在一块磁体的南北极之间电子的轨迹

代入到薛定谔方程 (4.4.4) 式中. 因此, 可以猜测时间反演一定与复共轭有某种关系. 如果 $t = 0$ 时, 波函数由下式给出:

$$\psi = \langle \mathbf{x} | \alpha \rangle, \text{tag4.4.6}$$

则相应的时间反演态波函数由 $\langle \mathbf{x} | \alpha \rangle^*$ 给出. 稍后将证明, 对于一个无自旋系统波函数, 情况确是如此. 作为一个例子, 可以容易现了一阶时间的微商. 然而, $\psi^*(\mathbf{x}, -t)$ 是一个解, 这一点你可以通过取 (4.4.4) 式的复共轭证实. 有启发意义的是, 对于一个地对于一个平面波的波函数检验这一点, 见本章的习题 4.8.

3.9.6 时间反演算符

现在终于能够给出时间反演的一种形式理论了. 时间反演算符用 Θ 代表, 以便与一个一般的反么正算符 θ 区分开. 考虑

$$|\alpha\rangle \rightarrow \Theta|\alpha\rangle, \text{tag4.4.22}$$

其中, $\Theta|\alpha\rangle$ 是时间反演态. 更恰当地, $\Theta|\alpha\rangle$ 应当称为运动反演态. 如果 $|\alpha\rangle$ 是一个动量本征态 $|\mathbf{p}'\rangle$, 则预期 $\Theta|\alpha\rangle$ 是 $|\mathbf{-p}'\rangle$, 至多差一个可能的相位. 同样地, 在时间反演下 \mathbf{J} 也被反转.

图 4.12 在 $t = 0$ 和 $t = \pm\delta t$ 时刻, 时间反演之前与之后的动量

现在, 通过观察时间反演态的时间演化, 推导时间反演算符的基本性质. 考虑一个物理系统, 在 $t = 0$ 时, 由右矢 $|\alpha\rangle$ 表示. 那么, 在稍后时刻, $t = \delta t$, 发现系统处在

$$|\alpha, t_0 = 0; t = \delta t\rangle = \left(1 - \frac{iH}{\hbar} \delta t \right) |\alpha\rangle, \text{tag4.4.23}$$

其中, H 是表征时间演化的哈密顿量. 代替上面的这个方程, 假定 $t = 0$ 时, 先作用 Θ . 而然后让系统在哈密顿量 H 的影响下演化. 那么, 在 δt 时, 有

$$\left(1 - \frac{iH\delta t}{\hbar}\right) \Theta|\alpha\rangle$$

(4. 4.24a)

如果运动遵从时间反演下的对称性, 预期上述的态右矢与下式相同

$$\Theta|\alpha, t_0 = 0; t = -\delta t\rangle. \text{tag4.4.24b}$$

这就是说, 先考虑在早些时刻 $t = -\delta t$ 的一个态右矢, 然后反转 \mathbf{p} 和 \mathbf{J} , 见图 4.12. 数学上有

$$\left(1 - \frac{iH}{\hbar}\delta t\right) \Theta|\alpha\rangle = \Theta\left(1 - \frac{iH}{\hbar}(-\delta t)\right)|\alpha\rangle. \text{tag4.2.5}$$

如果上述关系对任何右矢都对, 必须有

$$-iH\Theta|\rangle = \Theta iH|\rangle, \text{tag4.4.26}$$

其中, 空的 $|\rangle$ 强调, (4.2.26) 式对任何右矢都成立.

现在论证. 如果时间反演的运动有意义, Θ 不可能是么正的. 假定 Θ 真是么正的, 那么消掉 (4.4.26) 式中的 i 就会是合理的了, 于是就会有算符方程:

$$-H\Theta = \Theta H. \text{tag4.4.27}$$

考虑一个能量本征态 $|n\rangle$, 其能量本征值为 E_n . 相应的时间反演态就会是 $\Theta|n\rangle$, 并且由于 (4.4.27) 式, 就会有

$$H\Theta|n\rangle = -\Theta H|n\rangle = (-E_n)\Theta|n\rangle. \text{tag4.4.28}$$

这个方程表明, $\Theta|n\rangle$ 是哈密顿量的一个本征右矢, 能量本征值为 $-E_n$, 但是, 甚至在自由粒子这种非常基本的情况下, 这也是荒谬的. 众所周知, 自由粒子的能量谱是半正定的——从 0 到 $+\infty$. 不存在任何比静止粒子 (动量本征值为零的动量本征态) 还要低的态; 能谱从 $-\infty$ 到 0 的范围是完全不可接受的. 通过观察自由粒子哈密顿量的结构也可以看到这一点. 预期 \mathbf{p} 改变符号, 但 \mathbf{p}^2 不会; 然而 (4.4.27) 式会意味着

$$\Theta^{-1} \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \Theta = \frac{-\mathbf{p}^2}{2m}. \text{tag4.4.29}$$

所有这些论证都强烈地暗示, 如果时间反演果真是一个有用的对称性, 就不会允许消去 (4.4.26) 式中的 i ; 因此, Θ 更为恰当的是反么正的. 在这种情况下, 根据反线性 (4.4.13b) 式, (4.4.26) 式的右边变成

$$\Theta iH|\rangle = -i\Theta H|\rangle \text{tag4.4.30}$$

现在, 终于可以消去 (4.4.26) 式中的 i 了. 通过 (4.4.30) 式, 这最终导致

$$\Theta H = H\Theta. \text{tag4.4.31}$$

方程 (4.4.31) 式表示了哈密顿量在时间反演下的基本性质. 用了这个方程, 早些时候提到的困难 [见 (4.4.27) 式到 (4.4.29) 式] 不再存在, 因而得到了物理上合理的结果. 从现在起, Θ 总是取为反么正的.

早些时候曾提到过, 最好避免一个反么正算符从右边作用于左矢上. 不过, 可以用

$$\langle\beta|\Theta|\alpha\rangle. \text{tag4.42}$$

它总是理解为

$$(\langle \beta |) \cdot (\Theta | \alpha \rangle) \text{tag4.33}$$

而绝不是

$$(\langle \beta | \Theta \rangle \cdot | \alpha \rangle) \text{tag4.4.34}$$

事实上不打算定义 $\langle \beta | \Theta$. 这是一处狄拉克的左矢-右矢符号有点混淆的地方. 毕竟, 这个符号被发明用来处理线性算符, 而不是反线性算符.

伴随这种警示评注, 有必要讨论算符在时间反演下的行为. 继续采用这样的观点, 即 Θ 算符作用于右矢上

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta |\alpha\rangle, \quad |\tilde{\beta}\rangle = \Theta |\beta\rangle, \text{tag4.4.35}$$

谈论算符—特别是可观测量—在时间反演下是奇的或偶的, 通常也是很方便的. 从一个重要的恒等式开始:

$$\langle \beta | \otimes | \alpha \rangle = \langle \alpha | \Theta \otimes^\dagger \Theta^{-1} | \tilde{\beta} \rangle, \text{tag4.4.36}$$

其中 \otimes 是个线性算符. 这个恒等式单由 Θ 的反么正即可得到. 要证明这一点, 定义

$$|\gamma\rangle \equiv \otimes^\dagger |\beta\rangle \text{tag4.4.37}$$

通过对偶对应, 有

$$|\gamma\rangle \leftrightarrow \langle \beta | \otimes = \langle \gamma | \text{tag4.3.38}$$

因此,

$$\begin{aligned} \langle \beta | \otimes | \alpha \rangle &= \langle \gamma | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \tilde{\gamma} \rangle \\ &= \langle \alpha | \Theta \otimes^\dagger | \tilde{\beta} \rangle = \langle \alpha | \Theta \otimes^\dagger \Theta^{-1} | \tilde{\beta} \rangle \text{tag4.4.39} \\ &= \langle \alpha | \Theta \otimes^\dagger \Theta^{-1} | \tilde{\beta} \rangle, \end{aligned}$$

它证明了这个恒等式. 特别是, 对于厄米可观测量 A , 得到

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \langle \alpha | \Theta A \Theta^{-1} | \tilde{\beta} \rangle. \text{tag4.4.40}$$

可观测量在时间反演下是偶的还是奇的, 按照在下式有上面的符号还是下面的符号:

$$\Theta A \Theta^{-1} = \pm A. \text{tag4.4.41}$$

注意, 这个方程, 与 (4.4.40) 式一起, 对于 A 对时间反演态取的矩阵元给了一个相位限制如下:

$$\langle \beta | A | \alpha \rangle = \pm \langle \tilde{\beta} | A | \tilde{\alpha} \rangle^*, \text{tag4.4.42}$$

如果 $|\beta\rangle$ 恒等于 $|\alpha\rangle$, 正在谈的就是关于期待值的, 有

$$\langle \alpha | A | \alpha \rangle = \pm \langle \tilde{\alpha} | A | \tilde{\alpha} \rangle. \text{tag4.4.43}$$

其中 $\langle \tilde{\alpha} | A | \tilde{\alpha} \rangle$ 是对时间反演态取的期待值.

作为一个例子, 看一看 \mathbf{p} 的期待值. 假定 \mathbf{p} 对于时间反演态取的期待值将有相反的符号是合理的. 这样

$$\langle \alpha | \mathbf{p} | \alpha \rangle = -\langle \tilde{\alpha} | \mathbf{p} | \tilde{\alpha} \rangle. \text{tag4.4.44}$$

因此, 取 \mathbf{p} 是个奇算符, 即

$$\Theta \mathbf{p} \Theta^{-1} = -\mathbf{p}. \text{tag4.4.45}$$

这意味着

$$\mathbf{p} \Theta | \mathbf{p}' \rangle = -\Theta \mathbf{p} \Theta^{-1} \Theta | \mathbf{p}' \rangle \text{tag4.4.46}$$

$$= (-\mathbf{p}') \Theta | \mathbf{p}' \rangle.$$

方程 (4.4.46) 式符合早些时候的断言: $\Theta | \mathbf{p}' \rangle$ 是一个动量的本征态, 本征值为 $-\mathbf{p}'$. 在适当选择的相位下, 它可以认为就是 $|\mathbf{p}'\rangle$ 本身. 同样地, 得到

$$\Theta \mathbf{x} \Theta^{-1} = \mathbf{x} \text{tag4.4.47}$$

$$\Theta | \mathbf{x}' \rangle = | \mathbf{x}' \rangle \text{ (至多差一个相因子)}$$

它来自下列 (绝对合理的) 要求:

$$\langle \alpha | \mathbf{x} | \alpha \rangle = \langle \tilde{\alpha} | \mathbf{x} | \tilde{\alpha} \rangle. \text{tag4.4.48}$$

现在来核对基本对易关系

$$[x_i, p_j] | \rangle = i\hbar \delta_{ij} | \rangle \text{tag4.4.49}$$

的不变性, 其中的空右矢 $| \rangle$ 代表任何右矢. 把 Θ 作用于 (4.4.49) 式的两边, 有

$$\Theta [x_i, p_j] \Theta^{-1} \Theta | \rangle = \Theta i\hbar \delta_{ij} | \rangle, \text{tag4.4.50}$$

在 Θ 跨过 $i\hbar$ 之后, 该式导致

$$x_i], (-p_j) - p_j \Theta]] = -i\hbar \delta_{ij} \Theta]] \dots \text{tag4.4.51}$$

注意, 基本对易关系 $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$ 凭借 Θ 是反么正的而得以保持不变. 这也可以作为取 Θ 为反么正的另一理由; 否则的话, 不得不放弃或者 (4.4.45) 式、或者 (4.4.47) 式! 类似地, 要保持

$$[J_i, J_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} J_k, \text{tag4.4.52}$$

角动量算符在时间反演下必须是奇的, 即

$$\Theta \mathbf{J} \Theta^{-1} = -\mathbf{J}. \text{tag4.4.53}$$

对于一个无自旋系统该式是事实自洽的, 因为 \mathbf{J} 恰为 $\mathbf{x} \times \mathbf{p}$. 作为一种选择, 通过注意到转动算符和时间反演算符对易 (注意额外的 $i!$) 也能够推导出这个关系.

第四章 二次量子化

内容提要

□ 角动量对易关系

□ $\frac{1}{2}$ 自旋

□ $SO(3)$ 和 $SU(2)$

□ 系综

这一章关注角动量理论和相关论题的系统处理. 在现代物理中角动量理论的重要性怎么强调也不过分. 在分子、原子及核谱学中, 彻底理解角动量是极为重要的; 角动量的考虑不仅在散射和碰撞问题中, 也在束缚态问题中起着重要的作用. 此外, 角动量概念还有着重要的推广——核物理中的同位旋, 粒子物理中的 $SU(3)$, $SU(2) \otimes U(1)$ 等等.

4.1 密度算符和纯系综与混合系综

4.1.1 极化束与非极化束

至此, 已发展的量子力学形式关于一个全同制备的物理系统的系综, 即一个集合作出了统计的预言. 更精确地说, 在这样的一个系综内假定所有的成员都由同样的态右矢 $|\alpha\rangle$ 所表征. 通过 SG 过滤器的一束银原子就是这种系综的一个好例子. 束流中的每个原子其自旋指向相同的方向, 即由该过滤器的非均匀磁场确定的方向. 我们迄今还没有讨论过如何用量子力学描述这样的系综, 其中的某些物理系统, 比如 60%, 由 $|\alpha\rangle$ 表征, 而其余的 40% 由某个其他的右矢 $|\beta\rangle$ 表征.

为了生动地说明到此为止发展的形式体系的不完备性, 让我们考虑直接由热炉子飞出的银原子, 它们将受到斯特恩-盖拉赫类型的过滤器的作用. 基于对称性, 我们预期这样的原子具有随机的自旋取向; 换句话说, 没有任何优势的方向与这样的原子系综相联系. 按照到此为止发展的形式体系, 一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的最普遍的态右矢由下式给出

$$|\alpha\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle \quad \text{tag 3.4.1}$$

这个方程能够描写有着随机自旋取向的集团吗? 显然答案是不能. (3.4.1) 式表征一个这样的态右矢, 它的自旋指向某个确定的方向, 即沿 \hat{n} 方向, 它的极角和方位角分别为 β 和 α , 它们可以通过求解

$$\frac{c_+}{c_-} = \frac{\cos(\beta/2)}{e^{i\alpha} \sin(\beta/2)}, \quad \text{tag 3.4.2}$$

得到, 见 (3.2.52) 式.

为了应对这类情况, 我们引入分数布居或概率权重的概念. 一个有着完全随机自旋取向的银原子系综可以看作是这样的一团银原子, 其中 50% 的系综成员由 $|+\rangle$ 表征, 而其余的 50% 由 $|-\rangle$ 表征. 我们通过指定

$$w_+ = 0.5, \quad w_- = 0.5, \quad \text{tag 3.4.3}$$

其中 w_+ 和 w_- 分别为自旋向上和向下的分数布居, 来确定这样的系综. 因为这样一束束流不存在任何优势方向, 可合理地预期这同一系综也可以被看作 $|S_x; +\rangle$ 和 $|S_x; -\rangle$ 一半对一半的混合. 不久就会见到实现这一点所需要的数学形式.

—

* 这当然依赖于我们的约定: S_y (或更普遍的 J_y) 的矩阵元取为纯虚的.

—

非常重要的是要注意, 我们只不过引进了两个实数 w_+ 和 w_- . 没有任何有关自旋向上和自旋向下的右矢间的相对相位信息. 通常, 我们称这样的情况为自旋向上和自旋向下状态的非相干混合. 在这里我们正在做的是要把我们在相干线性叠加时所做的清楚地区分开——例如,

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)|+\rangle + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)|-\rangle, \text{tag 3.4.4}$$

在那里, $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 之间的相位关系包含了有关在 xy 平面中自旋取向的至关重要的信息, 在这种情况下, 自旋沿正 x 方向. 一般说来, 我们不应把 w_+ 和 w_- 与 $|c_+|^2$ 和 $|c_-|^2$ 混淆. 与 w_+ 和 w_- 联系起来的概率概念更靠近经典概率论中遇到的那种. 在处理直接来自热炉子的银原子所遇到的情况可以与一个毕业班中 50% 的毕业生是男生, 其余的 50% 是女生的情况相比. 当我们随机地挑选出一个学生时, 这位特定的学生是男生 (或女生) 的概率是 0.5. 究竟谁听说过一个学生可视为男生与女生以一种特定的相位关系线性相关叠加吗?

直接从炉子飞出来的银原子束流是一个完全随机系综的例子; 该束流被称为非极化的, 因为其自旋取向没有优势方向. 相比之下, 通过了一个有选择的斯特恩-盖拉赫类测量的束流是一个纯系综的例子; 该束流称为极化束, 因为这个系综的所有成员由一个单一的共同右矢所表征, 它描述自旋指向某确定方向的一个态. 为了领会完全随机系综和纯系综之间的区别, 让我们考虑一个可以转动的 SG 仪器, 在那里通过转动该仪器就可以改变非均匀磁场 \mathbf{B} 的方向. 当直接从炉子飞出来的完全非极化的束流遇到这样一个仪器时, 不管仪器可能是什么样的取向, 我们总是得到两个强度相等的出射束流. 相比之下, 如果一个极化束流遭遇到这样一个仪器时, 两个出射束流的相对强度随着仪器的转动而变化. 对于某个特定的取向, 实际上的强度之比变为 1 到 0 间的值. 事实上, 第 1 章所发展的形式体系告诉我们, 这个相对强度只不过是 $\cos^2(\beta/2)$ 和 $\sin^2(\beta/2)$, 其中 β 是原子的自旋方向和 SG 仪器中的非均匀磁场方向之间的夹角.

一个完全随机系综和一个纯系综可以看成所谓混合系综的两个极端. 在一个混合系综中, 其成员的某个部分, 例如 70% 由一个态右矢 $|\alpha\rangle$ 表征, 而其余的 30% 用 $|\beta\rangle$ 表征. 在这样的情况下, 该束流称为部分极化. 这里的 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 甚至不需要是正交的, 例如, 有 70% 的自旋沿正 x 方向, 而 30% 的自旋沿负 z 方向*.

4.1.2 系综平均和密度算符

现在介绍冯·诺依曼 (J. von Neumann) 在 1927 年首先提出来的密度算符形式, 它可定量地描述纯系综以及混合系综的物理情况. 在这里, 我们的一般性讨论不只限于自旋 $\frac{1}{2}$ 系统, 但是为了举例说明的目的, 我们会反复回到自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统.

一个纯系综被定义为一个这样的物理系统的集合, 它的每个成员都由同样的右矢 $|\alpha\rangle$ 表征. 相比之下, 在一个混合系综内, 相对布居数为 w_1 的那部分成员由 $|\alpha^{(1)}\rangle$ 表征, 而相对布居数为 w_2 的其他部分成员由 $|\alpha^{(2)}\rangle$ 表征, 等等. 粗略地讲, 一个混合系综可以看作纯系综的混合, 正如它的名字所示. 布居数受到满足归一条件的约束, 即

$$\sum_i w_i = 1 \text{tag 3.4.5}$$

—
* 在文献中, 称之为纯的或混合的系综经常指的是纯态和混态. 然而, 在本书中我们使用态意味着用一个确定的态右矢 $|\alpha\rangle$ 描写的物理系统.

—
正如我们在前面提到的, $|\alpha^{(1)}\rangle$ 和 $|\alpha^{(2)}\rangle$ 是不需要正交的. 此外在 (3.4.5) 式中, 对 i 求和中的项数不需要与右矢空间的维数 N 一致, 它可以很容易超过 N . 例如, 对 $N = 2$ 的自旋 $\frac{1}{2}$ 系统, 可以考虑有 40% 的态具有沿正 z 方向的自旋, 30% 的态具有沿正 x 方向的自旋, 而其余 30% 的态具有沿负 y 方向的自旋.

假定在一个混合系综上测量某可观测量 A . 我们可以问: 当测量的次数很多时, A 的平均测量值是多少. 答案由 A 的系综平均值确定, 它被定义为

$$[A] \equiv \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | A | \alpha^{(i)} \rangle \text{tag 3.4.6}$$

$$= \sum_i \sum_{a'} w_i \left| \langle a' | \alpha^{(i)} \rangle \right|^2 a',$$

其中 $|\alpha'\rangle$ 是 A 的一个本征右矢. 回想 $\langle \alpha^{(i)} | A | \alpha^{(i)} \rangle$ 是通常量子力学中 A 在 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 上的期待值. (3.4.6) 式告诉我们, 这些期待值必须再用相应的分数布居数 w_i 加权. 注意, 概率概念是如何进来两次的: 第一次是在 A 的一个本征态 $|\alpha'\rangle$ 中找到态 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 的量子力学概率 $|\langle \alpha' | \alpha^{(i)} \rangle|^2$, 而第二次是在系综中找到一个由 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 表征的量子力学态的概率因子*.

现在可以利用一个更一般的基 $\{|b'\rangle\}$ 改写系综平均值 (3.4.6) 式:

$$\begin{aligned} [A] &= \sum_i w_i \sum_{b'} \sum_{b''} \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \langle b' | A | b'' \rangle \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \quad \text{tag 3.4.7} \\ &= \sum_{b'} \sum_{b''} \left(\sum_i w_i \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \right) \langle b' | A | b'' \rangle. \end{aligned}$$

在对 b' (b'') 求和中的项数就是右矢空间的维数, 而对 i 求和中的项数依赖于这个混合系综是怎么被看作纯系综的混合的. 注意, 在这种形式中, 不依赖于特定可观测量 A 的系综的基本性质被分离了出来. 这诱使我们把密度算符 ρ 定义如下:

$$\rho \equiv \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}|. \quad \text{tag 3.4.8}$$

相应的密度矩阵的矩阵元有下列形式:

$$\langle b'' | \rho | b' \rangle = \sum_i w_i \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle. \quad \text{tag 3.4.9}$$

密度算符包含了我们可能得到的, 关于所论及系综的所有有物理意义的信息. 回到 (3.4.7) 式, 系综平均可以写成

$$\begin{aligned} [A] &= \sum_{b'} \sum_{b''} \langle b'' | \rho | b' \rangle \langle b' | A | b'' \rangle \quad \text{tag 3.4.10} \\ &= \text{tr}(\rho A). \end{aligned}$$

因为矩阵的迹不依赖于表象, $\text{tr}(\rho A)$ 可以利用任何方便的基计算. 因此, (3.4.10) 式是一个极为有用的关系.

密度算符有两个性质值得记住. 首先, 密度算符是厄米的, 这从 (3.4.8) 式显然可见. 第二, 密度算符满足归一化条件

- 在文献中相当常见, 系综平均也称为期待值. 然而, 在本书中, 术语期待值是指在一个纯系综中进行测量时得到的平均测量值.

$$\begin{aligned} \text{tr}(\rho) &= \sum_i \sum_{b'} w_i \langle b' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \\ &= \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(i)} \rangle \quad \text{tag 3.4.11} \\ &= 1. \end{aligned}$$

由于厄米性和归一条件, 对于维数为 2 的自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统, 密度算符或相应的密度矩阵由三个实参量表征. 4 个实数可以表征一个 2×2 厄米矩阵. 然而, 由于归一化条件, 只有 3 个是独立的. 所需要的 3 个数是 $[S_x]$, $[S_y]$ 和

$[S_z]$, 读者可以证明知道了这三个系综平均值, 足以重建密度算符. 一个混合系综形成的方式可以是相当复杂的. 我们可以把所有类型的 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 所表征的纯系综用适当的 w_i 混合起来; 而对自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统, 三个实数完全可以表征所涉及的系综. 这强烈地暗示, 一个混合系综能以许多种不同的方式分解为纯系综. 在本章末尾有一个习题说明了这一点.

一个纯系综可以通过对某个 $|\alpha^{(i)}\rangle$ ——例如, $i = n$ 时, $w_i = 1$, 而对所有的其他可能的态右矢 $w_i = 0$ 来确定, 因此相应的密度算符可写成不求和的

$$\rho = |\alpha^{(n)}\rangle\langle\alpha^{(n)}| \quad \text{tag 3.4.12}$$

显然, 一个纯系综的密度算符是幂等的. 即

$$\rho^2 = \rho \quad \text{tag 3.4.13}$$

或, 等价地

$$\rho(\rho - 1) = 0. \quad \text{tag 3.4.14}$$

于是, 除了 (3.4.11) 式以外, 只对纯系综有

$$\text{tr}(\rho^2) = 1. \quad \text{tag 3.4.15}$$

纯系综密度算符的本征值是 0 或 1, 这一点可以通过在 (3.4.14) 式的 ρ 和 $\rho - 1$ 之间插入一个基右矢完全集合看到, 该集合能对角化厄米算符 ρ . 因此, 当对角化时, 一个纯系综的密度矩阵看起来一定像

$$\rho \doteq \begin{pmatrix} 0 & & & & & & 0 \\ & 0 & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & 0 & & & \\ & & & & 1 & & \\ & & & & & 0 & \\ & & & & & & 0 \\ & & & & & & & 0 \\ & & & & & & & \ddots \\ 0 & & & & & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{对角形式}) \quad \text{tag 3.4.16}$$

可以证明, 当系综是纯的时候, $\text{tr}(\rho^2)$ 取最大值; 对于一个混合系综, $\text{tr}(\rho^2)$ 是一个小于 1 的正数.

给定一个密度算符, 让我们看一下在一些具体的基中, 怎样构建相应的密度矩阵. 为此, 首先回顾

$$|\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_{b'} \sum_{b''} |b'\rangle\langle b'|\alpha\rangle\langle\alpha|b''\rangle\langle b''|. \quad \text{tag 3.4.17}$$

这表明, 在外积的意义上, 可以通过把 $\langle b'|\alpha^{(i)}\rangle$ 形成的列矩阵与 $\langle\alpha^{(i)}|b''\rangle$ (当然, 它等于 $\langle b''|\alpha^{(i)}\rangle^*$) 形成的行矩阵组合在一起, 形成一个对应于 $|\alpha^{(i)}\rangle\langle\alpha^{(i)}|$ 的方阵. 最后一步, 就像 (3.4.8) 式指出的, 用权重因子 w_i 对这样的方阵求和. 正如所期待的, 最后的形式与 (3.4.9) 式一致.

研究几个例子是很有益的, 它们都涉及自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统.

例 3.1 一束 S_z+ 的完全极化束流

$$\begin{aligned}\rho &= |+\rangle\langle+| \pm \begin{pmatrix} 1 & \\ & 0 \end{pmatrix} (1,0) \text{tag3.4.18} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

例 3.2 一束 S_x 的完全极化束流

$$\begin{aligned}\rho &= |S_x; \pm\rangle\langle S_x; \pm| = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(|+\rangle \pm |- \rangle) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)(\langle+| \pm \langle-|) \\ &\doteq \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \pm\frac{1}{2} \\ \pm\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \text{tag3.4.19}\end{aligned}$$

例 3.1 和 3.2 的系综都是纯的.

例 3.3 一束非极化束流. 它可以看作一个自旋向上的系综和一个自旋向下的系综以相等权重 (各为 50%) 非相干混合:

$$\begin{aligned}\rho &= \left(\frac{1}{2}\right)|+\rangle\langle+| + \left(\frac{1}{2}\right)|-\rangle\langle-| \\ &\doteq \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \text{tag3.4.20}\end{aligned}$$

它正好是一个单位矩阵除以 2. 正如早些时候我们曾指出的, 同样的这个系综还可以看作是一种具有相等权重的 S_x 系综和 S_x 一系综的非相干混合. 令人欣慰的是, 我们的形式自动地满足预期

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \text{tag3.4.21}$$

由例 3.2 可以看到, 右手边的两项就是 S_x 系和 S_x 一两个纯系综的密度矩阵. 因为这种情况下的 ρ 正是单位算符除以 2 (维数), 我们有

$$\text{tr}(\rho S_x) = \text{tr}(\rho S_y) = \text{tr}(\rho S_z) = 0, \text{tag3.4.22}$$

其中用到了 S_k 是无迹的. 于是, 对于 \mathbf{S} 的系综平均值, 我们有

$$[\mathbf{S}] = 0. \text{tag3.4.23}$$

这是合理的, 因为在一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的完全随机系综中不应当存在自旋的优势方向.

例 3.4 作为部分极化束的例子, 考虑两个纯系综的 75-25 混合, 一个是 S_z+ 而另一个是 S_x+ :

$$w(S_z+) = 0.75, w(S_x+) = 0.25. \text{tag3.4.24}$$

相应的 ρ 可以表示为

$$\rho \doteq \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \text{tag3.4.25}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{7}{8} & \frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{8} \end{pmatrix},$$

从上式得到

$$[S_x] = \frac{\hbar}{8}, [S_y] = 0, [S_z] = \frac{3\hbar}{8}. \text{tag3.4.26}$$

把证明这个系综能以异于 (3.4.24) 式的方式分解作为一个练习留给读者.

4.1.3 系综的时间演化

作为一个时间函数, 密度算符 ρ 如何变化? 让我们假定在某个 t_0 时刻密度算符由下式给定

$$\rho(t_0) = \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}|. \text{tag3.4.27}$$

如果系综保持不受扰动, 我们就不可能改变分数布居数 w_i . 所以 ρ 的变化只是由态右矢 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 的时间演化所控制:

$$t_0 \text{ 时 } |\alpha^{(i)}\rangle \rightarrow |\alpha^{(i)}, t_0; t\rangle. \text{tag3.4.28}$$

由于 $|\alpha^{(i)}, t_0; t\rangle$ 满足薛定谔方程, 我们得到

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} &= \sum_i w_i \left(H |\alpha^{(i)}, t_0; t\rangle \langle \alpha^{(i)}, t_0; t| - |\alpha^{(i)}, t_0; t\rangle \langle \alpha^{(i)}, t_0; t| H \right) \text{tag3.4.29} \\ &= -[\rho, H]. \end{aligned}$$

除了符号相反, 该公式的样子很像海森伯运动方程! 这一点不会带来烦恼, 因为 ρ 不是一个海森伯绘景的动力学可观测量. 相反, ρ 是由薛定谔绘景的态右矢和态左矢构成的, 它们的时间演化都是遵从薛定谔方程的.

有意思的是, (3.4.29) 式可以看作是经典统计力学中刘维尔定理

$$\frac{\partial \rho_{\text{经典}}}{\partial t} = -[\rho_{\text{经典}}, H]_{\text{经典}} \text{tag3.4.30}$$

的量子力学类似定理, 其中的 $\rho_{\text{经典}}$ 是相空间中代表点的密度*. 因此, 对出现在 (3.4.29) 式中的 ρ , 密度算符的名字的确是合适的. 对于某个可观测量 A 的系综平均值, (3.4.10) 式的经典类似公式由下式给定:

$$A_{\text{平均}} = \frac{\int \rho_{\text{经典}} A(q, p) d\Gamma_{q,p}}{\int \rho_{\text{经典}} d\Gamma_{q,p}}, \text{tag3.4.31}$$

—

* 记住, 一个经典的纯态是用相空间 $(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f)$ 中每个时刻的一个单独运动的点表示. 另一方面, 一个经典的统计态用我们的非负的密度函数 $\rho_{\text{经典}}(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f, t)$ 描写, 它使得在 t 时刻在间隔 dq_1, \dots, dp_f 内找到一个系统的概率是 $\rho_{\text{经典}} dq_1, \dots, dp_f$.

—

其中的 $d\Gamma_{q,p}$ 表示相空间中的体积元.

4.1.4 连续的推广

至此, 已经考虑了右矢空间中的密度算符, 在那里基右矢是用某个可观测量的分立的本征值标记的. 密度矩阵的概念可以推广到使用的基右矢用连续的本征值标记. 特别是, 让我们考虑由位置本征右矢 $|\mathbf{x}\rangle$ 所张的右矢空

间. (3.4.10) 式的类似表达式由下式给定

$$[A] = \int d^3x' \int d^3x'' \langle \mathbf{x}'' | \rho | \mathbf{x}' \rangle \langle \mathbf{x}' | A | \mathbf{x}'' \rangle .tag3.4.32$$

这里的密度矩阵实际上是 \mathbf{x}' 和 \mathbf{x}'' 的一个函数, 即

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}'' | \rho | \mathbf{x}' \rangle &= \left\langle \mathbf{x}'' \left| \left(\sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}| \right) \right| \mathbf{x}' \right\rangle .tag3.4.33 \\ &= \sum_i w_i \psi_i(\mathbf{x}'') \psi_i^*(\mathbf{x}'), \end{aligned}$$

其中 ψ_i 是相应于态右矢 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 的波函数. 注意, 该矩阵的对角元 (即 $\mathbf{x}' = \mathbf{x}''$) 正是概率密度加权后的求和. 再次印证了术语密度矩阵的确是合适的.

在连续态情况下也一样, 重要的是要记住同一个混合系综可以按不同方式分解为纯系综. 例如, 一个“真实的”粒子束流既可以看作平面波态 (单能量的自由粒子态) 的混合也可以看作波包态的混合.

4.1.5 量子统计力学

我们以简略讨论密度算符公式形式与统计力学之间的联系结束这一节. 让我们先记下完全随机的系综和纯系综的一些性质. 一个完全随机系综的密度矩阵在任何表象看起来都像

$$\rho \doteq \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \\ 0 & & & & & 1 \end{pmatrix} .tag3.4.34$$

[比较例 3.3 与 (3.4.20) 式]. 这从对应于写出密度矩阵所用的基右矢的所有的态是同等布居的就可以看到. 相比之下, 在 ρ 是对角化的基中, 对一个纯系综密度算符的矩阵表示我们有 (3.4.16) 式. 而 (3.4.34) 和 (3.4.16) 这两个对角矩阵, 都满足归一化要求 (3.4.11), 它们看上去不可能有太大差别. 假如我们能够以某种方式构建一个量, 表征这种巨大差异的话, 将会是我们所希望的.

因此, 用

$$\sigma = -\text{tr}(\rho \ln \rho) .tag3.4.35$$

定义一个称为 σ 的量. 算符 ρ 的对数似乎十分令人生畏, 但是如果采用使 ρ 对角化的基, 则 (3.4.35) 式的意义就十分清楚了:

$$\sigma = -\sum_k \rho_{kk}^{(\text{对角})} \ln \rho_{kk}^{(\text{对角})} .tag3.4.36$$

由于每个元素 $\rho_{kk}^{(\text{对})}$ 都是 0 和 1 之间的实数, σ 必然是半正定的. 对于一个完全随机的系综 (3.4.34), 有

$$\sigma = -\sum_{k=1}^N \frac{1}{N} \ln \left(\frac{1}{N} \right) = \ln N .tag3.4.37$$

与之相比, 对于纯系综 (3.4.16), 有

$$\sigma = 0 \tag{3.4.38}$$

其中对 (3.4.36) 式的每一项, 都使用了

$$\rho_{kk}^{(\text{对角})} = 0 \text{ 或 } \ln \rho_{kk}^{(\text{对角})} = 0 \tag{3.4.39}$$

现在从物理上论证, σ 可以被看作一个无序的定量测度. 一个纯系综是一个最大程度的有序系综, 因为它的所有的成员都用同样的量子力学的态右矢表征, 它很像在一支训练有素部队中齐步走的士兵. 按照 (3.4.38) 式, 对这样的一个系综, σ 为零. 在另一个极端, 一个完全随机系综, 其中所有的量子力学态是同等可能的, 它可以比作一群喝醉了酒的士兵四面八方地游荡. 根据 (3.4.37) 式, σ 很大. 的确, 稍后将证明, 在归一条件

$$\sum_k \rho_{kk} = 1 \tag{3.4.40}$$

的约束下, σ 最大的可能值是 $\ln N$. 在热力学中我们知道, 一个称为熵的量是量度无序的. 结果是, σ 与表示系综每个成员的熵 S 通过

$$S = k\sigma \tag{3.4.41}$$

相关联, 其中 k 是一个可确定为玻尔兹曼 (Boltzman) 常数的普适常数. 事实上, (3.4.41) 式可以作为量子统计力学中熵的定义.

现在证明, 对于一个处于热平衡的系综, 怎样可以求得密度算符 ρ . 所做的基本假定是, 在哈密顿量的系综平均值有某一指定值的约束下, 自然界趋向于把 σ 极大化. 证明这个假定的正确性, 将使我们卷入一场关于平衡是如何作为与环境相互作用的结果而建立起来的微妙的讨论, 它已超出了本书的范围. 不管怎么样, 一旦热平衡得以确立, 我们预期

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \tag{3.4.42}$$

由于 (3.4.29) 式, 上式意味着 ρ 与 H 可以同时对角化. 所以, 在写出 (3.4.36) 式时使用的右矢可以被取作能量本征右矢. 采用这一选择, ρ_{kk} 则表示一个能量本征值为 E_k 的能量本征态的分数布居数.

通过要求

$$\delta \sigma = 0 \tag{3.4.43}$$

极大化 σ . 然而, 必须考虑 H 的系综平均值具有某一指定值的约束. 用统计力学的说法, $[H]$ 被确定为每个组分的内能, 用 U 表示

$$[H] = \text{tr}(\rho H) = U. \tag{3.4.44}$$

此外, 不应该忘记归一化约束 (3.4.40) 式. 因此, 基本任务是要求 (3.4.43) 式受到如下两个约束:

$$\delta [H] = \sum_k \delta \rho_{kk} E_k = 0$$

(3.4.45a)

和

$$\delta (\text{tr} \rho) = \sum_k \delta \rho_{kk} = 0.$$

(3. 4. 45 b)

可使用拉格朗日乘子法快捷地完成这个任务. 得到

$$\sum_k \delta \rho_{kk} [(\ln \rho_{kk} + 1) + \beta E_k + \gamma] = 0, \text{tag3.4.46}$$

且仅当

$$\rho_{kk} = \exp(-\beta E_k - \gamma - 1). \text{tag3.4.47}$$

时, 它才对任意变分都是可能的. 常数 γ 可以用归一条件 (3.4.40) 式消掉, 最终结果为

$$\rho_{kk} = \frac{\exp(-\beta E_k)}{\sum_l \exp(-\beta E_l)}. \text{tag3.4.48}$$

它直接给出一个能量本征值为 E_k 的能量本征态的分数布居数. 要始终理解求和是对分立的能量本征态进行的; 如果有简并存在, 还必须对具有相同能量本征值的态求和.

密度矩阵元 (3.4.48) 式对于统计力学中所谓的正则系综是适用的. 假如试图在没有内能约束 (3.4.45a) 的条件下极大化 σ , 就会相反地得到

$$\rho_{kk} = \frac{1}{N}, \text{ (不依赖于 } k), \text{tag3.4.49}$$

它是适用于一个完全随机系综的密度矩阵元. 把 (3.4.48) 式与 (3.4.49) 式比较, 我们推断, 一个完全随机的系综可以看作一个正则系综在 $\beta \rightarrow 0$ 时的极限 (即物理上高温极限). (3.4.48) 式的分母为统计力学中的配分函数

$$Z = \sum_k \exp(-\beta E_k) \text{tag3.4.50}$$

它还可以写成

$$Z = \text{tr}(e^{-\beta H}). \text{tag3.4.51}$$

知道了在能量基中给出的 ρ_{kk} , 可以把密度算符写成

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z}. \text{tag3.4.52}$$

这是最基本的方程, 所需的一切都可以从它得出来. 可以立即计算任何一个可观测量 A 的系综平均值:

$$\begin{aligned} [A] &= \frac{\text{tr}(e^{-\beta H} A)}{Z} \\ &= \frac{\left[\sum_k \langle A \rangle_k \exp(-\beta E_k) \right]}{\sum_k \exp(-\beta E_k)}. \text{tag3.4.53} \end{aligned}$$

特别是, 求得每组分的内能为

$$U = \frac{\left[\sum_k^N E_k \exp(-\beta E_k) \right]}{\sum_k^N \exp(-\beta E_k)} \quad \text{tag 3.4.54}$$

$$= -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Z),$$

它是每个统计力学的学生都熟知的一个公式.

参量 β 与温度 T 的关系如下

$$\beta = \frac{1}{kT}, \quad \text{tag 3.4.55}$$

其中 k 是玻尔兹曼常数. 通过把简谐振子系综平均 $[H]$ 与在经典极限下内能的预期值 kT 相比较, 确信这个关系是有益的, 这被留作一个练习. 已经阐明在高温极限下, 一个正则系综变成一个所有的能量本征态被同等布居的完全随机的系综. 在相反的低温极限下 ($\beta \rightarrow \infty$), (3.4.48) 式告诉我们, 一个正则系综变成一个只有基态被布居的纯系综.

作为一个例证考虑一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统组成的正则系综. 它的每一个成员都具有 $eh/2m_e c$ 的磁矩, 受到一个沿 z 方向均匀磁场的作用. 与该问题相关的哈密顿量已经给出 [见 (3.2.16) 式]. 因为 H 和 S_z 对易, 这个正则系综的密度矩阵在 S_z 基中是对角的. 于是

$$\rho \doteq \frac{\begin{pmatrix} e^{-\beta \hbar \omega/2} & 0 \\ 0 & e^{\beta \hbar \omega/2} \end{pmatrix}}{Z}, \quad \text{tag 3.4.56}$$

其中的配分函数恰为

$$Z = e^{-\beta \hbar \omega/2} + e^{\beta \hbar \omega/2}. \quad \text{tag 3.4.57}$$

由此得出

$$[S_x] = [S_y] = 0, \quad [S_z] = -\left(\frac{\hbar}{2}\right) \tanh\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right). \quad \text{tag 3.4.58}$$

磁矩分量的系综平均值正是 $e/m_e c$ 乘以 $[S_z]$. 顺磁磁化率 χ 可由下式计算

$$\left(\frac{e}{m_e c}\right) [S_z] = \chi B \quad \text{tag 3.4.59}$$

用这种方法得到 χ 的布里渊公式:

$$\chi = \left(\frac{|e| \hbar}{2m_e c B}\right) \tanh\left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right). \quad \text{tag 3.4.60}$$

4.2 自旋关联测量和贝尔不等式

4.2.1 自旋单态中的关联

在 3.8 节遇到的角动量相加的最简单的例子涉及由自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子构成的一个组合系统. 在这一节以这种系统为例说明量子力学中最使人吃惊的一个结果.

考虑处在一个自旋单态的双电子系统——这就是说, 它具有零总自旋. 已经看到过, 其态右矢可以写成 [见 (3.8.15d)]:

$$|\text{自旋单态}\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) (|\hat{z}^+; \hat{z}^-\rangle - |\hat{z}^-, \hat{z}^+\rangle), \text{tag 3.10.1}$$

这里已经明显地标明了量子化的取向. 回忆一下 $|\hat{z}^+; \hat{z}^-\rangle$ 意味着电子 1 是在自旋向上的态而电子 2 是在自旋向下的态. 对于 $|\hat{z}^-, \hat{z}^+\rangle$ 类似的说法也是对的.

假定测量其中一个电子的自旋分量. 很清楚, 有 50% 的机会得到自旋向上或者自旋向下, 因为该组合系统可以以相等的概率处于 $|\hat{z}^+; \hat{z}^-\rangle$ 或 $|\hat{z}^-, \hat{z}^+\rangle$. 但是, 如果成员之一被证明是处在自旋向上的态上, 则另一个必然是处在自旋向下的态上, 反之亦然. 当电子 1 的自旋分量被证明是向上的, 则测量仪器就挑选了 (3.10.1) 式的第一项 $|\hat{z}^+; \hat{z}^-\rangle$; 接着电子 2 自旋分量的测量一定确认该组合系统的态右矢由 $|\hat{z}^+; \hat{z}^-\rangle$ 给出.

值得注意的是, 如果这两个粒子飞开, 即使它们分开得很远, 而且不再发生相互作用, 这一类关联却仍能继续存在, 只要当它们飞开时, 它们的自旋态不发生任何变化. 对于一个 $J = 0$ 的系统自发解体为两个自旋为 $\frac{1}{2}$ 的、没有相对轨道角动量的粒子肯定属于这种情况, 因为在解体过程中角动量一定守恒. 这种情况的一个例子是 η 介子 (质量为

$549\text{MeV}/c^2$) 到一对 μ 子的稀有衰变

$$\eta \rightarrow \mu^+ + \mu^- \text{tag 3.10.2}$$

不幸的是, 它的衰变分支比仅为 6×10^{-6} . 更现实一点, 在低动能质子-质子散射中, 将在第 7 章讨论的泡利原理迫使相互作用的质子处于 S_0 态 (轨道角动量为 0, 自旋单态), 散射后的质子自旋态一定会按照 (3.10.1) 式指出的方式相关联, 即使它们被分隔开一段宏观距离之后.

图 3.11 自旋单态中的自旋关联

更形象化一些, 考虑沿相反方向运动的两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子, 如图 3.11 所示. 观察者 A 专门测量 (向右飞的) 粒子 1 的 S_z , 而观察者 B 专门测量 (向左飞的) 粒子 2 的 S_z . 具体说来, 假定观察者 A 发现粒子 1 的 S_z 为正. 接着他或她甚至在 B 做任何测量之前就可以肯定地预言出 B 的测量结果: B 一定会发现粒子 2 的 S_z 是负的. 另一方面, 如果 A 不做任何测量, 则 B 有 50% 对 50% 的机会得到 S_{z+} 或 S_{z-} .

这本身或许还不是这么奇特. 人们可以说, “它只不过像个小罐, 已知里面装有一个黑球和一个白球, 当随便从罐里抓出一个球时, 有 50% 的机会得到黑球或者白球. 但是如果拿出来的第一个球是黑球时, 那时就可以肯定地预言, 第二个球将是白的.”

事实证明, 这种类比过于简单了. 实际的量子力学情况比这个情况复杂得多! 这是因为观察者可能选择测 S_u 代替 S_z . 这同样的一对 “量子力学球” 或者可以用黑与白, 或者可以用蓝与红来分析.

现在回忆一下, 对于一个单个的自旋 $\frac{1}{2}$ 系统, S_r 的本征右矢与 S_z 的本征右矢之间有如下关系:

$$|\hat{x}^\pm\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) (|\hat{z}^+\rangle \pm |\hat{z}^-\rangle), \quad |\hat{z}^\pm\rangle = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) (|\hat{x}^+\rangle \pm |\hat{x}^-\rangle). \text{tag 3.10.3}$$

现在回到组合系统, 可以通过选择 x 方向作为量子化的轴, 把自旋单态右矢 (3.10.1) 重写为

$$|\text{自旋单态}\rangle = \left(\frac{1}{2}\right) (|\hat{x}^-; \hat{x}^+\rangle - |\hat{x}^+; \hat{x}^-\rangle). \text{tag 3.10.4}$$

除去在任何情况只不过是一个约定的整体符号外, 或许可以直接从 (3.10.1) 式猜出这个形式, 因为自旋单态不具有任何空间的优势方向. 现在假定, 观察者 A 可以通过改变他或她的自旋分析器的取向来选择测量粒子 1 的 S_x 还是 S_z , 而观察者 B 则永远专门测量粒子 2 的 S_x . 如果 A 确定粒子 1 的 S_z 为正, 显然 B 有 50% 对 50% 的机会得到 S_{x+} 或 S_{x-} ; 尽管已知粒子 2 的 S_z 肯定为负, 但它的 S_x 是完全不确定的. 另一方面, 假定 A 也选择测量 S_r . 如果观察者 A 确定粒子 1 的 S_x 为正, 则毫无例外, 观察者 B 将会测到粒子 2 的 S_x 为负. 最后, 如果 A 选择不做任何测量, 当然, B 将有 50% 对 50% 机会得到 S_r 十或 S_r 一. 综上所述:

1. 如果 A 测量 S_z 而 B 测量 S_r , 则两个测量之间有完全随机的关联.
2. 如果 A 测量 S_x 而 B 测量 S_x , 则两个测量之间有 100% (相反符号的) 关联.

3. 如果 A 不做任何测量, 则 B 的测量显示随机的结果.

表 3.1 自旋关联测量

表 3.1 显示了, 当 B 和 A 都被允许选择测量 S_x 或者 S_z 时, 所有可能的这样的测量结果. 这些考虑表明, B 的测量结果表现出对 A 决定做哪一种测量的依赖性: 即 A 测量 S_x 、测量 S_z 或者不做任何测量. 再次注意, A 和 B 可能分开几英里远, 没有任何通讯或相互作用的可能性. 观察者 A 可以决定, 在两个粒子分开足够远时, 他或她的分析器如何取向. 而粒子 2 就好像“知道”了粒子 1 的哪一个自旋分量被测量了.

正统量子力学对这种情况做如下解释. 测量是一次选择 (或过滤) 过程. 当测出粒子 1 的 S_z 为正时, 则挑选了 $|\hat{z}+, \hat{z}-\rangle$ 分量. 接着对另一个粒子的 S_z 的测量只不过要确认这个系统仍然处在 $|\hat{z}+, \hat{z}-\rangle$. 必须承认, 对该系统的一部分处于什么状态的测量将被看作对整个系统的测量.

4.2.2 爱因斯坦局域性原理和贝尔不等式

许多物理学家对于前述自旋关联的正统解释感到不舒服. 这种感觉体现在下面频繁引用的爱因斯坦的评述中, 称它为爱因斯坦局域性原理: “但是, 在我看来, 我们确实应该紧紧抓住一个假定: 系统 S_2 的真实情况和系统 S_1 做了些什么无关, 它们是空间分离的.” 因为这个问题最早是在 1935 年爱因斯坦, 波多尔斯基 (B. Podolsky) 和罗森 (N. Rosen) 的一篇文章中讨论的, 因此有时称之为爱因斯坦-波多尔斯基-罗森 (Einstein-Podolsky-Rosen) 佯谬.

*

—

* 精确的历史事实是, 爱因斯坦-波多尔斯基-罗森的原文处理 x 和 p 的测量. 利用组合的 $\frac{1}{2}$ 系统为例说明爱因斯坦-波多尔斯基-罗森佯谬始于玻姆.

—

有些人曾争辩过, 在这里遇到的困难是量子力学的概率解释所固有的, 微观层次的动力学行为出现了概率性的结果仅仅是因为某些还不知道的参量——所谓的隐变量——还没有被确定下来. 这里的目的不是要讨论基于隐变量或其他一些考虑的量子力学的各种替代理论. 相反, 试问, 这样的理论给出了不同于量子力学的预言吗? 直到 1964 年之前, 人们一直认为, 可以这样编造替代理论, 以致给不出任何不同于通常量子力学的而又能被实验证实的预言. 整个争论应该属于形而上学领域而不属于物理学. 当时, J. S. Bell 指出, 基于爱因斯坦的局域性原理的替代理论, 实际上预言了在自旋关联实验中可观测量间的一个可以检验的不等式关系, 它与量子力学的预言不相符.

在一个由维格纳构想出来的简单模型框架下推导出贝尔不等式, 该模型纳入了各种替代理论的基本特点. 这个模型的支持者们赞同不可能同时确定 S_x 和 S_z . 然而, 当有大量自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子时, 赋予它们当中的某部分成员具有下列的一些性质:

如果测量 S_z , 确定无疑地得到加号.

如果测量 S_x , 确定无疑地得到减号.

满足这一性质的粒子被称为属于 $(\hat{z}+, \hat{x}-)$ 类型. 注意, 并不能断言, 可以同时测量分别为十和一的 S_z 和 S_x . 当测量 S_z 时, 不测量 S_x , 反之亦然. 赋予沿不止一个方向的确定的自旋分量值, 应理解为只有一个或另一个分量可以实际被测量. 尽管这种方法与量子力学的方法根本不同, 只要属于 $(\hat{z}+, \hat{x}+)$ 类型的粒子像 $(\hat{z}+, \hat{x}-)$ 类型的粒子一样多, 则对在自旋向上 (S_z+) 的态上所做的 S_z 和 S_x 测量的量子力学预言可以重现.

现在检验这个模型怎样解释在组合自旋单态系统上测量自旋关联的结果. 显然, 对于一对特殊的粒子, 粒子 1 和粒子 2 之间一定有一个完美的匹配, 以保证总角动量为零: 如果粒子 1 是 $(\hat{z}+, \hat{x}-)$ 类型的, 则粒子 2 一定是 $(\hat{z}-, \hat{x}+)$ 类型的, 等等. 如果具有相等的布居——即各为 25%——的粒子 1 和粒子 2 有如下匹配:

粒子 1 粒子 2

$$(\hat{z}+, \hat{x}-) \leftrightarrow (\hat{z}-, \hat{x}+), \text{tag } 3.10.5a$$

$$(\hat{z}+, \hat{x}+) \leftrightarrow (\hat{z}-, \hat{x}-), \text{tag3.10.5b}$$

$$(\hat{z}-, \hat{x}+) \leftrightarrow (\hat{z}+, \hat{x}-),$$

(3.10. 5c)

$$(\hat{z}-, \hat{x}-) \leftrightarrow (\hat{z}+, \hat{x}+) \text{tag3.10.5d}$$

则诸如表 3.1 所示的关联测量结果就可以重新产生. 这里隐含着一个非常重要的假设. 假定特殊的一对粒子是属于 (3.10.5a) 类型的, 并且观察者 A 决定测量粒子 1 的 S_z ; 那时, 他或她必定得到一个加号, 不管 B 决定测量 S_z 或 S_x . 正是在这种意义上, 爱因斯坦的局域性原理被包含在这个模型中: A 的结果是预先确定的, 它与 B 选择测量什么无关.

到此为止所考虑的例子中, 这个模型在重现量子力学预言方面已经获得了成功. 现在考虑该模型能导致不同于通常量子力学预言的更为复杂的情况. 这一次, 从三个单位矢量 \hat{a}, \hat{b} 和 \hat{c} 开始, 一般说来它们不是相互正交的. 设想其中的一个粒子属于某确定类型, 比如 $(\hat{a}-, \hat{b}+, \hat{c}+)$, 它意味着: 如果测量 $S \cdot \hat{a}$, 肯定得到负号; 如果量 $S \cdot \hat{b}$, 肯定得到正号; 如果测量 $S \cdot \hat{c}$, 也肯定得到正号. 再一次, 在为了保证总角动量为零, 另一个粒子必定属于 $(\hat{a}+, \hat{b}-, \hat{c}-)$ 类型的意义上, 一定有一个完美的匹配. 在任意给定的事例中, 所考虑的粒子对一定是表 3.2 所示的八种类型之一. 这八种可能性互不相容并且没有交集. 每一类的布居数标明在第一列中.

假定观察者 A 发现 $S_1 \cdot \hat{a}$ 是正号而观察者 B 发现 $S_2 \cdot \hat{b}$ 也是正号, 从表 3.2 显然可见, 这一对粒子属于类型 3 或者类型 4, 所以, 在这种情况下粒子对的数目是 $N_3 + N_4$. 因为 N_i 是半正定的, 必须有不等式

$$N_3 + N_4 \leq (N_2 + N_4) + (N_3 + N_7) . \text{tag3.10.6}$$

设 $P(\hat{a}+; \hat{b}+)$ 是在一种随机选择下, 观察者 A 测量 $S_1 \cdot \hat{a}$ 是正号, 并且观察者 B 测量 $S_2 \cdot \hat{b}$ 也是正号, 等等的概率.

显然有

$$P(\hat{a}+; \hat{b}+) = \frac{(N_3 + N_4)}{\sum_i^8 N_i} . \text{tag3.10.7}$$

用类似的方式, 得到

$$P(\hat{a}+; \hat{c}+) = \frac{(N_2 + N_1)}{\sum_i^8 N_i} \text{ 和 } P(\hat{c}+; \hat{b}+) = \frac{(N_3 + N_7)}{\sum_i^8 N_i} . \text{tag3.10.8}$$

正定性条件 (3.10.6) 式现在变成

$$P(\hat{a}+; \hat{b}+) \leq P(\hat{a}+; \hat{c}+) + P(\hat{c}+; \hat{b}+) . \text{tag3.10.9}$$

这就是贝尔不等式, 它源自爱因斯坦局域性原理.

4.2.3 量子力学和贝尔不等式

现在返回到量子力学世界. 在量子力学中, 没有谈到粒子对的某一部分, 比如 $N_3 / \sum_i^8 N_i$, 属于类型 3. 相反, 用同样的右矢 (3.10.1) 式表征所有的自旋单态系统; 用 3.4 节的语言讲, 在这里所涉及的是一个纯系综. 利用这个右矢和所发展的量子力学规则, 可以无疑义地计算在不等式 (3.10.9) 的三项中的每一项.

先求 $P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}+)$. 假定观察者 A 发现 $\mathbf{S}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ 是正的, 由于原先讨论过的 100% (相反的符号) 关联, B 测量 $\mathbf{S}_2 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ 将肯定地产生负号. 但是, 为计算 $P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}+)$, 必须考虑一个新的量子化轴 $\hat{\mathbf{b}}$, 它与 $\hat{\mathbf{a}}$ 夹角为 θ_{ab} , 见图 3.12. 按照 3.2 节的公式形式, 当已知粒子 2 处在 $\mathbf{S}_2 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ 的负本征值的本征右矢上时, 测量 $\mathbf{S}_2 \cdot \hat{\mathbf{b}}$ 产生 + 的概率为

$$\cos^2 \left[\frac{(\pi - \theta_{ab})}{2} \right] = \sin^2 \left(\frac{\theta_{ab}}{2} \right). \text{tag3.10.10}$$

结果得到

$$P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}+) = \left(\frac{1}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\theta_{ab}}{2} \right), \text{tag3.10.11}$$

其中因子 $\frac{1}{2}$ 来自初始得到 $\mathbf{S}_1 \cdot \hat{\mathbf{a}}$ 为正的. 概率. 利用 (3.10.11) 式和它在 (3.10.9) 式其他两项上的推广, 可以把贝尔不等式写成

$$\sin^2 \left(\frac{\theta_{ab}}{2} \right) \leq \sin^2 \left(\frac{\theta_{ac}}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{\theta_{cb}}{2} \right). \text{tag3.10.12}$$

图 3.12 $P(\hat{\mathbf{a}}+; \hat{\mathbf{b}}+)$ 的求值

现在来证明, 从几何观点出发, 不等式 (3.10.12) 式不是永远可能的. 为了简单起见, 选择 $\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{b}}$ 和 $\hat{\mathbf{c}}$ 处在同一平面上, 而且设 $\hat{\mathbf{c}}$ 把 $\hat{\mathbf{a}}$ 和 $\hat{\mathbf{b}}$ 确定的两个方向一分为二:

$$\theta_{ab} = 2\theta, \theta_{ac} = \theta_{cb} = \theta. \text{tag3.10.13}$$

于是, 不等式 (3.10.12) 在

$$0 < \theta < \frac{\pi}{2}. \text{tag3.10.14}$$

时被破坏. 例如取 $\theta = \pi/4$ 时, 就会得到

$$0.500 \leq 0.292. \text{tag3.10.15}$$

因此, 量子力学预言与贝尔不等式不相容. 在量子力学和满足爱因斯坦局域性原理的替代理论之间, 存在一个真实、可观测——在可被实验检验的意义上——的差别.

目前已经完成了几个检验贝尔不等式的实验. 最近的评述请见《贝尔不等式检验: 比以往任何时候都更理想》, 源自 A. Aspect 的 Nature 398 (1999) 189. 在其中的一个实验中, 测量了在低能质子-质子散射中, 末态质子间的自旋关联. 而其他所有的实验都是在一个激发原子 (Ca, Hg, ...) 的级联跃迁

$$(j=0) \xrightarrow{\gamma} (j=1) \xrightarrow{\gamma} (j=0), \text{tag3.10.16}$$

中或者在电子偶素 (一个 e^+e^- 的 1S_0 束缚态) 的衰变中, 对一对光子间的光子-极化关联进行测量. 基于 1.1 节发展出来的类比

$$S_z+ \rightarrow \hat{\epsilon} \text{ 沿 } x \text{ 方向}, \text{tag3.10.17a}$$

$$S_z \rightarrow \hat{\epsilon} \text{ 沿 } y \text{ 方向}, \text{tag3.10.17b}$$

$$S_x+ \rightarrow \hat{\epsilon} \text{ 沿 } 45^\circ \text{ 斜线方向}, (3.10.17c)$$

$$S_x \rightarrow \hat{\epsilon} \text{ 沿 } 135^\circ \text{ 斜线方向}, (3.10.17d)$$

研究光子-极化关联应当同样地好. 所有最近的精确实验结果都决定性地确证贝尔不等式被破坏了, 有一种情况竟超过了九个标准偏差. 此外, 在所有这些实验中, 这个不等式是以这样的一种方式被破坏的, 即量子力学预言在误差范围之内得到满足. 在这场论战中, 量子力学取得了辉煌的胜利.

量子力学预言被证实并不意味着现在这个课题都是无聊的. 虽然有实验的结论, 但这类测量的很多方面使人感到心里不舒服. 特别是考虑下面的一点: 在观察者 A 对粒子 1 做了一次测量以后, 粒子 2—原则上, 它可能离开粒子 1 许多光年——怎么会“知道”它的自旋应怎样取向, 以使清楚地列在表 3.1 中的那些引人注目的关联得以实现呢? 在其中一个检验贝尔不等式的实验当中 [由阿斯派克特 (A. Aspect) 和他的合作者完成的], 分析器的设置变化要非常地快, 直到任何一类传播速度比光速慢的影响来不及到达 B 之前, A 就已经做出了测量什么的决定.

通过展示下述看法来结束这一节: 尽管有这些奇特之处, 仍然不可能用自旋关联的测量在两个宏观分离的点之间传送任何有用的信息. 特别是, 超光速 (比光速还快) 的通信是不可能的.

假定 A 和 B 事先都同意测量 S_z , 然后, 不用问 A, B 就精确地知道 A 得到的是什么. 但是, 这并不意味着 A 和 B 正在通信联系, B 只不过观测一个正号与负号的随机系列. 这里面显然没有包含任何有用的信息. 只有当 B 与 A 相聚在一起并且比较了记录 (或计算机工作表) 才能证实由量子力学预言的令人瞩目的关联.

或许有人会认为, 如果 A 和 B 中的一个突然改变了他或她的分析器的取向, 他们就能够通信. 假定一开始 A 同意测量 S_z , 而 B 测量 S_r . A 的测量结果与 B 的测量结果完全没有关联, 因此不存在被传递的信息. 但是之后, 假定 A 突然破坏了他或她的许诺, 没有告知 B, 就开始测量 S_r . 现在, 在 A 的结果与 B 的结果之间有了完全的关联. 然而, B 没有任何办法推断 A 已经改变了他或她的分析器的取向. B 通过只看他或她自己的笔记本仅能继续看到“十”和“一”的随机系列. 于是, 再次没有被传递的信息.

习题

3.1 求 $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ 的本征值和本征矢. 假定一个电子处在自旋态 $\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$ 上. 如果测得 s_y , 结果为 $\hbar/2$ 的概率是什么?

3.2 对于一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子, 在存在一个磁场 $\mathbf{B} = B_x \hat{x} + B_y \hat{y} + B_z \hat{z}$ 情况下, 通过利用泡利矩阵显式结构, 求哈密顿量

$$H = -\frac{2\mu}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}$$

的本征值.

3.3 考虑由

$$U = \frac{a_0 + i\sigma \cdot \mathbf{a}}{a_0 - i\sigma \cdot \mathbf{a}}.$$

定义的 2×2 矩阵, 其中 a_0 是一个实数, 而 \mathbf{a} 是一个有着实分量的三维矢量.

(a) 证明 U 是幺正的且么模的.

(b) 一般地说, 一个 2×2 幺正么模矩阵表示一个三维转动. 借助于 a_0, a_1, a_2 和 a_3 , 求适合于 U 的转动轴和转角.

3.4 在存在一个沿 z 方向的均匀磁场情况下, 一个电子-正电子系统的时间相关哈密顿量可以写成

$$H = A \mathbf{S}^{(r^-)} \cdot \mathbf{S}^{(r^+)} + \left(\frac{eB}{mc} \right) (S_z^{(r^-)} - S_z^{(r^+)}),$$

假定系统的自旋函数由 $\chi_+^{(e^-)} \chi_-^{(e^+)}$ 给出.

(a) 在 $A \rightarrow 0, eB/mc \neq 0$ 的极限下, 它是 H 的本征函数吗? 如果它是, 能量本征值是什么? 如果它不是, H 的期待值是什么?

(b) 当 $eB/mc \rightarrow 0, A \neq 0$ 时, 求解同样的问题.

3.5 考虑一个自旋为 1 的粒子. 求

$$S_z (S_z + h) (S_z - h) \text{ 和 } S_x (S_x + h) (S_x - h)$$

的矩阵元.

3.6 设一个刚体的哈密顿量为

—

其中 \mathbf{K} 是本体坐标架中的角动量. 从这个表示式求 \mathbf{K} 的海森伯运动方程, 然后在相应的极限下求欧拉运动方程.

3.7 令 $U = e^{i\theta_3\alpha} e^{i\theta_2\beta} e^{i\theta_1\gamma}$, 其中 (α, β, γ) 是欧拉角. 为了使 U 表示一个转动 (α, β, γ) , G_k 必须满足的对易关系是什么? 把 \mathbf{G} 与角动量算符联系起来.

3.8 下列方程式的意义是什么?

$$U^{-1} A_k U = \sum R_{kl} A_l,$$

其中, \mathbf{A} 的三个分量都是矩阵. 由这个方程式证明. 矩阵元 $\langle m | A_k | n \rangle$ 像一个矢量一样变换.

3.9 考虑一个由下式表示的欧拉转动序列

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(12)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \exp\left(\frac{-i\sigma_3\alpha}{2}\right) \exp\left(\frac{-i\sigma_2\beta}{2}\right) \exp\left(\frac{-i\sigma_3\gamma}{2}\right) \\ &= \begin{pmatrix} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} & -e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} \\ e^{i(\alpha-\gamma)/2} \sin \frac{\beta}{2} & e^{i(\alpha+\gamma)/2} \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

由于转动的群性质, 预期这一序列操作等价于绕某个轴转一个 θ 角的单一转动. 求 θ .

3.10 (a) 考虑全同制备的自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的一个纯系综. 假定期待值 $\langle S_x \rangle$ 和 $\langle S_z \rangle$ 已知, 而 $\langle S_y \rangle$ 的符号也已知. 证明如何确定态矢量. 为什么不必知道 $\langle S_y \rangle$ 的大小?

(b) 考虑一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统的混合系综. 假定系综平均值 $[S_x]$, $[S_y]$ 和 $[S_z]$ 都是已知的. 证明如何可以构造表征这个系综的 2×2 密度矩阵.

3.11 (a) 证明密度算符 ρ (在薛定谔绘景中) 的时间演化由下式给定

$$\rho(t) = u(t, t_0) \rho(t_0) u^\dagger(t, t_0).$$

(b) 假定在 $t = 0$ 时有一个纯系综. 证明只要时间演化由薛定谔方程控制, 则它不可能演化成一个混合系综.

3.12 考虑自旋为 1 系统的一个系综. 密度矩阵现在是一个 3×3 矩阵. 为了表征这个密度矩阵, 需要多少独立的 (实) 参量? 除了 $[S_x]$, $[S_y]$ 和 $[S_z]$. 为了完全表征这个系综还必须知道什么?

3.13 一个角动量本征态 $|j, m = m_{\text{最大}} = j\rangle$ 绕 y 轴转一个无穷小角度 ε . 不使用 $d_{mm}^{(t)}$ 函数的显式表达式, 求在其原来态上发现这个新的转动后的态的概率表示式, 直到 ε^2 量级项.

3.14 已知 3×3 矩阵 G_i ($i = 1, 2, 3$), 其矩阵元由下式给出:

$$(G_i)_{jk} = -i\hbar \varepsilon_{ijk},$$

其中 j 和 k 是行和列指标, 证明它满足角动量对易关系. 把 G_i 与比较常用的角动量算符 J_i , 在 J_3 取为对角的情况下的 3×3 表示联系起来, 实现该联系的变换矩阵的物理 (或几何) 意义是什么? 把得到的结果与无穷小转动下的

$$\mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V} + \hat{\mathbf{n}} \delta \phi \times \mathbf{V}$$

联系起来. (注: 这个问题可能有助于理解光子的自旋.)

3.15 (a) 令 \mathbf{J} 是角动量. (它可以是轨道角动量 \mathbf{L} , 自旋 \mathbf{S} , 或 $\mathbf{J}_{\text{总}}$.) 利用 J_x, J_y, J_z ($J_{\pm} \equiv J_x \pm iJ_y$) 满足通常角动量对易关系的事实, 证明

$$\mathbf{J}^2 = J_z^2 + J_+ J_- - \hbar J_z.$$

(b) 利用 (a) (或其他方式) 推导出在

$$J_- \psi_{jm} = c_- \psi_{j, m-1}$$

中的系数 c_- 的“著名”的表示式.

3.16 证明轨道角动量算符 \mathbf{L} 与算符 \mathbf{p}^2 和 \mathbf{x}^2 都对易, 即证明 (3.7.2) 式.

3.17 一个受到球对称势 $V(r)$ 作用的粒子的波函数由下式给出:

$$\psi(\mathbf{x}) = (x + y + 3z) f(r).$$

(a) ψ 是 \mathbf{L}^2 的一个本征函数吗? 如果是的话, l 值是什么? 如果不是, 当测量 \mathbf{L}^2 时能得到什么样可能的 l 值?

(b) 在各种 m_l 态上找到该粒子的概率是什么?

(c) 假定以某种方式知道 $\psi(\mathbf{x})$ 是一个能量本征函数, 本征值为 E . 指出怎样可以找到 $V(r)$.

3.18 已知一个在球对称势中的粒子处在 \mathbf{L}^2 和 L_z 的本征态, 本征值分别为 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$. 证明在 $|lm\rangle$ 态之间的期待值满足

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0, \quad \langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \frac{[l(l+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2]}{2}.$$

半经典地解释这个结果.

3.19 假定轨道角动量允许有一个半整数的 l 值, 比如 $\frac{1}{2}$. 通常, 从

$$L_+ Y_{1/2, 1/2}(\theta, \phi) = 0,$$

可以导出

$$Y_{1/2, 1/2}(\theta, \phi) \propto e^{i\phi/2} \sqrt{\sin\theta}.$$

现在尝试 (a) 用 L_- 作用于 $Y_{1/2, 1/2}(\theta, \phi)$; (b) 用 $L_- Y_{1/2, -1/2}(\theta, \phi) = 0$, 构造 $Y_{1/2, -1/2}(\theta, \phi)$. 证明这两种做法会导致矛盾的结果. (这给出了轨道角动量不能为一个半奇数 l 值的论据.)

3.20 考虑一个轨道角动量的本征态 $|l=2, m=0\rangle$. 假定这个态绕 y 轴转了 β 角. 求在 $m=0, \pm 1$ 和 ± 2 的态上找到这个新态的概率. (在附录 B 的 B.5 节中给出的 $l=0, 1$ 和 2 的球谐函数可能是有用的.)

3.21 本题的目的是借助于笛卡尔本征态 $|n_x, n_y, n_z\rangle$. 确定写成 \mathbf{L}^2 和 L_z 本征态的三维各向同性谐振子的简并本征态.

(a) 证明角动量算符由下式给出:

$$L_i = i\hbar \varepsilon_{ijk} a_j a_k^\dagger$$

$$\mathbf{L}^2 = \hbar^2 \left[N(N+1) - a_k^\dagger a_k^\dagger a_j a_j \right],$$

其中隐含了对于重复指标的求和, ε_{ijk} 是全反对称符号, 而 $N \equiv a_i^\dagger a_i$ 计数了总的量子数日.

(b) 使用这些关系式, 把态 $|qlm\rangle = |0lm\rangle$, $m=0, \pm 1$, 借助于能量简并的三个本征态 $|n_x, n_y, n_z\rangle$ 表示出来. 在坐标空间中表述你的答案, 并且检查角度和径向依赖关系都是正确的.

(c) 对 $|qlm\rangle = |200\rangle$ 重复以上两问.

(d) 对 $|qlm\rangle = |02m\rangle$, 在 $m = 0, 1$ 和 2 的情况下, 重复 (a) 和 (b) 两问.

3.22 遵照下列步骤, 证明库默尔方程 (3.7.46) 可以用拉盖尔多项式 $L_n(x)$ 写出来, 后者按照母函数定义为

$$g(x, t) = \frac{e^{-x/(1-t)}}{1-t} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) \frac{t^n}{n!}$$

其中 $0 < t < 1$. 2.5 节中关于厄米多项式的母函数的讨论将会很有帮助.

(a) 证明 $L_n(0) = n!$ 和 $L_0(x) = 1$.

(b) 把 $g(x, t)$ 对 x 求微商, 证明

$$L'_n(x) - nL'_{n-1}(x) = -nL_{n-1}(x),$$

并求出前几个拉盖尔多项式.

(c) 把 $g(x, t)$ 对 t 求微商, 证明

$$L_{n+1}(x) - (2n+1-x)L_n(x) + n^2L_{n-1}(x) = 0.$$

(d) 现在, 证明库默尔方程可以通过推导

$$xL''_n(x) + (1-x)L'_n(x) + nL_n(x) = 0,$$

而求解, 而且把 n 与氢原子的主量子数联系起来.

(e) 定义缔合拉盖尔多项式为

$$L_n^k(x) = (-1)^k \frac{d^k}{dx^k} [L_{n+k}(x)]$$

证明. 它满足下列方程

$$xL_n^{k*}(x) + (k+1-x)L_n^{k*}(x) + nL_n^k(x) = 0$$

事实上, 可以证明这个方程就是库默尔方程. 这就是说, 氢原子的径向波函数是用缔合拉盖尔多项式表示的.

[(e) 小题是作者在勘误表中要求加上的. 一译者注]

3.23 在角动量的施温格方案中, 算符

$$K_+ \equiv a_+^\dagger a_-^\dagger \text{ 和 } K_- \equiv a_+ a_-$$

的物理意义是什么? 给出 K_\pm 的非零矩阵元.

3.24 通过把 $j_1 = 1$ 和 $j_2 = 1$ 相加, 求出所形成的 $j = 2, 1, 0$ 的所有 9 个 $|j, m\rangle$ 态. 利用简化符号, 以 $\pm, 0$ 分别代表 $m_{1,2} = \pm 1, 0$, 写出 $|j, m\rangle$ 的显式, 例如

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|0+\rangle$$

可以利用阶梯算符 J_\pm , 或递推关系以及正交性. 找一个克莱布什-戈丹系数表用来做比较, 检验你的结果.

3.25 (a) 对于任意的 j (整数或半奇数), 求

$$\sum_{m=-j}^j \left| d_{mm'}^{(j)}(\beta) \right|^2 m.$$

并核对 $j = \frac{1}{2}$ 时所得的答案.

(b) 证明, 对于任意的 j

$$\sum_{m=-j}^j m^2 \left| d_{m'm}^{(j)}(\beta) \right|^2 = \frac{1}{2} j(j+1) \sin^2 \beta + m'^2 \frac{1}{2} (3 \cos^2 \beta - 1).$$

[提示: 这可以用许多方法证明. 例如, 可以利用球 (不可约) 张量语言检查 J_z^2 的转动性质.]

3.26 (a) 考虑一个 $j = 1$ 的系统. 明确地把

$$\langle j = 1, m' | J_y | j = 1, m \rangle$$

写成 3×3 矩阵形式.

(b) 证明, 只有 $j = 1$ 时, 才可以合理地用

$$1 - i \left(\frac{J_y}{\hbar} \right) \sin \beta - \left(\frac{J_y}{\hbar} \right)^2 (1 - \cos \beta)$$

代替 $e^{-iJ_y \beta / \hbar}$.

(c) 利用 (b) 证明

$$d^{(j=1)}(\beta) = \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{2}\right)(1 + \cos \beta) & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \sin \beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1 - \cos \beta) \\ \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \sin \beta & \cos \beta & -\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \sin \beta \\ \left(\frac{1}{2}\right)(1 - \cos \beta) & \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \sin \beta & \left(\frac{1}{2}\right)(1 + \cos \beta) \end{pmatrix}.$$

3.27 借助

$$\mathcal{D}'_{mn}(\alpha\beta\gamma) = \langle \alpha\beta\gamma | jmn \rangle$$

中的级数把矩阵元 $\langle \alpha_2 \beta_2 \gamma_2 | J_3^2 | \alpha_1 \beta_1 \gamma_1 \rangle$ 表示出来. (作者在勘误表中认为这个题应该删掉, 因为 $|jmn\rangle$ 代表什么, 并不清楚. 一译者注)

3.28 考虑由两个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子组成的一个系统. 观察者 A 专门测量其中一个粒子的自旋分量 (s_{1z} , s_{1x} , 等等), 同时观察者 B 测量另一个粒子的自旋分量. 假定已知系统处在自旋单态, 即 $S_{\&} = 0$.

(a) 当观察者 B 不做任何测量时, 观察者 A 得到 $s_{1z} = \hbar/2$ 的概率是什么? 对于 $s_{1x} = \hbar/2$ 求解同样问题.

(b) 观察者 B 肯定地确认粒子 2 的自旋处于 $s_{2z} = \hbar/2$ 态. 如果观察者 A (i) 测量 s_{1z} ; (ii) 测 s_{1x} , 则对观察者 A 的测量结果能给出的结论是什么? 解释你的答案.

3.29 考虑一个秩为 1 的球张量 (即一个矢量)

$$V_{\pm 1}^{(1)} = \mp \frac{V_x \pm iV_y}{\sqrt{2}}, \quad V_0^{(1)} = V_z.$$

利用习题 3.26 给出的 $d^{(j=1)}$ 的表示式, 求

$$\sum_{q'} d_{qq'}^{(1)}(\beta) V_{q'}^{(1)},$$

并证明这结果正是从绕 y 轴转动时 $V_{x,y,z}$ 的变换性质所预期的.

3.30 (a) 用两个不同的矢量 $\mathbf{U} = (U_x, U_y, U_z)$ 和 $\mathbf{V} = (V_x, V_y, V_z)$ 构造一个秩为 1 的球张量. 明确地用 $U_{x,y,z}$ 和 $V_{x,y,z}$ 写出 $T_{\pm 1,0}^{(1)}$.

(b) 用两个不同的矢量 \mathbf{U} 和 \mathbf{V} 构造一个秩为 2 的球张量. 明确地用 $U_{x,y,z}$ 和 $V_{x,y,z}$ 写出 $T_{\pm 2, \pm 1, 0}^{(2)}$.

3.31 考虑一个无自旋粒子被一个中心力位势束缚于一个固定的中心.

(a) 尽可能只用维格纳-埃卡特定理建立起矩阵元

$$\langle n', l', m' \rangle \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (x \pm iy) |n, l, m\rangle \text{ 和 } \langle n', l', m' \rangle z |n, l, m\rangle$$

的关系. 肯定地指出在什么样的条件下这些矩阵元非零.

(b) 利用波函数 $\psi(\mathbf{x}) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$ 求解同样的问题.

3.32 (a) 把 xy, xz 和 $(x^2 - y^2)$ 写成一个秩为 2 的球 (不可约) 张量的分量.

(b) 期待值

$$Q \equiv e \langle \alpha, j, m = j | (3z^2 - r^2) | \alpha, j, m = j \rangle$$

被称为四级矩. 利用 Q 和适当的克莱布什-戈丹系数, 求

$$e \langle \alpha, j, m' | (x^2 - y^2) | \alpha, j, m = j \rangle,$$

其中 $m' = j, j-1, j-2, \dots$.

3.33 一个处于原点的自旋为 $\frac{3}{2}$ 的原子核受到一个外部非均匀电场的作用. 基本的电四极矩相互作用可以取为

$$H_{\text{int}} = \frac{eQ}{2s(s-1)\hbar^2} \left[\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_0 S_x^2 + \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right)_0 S_y^2 + \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right)_0 S_z^2 \right],$$

其中 ϕ 是满足拉普拉斯方程的静电势, 而坐标轴的选取, 使得:

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \right)_0 = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y \partial z} \right)_0 = \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial z} \right)_0 = 0.$$

证明相互作用可以写成

$$A(3S_z^2 - \mathbf{S}^2) + B(S_+^2 + S_-^2).$$

并借助于 $(\partial^2 \phi / \partial x^2)_0$ 等表示 A 和 B . (借助 $|m\rangle$, 其中 $m = \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{1}{2}$) 确定能量本征右矢和相应的能量本征值. 有简并存在吗?

第五章 格林函数

内容提要

□ 诺特定理

□ 简并

□ 离散对称性

□ 宇称

第六章 路径积分, 关联函数

内容提要

☐ 微扰

☐ 变分

第七章 铁磁类模型

内容提要

- 声子
- 紧束缚模型

- 位能
- 哈伯德模型

第八章 重整化群方法 (RG)

内容提要

- ☐ 泛函积分
- ☐ 泛函导数
- ☐ 路径积分
- ☐ 配分函数

第九章 量子纠缠与 QSL

内容提要

- Wick 定理
- Dyson 方程
- 费曼图
- 格林函数

第十章 前沿导读

内容提要

▣ 松原函数

▣ Kubo 公式

附录 A 单位制

我们从小学就逐步接触一些单位, 常见的如米 (m), 千克 (kg), 秒 (s) 等是国际统一使用的**标准度量系统 (国际单位制)**. 相应的, 像是国内经常接触的斤, 公里, 亩, 美国¹常用的华氏度等, 则是生活中使用的独立度量系统, 大多数度量系统都和标准度量系统之间存在换算关系. 而且生活中使用的度量单位大多比较局限, 对于相干度较低的单位往往是不涉及的.

对于初中和高中的物理学习, 我们已经熟练使用国际单位制 (SI²) 来解决一些简单的物理问题. 但是, 就像生活中使用的单位制一样, 人们出于方便的角度对于一些物理场景也构建出一些新的单位制. 这些单位制能够简化相关的物理问题.

物理上使用的单位制与国际单位制的转换往往比较复杂, 使用时建议标注使用了哪个单位制.

注 在这个附录中, 电磁单位制与自然单位制独立分为两节, 但是按照较广义的自然单位制的定义³, 电磁单位制也属于其中的一类, 特此说明.

A.1 电磁单位制

相比于我们常用的国际单位制, 也称为 **MKSA** 单位制 (即米, 千克, 秒, 安培), 我们在电磁中常用的高斯单位制被称为 **CGS** 单位制 (即厘米, 克, 秒).

接下来为了避免混乱, 列举高斯单位制所常用的单位: 电荷 *statC*, 电势 *statV*, 力 *dyne*⁴, 磁感应强度 *gauss*, 磁场强度 *oersted*, 磁通量 *mx*, 能量 *erg*.

相比于自然单位制直接将值赋为 1, 高斯单位制就比较保守, 它根据我们熟知的库仑定律, 通过定义 $1\text{A} = 0.1c \cdot \text{dyne}^{\frac{1}{2}}$, $1\text{C} = 0.1c \cdot \text{dyne}^{\frac{1}{2}} \cdot \text{s}$ 来达到简化的操作.

表 A.1: 一些简单对应关系

	SI	Gaussian	G/SI
E	V/m	statV/m	$\sqrt{4\pi\epsilon_0}$
V	V	statV	$\sqrt{4\pi\epsilon_0}$
D	C/m^2	statC/cm^2	$\sqrt{4\pi/\epsilon_0}$
q	C	statC	$1/\sqrt{4\pi\epsilon_0}$
P	C/m^2	statC/cm^2	$1/\sqrt{4\pi\epsilon_0}$
I	A	statC/s	$1/\sqrt{4\pi\epsilon_0}$
B	T	$Gauss$	$\sqrt{4\pi/\mu_0}$
A	Wb/m	$Gauss \cdot cm$	$\sqrt{4\pi/\mu_0}$
H	A/m	$oersted$	$\sqrt{4\pi\mu_0}$
ϵ	F/m	1	$1/\epsilon_0$
μ	H/m	1	$1/\mu_0$

¹包括美国、开曼群岛、伯利兹等极少数国家和地区

²法语 *Système International d'Unités*, 简称 SI

³区别于粒子物理的“自然单位制”和普朗克单位制

⁴中文音译为达因

A.2 自然单位制

我们熟知, 国际单位制的 7 个基本单位是通过物理常数所定义的, 那么, 如果我们把其中一个或几个的定义值改为 1, 那么就又可以构造出来一套度量系统. 这其中显而易见的优点是直接导致原本含有大量常数的公式可以被写成更加简洁方便的形式. 在物理学里, 自然单位制就是一种建立于此类方法的计量单位制度. 例如, 电荷的自然单位是基本电荷 e , 速度的自然单位是光速 c , 角动量的自然单位是约化普朗克常数 \hbar , 电阻的自然单位是自由空间阻抗 Z_0 , 质量的自然单位则有电子质量 m_e 与质子质量 m_p 等.

事实上, 对于单位的改动, 我们至少要求不会导致无量纲常数的值发生改变, 如精细结构常数.

$$\alpha = \frac{e^2 k_e}{\hbar c} = \frac{e^2}{\hbar c (4\pi\epsilon_0)} = \frac{1}{137.035999074} = 7.2973525698 \cdot 10^{-3}$$

这个常数就要求不能同时把 e, \hbar, c, k_e 同时为 1.

A.2.1 普朗克单位制

普朗克单位制几乎是最常使用的单位制, 它的定义只依赖于最基本的性质. 普朗克单位选择将真空光速 c , 万有引力常数 G , 约化普朗克常数 \hbar , 真空电容率 ϵ_0 , 玻尔兹曼常数 k_B 定为 1⁵.

类比国际单位制, 普朗克单位制也有一些基本单位 (如常常出现在各种科普作品中的普朗克长度, 普朗克时间等) 和导出单位 (普朗克面积, 普朗克动量等). 具体列表可参考相关 [wiki 普朗克单位制](#), 这里不做展开.

A.2.2 “自然单位制”(粒子物理)

在粒子物理中, 自然单位制特指 $\hbar = c = k_B = 1$ 情况下的单位制. 通常会根据情况选择使用洛伦兹-亥维赛单位制或高斯单位制来确定电荷定义.

A.2.3 其他单位制

史东纳单位制

第一次出现的单位制, 已经不再使用. 规定了 $c = G = e = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = k_B = 1$.

原子单位制

这类单位制是特别为了简易表达原子物理学和分子物理学的方程而精心设计, 在本篇中仅做介绍.

原子单位制分为两种: 哈特里原子单位制和里德伯原子单位制. 哈特里原子单位制比里德伯原子单位制常见. 两者的主要区别在于质量单位与电荷单位的选取.

哈特里原子单位制的基本单位为 $e = m_e = \hbar = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = k_B = 1, c = \frac{1}{\alpha}$.

里德伯原子单位制的基本单位为 $\frac{e}{\sqrt{2}} = 2m_e = \hbar = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = k_B = 1, c = \frac{2}{\alpha}$.

⁵ 普朗克洛伦兹-亥维赛单位制将 $4\pi G, \epsilon_0$ 定为 1, 普朗克高斯单位制将 $G, 4\pi\epsilon_0$ 定为 1

附录 B 固体物理中的一些概念

对于物理研究, 把它放在合适的空间下能够简化问题. 对于坐标空间 (正格子, 基矢) 和动量空间 (倒格子, 倒格矢) 来讲, 相当于从两个角度来描写同一事物. 在之后对于晶格的分析中, 我们常常要在动量空间上分析这一问题.

如果对于物理形式较为敏感, 应该会容易的想到“两个角度描写同一事物”的表述和傅里叶变换有很大的相似性. 实际上, 坐标空间和动量空间互为傅里叶变换. 如果对于量子力学有一定了解或已经阅读过关于表象变换的内容, 对这一部分会有更深的体会.

一些需要了解的概念

为了能够便于理解接下来的内容, 以下是需要了解的概念.

1. **格矢**: 联系任两个晶格点的向量
2. **布拉维晶格 Bravais lattices**: 由同种原子构成的晶胞, 多种原子构成的晶胞可以视为几个布拉维晶格的叠加.
3. 待补充

附录 C $\delta_{ij}, \varepsilon_{ijk}$ 和爱因斯坦求和约定与 δ 函数

C.1 克罗内克符号 δ_{ij}

克罗内克符号是一类二元函数, 其通常定义为以下形式

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

其具有筛选性 (和投影算符类似)

$$\sum_{i=-\infty}^{\infty} \delta_{ij} a_i = a_j \quad (\text{C.2})$$

其具有和 δ 函数共同的部分性质, 而 δ 函数也正是源于克罗内克符号.

C.2 列维西维塔符号 ε_{ijk}

列维-奇维塔符号, 对于正整数 n , 它以 $1, 2, \dots, n$ 所形成排列的奇偶性来定义. 其他名称包括排列符号、反对称符号与交替符号.

而 ε_{ijk} 的值由下角标 ijk 决定, 当存在任意两个角标相同时值取 0, 当全部指标都不相等时, 角标的逆序数为偶数取 1, 为奇数则取 0.

二维形式

$$\varepsilon_{ij} = \begin{cases} +1 & \text{当 } (i, j) = (1, 2) \\ -1 & \text{当 } (i, j) = (2, 1) \\ 0 & \text{当 } i = j \end{cases} \quad (\text{C.3})$$

二维较为少见, 仅作为了解.

三维形式

我们经常看到的列维西维塔符号常常是三维形式的, 即如下

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{当 } (i, j, k) = (1, 2, 3), (2, 3, 1), (3, 1, 2) \\ -1 & \text{当 } (i, j, k) = (3, 2, 1), (2, 1, 3), (1, 3, 2) \\ 0 & \text{当 } i = j, j = k \text{ 或 } k = i \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

性质

两个列维-奇维塔符号的积, 可以用一个以克罗内克符号表示的行列式求得

$$\varepsilon_{ijk} \dots \varepsilon_{mnl} \dots = \begin{vmatrix} \delta_{im} & \delta_{in} & \delta_{il} & \dots \\ \delta_{jm} & \delta_{jn} & \delta_{jl} & \dots \\ \delta_{km} & \delta_{kn} & \delta_{kl} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \quad (\text{C.5})$$

也可以用来表示行列式和向量内积, 对于一个 3×3 的方阵 A , 有表示

$$\det(A) = \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{ijk} a_{1i} a_{2j} a_{3k} \quad (\text{C.6})$$

对于向量内积, 有

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \begin{vmatrix} \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \sum_{1 \leq i,j,k \leq 3} \varepsilon_{ijk} a_i b_j \mathbf{e}_k \quad (\text{C.7})$$

C.3 爱因斯坦求和约定

爱因斯坦求和约定是一种标记的约定, 即重复角标意味着求和, 一般未指定的情况下就是由 1 至 3.

C.4 δ 函数

我们首先明确, δ 函数并不是通常意义的函数, 其更准确的称呼是广义函数. 其在 $x = 0$ 处取值为正无穷, 在 $x \neq 0$ 处取值为 0, 但是在全定义域上的积分值为 1, 当然, 我们所学的黎曼积分并不支持这一操作, 我们需要勒贝格积分来处理它, 当然, 这里并不会讲述测度论的内容, 仅仅作为了解即可.

C.4.1 定义

我们从其定义开始这部分内容.

$$\delta(x) = \begin{cases} +\infty, & x = 0 \\ 0, & x \neq 0 \end{cases} \quad (\text{C.8})$$

且同时满足

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \, dx = 1 \quad (\text{C.9})$$

而对于复变函数中, 一切在域 D 中闭包的全纯函数, 我们可以用柯西积分公式来表示 δ 函数

$$\delta_z[f] = f(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\partial D} \frac{f(\zeta) \, d\zeta}{\zeta - z}. \quad (\text{C.10})$$

C.4.2 性质

首先, 回忆克罗内克符号的部分, 很容易联想到 δ 函数也具有筛选的性质:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) \, dx = f(x_0) \quad (\text{C.11})$$

以及 (高维的情况与之类似, 不再重复, 相关证明是显然的)

$$\begin{aligned} \delta(\alpha x) &= \frac{\delta(x)}{|\alpha|} \\ \delta(-x) &= \delta(x) \\ x\delta(x) &= 0 \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\xi - x) \delta(x - \eta) \, dx = \delta(\xi - \eta)$$

狄拉克 δ 分布是在包含所有平方可积函数的希尔伯特空间 L_2 上所稠密定义的一个无界线性泛函. 在许多应用中, 可以对 L_2 的某个子空间赋予更强的拓扑, 使得 δ 函数能够定义一个有界线性算子.

附录 D mathematica 的基本用法

附录 E 临时章节

"normal"		<i>ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ</i>	
"blackboard"	mathbb	<i>ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ</i>	
"boldface"	mathbf	ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ	
"typewriter"	mathtt	<i>ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ</i>	
"roman"	mathrm	<i>ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ</i>	(E.1)
"sans-serif"	mathsf	<i>ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ</i>	
"calligraphic"	mathcal	<i>ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ</i>	
"script"	mathscr	<i>ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ</i>	
"fraktur"	mathfrak	<i>ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ</i>	

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{\text{StandardModel}} = & -\frac{1}{2} \partial_\nu g_\mu^a \partial_\nu g_\mu^a - g_s f^{abc} \partial_\mu g_\nu^a g_\mu^b g_\nu^c - \frac{1}{4} g_s^2 f^{abc} f^{ade} g_\mu^b g_\nu^c g_\mu^d g_\nu^e + \frac{1}{2} i g_s^2 (\bar{q}_i^\sigma \gamma^\mu q_j^\sigma) g_\mu^a + \bar{G}^a \partial^2 G^a + \\
& g_s f^{abc} \partial_\mu \bar{G}^a G^b g_\mu^c - \partial_\nu W_\mu^+ \partial_\nu W_\mu^- - M^2 W_\mu^+ W_\mu^- - \frac{1}{2} \partial_\nu Z_\mu^0 \partial_\nu Z_\mu^0 - \frac{1}{2 c_w^2} M^2 Z_\mu^0 Z_\mu^0 - \frac{1}{2} \partial_\mu A_\nu \partial_\mu A_\nu - \\
& \frac{1}{2} \partial_\mu H \partial_\mu H - \frac{1}{2} m_h^2 H^2 - \partial_\mu \phi^+ \partial_\mu \phi^- - M^2 \phi^+ \phi^- - \frac{1}{2} \partial_\mu \phi^0 \partial_\mu \phi^0 - \frac{1}{2 c_w^2} M \phi^0 \phi^0 - \beta_h \left[\frac{2M^2}{g^2} + \frac{2M}{g} H + \right. \\
& \left. \frac{1}{2} (H^2 + \phi^0 \phi^0 + 2\phi^+ \phi^-) \right] + \frac{2M^4}{g^2} \alpha_h - i g c_w [\partial_\nu Z_\mu^0 (W_\mu^+ W_\nu^- - W_\nu^+ W_\mu^-) - Z_\nu^0 (W_\mu^+ \partial_\nu W_\mu^- - W_\mu^- \partial_\nu W_\mu^+) + \\
& Z_\mu^0 (W_\nu^+ \partial_\nu W_\mu^- - W_\nu^- \partial_\nu W_\mu^+) - i g s_w [\partial_\nu A_\mu (W_\mu^+ W_\nu^- - W_\nu^+ W_\mu^-) - A_\nu (W_\mu^+ \partial_\nu W_\mu^- - W_\mu^- \partial_\nu W_\mu^+) - \\
& g^2 c_w^2 (Z_\mu^0 W_\mu^+ Z_\nu^0 W_\nu^- - Z_\mu^0 Z_\mu^0 W_\nu^+ W_\nu^-) + g^2 s_w^2 (A_\mu W_\mu^+ A_\nu W_\nu^- - A_\mu A_\mu W_\nu^+ W_\nu^-) + A g^2 s_w c_w [A_\mu Z_\nu^0 (W_\mu^+ W_\nu^- - \\
& W_\nu^+ W_\mu^-) - 2A_\mu Z_\mu^0 W_\nu^+ W_\nu^-] - g \alpha [H^3 + H \phi^0 \phi^0 + 2H \phi^+ \phi^-] - \frac{1}{8} g^2 \alpha_h [H^4 + (\phi^0)^4 + 4(\phi^+ \phi^-)^2 + 4(\phi^0)^2 \phi^+ \phi^- + \\
& 4H^2 \phi^+ \phi^- + 2(\phi^0)^2 H^2] - g M W_\mu^+ W_\mu^- H - \frac{1}{2} g \frac{M}{c_w^2} Z_\mu^0 Z_\mu^0 H - \frac{1}{2} i g [W_\mu^+ (\phi^0 \partial_\mu \phi^- - \phi^- \partial_\mu \phi^0) - W_\mu^- (\phi^0 \partial_\mu \phi^+ - \\
& \phi^+ \partial_\mu \phi^0)] + \frac{1}{2} g [W_\mu^+ (H \partial_\mu \phi^- - \phi^- \partial_\mu H) - W_\mu^- (H \partial_\mu \phi^+ - \phi^+ \partial_\mu H)] + \frac{1}{2} g \frac{1}{c_w} (Z_\mu^0 (H \partial_\mu \phi^0 - \phi^0 \partial_\mu H) - \\
& i g \frac{s_w^2}{c_w} M Z_\mu^0 (W_\mu^+ \phi^- - W_\mu^- \phi^+) + i g s_w M A_\mu (W_\mu^+ \phi^- - W_\mu^- \phi^+) - i g \frac{1 - 2c_w^2}{2c_w} Z_\mu^0 (\phi^+ \partial_\mu \phi^- - \phi^- \partial_\mu \phi^+) + i g s_w A_\mu \\
& (\phi^+ \partial_\mu \phi^- - \phi^- \partial_\mu \phi^+) - \frac{1}{4} g^2 W_\mu^+ W_\mu^- [H^2 + (\phi^0)^2 + 2\phi^+ \phi^-] - \frac{1}{4} g^2 \frac{1}{c_w^2} Z_\mu^0 Z_\mu^0 [H^2 + (\phi^0)^2 + 2(2s_w^2 - 1)^2 \phi^+ \phi^-] - \\
& \frac{1}{2} g^2 \frac{s_w^2}{c_w} Z_\mu^0 \phi^0 (W_\mu^+ \phi^- + W_\mu^- \phi^+) - \frac{1}{2} i g^2 \frac{s_w^2}{c_w} Z_\mu^0 H (W_\mu^+ \phi^- - W_\mu^- \phi^+) + \frac{1}{2} g^2 s_w A_\mu \phi^0 (W_\mu^+ \phi^- + W_\mu^- \phi^+) + \frac{1}{2} i g^2 s_w A_\mu H \\
& (W_\mu^+ \phi^- - W_\mu^- \phi^+) - g^2 \frac{s_w}{c_w} (2c_w^2 - 1) Z_\mu^0 A_\mu \phi^+ \phi^- - g^1 s_w^2 A_\mu A_\mu \phi^+ \phi^- - \bar{e}^\lambda (\gamma \partial + m_e^\lambda) e^\lambda - \bar{\nu}^\lambda \gamma \partial \nu^\lambda - \bar{u}_j^\lambda (\gamma \partial + \\
& m_u^\lambda) u_j^\lambda - \bar{d}_j^\lambda (\gamma \partial + m_d^\lambda) d_j^\lambda + i g s_w A_\mu [-(\bar{e}^\lambda \gamma^\mu e^\lambda) + \frac{2}{3} (\bar{u}_j^\lambda \gamma^\mu u_j^\lambda) - \frac{1}{3} (\bar{d}_j^\lambda \gamma^\mu d_j^\lambda)] + \frac{i g}{4c_w} Z_\mu^0 [(\bar{\nu}^\lambda \gamma^\mu (1 + \gamma^5) \nu^\lambda) + \\
& (\bar{e}^\lambda \gamma^\mu (4s_w^2 - 1 - \gamma^5) e^\lambda) + (\bar{u}_j^\lambda \gamma^\mu (\frac{4}{3} s_w^2 - 1 - \gamma^5) u_j^\lambda) + (\bar{d}_j^\lambda \gamma^\mu (1 - \frac{8}{3} s_w^2 - \gamma^5) d_j^\lambda)] + \frac{i g}{2\sqrt{2}} W_\mu^+ [(\bar{\nu}^\lambda \gamma^\mu (1 + \gamma^5) e^\lambda) + \\
& (\bar{u}_j^\lambda \gamma^\mu (1 + \gamma^5) C_{\lambda k} d_j^k)] + \frac{i g}{2\sqrt{2}} W_\mu^- [(\bar{e}^\lambda \gamma^\mu (1 + \gamma^5) \nu^\lambda) + (\bar{d}_j^\lambda C_{\lambda k}^\dagger \gamma^\mu (1 + \gamma^5) u_j^k)] + \frac{i g}{2\sqrt{2}} \frac{m_e^\lambda}{M} [-\phi^+ (\bar{\nu}^\lambda (1 - \gamma^5) e^\lambda) + \\
& \phi^- (\bar{e}^\lambda (1 + \gamma^5) \nu^\lambda)] - \frac{\partial}{2} \frac{m_e^\lambda}{M} [H (\bar{e}^\lambda e^\lambda) + i \phi^0 (\bar{e}^\lambda \gamma^5 e^\lambda)] + \frac{i g}{2M\sqrt{2}} \phi^+ [-m_d^\lambda (\bar{u}_j^\lambda C_{\lambda k} (1 - \gamma^5) d_j^k) + m_u^\lambda (\bar{u}_j^\lambda C_{\lambda k} (1 + \\
& \gamma^5) d_j^k) + \frac{i g}{2M\sqrt{2}} \phi^- [m_d^\lambda (\bar{d}_j^\lambda C_{\lambda k}^\dagger (1 + \gamma^5) u_j^k) - m_u^\lambda (\bar{d}_j^\lambda C_{\lambda k}^\dagger (1 - \gamma^5) u_j^k) - \frac{g}{2} \frac{m_u^\lambda}{M} H (\bar{u}_j^\lambda u_j^\lambda) - \frac{g}{2} \frac{m_d^\lambda}{M} H (\bar{d}_j^\lambda d_j^\lambda) + \\
& \frac{i g}{2} \frac{m_u^\lambda}{M} \phi^0 (\bar{u}_j^\lambda \gamma^5 u_j^\lambda) - \frac{i g}{2} \frac{m_d^\lambda}{M} \phi^0 (\bar{d}_j^\lambda \gamma^5 d_j^\lambda) + \bar{X}^+ (\partial^2 - M^2) X^+ + \bar{X}^- (\partial^2 - M^2) X^- + \bar{X}^0 (\partial^2 - \frac{M^2}{c_w^2}) X^0 + \bar{Y} \partial^2 Y + \\
& i g c_w W_\mu^+ (\partial_\mu \bar{X}^0 X^- - \partial_\mu \bar{X}^+ X^0) + i g s_w W_\mu^+ (\partial_\mu \bar{Y} X^- - \partial_\mu \bar{X}^+ Y) + i g c_w W_\mu^- (\partial_\mu \bar{X} - X^0 - \partial_\mu \bar{X}^0 X^+) + i g s_w W_\mu^- (\partial_\mu \bar{X} - \\
& Y - \partial_\mu \bar{Y} X^+) + i g c_w Z_\mu^0 (\partial_\mu \bar{X}^+ X^+ - \partial_\mu \bar{X}^- X^-) + i g s_w A_\mu (\partial_\mu \bar{X}^+ X^+ - \partial_\mu \bar{X} - X^-) - \frac{1}{2} g M [\bar{X} + X^+ H + \bar{X}^- X^- H + \\
& \frac{1}{c_w^2} \bar{X}^0 X^0 H] + \frac{1 - 2c_w^2}{2c_w} i g M [\bar{X}^+ X^0 \phi^+ - \bar{X}^- X^0 \phi^-] + \frac{1}{2c_w} i g M [\bar{X}^0 X^- \phi^+ - \bar{X}^0 X^+ \phi^-] + i g M s_w [\bar{X}^0 X^- \phi^+ - \\
& \bar{X}^0 X^+ \phi^-] + \frac{1}{2} i g M [\bar{X}^+ X^+ \phi^0 - \bar{X}^- X^- \phi^0]
\end{aligned}$$

(E.2)

附录 F 答案及解析

F.1 第一章

1. 证明: 如果 $X = |\beta\rangle\langle\alpha|$, 那么则有 $X^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|$.

证明 由左右矢运算规则可得, 也可以利用矩阵形式进行运算.

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|)^\dagger = \langle\alpha|^\dagger|\beta\rangle^\dagger = |\alpha\rangle\langle\beta|$$

2. 判断

- (a). 对
(b). 错
(c). 对

3. 证明:

$$[AB, CD] = -AC\{D, B\} + A\{C, B\}D - C\{D, A\}B + \{C, A\}DB.$$

证明

$$AC\{D, B\} = ACDB + ACBD,$$

$$A\{C, B\}D = ACBD + ABCD,$$

$$C\{D, A\}B = CDAB + CADB,$$

$$\{C, A\}DB = CADB + ACDB.$$

$$\begin{aligned} \text{于是有 } -AC\{D, B\} + A\{C, B\}D - C\{D, A\}B + \{C, A\}DB &= -ACDB + ABCD - CDAB + ACDB \\ &= ABCD - CDAB = [AB, CD] \end{aligned}$$

4. 假定一个 2×2 矩阵 X (不一定是厄米或么正矩阵) 被写成

$$X = a_0 + \sigma \cdot \mathbf{a},$$

其中 a_0 和 $a_{1,2,3}$ 都是数.

- (a). a_0 和 a_k ($k = 1, 2, 3$) 与 $\text{tr}(X)$ 和 $\text{tr}(\sigma_k X)$ 有什么样的关系?

证明 我们先分别计算 $\text{Tr}(X)$ 和 $\text{Tr}(\sigma_k X)$, 对于前者 (我们首先需要强调, a_0 是一个数, 得到的结果是矩阵, 这里的加法我们视为 $X = a_0 \cdot \mathbf{1} + \sigma \cdot \mathbf{a}$, 并且这里的乘法显然是矩阵乘法而不是内积.) 我们有

$$\text{Tr}(X) = a_0 \text{Tr}(\mathbf{1}) + \sum_{\ell} \text{Tr}(\sigma_{\ell}) a_{\ell} = 2a_0 \quad (\text{F.1})$$

其中我们知道 $\text{Tr}(A + B) = \text{Tr}(A) + \text{Tr}(B)$, 而且我们不需要理会后面那一项, 因为我们知道泡利矩阵的迹为 0, 不要忘记单位矩阵的迹是 2, 自然得出结果.

下面我们看后面部分

$$\text{Tr}(\sigma_k X) = a_0 \text{Tr}(\sigma_k) + \sum_{\ell} \text{Tr}(\sigma_k \sigma_{\ell}) a_{\ell} = \frac{1}{2} \sum_{\ell} \text{Tr}(\sigma_k \sigma_{\ell} + \sigma_{\ell} \sigma_k) a_{\ell} \quad (\text{F.2})$$

其中 $a_0 \text{Tr}(\sigma_k)$ 这一项同样为 0, 后一项我们利用了迹的循环性质 (泡利矩阵为 2×2 的方阵): $\text{Tr}(ABCD) = \text{Tr}(BCDA) = \text{Tr}(CDAB)$, 并且注意到可以利用克罗内克符号将其表现为

$$\frac{1}{2} \sum_{\ell} \text{Tr}(\sigma_k \sigma_{\ell} + \sigma_{\ell} \sigma_k) a_{\ell} = \sum_{\ell} \delta_{k\ell} \text{Tr}(\mathbf{1}) a_{\ell} = 2a_k \quad (\text{F.3})$$

注意 $\frac{1}{2}$ 被约去了, 且我们知道 $\sum_{\ell} \delta_{k\ell}$ 具有筛选性质 (参照附录), 现在我们一并给出最终结果.

$$a_0 = \frac{1}{2} \text{Tr}(X) \text{ 和 } a_k = \frac{1}{2} \text{Tr}(\sigma_k X) \quad (\text{F.4})$$

- (b). 利用矩阵元 X_{ij} 求出 a_0 和 a_k .

证明 直接写为矩阵元形式代入即可得到答案

$$a_0 = (X_{11} + X_{22})/2, a_1 = (X_{12} + X_{21})/2, a_2 = i(-X_{21} + X_{12})/2, a_3 = (X_{11} - X_{22})/2 \quad (\text{F.5})$$

5. 证明一个 2×2 矩阵 $\sigma \cdot \mathbf{a}$ 的行列式在如下变换中不变:

$$\sigma \cdot \mathbf{a} \rightarrow \sigma \cdot \mathbf{a}' \equiv \exp\left(\frac{i\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right) \sigma \cdot \mathbf{a} \exp\left(\frac{-i\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right).$$

当 $\hat{\mathbf{n}}$ 沿 z 正方向时, 利用 a_k 求出 a'_k 并解释你的结果.

证明 事实上, 这一题需要一定对于旋转矩阵和 $\text{SO}(2)$ 群的了解, 下面使用了其中的部分结论, 如果你并不了解这些内容, 可以参照后续章节.

我们知道, $\det(A \cdot B) = \det(A) \det(B)$, 自然有 $\det(\sigma \cdot \mathbf{a}) = -a_z^2 - (a_x^2 + a_y^2) = -|\mathbf{a}|^2$, 下面存在关系

$$\det\left[\exp\left(\pm \frac{i\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right)\right] = 1 \quad (\text{F.6})$$

这个关系可以从两个角度来解释, 我们可以认为通过一个旋转变换后矩阵的行列式不变, 也可以尝试证明它:

$$\det\left[\exp\left(\pm \frac{i\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right)\right] = \exp\left(\text{Tr}\left(\pm \frac{i\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right)\right) = \exp\left(\pm \frac{i\phi}{2} \text{Tr}(\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}})\right) = 1 \quad (\text{F.7})$$

自然证明题干. 第二种方法是对 $\exp\left(\pm \frac{i\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right)$ 进行泰勒展开, 并注意到 $(\sigma \cdot \mathbf{a})^n$ 当 n 为偶数时为 1, 奇数时仍为 $\sigma \cdot \mathbf{a}$, 我们有

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-i\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right) &= \left[1 - \frac{(\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}})^2}{2!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^2 + \frac{(\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}})^4}{4!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^4 - \dots\right] \\ &\quad - i \left[(\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}) \frac{\phi}{2} - \frac{(\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}})^3}{3!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^3 + \dots\right] \\ &= \left[1 - \frac{1}{2!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^2 + \frac{1}{4!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^4 - \dots\right] - i \left[(\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}) \frac{\phi}{2} - \frac{(\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}})^3}{3!} \left(\frac{\phi}{2}\right)^3 + \dots\right] \\ &= \mathbf{1} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - i\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}} \sin\left(\frac{\phi}{2}\right). \end{aligned} \quad (\text{F.8})$$

并将其写为矩阵形式

$$\exp\left(\frac{-i\sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) - in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & (-in_x - n_y) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \\ (-in_x + n_y) \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2}\right) + in_z \sin\left(\frac{\phi}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (\text{F.9})$$

并注意到题干给出 $\hat{\mathbf{n}}$ 沿 z 正方向, 自然 $n_x, n_y = 0, n_z = 1$ 再次发现其行列式恰好为 1, 并可以继续求得 a'_k , 后续为基本的矩阵乘法, 不单独列出, 仅给出答案:

$$a'_1 = a_1 \cos \phi + a_2 \sin \phi, a'_2 = a_2 \cos \phi - a_1 \sin \phi, a'_3 = a_3 \quad (\text{F.10})$$

现在不难看出, 在 z -方向上, 显然我们刚刚执行了一个绕 z 轴的旋转 (将矢量 \mathbf{a} 绕 z 轴旋转 ϕ 的角度).

6. 利用左矢-右矢代数规则证明或计算下列各式

(a). $\text{tr}(XY) = \text{tr}(YX)$, 其中 X 和 Y 都是算符.

证明 我们将其写成左右矢形式, 并插入一个单位算符: $\text{Tr}(XY) \equiv \sum_a \langle a|XY|a \rangle = \sum_a \sum_b \langle a|X|b \rangle \langle b|Y|a \rangle$, 指标交换转置后即证 $\text{Tr}(XY) = \sum_b \sum_a \langle b|Y|a \rangle \langle a|X|b \rangle = \sum_b \langle b|YX|b \rangle = \text{Tr}(YX)$

(b). $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$, 其中 X 和 Y 都是算符.

证明 注意到对偶关系即证.

(c). 在左矢-右矢形式下 $\exp[if(A)] = ?$ 其中 A 是厄米算符, 其本征值是已知的.

证明 $\exp[if(A)] = \sum_a \exp[if(a)]|a\rangle\langle a| = \sum_a \exp[if(a)]|a\rangle\langle a|$

(d). $\sum_a \psi'_a(\mathbf{x}') \psi_a(\mathbf{x}'')$, 其中 $\psi_a(\mathbf{x}') = \langle \mathbf{x}'|a' \rangle$.

证明 $\sum_a \psi_a^*(\mathbf{x}') \psi_a(\mathbf{x}'') = \sum_a \langle \mathbf{x}'|a \rangle^* \langle \mathbf{x}''|a \rangle = \sum_a \langle \mathbf{x}''|a \rangle \langle a|\mathbf{x}' \rangle = \langle \mathbf{x}''|\mathbf{x}' \rangle = \delta(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')$

7. (a). 考虑两个右矢 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$. 假定 $\langle \alpha'|\alpha \rangle, \langle \alpha''|\alpha \rangle, \dots$ 和 $\langle \alpha'|\beta \rangle, \langle \alpha''|\beta \rangle, \dots$ 均为已知, 其中 $|\alpha'\rangle, |\alpha''\rangle, \dots$ 组成基右矢的完备集. 求在该基下算符 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ 的矩阵表示.

证明 第一问较为简单, 我们只需要写出矩阵元 $X = |\alpha\rangle\langle\beta|, X_{ij} = \langle a_i|\alpha\rangle\langle\beta|a_j\rangle = \langle a_i|\alpha\rangle\langle a_j|\beta\rangle^*$ 即可.

- (b). 现在考虑一个自旋 $\frac{1}{2}$ 系统, 设 $|\alpha\rangle$ 和 $|\beta\rangle$ 分别为 $|s_z = \hbar/2\rangle$ 和 $|s_x = \hbar/2\rangle$ 态. 写出在通常 (s_z 对角) 的基下, 与 $|\alpha\rangle\langle\beta|$ 对应的方阵的显示式.

证明 我们仅需把之前的结论带入即可

$$|S_z = \hbar/2\rangle\langle S_x = \hbar/2| \doteq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{F.11})$$

8. 假定 $|i\rangle$ 和 $|j\rangle$ 都是某厄米算符 A 的本征右矢. 在什么条件下 $|i\rangle + |j\rangle$ 也是 A 的一个本征右矢. 证明答案的正确性.

证明 仅当本征值相同时正确.

9. 利用 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 的正交性证明

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar S_k, \quad \{S_i, S_j\} = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right)\delta_{ij},$$

其中

$$S_x = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle-| + |- \rangle\langle+|), \quad S_y = \frac{i\hbar}{2}(-|+\rangle\langle-| + |- \rangle\langle+|), \quad S_z = \frac{\hbar}{2}(|+\rangle\langle+| - |- \rangle\langle-|).$$

证明 本题仅需要理解各个符号的含义并带入即可, 一个可以有一定作用的方法是令 $\langle+|-\rangle = \langle-|+\rangle = 0, \langle+|+\rangle = \langle-|-\rangle = 1$, 这样可以减少其中的运算量.

10. 一个双态系统其哈密顿算符由下式给出

$$H = a(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|),$$

其中 a 是一个数, 其量纲为能量. 求能量的本征值和相应的能量本征右矢 (作为 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 的线性组合).

证明 我们先将其写成矩阵表示的形式

$$H \doteq \begin{bmatrix} a & a \\ a & -a \end{bmatrix} \quad (\text{F.12})$$

本征值 E 满足 $(a - E)(-a - E) - a^2 = -2a^2 + E^2 = 0$ 即 $E = \pm a\sqrt{2}$. 令 x_1 和 x_2 为本征右矢的两个元素. 对于 $E = +a\sqrt{2} \equiv E^{(1)}, (1 - \sqrt{2})x_1^{(1)} + x_2^{(1)} = 0$, 而对于 $E = -a\sqrt{2} \equiv E^{(2)}, (1 + \sqrt{2})x_1^{(2)} + x_2^{(2)} = 0$. 于是本征态可以被表示为

$$|E^{(1)}\rangle \doteq N^{(1)} \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{2} - 1 \end{bmatrix} \quad \text{及} \quad |E^{(2)}\rangle \doteq N^{(2)} \begin{bmatrix} -1 \\ \sqrt{2} + 1 \end{bmatrix} \quad (\text{F.13})$$

其中 $N^{(1)^2} = 1/(4 - 2\sqrt{2})$ 和 $N^{(2)^2} = 1/(4 + 2\sqrt{2})$.

11. 已知一个自旋 $\frac{1}{2}$ 的系统处于 $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 的一个本征态, 其本征值为 $\hbar/2$, 其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 为 xz 平面上的一个单位矢量, 与正 z 轴夹 γ 角.

- (a). 假定已测得 S_x . 得到 $+\hbar/2$ 的概率是什么?

证明 这里我们直接给出本征值为 $\hbar/2$ 的 $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 态的构造, 可以自行尝试构造.

$$\cos\left(\frac{\beta}{2}\right)|+\rangle + \sin\left(\frac{\beta}{2}\right)e^{i\alpha}|- \rangle \quad (\text{F.14})$$

其中 α 和 β 分别对应球坐标系下的 (r, θ, φ) 中的后两项, 在本题中 $\alpha = 0, \beta = \gamma$, 于是有

$$\left| \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\langle+| + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle-| \right] \left[\cos\frac{\gamma}{2}|+\rangle + \sin\frac{\gamma}{2}|- \rangle \right] \right|^2 = \frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{1+\cos\gamma}{2}} + \sqrt{\frac{1-\cos\gamma}{2}} \right]^2 = \frac{1+\sin\gamma}{2} \quad (\text{F.15})$$

- (b). 计算 S_x 的弥散度, 即

$$\langle (S_x - \langle S_x \rangle)^2 \rangle.$$

(为了让你自己放心起见, 验证在 $\gamma = 0, \pi/2$ 和 π 等特殊情况下的答案.)

证明 由第 9 题我们容易得出 $S_x^2 = \frac{\hbar^2}{4}$ 并且 S_x 的期望

$$\left| \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\langle+| + \frac{1}{\sqrt{2}}\langle-| \right] \left[\cos\frac{\gamma}{2}|+\rangle + \sin\frac{\gamma}{2}|- \rangle \right] \right|^2 = \frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{1+\cos\gamma}{2}} + \sqrt{\frac{1-\cos\gamma}{2}} \right]^2 = \frac{1+\sin\gamma}{2} \quad (\text{F.16})$$

于是原式为

$$\langle (S_x - \langle S_x \rangle)^2 \rangle = \hbar^2(1 - \sin^2 \gamma)/4 = \hbar^2 \cos^2 \gamma/4 = \hbar^2/4, 0, \hbar^2/4 \text{ 分别对于 } \gamma = 0, \pi/2, \pi. \quad (\text{F.17})$$

12. 设 A 和 B 是两个可观测量. 假定 A 和 B 的共同本征右矢 $\{|a', b'\rangle\}$ 构成一组正交完备的基右矢集合. 我们是否总可以得出结论

$$[A, B] = 0?$$

如果你的答案是可以, 证明这一论断. 如果你的答案是不可以, 举出一个反例.

证明 可以, 我们利用单位算符即可得出

$$AB = AB\mathbf{1} = AB \sum_{a', b'} |a', b'\rangle \langle a', b'| = A \sum_{a', b'} b' |a', b'\rangle \langle a', b'| = \sum_{a', b'} b' a' |a', b'\rangle \langle a', b'| = BA \quad (\text{F.18})$$

我们发现完备性具有强大的作用. 需要着重指出的是, 为了涵盖完整的集合组, 求和必须同时涵盖 a 和 b .

13. 两个厄米算符反对易

$$\{A, B\} = AB + BA = 0.$$

能够存在一个 A 和 B 的同时 (即, 共同) 的本征右矢吗? 证明或举例说明你的论断.

证明 由反对易关系, $AB = -BA$, 如果存在共同本征右矢, 需要满足 $AB|a, b\rangle = ab|a, b\rangle = BA|a, b\rangle$, 则必须有 $ab = -ba$, 我们同时注意到 a, b 为实数, 则除非 a, b 至少有一个为 0.

14. 已知两个可观测量 A_1 和 A_2 均不显含时间, 且相互不对易

$$[A_1, A_2] \neq 0,$$

我们还知道 A_1 和 A_2 均与哈密顿量对易:

$$[A_1, H] = 0. \quad [A_2, H] = 0.$$

证明, 在一般情况下, 能量本征态是简并的. 存在例外吗?

证明 略

15. 找出使不确定度乘积

$$\langle (\Delta S_x)^2 \rangle \langle (\Delta S_y)^2 \rangle$$

取最大值的右矢 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 的线性组合. 直接证明, 你所找到的这个线性组合不破坏 S_x 和 S_y 的不确定度关系.

证明 略

16. 对于一个禁闭于两个刚性壁之间的一维粒子,

$$V = \begin{cases} 0 & \text{对于 } 0 < x < a, \\ \infty & \text{其他} \end{cases}$$

求出 $x - p$ 不确定度乘积 $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle$ 的值. 对基态和激发态都进行求解.

证明 略

17. 考虑一个三维右矢空间. 如果某一组正交的右矢集合, 比如 $|1\rangle, |2\rangle$ 和 $|3\rangle$, 用作基右矢, 算符 A 和 B 由

$$A \doteq \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & -a & 0 \\ 0 & 0 & -a \end{pmatrix}, \quad B \doteq \begin{pmatrix} b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -ib \\ 0 & ib & 0 \end{pmatrix}$$

表示, 其中 a 和 b 都是实数.

- (a). 显然, A 展示了一个简并的谱. B 也展示了简并的谱吗?

证明 略

- (b). 证明 A 和 B 对易.

证明 略

- (c). 找到一组新的正交归一右矢集合, 它们是 A 和 B 的共同本征右矢. 具体确定在这三个本征右矢的每一

个本征右矢上 A 和 B 的本征值. 你确定的本征值能完全地表征每个本征右矢吗?

证明 略

18. 构造一个变换矩阵, 它把 S_z 对角的基和 S_x 对角的基联系起来. 证明你的结果与下列的普遍关系式自治:

$$U = \sum_r |b^{(r)}\rangle \langle a^{(r)}|.$$

证明 略

19. 一个有限的 (空间) 位移的平移算符由

$$\mathcal{T}(\mathbf{l}) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{l}}{\hbar}\right),$$

给出, 其中 \mathbf{p} 是动量算符.

- (a). 求

$$[x_i, f(1)].$$

证明 略

- (b). 利用上一问, 展示期望 $\langle \mathbf{x} \rangle$ 在平移下如何改变.

证明 略

20. (a). 证明下列各式:

I. $\langle p' | x | \alpha \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p' | \alpha \rangle$

证明 略

II. $\langle \beta | x | \alpha \rangle = \int dp' \phi_\beta(p') i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')$. 其中 $\phi_\alpha(p') = \langle p' | \alpha \rangle$ 和 $\phi_\beta(p') = \langle p' | \beta \rangle$ 都是动量空间波函数.

证明 略

- (b).

$$\exp\left(\frac{ix\Xi}{\hbar}\right)$$

的物理意义是什么, 其中 x 是位置算符, 而 Ξ 是某个量纲为动量的数? 证明你的答案的正确性.

证明 略

F.2 第二章

附录 G 致谢/参考

G.1 致谢

感谢 elegantbook 所提供的模板,<https://elegantlatex.org/>.

G.2 参考

本文主要参考的书籍和期刊如下:

1. Modern Quantum Mechanics 2nd.J.J.Sakurai
2. Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics 2nd.Alexei M.Tsvellk
3. Entanglement in Many-Body Systems(RMP)
4. 物理学家用李群李代数
5. 《李群与李代数》讲义-李世雄
6. Nicolas Dupuis - Field Theory of Condensed Matter and Ultracold Gases
7. Conformal Field Theory A.N. Schellekens

参考了十余本,之后慢慢整理,并会改为 bib 引用的.

免责声明:本讲义仅限个人学习使用,第一章和第二章大篇幅借鉴了 Sakurai 的 MQM,第三章是多本李群李代数教材的综合,对部分内容进行了改写和删改,习题答案系个人补充,仅供参考.部分图片为个人重绘,部分图片来源 wiki.同时,本讲义的全部内容和代码已公开至 github 主页,允许二次传播,但请注意讲义仅为多本书和综述的整理和综合,且仍处于更新状态,不排除未来将前几章重置的可能性.