平移算符 $\hat{T}(d\vec{r})$ $\quad \hat{T}(d\vec{r})|\vec{r}\rangle = |\vec{r}+d\vec{r}\rangle$

$$\langle\vec{r}|\hat{T}(d\vec{r})|\psi\rangle = \int d\vec{r}'\ \langle\vec{r}|\hat{T}(d\vec{r})|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\psi\rangle = \int d\vec{r}'\ \langle\vec{r}|\vec{r}'+d\vec{r}\rangle\psi(\vec{r}') = \psi(\vec{r}-d\vec{r})$$

(坐标表象)

幺正性 $\hat{T}^\dagger\hat{T}=1$. $\quad \hat{T}(d\vec{r})$ 构成阿贝尔群 $\quad \hat{T}(d\vec{r}) = 1-\frac{i}{\hbar}\vec{G}\cdot d\vec{r}$ $\quad \vec{G}$：生成元，厄米. $\quad \vec{G} \longleftrightarrow \frac{\hbar}{i}\nabla$ 即 $\vec{p}$.

$$[\hat{\vec{r}},\hat{T}(d\vec{r})]|\vec{r}'\rangle = \hat{\vec{r}}|\vec{r}'+d\vec{r}\rangle - \vec{r}'\hat{T}(d\vec{r})|\vec{r}'\rangle = d\vec{r}\,|\vec{r}'+d\vec{r}\rangle \approx d\vec{r}\,|\vec{r}'\rangle$$

即 $[\hat{\vec{r}},\hat{T}(d\vec{r})] = d\vec{r}$. $\quad [r_\alpha, G_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$ $\quad \hat{G}$ 即动量算符.

$$\hat{T}(\vec{r}') = \exp\left(-\frac{i\vec{p}\cdot\vec{r}'}{\hbar}\right).$$

动量本征函数 $\phi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(\frac{i\vec{p}\cdot\vec{r}}{\hbar}\right) = \int d^3\vec{p}'\ \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(\frac{i\vec{p}'\cdot\vec{r}}{\hbar}\right)\delta(\vec{p}-\vec{p}').$

引入演化算符 $|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$

性质：(1) $\lim_{t\to t_0} U(t,t_0) = 1$.

(2) 幺正性 $\hat{U}(t,t_0)\hat{U}^\dagger(t,t_0) = 1$.

(3) 乘法规则 $U(t_1,t_3) = U(t_1,t_2)U(t_2,t_3)$ $\quad t_1>t_2>t_3$

(看起来像是李群的表示，如果数学地引入 $U(t,t_0)^{-1} \triangleq U(t_0,t)$)

生成元 $\hat{U}(t+dt,t) \simeq 1-i\frac{\hat{H}}{\hbar}dt$.

$$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

其中 $\{|\psi_n\rangle\}$ 是 H 的本征矢(本征值 E_n)构成的正交归一完备基

可观测量期待值 $\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{A}\hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$

若 $[\hat{A},\hat{U}]=0$ 即 $[\hat{A},\hat{H}]=0$，$\langle\hat{A}\rangle$ 不随时间变化.

态矢量随时间变化 $|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t_0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|\psi_n\rangle$

时间关联函数 $C(t) \triangleq \langle\psi(t_0)|\psi(t)\rangle = \sum_n |C_n(t_0)|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}$

设 $c_n(t_0)=g(E_n)$ 引入态密度 $\rho(E)=\sum_n\delta(E-E_n)$

$$\Rightarrow c(t)=\sum_n|g(E_n)|^2e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}=\int dE\,\rho(E)|g(E)|^2e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}$$

$\begin{cases} S\text{绘景} & A^{(s)}\text{不含时} \quad |\psi^{(s)}(t)\rangle\text{随时间演化} \\ H\text{绘景} & |\psi^{(H)}\rangle\text{不变} \quad A^{(H)}\text{随时间变化} \end{cases}$

约定 $t=0$ 时 $|\psi^{(s)}(0)\rangle=|\psi^{(H)}\rangle$ $A^{(H)}(0)=A^{(s)}$ 联系 $A^{(H)}(t)=U^{+}(t,0)A^{(s)}U(t,0)$

$|\psi^{(H)}\rangle=U^{+}(t,0)|\psi^{(s)}(t)\rangle$

H图象中运动方程 $\frac{dA^H}{dt}=\frac{dU^{+}(t,0)}{dt}A^sU(t,0)+U^{+}(t,0)A^s\frac{dU(t,0)}{dt}$

$$=U^{+}\left[-\frac{H}{i\hbar}A^s+A^s\frac{H}{i\hbar}\right]U$$

$$\Rightarrow i\hbar\frac{dA^H}{dt}=[A^H(t),H]$$

埃伦费斯特定理 设 $H=\frac{p^2}{2m}+V(r)$ $i\hbar\frac{dr^H}{dt}=[r^H,H^H]=i\hbar\frac{p^H}{m}$

$$i\hbar\frac{dp^H}{dt}=[p^H,H]=-i\hbar\nabla V$$

$$\Rightarrow m\frac{d^2}{dt^2}\langle r\rangle=\frac{d}{dt}\langle p\rangle=-\langle\nabla V(r)\rangle$$

当 $\langle\nabla V(r)\rangle\approx\nabla V(\langle r\rangle)$ 时 退化到经典情形

一般 A^s 不含时，取本征态为基矢，$|\psi^s(t)\rangle=\sum_n c_n^s(t)|\psi_n^{(s)}\rangle$

在H图象下，$A^H(t)$，基矢$|\psi_n^H(t)\rangle$含时 $|\psi^H\rangle=\sum_n c_n^H(t)|\psi_n^H(t)\rangle$

由 $A^s|\psi_n^s\rangle=\lambda_n|\psi_n^s\rangle$ $A^H(t)|\psi_n^H(t)\rangle=\lambda_n|\psi_n^H(t)\rangle$ $A^H(t)=U(t)^{+}A^sU(t)$

$\Rightarrow |\psi_n^H(t)\rangle=U^{+}(t,0)|\psi_n^s\rangle$ $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_n^H(t)\rangle=-H|\psi^{(H)}(t)\rangle$ (反号薛定谔方程)

一维谐振子 $\hat{H}=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$. 引入湮灭算符 $a\triangleq\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x+\frac{ip}{m\omega}\right)$ 产生算符 $a^{+}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x-\frac{ip}{m\omega}\right)$

$[a,a^{+}]=1$. (玻色子的湮灭/产生算符关系)

粒子数算符 $N\triangleq a^{+}a$. $[H,N]=0$ 设 $N|n\rangle=n|n\rangle$

$[N,a]=-a$ $[N,a^{+}]=a^{+}$ 从而 $Na|n\rangle=(n-1)a|n\rangle$ $a|n\rangle\propto|n-1\rangle$

$\langle n|a^{+}a|n\rangle=n=\langle\hat{a}n|\hat{a}n\rangle\geq0\Rightarrow a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle$ $a^{+}|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle$

n 的最小值为 0，n 一般为非负整数 $a|0\rangle=0$

由 $n=\langle\hat{a}n|\hat{a}n\rangle\geq0$ 不允许有负数 $|n\rangle$ 态 若 n 为正小数，特别取 $n\in(0,1)$

则 $a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle$ 可构造出负数 $|n\rangle$ 态，从而 n 只能为自然数，$n_{min}=0$

任意激发态 $|n\rangle=\frac{a^{+}}{\sqrt{n}}|n-1\rangle=\cdots=\frac{(a^{+})^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$ $E_n=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$

以 $\{|n\rangle\}$ 为基矢建立表象 $\langle n'|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}$ $\langle n'|\hat{a}^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}$

$$\Rightarrow \langle n'|\hat{x}|n\rangle = +\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right)$$

$$\langle n'|\hat{p}|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(-\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right)$$

(坐标表象下)

解本征函数 基态 $|0\rangle$ 满足 $a|0\rangle = 0$ $\langle x'|\hat{a}|0\rangle = 0$

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

$$\Rightarrow \int dx\, \psi_0(x)\left[x\delta(x-x') + \frac{i}{m\omega}\frac{\hbar}{i}\frac{d\delta(x-x')}{dx}\right] = x'\psi_0(x') + \frac{\hbar}{m\omega}\psi_0'(x') = 0$$

$$\Rightarrow \psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_0}\right)^2\right] \qquad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

激发态 $\psi_n(x') = \langle x'|\frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \int dx\, \langle x'|\frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}|x\rangle\langle x|0\rangle$

$$\propto \left(x' - x_0^2\frac{d}{dx'}\right)^n \psi_0(x')$$

利用 $\{|n\rangle\}$ 表象下算符矩阵元, $\langle n|\frac{p^2}{2m}|n\rangle = \langle n|\frac{m\omega}{2}x^2|n\rangle = \frac{1}{2}E_n$.

在基态, 动能期待值非 0 (零点振动).

相干态 (激光, 玻色-爱因斯坦凝聚) 是 $\hat{a}$ 的本征态 $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$

由于 $\hat{a}$ 不是厄密算符, α 不一定为实数 $\alpha \in \mathbb{C}$

在 $\{|n\rangle\}$ 表象下, 设 $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n|n\rangle$ $\alpha|\alpha\rangle = \hat{a}|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} C_n\sqrt{n}|n-1\rangle$.

$$\Rightarrow C_n\sqrt{n} = \alpha C_{n-1} \Rightarrow C_n = C_0\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \Rightarrow |\alpha\rangle = C_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_0\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = C_0\exp[\alpha\hat{a}^+]|0\rangle$$

由 $1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = \langle 0|\exp[\alpha^*\hat{a}]C_0^*|\alpha\rangle = C_0^* e^{|\alpha|^2}\langle 0|\alpha\rangle = |C_0|^2 e^{|\alpha|^2} \Rightarrow |C_0| = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}$

$$|\alpha\rangle = \exp\left[-\frac{|\alpha|^2}{2} + \alpha\hat{a}^+\right]|0\rangle$$

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle 0|\exp\left[-\frac{|\beta|^2}{2} + \beta^*\hat{a}\right]|\alpha\rangle = \exp\left[-\frac{|\beta|^2}{2} + \beta^*\alpha - \frac{|\alpha|^2}{2}\right]$$

相干态不具有正交性 但相干态具有完备性

令 $\alpha = |\alpha|e^{i\theta_\alpha}$ $\int d\alpha\, d\alpha^*\, (\alpha^*)^{n'}|\alpha\rangle = \int d\alpha\, d\alpha^*\, |\alpha|^{2n'}\frac{C_0(\alpha)}{\sqrt{n'!}}|n'\rangle$ $(n' = 0, 1, 2, \cdots)$

$$= \pi\, 2^{n'+1}\sqrt{n'!}\,|n'\rangle.$$

即任一个 $|n'\rangle$ 可用 $|\alpha\rangle$ 展开（完备性）

另一种表述： $\int d\alpha\, d\alpha^* \, |\alpha\rangle\langle\alpha| = \pi$

相干态 $|\alpha\rangle$ 少一个粒子增加 θ_α 相位，多一个粒子减小 θ_α 相位，在相干态、相位是确定的 ? 粒子数不确定

广义不确定性：相位与粒子数存在不确定性.

S方程经典极限与WKB方法

$\rho(\vec r,t) = |\psi(\vec r,t)|^2$　　连续性方程： $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\vec j = 0$　　$\vec j = \frac{-i\hbar}{2m}[\psi^*\nabla\psi - (\nabla\psi^*)\psi] = \frac{\rho}{m}\nabla S$

令 $\psi(\vec r,t) = \sqrt{\rho(\vec r,t)}\exp\left[\frac{iS(\vec r,t)}{\hbar}\right]$　　$\rho, S \in R$

S方程　$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi$.

$$\Rightarrow i\hbar\left[\frac{\partial\sqrt\rho}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\sqrt\rho\frac{\partial S}{\partial t}\right] = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\nabla^2\sqrt\rho + \frac{2i}{\hbar}\nabla\sqrt\rho\cdot\nabla S - \frac{1}{\hbar^2}\sqrt\rho|\nabla S|^2 + \frac{i}{\hbar}\sqrt\rho\nabla^2 S\right] + \sqrt\rho V$$

$|\nabla S|^2 \gg \hbar\nabla^2 S$

经典极限 $\hbar\to 0$　$\Rightarrow$　$-\sqrt\rho\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}\sqrt\rho|\nabla S|^2 + \sqrt\rho V$　即 $\frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$

与经典力学中的哈密顿-雅可比方程相似（哈雅方程： $H(q_k, \frac{\partial S}{\partial q_k}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$　$S = S(q,P,t)$，P_k 以及 $\alpha_k = \frac{\partial S}{\partial P_k}$ 均为常数）

WKB方法：利用S方程的经典极限得到近似解，适用于物质波波长远小于势阱的特征长度.

在一维，利用经典极限，设本征能量为 E，$S(x,t) = W(x) - Et$　　$\Rightarrow \left(\frac{dW}{dx}\right)^2 = 2m(E-V)$.

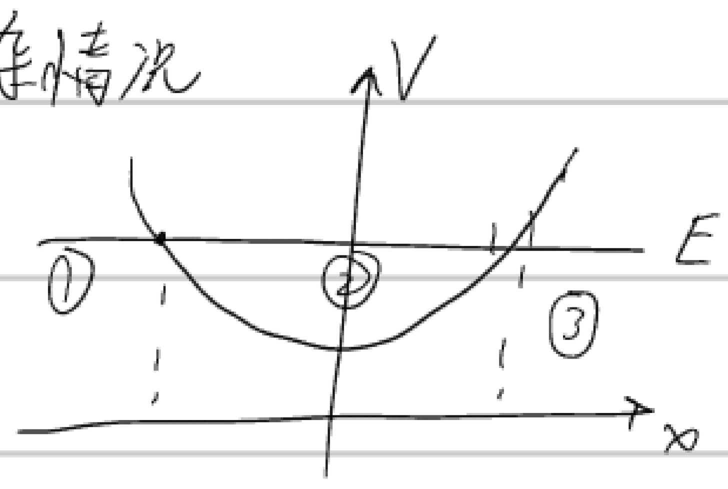
$E>V \Rightarrow W(x) = \pm\int^x dx'\sqrt{2m(E-V)}$　　对于定态解，$\frac{\partial\rho}{\partial t}=0$　$\frac{\partial j}{\partial x}=0$　　$\rho\propto(\nabla S)^{-1} = (\sqrt{2m(E-V)})^{-1}$

$$\psi(x,t)\propto\frac{1}{(E-V)^{1/4}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int^x dx'\sqrt{2m(E-V)}}e^{-iEt/\hbar}$$

经典条件 $|\nabla S|^2 \gg \hbar\nabla^2 S \iff \lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}} \ll \frac{2(E-V)}{|dV/dx|}$ 势阱特征长度

$E<V$ 时 $\psi(x,t)\propto\frac{1}{(V-E)^{1/4}}e^{\pm\frac{1}{\hbar}\int^x dx'\sqrt{2m(V-E)}}e^{-iEt/\hbar}$

对于复杂情况



分段处理　但边界 $E=V(x_0)$ 处需特殊处理.

对S方程线性化： $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \frac{dV}{dx}\Big|_{x_0}(x-x_0)\psi = 0$　得到临界区域解

再利用连续条件得到完整解.

路径积分

一、传播子 $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$ 坐标表象下 $\langle\vec{r}|\psi(t)\rangle = \int d^3r' \underbrace{\langle\vec{r}|\hat{U}(t,t_0)|\vec{r}'\rangle}_{\text{传播子}}\langle\vec{r}'|\psi(t_0)\rangle$

$K(\vec{r},t;\vec{r}',t_0) \triangleq \langle\vec{r}|\hat{U}(t,t_0)|\vec{r}'\rangle$ $\qquad \psi(\vec{r},t) = \int d^3r' K(\vec{r},t,\vec{r}',t_0)\psi(\vec{r}',t_0)$

即演化算符在$\{|\vec{r}\rangle\}$表象下的矩阵元

性质：(1) $\lim_{t\to t_0} K(\vec{r},t;\vec{r}',t_0) = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$

(2) 约定 $t<t_0$，$K(\vec{r},t;\vec{r}',t_0)=0$ (因果)

$\Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right]K(\vec{r},t;\vec{r}',t_0) = -i\hbar\,\delta(t-t_0)\delta(\vec{r}-\vec{r}')$ ($\delta(t-t_0)$来源于上述因果约定)

传播子是含时的格林函数

(3) 当$\hat{H}$不显含时间时，$\hat{U}(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}$，$K(\vec{r},t;\vec{r}';t_0) = \sum_{n,m}\langle\vec{r}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}|\psi_m\rangle\langle\psi_m|\vec{r}'\rangle$

$\Rightarrow K(\vec{r},t;\vec{r}';t_0) = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)E_n}\psi_n(\vec{r})\psi_n^*(\vec{r}')$

举例：一维自由粒子 $K(x,t;x',t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty}dp\; e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\frac{p^2}{2m}}\; e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')}\frac{1}{2\pi\hbar}$

$\Rightarrow K(x,t;x',t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t-t_0)}}\exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\hbar(t-t_0)}\right]$

二、路径积分

取H绘景中$\vec{r}^H(t)$的本征态 $|\vec{r},t\rangle$ $\quad |\vec{r},t\rangle$满足反号薛定谔方程 $|\vec{r},t\rangle = U^+(t,0)|\vec{r}\rangle \quad t>0$

$K(\vec{r},t;\vec{r}',t') = \langle\vec{r}|\hat{U}(t,t')|\vec{r}'\rangle = \langle\vec{r}|\hat{U}(t,0)\hat{U}^+(t',0)|\vec{r}'\rangle = \langle\vec{r},t|\vec{r}',t'\rangle$

$= \int d^3r_1\langle\vec{r},t|\vec{r}_1,t_1\rangle\langle\vec{r}_1,t_1|\vec{r}',t'\rangle = \int d^3r_1 K(\vec{r},t;\vec{r}_1,t_1)K(\vec{r}_1,t_1,\vec{r}',t') \quad t>t_1>t'$

可在$t'\sim t$间插入N个中间点 $t_1,\cdots,t_N$ 取 $N\to+\infty$ $t_i-t_{i-1}\to 0$ 考虑所有$(\vec{r}',t')$到$(\vec{r},t)$的路径，计算每个路径上传播子乘积，再相加

可以证明当$\Delta t\to 0$时，不连续路径贡献为0 $\qquad \Delta t\to 0$时，$K(\vec{r},t+\Delta t;\vec{r}',t)\to\delta(\vec{r}-\vec{r}')\Rightarrow$只需考虑连续路径

$K(\vec{r}+\Delta\vec{r},t+\Delta t;\vec{r},t] = \langle\vec{r}+\Delta\vec{r}|e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t(\frac{p^2}{2m}+V)}|\vec{r}\rangle$ $\quad \frac{p^2}{2m}$与V不对易，但$\Delta t\to 0$时不对易影响$\sim(\Delta t)^2$可略

上式 $= \langle\vec{r}+\Delta\vec{r}|e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t\frac{p^2}{2m}}e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t V}|\vec{r}\rangle = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{3/2}\exp\left\{\left[\frac{im}{2\hbar}\left|\frac{\Delta\vec{r}}{\Delta t}\right|^2 - \frac{i}{\hbar}V(\vec{r})\right]\Delta t\right\}$

$= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{3/2}\exp\left[\frac{iL\Delta t}{\hbar}\right] \qquad L = T-V = \frac{m}{2}\left|\frac{\Delta\vec{r}}{\Delta t}\right|^2 - V(\vec{r})$

$\Rightarrow$一般的$\Delta\vec{r},\Delta t$有 $K(\vec{r}+\Delta\vec{r},t+\Delta t;\vec{r},t] \propto \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_t^{t+\Delta t}dt' L(\vec{r},\dot{\vec{r}})\right]$

$\Rightarrow K(\vec{r},t;\vec{r}',t') \sim \int_{\vec{r}'}^{\vec{r}} D[\vec{r}''(t)]\exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}dt'' L(\vec{r}'',\dot{\vec{r}}'')\right]$

讨论：① $\hbar\to 0$ 相位项剧烈变化，只有特殊路径 $\delta S=0$ 胜出，即只需考虑经典轨道

② 可由路径积分方法得到 S方程与H运动方程

A-B效应　电磁场中带电粒子 $H=\frac{1}{2m}(\hat{p}-\frac{e\hat{A}}{c})^2+e\phi$　$\hat{p}=-i\hbar\nabla$

$\Rightarrow \frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\cdot\vec{j}=0$　$\rho=|\psi(\vec{r},t)|^2$　$\vec{j}=\frac{-i\hbar}{2m}[\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi^*)\psi]-\frac{e}{mc}\hat{A}\rho$

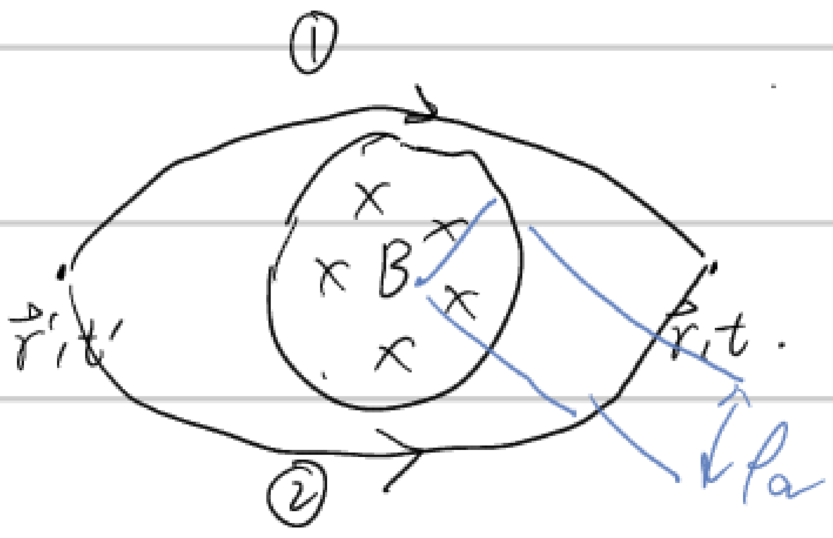
$\psi=\sqrt{\rho}\,e^{\frac{iS}{\hbar}}$　$\Rightarrow \vec{j}=\frac{\rho}{m}(\nabla S-\frac{e\hat{A}}{c})$

规范变换　$\tilde{\phi}=\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\Lambda}{\partial t}$，$\tilde{A}=A+\nabla\Lambda$　下 $\vec{E}=-\nabla\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}$ 与 $\vec{B}=\nabla\times\vec{A}$ 不变.

规范变换后　$\tilde{H}=\frac{1}{2m}(\hat{p}-\frac{e}{c}\tilde{A})^2+e\tilde{\phi}$　$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\psi}=\tilde{H}\tilde{\psi}$　$\tilde{\psi}=g\psi$　$g=e^{\frac{ie}{\hbar c}\Lambda}$

$g^\dagger=g^*=g^{-1}$　$\tilde{H}=gHg^\dagger$　$\tilde{S}=S+\frac{e}{c}\Lambda$

A-B效应：若恒定磁场只存在于某一圆柱体内，粒子在圆柱体外运动. $(\vec{r}',t')\to(\vec{r},t)$



利用路径积分方法讨论

$$\Delta(S_1-S_2)=\int_{t'}^{t}dt''(L_1-L_2)\qquad L=\frac{m}{2}v^2+\frac{e}{c}\vec{v}\cdot\hat{A}$$

$$=\left[\int_{\vec{r}'}^{\vec{r}}d\vec{r}_1\cdot\frac{e}{c}\hat{A}(\vec{r}_1)-\int_{\vec{r}'}^{\vec{r}}d\vec{r}_2\cdot\frac{e}{c}\hat{A}(\vec{r}_2)\right]$$

$$=\oint d\vec{r}\cdot\frac{e}{c}\hat{A}=\frac{e}{c}\phi\qquad \phi=\pi B\rho_a^2$$

只有当 ϕ 取单位磁通 ϕ_0 的整数倍 $\phi_0=\frac{hc}{e}$ 时磁场才不会影响粒子的运动.

A-B效应是拓扑效应（与参数整体几何结构有关，与具体大小形状无关）磁场可放置至任一形状分布，只要电子绕磁场区域运动，并且 ϕ_B 满足量子化条件，矢量势的影响可忽略.

第三章 角动量理论

§3.1. 转动与角动量

经典转动 欧氏空间 $\vec{v}$ 绕 $\hat{n}$ 轴转 ϕ 角，$\vec{v}' = R(\hat{n},\phi)\vec{v}$ $\vec{v} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix}$ $R(\hat{n},\phi)$ 为 3X3 矩阵

当 $\phi = \epsilon \ll 1$ 时，$\vec{r}' = R(\hat{n},\epsilon)\vec{r} = \vec{r} + \Delta\vec{r}$ $\Delta\vec{r} = \epsilon\hat{n}\cdot\vec{K}\vec{r}$ $\vec{K}$ 为3个 3x3矩阵，为 R的生成元.

$R(\hat{n},\phi) = \mathbb{1} + \epsilon\hat{n}\cdot\vec{K}$

设 $\vec{r} = \vec{r}_{\parallel} + \vec{r}_{\perp}$ 转动后 $\vec{r}_{\parallel}' = \vec{r}_{\parallel}$，$\Delta\vec{r} = \vec{r}_{\perp}' - \vec{r}_{\perp}$ $|\vec{r}_{\perp}'| = |\vec{r}_{\perp}|$ 转角 ϵ 很小时 $\Delta\vec{r} \perp \vec{r}_{\perp}$ $\Delta\vec{r} = \epsilon\hat{n}\times\vec{r}_{\perp} = \epsilon\hat{n}\times\vec{r} = \epsilon\,\epsilon_{ijk}\,n_i r_j \hat{e}_k$

又 $\Delta\vec{r} = \epsilon(\hat{n}\cdot\vec{K})_{kj} r_j \vec{e}_k$ 其中 $(\hat{n}\cdot\vec{K})_{kj} = (n_i K_i)_{kj} = n_i (K_i)_{kj} = n_i\epsilon_{ijk} \Rightarrow (K_i)_{kj} = \epsilon_{ijk}$

即 $K_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ $K_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ $K_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

一般转动 $R(\hat{n},\phi) = \lim\limits_{N\to\infty} R^N(\hat{n},\frac{\phi}{N}) = \lim\limits_{N\to\infty}(\mathbb{1} + \frac{\phi}{N}\hat{n}\cdot\vec{K})^N = \exp[\hat{n}\cdot\vec{K}\phi]$

讨论：① 当 $\phi = \epsilon \ll 1$ 时，准确 ϵ 一阶，不同方向转动可交换顺序，且满足线性叠加原理

② $[K_\alpha, K_\beta] = \epsilon_{\alpha\beta\gamma}K_\gamma$ 证明 $[K_\alpha, K_\beta]_{ij} = \epsilon_{\alpha li}\epsilon_{\beta jl} - \epsilon_{\alpha jl}\epsilon_{\beta li} = \delta_{\alpha j}\delta_{i\beta} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{ij} - \delta_{j\beta}\delta_{\alpha i} + \delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}$

$= \epsilon_{\gamma\alpha\beta}\epsilon_{\gamma ji} = \epsilon_{\alpha\beta\gamma}(K_\gamma)_{ij}$.

$\Rightarrow [R(\hat{\alpha},\epsilon), R(\hat{\beta},\epsilon)] = \epsilon_{\alpha\beta\gamma}[R(\hat{\gamma},\epsilon^2) - I] + O(\epsilon^3)$

有限大不同方向的转动操作不对易.

量子力学中的转动操作 指对粒子的位置坐标进行旋转，若粒子存在内禀自由度，也随之旋转.

(Cohen I 第六章 BVI) $|\psi\rangle_R = \hat{D}(R)|\psi\rangle$

$\hat{D}(R,\epsilon) = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{n}\cdot\vec{J}\epsilon$ $\hat{n}\cdot\vec{J} = n_x\hat{J}_x + n_y\hat{J}_y + n_z\hat{J}_z$ $\vec{J}$ 为角动量算符，为厄密的.

$[J_\alpha, J_\beta] = i\hbar\epsilon_{\alpha\beta\gamma}J_\gamma$

设 $J_+ = J_x + iJ_y$，$J_- = J_x - iJ_y$ $\Rightarrow [J_z, J_\pm] = \hbar J_\pm$. $[J_+, J_-] = 2J_z$

$\hat{D}(R,\phi) = \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{n}\cdot\vec{J}\phi)$ 若 $|\psi\rangle$ 基矢数为 N，$\hat{D}(R)$ 形成 SU(N) 群

自旋的 1/2 系统. $S_z|+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+\rangle$ $S_z|-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|-\rangle$. $S_z = \frac{\hbar}{2}|+\rangle\langle+| - \frac{\hbar}{2}|-\rangle\langle-|$. $S_+ = \hbar|+\rangle\langle-|$

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

考虑自旋转动对物理量影响 ${}_R\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle_R = \langle\psi|D^\dagger(R)AD(R)|\psi\rangle$

举例：$\hat{D}_z^\dagger(\phi)\hat{S}_x\hat{D}_z(\phi) = e^{\frac{i}{\hbar}S_z\phi}S_x e^{-\frac{i}{\hbar}S_z\phi} = \cos\phi\,\hat{S}_x - i\sin\phi\,\hat{S}_y$

二旋量态、 $|\psi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$ $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ $S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_1$ $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

$S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_2$ $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_3$ $\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$ $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$ $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$

$\det(\sigma_i) = -1$ $Tr(\sigma_i) = 0$ $(\vec{\sigma}\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}\cdot\vec{b}) = \vec{a}\cdot\vec{b} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})$

$\hat{D}(R) = \exp[-\frac{i}{\hbar}\vec{J}\cdot\hat{n}\phi]$ 在自旋 1/2 系统 表示为 $\exp[-\frac{i}{2}\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\phi]$

利用 $(\vec{\sigma}\cdot\hat{n})^{2m} = 1$ ， $\hat{D}(R) = \cos\frac{\phi}{2} - i\vec{\sigma}\cdot\hat{n}\sin\frac{\phi}{2}$ 形成 SU(2)群，与 SO(3) 同态但不同构

$\hat{D}_z(2\pi) = -1$ SU(2)群比 SO(3)群元素数目多一倍

纯态、系统处于同一量子态、 混合态、系统在一些量子态上有一个出现几率(统计效应)

密度算符可用于计算观测量期待值 纯态 $\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$

设 $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$ $\langle\hat{A}(t)\rangle = \sum_n a_n \langle\psi|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\psi\rangle = \sum_n a_n\langle\psi_n|\hat{\rho}(t)|\psi_n\rangle = \sum_n\langle\psi_n|\hat{A}\hat{\rho}|\psi_n\rangle$

$= Tr(\hat{A}\hat{\rho}(t))$

对于混合态， $\hat{\rho}(t) = \sum_i p_i|\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)|$ p_i 为 $|\psi_i\rangle$ 的出现几率 $\langle\hat{A}\rangle = Tr(\hat{A}\hat{\rho})$ 仍成立

欧拉角表示转动 $R(\hat{n}, \phi) = R_{z_1}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma)$

自旋 1/2 系统中 $\hat{D}(\alpha,\beta,\gamma) = \hat{D}_z(\alpha)\hat{D}_y(\beta)\hat{D}_z(\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\alpha}{2}} & \\ & e^{\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2} \\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-\frac{i\gamma}{2}} & \\ & e^{\frac{i\gamma}{2}} \end{pmatrix}$

角动量的本征态与本征值与 Wigner 函数

$J_\pm = J_x \pm iJ_y$ $[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm$ $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$

$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+)$ $\Rightarrow [J^2, J_\alpha] = 0$

~~设 $|m\rangle$ 为 J_z 本征态， $J_z|m\rangle = \hbar m|m\rangle$ $J_+|m\rangle$ 与 J_z 的本征值为 $m+1$ 的本征态， $J_-|m\rangle$ 为 J_z 的~~

~~本征值为 $m-1$ 的本征态. 设 j 为 m 的最大值 $\Rightarrow J_+|j\rangle = 0$. $J^2|j\rangle = j(j+1)\hbar^2|j\rangle$.~~

~~由 $[J^2, J_\pm] = 0$ $J^2J_-^n|j\rangle = j(j+1)\hbar^2J_-^n|j\rangle$ $J_-^n|j\rangle \propto |j-n\rangle$~~

略去. 老师推导逻辑问题较多，请看 Sakurai 与 Cohen

Wigner 函数 $D^{(j)}_{m'm}(R) \triangleq \langle jm'|e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{J}\cdot\hat{n}\phi}|jm\rangle$ 为转动算符 $D(R)$ 在 $\{|jm\rangle\}$ 基下的矩阵元

性质： $D^{(j)}(R_1R_2) = D^{(j)}(R_1)D^{(j)}(R_2)$. $D^{(j)}(R^{-1}) = D^{(j)}(R)^\dagger$ $D^{(j)}(R)$ 构成群.

欧拉角表示、 $D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) = \langle jm'|D_z(\alpha)D_y(\beta)D_z(\gamma)|jm\rangle = e^{-i(m'\alpha+m\gamma)}d^{(j)}_{m'm}(\beta)$.

其中 $d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \langle jm'|D_y(\beta)|jm\rangle$

轨道角动量

具体形式　由无穷小转动 $\hat{D}(\hat{n},\delta\phi) = 1-\frac{i}{\hbar}\hat{L}\cdot\hat{n}\delta\phi$　$\Delta\vec{r} = \hat{n}\times\vec{r}\delta\phi$

$\hat{D}(\hat{n},\delta\phi)|\vec{r}\rangle = |\vec{r}+\Delta\vec{r}\rangle = (1-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot\Delta\vec{r})|\vec{r}\rangle = (1-\frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot(\hat{n}\times\vec{r})\delta\phi)|\vec{r}\rangle$

$= [1-\frac{i}{\hbar}\hat{n}\cdot(\vec{r}\times\vec{p})\delta\phi]|\vec{r}\rangle$　　取 $\hat{L} = \vec{r}\times\vec{p}$

球坐标表示　$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}$　$L_x = \frac{\hbar}{i}(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi})$　$L_y = \frac{\hbar}{i}(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi})$

$\Rightarrow L_\pm = -i\hbar e^{\pm i\phi}(\pm i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi})$

球谐函数　当外势为中心势 $V(r)$ $\Rightarrow [L_\alpha, H]=0$　取 $\{H, L^2, L_z\}$ 的共同本征态 $|n,l,m\rangle$

在 $\vec{r}$ 表象下 $\langle\vec{r}|n,l,m\rangle = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$

性质：(1) $L^2 Y_l^m(\theta,\phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta,\phi)$　　$L_z Y_l^m(\theta,\phi) = m\hbar Y_l^m(\theta,\phi)$

(2) 冻结径向运动，球面上位置算符为 $|\hat{n}\rangle$　$Y_l^m(\theta,\varphi) = \langle n|l,m\rangle$

球面上 $\int d\hat{n}\, |\hat{n}\rangle\langle\hat{n}| = 1$　$d\hat{n} = \sin\theta d\theta d\phi$

(3) 正交性 $\int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\ Y_l^{m*}(\theta,\varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$

完备性 $\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} Y_l^{m*}(\theta,\varphi) Y_l^m(\theta',\varphi') = \delta(\hat{n}-\hat{n}') = \delta(\cos\theta-\cos\theta')\delta(\varphi-\varphi')$

利用球谐函数表示 Wigner 函数

$|\hat{n}\rangle = \hat{D}(R)|\hat{z}\rangle$　　R为先绕y轴转θ角，再绕z轴转φ角，用欧拉角符号即

$\hat{D}(R) = \hat{D}(\phi,\theta,0)$　　$|\hat{n}\rangle = \sum_{l,m}\hat{D}(R)|l,m\rangle\langle l,m|\hat{z}\rangle$

$\Rightarrow \langle l,m'|\hat{n}\rangle = \sum_m D_{m'm}^{(l)}(\phi,\theta,0)\ \langle l,m|\hat{z}\rangle$

$|\hat{z}\rangle$ 是 L_z 的本征值为0的本征矢，　$\langle l,m|\hat{z}\rangle = Y_l^{m*}(\theta=0,\phi)\delta_{m0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m0}$

即 $Y_l^{m'*}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} D_{m'0}^{(l)}(\phi,\theta,0)$　或 $D_{m0}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma=0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_l^{m*}(\theta,\phi)\Big|_{\theta=\beta,\phi=\alpha}$

$m=0$ 时 $d_{00}^{l}(\beta)\Big|_{\beta=\theta} = P_l(\cos\theta)$

角动量加法

$\hat{J} = \hat{J}_1\otimes\hat{I} + \hat{I}\otimes\hat{J}_2$　简写为 $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$

转动 $\hat{D}(R) = \hat{D}_1(R)\otimes\hat{D}_2(R)$　简写为 $\exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{J}\cdot\vec{n}\phi)$

基矢的2种取法：(1) $|j_1m_1\rangle\otimes|j_2m_2\rangle = |j_1j_2m_1m_2\rangle$

(2) $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$, $\hat{J}_1^2$, $\hat{J}_2^2$ 的共同本征态 $|j_1j_2jm\rangle$

基矢变换矩阵元为C-G系数 $\langle j_1j_2m_1m_2|j_1j_2jm\rangle$.

$$|j_1j_2jm\rangle=\sum_{m_1m_2}|j_1j_2m_1m_2\rangle\langle j_1j_2m_1m_2|j_1j_2jm\rangle.$$

变换矩阵为幺正的，可以取C-G系数为实数，变换矩阵进一步为正交的，相当于把 J^2 ($|m_1m_2\rangle$基下) 这一非对角矩阵对角化。

$m=m_1+m_2$ $\quad |j_1-j_2|\le j\le j_1+j_2$ $\quad |m|\le j$. 时 C-G系数才不为0.

递推关系

$$\boxed{\begin{aligned}\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\,\langle j_1j_2m_1m_2|j_1j_2;j,m\pm1\rangle &= \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1\mp1)}\,\langle j_1j_2m_1\mp1,m_2|j_1j_2jm\rangle\\ &+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2\mp1)}\,\langle j_1j_2;m_1,m_2\mp1|j_1j_2jm\rangle.\end{aligned}}$$

解读：

对 $|jm\rangle$ 的展开应用 $L_\pm$ 得到 $|j,m\pm1\rangle$ 的展开，其中 $|m_1m_2\rangle$ 项由原来 $|m_1\mp1,m_2\rangle$ 和 $|m_1,m_2\mp1\rangle$ 被 $L_\pm$ 作用得到.

C-G系数与维格纳函数

C-G级数展开 $D^{(j_1)}_{m_1m_1'}(R)\,D^{(j_2)}_{m_2m_2'}(R)=\sum_j\sum_m\sum_{m'}\langle j_1j_2m_1m_2|j_1j_2jm\rangle\langle j_1j_2m_1'm_2'|j_1j_2jm'\rangle D^{(j)}_{mm'}(R)$,

其中对 j 求和从 $|j_1-j_2|$ 到 j_1+j_2

解读：

$$\text{左边}=\langle j_1j_2m_1m_2|D(R)|j_1j_2m_1'm_2'\rangle=\sum_j\sum_m\sum_{m'}\langle m_1m_2|jm\rangle\langle jm|D(R)|jm'\rangle\langle jm'|m_1'm_2'\rangle$$
$$=\text{右边}$$

角动量的施温格振子模型

定义两种振子（加号型与减号型），湮灭与产生算符分别用 $\{a_+, a_+^\dagger\}$ 与 $\{a_-, a_-^\dagger\}$ 表示，粒子数算符

$N_+ = a_+^\dagger a_+$ 　$N_- = a_-^\dagger a_-$ 　可以理解为自旋向上 $(m=\frac{1}{2})$ 的粒子与自旋向下 $(m=-\frac{1}{2})$ 的粒子的数目

设两种振子无耦合，$[a_+, a_-^\dagger] = [a_-, a_+^\dagger] = 0$ 　　$[N_+, N_-]=0$ 可构造二者共同本征态 $|n_+, n_-\rangle$

定义真空右矢 　$a_+|0,0\rangle = 0$，$a_-|0,0\rangle = 0$ 　于是 $|n_+, n_-\rangle = \dfrac{(a_+^\dagger)^{n_+}(a_-^\dagger)^{n_-}}{\sqrt{n_+!\,n_-!}}|0,0\rangle$

定义 $J_+ = \hbar a_+^\dagger a_-$ 　$J_- = \hbar a_-^\dagger a_+$ 　J_+ 即增加一个 ↑ 减小一个 ↓，于是总角动量加 $\hbar$，J_- 同理。

$J_z = \frac{\hbar}{2}(N_+ - N_-) = \frac{\hbar}{2}(a_+^\dagger a_+ - a_-^\dagger a_-)$ 　即向上和向下的粒子数之差乘 $\frac{\hbar}{2}$

它们满足通常的角动量对易关系 $[J_z, J_\pm] = \pm\hbar J_\pm$ 　　$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$

定义 $N = N_+ + N_- = a_+^\dagger a_+ + a_-^\dagger a_-$

$$J^2 = J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) = \frac{\hbar^2}{2}N\left(\frac{N}{2}+1\right)$$

作代换 　$m = n_+ - n_-$ 　　$j = n_+ + n_-$ 　用 $\{|jm\rangle\}$ 基表示就有

$$J_+|jm\rangle = \sqrt{n_-(n_++1)}\,\hbar\,|j, m+1\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,\hbar\,|j, m+1\rangle$$

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

$$J^2|jm\rangle = j(j+1)\hbar^2|jm\rangle$$

一般地

$$|jm\rangle = \frac{(a_+^\dagger)^{j+m}(a_-^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}|0\rangle$$

$|0\rangle$ 为真空右矢（对应 $j=0, m=0$）

令 $m=j$，于是 $|jj\rangle = \dfrac{(a_+^\dagger)^{2j}}{\sqrt{(2j)!}}|0\rangle$ 　这个态可以想象为 $2j$ 个自旋 $\frac{1}{2}$ 方向向上的粒子构成

就转动下的变换性质而言，可以把角动量为 j 的任何客体视为一个由 $2j$ 个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子构成的复合系统。

注意：这与一般的角动量加法不同，这里只能构成完全对称的态，这些自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子实际是玻色子。

其可用于求得转动矩阵的显示表达（即求 Wigner 函数），具体地是求 $d_{m'm}^{(j)}(\beta)$

记 $D(R) = \exp\left(-\frac{iJ_y\beta}{\hbar}\right)$ 　$D(R)|jm\rangle = \dfrac{[D(R)a_+^\dagger D^{-1}(R)]^{j+m}[D(R)a_-^\dagger D^{-1}(R)]^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}D(R)|0\rangle$

$D(R)|0\rangle = |0\rangle$，上式得到 $D(R)|j,m\rangle = \displaystyle\sum_{k=0}^{j+m}\sum_{l=0}^{j-m}\frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}{(j+m-k)!\,k!\,(j-m-l)!\,l!}\left(a_+^\dagger\cos\frac{\beta}{2}\right)^{j+m-k}\left(a_-^\dagger\sin\frac{\beta}{2}\right)^{k}$

$$\left[-a_+^\dagger\sin\frac{\beta}{2}\right]^{j-m-l}\left[a_-^\dagger\cos\frac{\beta}{2}\right]^{l}|0\rangle$$

与 $D(R)|jm\rangle = \displaystyle\sum_{m'}|jm'\rangle d_{m'm}^{(j)}(\beta) = \sum_{m'}d_{m'm}^{(j)}(\beta)\frac{(a_+^\dagger)^{j+m'}(a_-^\dagger)^{j-m'}}{\sqrt{(j+m')!\,(j-m')!}}|0\rangle$ 对比，

有维格纳公式

$$d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \sum_k (-1)^{k-m+m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{(j+m-k)!\,k!\,(j-k-m')!\,(k-m+m')!} \left(\cos\frac{\beta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'} \left(\sin\frac{\beta}{2}\right)^{2k-m+m'}$$

$\sum_k$ 表示对所有阶乘不为0的项求和.

张量算符

矢量算符：V_i $(i=1,2,3)$ 称为矢量算符，如果在转动下 V 的期待值像矢量一样变换 $V_i \to \sum_j R_{ij} V_j$.

$|\alpha\rangle \to D(R)|\alpha\rangle$ 时 $\langle\alpha|V_i|\alpha\rangle \to \langle\alpha|D^+(R)V_iD(R)|\alpha\rangle = \sum_j R_{ij}\langle\alpha|V_j|\alpha\rangle$.

即 $\hat{D}^+(R)\hat{V}_i\hat{D}(R) = \sum_j R_{ij}V_j$.

考虑无穷小转动 $\hat{D}(R) = 1 - \frac{i\varepsilon \vec{J}\cdot\vec{n}}{\hbar}$，$\hat{D}^+(R)\hat{V}_i\hat{D}(R) = V_i + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_i, \vec{J}\cdot\vec{n}]$

特别 $\vec{n}=\vec{z}$ 时

$$R(\vec{z};\varepsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon & 0 \\ \varepsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

于是 $\begin{cases} V_x + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_x, J_z] = V_x - \varepsilon V_y \\ V_y + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_y, J_z] = V_y + \varepsilon V_x \\ V_z + \frac{\varepsilon}{i\hbar}[V_z, J_z] = V_z \end{cases}$

$\Rightarrow [V_i, J_j] = \epsilon_{ijk}\, i\hbar V_k$ 其可作为矢量算符定义式. 特别地，$\vec{x}, \vec{p}, \vec{L}$ 均为矢量算符.

备注：经典力学的矢量对应物实际为 $\vec{v}\cdot\vec{n}$（后面简称矢量）

笛卡尔张量与不可约张量

笛卡尔张量 $T_{ijk\cdots}$（指标数称为张量的秩）按转动下规律定义：

$$T_{ijk\cdots} \to \sum_{i'}\sum_{j'}\sum_{k'}\cdots R_{ii'}R_{jj'}R_{kk'}\cdots T_{i'j'k'\cdots}$$

例如 并矢 $T=UV$ $T_{ij} = U_iV_j \to \sum_{i'}\sum_{j'} T_{ii'}T_{jj'}U_{i'}V_{j'}$

并矢是可约的（可以分解为几部分，它们在转动下遵循不同变换）

$$U_iV_j = \underbrace{\frac{\vec{U}\cdot\vec{V}}{3}\delta_{ij}}_{\substack{\text{标量积,}\\ \text{转动下不变}}} + \underbrace{\frac{(U_iV_j - U_jV_i)}{2}}_{\substack{\text{反对称张量，可}\\ \text{写成矢量积 }\epsilon_{ijk}(U\times V)_k\cdot\frac{1}{2}}} + \underbrace{\left(\frac{U_iV_j + U_jV_i}{2} - \frac{\vec{U}\cdot\vec{V}}{3}\delta_{ij}\right)}_{\substack{3\times3\text{ 对称无迹张量}\\ \text{转动与 }Y_2^m(\vec{n})\text{ 相似}}}$$

独立分量分别为 1, 3, 5. 暗示并矢可被分解成能像 $l=0,1,2$ 的球谐函数一样变换的张量.

上面是一个张量约化成不可约球张量的最简单非平凡实例.

球张量（接下下页）

补充页

矢量 $\vec{V}$ 自然设想，若 $|\psi\rangle$ 为 V_x, V_y, V_z 的共同本征态，应有 $\hat{\vec{V}}|\psi\rangle = (v_x\hat{x}+v_y\hat{y}+v_z\hat{z})|\psi\rangle$.
于是矢量算符 $\vec{V} = V_x\hat{x}+V_y\hat{y}+V_z\hat{z}$. 薛定谔绘景与海森堡绘景区别可推广至任意变换，于是海森堡绘景下，转动 R 下，态 $|\psi\rangle$ 不变，任意算符 $\hat{A}$ 变为 $\hat{D}^\dagger(R)\hat{A}\hat{D}(R)$.
矢量(算符) $\vec{V}$ 同理 (下简称矢量). $\vec{V} \to \vec{V}' = \hat{D}^\dagger(R)\vec{V}\hat{D}(R) = \sum_i \hat{D}^\dagger(R)V_i\hat{D}(R)\,\hat{e}_i$.

矢量 $\vec{V}$ 与一般算符 $(|\psi\rangle \to |\psi'\rangle)$ 不同，它把态矢量 $|\psi\rangle$ 变为 $|\psi_x\rangle\hat{x}+|\psi_y\rangle\hat{y}+|\psi_z\rangle\hat{z}$
这样一个以态矢量为系数的"矢量"，因此严格而讲不是算符，而是算符的集合(直和)
(集合视角) $\vec{V} \xlongequal{def} V_x \oplus V_y \oplus V_z$. 它是 $\mathcal{H} \to \mathcal{H}^3$ 的映射，满足：

(1) $\vec{V}|\psi\rangle = V_x|\psi\rangle \oplus V_y|\psi\rangle \oplus V_z|\psi\rangle$. $\alpha\vec{V} = \alpha V_x \oplus \alpha V_y \oplus \alpha V_z$ $\alpha \in \mathbb{C}$.

(2) 点乘：若 $\vec{V} = V_x \oplus V_y \oplus V_z$ $\vec{U} = U_x \oplus U_y \oplus U_z$，则 $\vec{V}\cdot\vec{U} = V_xU_x+V_yU_y+V_zU_z$.

(3) $\vec{V}\cdot\vec{n} = V_xn_x+V_yn_y+V_zn_z$ 称为 $\vec{V}$ 在 $\vec{n}$ 轴上的投影.

(4) $\hat{D}\vec{V} = \hat{D}V_x \oplus \hat{D}V_y \oplus \hat{D}V_z$， 其中 $\hat{D}$ 是算符 $\vec{V}\hat{D}$ 也成立.

从(3)又可给出抽象定义
(映射视角) $\vec{V}$ 是 $V \to D$ 的一个映射，其中 D 是全体算符构成的空间，V 是3维矢量空间
$\vec{V}|\psi\rangle$ 是由 (2) 定义的 $R^3 \to \mathcal{H}$ 的一个映射，$\mathcal{H}$ 是希尔伯特空间
全体 $\vec{V}$ 构成一种线性空间，(2) 和 (4) 是定义在其上的运算.
由此进一步定义张量算符
总结：矢量(算符)是矢量到算符的映射

集合视角与映射视角的不同为是否指定了一组基 $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$，两种视角的关系完全如梁书广相所言.

一个秩为k的球张量例子 $Y_l^m(\theta,\phi)$ 可写成 $Y_l^m(\hat{n})$ 用某个矢量 $\vec{V}$ 代替 $\hat{n}$，得到一个秩为 $k(l=k)$

磁量子数为 $q(=m)$ 的球张量，$T_q^{(k)} = Y_{l=k}^{m=q}(\vec{V})$ $T_q^{(k)}$ 是不可约的

例如，$k=1$，$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{z}{r}$ $\longrightarrow$ $T_0^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}V_z$

$Y_1^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\frac{x\pm iy}{\sqrt{2}r}$ $\longrightarrow$ $T_{\pm1}^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\mp\frac{V_x\pm iV_y}{\sqrt{2}}\right)$

在转动R下，$|\hat{n}\rangle \to \hat{D}(R)|\hat{n}\rangle = |\hat{n}'\rangle$ $Y_l^m(\hat{n}') = \langle\hat{n}'|lm\rangle$

$$Y_l^m(\hat{n}') = \langle\hat{n}'|lm\rangle = \langle\hat{n}|\hat{D}(R^{-1})|lm\rangle = \sum_{m'}\langle\hat{n}|lm'\rangle \hat{D}_{m'm}^{(l)}(R^{-1})$$

$$= \sum_{m'} Y_l^{m'}(\hat{n})\, \hat{D}_{mm'}^{(l)*}(R)$$

于是可以预期 $Y_l^m(\hat{D}^\dagger(R)\vec{V}\hat{D}(R)) = \hat{D}^\dagger(R)Y_l^m(\vec{V})\hat{D}(R) = \sum_{m'}Y_l^{m'}(V)D_{mm'}^{(l)*}(R)$

上面推导应理解到 $\vec{V}$ 与 $\hat{n}$ 遵循相同变换 → 与小线态函数转动(薛定谔视角)方向相反

受此启发定义 k阶球张量算符 $T_q^{(k)}$，若 $\hat{D}^\dagger(R)T_q^{(k)}\hat{D}(R) = \sum_{q'=-k}^{k} D_{qq'}^{(k)*}T_{q'}^{(k)}$

或等价地 $\hat{D}(R)T_q^{(k)}\hat{D}^\dagger(R) = \sum_{q'=-k}^{k} D_{q'q}^{(k)}(R)\, T_{q'}^{(k)}$

考虑其无穷小形式，

$$\left(1+\frac{i\vec{J}\cdot\hat{n}\epsilon}{\hbar}\right)T_q^{(k)}\left(1-\frac{i\vec{J}\cdot\hat{n}\epsilon}{\hbar}\right) = \sum_{q'=-k}^{k} T_{q'}^{(k)}\langle kq'|\left(1+\frac{i\vec{J}\cdot\hat{n}\epsilon}{\hbar}\right)|kq\rangle$$

即 $$[\vec{J}\cdot\hat{n}, T_q^{(k)}] = \sum_{q'=-k}^{k} T_{q'}^{(k)}\langle kq'|\vec{J}\cdot\hat{n}|kq\rangle$$

取 $\hat{n}$ 沿 $\hat{z}$ 和 $(\hat{x}\pm i\hat{y})$ 方向，得 $[J_z, T_q^{(k)}] = \hbar q T_q^{(k)}$

$$[J_\pm, T_q^{(k)}] = \hbar\sqrt{(k\mp q)(k\pm q+1)}\; T_{q\pm1}^{(k)}$$

也可作为等效定义 注意：k阶球张量 $T^{(k)}$ 有 $2k+1$ 个分量，分量记为 $T_q^{(k)}$，每个分量都是算符，因此看起来是矢量的"横向"扩展而非"纵向"扩展。

张量积

定理：令 $X_{q_1}^{(k_1)}$ 与 $Z_{q_2}^{(k_2)}$ 分别为 k_1 秩和 k_2 秩的不可约球张量，则

$$\boxed{T_q^{(k)} = \sum_{q_1}\sum_{q_2}\langle k_1k_2;q_1q_2|k_1k_2;kq\rangle X_{q_1}^{(k_1)}X_{q_2}^{(k_2)}}$$

是一个k秩球(不可约)张量，这种构造方式完全类似于角动量加法。

张量算符的矩阵元及维格纳-埃卡特定理

m选择定则 $\langle\alpha',j'm'|T_q^{(k)}|\alpha,jm\rangle = 0$ 除非 $m'=q+m$

维格纳-埃卡特定理

$$\langle \alpha', j'm' | T_q^{(k)} | \alpha, jm\rangle = \langle jk; mq | jk; j'm'\rangle \frac{\langle \alpha' j' \| T^{(k)} \| \alpha j\rangle}{\sqrt{2j+1}}$$

$\propto \langle jk; mq | jk; j'm'\rangle$. 系数不依赖于 m, q, m'

例如 矢量算符是一个一秩张量，有选择定则 $\Delta m = m' - m = \pm 1, 0$ $\Delta j = j' - j = \begin{cases} \pm 1 \\ 0 \end{cases}$

此外，$0 \to 0$ 的跃迁是禁戒的.

特别地，$j = j'$ 时的维-埃定理作用于矢量算符时 称为投影定理

$$\langle \alpha', jm' | V_q | \alpha, jm\rangle = \frac{\langle \alpha', jm | \vec{J} \cdot \vec{V} | \alpha, jm\rangle}{\hbar^2 j(j+1)} \langle jm' | J_q | jm\rangle$$

其中 $J_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} J_\pm \quad J_0 = J_z$

球张量语言分解笛卡尔张量

$$T_0^{(0)} = \frac{-\vec{U} \cdot \vec{V}}{3} = \frac{(U_{+1} V_{-1} + U_{-1} V_{+1} - U_0 V_0)}{3}$$

$$T_q^{(1)} = \frac{(\vec{U} \times \vec{V})_q}{i\sqrt{2}}$$

V_q 为一秩球张量的 q 分量，$V_{+1} = -\frac{U_x + iU_y}{\sqrt{2}} = -\frac{1}{\sqrt{2}} V_+$ $\quad V_{-1} = \frac{U_x - iU_y}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} V_-$ $\quad V_0 = U_z$

量子力学中的对称性

4.1 对称性、守恒定律和简并

幺正算符 $\mathscr{S}$ 也称为对称算符 $\mathscr{S}=1-\frac{i\epsilon}{\hbar}G$ G为厄米生成元

若H在$\mathscr{S}$下不变，即 $\mathscr{S}^\dagger H\mathscr{S}=H \Leftrightarrow [G,H]=0 \Leftrightarrow \frac{dG}{dt}=0$ 即G是一个运动常数

$[G,H]=0$ 表明，若t_0时刻系统处在G的本征态上，稍后t时刻也处于G的本征态，且本征值相同

简并：若 $[H,\mathscr{S}]=0$ 而 $|n\rangle$ 为能量本征右矢，本征值为 E_n 则 $\mathscr{S}|n\rangle$ 具有相同本征值 E_n

(反之，E_n不简并，则 $|n\rangle=\mathscr{S}|n\rangle$，至多差一个$e^{i\delta}$因子)

若 $|n\rangle$ 与 $\mathscr{S}|n\rangle$ 代表不同的态，E_n 能级简并　对连续对称，$\mathscr{S}=\mathscr{S}(\lambda)$ 所有 $\mathscr{S}(\lambda)|n\rangle$ 有相同能量

若H是转动不变的，$[\mathcal{D}(R),H]=0$ 于是 $[\vec{J},H]=0$ $[J^2,H]=0$

所有 $\hat{D}(R)|n,j,m\rangle$ 具有相同能量，$\hat{D}(R)|n;j,m\rangle=\sum_{m'}|n;j,m'\rangle D^{(j)}_{m'm}(R)$ 具有相同能量

$\hat{D}(R)$ 是连续变换，上式表明 $2j+1$ 个 $|n;j,m\rangle$ $(m=-j,\cdots,j)$ 具有相同能量，这里的 $(2j+1)$ 重简并由转动对称性带来

库仑势中的SO(4)对称性

经典地，库仑势有特别的运动常数 $\vec{M}=\frac{\vec{p}\times\vec{L}}{m}-\frac{Ze^2}{r}\vec{r}$ 新的对称性为SO(4)对称性，等价于行列式为1的4×4正交矩阵群

首先把$\vec{M}$化为量子地，$\vec{M}$应是厄米的，若$\vec{A},\vec{B}$均是厄米的，$(\vec{A}\times\vec{B})^\dagger=(\epsilon_{ijk}A_iB_j\hat{e}_k)^\dagger=-\vec{B}\times\vec{A}$

厄米版本的$\vec{M}$为 $\vec{M}=\frac{1}{2m}(\vec{p}\times\vec{L}-\vec{L}\times\vec{p})-\frac{Ze^2}{r}\vec{r}$ $[\vec{M},H]=0 \Rightarrow \vec{M}$确为一个运动常数

$\vec{L}\cdot\vec{M}=0=\vec{M}\cdot\vec{L}$

$\vec{M}^2=\frac{2}{m}H(\vec{L}^2+\hbar^2)+Z^2e^4$

可以证明 $[L_i,L_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ $[M_i,L_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}M_k$ ($\vec{M}$为矢量算符) $[M_i,M_j]=-i\hbar\epsilon_{ijk}\frac{2}{m}HL_k$

$\{\vec{L},\vec{M}\}$不构成封闭代数，但对于特定的束缚态问题，矢量空间缩为H的某一本征子空间，$E<0$，上述代数封闭

将$\vec{M}$重新标度化：$\vec{N}=\left(-\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}}\vec{M}$ 于是有封闭代数

$[L_i,L_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ $[N_i,N_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}L_k$ $[N_i,L_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}N_k$

由$\vec{L}$与$\vec{N}$生成的对称性操作为四维空间的转动　四维空间 (x_1,x_2,x_3,x_4) 和 (p_1,p_2,p_3,p_4) 下

$L_3=\tilde{L}_{12}=x_1p_2-x_2p_1$ 定义 $\tilde{L}_{14}=N_1$ $\tilde{L}_{24}=N_2$ $\tilde{L}_{34}=N_3$ 便得到上述代数

定义 $\vec{I}=(\vec{L}+\vec{N})/2$ $\vec{K}=(\vec{L}-\vec{N})/2$ 可证 $[I_i,I_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}I_k$ $[K_i,K_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}K_k$ $[I_i,K_j]=0$

$\vec{I},\vec{K}$ 遵从独立角动量代数，且 $[\vec{I},H]=[\vec{K},H]=0$，它们都是守恒量　I^2与K^2本征值为 $i(i+1)\hbar^2$，$k(k+1)\hbar^2$

由 $\vec{I}^2-\vec{K}^2=\vec{L}\cdot\vec{N}=0 \Rightarrow i=k$ $(k=0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},\cdots)$

另一方面，$\vec{I}^2+\vec{K}^2=\frac{1}{2}(\vec{L}^2+\vec{N}^2)=\frac{1}{2}(\vec{L}^2-\frac{m}{2E}\vec{M}^2)=\frac{1}{2}(-\hbar^2-\frac{m}{2E}Z^2e^4)$

于是 $2k(k+1)\hbar^2=-\frac{1}{2}\hbar^2-\frac{m}{4E}Z^2e^4 \Rightarrow E=-\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(2k+1)^2}$

E的简并源于 $\vec{I},\vec{K}$ "转动"，简并度 $(2k+1)^2=n^2$

还可得到，$SO(4) = SU(2) \times SU(2)$

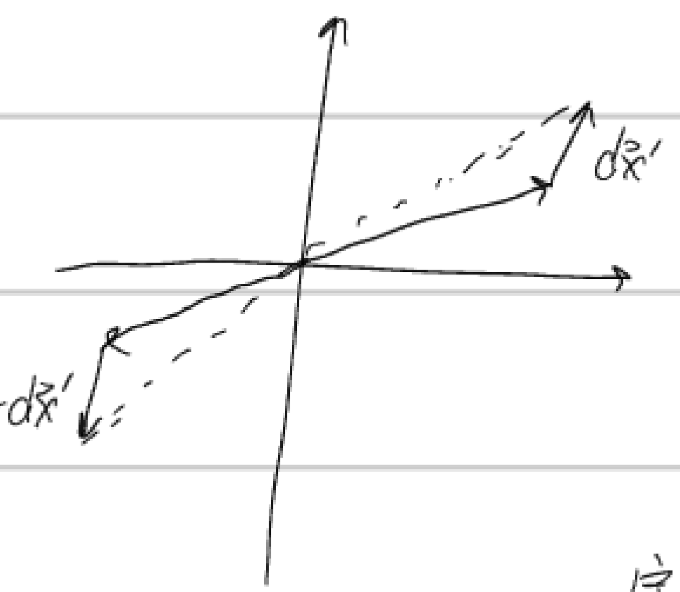
4.2 分立对称性，宇称或空间反射

宇称算符 π　　$\langle\alpha|\pi^\dagger\hat{\vec{x}}\pi|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\hat{\vec{x}}|\alpha\rangle \Rightarrow \hat{\vec{x}}\pi = -\pi\hat{\vec{x}}$　即 $\hat{\vec{x}}$ 与 π 反对易

$\hat{\vec{x}}\pi|\vec{x}'\rangle = -\pi\hat{\vec{x}}|\vec{x}'\rangle = (-\vec{x}')\pi|\vec{x}'\rangle$　即 $\pi|\vec{x}'\rangle$ 是 $\hat{\vec{x}}$ 的本征矢，本征值 $-\vec{x}'$ $\Rightarrow \pi|\vec{x}'\rangle = e^{i\delta}|-\vec{x}'\rangle$　约定 $e^{i\delta}=1$

$\pi^2|\vec{x}'\rangle = |\vec{x}'\rangle \Rightarrow \pi^2 = 1$　　$\pi^{-1} = \pi^\dagger = \pi$　　π 既厄米又幺正，本征值只能是 ± 1

由 $\pi\, \mathcal{J}(d\vec{x}') = \mathcal{J}(-d\vec{x}')\pi$　　$\pi\left(1 - \frac{i\vec{p}\cdot d\vec{x}'}{\hbar}\right)\pi^\dagger = 1 + \frac{i\vec{p}\cdot d\vec{x}'}{\hbar}$　$\Rightarrow \{\pi, \vec{p}\} = 0$　π 与 $\vec{p}$ 也反对易



$[\pi, \vec{L}] = 0$　可直接从 $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$ 得到，要扩展到一般角动量，由

$$R^{(宇称)}R^{(转动)} = R^{(转动)}R^{(宇称)} \qquad R^{(宇称)} = \begin{pmatrix} -1 & & \\ & -1 & \\ & & -1 \end{pmatrix}$$ $R^{(转动)}$ 为幺模正交矩阵

量子力学中自然假设 $\pi\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(R)\pi$　　即 $[\pi, \vec{J}] = 0$　　$\pi^\dagger\vec{J}\pi = \vec{J}$

宇称下为奇的矢量称为极矢量，宇称下为偶的矢量称为轴矢量或赝矢量

宇称下的波函数

$\psi(\vec{x}') = \langle\vec{x}'|\alpha\rangle$　　其空间反射态波函数 $\langle\vec{x}'|\pi|\alpha\rangle = \langle-\vec{x}'|\alpha\rangle = \psi(-\vec{x}')$

若 $|\alpha\rangle$ 是 π 的本征矢，$\pi|\alpha\rangle = \pm|\alpha\rangle$　　$\langle\vec{x}'|\pi|\alpha\rangle = \pm\langle\vec{x}'|\alpha\rangle = \langle-\vec{x}'|\alpha\rangle$

因此若 $\psi(\vec{x}') = \psi(-\vec{x}')$，$|\alpha\rangle$ 为偶宇称、　　若 $\psi(\vec{x}') = -\psi(-\vec{x}')$，$|\alpha\rangle$ 为奇宇称、

由 $[L, \pi] = 0$，$|\alpha, lm\rangle$ 有确定宇称、　　由 Y_l^m 宇称为 $(-1)^l$　　$|\alpha, lm\rangle$ 宇称为 $(-1)^l$

定理：若 $[H, \pi] = 0$，非简并的能量本征态有宇称（奇/偶）

宇称选择定则：宇称下为奇的算符，只在相反宇称的态之间有非零矩阵元

宇称下为偶的算符，只在相同宇称的态间有非零矩阵元.

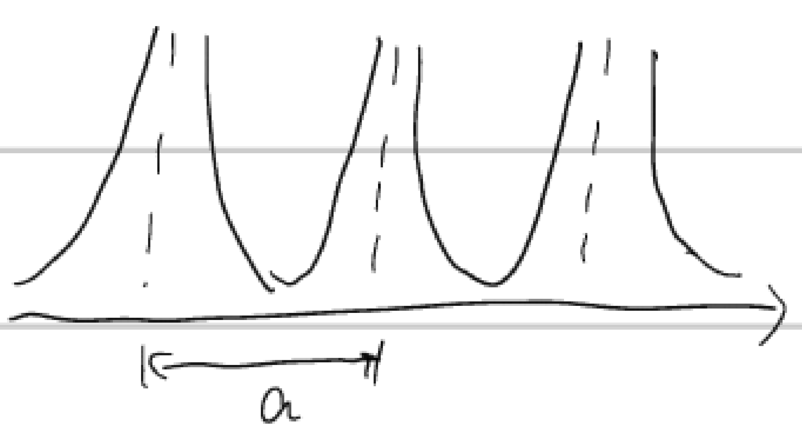
4.3 晶格平移

记 $\tau(l)$ 为平移算符，　$\tau^\dagger(l)\hat{x}\tau(l) = x + l$　　$\tau(l)|x'\rangle = |x'+l\rangle$

对周期性势场 $V(x+a) = V(x)$　　$\tau^\dagger(a)V(x)\tau(a) = V(x)$　　$\Rightarrow [H, \tau(a)] = 0$

H 与 $\tau(a)$ 可同时对角化. $\tau(a)$ 本征值是模为1的复数（设 $|\psi\rangle$ 为 $\tau(a)$ 本征态、$\langle\tau\psi|\tau\psi\rangle = |\lambda|^2\langle\psi|\psi\rangle$
$= \langle\psi|\tau^\dagger\tau|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \Rightarrow |\lambda|^2 = 1$）

相邻格点间势垒高度为 ∞ 大时，粒子完全定位于第 n 个格点 ($|n\rangle$) 是一个能量本征态，　$H|n\rangle = E_0|n\rangle$



$\tau(a)|n\rangle = |n+1\rangle \Rightarrow |n\rangle$ 不是 $\tau(a)$ 的本征矢（E_0 能级有无穷重简并）

构造 $|\theta\rangle \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta}|n\rangle$　　则 $|\theta\rangle$ 为 H 与 $\tau(a)$ 的共同本征态

$\tau(a)|\theta\rangle = \sum_n e^{i(n-1)\theta}|n\rangle = e^{-i\theta}|\theta\rangle$

更一般地情况，相邻格点间势垒不是无穷大，但很大，仍可构造局域本征态 $|n\rangle$ 然而可以预期 $\langle n'|H|n\rangle \neq 0$

假设只需考虑临近格点的 $|n\rangle$ 的耦合：$\langle n'|H|n\rangle = 0$，除非 $n'=n$ 或 $n'=n\pm1$（紧束缚近似）

定义 $\langle n|H|n\rangle = E_0$ $\quad \langle n\pm1|H|n\rangle = -\Delta$ $\quad \Rightarrow H|n\rangle = E_0|n\rangle - \Delta|n+1\rangle - \Delta|n-1\rangle$

构造 $|\theta\rangle = \sum_n e^{in\theta}|n\rangle$ 它是 $\tau(a)$ 本征态，$H|\theta\rangle = (E_0 - 2\Delta\cos\theta)|\theta\rangle \Rightarrow |\theta\rangle$ 也是 H 本征态，能量本征值连续地分布在 $[E_0-2\Delta, E_0+2\Delta]$ 能带中

$\langle x'|\tau(a)|\theta\rangle = \langle x'-a|\theta\rangle = e^{-i\theta}\langle x'|\theta\rangle$ 　设 $\langle x'|\theta\rangle = e^{ikx'}u_k(x')$ 取 $\theta = ka$，$u_k(x')$ 是周期为 a 的函数。布洛赫定理：$\tau(a)$ 的本征矢 $|\theta\rangle$ 的波函数可以写成平面波 $e^{ikx'}$ 乘以一个周期为 a 的周期函数。

$E(k) = E_0 - 2\Delta\cos ka \qquad |k| \leq \pi/a$

4.4 时间反演分立对称性

$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V)\psi$ 　若 $\psi(\vec{x},t)$ 是一个解，则 $\psi(\vec{x},-t)$ 不是一个解，但 $\psi^*(\vec{x},-t)$ 是一个解

定义：变换 $|\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle = \theta|\alpha\rangle$ $\quad |\beta\rangle \to |\tilde{\beta}\rangle = \theta|\beta\rangle$ 是反幺正的，如果 ① $\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^* = \langle\alpha|\beta\rangle$

② $\theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^*\theta|\alpha\rangle + c_2^*\theta|\beta\rangle$（反线性）

现在要求反幺正算符 $\theta = UK$，U 是幺正的，K 是复共轭算符，$Kc|\alpha\rangle = c^*K|\alpha\rangle$

在基右矢 $\{|a'\rangle\}$ 下 $|\tilde{\alpha}\rangle = \sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^* K|a'\rangle = \sum_{a'}\langle a'|\alpha\rangle^*|a'\rangle$ 　假定 $K|a'\rangle = |a'\rangle$ 不改变基

注意：K 与选取的基有关，选取的基不同，K 也不同

$\theta = UK$ 可以满足 θ 的反幺正性

时间反演算符 Θ 　$|\alpha\rangle \to \Theta|\alpha\rangle$（运动反演算符）$\Theta|\vec{p}'\rangle = |-\vec{p}'\rangle$，至多差一个相位，同理 $\vec{J}$ 也被反转

观察时间反演态的时间演化 　考虑系统 $t=0$ 时由 $|\alpha\rangle$ 表示，$t=\delta t$ 时 $|\alpha, t_0=0, t=\delta t\rangle = (1-\frac{iH}{\hbar}\delta t)|\alpha\rangle$

若系统具有时间反演对称性，应有 $(1-\frac{iH\delta t}{\hbar})\Theta|\alpha\rangle = \Theta|\alpha, t_0=0; t=-\delta t\rangle$（先考虑 $t=-\delta t$ 的态右矢，再反转 $\vec{p}$, $\vec{J}$）

即 $\quad -iH\Theta|\ \rangle = \Theta iH|\ \rangle$

Θ 不是幺正的，否则取 $|n\rangle$ $(H|n\rangle = E_n|n\rangle)$ 有 $H\Theta|n\rangle = -\Theta H|n\rangle = -E_n\Theta|n\rangle$ 对于正定能谱这是不允许的

Θ 更恰当应为反幺正的，于是 $\Theta H = H\Theta$

关于 Θ 的恒等式：$\langle\beta|\otimes|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta\otimes^\dagger\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle$ 　$\otimes$ 是线性算符，$|\tilde{\alpha}\rangle = \Theta|\alpha\rangle$

对于可观测 A，$\langle\beta|A|\alpha\rangle = \langle\tilde{\alpha}|\Theta A\Theta^{-1}|\tilde{\beta}\rangle$ 　定义可观测量在时间反演下的奇偶性，根据 $\Theta A\Theta^{-1} = \pm A$

$\Rightarrow \langle\beta|A|\alpha\rangle = \pm\langle\tilde{\beta}|A|\tilde{\alpha}\rangle^*$ $\qquad \langle\alpha|A|\alpha\rangle = \pm\langle\tilde{\alpha}|A|\tilde{\alpha}\rangle$

$\vec{p}$ 应该是奇的 $\Theta\vec{p}\Theta^{-1} = -\vec{p}$ 　这样 $\langle\alpha|\vec{p}|\alpha\rangle = -\langle\tilde{\alpha}|\vec{p}|\tilde{\alpha}\rangle$ 　同时意味着 $\hat{\vec{p}}\Theta|\vec{p}'\rangle = -\Theta\hat{\vec{p}}|\vec{p}'\rangle = (-\vec{p}')\Theta|\vec{p}'\rangle$

即 $\Theta|\vec{p}'\rangle$ 也是动量的本征态，本征值为 $-\vec{p}'$ 　选择适当相位 $\Theta|\vec{p}'\rangle = |-\vec{p}'\rangle$

$\vec{x}$应是偶的 $\Theta\vec{x}\Theta^{-1}=\vec{x}$ $\Theta|\vec{x}'\rangle=|\vec{x}'\rangle$ (至多差一个相因子)

$\vec{J}$应是奇的 $\Theta\vec{J}\Theta^{-1}=-\vec{J}$

波函数 假定 $t=0$ 时一个无自旋单粒子系统处于 $|\alpha\rangle$， $|\alpha\rangle=\int d^3x'\ |\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\alpha\rangle$

$\Theta|\alpha\rangle=\int d^3x'\ \Theta|\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\alpha\rangle^* = \int d^3x'\ |\vec{x}'\rangle\langle\vec{x}'|\alpha\rangle^*$

于是 $\psi(\vec{x}')\rightarrow\psi^*(\vec{x}')$

$Y_l^m(\theta,\phi)\rightarrow Y_l^{m*}(\theta,\phi)=(-1)^m Y_l^{-m}(\theta,\phi)$ $\Rightarrow \Theta|l,m\rangle=(-1)^m|l,-m\rangle$

定理(能量本征函数的实性) 假定 H 在时间反演下不变，非简并能级的能量本征函数是实的(一个实函数乘以一个不依赖于 $\vec{x}$ 的相因子)

$\hookrightarrow$ $\Theta H=H\Theta$，或者说时间反演下 H 是偶的.

对于自旋1/2系统的时间反演

$|\hat{n};+\rangle=e^{-iS_z\alpha/\hbar}e^{-iS_y\beta/\hbar}|+\rangle$ $\hat{n}$ 极角为 β，方位角为 α 由 $\Theta(iJ_z)\Theta^{-1}=iJ_z$

$\Theta|\hat{n};+\rangle=e^{-iS_z\alpha/\hbar}e^{-iS_y\beta/\hbar}\Theta|+\rangle=\eta|\hat{n};-\rangle$ η 为模为1的相因子

另一方面，$|\hat{n};-\rangle=e^{-i\alpha S_z/\hbar}e^{-i(\pi+\beta)S_y/\hbar}|+\rangle$ 设 $\Theta=UK$，并注意到 $K|+\rangle=|+\rangle$，得

$\Theta=\eta e^{-i\pi S_y/\hbar}K=-i\eta\left(\frac{2S_y}{\hbar}\right)K$ 由 $e^{-i\pi S_y/\hbar}|+\rangle=|-\rangle$ $e^{-i\pi S_y/\hbar}|-\rangle=-|+\rangle$.

因此 Θ 作用在一般的态上，$\Theta(C_+|+\rangle+C_-|-\rangle)=\eta C_+^*|-\rangle-\eta C_-^*|-\rangle$

$\Theta^2(C_+|+\rangle+C_-|-\rangle)=-|\eta|^2C_+|+\rangle-|\eta|^2C_-|-\rangle=-(C_+|+\rangle+C_-|-\rangle)$

$\Rightarrow \Theta^2=-1$ 对任何自旋取向成立，且结论完全与位相选择无关 对非自旋体系 $\Theta^2=+1$

更一般地，可以证明 $\Theta^2|j\text{半奇数}\rangle=-|j\text{半奇数}\rangle$ $\Theta^2|j\text{整数}\rangle=+|j\text{整数}\rangle$

对一个专门由电子组成的系统，电子数的奇偶决定了 Θ^2 奇偶

与电场和磁场的相互作用及克拉默斯简并

对静电场中电荷，$V(\vec{x})=e\phi(\vec{x})$ $\Rightarrow[\Theta,H]=0$ 与宇称情况不同，这不能导出守恒定律

因为 $\Theta U(t,t_0)=\Theta\exp(-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0))=\exp(\frac{i}{\hbar}H(t-t_0))\Theta\neq U(t,t_0)\Theta$

然而其后果是非简并能量本征函数的实性.

克拉默斯简并：若 $[\Theta,H]=0$，非简并能量本征态的时间反演至多附加一个相因子，因而 $\Theta^2=1$. 但对半奇数 j 系统 $\Theta^2=-1$，因而半奇数 j 系统(例如，奇数个电荷在外场)的每个能级至少是二重简并的。

在外磁场中 H 包含 $\vec{S}\cdot\vec{B}$ $\vec{p}\cdot\vec{A}+\vec{A}\cdot\vec{p}$ $(\vec{B}=\nabla\times\vec{A})$ $\vec{S}$ 与 $\vec{p}$ 是奇的，因而 $\Theta H\neq H\Theta$，

$\Rightarrow$ 解除克拉默斯简并.

全同粒子

多粒子态、二次量子化

一个多粒子态定义为 $|n_1, n_2, \cdots, n_i, \cdots\rangle$　n_i 表示具有某些算符本征值 k_i 的粒子数，

该矢量处于一类新的矢量空间(福克空间)

真空态 $|0\rangle = |0, 0, \cdots 0, \cdots\rangle$　　注意 $|0\rangle \neq 0$

单粒子态 $|k_i\rangle = |0, 0, \cdots, n_i = 1, \cdots\rangle$

定义构算符 a_i^+ 作用是使本征值为 k_i 的态上粒子数增加1个．　$a_i^+|0\rangle = |k_i\rangle$

a_i 为湮灭算符，使粒子数减1　　$a_i|k_j\rangle = \delta_{ij}|0\rangle$

我们预期 $a_i^+ a_j^+ |0\rangle = \pm a_j^+ a_i^+ |0\rangle$　　$\pm$：玻/费

推广到多粒子态，$\begin{cases} [a_i^+, a_j^+] = 0 & \text{玻色子} & [a_i, a_j] = 0 \\ \{a_i^+, a_j^+\} = 0 & \text{费米子} & \{a_i, a_j\} = 0 \end{cases}$

再定义　玻色子 $[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}$　　费米子 $\{a_i, a_j^+\} = \delta_{ij}$

可定义 $N_i = a_i^+ a_i$　对处于 $|k_i\rangle$ 的粒子计数．　$N = \sum_i a_i^+ a_i$ 表示总粒子数．

设 $|k_i\rangle$ 是"可加的"单粒子算符 K 的本征态，对多粒子态 $|\Psi\rangle$

多粒子算符 $\mathcal{K} = \sum_i k_i a_i^+ a_i$　　则 $|\Psi\rangle$ 关于 $\mathcal{K}$ 本征值为 $\sum_i n_i k_i$

非简并不含时微扰. $H=H_0+\lambda V$ $H_0|n^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$ $\Delta_n \overset{def}{=} E_n-E_n^{(0)} \Rightarrow (E_n^{(0)}-H_0)|n\rangle=(\lambda V-\Delta_n)|n\rangle$

(i) $(\lambda V-\Delta_n)|n\rangle$ 没有 $|n^{(0)}\rangle$ 分量 $(\langle n^{(0)}|E_n^{(0)}-H_0|n\rangle=0)$ 定义 $\phi_n=1-|n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}|=\sum_{k\neq n}|k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|$

$(E_n^{(0)}-H_0)|n\rangle=\phi_n(\lambda V-\Delta_n)|n\rangle \Rightarrow |n\rangle=C_n(\lambda)|n^{(0)}\rangle+\frac{1}{E_n^{(0)}-H_0}\phi_n(\lambda V-\Delta_n)|n\rangle$ $\lim_{\lambda\to 0}C_n(\lambda)=1$.

(ii) 采取归一化方案为 $\langle n^{(0)}|n\rangle=1$ 从而 $|n\rangle=|n^{(0)}\rangle+\frac{1}{E_n^{(0)}-H_0}\phi_n(\lambda V-\Delta_n)|n\rangle$

这样 $\Delta_n=\lambda\langle n^{(0)}|V|n\rangle$ 这两式是无近似的.

(iii) 令 $|n\rangle=|n^{(0)}\rangle+\lambda|n^{(1)}\rangle+\cdots$ $\Delta_n=\lambda\Delta_n^{(1)}+\lambda^2\Delta_n^{(2)}+\cdots$ $\Rightarrow$ $\Delta_n^{(N)}=\langle n^{(0)}|V|n^{(N-1)}\rangle$

$|n^{(1)}\rangle=\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}V|n^{(0)}\rangle$ $\Delta_n^{(2)}=\langle n^{(0)}|V\frac{\phi_n}{E_n^{(0)}-H_0}V|n^{(0)}\rangle$.

(iv) 令 $V_{nk}=\langle n^{(0)}|V|k^{(0)}\rangle$ $\Rightarrow$ $\Delta_n=\lambda V_{nn}+\lambda^2\sum_{k\neq n}\frac{|V_{nk}|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}+\cdots$

$|n\rangle\approx|n^{(0)}\rangle+\lambda\sum_{k\neq n}|k^{(0)}\rangle\frac{V_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}$. 两能级倾向于相互排斥(无能级交叉定理 特殊情况)

基态的2级能量移动总是负的

(v) 定义 $|n\rangle_N=Z_n^{1/2}|n\rangle$ 使 $_N\langle n|n\rangle_N=1$ 由 $\langle n^{(0)}|n\rangle=1 \Rightarrow Z_n^{1/2}=\langle n^{(0)}|n\rangle_N$.

$Z_n^{-1}=\langle n|n\rangle=1+\lambda^2\langle n^{(1)}|n^{(1)}\rangle+\cdots=1+\lambda^2\sum_{k\neq n}\frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})^2}+\cdots$

$\Rightarrow Z_n=1-\lambda^2\sum_{k\neq n}\frac{|V_{kn}|^2}{(E_n^{(0)}-E_k^{(0)})^2}+O(\lambda^3)$ 一般地: $Z_n=\frac{\partial E_n}{\partial E_n^{(0)}}$

(vi) 上述讨论前提: $|n^{(0)}\rangle$ 能级不简并 (其他能级可以简并)

简并不合时微扰. 设现在 $E_D^{(0)}$ 存在 g 重简并, $\{|m^{(0)}\rangle\}$, 张成简并子空间 D. 一般情况下微扰解除简并, 构成 $\{|l\rangle\}$, $\lambda\to 0$ 时 $\{|l\rangle\}\to\{|l^{(0)}\rangle\}$, 它一般与 $\{|m^{(0)}\rangle\}$ 不同, 但均张成子空间 D.

(i) 令 P_0 为投影到 D 的算符 $P_1 = 1-P_0$. $0=(E-H_0-\lambda V)|l\rangle=(\Delta_l-\lambda V)P_0|l\rangle+(E-H_0-\lambda V)P_1|l\rangle$

$\Rightarrow (\Delta_l-\lambda P_0V)P_0|l\rangle-\lambda P_0VP_1|l\rangle=0$ (P_0 子空间) $\quad -\lambda P_1VP_0|l\rangle+(E-H_0-\lambda P_1V)P_1|l\rangle=0$ (P_1 子空间).

(ii) 在 P_1 子空间 $P_1|l\rangle = P_1\dfrac{\lambda}{E-H_0-\lambda P_1VP_1}P_1VP_0|l\rangle$. $\Rightarrow P_1|l^{(1)}\rangle=\lambda\sum\limits_{k\notin D}\dfrac{|k^{(0)}\rangle V_{kl}}{E_D^{(0)}-E_k^{(0)}}$ $\quad V_{kl}=\langle k^{(0)}|V|l^{(0)}\rangle$.

(iii) 在 P_0 子空间

$$\left(\Delta_l-\lambda P_0VP_0-\lambda^2P_0VP_1\frac{1}{E-H_0-\lambda V}P_1VP_0\right)P_0|l\rangle=0$$

$\Rightarrow (\Delta_l^{(1)}-P_0VP_0)(P_0|l^{(0)}\rangle)=0$. 这是关于 P_0VP_0 的本征值问题. $\Delta_l^{(1)}$ 是 $\det[V-\Delta_l^{(1)}]=0$ 的根.

$|l^{(0)}\rangle$ 即对应的本征矢量.

(iv) 总结: 首先将 V 在子空间 D 对角化, 得到 $|l_i^{(0)}\rangle$. $\Delta_i^{(1)}=\langle l_i^{(0)}|V|l_i^{(0)}\rangle$ 是本征值 $(i=1,\cdots,g)$.

假设简并完全解除, 即 $\Delta_i^{(1)}-\Delta_j^{(1)}$ 全不为 0. $\quad P_0|l_i^{(1)}\rangle=\sum\limits_{j\neq i}\lambda\dfrac{P_0|l_j^{(0)}\rangle}{\Delta_j^{(1)}-\Delta_i^{(1)}}\langle l_j^{(0)}|VP_1\dfrac{1}{E_D^{(0)}-H_0}P_1V|l_i^{(0)}\rangle$

更明显地写成 $P_0|l_i^{(1)}\rangle=\sum\limits_{j\neq i}\lambda\dfrac{|l_j^{(0)}\rangle}{\Delta_j^{(1)}-\Delta_i^{(1)}}\sum\limits_{k\notin D}\langle l_j^{(0)}|V|k\rangle\dfrac{1}{E_D^{(0)}-E_k^{(0)}}\langle k|V|l_i^{(0)}\rangle$

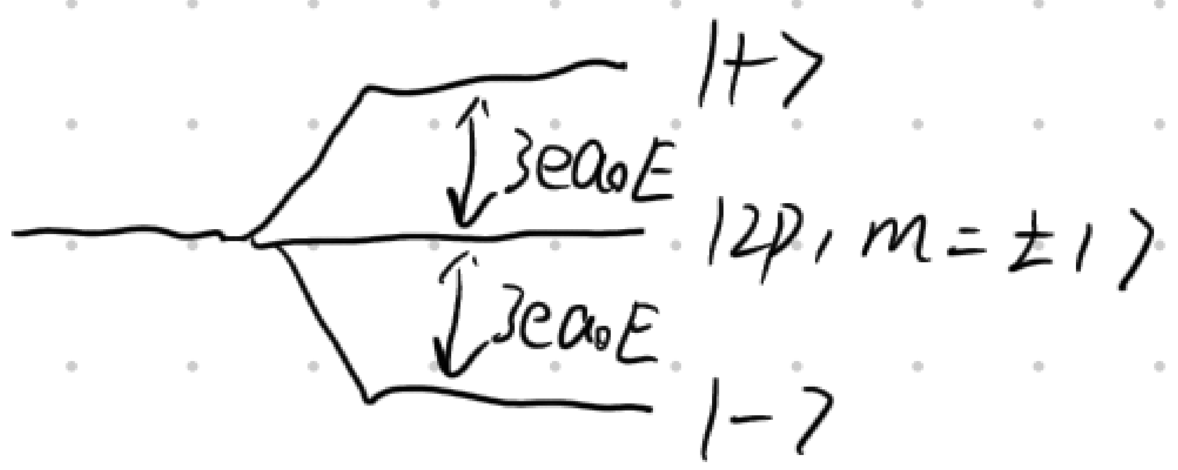
而 $P_1|l_i^{(1)}\rangle=\sum\limits_{k\notin D}\dfrac{|k\rangle}{E_D^{(0)}-E_k^{(0)}}\langle k|V|l_i^{(0)}\rangle$. $\Rightarrow$ 求出 $|l_i^{(1)}\rangle$

(v) 仍约定 $\langle l^{(0)}|l\rangle=1$. 由 $0=(E-H_0-\lambda V)|l\rangle \Rightarrow \lambda\langle l^{(0)}|V|l\rangle=\lambda\Delta_i^{(1)}+\lambda^2\Delta_i^{(2)}+\cdots$

$\Rightarrow \Delta_i^{(1)}=\langle l^{(0)}|V|l^{(0)}\rangle \qquad \Delta_i^{(2)}=\langle l^{(0)}|V|P_1l^{(1)}\rangle=\sum\limits_{k\notin D}\dfrac{|V_{kl}|^2}{E_D^{(0)}-E_k^{(0)}}$

应用：(1) 均匀电场对氢原子作用 $V=-ezE$ 以 $n=2$ 能级为例，对称性上只有 $\langle 2p,m=0|V|2s\rangle=3ea_0E\neq 0$

类比 σ_x 矩阵 $\Rightarrow$ $\Delta_\pm^{(1)}=\pm 3ea_0E$ $|\pm\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|2s,m=0\rangle\pm|2p,m=0\rangle)$.



$\Delta\propto E$，称为线性斯塔克效应，源于 $|\pm\rangle$ 态 $\langle z\rangle\neq 0$，即有非零的恒定电偶极矩.

(2) 类氢原子精细结构 分为动能修正与自旋-轨道耦合修正.

动能修正：$V=-\frac{(p^2)^2}{8m_e^3c^2}$ 由 $[\vec{L},p^2]=0\Rightarrow[\vec{L},V]=0$ 即 V 已在 $|nlm\rangle$ 基对角化了，

$$\Delta_{nl}^{(1)}=-\langle nlm|\frac{(p^2)^2}{8m_e^3c^2}|nlm\rangle=-\frac{1}{2}m_ec^2Z^4\alpha^4\left[-\frac{3}{4n^4}+\frac{1}{n^3(l+\frac{1}{2})}\right].$$

$\vec{L}\cdot\vec{S}$ 效应：$V_{LS}=\frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}(\vec{L}\cdot\vec{S})$ 现在应选择 $|lsjm\rangle$ 基，对氢原子

$$\Delta_{nlj}^{(1)}=-\frac{Z^2\alpha^2}{2nl(l+1)(l+1/2)}E_n^{(0)}\begin{cases}l & j=l+\frac{1}{2}\\-(l+1) & j=l-\frac{1}{2}\end{cases}.$$

(3) 塞曼效应 $H=H_0+V_{LS}+V_B$. $V_B=-\frac{eB}{2m_ec}(L_z+2S_z)$ $H_0=\frac{p^2}{2m}+V_c(r)$.

弱场：$V_{LS}\gg V_B$，取 $|jm\rangle$ 基 $\Delta E_B=\frac{-e\hbar B}{2m_ec}m\left[1\pm\frac{1}{(2l+1)}\right]$

强场（帕邢-巴克极限）取 $|lm_l\rangle$ 基 $\Delta E_B=\frac{\hbar^2m_lm_s}{2m_e^2c^2}\left\langle\frac{1}{r}\frac{dV_c}{dr}\right\rangle$

变分法. 可用于求基态能量上限：$\bar{H}\geq E_0$ 其中 $\bar{H}=\langle\tilde{0}|H|\tilde{0}\rangle/\langle\tilde{0}|\tilde{0}\rangle$.

时间相关势　两种极限情况：瞬变近似与绝热近似

瞬变近似：$U(t,t_0)\to 1$　即波函数不变

绝热近似：设 $H=H(\lambda)$　λ 缓慢变化，则本征态始终为 H 本征态。　设初始 $t=0$

(i) 考虑态 $|\alpha\rangle$ 演化：$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha;t\rangle = H(t)|\alpha;t\rangle$　展开 $|\alpha;t\rangle=\sum_n c_n(t)e^{i\theta_n(t)}|n;t\rangle$　其中 $H(t)|n;t\rangle=E_n(t)|n;t\rangle$

$\theta_n(t)=-\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'$　$\Rightarrow \sum_n e^{i\theta_n(t)}\left[\dot{c}_n(t)|n;t\rangle + c_n(t)\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right]=0$　（注意：$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle \neq H(t)|n;t\rangle$）

$\Longrightarrow \dot{c}_m(t) = -\sum_n c_n(t)e^{i(\theta_n-\theta_m)}\langle m;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right]$　但 $m\neq n$ 时 $\langle m;t|\dot{H}|n;t\rangle = [E_n(t)-E_m(t)]\langle m;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right]$

$\Rightarrow \dot{c}_m(t) = -c_m(t)\langle m;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|m;t\rangle\right] - \sum_{n\neq m}c_n(t)e^{i(\theta_n-\theta_m)}\frac{\langle m;t|\dot{H}|n;t\rangle}{E_n-E_m}$

(ii) 绝热近似指可以略去上式第二项，即 $\frac{\langle m;t|\dot{H}|n;t\rangle}{E_n-E_m}\equiv\frac{1}{\tau}\ll\langle m;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|m;t\rangle\right]\sim\frac{E_m}{\hbar}$

从而 $c_n(t)=e^{i\gamma_n(t)}c_n(0)$　其中 $\gamma_n(t)=i\int_0^t\langle n;t'|\left[\frac{\partial}{\partial t'}|n;t'\rangle\right]dt'$

$\gamma_n(t)$ 是实的，因为 $0=\frac{\partial}{\partial t}\langle n;t|n;t\rangle = \left(\langle n;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right]\right)+c.c.$

若开始系统处于 $H(0)$ 的1个本征态 $|n\rangle$，则它将保持在 $H(t)$ 的本征态 $|n;t\rangle$

(iii) Berry 相　假设 H 由一个矢量参数 $\vec{R}(t)$ 描述　$H=H(\vec{R}(t))$　于是 $\langle n;t|\left[\frac{\partial}{\partial t}|n;t\rangle\right]=\langle n;t|[\nabla_R|n;t\rangle]\cdot\frac{d\vec{R}}{dt}$

$\Rightarrow \gamma_n(T)=i\int_{\vec{R}(0)}^{\vec{R}(T)}\langle n;t|[\nabla_R|n;t\rangle]\cdot d\vec{R}$　设 $\vec{R}(t)$ 沿着闭合曲线 C 移动一周，累积相位 $\gamma_n(C)=i\oint\langle n;t|[\nabla_R|n;t\rangle]\cdot d\vec{R}$

定义 $\vec{A}_n(\vec{R})=i\langle n;t|[\nabla_R|n;t\rangle]$　$\gamma_n(C)=\oint_C\vec{A}_n(\vec{R})\cdot d\vec{R}=\int[\nabla_R\times\vec{A}_n(\vec{R})]\cdot d\vec{a}=\int\vec{B}_n(\vec{R})\cdot d\vec{a}$　$\vec{B}_n(\vec{R})=\nabla_R\times\vec{A}_n(\vec{R})$

$\gamma_n(C)$ 具有"规范不变性"，指若 $|n;t\rangle\to e^{i\delta(\vec{R})}|n;t\rangle$ 附加一个 $\delta(\vec{R})$ 相位因子，则 $\vec{A}_n(\vec{R})\to\vec{A}_n(\vec{R})-\nabla_R\delta(\vec{R})$，$\gamma_n(C)$ 不变

换言之，$\gamma_n(C)$ 仅依赖 $\vec{R}(t)$ 的路径几何形状，不依赖沿路径的相位行为细节

$\vec{B}_n(\vec{R})=i[\nabla_R\langle n;t|]\times[\nabla_R|n;t\rangle]=i\sum_{m\neq n}[\nabla_R\langle n;t|]|m;t\rangle\times\langle m;t|[\nabla_R|n;t\rangle]$

取 $H(\vec R)|n;t\rangle = E_n(\vec R)|n;t\rangle$ 梯度并取 $\langle m;t|$ 内积 $\Rightarrow \langle m;t|[\nabla_R|n;t\rangle] = \frac{\langle m;t|[\nabla_R H]|n;t\rangle}{E_n - E_m}$ $(m\neq n)$.

最后得到 $\gamma_n(C) = \int \vec B_n(\vec R)\cdot d\vec a$ 其中 $\vec B_n(\vec R) = i\sum_{m\neq n} \frac{\langle n;t|[\nabla_R H]|m;t\rangle \times \langle m;t|[\nabla_R H]|n;t\rangle}{(E_n-E_m)^2}$

时间相关微扰论

使用相互作用绘景 $|\alpha,t_0;t\rangle_I = U_I(t,t_0)|\alpha,t_0;t\rangle$ $\quad i\hbar\frac{d}{dt}U_I(t,t_0) = V_I(t)U_I(t,t_0)$ $\quad U_I(t_0,t_0)=1$.

(i) $U_I(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t V_I(t')U_I(t',t_0)dt' = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^t V_I(t')dt' + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^t dt'\int_{t_0}^{t'}dt'' V_I(t')V_I(t'') + \cdots$ 称为 Dyson 级数

$U_I(t,t_0) = e^{iH_0t/\hbar}U(t,t_0)e^{-iH_0t_0/\hbar} \Rightarrow \langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle = e^{i(E_nt-E_it_0)/\hbar}\underbrace{\langle n|U(t,t_0)|i\rangle}_{\text{跃迁振幅}}$

$(|\alpha,t\rangle_I = e^{iH_0t/\hbar}|\alpha,t\rangle)$

(ii) 若 $t=t_0$ 时 系统处于 $|i\rangle$ 态，取 $|i,t_0;t_0\rangle_S = e^{-iE_it_0/\hbar}|i\rangle \Rightarrow |i,t_0;t_0\rangle_I = |i\rangle$ $\quad |i,t_0;t\rangle_I = \sum_n c_n(t)|n\rangle$

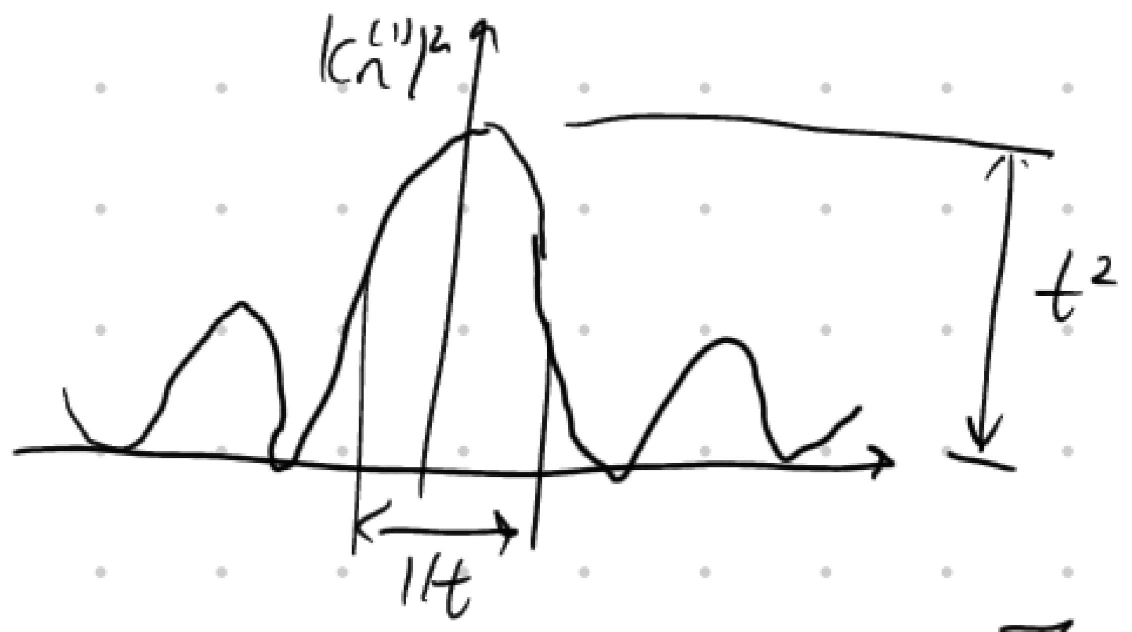
其中 $c_n(t) = \langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle \Rightarrow c_n^{(0)} = \delta_{ni}$ $\quad c_n^{(1)}(t) = \frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^t \langle n|V_I(t')|i\rangle dt' = \frac{-i}{\hbar}\int_{t_0}^t e^{i\omega_{ni}t'}V_{ni}(t')dt'$

$\left(V_I = e^{iH_0t/\hbar}Ve^{-iH_0t/\hbar},\ \omega_{ni} = \frac{E_n-E_i}{\hbar}\quad V_{ni}(t') = \langle n|V(t')|i\rangle\right)$ $\quad c_n^{(2)}(t) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\sum_m\int_{t_0}^t dt'\int_{t_0}^{t'}dt''\, e^{i\omega_{nm}t'}V_{nm}(t')e^{i\omega_{mi}t''}V_{mi}(t'')$

$|i\rangle\to|n\rangle$ 且 $i\neq n$ 的跃迁概率 $P(i\to n) = |c_n^{(1)}+c_n^{(2)}+\cdots|^2$

(iii) 常微扰 $V(t) = \begin{cases}0 & t<0\\ V & t\geq 0\end{cases}$ $\quad c_n^{(0)}=\delta_{ni}$ $\quad c_n^{(1)} = \frac{V_{ni}}{E_n-E_i}(1-e^{i\omega_{ni}t})$ $\quad |c_n^{(1)}|^2 = \frac{4|V_{ni}|^2}{|E_n-E_i|^2}\sin^2\left[\frac{(E_n-E_i)t}{2\hbar}\right]$

定义 $\omega = \frac{E_n-E_i}{\hbar}$ 则 $|c_n^{(1)}|^2 \sim \frac{4\sin^2(\frac{\omega t}{2})}{\omega^2}$ 主峰宽度 $|\omega|\sim\frac{2\pi}{t}$ $\Rightarrow \Delta t\Delta E\sim\hbar$ 才有可观的跃迁概率.



当 Δt 很大时，峰很窄 $\Rightarrow$ 跃迁只能量守恒

精确能量守恒的跃迁 $E_n=E_i$ $\quad |c_n^{(1)}|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|V_{ni}|^2t^2$

一般末态是在 E_i 附近的连续谱，此时关心总跃迁概率

$$\sum_{n, E_n\simeq E_i}|c_n^{(1)}|^2 = \int dE_n\,\rho(E_n)|c_n^{(1)}|^2 = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)\overline{|V_{ni}|^2}\rho(E_i)t \quad (t\to+\infty)$$

跃迁率 $w_{i\to[n]} = \frac{2\pi}{\hbar}\overline{|V_{ni}|^2}\rho(E_i)$ 不依赖于 t，称为 $\boxed{\text{费米黄金规则}}$

二级项 $c_n^{(2)} = \frac{i}{\hbar}\sum_m \frac{V_{nm}V_{mi}}{E_m-E_i}\int_0^t (e^{i\omega_{ni}t'} - e^{i\omega_{nm}t'})dt'$ 若 E_m 不同于 E_n 和 E_i，得到

$$W_{i\to[n]} = \frac{2\pi}{\hbar}\left|V_{ni} + \sum_m \frac{V_{nm}V_{mi}}{E_i - E_m}\right|^2 \rho(E_i)$$ （第二项表示虚跃迁 $i\to m\to n$）

(iv) 谐波微扰. 设 $V(t) = v e^{i\omega t} + v^+ e^{-i\omega t} \Rightarrow c_n^{(1)} = \frac{1}{\hbar}\left[\frac{1-e^{i(\omega+\omega_{ni})t}}{\omega+\omega_{ni}} v_{ni} + \frac{1-e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}}{-\omega+\omega_{ni}} v_{ni}^+\right]$.

与常微扰情况类似，$t\to\infty$ 时只有 $E_n \simeq E_i \pm \hbar\omega$ 的态 $|n\rangle$ 有可观跃迁，分别表示受激辐射与受激吸收.

$$W_{i\to[n]} = \frac{2\pi}{\hbar}\left\{\begin{matrix} |v_{ni}|^2 \\ |v_{ni}^+|^2 \end{matrix}\right\} \rho(E_n)\Big|_{E_n \simeq E_i \mp \hbar\omega}$$

细致平衡：$\dfrac{i\to[n] \text{ 发射率}}{[n] \text{ 的末态密度}} = \dfrac{n\to[i] \text{ 吸收率}}{[i] \text{ 的末态密度}}$.

散射理论（听课笔记）

§5.1 Lippman-Schwinger 方程

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ $\quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ $\quad$ 解 $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ $\quad$ 设 $\hat{V}\to 0$ 时 $|\psi\rangle \to |\phi\rangle$ 为本征态.

$(E-\hat{H}_0)|\psi\rangle = \hat{V}|\psi\rangle \rightsquigarrow |\psi\rangle = \frac{1}{E-H_0} V|\psi\rangle + |\phi\rangle$ $\quad$ 但 $E-H_0$ 奇异 $(E-\hat{H}_0)|\phi\rangle = 0$

为避免奇异性，定义 $|\psi^{(\pm)}\rangle = \frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}\hat{V}|\psi^{(\pm)}\rangle + |\phi\rangle$ $\quad \varepsilon\to 0 \quad \varepsilon > 0$ $\quad$（李-施方程）

$\psi^{(\pm)}(\vec{r}) = \int d^3\vec{r}\,' \langle\vec{r}|\frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}|\vec{r}\,'\rangle\langle\vec{r}\,'|V|\psi^{(\pm)}\rangle + \phi(\vec{r})$ $\quad$ 取 $|\phi\rangle = |\vec{p}\rangle$

定义 $\langle\vec{r}|\frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}|\vec{r}\,'\rangle = G_\pm(\vec{r},\vec{r}\,')$. $\quad$ 利用 $\langle\vec{r}|\vec{p}\rangle = \frac{e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$.

$G_\pm(\vec{r},\vec{r}\,') = \int d^3\vec{p}\,\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')/\hbar}\frac{1}{E-\frac{p^2}{2m}\pm i\varepsilon} = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\frac{2m}{\hbar^2}$（取 $\epsilon\to 0$）.

$\psi^{(\pm)}(\vec{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2}\int d^3\vec{r}\,'\frac{e^{\pm ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}\,'|}V(\vec{r}\,')\psi^{(\pm)}(\vec{r}\,') + \phi_{\vec{p}}(\vec{r})$

$r = |\vec{r}| \gg r'$ 时，$|\vec{r}-\vec{r}\,'| \simeq r - \frac{\vec{r}\cdot\vec{r}\,'}{r}$ 远场近似下，定义 $\vec{k}\,' = k\hat{r}$.

$\psi^{(\pm)}(\vec{r}) = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r}\int d^3\vec{r}\,' e^{\mp i\vec{k}\,'\cdot\vec{r}\,'}V(\vec{r}\,')\psi^{(\pm)}(\vec{r}\,') + \phi_{\vec{p}}(\vec{r}).$

散射振幅 $f(\vec{k}\,',\vec{k}) = -\frac{1}{4\pi}(2\pi)^3\frac{2m}{\hbar^2}\langle\vec{k}\,'|\hat{V}|\psi^{(+)}\rangle$

$$\Rightarrow \psi^{(+)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + f(\vec{k}',\vec{k})\frac{e^{ikr}}{r}\right].$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k}',\vec{k})|^2$$

$$(\nabla^2+k^2)G_\pm(\vec{r},\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}') \Longleftrightarrow (E-\hat{H}_0 \pm i\varepsilon)\hat{G}_\pm = \hat{I}, \quad \hat{G}_\pm = \frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}.$$

$$\hat{G}_\pm = \frac{1}{E-H_0\pm i\varepsilon}\int d^3p\, |p\rangle\langle p| = \int d^3p\, \frac{|p\rangle\langle p|}{E-\frac{p^2}{2m}\pm i\varepsilon}$$

不无量纲化真的很别扭

$$\hat{V}|\psi^{(\pm)}\rangle = \hat{T}|k\rangle \qquad \hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\frac{1}{E-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}\hat{T}.$$

§5.2.

一阶玻恩近似，$f^{(1)}(\vec{k}',\vec{k}) \simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\langle \vec{k}'|\hat{V}|\vec{k}\rangle = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}V(\vec{k}'-\vec{k})$.

对V作傅里叶变换，略去$(2\pi)^3$因子

例：汤川势 $V = \frac{V_0}{r}e^{-\mu r}$

$$V(\vec{q}) = \int d^3\vec{r}\, e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}V(\vec{r}) = \frac{4\pi V_0}{\mu^2+q^2}.$$

玻恩近似前提：散射波 << 入射波　取 $\vec{r}=0$ (远场近似不再适用)

$$\frac{2m}{\hbar^2}\left|\int d^3\vec{r}'\left(-\frac{1}{4\pi}\right)\frac{e^{ikr'}}{r'}V(\vec{r}')\frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}}{(2\pi)^{3/2}}\right| \ll 1$$ 时，则玻恩近似成立.

对汤川势 $V = \frac{V_0}{r}e^{-\mu r}$，长波极限 $k \ll \mu$ 时 $\frac{2m}{\hbar^2}\frac{|V_0|}{\mu} \ll 1$　短波极限 $k \gg \mu$ 时 $\frac{2m}{\hbar^2}\frac{|V_0|}{\mu k}\ln\frac{k}{\mu} \ll 1$

n阶玻恩近似：$\hat{T} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}^{(+)}\hat{V} + \hat{V}\hat{G}^{(+)}\hat{V}\hat{G}^{(+)}\cdots V$ 截断到n阶

$\Rightarrow f^{(n)}(\vec{k}',\vec{k}) \propto \langle \vec{k}' | \underbrace{\hat{V}\hat{G}\hat{V}\hat{G}}_{n-1个}\cdots\hat{V}|\vec{k}\rangle$

§5.3 光学定理

$\mathrm{Im}\, f(\theta=0) = \frac{k\sigma}{4\pi}$ $\sigma = \int d\Omega\, |f(\theta)|^2$ 证明见后面

§5.4 球面波与平面波

考虑自由粒子，基矢两种取法：(1) $\hat{H}_0$ 与 $\hat{p}$ 共同本征态 $|\vec{k}\rangle$ (2) $\hat{H}_0$ 与 $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$ 共同本征态 $|E,l,m\rangle$.

基矢变换 $\langle \vec{k}|Elm\rangle$ 设 $\vec{k}$ 对应立体角 (θ,ϕ) $\vec{k} = \hat{D}(\alpha=\phi, \beta=\theta, \gamma=0)|\vec{k}_z\rangle$.

$$\langle Elm|\vec{k}\rangle = \langle Elm|\hat{D}(\phi,\theta,0)|\vec{k}_z\rangle = \sum_{l'm'}\int dE' \langle Elm|\hat{D}(\phi,\theta,0)|E'l'm'\rangle\langle E'l'm'|\vec{k}_z\rangle.$$

$p_x|\vec{k}_z\rangle = p_y|\vec{k}_z\rangle = 0 \Rightarrow |\vec{k}_z\rangle$ 是 $\hat{L}_z$ 的 $m=0$ 的本征态

$$\langle Elm|\hat{D}(\phi,\theta,0)|E'l'm'\rangle = \delta(E-E')\delta_{ll'} D^{(l)}_{mm'}(\phi,\theta,0).$$

$\Rightarrow \langle Elm|\vec{k}\rangle = D^{(l)}_{m0}(\phi,\theta,0)\langle El0|\vec{k}_z\rangle$ 设 $\langle El0|\vec{k}_z\rangle = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, g^*_{lE}(k)$.

$\Rightarrow \langle \vec{k}|Elm\rangle = g_{lE}(k)\, Y_l^m(\theta,\phi)$ $g_{lE}(k) \propto \delta\left(E - \frac{\hbar^2k^2}{2M}\right)$ 设比例系数为 $N_l(k)$

由 $\delta(E-E')\delta_{ll'}\delta_{mm'} = \int d^3\vec{k}\, \langle E'l'm'|\vec{k}\rangle\langle\vec{k}|Elm\rangle = \int k^2dk\int\sin\theta\, d\theta\int d\phi\, Y_{l'}^{m'*}(\theta,\phi)\,\delta\left(E'-\frac{\hbar^2k^2}{2M}\right)N_{l'}^*$

$Y_l^m(\theta,\phi)\,\delta(E-\hbar^2k^2/2M)N_l.$

上式 $= \delta_{ll'}\delta_{mm'}\frac{M}{\hbar^2}k\,\delta(E'-E)N_l^2 \Rightarrow N_l = \frac{\hbar}{\sqrt{kM}}$（这里 k 可以代成 $\frac{\sqrt{2ME}}{\hbar}$，M 是质量不是角量子数）

$$\Rightarrow \langle \vec{k}|Elm\rangle = \frac{\hbar}{\sqrt{Mk}}\delta\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2M}\right)Y_l^m(\hat{k})$$

因此 $|\vec{k}\rangle = \int dE\sum_{lm}|Elm\rangle\frac{\hbar}{\sqrt{Mk}}\delta\left(E-\frac{\hbar^2k^2}{2M}\right)\cdot Y_l^{m*}(\hat{k}) = \sum_{lm}\frac{\hbar}{\sqrt{Mk}}Y_l^{m*}(\hat{k})\left|E=\frac{\hbar^2k^2}{2M},l,m\right\rangle$

利用 $\langle\vec{r}|Elm\rangle = \frac{i^l}{\hbar}\sqrt{\frac{2Mk}{\pi}}j_l(kr)Y_l^m(\hat{r})$　　由加法定理 $\sum_m Y_l^m(\hat{r})Y_l^{m*}(\hat{k}) = \frac{2l+1}{4\pi}P_l(\hat{k}\cdot\hat{r})$

$$\Rightarrow \langle\vec{r}|\vec{k}\rangle = \sum_l\frac{i^l(2l+1)}{(2\pi)^{3/2}}j_l(kr)P_l(\hat{k}\cdot\hat{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

§5.5 分波法

考虑中心势 $V(r)$　　$f(\vec{k}',\vec{k})\propto\langle\vec{k}'|\hat{V}|\psi^{(+)}\rangle = \langle\vec{k}'|\hat{T}|\vec{k}\rangle$　　$[\hat{T},\hat{L}^2]=0$，$[\hat{T},\hat{L}_\alpha]=0$　　$|\vec{k}'|=|\vec{k}|$

用球面波态展开　$f(\vec{k}',\vec{k})\propto\sum_{lm}\sum_{l'm'}\frac{\hbar^2}{kM}Y_{l'}^{m'}(\hat{k}')Y_l^{m*}(\hat{k})\langle E,l',m'|\hat{T}|E,l,m\rangle$ $\left(E=\frac{\hbar^2k^2}{2M}\right)$

可设 $\langle E,l',m'|\hat{T}|E,l,m\rangle = \delta_{ll'}\delta_{mm'}T_l(E)$

$$\Rightarrow f(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{M}{2\pi\hbar^2}(2\pi)^3\sum_{lm}\frac{\hbar^2}{Mk}Y_l^m(\hat{k}')Y_l^{m*}(\hat{k})T_l\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)$$

$f(\vec{k}',\vec{k})$ 只与 $\vec{k}'$ 与 $\vec{k}$ 夹角有关，可设 $\vec{k}=k\hat{z}$，　$Y_l^m(k\hat{z}) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\delta_{m0}$　　$Y_l^0(\hat{k}') = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)$

设 $f_l(k) = -\frac{\pi}{k} T_l(E=\frac{\hbar^2k^2}{2m})$ $\Rightarrow$ $f(\vec{k}';\vec{k}) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)f_l(k)P_l(\cos\theta)$. (分波法)

$\sigma = \int d\Omega |f(\cos\theta)|^2 = \sum_l 4\pi(2l+1)|f_l|^2$

$\psi^{(+)}(\vec{r}) \to \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vec{k}',\vec{k})\right]$ $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_l i^l(2l+1)j_l(kr)P_l(\cos\theta)$.

$\Rightarrow \psi^{(+)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_l (2l+1)P_l(\cos\theta)\left[i^l j_l(kr) + \frac{e^{ikr}}{r}f_l(k)\right]$. 利用 $j_l(kr) \to \frac{1}{2ikr}\left[e^{i(kr-\frac{l}{2}\pi)} - e^{-i(kr-\frac{l}{2}\pi)}\right]$

$\Rightarrow \psi^{(+)}(\vec{r}) \to \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_l (2l+1)\frac{1}{2ik}P_l(\cos\theta)\left[\underbrace{(1+2ikf_l(k))\frac{1}{r}e^{ikr}}_{\text{出射部分}} - \underbrace{\frac{1}{r}e^{-i(kr-l\pi)}}_{\text{入射部分}}\right]$.

讨论：(1) 当 $V(r)=0$，$f_l(k)=0$ 入射与出射部分系数相同.

(2) 概率守恒 $\Rightarrow$ $|1+2ikf_l(k)| = 1$ 入射与出射的几率流大小相同，几率密度不变.

可设 $1+2ikf_l(k) = e^{2i\delta_l}$

$f_l(k) = \frac{e^{2i\delta_l}-1}{2ik} = \frac{\sin\delta_l}{k}e^{i\delta_l} = \frac{1}{k(\cot\delta_l - i)}$ δ_l：相移（幺正条件）.

$\Rightarrow f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta)$. 光学定理 $\mathrm{Im} f(\theta=0) = \frac{k}{4\pi}\sigma = \sum_{l=0}^{\infty}\frac{2l+1}{k}\sin^2\delta_l$.

(3) 当 $\delta_l = \frac{\pi}{2}$ 时，$|f_l(k)|$ 最大 (共振条件) 系统中的价束缚态(能量最大的束缚态)与散射态的最低能量简并.

对短程势，设力程为 R　$r>R$ 时可近似忽略 $V(r)$ 取自由粒子球面波波函数为近似解.

自由粒子　$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}\right]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r})$

$\Rightarrow \psi(\vec{r})=f_l(r)\,Y_l^m(\theta,\phi)$.　$f_l(r)$: 径向函数 满足 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}u_l+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}u_l=Eu_l$.　$(u_l=rf_l)$

f_l 一般解　$f_l=c_1 j_l(kr)+c_2 n_l(kr)$.　$(E=\frac{\hbar^2k^2}{2m})$　$n_l(kr)$ 在 $r\to 0$ 发散 不能出现在含有原点的区域

汉克尔函数　$h_l^{(1)}=j_l+in_l \xrightarrow{r\to\infty} \frac{1}{ikr}e^{i(kr-\frac{l\pi}{2})}$

$h_l^{(2)}=j_l-in_l \xrightarrow{r\to\infty} \frac{-1}{ikr}e^{-i(kr-\frac{l\pi}{2})}$

$l=0$ 时, $j_0(\rho)=\frac{\sin\rho}{\rho}$　$n_0(\rho)=-\frac{\cos\rho}{\rho}$ $(\rho=kr)$ $l=1$, $j_1(\rho)=\frac{\sin\rho}{\rho^2}-\frac{\cos\rho}{\rho}$　$n_1(\rho)=\frac{\cos\rho}{\rho^2}-\frac{\sin\rho}{\rho}$

设散射态波函数　$\langle\vec{r}|\psi^{(+)}\rangle=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_l i^l(2l+1)A_l(r)P_l(\cos\theta)$.　(设 V 为中心势)

$r>R$ 时, 取 $A_l(r)=c_l^{(1)}h_l^{(1)}(kr)+c_l^{(2)}h_l^{(2)}(kr)$

$r\to\infty$ 时 $\langle\vec{r}|\psi^{(+)}\rangle=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\sum_l(2l+1)\frac{1}{ikr}\left[c_l^{(1)}e^{ikr}-c_l^{(2)}e^{-i(kr-l\pi)}\right]$.

与分波法得到的 $\langle\vec{r}|\psi^{(+)}\rangle$ 对比 $\Rightarrow$ $c_l^{(1)}=\frac{1}{2}e^{2i\delta_l}$　$c_l^{(2)}=\frac{1}{2}$.

$\Rightarrow A_l(r)=e^{i\delta_l}\left[\cos\delta_l\, j_l(kr)-\sin\delta_l\, n_l(kr)\right]$.　$A_0(r)=\frac{e^{i\delta_0}}{kr}\sin(kr+\delta_0)$

利用在球面 $r=R$ 处 连续条件　$\beta=\frac{A_l'(r)}{A_l(r)}$　有 $\beta|_{r=R^-}=\beta|_{r=R^+}$.

给定 $V(r)$ ⇒ 解球内本征函数，由连续条件 ⇒ 确定相移 δ_l.

例：硬球势 $V(r)=\begin{cases}\infty & r<R\\ 0 & r\geq R\end{cases}$ 边界条件 $A_l(R)=0$　$A_l(r\to\infty)\to 0$

$$\Rightarrow \tan\delta_l=\frac{j_l(kR)}{n_l(kR)}\qquad \tan\delta_0=-\tan kR\Rightarrow\delta_0=-kR.\quad A_0(r)=\frac{e^{-kR}}{kr}\sin k(r-R)$$

$kR\ll1$ 时 $j_l(kr)\propto(kr)^l$　$n_l(kr)\propto(kr)^{-l-1}$ $(kr\to0)$ $\Rightarrow\tan\delta_l\propto(kR)^{2l+1}$

对低能问题，$l\uparrow$，$\delta_l\to0$，由 $\sigma=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{k^2}(2l+1)\sin^2\delta_l$，对 σ 贡献最大的分波为 $l=0$（S波）

$\sigma\simeq4\pi R^2$　比经典情况 $\sigma=\pi R^2$ 大4倍（经典相当于 $\hbar\to0$，$kR\gg1$）

§5.6 低能散射态与束缚态

利用 $f(\vec{k}',\vec{k})\propto\langle\vec{k}'|V|\psi^{(+)}\rangle$　　$\frac{e^{i\delta_l}\sin\delta_l}{k}=-\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty dr\ j_l(kr)V(r)A_l(r)$. 设力程为R，

展开　　展开　展开

$$A_l(r)\text{满足}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\underbrace{\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}+V(r)}_{V_{eff}}\right]A(r)=EA(r)$$

比较 $\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mR^2}$ 与 $\frac{\hbar^2k^2}{2m}$　当 $l\gg kR$ 时，离心势比 $V(r)$ 更重要，散射势对散射态影响较小.

⇒ 对低能问题，最重要的是 l 比较低的分波

以方形势为例 $V(r)=\begin{cases}V_0 & r<R\\ 0 & r\geq R\end{cases}$ 低能下只考虑 s 波散射 $r\geq R$ 时 $A_0(r)=\frac{e^{i\delta_0}}{kr}\sin(kr+\delta_0)$

$r<R$ 时 $-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)A_0(r)=(E-V_0)A_0(r)$.

$E>0$ 时

$E\geq V_0$ 时 $A_0(r)=\frac{C}{r}\sin(k'r)$ $k'=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$

$E<V_0$ 时 $A_0(r)=\frac{C'}{r}\sinh(k'r)$ $k'=\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ 利用 $\beta=\frac{A_0'(r)}{A_0(r)}$ 在 $r=R$ 连续.

$\beta|_{R^+}=k\cot(kR+\delta_0)-\frac{1}{R}$ 取 $E>V_0$, $\beta|_{R^-}=k'\cot(k'R)-\frac{1}{R}$

$\Longrightarrow k'\tan(kR+\delta_0)=k\tan k'R$ $(E>V_0)$ $E<V_0$ 时 $k'\tan(kR+\delta_0)=k\tanh(k'R)$

零能极限 $k\to0$ $k'\to\sqrt{\frac{2m|V_0|}{\hbar^2}}$ $V_0<0$ 时 非共振时 $\frac{\tan\delta_0}{k}\to$ 常数 定义 $\lim\limits_{k\to0}k\cot\delta_0=-\frac{1}{a}$

a 为散射长度, $R-a=k'^{-1}\tan k'R$ $A_0(r)\propto\left(1-\frac{a}{r}\right)$ 即 a 为 $A_0(r)$ 在 $k\to0$ 的零点位置.

利用 $f_l=\frac{e^{i\delta_l}\sin\delta_l}{k}\to-a$, $\sigma=\sum_l 4\pi(2l+1)|f_l|^2\to4\pi a^2$ 即 a 反映 $k\to0$ 时散射截面大小

低能散射与形状无关 ($k\to0$ 时 唯一参量即 散射长度 a) 吸引势 $a<0$ 排斥势 $a>0$

讨论: (1) 共振 $E>V_0$ 时, 当 $k'R=(n+\frac{1}{2})\pi$ 时 (n 为整数) $\Longrightarrow\begin{cases}\delta_0=(m+\frac{1}{2})\pi & (m\in\mathbb{Z})(\text{后取 }k\to0\text{ 极限})\\ a\to\infty\end{cases}$

S 波散射截面最大. $E<V_0$ 时不会有共振发生.

(2) δ_0 随 $|V_0|$ 变化关系. $V_0\to0^-$ 时, $a\to0^-$, $\delta_0\to0^+$ $V_0<0$ 且 $|V_0|\uparrow$, $k'\uparrow$, $|a|\uparrow$, $|\sigma|\uparrow$,

当 $k'R=\frac{\pi}{2}$ 时 $\delta_0=\frac{\pi}{2}$. $V_0\to0^+$ 时 $a\to0^+$

(接下页).

束缚态：$E<0$　$A_0(r)$ 指数衰减　定义 $u_0(r)=rA_0(r)$　对 $r>R$ 时，$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u_0}{dr^2}=Eu_0(r)$

(承上页)

$\Rightarrow u_0(r)\sim Ce^{-\kappa r}$　$\kappa=\sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$　当 $r<R$ 时 $u_0(r\to 0)=0$，$u_0(r)=\begin{cases}C'\sin k'r & E>V_0\\ C'\sinh k'r & E<V_0\end{cases}$　$k'=\sqrt{\frac{2m|E-V|}{\hbar^2}}$

由 $\beta=\frac{u_0'(r)}{u_0(r)}$ 在 $r=R$ 处连续性　$-\kappa=\begin{cases}k'\cot k'R & E>V_0\\ k'\coth k'R & E<V_0 \text{ 不存在}\end{cases}$

$\Rightarrow V_0>0$ 时不存在束缚态（物理上：只有吸引势能才能把粒子束缚在散射中心附近）考虑 $V_0<0$ 时，

V_0 非常弱时　$\cot(k'R)>0$，也不存在束缚态。只有当 $\cot(k'R)<0$ 时才有解

当 $k'R\to(n+\frac{1}{2})\pi+0^+$ 时，$\cot k'R\to 0^-$，$\kappa\to 0^+$，$E\to 0^-$　发生共振时出现零能的浅束缚态

$a\simeq -k'\tan(k'R)\to-\infty$

浅束缚态能量 $E=-\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}\simeq-\frac{\hbar^2}{2m}k'^2\cot^2 k'R\simeq-\frac{\hbar^2k'^4}{2ma^2}\propto-\frac{1}{a^2}$

§5.7. 形式散射理论

$t\to-\infty$ 时，粒子离散射中心非常远，处在一个波包态上

$$|\phi_0(t)\rangle=\int d^3\vec{p}\;C(\vec{p},\underbrace{\vec{p}_0}_{\text{波包中心动量}},\underbrace{\Delta}_{\text{波包宽度}})\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_pt}\,|\vec{p}\,\underbrace{\nu}_{\text{自旋量子数}}\rangle$$

$t=0$ 时 波包到达散射中心；　$t\to+\infty$ 时 波包散射到远离散射中心的位置

$$|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H(0-\tau)}|\phi_0(\tau)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat H\tau}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0\tau}\, \underbrace{|\phi_0(0)\rangle}$$ → 假设 $\hat V=0$ 时 粒子在 $t=0$ 的态矢量.

($\tau<T$, T为粒子进入力程的时刻)

相互作用表象 $\hat A^{(I)} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat H t}\,\hat A^{(S)}\, e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H t}$

$$|\psi^{(I)}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Vt}|\psi^{(S)}(0)\rangle = U_I(t,0)|\psi^{(I)}(0)\rangle$$

$$|\psi(0)\rangle = \hat U_I^{\dagger}(\tau,0)|\phi_0(0)\rangle = \hat U(0,\tau)|\phi_0(0)\rangle$$

$$i\hbar\frac{d}{d\tau}\hat U(0,\tau) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat H\tau}(-V)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\hat H_0\tau} \Rightarrow \hat U(0,-\infty) = 1+\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dt\,\theta(-t)\,e^{\frac{iHt}{\hbar}}\,V\,e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}dt\,\theta(-t)\,e^{i\omega t} = \lim_{\epsilon\to0^+}\int_{-\infty}^{0}dt\,e^{i\omega t+\epsilon t} = \lim_{\epsilon\to0^+}\frac{1}{\epsilon+i\omega} = \lim_{\epsilon\to0^+}\frac{i}{-\omega+i\epsilon}$$

$$\Rightarrow \theta(-t)\,e^{\frac{iHt}{\hbar}} = \frac{i}{2\pi}\lim_{\epsilon\to0^+}\int_{-\infty}^{+\infty}dE\,\frac{1}{E-\hat H+i\epsilon}\,e^{-\frac{i}{\hbar}(\hat H-E)t}\,e^{i\frac{Ht}{\hbar}} = \frac{i}{2\pi}\lim_{\epsilon\to0^+}\int_{-\infty}^{\infty}dE\,\frac{1}{E-\hat H+i\epsilon}\,e^{\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$\Rightarrow \hat U(0,-\infty) = 1+\frac{1}{2\pi\hbar}\lim_{\epsilon\to0^+}\int_{-\infty}^{+\infty}dt\int_{-\infty}^{+\infty}dE\,\frac{1}{E-H+i\epsilon}\,e^{\frac{iEt}{\hbar}}\,V\,e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}$$

$$= 1+\lim_{\epsilon\to0^+}\int_{-\infty}^{\infty}dE\,\frac{1}{E-H+i\epsilon}V\,\delta(E-H_0)$$

$\delta(E-H_0)$可理解为$\sum_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\,\delta(E-E_n)$

$$= \lim_{\epsilon\to0^+}\int_{-\infty}^{\infty}dE\,\Lambda_\epsilon(E)\,\delta(E-H_0) \qquad \Lambda_\epsilon(E) = 1+\frac{1}{E-H+i\epsilon}V$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}dE\,\Lambda(E)\,\delta(E-H_0) \qquad \Lambda(E) = \lim_{\epsilon\to0}\Lambda_\epsilon(E).$$

由 $|\psi(0)\rangle = \hat U(0,-\infty)|\phi_0(0)\rangle$ 取波包宽度 $\Delta\to0$

$$|\psi^{(+)}_{\vec p\nu}\rangle = \hat U(0,-\infty)|\vec p\nu\rangle = |\vec p\nu\rangle + \frac{1}{E-H+i\epsilon}V|\psi^{(+)}_{\vec p\nu}\rangle$$ (LS方程)

ν → 自旋

($E=p^2/2m$).

$$\hat U(0,+\infty) = \int_{-\infty}^{+\infty}dE\lim_{\epsilon\to0^-}\Lambda_\epsilon(E)\,\delta(E-\hat H_0)$$

$U(0,\pm\infty)$称为 Møller 波算符

性质：(1) $H|\psi^{(\pm)}_{\vec{p}\nu}\rangle = E_p|\psi^{(\pm)}_{\vec{p}\nu}\rangle$ （利用 L-S 方程，两边 $\times(E_p-H\pm i\epsilon)$ 利用 $(E_p-H_0)|\vec{p}\nu\rangle=0$）

意义：弹性散射

(2) 散射振幅 $f^{(\pm)}_{\nu'\nu}(\vec{p}',\vec{p}) = \langle\vec{p}'\nu'|V|\psi^{(\pm)}_{\vec{p}\nu}\rangle$

(3) $HU(0,\pm\infty) = U(0,\pm\infty)H_0$

(4) $\langle\psi^{(\pm)}_{\vec{p}'\nu'}|\psi^{(\pm)}_{\vec{p}\nu}\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}')\delta_{\nu\nu'}$ （正交性）

(5) 若存在束缚态，散射态不具有完备性 $\sum_\nu\int d^3p\,|\psi^{(\pm)}_{\vec{p}\nu}\rangle\langle\psi^{(\pm)}_{\vec{p}\nu}| \neq I$ $U(0,\pm\infty)U(\pm\infty,0)\neq I$

散射矩阵 $S = U(+\infty,-\infty) = U(+\infty,0)U(0,-\infty)$

性质：(1) 对中心势，$[S,D(R)]=0$ S 具有旋转对称性

(2) 若 $[V,\Theta]=0$ $[H,\Theta]=0$ 利用 $U(0,+\infty) = \int_{-\infty}^{\infty}dE\,\Lambda_\epsilon(E)\,\delta(E-H_0)$

$\Rightarrow \Theta S\Theta^{-1} = \Theta U(+\infty,0)U(0,-\infty)\Theta^{-1} = U(-\infty,0)U(0,+\infty) = S^\dagger$

(3) $[S,H_0]=0$ 利用 $H_0S = H_0U(\infty,0)U(0,-\infty) = U(\infty,0)HU(0,-\infty) = SH_0$

(4) $\langle\vec{p}'\nu'|S-1|\vec{p}\nu\rangle = \frac{i}{2\pi\hbar m}f_{\nu'\nu}(\vec{p}',\vec{p})\,\delta(E_{p'}-E_p)$

(5) 互逆定理 若有时间反演对称性，则 $f_{\nu'\nu}(\vec{p}',\vec{p}) = f_{-\nu,-\nu'}(-\vec{p},-\vec{p}')$

$S|E,l,m\rangle = e^{2i\delta_l}|E,l,m\rangle$

附：柯书讲得💩 网上找到参考 Taylor 的 ppt 内容整理如下：

势散射 ① 时间无关表述 $\psi_p^+ \xrightarrow{r\to\infty} (2\pi)^{-3/2}\left[e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} + f(E,\theta)\frac{e^{ipr}}{r}\right]$ 依据此边界条件

解全空间 ψ_p^+ 得到散射态.

② 时间依赖表述 自由粒子 $\longrightarrow$ 碰撞 $\longrightarrow$ 自由粒子

柯书与 Sakurai 讲得是 ②.

渐近入射/出射态：$U(t)|\psi\rangle \xrightarrow{t\to-\infty} U_0(t)|\psi_{in}\rangle$

$$U(t)|\psi\rangle \xrightarrow{t\to+\infty} U_0(t)|\psi_{out}\rangle$$

期望有渐近态的散射态 $|\psi\rangle$ 和没有渐近态的束缚态张成整个 Hilbert 空间.

$|\psi\rangle$ 的极限指强极限，即 $|\psi_t\rangle \xrightarrow{t\to+\infty} |\psi\rangle \iff \|\psi_t-\psi\| \xrightarrow{t\to\infty} 0$

渐近条件：$\mathcal{H}$ 中的每一个矢量都对应一个真实轨道的散射态.

$\forall |\psi_{in}\rangle \in \mathcal{H}$，$\exists |\psi\rangle$ s.t. $U(t)|\psi\rangle - U_0(t)|\psi_{in}\rangle \xrightarrow{t\to-\infty} 0$

对 $t\to+\infty$，$|\psi_{out}\rangle$ 同样. 成立条件称为渐近条件.

一个充分条件是 $\int d^3x\,|V(\vec{x})|^2 < \infty$ (V短程) 库仑势不满足.

渐近条件下散射理论才适用. 下面假设渐近条件总成立.

上面可写成：

$$|\psi\rangle = \left[\lim_{t\to-\infty} U^{+}(t)U_0(t)\right]|\psi_{in}\rangle = \Lambda_{+}|\psi_{in}\rangle$$ 对出射态同理，定义 $\Lambda_{t} = \lim_{t\to\mp\infty} U^{+}(t)U_0(t)$.

称为 Møller 波算符，是幺正算符极限，是 Isometric 算符.

Isometric operator 定义：定义域是整个 $\mathcal{H}$. 保 norm $\forall u\in\mathcal{H}$. $\|Uu\|=\|u\|$.

注意：(i) 一般来说值域不是 $\mathcal{H}$. (ii) 不一定保内积. (iii) 有限维空间 Isometric 与幺正无区别，只有在∞维空间有区别. 例：$\{|n\rangle\}$ $(n=1,2,\cdots)$. $\Lambda|n\rangle=|n+1\rangle$. 仅当 $n\geq2$ 时 Λ 有逆：

$\Lambda^{-1}|n\rangle=|n-1\rangle$ $(n\geq2)$. 于是有 $\Lambda^{-1}\Lambda=I$. 但 $\Lambda\Lambda^{-1}\neq I$.

算符的强收敛：$\forall|\chi\rangle\in\mathcal{H}$ $\exists|\phi_x\rangle\in\mathcal{H}$ s.t. $\lim_{t\to\infty}\|A_t|\chi\rangle-|\phi_x\rangle\|=0$,

称 $\lim_{t\to\infty}A_t=A$, $A|\chi\rangle=|\phi_x\rangle$.

注意：在∞维空间 $A_t\to A$ $\not\Rightarrow$ $A_t^{+}\to A^{+}$. $A_t\to A, B_t\to B$ $\not\Rightarrow$ $A_tB_t\to AB$

即：极限与厄米共轭和乘积不可交换顺序.

幺正算符极限不一定仍幺正 $U_t|\psi\rangle\to\Lambda|\psi\rangle$ $(\forall|\psi\rangle\in\mathcal{H})$. $\Rightarrow \|\Lambda\psi\|=\lim_t\|U_t\psi\|=\|\psi\|$

即幺正算符极限只能给出是 isometric 的，$\Lambda^{+}\Lambda=1$ 但一般 $\Lambda\Lambda^{+}\neq1$.

注意散射条件不能反过来，即 $\mathcal{H}$ 中任何一个态 $|\phi\rangle$ 的轨道 $U(t)|\phi\rangle$ 不一定有渐近态（可能有束缚态）

即 渐近态 $\longrightarrow$ 轨道　　轨道 $\not\longrightarrow$ 渐近态.

物理上期望：① 有渐近入射态的轨道(散射态)都有渐近出射态.
② 所有散射态与束缚态张成整个 Hilbert 空间.

正交性：满足散射条件的势，散射态空间与束缚态空间正交 $\mathcal{R}_\pm \perp \mathcal{R}$.

证明：若 $|\psi\rangle \in \mathcal{R}_+$ 为散射态、$|\phi\rangle \in \mathcal{R}$ 为束缚态、$\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|U^\dagger(t)\,U(t)|\psi\rangle \quad \forall t.$

$$= e^{iEt}\langle\phi|U(t)|\psi\rangle = \lim_{t\to-\infty} e^{iEt}\langle\phi|U(t)|\psi\rangle = \lim_{t\to-\infty} \underbrace{e^{iEt}\langle\phi|}_{\text{局域在势里}}\underbrace{U_0(t)|\psi_{in}\rangle}_{\infty\text{处波包}} = 0.$$

一个散射理论是渐近完备的，如果 $\mathcal{R}_+ = \mathcal{R}_-$　　这时 $\mathcal{R}_+ \oplus \mathcal{R}_- = \mathcal{H}$ 上述2点期望成立.

总结：1. 整个 Hilbert 空间分为互相正交的两部分，散射态与束缚态.

2. 对散射态 $|\psi\rangle$，轨道 $U(t)|\psi\rangle$ 具有入射/出射渐近态.　$U(t)|\psi\rangle \xrightarrow{t\to-\infty} U_0(t)|\psi_{in}\rangle$

$\xrightarrow{t\to+\infty} U_0(t)|\psi_{out}\rangle$

3. 对 $\forall\,|\psi_{in}\rangle\,(|\psi_{out}\rangle) \in \mathcal{H}$，唯一标记一个轨道 $U(t)|\psi\rangle$ 的渐近入/出射态，

$$|\psi\rangle = \Omega_+|\psi_{in}\rangle = \Omega_-|\psi_{out}\rangle.$$

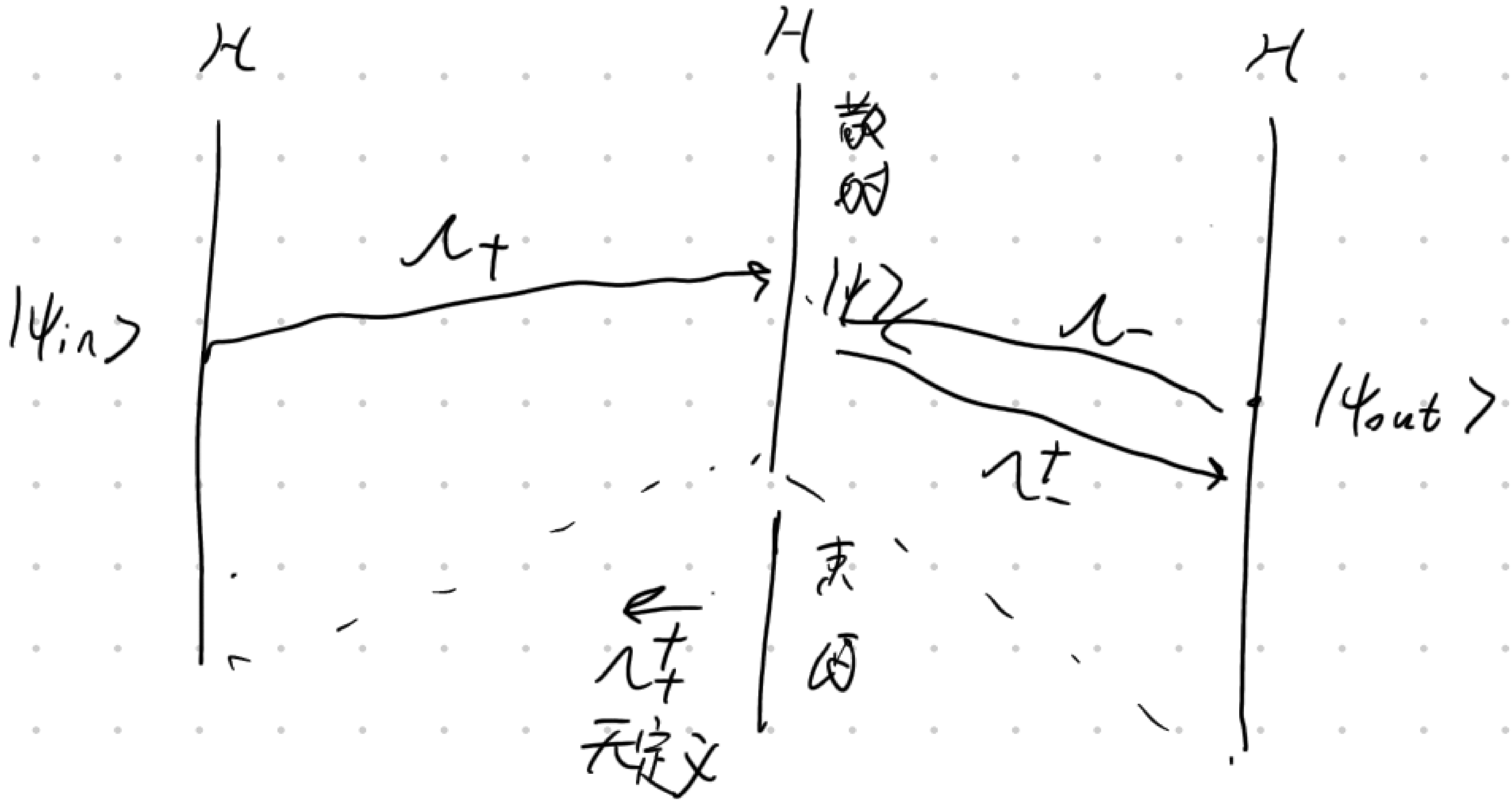
4. $\Omega_\pm$ 是 isometric 的，但只有在不存在束缚态时是幺正的.

5. 束缚态 $|\phi\rangle$ 也唯一标记一个散射态的入射态　$U_0(t)|\phi\rangle$ 也会弥散掉 但 $U(t)|\phi\rangle$ 不会弥散掉.

$\Omega_\pm$ 在存在束缚态时不是幺正的

$$\Omega_\pm^\dagger \Omega_\pm = 1$$

但 $\Omega_\pm \Omega_\pm^\dagger \neq 1$



实际问题中不关心中间态。 由 $\Omega_-^\dagger \Omega_- = 1$，$|\psi\rangle = \Omega_- |\psi_{out}\rangle \Rightarrow |\psi_{out}\rangle = \Omega_-^\dagger |\psi\rangle = \Omega_-^\dagger \Omega_+ |\psi_{in}\rangle$.

定义 $S = \Omega_-^\dagger \Omega_+$ 为散射算符 $\quad |\psi_{out}\rangle = S|\psi_{in}\rangle$

$\Omega_\pm$ 渐近完备时 $\Omega_+ \mathcal{H} = \Omega_- \mathcal{H} \Rightarrow S\mathcal{H} = \mathcal{H}$ $\quad$ $\Omega_\pm$ 都是 isometric $\Rightarrow$ S 是 isometric

因此，S 是幺正的 $\quad$ 意义：概率守恒 $\langle \psi_{out} | \psi_{out} \rangle = \langle \psi_{in} | \psi_{in} \rangle = 1$

Møller 算符有性质：$H \Omega_\pm = \Omega_\pm H_0$ （弹性）. 因此 $\Omega_\pm^\dagger H \Omega_\pm = H_0$

弹性又可表述为：$[S, H_0] = 0$. $\quad$ 进一步定义 $S = 1 + R$.

散射理论（Sakurai）

$H = H_0 + V(\vec{r}) \quad H_0 = \frac{p^2}{2m}$ 　 $|\alpha, t; t_0\rangle_I = U_I(t,t_0)|\alpha, t_0; t_0\rangle_I$ 　 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t,t_0) = V_I(t) U_I(t,t_0)$

其中 $V_I(t) = \exp(iH_0t/\hbar) V \exp(-iH_0t/\hbar)$. 　 $U_I(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_I(t') U_I(t',t_0)dt'$.

$|i\rangle \to |n\rangle \quad \langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\sum_m \langle n|V|m\rangle \int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{nm}t'} \langle m|U_I(t',t_0)|i\rangle dt'$.

箱归一化 $\Rightarrow \langle \vec{x}|\vec{k}\rangle = \frac{1}{L^{3/2}} \exp(i\vec{k}\cdot\vec{x})$ 　 $\{|\vec{k}\rangle\}$ 是离散的 $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(\vec{n}_x + \vec{n}_y + \vec{n}_z)$

定义 T: 　 $\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} T_{ni} \int_{t_0}^{t} e^{i\omega_{ni}t' + \epsilon t'} dt'$. 　($\varepsilon > 0$ 且 ε 足够小)

其中 $\epsilon > 0$ 且 $t \ll 1/\epsilon$. 取 $\epsilon \to 0$ ~~再~~ 取 $t \to +\infty$ 即为 $t \to +\infty$ 情形解.

散射矩阵 $S_{ni} = \lim_{t\to+\infty}\left[\lim_{\epsilon\to 0} \langle n|U_I(t,-\infty)|i\rangle\right] = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} T_{ni} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega_{ni}t'} dt'$

$= \delta_{ni} - 2\pi i\,\delta(E_n - E_i)\, T_{ni}$.

跃迁率 $w(i\to n) = \lim_{t\to+\infty}\left[\lim_{\epsilon\to 0} \frac{d}{dt}|\langle n|U_I(t,-\infty)|i\rangle|^2\right]$ 　 $(i \neq n)$.

$\langle n|U_I(t,-\infty)|i\rangle = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar} T_{ni} \frac{e^{i\omega_{ni}t + \epsilon t}}{i\omega_{ni} + \epsilon}$.

$w(i\to n) = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i)$

$|i\rangle = |\vec{k}\rangle$, $|n\rangle = |\vec{k}'\rangle$ 的态密度 $(|\vec{k}| = |\vec{k}'|)$ 　 $\rho(E_n) = \frac{L^3 p^2 dp\, d\Omega}{(2\pi\hbar)^3 dE} = \frac{mk}{\hbar^2}\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d\Omega$.

对末态 $|n\rangle = |\vec{k}'\rangle$ 附近态积分 　 $w(i\to n) = \frac{mkL^3}{(2\pi)^2\hbar^3} |T_{ni}|^2 d\Omega$.

粒子流 $= \frac{1}{L^2}\cdot\frac{1}{L/v} = \frac{v}{L^3}$　对 $|\vec{k}\rangle$，$\vec{j}(\vec{x},t) = \left(\frac{\hbar}{m}\right)\frac{\vec{k}}{L^3} = \frac{\vec{v}}{L^3}$

$d\sigma = \frac{w}{flux}$　$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |T_{ni}|^2$.

$$\langle n|U_I(t,-\infty)|i\rangle = \delta_{ni} + \frac{1}{\hbar}T_{ni}\frac{e^{i\omega_{ni}t+\varepsilon t}}{-\omega_{ni}+i\varepsilon} = \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\sum_m V_{nm}\int_{-\infty}^{t} e^{i\omega_{nm}t'}\langle m|U_I(t',-\infty)|i\rangle dt'$$

$$= \delta_{ni} - \frac{i}{\hbar}\frac{1}{\hbar}\sum_m V_{nm}T_{mi}\frac{1}{-\omega_{mi}+i\varepsilon}\int_{-\infty}^{t} e^{i\omega_{ni}t'+\varepsilon t'}dt' - \frac{i}{\hbar}V_{ni}.$$

$$\Rightarrow T_{ni} = V_{ni} + \frac{1}{\hbar}\sum_m V_{nm}\frac{T_{mi}}{-\omega_{mi}+i\varepsilon} = V_{ni} + \sum_m V_{nm}\frac{T_{mi}}{E_i-E_m+i\hbar\varepsilon}$$（可解出 T_{ni}）

记 $T_{ni} = \sum_j V_{nj}\langle j|\psi^{(+)}\rangle = \langle n|V|\psi^{(+)}\rangle$（这里 $\langle j|\psi^{(+)}\rangle$ 只是一组数，在基 $\{|j\rangle\}$ 下定义出 $|\psi^{(+)}\rangle$）.

$$\Rightarrow \langle n|V|\psi^{(+)}\rangle = \langle n|V|i\rangle + \sum_m \langle n|V|m\rangle\frac{\langle m|V|\psi^{(+)}\rangle}{E_i-E_m+i\hbar\varepsilon}$$

$$|\psi^{(+)}\rangle = |i\rangle + \sum_m |m\rangle\frac{\langle m|V|\psi^{(+)}\rangle}{E_i-E_m+i\hbar\varepsilon} = |i\rangle + \frac{1}{E_i-H_0+i\hbar\varepsilon}V|\psi^{(+)}\rangle.$$　李普曼-施温格方程

$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\langle n|V|\psi^{(+)}\rangle|^2$.　定义 operator T　$T|i\rangle = V|\psi^{(+)}\rangle$.（$\langle n|T|i\rangle = T_{ni}$）

$\Rightarrow T = V + V\frac{1}{E_i-H_0+i\hbar\varepsilon}T$.　若作用于 $|i\rangle$.

V "级数" $\quad T = V + V\frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\varepsilon}V + V\frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\varepsilon}V\frac{1}{E_i - H_0 + i\hbar\varepsilon}V + \cdots$

从未来到过去散射： $U_I(t,t_0) = 1 + \frac{i}{\hbar}\int_t^{t_0} V_I(t')U_I(t',t_0)\,dt' \quad t,t' > t_0$.

T_{ni} 可由 $\langle n|U_I(t,t_0)|i\rangle = \delta_{ni} + \frac{i}{\hbar}T_{ni}\int_t^{t_0} e^{i\omega_{ni}t' - \varepsilon t'}dt'$ 定义（适应 $t_0 \to +\infty$）.

相应由 $|\psi^{(-)}\rangle \quad T|i\rangle = V|\psi^{(-)}\rangle$.

散射振幅

用 $\hbar\varepsilon$ 代替 ε $\Rightarrow |\psi^{(\pm)}\rangle = |i\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon}V|\psi^{(\pm)}\rangle$

$\langle\vec{x}|\psi^{(\pm)}\rangle = \langle\vec{x}|i\rangle + \int d^3x' \left\langle\vec{x}\right|\frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon}\left|\vec{x}'\right\rangle\langle\vec{x}'|V|\psi^{(\pm)}\rangle$. 积分方程

$G_\pm(\vec{x},\vec{x}') = \frac{\hbar^2}{2m}\left\langle\vec{x}\right|\frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon}\left|\vec{x}'\right\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_{\vec{k}',\vec{k}''}\langle\vec{x}|\vec{k}'\rangle\left\langle\vec{k}'\right|\frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon}\left|\vec{k}''\right\rangle\langle\vec{k}''|\vec{x}'\rangle$.

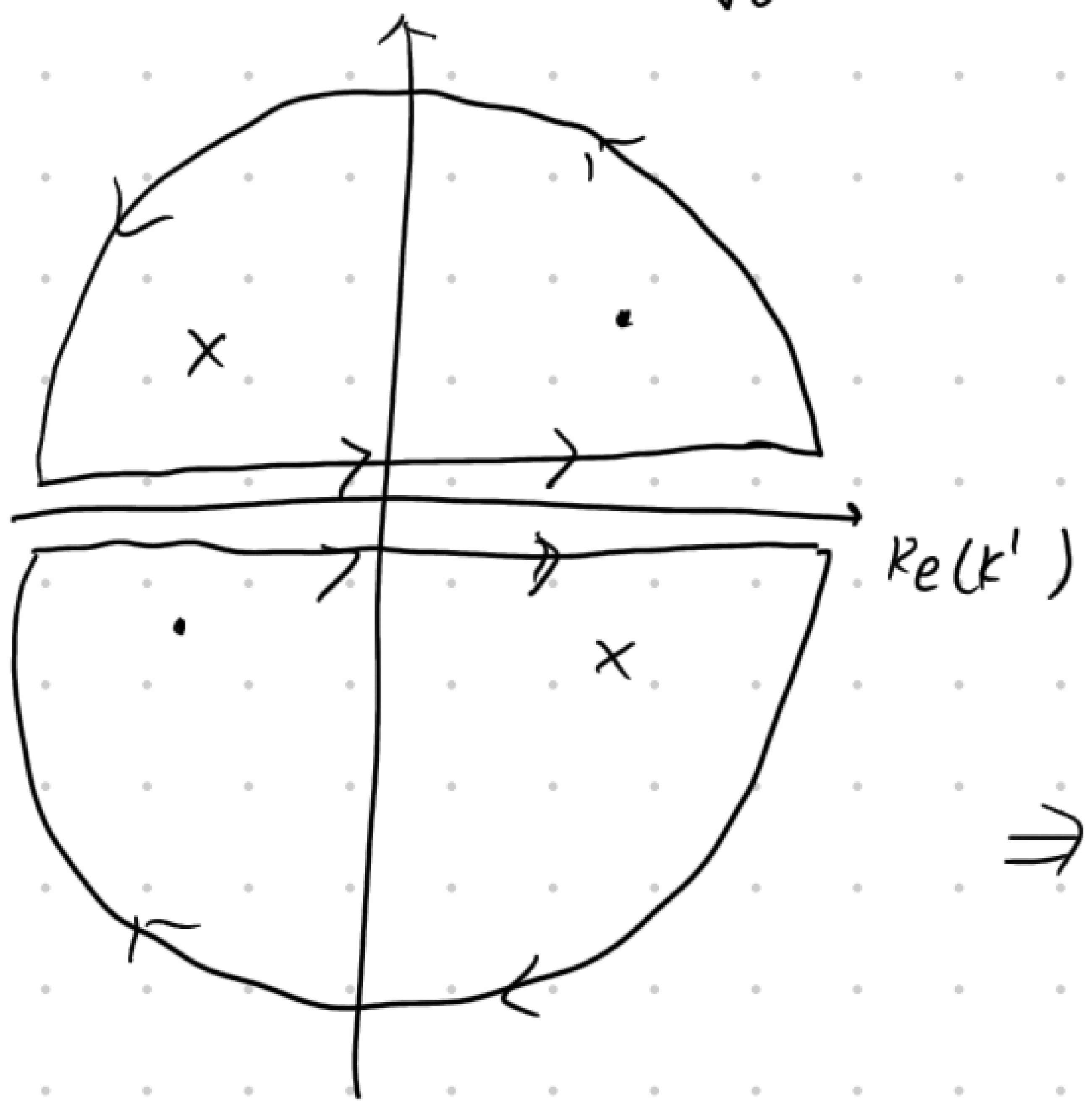
$= \frac{1}{L^3}\sum_{\vec{k}'}\frac{e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}}{k^2 - k'^2 \pm i\varepsilon}$ $\quad$ （$E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$，再次修改 ε 定义）.

取 $L \to +\infty$，$k_i = \frac{2\pi n_i}{L}$ $(i = x,y,z)$ $\Rightarrow d^3k' = \frac{(2\pi)^3}{L^3}$

$G_\pm(\vec{x},\vec{x}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k'\,\frac{e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{x}-\vec{x}')}}{k^2 - k'^2 \pm i\varepsilon}$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^{+\infty} k'^2 dk' \int_{-1}^{1} d\mu \, \frac{e^{ik'|\vec{x}-\vec{x}'|\mu}}{k^2-k'^2\pm i\varepsilon} = \frac{1}{8\pi^2}\,\frac{1}{i|\vec{x}-\vec{x}'|}\int_{-\infty}^{\infty} k' dk' \left[\frac{e^{ik'|\vec{x}-\vec{x}'|}-e^{-ik'|\vec{x}-\vec{x}'|}}{k^2-k'^2\pm i\varepsilon}\right]$$

$-(k'-k_0)(k'+k_0)$



由 $\oint_C \frac{f(z)}{z-z_0}dz = 2\pi i f(z_0)$.（C沿逆时针方向）

$k_0 = k\pm i\varepsilon$（重新定义ε，保持符号不变）

积分分为2部分，分别沿上、下圆周积分

$\Rightarrow G_\pm(\vec{x},\vec{x}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$（已令 $\epsilon\to 0$）.

它是 $(\nabla^2+k^2)G_\pm(\vec{x},\vec{x}') = \delta^{(3)}(\vec{x}-\vec{x}')$ 的解.

$$\Rightarrow \langle \vec{x}|\psi^{(\pm)}\rangle = \langle \vec{x}|i\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3\vec{x}' \, \frac{e^{\pm ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x}-\vec{x}'|}\langle \vec{x}'|V|\psi^{(\pm)}\rangle$$

假设V是定域的（local），即 $\langle \vec{x}'|V|\vec{x}''\rangle = V(\vec{x}')\,\delta(\vec{x}'-\vec{x}'')$ V在$\{|\vec{x}\rangle\}$表象下是对角的

$$\Rightarrow \langle \vec{x}'|V|\psi^{(\pm)}\rangle = V(\vec{x}')\langle \vec{x}'|\psi^{(\pm)}\rangle.$$

$$\langle \vec{x}|\psi^{(\pm)}\rangle = \langle \vec{x}|i\rangle - \frac{2m}{\hbar^2}\int d^3\vec{x}' \, \frac{e^{\pm ik|\vec{x}-\vec{x}'|}}{4\pi|\vec{x}-\vec{x}'|}V(\vec{x}')\langle \vec{x}'|\psi\rangle.$$

实际情形 $|\vec{x}| \gg |\vec{x}'|$ 记 $r=|\vec{x}|$, $r'=|\vec{x}'|$ $\alpha=\angle(\vec{x},\vec{x}')$ $|\vec{x}-\vec{x}'|\approx r-\hat{r}\cdot\vec{x}'$.
（远场条件）.

初态 $|i\rangle = |\vec{k}\rangle$ $\langle \vec{x}|\psi^{(\pm)}\rangle \approx \langle \vec{x}|\vec{k}\rangle - \frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int d^3x' \, e^{\mp i\vec{k}'\cdot\vec{x}'} V(\vec{x}')\langle \vec{x}'|\psi^{(\pm)}\rangle$ $(\vec{k}'=k\hat{r})$

$$\langle \vec{x}|\psi^{(+)}\rangle = \frac{1}{L^{3/2}}\left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \frac{e^{ikr}}{r} f(\vec{k}',\vec{k})\right] \qquad f(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\langle \vec{k}'|V|\psi^{(+)}\rangle$$

$$\langle \vec{x}|\psi^{(-)}\rangle = \frac{1}{L^{3/2}}\left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \frac{e^{-ikr}}{r} g(\vec{k}',\vec{k})\right] \qquad g(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\langle -\vec{k}'|V|\psi^{(-)}\rangle$$

$f(\vec{k},\vec{k}')$ 称为散射振幅 (scattering amplitude)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vec{k}',\vec{k})|^2$$

光学定理：$\mathrm{Im}\, f(\theta=0) = \frac{k\sigma_{总}}{4\pi}$ $\qquad \sigma_{总} = \int d\Omega \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)$ $\qquad f(\theta=0) = f(\vec{k},\vec{k})$ 为向前的散射振幅。

李-施方程：$|\psi^{(+)}\rangle = |\vec{k}\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} V|\psi^{(+)}\rangle$

$$\Rightarrow \langle \vec{k}|V|\psi^{(+)}\rangle = \left[\langle\psi^{(+)}| - \langle\psi^{(+)}|V\frac{1}{E-H_0-i\varepsilon}\right]V|\psi^{(+)}\rangle = \langle\psi^{(+)}|V|\psi^{(+)}\rangle - \underbrace{\langle\psi^{(+)}|V\frac{1}{E-H_0-i\varepsilon}V|\psi^{(+)}\rangle}_{A}$$

$f(\vec{k},\vec{k}) = -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\langle\vec{k}|V|\psi^{(+)}\rangle$ $\qquad$ 取虚部 $\qquad \mathrm{Im}\langle\psi^{(+)}|V|\psi^{(+)}\rangle = 0$

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\mathrm{Im}\left(\frac{1}{x-i\varepsilon}\right) = \pi\delta(x) \qquad \text{prove: } \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{Im}\left(\frac{1}{x-i\varepsilon}\right)dx = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{2i}\left[\frac{1}{x-i\varepsilon} - \frac{1}{x+i\varepsilon}\right]dx = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{+\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}dx$$
$$= +\pi$$

因此 $\mathrm{Im}\,A = \mathrm{Im}\left[\sum_{n,m}\langle\psi^{(+)}|V|n\rangle\langle n|\frac{1}{E-H_0-i\varepsilon}|m\rangle\langle m|V|\psi^{(+)}\rangle\right.$

$$= \mathrm{Im}\left[\sum_n \frac{1}{E_0-E_n-i\varepsilon}|\langle\psi^{(+)}|V|n\rangle|^2\right] = \pi\sum_n\delta(E_n-E_i)\overbrace{|\langle\psi^{(+)}|V|n\rangle|^2}^{|T_{ni}|^2}$$

$$\mathrm{Im}\, f(\theta=0) = +\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\pi\sum_n\delta(E_n-E_i)|T_{ni}|^2 = \frac{k}{4\pi}\sigma_{tot}$$

现在任务是给定 $V(\vec{x})$ 计算 $f(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\langle\vec{k}'|V|\psi^{(+)}\rangle = -\frac{mL^3}{2\pi\hbar^2}\langle\vec{k}'|T|\vec{k}\rangle$

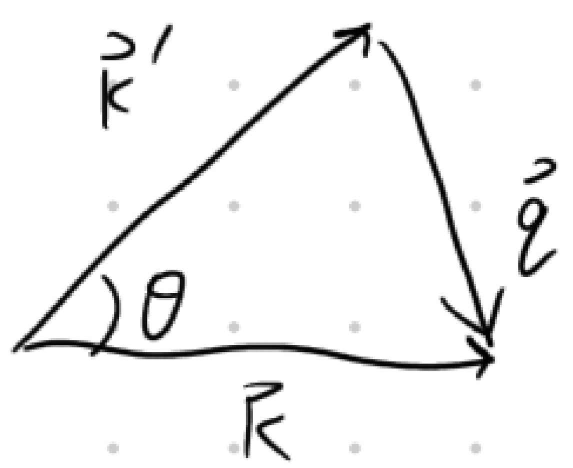
V "弱" $T = V + V\frac{1}{E_i - H_0 + i\varepsilon}V + V\frac{1}{E_i - H_0 + i\varepsilon}V\frac{1}{E_i - H_0 + i\varepsilon}V + \cdots$

一级玻恩近似：取 $T=V$ 或等价于取 $|\psi^{(+)}\rangle = |\vec{k}\rangle$

$$f^{(1)}(\vec{k}',\vec{k}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int d^3x'\, e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}'}V(\vec{x}')$$

即势 V 对 $\vec{q} = \vec{k}-\vec{k}'$ 的 Fourier 变换

~~重要~~特例：V 球对称，$V = V(r)$ $f^{(1)}(\vec{k}',\vec{k}) = f(q)$ $q = 2k\sin\frac{\theta}{2}$



$$f^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{2}\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{iq}\int_0^\infty \frac{r^2}{r}V(r)\,dr\,(e^{iqr}-e^{-iqr})\,dr = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{q}\int_0^\infty rV(r)\sin qr\,dr$$

例如，$V(r) = \begin{cases} V_0 & r\le a \\ 0 & r>a \end{cases}$ $\Rightarrow f^{(1)}(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{V_0 a^3}{(qa)^2}\left[\frac{\sin qa}{qa} - \cos qa\right]$

在 $qa = 4.49, 7.73, \ldots$ 为 0 $\Rightarrow$ 可用于确定势的半径 a.

汤川势 $V(r) = \frac{V_0 e^{-\mu r}}{\mu r}$ $f^{(1)}(\theta) = -\left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\right)\frac{1}{q^2+\mu^2}$ $q^2 = 2k^2(1-\cos\theta)$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \left(\frac{2mV_0}{\mu\hbar^2}\right)^2\frac{1}{[2k^2(1-\cos\theta)+\mu^2]^2}$$

$\mu\to 0$ 时，若 $\frac{V_0}{\mu} = ZZ'e^2$ 比值固定，$V(r)\sim\frac{ZZ'e^2}{r}$ 库仑势

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \simeq \frac{(2m)^2(ZZ'e^2)^2}{\hbar^4}\frac{1}{16k^4\sin^4(\theta/2)} = \frac{1}{16}\left(\frac{ZZ'e^2}{E_{KE}}\right)^2\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$$

$E_{KE} = \frac{|\vec{p}|^2}{2m}$ 卢瑟福散射截面

总结：球对称势下的 $f^{(1)}(\theta)$，或 $\frac{d\sigma}{d\Omega}$，仅是 q 的函数，即仅通过组合 $2k^2(1-\cos\theta)$ 依赖能量 $\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ 与 θ.

$f^{(1)}(\theta)$ 总是实的. $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ 与 V 的符号无关. 对低小的 k，$f^{(1)}(\theta) \sim -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int V(r)\,d^3x$ 与 θ 无关.

对大 q，被积函数快速衰减，$f(\theta)$ 很小.

二次量子化

对称算符 $S_N = \frac{1}{N!}\sum_{\alpha} P_\alpha$ → 全排列　　反对称算符 $A_N = \frac{1}{N!}\sum_{\alpha} \varepsilon_\alpha P_\alpha$

Fock基　玻色：$|n_i, n_j, \cdots, n_l, \cdots\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_i!\, n_j! \cdots n_l!}}\, S_N\, |1:u_i; 2:u_i; \cdots; n_i+1: u_j, \cdots\rangle$

费米

$$|u_i, u_j, \cdots, u_l, \cdots\rangle = \begin{cases} \sqrt{N!}\, A_N\, |1:u_i, 2:u_j, \cdots, \cdots\rangle \\ 0 & \text{有相同态占据} \end{cases}$$

$$|u_i, u_j, \cdots\rangle = -\,|u_j, u_i, \cdots\rangle$$

Fock Space

$$\mathcal{E}^{S}_{Fock} = \mathcal{E}_S(0) \oplus \mathcal{E}_S(1) \oplus \cdots \oplus \underbrace{\mathcal{E}_S(N)}_{\text{粒子数}} \oplus \cdots$$

$$\mathcal{E}^{A}_{Fock} = \mathcal{E}_A(0) \oplus \cdots \oplus \mathcal{E}_A(N) \oplus \cdots$$

$$\mathcal{E}^{S,A}_{Fock} = \mathcal{E}^{u_1}_{Fock} \otimes \cdots \otimes \mathcal{E}^{u_i}_{Fock} \otimes \cdots$$

→ $|u_i\rangle$ 态占据数 $\{|0\rangle, |1\rangle, \cdots\}$

$\mathcal{E}_{S,A}(0)$ 的基 $|0\rangle$ 称为真空态.

产生/湮灭算符　玻色：

$$a^\dagger_{u_i}|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = \sqrt{n_i+1}\,|n_1, \cdots, n_i+1, \cdots\rangle$$

$$a_{u_i}|n_1, \cdots, n_i, \cdots\rangle = \sqrt{n_i}\,|n_1, \cdots, n_i-1, \cdots\rangle$$

费米：$a_{u_i}^\dagger |u_j, \cdots, u_k, \cdots\rangle = |u_i, u_j, \cdots\rangle$

$$a_{u_i} |u_i, u_j, \cdots\rangle = |u_j, \cdots\rangle$$

粒子数算符 $n_{u_i} = a_{u_i}^\dagger a_{u_i}$ 　总 $N = \sum_i a_{u_i}^\dagger a_{u_i}$

对易：玻色：$[a_{u_i}, a_{u_j}] = 0$ 　$[a_{u_i}^\dagger, a_{u_j}^\dagger] = 0$ 　$[a_{u_i}, a_{u_j}^\dagger] = \delta_{ij}$

费米：$\{a_{u_i}, a_{u_j}\} = 0$ 　$\{a_{u_i}^\dagger, a_{u_j}^\dagger\} = 0$ 　$\{a_{u_i}, a_{u_j}^\dagger\} = \delta_{ij}$

基变换 $\{|u_i\rangle\} \to \{|v_s\rangle\}$.

$$a_{v_s}^\dagger = \sum_i \langle u_i|v_s\rangle a_{u_i}^\dagger \qquad a_{v_s} = \sum_i \langle v_s|u_i\rangle a_{u_i}.$$

场算符 取连续基，如 $\{|\vec r\rangle\}$ 的产生/湮灭算符 　有自旋时采用 $\{|\vec r, \nu\rangle\}$ 基.

自旋

$$\psi_\nu(\vec r) = \sum_i \langle \vec r, \nu|u_i\rangle a_{u_i} = \sum_i u_i^\nu(\vec r)\, a_{u_i}$$

$$\psi_\nu^\dagger(\vec r) = \sum_i u_i^{\nu *}(\vec r)\, a_{u_i}^\dagger$$

对易：$[\Psi_\nu(\vec r), \Psi_{\nu'}^\dagger(\vec r')] = \delta(\vec r - \vec r')\delta_{\nu\nu'}$ 　对费米是反对易

单体算符 $\hat{F}^{(N)} = \sum_{q=1}^{N} \hat{f}(q)$. 定义在 $\mathcal{E}_S(N)$ 或 $\mathcal{E}_A(N)$ 上 $\hat{F} = \hat{F}^{(1)} \oplus \hat{F}^{(2)} \oplus \cdots \oplus \hat{F}^{(N)} \oplus \cdots$

$\hat{f}(q) = \sum_{k,l} f_{kl} \, |q:u_k\rangle\langle q:u_l|$ $f_{kl} = \langle u_k|\hat{f}|u_l\rangle$ 利用 $\hat{F}^{(N)}$ 与 $\hat{S}$, $\hat{A}$ 对易性讨论得到

$\sum_{q=1}^{N} |q:u_k\rangle\langle q:u_l| = a_k^+ a_l$ $\Rightarrow$ $\hat{F}^{(N)} = \sum_{k,l} f_{kl} \, a_k^+ a_l$ $\hat{F} = \sum_{k,l} f_{kl} \, a_k^+ a_l$.

不依赖于具体的 $\{|u_i\rangle\}$ 基

讨论：(1) 若 $f_{kl} = f_k \delta_{kl} \Rightarrow \hat{F}^{(N)} = \sum_k f_k \hat{n}_k$

(2) $\hat{f} = |\vec{r}_0\rangle\langle\vec{r}_0| \Rightarrow$ 单体密度算符 $\hat{D}(\vec{r}_0) = \sum_{k,l} u_k^*(\vec{r}_0) u_l(\vec{r}_0) \, a_k^+ a_l = \hat{\Psi}^+(\vec{r}_0)\hat{\Psi}(\vec{r}_0)$

(3) 动量 $\hat{\vec{P}} = \sum_{\vec{k}_i} \hbar\vec{k}_i \, a_{\vec{k}_i}^+ a_{\vec{k}_i} = \sum_{\vec{k}_i} \hbar\vec{k}_i \, \hat{n}_{\vec{k}_i}$.

动能 $\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}_i} \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \hat{n}_{\vec{k}_i}$. 局域势 $\hat{V}_1 = \int d^3r \; V_1(\vec{r})\hat{D}(\vec{r})$

(4) 粒子数 $\hat{N}$ 也是单体算符，对应的 $\hat{f}(q)$ 为 $\mathbb{1}$ 常数算符. $\hat{N} = \int d^3r \; \hat{\Psi}^+(\vec{r})\hat{\Psi}(\vec{r})$

(5). $\langle \hat{F}\rangle = \sum_{k,l} f_{kl} \langle a_k^+ a_l\rangle$ 若引入约化密度算符 $\hat{\rho}_1$ $\langle u_l|\hat{\rho}_1|u_k\rangle = \langle a_k^+ a_l\rangle$.

于是 $\langle \hat{F}\rangle = \mathrm{Tr}\{\hat{f}\hat{\rho}_1\}$. $\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}_1\} = \sum_k \langle a_k^+ a_k\rangle = \langle \hat{N}\rangle$

在 $\{|\vec{r}\rangle\}$ 表象下 矩阵元 $\langle \vec{r}_0|\hat{\rho}_1|\vec{r}_0\rangle = \langle \hat{D}(\vec{r}_0)\rangle$ 除以 $\langle \hat{N}\rangle$ 因子，归一化迹.

(6) 粒子流算符 $\hat{J}(\vec{r}_0) = \frac{1}{2}\left[|\vec{r}_0\rangle\langle\vec{r}_0|\frac{\hat{\vec{P}}}{m} + \frac{\hat{\vec{P}}}{m}|\vec{r}_0\rangle\langle\vec{r}_0|\right]$ (密度 × 速度并对称化)

利用 $\{|\vec{r}\rangle\}$ 表示，对应单体算符 $\hat{J}(\vec{r}_0) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\hat{\Psi}^+(\vec{r}_0)\nabla\hat{\Psi}(\vec{r}_0) - \hat{\Psi}(\vec{r}_0)\nabla\hat{\Psi}^+(\vec{r}_0)\right]$

二体算符 $\hat{G}^{(N)} = \frac{1}{2}\sum_{\substack{q,q'=1\\ q\neq q'}}^{N} \hat{g}(q,q') \left(= \sum_{q<q'}^{N} \hat{g}(q,q') \quad 若\ \hat{g}(q,q')=\hat{g}(q',q)\right)$ $\quad \hat{G} = \hat{G}^{(1)} \oplus \cdots \oplus \hat{G}^{(N)} \oplus \cdots$

$\hat g(q,q')$ 总可以分解为单体算符张量积形式：$\hat g(q,q') = \sum_{\alpha,\beta} C_{\alpha,\beta}\hat f_\alpha(q)\hat h_\beta(q')$ 运用单体算符结果得到

$\hat G = \frac12 \sum_{ijkl} \langle 1:u_i;2:u_j|\hat g(1,2)|1:u_k,2:u_l\rangle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k$ （玻色子顺序无影响，费米子注意顺序，生成与湮灭互为共轭因而顺序相反）

引入二体约化密度算符 $\hat\rho_2(1,2)$ $\quad \langle 1:u_k;2:u_l|\hat\rho_2|1:u_i;2:u_j\rangle = \langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k\rangle$

$\langle \hat G\rangle = \frac12\sum_{ij}\langle 1:u_i;2:u_j|\hat g\hat\rho_2(1,2)|1:u_i,2:u_j\rangle = \frac12 Tr\{\hat g\hat\rho_2\}$

$Tr\{\hat\rho_2\} = \sum_{ij}\langle a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i\rangle = \sum_{ij}\langle a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j - \delta_{ij} a_i^\dagger a_i\rangle = \langle \hat N(\hat N-1)\rangle$

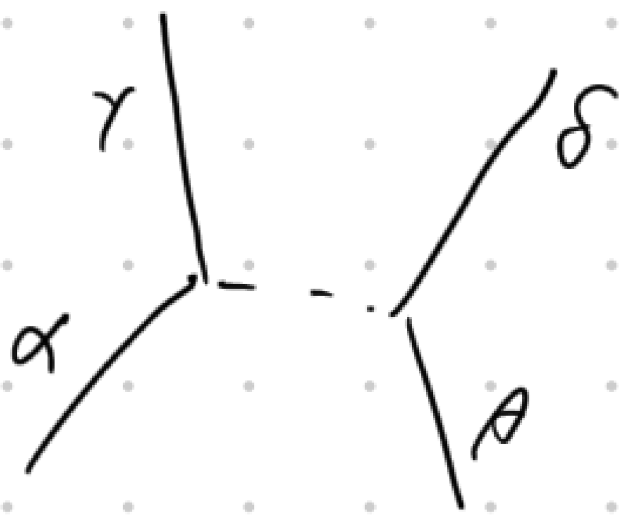
讨论：(1) 作用在2个全同粒子之间的相互作用$\hat g$将 $|u_{k\alpha}\rangle,|u_{k\beta}\rangle \longrightarrow |u_{k\gamma}\rangle,|u_{k\beta}\rangle$

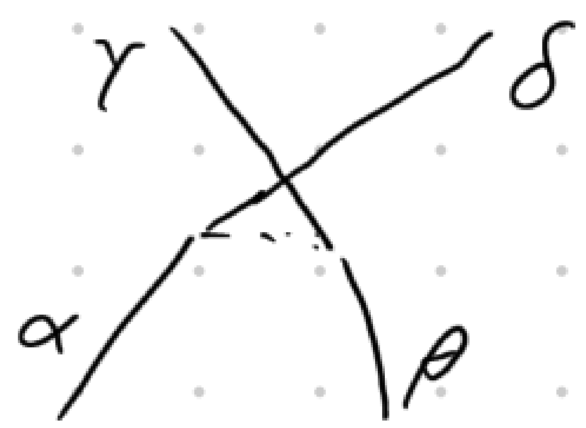
$\hat g$是对称的：$\hat g(1,2)=\hat g(2,1)$

$\hat G$中相关项为 $a_{k\gamma}^\dagger a_{k\delta}^\dagger a_{k\beta}a_{k\alpha}\big[\langle 1:u_{k\gamma};2:u_{k\delta}|\hat g|1:u_{k\alpha};2:u_{k\beta}\rangle$

$\hat g(1,2)$，因为$\hat g$是对称的作简写

$\begin{cases}B:+\\F:-\end{cases} \Leftarrow \pm\langle 1:u_{k\delta};2:u_{k\gamma}|\hat g|1:u_{k\alpha};2:u_{k\beta}\rangle\big]$





两项对应左图两个过程

对费米子，右图有一个额外的交换过程，表现为负号。

(2) 相互作用能 $W_{int}(\vec{r}_1, \cdots \vec{r}_N) = \sum_{q<q'} W_2(\vec{r}_q, \vec{r}_{q'})$ （假设 W_{int} 在 $\{|\vec{r}_1, \cdots, \vec{r}_N\rangle\}$ 基下是对角的）

$$W_{int} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \int d^3r_1 \int d^3r_2 \; W_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \, u_i^*(\vec{r}_1) u_j^*(\vec{r}_2) u_k(\vec{r}_1) u_l(\vec{r}_2) \, a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k$$

在 $|\Phi\rangle$ 态下 W_{int} 平均值

$$\langle W_{int}\rangle = \langle\Phi|W_{int}|\Phi\rangle = \frac{1}{2}\int d^3r_1 \int d^3r_2 \; W_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \, G_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$G_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ 是空间关联函数

$$G_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{ijkl} u_i^*(\vec{r}_1) u_j^*(\vec{r}_2) u_k(\vec{r}_1) u_l(\vec{r}_2) \; \langle\Phi|a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k|\Phi\rangle$$

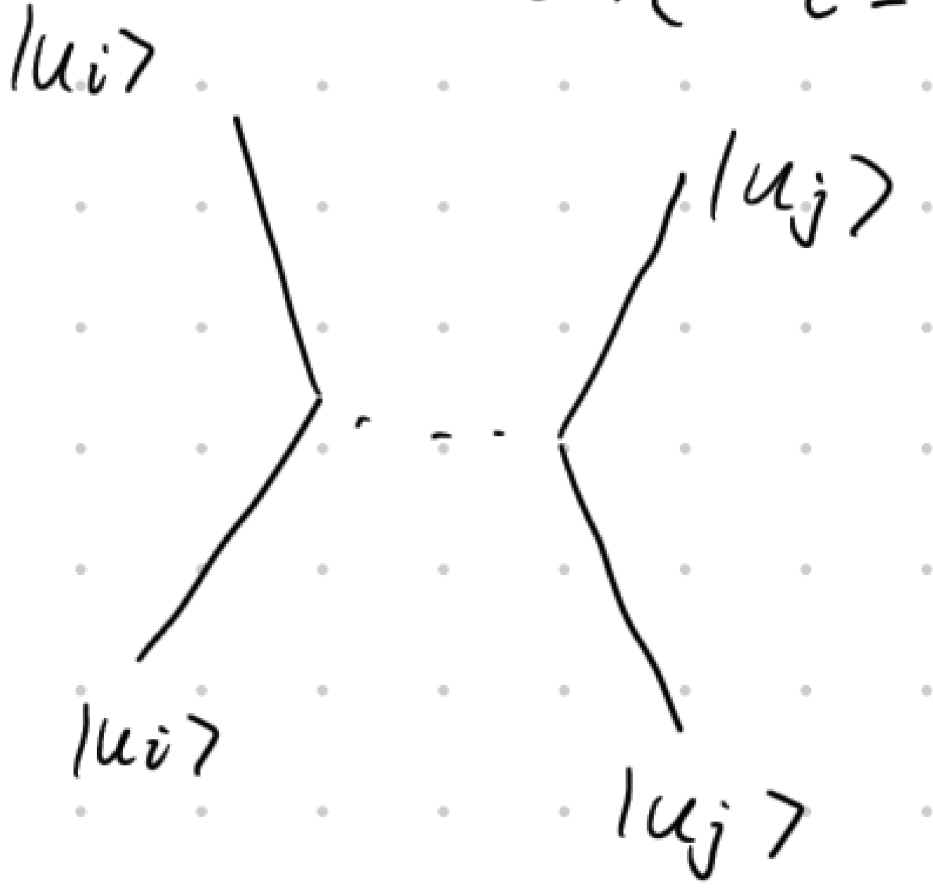
$$= \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} \langle \delta(\hat{r}_i - \vec{r}_1)\delta(\hat{r}_j - \vec{r}_2)\rangle$$

即二体密度，在 $\vec{r}_1$ 发现一个粒子，$\vec{r}_2$ 发现另一个粒子的概率.（极化率）

若 $|\Phi\rangle$ 是 Fock 态，$|\Phi\rangle = |n_1 : u_1 ; n_2 : u_2 ; \cdots ; n_i : u_i ; \cdots\rangle$

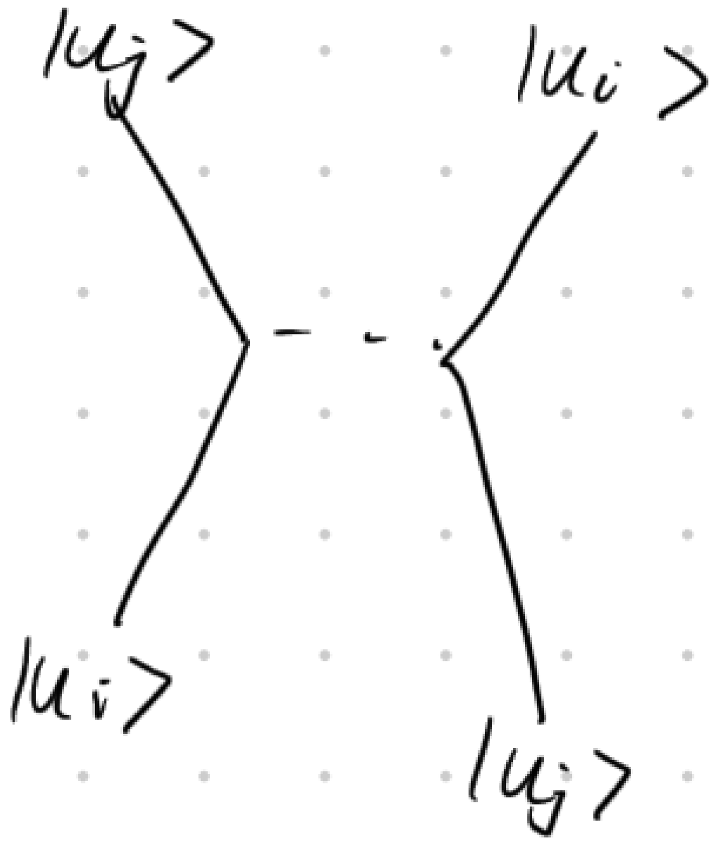
$\langle\Phi|a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k|\Phi\rangle \neq 0 \iff i = l, j = k$ 或 $i = k, j = l$.

(i) 直接项 $i = k, j = l$.



$$G_2^{dir}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{i\neq j} |u_i(\vec{r}_1)|^2 |u_j(\vec{r}_2)|^2 n_i n_j + \sum_i n_i(n_i - 1)|u_i(\vec{r}_1)|^2 |u_i(\vec{r}_2)|^2$$

(ii) 交换项 $i = l, j = k$ 且 $i \neq j$



$$G_2^{ex}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{i\neq j} n_i n_j \left[u_i^*(\vec{r}_1) u_j^*(\vec{r}_2) u_i(\vec{r}_2) u_j(\vec{r}_1)\right]$$

$$G_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \underbrace{G_2^{dir}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\text{经典统计}} \pm \underbrace{G_2^{ex}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\text{粒子全同性影响}}$$

单/二体算符 利用 $\{|\vec r\rangle\}$ 表达　$\hat F = \int d^3r \int d^3r' \langle \vec r|\hat f|\vec r'\rangle \Psi^\dagger(\vec r)\Psi(\vec r')$

$$\hat G = \frac{1}{2}\int d^3r\int d^3r'\int d^3r''\int d^3r''' \langle 1:\vec r;2:\vec r'|\hat g|1:\vec r'';2:\vec r'''\rangle \Psi^\dagger(\vec r)\Psi^\dagger(\vec r')\Psi(\vec r''')\Psi(\vec r'')$$

单体密度 $\hat\rho(\vec r_0) = \Psi^\dagger(\vec r_0)\Psi(\vec r_0)$　　$\hat N = \int d^3r\, \Psi^\dagger(\vec r)\Psi(\vec r)$　　局域势 $\hat V_1 = \int d^3r\, V_1(\vec r)\Psi^\dagger(\vec r)\Psi(\vec r)$

议 薛定谔方程

一次量子化　$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\xi_1,\cdots,\xi_N,t) = \left[\sum_{i=1}^{N} H_0(\xi_i) + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} V(\xi_i,\xi_j)\right]\Psi(\xi_1,\cdots,\xi_N,t)$

二次量子化：全同多体系统 用产生和湮灭算符表示

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \left[\sum_{i,i'}\langle i|\hat H_0|i'\rangle a_i^\dagger a_{i'} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{i,k,\\l,m}}\langle i,k|V|l,m\rangle a_i^\dagger a_k^\dagger a_l a_m\right]|\Psi(t)\rangle$$

$|\Psi(t)\rangle$ 为Fock空间矢量

全同粒子的散射　设两个全同粒子间相互作用造成散射，散射态 $\Psi(\xi_1,\xi_2) = \overbrace{\phi(\vec r_1+\vec r_2)}^{\text{质心部分}}\underbrace{\overbrace{\psi(\vec r_1-\vec r_2)}^{\text{相互部分}}}_{\text{只考虑这部分}}\chi_{\sigma_1\sigma_2}$

若无全同粒子统计性，$\psi_0(\vec r) \to \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\left[e^{i\vec k\cdot\vec r} + \frac{e^{ikr}}{r}f(\theta)\right]$

若 ψ 是对称的，$\psi(\vec r) = \frac{1}{\sqrt2}(\psi_0(\vec r)+\psi_0(-\vec r)) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\frac{1}{\sqrt2}\left[e^{i\vec k\cdot\vec r} + e^{-i\vec k\cdot\vec r} + \frac{e^{ikr}}{r}(f(\theta)+f(\pi-\theta))\right]$

若 ψ 是反对称的，$\psi(\vec r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\frac{1}{\sqrt2}\left[e^{i\vec k\cdot\vec r} - e^{-i\vec k\cdot\vec r} + \frac{e^{ikr}}{r}[f(\theta)-f(\pi-\theta)]\right]$

散射截面 $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta) \pm f(\pi-\theta)|^2$

举例：2个电子 $\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{4}|f(\theta) - f(\pi-\theta)|^2 + \frac{3}{4}|f(\theta) + f(\pi-\theta)|^2$

薛定谔方程 适用：(1) 非相对论 (2) 没有粒子产生和湮灭 (基于薛方程的二次量子化理论只是形式的)

拓展： KG 方程 (适用无自旋粒子如 π介子) Dirac 方程 (适用 1/2 自旋粒子) Maxwell 方程 (适用 1自旋粒子 且 $m=0$)

以上均为场方程，分别称为标量场、旋量场、矢量场 ($m=0$) 的场方程.

高量讨论仍局限于粒子视角，不涉及场的量子化. 故只适用于不涉及粒子的产生和湮灭的现象.

以下部分 $\eta = \mathrm{diag}(+,-,-,-)$

§7.1. Klein-Gorden方程

1. 薛定谔方程伽利略不变性

$\vec{r}' = \vec{r} - \vec{v}t \qquad t' = t. \qquad i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t)$ (自由粒子)

变换后: $\nabla|_t = \nabla'|_{t'} \qquad \frac{\partial}{\partial t}\Big|_{\vec{r}} = \frac{\partial}{\partial t'}\Big|_{\vec{r}'} + \nabla'\cdot\frac{\partial\vec{r}'}{\partial t}\Big|_{\vec{r}} = \frac{\partial}{\partial t'}\Big|_{\vec{r}'} - \vec{v}\cdot\nabla'$

$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\Big|_{\vec{r}'}\psi(\vec{r}',t') = \left[\frac{m}{2}\left(-\frac{i\hbar\nabla'}{m} - \vec{v}\right)^2 - \frac{m}{2}v^2\right]\psi(\vec{r}',t')$

若定义 $\psi'(\vec{r}',t') = e^{i\frac{m}{2}v^2\frac{t}{\hbar}}\psi(\vec{r},t) \qquad \Rightarrow \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\psi'(\vec{r}',t') = \frac{m}{2}\left(-\frac{i\hbar\nabla'}{m} - \vec{v}\right)^2\psi'(\vec{r}',t')$

2. K-G方程 $\quad E^2 = p^2c^2 + m^2c^4 \quad \Rightarrow \quad -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = \left[-\hbar^2\nabla^2c^2 + m^2c^4\right]\psi \Rightarrow \left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi = 0.$

缺点: ① 二次 PDE, 初始条件: $\psi(t_0)$, $\frac{\partial}{\partial t}\psi(t_0)$ 但波函数应包含系统全部信息

② 连续性方程 $\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{j} = 0 \qquad$ 但 ρ 非正定

§7.2 Dirac 方程

出发点: 一阶 PDE, 几率密度正定, 洛伦兹不变性.

设 $\frac{1}{c}\frac{\partial\psi}{\partial t} + \vec{\alpha}\cdot\nabla\psi + \frac{imc}{\hbar}\beta\psi = 0. \qquad \psi$ 有N个分量. α_k与β为$N\times N$矩阵 $(k = x,y,z)$

$\Rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_\mu(\vec{r},t) = \left[-ic\hbar\,(\alpha_k)_{\mu\nu}\,\partial_k + mc^2\beta_{\mu\nu}\right]\psi_\nu. \qquad H = -i\hbar c\,\vec{\alpha}\cdot\nabla + mc^2\beta. = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta.$

$(\nabla\psi^{\dagger})c\vec{\alpha}i\hbar + mc^2\beta\psi^{\dagger}$

$H=H^{\dagger} \Rightarrow \alpha_k=\alpha_k^{\dagger},\ \beta=\beta^{\dagger}$ 取 $\psi^{\dagger}=(\psi_1^*,\cdots,\psi_N^*) \Rightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^{\dagger}=(c\vec{\alpha}\cdot\vec{p}+mc^2\beta)\psi^{\dagger}$

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

$\rho=\psi^{\dagger}\psi=\psi_\mu^*\psi_\mu\geq 0$ 半正定 速度算符 $c\vec{\alpha}$ 另：取海森堡表象，$\frac{d\vec{r}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}[\vec{r},H]=c\vec{\alpha}$

洛伦兹不变性：$(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}+\vec{\alpha}\cdot\nabla+\frac{imc}{\hbar}\beta)\psi=0$ 左边作用 $(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}-\vec{\alpha}\cdot\nabla-\frac{imc}{\hbar}\beta)$

$$\Rightarrow\left\{\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-(\vec{\alpha}\cdot\nabla)^2+\frac{m^2c^2}{\hbar^2}\beta^2-\left[(\vec{\alpha}\cdot\nabla)\frac{imc}{\hbar}\beta+\frac{imc}{\hbar}\beta(\vec{\alpha}\cdot\nabla)\right]\right\}\psi=0$$

与K-G方程比较，$\Rightarrow$ 要求 $\alpha_k^2=1 \quad \{\alpha_k,\alpha_{k'}\}=2\delta_{kk'} \quad \{\alpha_k,\beta\}=0 \quad \beta^2=1$

讨论：N的取值 (1) 由 $\alpha_k\beta=-\beta\alpha_k \Rightarrow \det|\alpha_k\beta|=(-)^N\det|\beta\alpha_k| \Rightarrow$ N为偶数

(2). N最小为2. 可取Pauli矩阵 满足 $\{\sigma_\alpha,\sigma_\beta\}=2\delta_{\alpha\beta}$，令 $\vec{\alpha}=\vec{\sigma}$，但找不到 β，即 $N=2$ 不满足要求。

但：若 $m=0$（无质量粒子）不需要 β 矩阵，可取 $N=2$.（写书 分二量，中微子）

(3) $m\neq 0$ 时 N最小为4. ψ 为旋量波函数.

定义 $\gamma^0=\beta$，$\gamma^k=\gamma^0\alpha_k \quad (k=1,2,3)$ 满足 $(\gamma^0)^{\dagger}=\gamma^0 \quad (\gamma^k)^{\dagger}=-\gamma^k=\gamma^0\gamma^k\gamma^0$

$\Rightarrow \{\gamma^\mu,\gamma^\nu\}=2\eta^{\mu\nu} \qquad \eta^{\mu\nu}=\mathrm{diag}\{1,-1,-1,-1\}$

可得到16种独立矩阵 $(1+4+6+4+1=16)$ 即由 γ^μ 的代数可以形成对 4×4 矩阵的不可约表示.

		数目
零乘积	1	1
一乘积	γ^μ	4
二乘积	$\gamma^\mu\gamma^\nu \ (\mu\neq\nu)$	6
三乘积	$\gamma_5\gamma^\mu$	4
四乘积	$\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$	1

Dirac 表示：

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \qquad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} = \gamma^0$$

$$\vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} = \beta\vec{\alpha}$$

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

Dirac方程的协变形式. $x^0 = ct \quad x^1 = x \quad x^2 = y \quad x^3 = z$. (逆变向量).

协变 $x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu = (ct, -x, -y, -z)$. $\quad \partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu} = (\frac{1}{c}\partial_t, \nabla)$.

$\Rightarrow (i\gamma^\mu\partial_\mu - \frac{mc}{\hbar})\psi = 0$. 厄米共轭：$-i\partial_\mu\psi^\dagger\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 - \frac{mc}{\hbar}\psi^\dagger = 0$.

定义 $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0 \Rightarrow i\partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu + \frac{mc}{\hbar}\bar{\psi} = 0$.

存在电磁场时，$\vec{p} = -i\hbar\nabla \to \vec{p} - q\vec{A}$. $\quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - q\phi$. 利用 $A_\mu = (c\phi, -\vec{A})_\mu$.

$$\Rightarrow \left[i\gamma^\mu(\partial_\mu + \frac{iq}{\hbar c}A_\mu) - \frac{mc}{\hbar}\right]\psi = 0.$$

§7.3. Dirac方程在洛伦兹变换下的协变性

设 $x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu} x^{\nu} + b^{\mu}$ $\Delta x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu} \Delta x^{\nu}$ $\Delta x_{\mu} \Delta x^{\mu} = \Delta x'_{\mu} \Delta x'^{\mu}$. $\Delta x_{\mu} = g_{\mu\nu} \Delta x^{\nu}$

$\Rightarrow g_{\mu\nu} = \Lambda^{\mu'}{}_{\mu} g_{\mu'\nu'} \Lambda^{\nu'}{}_{\nu}$ $\Rightarrow$ $g = \underbrace{\tilde{\Lambda}}_{转置} g \Lambda = \Lambda g \tilde{\Lambda}$ $\Rightarrow |\det\Lambda|^2 = 1$

取(0,0)矩阵元, $1 = {\Lambda^0{}_0}^2 - \sum_{k=1}^{3} {\Lambda^0{}_k}^2$ $\Rightarrow |\Lambda^0{}_0| \geq 1$

分类:
(1) 正常变换 $\Lambda^0{}_0 \geq 1$ $\det\Lambda = 1$
(2) 空间反演 $\Lambda^0{}_0 \geq 1$ $\det\Lambda = -1$
(3) 时间反演 $\Lambda^0{}_0 \leq -1$ $\det\Lambda = -1$

任何Λ可分为以上3种变换之乘积.

设 $x'^{\mu} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu} x^{\nu}$ 变换前 $(i\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - \frac{mc}{\hbar})\psi = 0$. 变换后 应有 $(i\gamma^{\mu}\partial'_{\mu} - \frac{mc}{\hbar})\psi' = 0$.

由于坐标变换不引起物理状态变化, 有 $\psi'(x') = S\psi(x)$. 求 S 与 Λ 之间关系?

$\Rightarrow (iS\gamma^{\mu}S^{-1}\partial_{\mu} - \frac{mc}{\hbar})\psi' = 0$ $\partial_{\mu} = \Lambda^{\nu}{}_{\mu} \partial'_{\nu}$

由协变性要求 $\Rightarrow S\gamma^{\nu}S^{-1}\Lambda^{\mu}{}_{\nu} = \gamma^{\mu}$ $\Rightarrow S^{-1}\gamma^{\mu}S = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu}$ (利用 $(\Lambda^{\nu}{}_{\mu})^{-1} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}$)

设 $\Gamma^{\mu}(\Lambda) = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu}$ $\Rightarrow \{\Gamma^{\mu}, \Gamma^{\mu'}\} = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}\Lambda^{\mu'}{}_{\nu'}\{\gamma^{\nu}, \gamma^{\nu'}\} = 2g^{\nu\nu'}\Lambda^{\mu}{}_{\nu}\Lambda^{\mu'}{}_{\nu'} = 2g^{\mu\mu'} = \{\gamma^{\mu}, \gamma^{\mu'}\}$.

$\Rightarrow \{\Gamma^{\mu}\}$ 可视为 $\{\gamma^{\mu}\}$ 代数的另一个表示, $\Gamma^{\mu} = S^{-1}\gamma^{\mu}S$

由 $S^{-1}\gamma^{\mu}S = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu}$ 取厄米共轭 $\Rightarrow$ $S^{\dagger}\gamma^0\gamma^{\mu}\gamma^0(S^{\dagger})^{-1} = \gamma^0\gamma^{\nu}\gamma^0\Lambda^{\mu}{}_{\nu} \Rightarrow \gamma^0 S^{\dagger}\gamma^0\gamma^{\mu}\gamma^0(S^{\dagger})^{-1}\gamma_0 = \Lambda^{\mu}{}_{\nu}\gamma^{\nu}$.

$\Rightarrow (\gamma^0 S \gamma^0)^\dagger \gamma^\mu [(\gamma^0 S \gamma^0)^\dagger]^{-1} = \Lambda^\mu{}_\nu \gamma^\nu \Rightarrow \gamma^0 S^\dagger \gamma^0 = b S^{-1} \Rightarrow S^\dagger \gamma^0 S = b\gamma^0$. 取厄米共轭 $\Rightarrow b \in \mathbb{R}$

$S^\dagger S = \gamma^0 b \underline{S^{-1}\gamma^0 S} = \gamma^0 b \Lambda^0{}_\nu \gamma^\nu = \underbrace{b\Lambda^0{}_0}_{对角} + \underbrace{\sum_{i=1}^{3} \gamma^0 b \Lambda^0{}_k \gamma^k}_{非对角}$ 取迹 $\mathrm{Tr}\, S^\dagger S = \sum_{ij} S^*_{ij} S_{ij} > 0$

$\Rightarrow b\Lambda^0{}_0 > 0$.

若只考虑正常洛伦兹变换，并且 $\Lambda^0{}_k = 0$ 可进一步约定 ① $S^* = \gamma^0\gamma^1\gamma^3 S \gamma^3\gamma^1\gamma^0$ ② $S^\dagger = \gamma^0 S^{-1} \gamma^0$.
(取 $b=1$)

无穷小的 Lorentz 变换 $x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu$ $\Lambda^\mu{}_\nu = \delta^\mu{}_\nu + \epsilon^\mu{}_\nu$ 由 $\tilde{\Lambda} g \Lambda = g \Rightarrow \epsilon_{\mu\nu} + \epsilon_{\nu\mu} = 0$.

设 $S \simeq 1 + T(\epsilon)$ $S^{-1} \simeq 1 - T$ $(1-T)\gamma^\mu(1+T) = (\delta^\mu{}_\nu + \epsilon^\mu{}_\nu)\gamma^\nu = \delta^\mu + \epsilon^\mu{}_\nu \gamma^\nu$

$\Rightarrow [\gamma^\mu, T] = \epsilon^\mu{}_\nu \gamma^\nu$. 可设 $T = C_\nu \gamma^\nu \gamma^\mu$. $\Rightarrow T = \frac{\epsilon_{\mu\nu}}{8}(\gamma^\mu\gamma^\nu - \gamma^\nu\gamma^\mu)$.

§7.4. 空间转动与 Dirac 粒子自旋

空间轴转动 $t' = t$ $\vec{r}' = R\vec{r}$. 设转轴 $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ 方向 转角 $-\Delta\theta \ll 1$. (波函数转 $\Delta\theta$)

$\delta\vec{r} \simeq \vec{n} \times \vec{r}(-\Delta\theta)$. $\Rightarrow \epsilon^1{}_2 = -\epsilon^2{}_1 = -\Delta\theta n_z$ $\epsilon^2{}_3 = -\epsilon^3{}_2 = -\Delta\theta n_x$ $\epsilon^3{}_1 = -\epsilon^1{}_3 = -\Delta\theta n_y$

$\Rightarrow S \simeq 1 - \frac{i}{4}\epsilon_{\mu\nu}\gamma^\mu\gamma^\nu = 1 - \frac{i}{2}\Delta\theta\, \vec{n}\cdot\vec{\Sigma}$ 其中 $\Sigma_x = i\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}$ $\Sigma_y = i\gamma^3\gamma^1 = \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix}$

$\Sigma_z = i\gamma^1\gamma^2 = \begin{pmatrix} \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_z \end{pmatrix}$ $\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}$

性质：(1) $\vec{\Sigma}\cdot\vec{\Sigma} = 3I$.

(2) 对一般转角 $\Delta\theta$， $S = \exp[-\frac{i}{2}\Delta\theta\, \vec{n}\cdot\vec{\Sigma}]$ 对应自旋 $\frac{1}{2}\vec{\Sigma}$. $\Rightarrow$ Dirac粒子自旋为 1/2.

$H = c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + mc^2\beta$ $[\frac{1}{2}\vec{\Sigma}, H] \neq 0$ $[\vec{L}, H] \neq 0$ 但定义 $\vec{J} = \vec{L} + \frac{1}{2}\vec{\Sigma}$ $\Rightarrow [\vec{J}, H] = 0$

§7.5. 空间反射

$x'^0 = x^0 \quad x'^k = -x^k \ (k=1,2,3). \quad \Lambda^0{}_0 = 1 \quad \Lambda^k{}_k = -1 \quad \Lambda^i{}_j = \delta_{ij}\Lambda^j{}_i.$

设 $\psi'(x') = S_p \psi(x) \Rightarrow S_p^{-1}\gamma^k S_p = -\gamma^k. \quad S_p^{-1}\gamma^0 S_p = \gamma^0. \quad \Rightarrow S_p = \eta_p \gamma^0$ η_p 可取为 1.

§7.6.

$\psi'(x') = S\psi(x) \Rightarrow \bar{\psi}'(x') = \psi'^\dagger(x')\gamma^0 = \psi^\dagger(x) S^\dagger \gamma^0 = \bar{\psi}(x) S^{-1} \quad (S^\dagger = \gamma^0 S^{-1}\gamma^0)$

$\Rightarrow$ 构造张量：(1) $\bar{\psi}'(x')\psi'(x') = \bar{\psi}(x)\psi(x)$. 标量.

(2) $\bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\psi'(x') = \bar{\psi}(x) S_p^{-1}\gamma^\mu S_p \psi(x) = \Lambda^\mu{}_\nu \bar{\psi}(x)\gamma^\nu\psi(x)$ 矢量.

(3) $\bar{\psi}'(x')\gamma^\mu\gamma^\nu\psi'(x') = \Lambda^\mu{}_{\mu'}\Lambda^\nu{}_{\nu'}\bar{\psi}(x)\gamma^{\mu'}\gamma^{\nu'}\psi(x)$ 反对称张量

(4) $\bar{\psi}'(x')\gamma_5\psi'(x') = \bar{\psi}'(x') i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3\psi'(x') = \bar{\psi}(x) i\Lambda^0{}_\mu\Lambda^1{}_{\mu'}\Lambda^2{}_\nu\Lambda^3{}_{\nu'}\gamma^\mu\gamma^{\mu'}\gamma^\nu\gamma^{\nu'}\psi(x)$

$= \det|\Lambda|\ \bar{\psi}(x)\gamma_5\psi(x).$ 赝标量.

(5) $\bar{\psi}'(x')\gamma_5\gamma^\mu\psi'(x') = \det|\Lambda|\Lambda^\mu{}_\nu\bar{\psi}(x)\gamma_5\gamma^\nu\psi(x)$ 赝矢量.

§7.7. 时间反演.

设 $\psi'(x') = T\psi(x) \quad T = \theta U \quad \theta$: 复共轭算符 $\quad U$: 线性算符.

利用 $\{i\gamma^\mu(\partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c}A_\mu) - \frac{mc}{\hbar}\} U^{-1}\theta\psi'(x') = 0 \qquad \psi(x) = T^{-1}\psi'(x') = U^{-1}\theta\psi'(x')$

作用 θU, $\quad TA_0T^{-1} = A_0 \qquad TA_kT^{-1} = -A_k \quad (k=1,2,3).$

协变性要求. $T\gamma^\mu T^{-1} = \begin{cases} (\gamma^0)^* & \mu = 0 \\ -(\gamma^\mu)^* & \mu = 1,2,3 \end{cases} \Rightarrow U\gamma^{0,2}U^{-1} = \gamma^{0,2} \qquad U\gamma^{1,3}U^{-1} = -\gamma^{1,3}$

$\Rightarrow U = \lambda\gamma^1\gamma^3 \quad |\lambda|=1. \quad T = \theta U = \lambda^*\gamma^1\gamma^3\theta \quad T^2 = \lambda^*\gamma^1\gamma^3\theta\lambda^*\gamma^1\gamma^3\theta = |\lambda|^2\gamma^1\gamma^3\gamma^1\gamma^3 = -1$

(符合非相对论结果，半整数自旋 $T^2=-1$)

(1) 标量. $\bar\psi'(x')\psi'(x') = \psi'^\dagger(x')\gamma^0\psi'(x')$ $\quad \psi'(x') = \theta U\psi(x) = U^*\psi^*(x)$. $\psi'^\dagger(x') = \psi^{*\dagger}(x)(U^*)^\dagger = \tilde\psi(x)\tilde U$

$U^* = \tilde U^\dagger \quad \psi^*(x) = \tilde\psi^\dagger(x) \quad \tilde\gamma^0 = \gamma^0. \quad \tilde U\gamma^0 U^* = \gamma^3\gamma^1\gamma^0\gamma^1\gamma^3 = \gamma^0$ 转置.

$\Rightarrow \bar\psi'(x')\psi'(x') = \tilde\psi(x)\tilde U\gamma^0U^*\psi^*(x) = \tilde\psi(x)\gamma^0\psi^*(x) = \psi^\dagger(x)\gamma^0\psi(x). = \bar\psi(x)\psi(x)$ 标量在时间反演下不变.

(2) 矢量 $\bar\psi'(x')\gamma^\mu\psi'(x') = \tilde\psi(x)\tilde U\gamma^0\gamma^\mu U^*\psi^*(x) = \tilde\psi(x)\gamma^0\tilde U\gamma^\mu U^*\psi^*(x)$

$\gamma^3\gamma^1\gamma^\mu\gamma^1\gamma^3 = \begin{cases}\gamma^\mu & \mu\neq 1,3\\ -\gamma^\mu & \mu = 1,3\end{cases} \qquad \gamma^{2*} = -\gamma^2 = \tilde\gamma^2$

$\Rightarrow \bar\psi'(x')\gamma^\mu\psi'(x') = \begin{cases}\bar\psi(x)\gamma^0\psi(x). & \mu=0\\ -\bar\psi(x)\gamma^k\psi(x) & \mu=1,2,3.\end{cases}$ 时分量不变，空间分量变为负号.

§7.6. 自由粒子的平面波解.

$H = c\vec\alpha\cdot\vec p + mc^2\beta$ 设平面波解为 $\psi(x) = u(\vec q)e^{i(\vec q\cdot\vec x - Et)/\hbar}$ 解：$E(\vec q)$ 及 $u(\vec q)$.

$H\psi(x) = [c\vec\alpha\cdot\vec q + mc^2\beta]u(\vec q)e^{i(\vec q\cdot\vec x - Et)} = E\psi(x) \quad \Rightarrow H_{\vec q}\, u(\vec q) = Eu(\vec q)$

$H_{\vec q} = \begin{pmatrix} mc^2 & c\vec\sigma\cdot\vec q\\ c\vec\sigma\cdot\vec q & -mc^2\end{pmatrix}$ 考虑 $\vec q$ 方向上的自旋分量 $\Sigma_{\vec q} = \vec\Sigma\cdot\vec q = \begin{pmatrix}\vec\sigma\cdot\vec q & 0\\ 0 & \vec\sigma\cdot\vec q\end{pmatrix}$

$[H_{\vec q}, \Sigma_{\vec q}] = 0 \quad \Rightarrow \Sigma_{\vec q}$ 是守恒量，可取 $u(\vec q)$ 为 $H_{\vec q}$ 与 $\Sigma_{\vec q}$ 的共同本征态.

设 $\Sigma_q u(\vec{q}) = \lambda u(\vec{q})$ $\quad \Sigma_q^2 = 1 \Rightarrow \lambda^2 = 1 \quad \lambda = \pm 1$ （螺旋度）

设 $(\vec{\sigma}\cdot\hat{q})\chi_\pm(\hat{q}) = \pm\chi_\pm(\hat{q})$ $\quad$ 设 $\lambda = +1$ $\quad u(\vec{q}) = \begin{pmatrix} A\chi_+(\hat{q}) \\ B\chi_+(\hat{q}) \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} mc^2 & cq \\ cq & -mc^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$,

$\lambda = -1$ $\quad u(\vec{q}) = \begin{pmatrix} A'\chi_-(\hat{q}) \\ B'\chi_-(\hat{q}) \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} mc^2 & -cq \\ -cq & mc^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix} = E\begin{pmatrix} A' \\ B' \end{pmatrix}$

$\Rightarrow \det\begin{vmatrix} mc^2-E & cq\lambda \\ cq\lambda & -mc^2-E \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow E = \pm E_q \quad E_q = \sqrt{c^2q^2+m^2c^4}$ 存在负能解.

按螺旋度正负、能量正负 分类有 4 个解.

	ψ_{I}	ψ_{II}	ψ_{III}	ψ_{IV}
$\vec{p}$	$\vec{q}$	$\vec{q}$	$\vec{q}$	$\vec{q}$
H	E_q	E_q	$-E_q$	$-E_q$
Σ_q	$+1$	-1	$+1$	-1

$$u_I(\vec{q}) = \sqrt{\frac{mc^2+E_q}{2E_q}}\begin{pmatrix} \chi_+(\hat{q}) \\ \frac{cq}{mc^2+E_q}\chi_+(\hat{q}) \end{pmatrix} \qquad u_{II}(\vec{q}) = \sqrt{\frac{mc^2+E_q}{2E_q}}\begin{pmatrix} \chi_-(\hat{q}) \\ -\frac{cq}{mc^2+E_q}\chi_-(\hat{q}) \end{pmatrix}$$

讨论：(1) 速度算符 $c\vec{\alpha}$. $\quad u_I^+(\vec{q})\,c\vec{\alpha}\,u_I(\vec{q}) \longrightarrow \frac{\vec{q}}{m}$ （$q\to 0$ 时）

(2) 当 $q\to 0$ 时 正能解中 $|A| >> |B|$ $\quad |A'| >> |B'|$ 负能解 情况相反

（非相对论情况 $\Rightarrow$ 两分量近似）

(3) $\chi_\pm(\vec{q})$ 表达式. 设 $\vec{q}=(\phi,\theta)$ $\chi_\pm(\vec{q}) = e^{-\frac{i}{2}\sigma_z\phi} e^{-\frac{i}{2}\sigma_y\theta}\chi_\pm(\vec{z})$ $\chi_\pm(\vec{z}) = \begin{cases} \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} & + \\ \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} & - \end{cases}$

(4) 理解负能态：不稳定性. dirac 提出电子海观点，认为所有负能态都被占据，由 Pauli 不相容原理，剩余粒子占据在正能态上。 当某个负能态未被占据，出现"空穴"，与完整电子海比较，空穴携带 $(-\vec{q}, E_q, \varepsilon_q, -e)$. 称为正电子.

§7.8. 电荷共轭

dirac粒子 $\{i\gamma^\mu(\partial_\mu + \frac{iq}{\hbar c}A_\mu) - \frac{mc}{\hbar}\}\psi = 0$. 反粒子 $\{i\gamma^\mu(\partial_\mu - \frac{iq}{\hbar c}A_\mu) - \frac{mc}{\hbar}\}\psi' = 0$.

算符

设 $\psi'(x) = \Gamma\psi^*(x)$ （复共轭：保证能量、动量相反） $\Rightarrow \psi(x) = (\Gamma^{-1})^*\psi'^*(x)$

$\Rightarrow \{i\gamma^\mu(\partial_\mu + \frac{iq}{\hbar c}A_\mu) - \frac{mc}{\hbar}\}(\Gamma^{-1})^*\psi'^*(x) = 0$ 取复共轭，左边乘 Γ，与反粒子方程比较

$\Rightarrow \Gamma(\gamma^\mu)^*\Gamma^{-1} = -\gamma^\mu$. $\Rightarrow \begin{cases} \mu = 0,1,3 & \Gamma\gamma^\mu\Gamma^{-1} = -\gamma^\mu \\ \mu = 2 & \Gamma\gamma^2\Gamma^{-1} = \gamma^2 \end{cases}$ $\Rightarrow \Gamma \propto \gamma^2$

设 $\Gamma = \Gamma^\dagger$，则可取 $\Gamma = i\gamma^2$. （Γ 同时也是幺正的）. $\Rightarrow \psi'(x) = i\gamma^2\Theta\psi(x)$

$\Rightarrow \psi'(x) = i\gamma^2\,\widetilde{\bar{\psi}(x)\gamma^0} = C\,\widetilde{\bar{\psi}(x)}$ $C = i\gamma^2\gamma^0$

K-G方程 $(\Box+m^2)\Psi(\vec{x},t)=0$ $\Box=\partial_\mu\partial^\mu=\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\nabla^2$ $\eta=\mathrm{diag}\{+1,-1,-1,-1\}$

描述相对论性自由粒子，$\Psi(\vec{x},t)=e^{-i(Et-\vec{p}\cdot\vec{x})}=e^{-ip^\mu x_\mu}$ 是其解，其中 $p^\mu p_\mu=m^2$

令 $p^\mu\to p^\mu-eA^\mu$ 得 $[D_\mu D^\mu+m^2]\Psi(\vec{x},t)=0$ 其中 $D_\mu=\partial_\mu-ieA_\mu$ 协变导数 （采取 $\hbar=c=1$ 的单位制，下同）

描述电磁场下粒子，此方程关于时间是2阶的，分解 $D_\mu D^\mu=D_t^2-\vec{D}^2$，定义

$$\begin{cases}\phi(\vec{x},t)=\frac{1}{2}\left[\Psi(\vec{x},t)+\frac{i}{m}D_t\Psi(\vec{x},t)\right]\\ \chi(\vec{x},t)=\frac{1}{2}\left[\Psi(\vec{x},t)-\frac{i}{m}D_t\Psi(\vec{x},t)\right]\end{cases}$$

满足

$$iD_t\phi=-\frac{1}{2m}\vec{D}^2(\phi+\chi)+m\phi$$

$$iD_t\chi=\frac{1}{2m}\vec{D}^2(\phi+\chi)-m\chi$$

用 $\phi|_{t=0}$，$\chi|_{t=0}$ 可以确定解，取消了 $\partial\Psi/\partial t|_{t=0}$ 这项一阶时间导数依赖。定义二分量函数 $\Upsilon(\vec{x},t)=\begin{bmatrix}\phi(\vec{x},t)\\ \chi(\vec{x},t)\end{bmatrix}$

可把K-G方程写为 $iD_t\Upsilon=\left[-\frac{1}{2m}\vec{D}^2(\tau_3+i\tau_2)+m\tau_3\right]\Upsilon$. τ为Pauli矩阵.

守恒流 $j^\mu=\frac{i}{2m}\left[\Psi^*D^\mu\Psi-(D^\mu\Psi)^*\Psi\right]$ $\rho=j^0=\phi^*\phi-\chi^*\chi=\Upsilon^\dagger\tau_3\Upsilon$

ρ可正可负，不能解释为概率密度，可作为正反粒子密度的代数和，ϕ为正粒子，χ为反粒子.

讨论：K-G方程的负能解 自由粒子情况 $E^2=p^2+m^2$ E可以小于0，$E=\pm E_p$ 的归一化就是对应 $\rho=\pm1$，

即一个带负电的自由粒子~~具有负的总能量~~，对静止粒子，$E=m$ 的正能解只有上分量，$E=-m$ 的正能解只有下分量.

自由粒子概率流为 $\vec{j}=\frac{\vec{p}}{E_p}$ 正负能解电荷流密度相同.

修复：(i) 对负能解反转 $\vec{p}$ 的符号 (ii) 认为负能粒子在"时间上向后运动"

可以把正能解关联到粒子，负能解的共轭关联到反粒子

$$[(\partial_\mu - ieA_\mu)(\partial^\mu - ieA^\mu) + m^2]\Psi_{粒子}(\vec{x},t) = 0$$

$$[(\partial_\mu + ieA_\mu)(\partial^\mu + ieA^\mu) + m^2]\Psi_{反粒子}(\vec{x},t) = 0$$

分别对应电荷为 $\pm e$ 的粒子

Dirac 方程：具有时间一阶导数项，被写为 $\boxed{(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\Psi(\vec{x},t) = 0}$ （或：$(\gamma^\mu p_\mu - m)\Psi = 0$）

作用 $(-i\gamma^\nu\partial_\nu - m) \Rightarrow (\gamma^\nu\partial_\nu\gamma^\mu\partial_\mu + m^2)\Psi(\vec{x},t) = 0$ 强加条件 $\gamma^\nu\gamma^\mu\partial_\nu\partial_\mu = \partial^\mu\partial_\mu = \eta^{\mu\nu}\partial_\nu\partial_\mu$ 就是 K-G 方程.

上述条件可写为对称形式：$\frac{1}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu) = \eta^{\mu\nu}$ 遵从 Clifford 代数：

$$(\gamma^0)^2 = 1 \quad (\gamma^i)^2 = -1 \quad \gamma^\mu\gamma^\nu = -\gamma^\nu\gamma^\mu \quad (i = 1,2,3,\ \mu\neq\nu)$$

Clifford 代数是 4 维的，可写为（即 2×2 矩阵的 2×2 矩阵）

$$\vec{\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{bmatrix} \qquad \beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

代入自由粒子解 $\Psi = e^{ip_\mu x^\mu}$ 得 $\gamma^\mu p_\mu - m = 0 \Rightarrow E = \gamma^0\vec{\gamma}\cdot\vec{p} + \gamma^0 m$ 定义 $\alpha_i = \gamma^0\gamma^i$ $\beta = \gamma^0$

得到 $H = \vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m$ （Dirac 方程另一种形式）

定义 $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger\beta = \Psi^\dagger\gamma_0$，$\rho = \Psi^\dagger\Psi = \bar{\Psi}\gamma^0\Psi$，$\vec{j} = \Psi^\dagger\alpha\Psi = \bar{\Psi}\gamma^0\alpha\Psi = \bar{\Psi}\gamma\Psi$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\Psi}\gamma^0\Psi) + \nabla\cdot(\bar{\Psi}\gamma\Psi) = \partial_\mu j^\mu = 0 \qquad j^\mu = \bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi$$ 得到正定的概率密度 ρ，概率流 $\vec{j}$

物理解释：基于 $(\gamma^\mu p_\mu - m)\Psi = 0$ 取伴随并插入 γ_0 因子：$\bar{\Psi}(\gamma^\mu p_\mu - m) = 0$

Dirac 设想单电子波动方程时考虑到：（1）概率正定 （2）概率守恒 （3）Lorentz 协变

K-G 方程不满足（2）因为时间是二阶导，从而可任意指定 $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 导致的。因此波动方程因只有时间一阶导数

Lorentz 协变要求空间导数也是一阶的。考虑内禀自由度（自旋）波函数应写为旋量形式 $\psi = \begin{pmatrix}\psi_1 \\ \vdots \\ \psi_N\end{pmatrix}$

设方程形式为 $\frac{\partial\psi_\nu}{\partial t} + (\vec{\alpha}_{\nu\mu}\cdot\nabla\psi_\mu + im\beta_{\nu\mu}\psi_\mu) = 0$ 时空均匀性要求 α, β 为常量

矩阵形式：$\frac{\partial\psi}{\partial t} + \vec{\alpha}\cdot\nabla\psi + im\beta\psi = 0$ 或写为 $i\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$ $H = -i\vec{\alpha}\cdot\nabla + m\beta = \vec{\alpha}\cdot\vec{p} + m\beta$

推算 $\vec{\alpha}, \beta$ 应满足性质，概率守恒 $\Rightarrow H$ 厄米 $\Rightarrow$ $\vec{\alpha}$ 与 β 为厄米矩阵 即 $\alpha_{\nu\mu}^* = \alpha_{\mu\nu}$ $\beta_{\nu\mu}^* = \beta_{\mu\nu}$

$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla\cdot\vec{j} = 0$ $\rho = \psi^\dagger\psi = \psi_\nu^*\psi_\nu$ $\vec{j} = \psi^\dagger\vec{\alpha}\psi = \psi_\nu^*\vec{\alpha}_{\nu\mu}\psi_\mu$ 即概率正定、守恒

与 Maxwell 方程类比，它对时空导数是一阶的，$\vec{E}$、$\vec{B}$ 各分量都遵循二阶导数的波动方程。Dirac 方程波函数各分量

也应满足 $\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} - \nabla^2\psi + m^2\psi = 0$ 形式的波动方程（与 K-G 方程不同：这里 ψ 是多分量波函数）

Dirac 方程左乘 $(\frac{\partial}{\partial t} - \alpha_i\frac{\partial}{\partial x_i} - im\beta)$ $\Rightarrow (\frac{\partial}{\partial t} - \alpha_i\frac{\partial}{\partial x_i} - im\beta)(\frac{\partial}{\partial t} + \alpha_j\frac{\partial}{\partial x_j} + im\beta)\psi = 0$

对称化 $\Rightarrow \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{1}{2}(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i)\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_j} + m^2\beta^2 - im(\alpha_i\beta + \beta\alpha_i)\frac{\partial}{\partial x_i}\right]\psi = 0$

对比得到 $\Rightarrow \frac{1}{2}(\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i) = \delta_{ij}$ $\beta^2 = 1$ $\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0$

$\Rightarrow \alpha_i^2 = \beta^2 = 1$ $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, \beta$ 中两两反对易 与厄米性一同概括了 $\vec{\alpha}, \beta$ 的全部代数性质

令 $\gamma^0 = \beta$ $\gamma^i = \beta\alpha^i$ dirac 方程变为：$(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi = 0$

定义 $\bar{\psi} = \tilde{\psi}^*\gamma^0$ Dirac 方程还可写成 $(i\gamma^\mu\partial_\mu + m)\bar{\psi} = 0$

γ^μ 矩阵性质：(1) $(\gamma^0)^2 = -(\gamma^i)^2 = 1$ $\gamma^\mu\gamma^\nu = -\gamma^\nu\gamma^\mu$ 或写为 $\frac{1}{2}(\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu) = \gamma^{(\mu}\gamma^{\nu)} = \eta^{\mu\nu}$

(2) $(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0$ $(\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i$ (反厄米)

(3) $\mathrm{Tr}\,\gamma^\mu = 0$

(4) γ^μ 为偶数维矩阵，最小维数是4 常用Pauli - Dirac表示（γ^0为对角阵）

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} = \gamma^0 \quad \vec{\gamma} = \gamma^0\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$$

(5) 由 γ^μ 可构造16种线性独立的积

0重：1 1重：γ^μ 2重：$\gamma^\mu\gamma^\nu$ $(\mu \neq \nu)$ 4重：$\gamma_5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3$

3重：$\gamma_5\gamma^\mu$ $(1+4+6+1+4=16)$ 它们张成16维线性空间，在矩阵乘法下构成一个代数(也构成群)，这代数(或群)不可约表示是4×4矩阵表示（即上面的矩阵）

ψ有4个分量．

有电磁场时，作代换：$\partial_\mu \to \partial_\mu + ieA_\mu$ （即 $i\frac{\partial}{\partial t} \to i\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi$ $-i\frac{\partial}{\partial x^i} \to -i\frac{\partial}{\partial x^i} - eA_i$）

即有 $[i\gamma^\mu(\partial_\mu + ieA_\mu) - m]\psi = 0$

Dirac 方程的协变性 只讨论正常Lorentz变换，即 $\det\Lambda = 1$ $\Lambda^0{}_0 \geq 1$

ψ不是4矢量形式，因此 Dirac 方程协变性不是显然的．设 $\psi'(x') = S\psi(x)$ S应是依赖变换Λ的4×4矩阵．假设方程是协变的，则

$[i\gamma^\mu(\partial_\mu + ieA_\mu) - m]S^{-1}\psi'(x') = 0$ $\xRightarrow{S*}$ $[iS\gamma^\nu S^{-1}(\partial_\nu + ieA_\nu) - m]\psi'(x') = 0$

$\Rightarrow [iS\gamma^\nu S^{-1}\Lambda_\nu{}^\mu(\partial'_\mu + ieA'_\mu) - m]\psi' = 0$ 即应有 $\Lambda_\nu{}^\mu S\gamma^\nu S^{-1} = \gamma^\mu$ 即 $S^{-1}\gamma^\mu S = \Lambda_\nu{}^\mu\gamma^\nu$

为了确定 S，令 $\Gamma^{\mu}(\Lambda)=\Lambda_{\nu}{}^{\mu}\gamma^{\nu}$，则 $\Gamma^{\mu}(\Lambda)\Gamma^{\mu'}(\Lambda)+\Gamma^{\mu'}(\Lambda)\Gamma^{\mu}(\Lambda)=2\Lambda_{\nu}{}^{\mu}\Lambda_{\nu'}{}^{\mu'}\eta^{\nu\nu'}=2\eta^{\mu\mu'}$ ($g=\tilde{\Lambda}g\Lambda$)

即 $\Gamma^{\mu}(\Lambda)$ 构成 Clifford 代数的不可约表示（Γ^{μ} 也是 4×4 矩阵）因此存在从 γ^{μ} 到 Γ^{μ} 的相似变换 $S(\Lambda)$

ψ 的变换性质与 4-矢量是不同，称为 Dirac 旋量，4-旋量。 上面把 S 确定到差一个常数

可以补充要求 $S^{\dagger}=\gamma^0 S^{-1}\gamma_0$ 与 $S^{*}=\gamma^0\gamma^1\gamma^3 S\gamma^3\gamma^1\gamma^0$ 使 S 最多差一个正负号，这样的 $\{S(\Lambda)\}$ 构成一个群

$\bar{\psi}$ 服从：$\bar{\psi}'(x')=\bar{\psi}(x)S^{-1}$

无穷小 Lorentz 变换的 $S(\Lambda)$ 设 $x'^{\mu}=x^{\mu}+\epsilon^{\mu}{}_{\nu}x^{\nu}$ 由 $x'^{\mu}x'_{\mu}=x^{\mu}x_{\mu}\Rightarrow\epsilon_{\mu\nu}+\epsilon_{\nu\mu}=0$ 即 $\epsilon_{\mu\nu}$ 有 6 个分量独立

$S(\Lambda)\approx1+T(\epsilon)$ $S^{-1}(\Lambda)\approx1-T(\epsilon)$ $S^{-1}\gamma^{\mu}S=\Lambda_{\nu}{}^{\mu}\gamma^{\nu}\Rightarrow\gamma^{\mu}T(\epsilon)-T(\epsilon)\gamma^{\mu}=\epsilon_{\nu}{}^{\mu}\gamma^{\nu}$

$\Rightarrow T(\epsilon)=\frac{1}{8}\epsilon_{\mu\nu}(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}-\gamma^{\nu}\gamma^{\mu})$ （已应用 2 个补充条件）

$S(\Lambda)\approx1+\frac{1}{8}\epsilon_{\mu\nu}(\gamma^{\mu}\gamma^{\nu}-\gamma^{\nu}\gamma^{\mu})$

特别地，对空间转动 $S(\Lambda)\approx1-\frac{i}{2}\Delta\theta\,\vec{n}\cdot\vec{\Sigma}$ 其中 $\vec{\Sigma}=\begin{pmatrix}\vec{\sigma}&0\\0&\vec{\sigma}\end{pmatrix}$ 因此 Dirac 方程粒子有 1/2 自旋

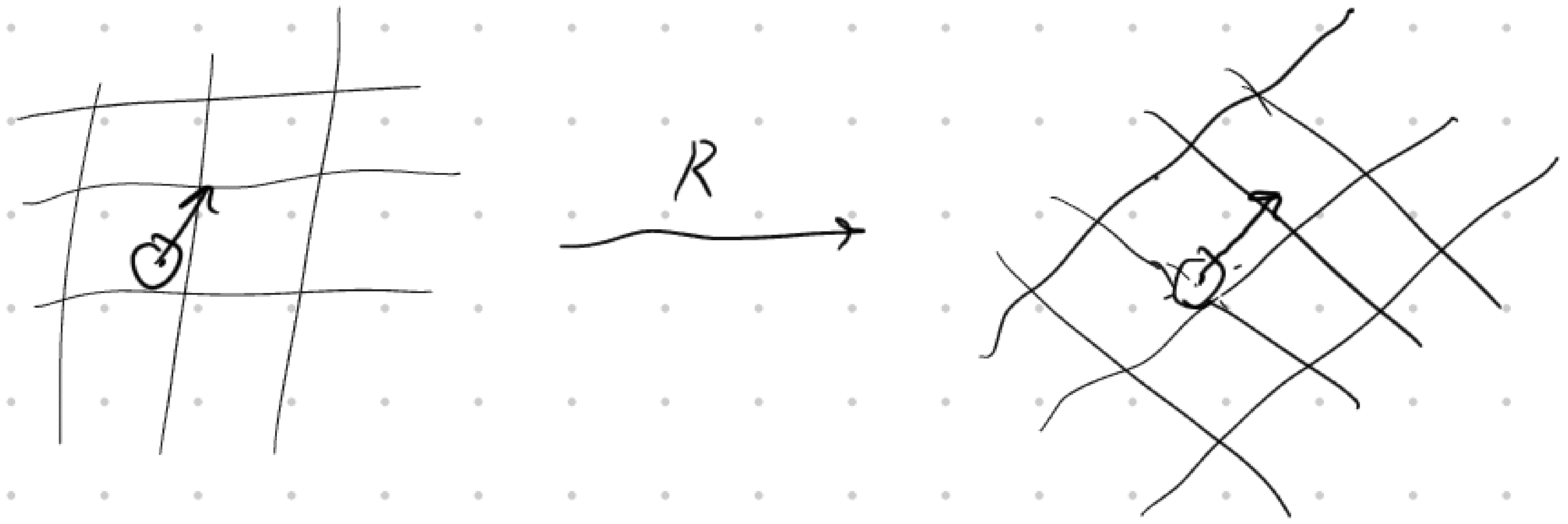
$\vec{S}=\frac{\hbar}{2}\vec{\Sigma}$ $\Sigma_x^2=\Sigma_y^2=\Sigma_z^2=1$ $[\vec{\Sigma},\beta]=0$ $[\Sigma_i,\alpha_i]=0$ $[\Sigma_i,\alpha_j]=2i\epsilon_{ijk}\alpha_k$ $[\Sigma_i,\Sigma_j]=2i\epsilon_{ijk}\Sigma_k$

有限转动：$\psi'(\vec{x}',t)=(\cos\frac{\theta}{2}-i\vec{n}\cdot\vec{\Sigma}\sin\frac{\theta}{2})\psi(R^{-1}\vec{x}',t)$

备注：这里没有出现轨道角动量，因为 $\psi'(\vec{x}',t)=(1-\frac{i}{\hbar}\Delta\theta\,\vec{n}\cdot\vec{S})\psi(R^{-1}\vec{x}',t)$，考虑 $\psi(R^{-1}\vec{x}',t)=(1-\frac{i}{\hbar}\Delta\theta\,\vec{n}\cdot\vec{L})\psi(\vec{x}',t)$

$\Rightarrow\psi'(\vec{x},t)=(1-\frac{i}{\hbar}\Delta\theta\,\vec{n}\cdot\vec{J})\psi(\vec{x},t)$ 这才是波函数的完整无穷小变换

$\psi'(\vec{x}',t)\neq\psi(\vec{x},t)$ 即 $S(\Lambda)\neq1$ 反映了粒子有内禀性质（自旋） 变换前后该内禀性质不变造成不对称性



(A) $\psi'(\vec{x},t) = \left(1-\frac{i}{\hbar}\Delta\theta\,\vec{n}\cdot\vec{J}\right)\psi(\vec{x},t)$ 一种理解为同时对位形空间和"自旋空间"施加转动，但注意这不能写成 $\psi'(\vec{x},t) = \psi(R^{-1}\vec{x},t)$ 因为这种写法只包含了位形空间的转动，但内禀性质自旋不转，即并不是所有事情都跟着转了，自然 $\psi'(\vec{x}',t) \neq \psi(\vec{x},t)$ $(\vec{x}' = R\vec{x})$

(B) 然而，旋是表示下实际不存在自旋空间，也无所谓"自旋空间转动"，即上述讨论中"转动"完全是对位形空间进行的，对粒子的内禀性质自旋不起作用，自然 $\psi'(\vec{x}',t) \neq \psi(R^{-1}\vec{x}',t)$，$\psi'(\vec{x},t) = \left(1-\frac{i}{\hbar}\Delta\theta\,\vec{n}\cdot\vec{J}\right)\psi(\vec{x},t)$ 中 $\vec{S}$ 项完全是对自旋指向的修正，不代表所谓"自旋空间转动"。
但自旋项具有转动形式，又不是转动，很奇怪。

自由电子 $H = \vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m$ $[H, \vec{p}] = 0 \Rightarrow \vec{p}$ 守恒 $\vec{\alpha}$ 为速度算符

$[\vec{l}, H] = i(\vec{\alpha}\times\vec{p}) \Rightarrow$ 电子有自旋 $\vec{s} = \frac{1}{2}\vec{\Sigma}$ $[\vec{s}, H] = -i(\vec{\alpha}\times\vec{p})$