

研究生教学用书

教育部研究生工作办公室推荐

# 高等量子力学

(第二版)

Advanced Quantum Mechanics

倪光炯 陈苏卿 著



复旦大学出版社

www.fudanpress.com.cn

## 第二版序

本书第一版前后印了两次,得到了许多老师、同学和专家学者的鼓励,也承蒙指出了书中存在的错误和缺点以及具体的改进意见.我们谨向所有关心这本书的人们表示衷心的感谢.2001年6月经国务院学位委员会学科评议组审定,本书作为一本由教育部研究生工作办公室向全国研究生推荐的教材,这本书的英文版(*Advanced Quantum Mechanics*, Guangjiong Ni and Suqing Chen)也已于2002年由Rinton Press在美国出版.

本书第二版除改正了全书已经发现的印刷错误和不妥之处外,还作了以下的补充和修改:在各章后面补充适当的习题,并把习题的答案、提示或附注放在全书的末尾,以帮助读者提高应用能力;删去原来的§2.7D和§2.8两节内容,增加附录1B、附录8A、附录8B、附录9B和附录9C;并在附录10B的最后补充介绍了一个新的实验,这样使章节划分和讲述内容更趋合理.

我们感到欣慰的是:在年轻时开始对物理学的两点猜测,在经过30多年的研究,特别是对6个佯谬的讨论之后,已逐渐落实到两点认识(见附录10B的最后),并且在两个问题——超光速中微子方程和反引力上得到具体的应用.当然一切都有待于实验的进一步检验,但我们仍热切地希望有更多同行,尤其是年轻一代,能够和我们共同切磋、探求真理,因此我们期待着继续得到广大读者和专家的指正.

倪光炯 陈苏卿

2003年10月于复旦大学

# 第一版序

1978年全国恢复研究生制度以后,高等量子力学(“高量”)就被列为物理系各专业研究生必修的一门基础理论课.我边干边学地开始上这门课,于1981年印出了一本《高等量子力学选题》讲义,以后陈苏卿又多次上这门课,并编写了《高等量子力学》讲义.我们虽早有写书的念头,但实际上一拖就是十几年,原因是多方面的.

涉水方知深浅.在40多年的科研历程中,不断地从各个角度学习和应用量子力学,我们才逐渐体会到这门学科的博大精深,可以说经历了由“薄”到“厚”再到“薄”的过程,也可说是经历了由“胆大”到“胆怯”再到重新恢复勇气的过程.我们深知:写书必须以科研为后盾,而写书又不同于科研,原则上一字一句都不许有错,不能误人子弟.能做到这一点谈何容易,再想有新的体会更属难事.然而,正如量子力学有“不确定关系”那样,面对学科范围如此之广,变化发展如此之快,作者时间和水平有限而客观上又确有需要等诸多矛盾因素,我们惟有鼓起勇气,在可能范围内最大限度地作一次努力.

“理论联系实际”,这是学校教育的一个永恒主题,在我们看来,也是当前理论物理教学改革的一个迫切问题.多年以来,我们对“从一般到特殊”的演绎法是十分重视的,我们常常追求理论的系统性、完整性和严格性.本来演绎法、系统性、完整性和严格性也都是好东西,但一旦过了头,便走向反面.因为一切都是相对的,本来同样重要的“从特殊到一般”的分析归纳法被大大地忽视了,而这是不符合物理学发展规律的.过去不少书虽然对读者很有帮助,但对年轻人的培养教育也有不利的一面,虽然他们学到了一定的知识,但更多地学到的是计算方法,而不是思想方法,甚至在思想上反而受到束缚.我们从多年来理论物理的教学中看到一个现象,来问教师问题的多半是计算中有困难的学生,而那些自以为学得很好的学生很少来提问题.这决不是一种好现象.

我们认为:学物理不能把演绎法讲过头,而应该多学一些“从特殊到一般”的分析归纳法,并把它与演绎法结合起来,这是本书写作时的主要指导思想之一.

学习在本质上是自学,科研在本质上是探索.对开始想做研究的研究

生来说,最重要的是两个词: Motivation 和 Observation. 一本书或一篇文章首先要引起读者的兴趣,产生强烈的好奇心和求知欲,一定要让读者知道作者在讲什么? 提出了什么问题? 困难在哪里? 解决到什么程度? 这样才会激发起动机或动力(Motivation). 然后同样重要的是眼光或洞察力(Observation): 有时是一眼看到问题,更多情况下是在摸索中转了几个弯才看到解决问题的曙光,才有可能找到正确的前进方向. 于是再坚持一下,情况豁然开朗,突然看到了关键之点或突破口在哪里? 第三是正确的方法,最后才是计算的细节. 数学计算不是不重要,但它变得重要是在有了 Motivation 和 Observation 之后,而不是在这之前. 过去我们在有些理论物理课上讲了那么多内容,其中不少对初学者是不必要的,因为他们当时还不可能懂;而在他们经过许多年成为专家后再回头去看时,又会感到那些内容原来是多余的.

因此,本书虽仍以演绎法作为叙述的主线,也注意理论的系统性、完整性和严格性,但适可而止;同时注意多讲“从特殊到一般”的分析归纳方法,力求讲清楚 Motivation 和 Observation;多介绍新的实验结果,并讨论它们对理论发展可能提供什么启示? 还适当地反映作者自己的研究成果或见解[如 Levinson 定理(§ 2.4)、几何相(§ 1.6E, § 6.4)、Casimir 效应(§ 4.6)、分数统计(§ 7.3C, D)、狭义相对论的本质(§ 9.5)和量子力学的基本解释(§ 10.3)等]. 我们知道,有些问题在学术界一直存在着这样或那样的看法. 然而,物理学首先是实验科学,我们讨论问题一定要从事实出发而不是从概念出发. 伽利略说得好:“一个科学家必须超越‘单纯的思索’(mere think),必须通过实验来‘聪明的提问’(intelligent questions)”. 幸运的是:时值世纪之交,一系列令人惊异的新的实验发现接踵而至. 现在应该是认真地面对实验事实,从基本观念上讨论这些问题的时候了.

总之,本书基本上涵盖了目前各校通用的“高量”教学大纲的内容,同时也反映了作者对这门学科的心得体会以及在教学上一种新的尝试. 庄子曰:“吾生也有涯,而知也无涯”;杜甫诗曰:“文章千古事,得失寸心知”. 字斟句酌,临笔踌躇. 本书清样印出后,虽于 1999 年秋冬在复旦一个 30 多人的研究生班上作为教材使用一遍,与同学们一起仔细地校订了一次,犹恐谬误或不当之处,仍在所难免,尚望广大老师同学、专家学者惠予指正为幸. 纵一字之改,亦吾师也. 是为序.

倪光炯

2000 年 2 月于复旦大学

# 目 录

|                          |    |
|--------------------------|----|
| 第一章 量子力学的基本概念和方法         | 1  |
| § 1.1 自旋二态体系             | 2  |
| 1.1A 电子的自旋               | 2  |
| 1.1B 自旋的矩阵表示及其几率诠释       | 3  |
| 1.1C Pauli 矩阵和自旋极化矢量     | 5  |
| § 1.2 态矢量、算符和矩阵表示        | 8  |
| 1.2A 右态矢和左态矢             | 8  |
| 1.2B 算符                  | 9  |
| 1.2C 基矢和矩阵表示             | 11 |
| § 1.3 波函数和薛定谔方程,海森堡运动方程  | 13 |
| 1.3A 连续谱与 $\delta$ 函数    | 13 |
| 1.3B 图景和表象,薛定谔方程         | 14 |
| 1.3C 时间演化算符, $U$ 矩阵      | 17 |
| 1.3D 算符的海森堡运动方程          | 19 |
| § 1.4 简谐振子               | 20 |
| 1.4A 从经典力学经过量子论到量子力学     | 20 |
| 1.4B 产生算符和湮灭算符, $N$ 表象   | 22 |
| 1.4C $x$ 表象中的波函数         | 23 |
| § 1.5 测量中的不确定关系          | 24 |
| 1.5A 观察量的均方差             | 24 |
| 1.5B 不确定关系的导出            | 25 |
| 1.5C 谐振子与不确定关系           | 26 |
| § 1.6 相干态和压缩态            | 27 |
| 1.6A 湮灭算符 $\hat{a}$ 的本征态 | 27 |
| 1.6B 相干态是最小不确定态          | 29 |
| 1.6C 相干态从基态平移得到          | 30 |
| 1.6D 物理学中的相干态和相位         | 31 |
| 1.6E 相干态的运动和几何相          | 32 |
| 1.6F 压缩态                 | 35 |
| § 1.7 路径积分和 Green 函数     | 37 |

|            |                                |           |
|------------|--------------------------------|-----------|
| 1.7A       | 从经典力学过渡到量子力学的 3 种途径 .....      | 37        |
| 1.7B       | 费曼传播函数和海森堡图景中位置基矢的转换矩阵元 .....  | 39        |
| 1.7C       | 算符排列的 Weyl 顺序 .....            | 40        |
| 1.7D       | Green 函数 .....                 | 41        |
| 附录 1A      | 算符代数的若干定理 .....                | 43        |
| 附录 1B      | Hilbert 空间及其表示, 量子力学基本原理 ..... | 45        |
| 习题         | .....                          | 49        |
| 参考文献       | .....                          | 51        |
| <b>第二章</b> | <b>量子散射理论 .....</b>            | <b>52</b> |
| § 2.1      | 弹性散射的严格解 .....                 | 52        |
| 2.1A       | Lippmann-Schwinger 方程 .....    | 52        |
| 2.1B       | Green 函数的选择 .....              | 53        |
| 2.1C       | 严格的跃迁矩阵元 .....                 | 56        |
| 2.1D       | Dyson 方程 .....                 | 58        |
| 2.1E       | 跃迁矩阵元的另一种形式 .....              | 59        |
| § 2.2      | Born 近似 .....                  | 60        |
| 2.2A       | Born 近似的级数展开 .....             | 60        |
| 2.2B       | 汤川势中弹性散射的一级 Born 近似 .....      | 62        |
| § 2.3      | 分波法 .....                      | 63        |
| 2.3A       | 分波展开和相移 .....                  | 63        |
| 2.3B       | 截面和光学定理 .....                  | 66        |
| 2.3C       | 相移的计算及其变化趋势 .....              | 68        |
| § 2.4      | Levinson 定理 .....              | 71        |
| 2.4A       | 引言和数学准备 .....                  | 71        |
| 2.4B       | 渐近完备性定理 .....                  | 74        |
| 2.4C       | Levinson 定理的证明 .....           | 76        |
| 2.4D       | Levinson 定理新形式的证明 .....        | 79        |
| § 2.5      | 低能中子和质子的散射, 核力 .....           | 81        |
| 2.5A       | 氘核的基态性质和核力 .....               | 81        |
| 2.5B       | 慢粒子在球方势阱中的散射 .....             | 82        |
| 2.5C       | 低能散射的有效力程理论 .....              | 84        |
| 2.5D       | 核力对自旋的依赖性 .....                | 86        |
| § 2.6      | 演化算符和 S 矩阵 .....               | 87        |

|            |                                      |            |
|------------|--------------------------------------|------------|
| 2.6A       | 反应道 .....                            | 87         |
| 2.6B       | 相互作用图景 .....                         | 89         |
| 2.6C       | 演化算符的微扰展开 .....                      | 91         |
| 2.6D       | 波算符 .....                            | 93         |
| 2.6E       | S 矩阵 .....                           | 98         |
| 2.6F       | 跃迁矩阵 .....                           | 101        |
| § 2.7      | 跃迁几率和截面 .....                        | 102        |
| 2.7A       | 跃迁几率和黄金规则 .....                      | 102        |
| 2.7B       | 重整碰撞的截面 .....                        | 106        |
| 2.7C       | 光学定理 .....                           | 108        |
| § 2.8      | 黑核模型 .....                           | 109        |
| 习题         | .....                                | 112        |
| 参考文献       | .....                                | 114        |
| <b>第三章</b> | <b>量子力学中的对称性和角动量</b> .....           | <b>115</b> |
| § 3.1      | 引言 .....                             | 115        |
| § 3.2      | 转动态的定义和转动算符 .....                    | 118        |
| 3.2A       | 转动态的定义 .....                         | 118        |
| 3.2B       | 算符的转动 .....                          | 119        |
| 3.2C       | 态的无限小转动 .....                        | 121        |
| 3.2D       | 态的有限转动 .....                         | 126        |
| § 3.3      | 角动量算符的一般性质 .....                     | 127        |
| § 3.4      | 两个角动量的耦合, Clebsch-Gordan 系数 .....    | 129        |
| § 3.5      | 转动算符的矩阵表示, $D$ 函数 .....              | 134        |
| § 3.6      | 不可约张量算符, Wigner-Eckart 定理和选择规则 ..... | 137        |
| 3.6A       | 标量算符和不可约张量算符 .....                   | 137        |
| 3.6B       | Wigner-Eckart 定理 .....               | 140        |
| 3.6C       | 选择规则 .....                           | 141        |
| § 3.7      | 对称性和守恒律 .....                        | 143        |
| 3.7A       | 可观察量和不可观察量 .....                     | 143        |
| 3.7B       | 空间的均匀性及动量守恒 .....                    | 145        |
| 3.7C       | 时间的均匀性与能量守恒 .....                    | 145        |
| § 3.8      | 空间反演和宇称 .....                        | 146        |
| 3.8A       | 量子态和算符的宇称 .....                      | 146        |
| 3.8B       | 宇称守恒定律 .....                         | 148        |

|                                      |            |
|--------------------------------------|------------|
| 3.8C 宇称不守恒的发现 .....                  | 148        |
| § 3.9 时间反演对称性 .....                  | 150        |
| 3.9A 时间反演算符 .....                    | 150        |
| 3.9B 时间反演对称性带来的后果 .....              | 152        |
| 3.9C 关于时间反演不守恒的一点评注 .....            | 154        |
| 习题 .....                             | 155        |
| 参考文献 .....                           | 157        |
| <b>第四章 电磁场的量子化及其与荷电粒子的相互作用</b> ..... | <b>158</b> |
| § 4.1 电磁场的库仑规范, 荷电粒子和电磁场的总哈密顿量 ..... | 158        |
| 4.1A 麦克斯韦方程和四维势 .....                | 158        |
| 4.1B 电磁场的哈密顿量, 库仑规范 .....            | 159        |
| 4.1C 最小电磁相互作用原理 .....                | 162        |
| § 4.2 自由电磁场的平面波解和量子化 .....           | 164        |
| 4.2A Fourier 分解和辐射振子 .....           | 164        |
| 4.2B 辐射振子的量子化 .....                  | 167        |
| 4.2C 黑体辐射的普朗克公式 .....                | 169        |
| § 4.3 自由电磁场的球面波解和量子化 .....           | 172        |
| 4.3A 矢量球谐函数 .....                    | 173        |
| 4.3B 电多极场(TM 波)和磁多极场(TE 波) .....     | 177        |
| 4.3C 矢势的多极场展开和量子化 .....              | 179        |
| § 4.4 电磁多极辐射的跃迁几率 .....              | 181        |
| 4.4A 荷电粒子体系与电磁场的耦合 .....             | 181        |
| 4.4B 放单光子的跃迁几率 .....                 | 182        |
| 4.4C 电磁多极跃迁矩阵元和跃迁几率 .....            | 183        |
| § 4.5 电磁跃迁几率的数量级估计和选择规则 .....        | 187        |
| 4.5A 电磁跃迁几率相对大小的定性估计 .....           | 187        |
| 4.5B 电磁跃迁的选择规则 .....                 | 188        |
| § 4.6 Casimir 效应 .....               | 193        |
| 4.6A 电磁场零点能与 Casimir 能量 .....        | 193        |
| 4.6B Plana 求和公式 .....                | 194        |
| 4.6C 三维空间电磁场的 Casimir 效应 .....       | 195        |
| 习题 .....                             | 197        |
| 参考文献 .....                           | 198        |



|                                      |     |
|--------------------------------------|-----|
| <b>第五章 密度矩阵与量子统计</b> .....           | 200 |
| § 5.1 密度算符和系综 .....                  | 200 |
| 5.1A 极化束流与非极化束流 .....                | 200 |
| 5.1B 系综平均和密度算符 .....                 | 201 |
| 5.1C 密度矩阵的性质 .....                   | 203 |
| 5.1D 二态体系的密度矩阵与极化 .....              | 204 |
| § 5.2 密度矩阵的运动方程 .....                | 206 |
| § 5.3 极化和散射 .....                    | 207 |
| 5.3A 散射的 S 矩阵依赖于自旋的情形 .....          | 207 |
| 5.3B 极化束流引起散射的左右不对称性 .....           | 210 |
| § 5.4 量子统计学简介 .....                  | 211 |
| 5.4A 密度矩阵与熵 .....                    | 211 |
| 5.4B 配分函数, 电子的顺磁性 .....              | 214 |
| 5.4C 巨正则系综, 电子的反磁性 .....             | 216 |
| 习题 .....                             | 221 |
| 参考文献 .....                           | 223 |
| <br>                                 |     |
| <b>第六章 量子力学中的相位</b> .....            | 224 |
| § 6.1 电磁势和规范变换 .....                 | 224 |
| § 6.2 Aharonov-Bohm 效应和磁通量量子化 .....  | 228 |
| 6.2A Aharonov-Bohm 效应及其含义 .....      | 228 |
| 6.2B 超导环中的磁通量量子化 .....               | 230 |
| § 6.3 绝热近似与 Berry 相因子 .....          | 232 |
| 6.3A 绝热近似 .....                      | 232 |
| 6.3B Berry 的发现 .....                 | 235 |
| 6.3C 再论 Aharonov-Bohm 效应 .....       | 239 |
| § 6.4 二态体系中的几何相问题 .....              | 241 |
| 6.4A 动力学相和几何相 .....                  | 241 |
| 6.4B 演化算符的么正矩阵法 .....                | 243 |
| 6.4C 用密度矩阵法算几何相, 纤维丛和联络 .....        | 246 |
| 6.4D 二态体系与受力谐振子相干态在几何相上的<br>比较 ..... | 252 |
| 习题 .....                             | 254 |
| 参考文献 .....                           | 255 |

|  |         |
|--|---------|
| <b>第七章 电子在磁场中的运动</b> .....             | 257     |
| § 7.1 Landau 能级和简并度 .....              | 257     |
| 7.1A Landau 规范下的解 .....                | 257     |
| 7.1B Landau 能级的简并度 .....               | 258     |
| 7.1C 对称规范下的解 .....                     | 260     |
| § 7.2 量子 Hall 效应简介 .....               | 264     |
| 7.2A 经典 Hall 效应 .....                  | 264     |
| 7.2B 量子力学的计算 .....                     | 265     |
| 7.2C 量子 Hall 效应的实验发现 .....             | 266     |
| 7.2D 整数量子 Hall 效应的解释 .....             | 268     |
| 7.2E 分数量子 Hall 效应的解释 .....             | 271     |
| § 7.3 二维分数统计简介 .....                   | 274     |
| 7.3A 引言, Wilczek 模型 .....              | 274     |
| 7.3B 任意子气体的第二维里系数 .....                | 279     |
| 7.3C 分数统计的拓扑学特点 .....                  | 285     |
| 7.3D 分数统计与 Chern-Simons 规范场 .....      | 288     |
| § 7.4 复合玻色子和复合费米子 .....                | 291     |
| 7.4A 量子 Hall 效应的 CSLG 理论 .....         | 291     |
| 7.4B FQHE 中的元激发具有分数电荷和分数统计<br>性质 ..... | 294     |
| 7.4C FQHE 的复合费米子理论 .....               | 299     |
| § 7.5 FQHE 中分数电荷的实验发现 .....            | 300     |
| 习题 .....                               | 302     |
| 参考文献 .....                             | 302     |
| <br><b>第八章 量子多体问题方法及其应用</b> .....      | <br>304 |
| § 8.1 二次量子化方法 .....                    | 304     |
| 8.1A 二次量子化, 玻色子和费米子 .....              | 304     |
| 8.1B 量子光学中的 Jaynes-Cummings 模型 .....   | 306     |
| § 8.2 二次量子化后的哈密顿量 .....                | 309     |
| 8.2A 场算符, 一粒子态和多粒子态 .....              | 309     |
| 8.2B 自由哈密顿和相互作用哈密顿 .....               | 312     |
| 8.2C Fock 空间算符随时间的演化和运动方程 .....        | 317     |
| § 8.3 玻色-爱因斯坦凝结 .....                  | 319     |
| 8.3A 玻色-爱因斯坦凝结(BEC)的条件 .....           | 319     |

|            |                                |            |
|------------|--------------------------------|------------|
| 8.3B       | 气态 BEC 的实验发现                   | 322        |
| § 8.4      | 液氦的超流理论                        | 324        |
| 8.4A       | Bogoliubov 的正则变换               | 324        |
| 8.4B       | Landau 超流理论                    | 328        |
| § 8.5      | 超导的 BCS 理论                     | 331        |
| 8.5A       | 电子-声子相互作用和 Cooper 对的概念         | 331        |
| 8.5B       | 费米子的正则变换                       | 335        |
| 8.5C       | 超导基态, 能隙和超导临界温度                | 338        |
| 附录 8A      | 实时 Green 函数方法                  | 341        |
| 附录 8B      | Josephson 效应                   | 345        |
|            | 习题                             | 347        |
|            | 参考文献                           | 349        |
|            |                                |            |
| <b>第九章</b> | <b>相对论性量子力学</b>                | <b>350</b> |
| § 9.1      | 相对论性波动方程                       | 350        |
| 9.1A       | Klein-Gordon 方程                | 350        |
| 9.1B       | Dirac 方程及其平面波解                 | 352        |
| 9.1C       | Dirac 粒子的自旋                    | 356        |
| § 9.2      | K-G 方程与电磁场的耦合                  | 357        |
| § 9.3      | 电磁场中的电子                        | 361        |
| 9.3A       | Pauli 方程和电子的自旋磁矩               | 361        |
| 9.3B       | 自旋-轨道耦合与类氢原子能级的精细结构            | 363        |
| 9.3C       | 库仑场中 Dirac 方程的严格解              | 368        |
| § 9.4      | Klein 佯谬和反粒子                   | 371        |
| 9.4A       | 势阱为何关不住粒子?                     | 371        |
| 9.4B       | K-G 方程的分解形式, Klein 佯谬的解释       | 374        |
| § 9.5      | 关于狭义相对论的本质                     | 378        |
| 9.5A       | Einstein-Podolsky-Rosen 佯谬和反粒子 | 378        |
| 9.5B       | <i>CPT</i> 定理实际上已变为一个基本假设      | 379        |
| 9.5C       | 狭义相对论效应即隐藏反粒子场的效应              | 382        |
| 9.5D       | 相对论性多粒子体系定态薛定谔方程, 重夸克偶素        | 389        |
| § 9.6      | 氢原子基态附近能级的研究                   | 394        |
| 9.6A       | 氢原子基态附近能级概况, 超精细结构             | 394        |
| 9.6B       | 莱姆移位的定性解释——辐射修正                | 396        |
| 附录 9A      | 莱姆移位的一种半定量计算方法                 | 399        |

|  |            |
|--|------------|
| 附录 9B 中微子是超光速粒子吗? .....                        | 407        |
| 附录 9C 反引力和宇宙学 .....                            | 417        |
| 习题 .....                                       | 421        |
| 参考文献 .....                                     | 425        |
| <b>第十章 从实验看量子力学基本解释</b> .....                  | <b>429</b> |
| § 10.1 波粒二重性, 互补原理和测不准关系 .....                 | 429        |
| 10.1A 光的双缝干涉实验 .....                           | 430        |
| 10.1B 费曼“追踪电子”的双缝干涉实验 .....                    | 431        |
| 10.1C 原子干涉仪中的“Which Way”实验 .....               | 432        |
| § 10.2 Einstein-Podolsky-Rosen 佯谬及其实验检验 .....  | 436        |
| 10.2A EPR 佯谬与非定域纠缠态 .....                      | 436        |
| 10.2B Bell 不等式及其实验检验 .....                     | 438        |
| 10.2C 双光子的非经典干涉效应与 Franson 型实验<br>中的长程关联 ..... | 442        |
| 10.2D 对 $K^0 \bar{K}^0$ 体系做的 EPR 实验 .....      | 446        |
| § 10.3 量子理论和物理实在 .....                         | 450        |
| 10.3A Einstein-Pauli-Yukawa 佯谬 .....           | 450        |
| 10.3B 测量的本质 .....                              | 452        |
| 10.3C 量子态和波函数 .....                            | 455        |
| 10.3D 个体与环境的对立统一 .....                         | 456        |
| 10.3E 自在之物和为我之物 .....                          | 459        |
| 附录 10A 量子态隐形传输 .....                           | 463        |
| 附录 10B 薛定谔猫态及其消相干的实验研究 .....                   | 468        |
| 习题 .....                                       | 474        |
| 参考文献 .....                                     | 475        |
| <b>附录 关于物理量单位制</b> .....                       | <b>478</b> |
| <b>习题答案、提示或附注</b> .....                        | <b>482</b> |

# 第一章 量子力学的基本概念和方法

本书是在大学量子力学课程基础上编写的,因此第一章带有复习的性质,然而也包含有不少新的、提高的内容,如路径积分、谐振子运动中的几何相位、相干态和压缩态等.对量子力学这种学科(恐怕任何学科都是如此),学一遍是远远不够的,只有在不断深入学习、应用和研究的过程中,才会真懂,即才会有体会、有感觉.为此不妨引用一段杨振宁教授在谈到一位聪明的年轻人时所说的话(“杨振宁教授一席谈”,倪光炯根据录音整理,中国《百科知识》1987年第一、二期;转载在《科学、教育与中国现代化》,杨振宁著[人民日报出版社,1987],92~113页;《杨振宁演讲集》[南开大学出版社,1989],88~100页等多本书上):

他虽然很聪明,比如说我问他几个量子力学的问题,他都会回答.但我问他:这些量子力学问题,哪一个你觉得是妙的?然而他却讲不出来.对他讲起来,整个量子力学就像是茫茫一片.我对于他的看法是:尽管他吸收了很多东西,可是他没有发展成一个 taste.这就是我所以觉得对他的前途发展不能采取最乐观态度的基本道理.因为学一个东西不只是一定要学到一些知识,学到一些技术上面的特别的方法,而是更要对它的意义有一些了解,有一些欣赏.假如一个人在学了量子力学以后,他不觉得其中有的东西是重要的,有的东西是美妙的,有的东西是值得跟人辩论得面红耳赤而不放手的,那我觉得他对这个东西并没有学进去.他只学了很多可以参加考试得很好分数的知识,这不是真正做学问的精神.他没有把问题里面基本的价值掌握住.学一个学科,不只是物理学,不但要掌握住它们里面的知识、定理和公理,更要掌握住这些知识、定理和公理的意义、精神及其重要性,等到你觉得这些东西重要到一个程度时,你才是真正把这些东西吸收进去了.我想一个思考比较成熟的、学得很好的学生,如果能够在一个早的时候接触到一些风格比较合适或者是比较重要的文章,并吸收了它们的精神,这对他将来选择正确的问题和正确地解决问题的方法是会有很大帮助的.

## § 1.1 自旋二态体系

### 1.1A 电子的自旋

对原子、分子过程的长期研究使人们逐渐懂得：对微观世界一个态的认识，与过去对宏观状态的描写是很不相同的。最能显示这一特色的体系是电子的自旋，乍看起来，它似乎完全没有经典的对应<sup>[1-6]</sup>。

在 1922 年所做的 Stern-Gerlach 实验表明：一个电子（实际上是一个原子中最外层的 S 电子）具有自旋角动量  $\mathbf{S}$ ， $\mathbf{S}$  沿着空间某一固定方向（通常是一个固定的外磁场  $\mathbf{B}$  的方向，并取为  $z$  轴方向），只有两个可能的投影值，记为

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \quad \text{或} \quad S_z = -\frac{\hbar}{2} \quad (1.1.1)$$

这里

$$\begin{aligned} \hbar &= 1.0546 \times 10^{-34} \text{ 焦耳} \cdot \text{秒} \\ &= 6.5822 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{秒} \end{aligned} \quad (1.1.2)$$

是一个基本的角动量单位，它等于 Planck 常数  $h$  除以  $2\pi$  ( $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ )。

现在已经测定电子的自旋磁矩  $\boldsymbol{\mu}$  与  $\mathbf{S}$  成正比：

$$\boldsymbol{\mu} = -g \frac{e}{2mc} \mathbf{S} \quad (1.1.3)$$

其中  $e = 4.80296 \times 10^{-10} \text{ esu} = 1.602095 \times 10^{-19} \text{ 库仑}$ ，

$$m = 9.10710 \times 10^{-31} \text{ 千克}$$

分别是电子的电荷（绝对值）和质量，无量纲的  $g$  因子叫做回转磁比率，在 Dirac 理论（见 9.3.8 式）中可以证明  $g = 2$ （在只考虑电子的轨道运动而不计自旋时， $g_l = 1$ ），但实验测得为

$$g = 2[1 + 0.0011596522] \quad (1.1.4)$$

其中  $\frac{1}{2}(g - 2) = a = 0.00116$ ，这一个  $g$  对于 Dirac 理论值 2 的相对偏差，常被称为电子磁矩的反常部分，现在已能够由量子电动力学予以解释。

电子自旋磁矩与外磁场  $\mathbf{B}$  的相互作用能量是

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (1.1.5)$$

以(1.1.3)式代入(1.1.5)式,即见  $S_z = \frac{\hbar}{2}$  与  $(-\frac{\hbar}{2})$  的两个态在磁场中有不同的能量;再假设磁场强度沿  $z$  方向有一不均匀性,这使电子束流(沿  $y$  轴方向)受到沿  $z$  方向的力

$$F_z = \frac{\partial}{\partial z}(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (1.1.6)$$

于是束流便分成了两束,这是 Stern-Gerlach 实验及类似实验的基础.

### 1.1B 自旋的矩阵表示及其几率诠释

经过 70 多年的研究,人们仍不知道电子有什么样的内部结构,因而不了解为什么  $\mathbf{S}$  或其投影值是量子化的. 不过最聪明的办法是把这个问题搁置起来,而明确指出自旋体系是一个最简单的二态体系,把对应于  $S_z = \frac{\hbar}{2}$  和  $(-\frac{\hbar}{2})$  的两个态分别记作

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.1.7)$$

这里引进了二行一列的列矩阵表示. 进一步指出:一个电子的任意自旋状态  $|\psi(t)\rangle$  必可表成为  $\alpha$  与  $\beta$  的线性组合:

$$|\psi(t)\rangle = C_1(t)\alpha + C_2(t)\beta \quad (1.1.8)$$

其中  $C_1(t)$  与  $C_2(t)$  一般是任意复数(时间  $t$  的函数),但是受到归一化条件的限制. 后一点需要说明. 为此先定义态  $|\psi(t)\rangle$  的厄密共轭为

$$\langle\psi(t)| = C_1^*(t)\alpha^\dagger + C_2^*(t)\beta^\dagger \quad (1.1.9)$$

其中

$$\alpha^\dagger = (1, 0), \quad \beta^\dagger = (0, 1) \quad (1.1.10)$$

我们要求  $|\psi(t)\rangle$  是一个归一化的态:

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1 \quad (1.1.11)$$

注意到  $\alpha^\dagger\alpha = \beta^\dagger\beta = 1, \alpha^\dagger\beta = \beta^\dagger\alpha = 0$ , 就有

$$|C_1(t)|^2 + |C_2(t)|^2 = 1 \quad (1.1.12)$$

这个归一化条件的意义是:  $|\psi(t)\rangle$  态中电子自旋朝上 ( $S_z = \frac{\hbar}{2}$ ) 的几率与朝下 ( $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ ) 的几率之和等于 1. 量子力学的这种几率诠释经过

了长期的考验. 按照哥本哈根学派的观点(这种观点已为大多数物理学家所接受), 量子力学应当能够描写单个电子, 但其预言与实验的联系只能是几率性即统计性质的. 为说明这一点, 我们来看一个相继的 Stern-Gerlach (S-G) 实验(见图 1.1.1).

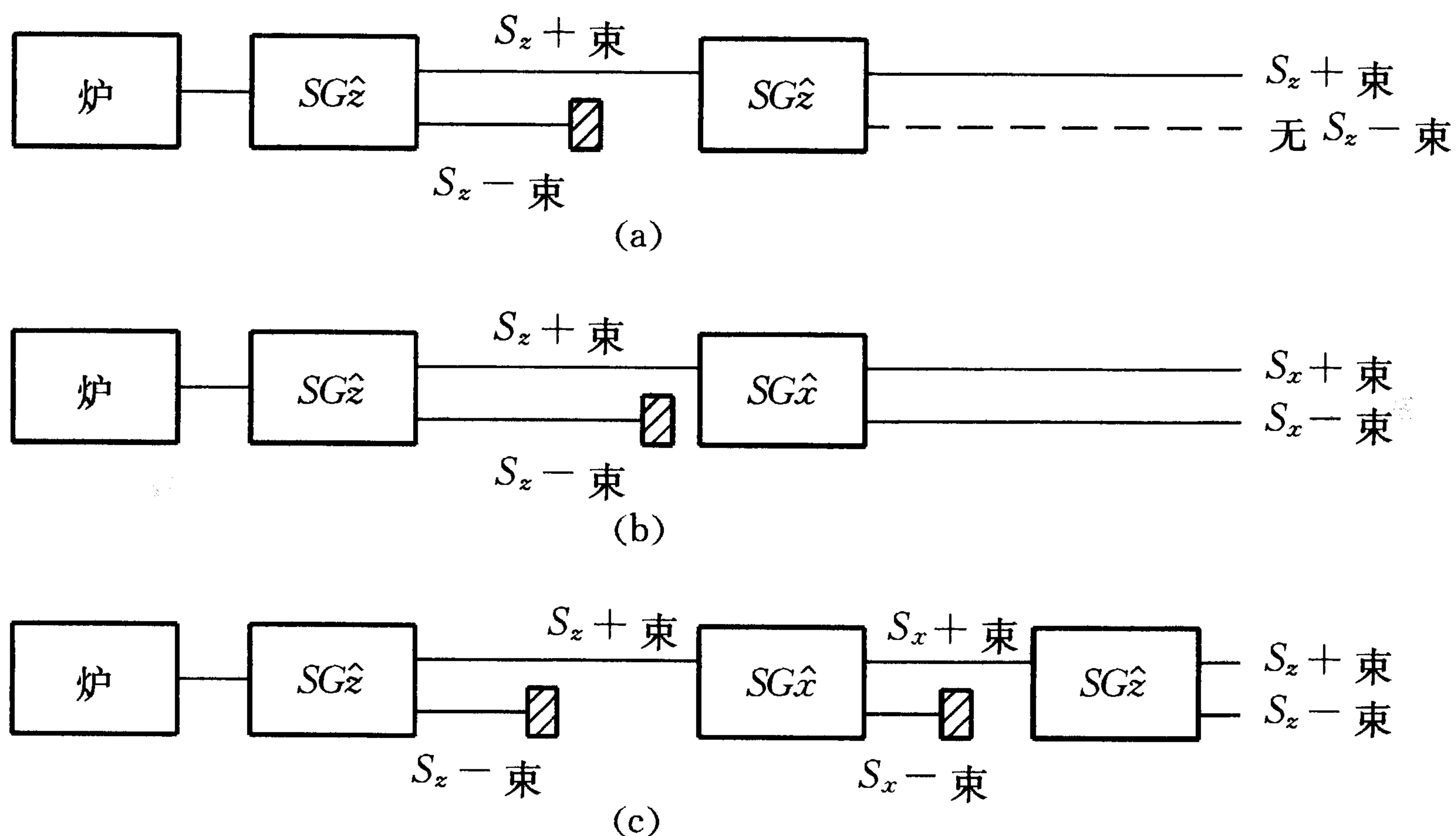


图 1.1.1 相继的 Stern-Gerlach 实验

(引自文献[7], 说明见正文)

在经过第一个装置  $SG_{\hat{z}}$  后, 沿  $y$  轴运动的电子束在(不均匀的) $z$  方向磁场内分成两束  $S_z+$  和  $S_z-$ , 两者的强度相等. 若将  $S_z-$  束阻止, 让  $S_z+$  束再经过同样的第二个装置  $SG_{\hat{z}}$ , 情况将没有变化,  $S_z+$  束电子仍沿着  $z$  方向完全极化, 如图 1.1(a) 所示.

现在改变情况, 令第二个装置中沿着  $\hat{x}$  方向的磁场有不均匀的强度变化, 记它为  $SG_{\hat{x}}$ , 则  $S_z+$  束经过  $SG_{\hat{x}}$  后将分成强度相等的两束  $S_x+$  和  $S_x-$ , 见图 1.1(b). 为解释这一事实, 能否说在  $S_z+$  束中的电子有 50% 具有  $S_z+$  和  $S_x+$  的特性, 而另外 50% 的电子具有  $S_z+$  和  $S_x-$  的特性呢?

为回答此一问题, 再看图 1.1(c). 把经过第二个  $SG_{\hat{x}}$  的  $S_x-$  束阻止, 让  $S_x+$  穿过  $SG_{\hat{z}}$  型的第三个装置, 则实验发现经第三个  $SG_{\hat{z}}$  后,  $S_z+$  与  $S_z-$  又以同样的几率出现! 这一事实是经典观念完全不能理解的. 因为经过第一个  $SG_{\hat{z}}$  后,  $S_z-$  的成分似乎已完全被阻止住了, 它怎么又会重新出现呢?

上述实验说明: 一般地说, 量子力学中的测量是必定要改变微观客体的状态的. 当加上第二个  $SG_{\hat{x}}$  装置去测量  $S_x$  时, 原来关于  $S_z$  的信息已归于消失. 一个电子的自旋态, 要么按  $S_z$  分解(如(1.1.8)式所示), 要么按  $S_x$  分解. 设想一个电子同时具有确定的  $S_x$  和  $S_z$  值, 那是不符合事实的.



### 1.1C Pauli 矩阵和自旋极化矢量

在量子力学中不能同时测量  $S_x$  和  $S_z$  的这一事实,用数学的语言来表达,即是  $S_x$  和  $S_z$  所对应的两个算符  $\sigma_x$  和  $\sigma_z$  之间的不可对易性. 记  $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ , 则对应于态的矩阵表示(1.1.7),可以取  $\boldsymbol{\sigma}$  为如下的 Pauli 矩阵表示:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.1.13)$$

显然

$$\sigma_z \alpha = \alpha, \quad \sigma_z \beta = -\beta \quad (1.1.14)$$

但是

$$\begin{aligned} \sigma_x \alpha &= \beta, & \sigma_x \beta &= \alpha \\ \sigma_y \alpha &= i\beta, & \sigma_y \beta &= -i\alpha \end{aligned} \quad (1.1.15)$$

用量子力学的语言来说:  $\alpha$  和  $\beta$  是  $\sigma_z$  的本征态而不是  $\sigma_x$  (或  $\sigma_y$ ) 的本征态. 在前述实验 1.1(b)中,经  $SG_z$  而选出的  $S_x \pm$  态才是  $\sigma_x$  的本征态. 这就是说它们满足如下的本征方程:

$$\sigma_x |S_x \pm\rangle = \pm |S_x \pm\rangle \quad (1.1.16)$$

由此易证(习题)

$$|S_x \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha \pm \beta) \quad (1.1.17)$$

这就说明了为什么在实验 1.1(c)中  $S_x +$  束流经过第三个装置  $SG_z$  后重又出现了强度相等的  $S_z +$  和  $S_z -$  束. 还要注意,第三个  $SG_z$  的测量不能测出(1.1.17)式中的士号,因此有时也说:测量作为一种筛选过程,使测量前量子态的相干性(即态所包含的相位信息)归于消失.

我们来看 Pauli 算符之间的不可对易性. 易证

$$\begin{cases} \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i\sigma_z \\ \sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = 2i\sigma_x \\ \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z = 2i\sigma_y \end{cases} \quad (1.1.18)$$

如果把  $\boldsymbol{\sigma}$  看成一个矢量,对易关系(1.1.18)可以合并写成

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \quad (1.1.19a)$$

或

$$\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\sigma} = 2i\boldsymbol{\sigma} \quad (1.1.19b)$$

( $\epsilon_{ijk}$  是 Levi-Civita 反对称记号,  $\epsilon_{123} = 1$ , 其余  $\epsilon_{ijk}$  按轮换规则由奇偶性决定之。)有趣的是比较经典力学中的普通矢量  $\mathbf{A}$ , 它与自身的矢量积恒为零:  $\mathbf{A} \times \mathbf{A} \equiv 0$ . 现在(1.1.19)式回到  $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$  后有

$$\mathbf{S} \times \mathbf{S} = i\hbar\mathbf{S} \quad (1.1.20)$$

它显然是一种量子现象 ( $\hbar \neq 0$ ). 正因为如此, 在半经典图像中, 常把自旋用一个绕  $z$  轴而快速进动的矢量来表示, 这也是“不确定关系”(见后)在自旋中的表现. 注意, 这里一个进动态, 即一个旋转着的  $\mathbf{S}$  矢量代表一个“量子态”, 而不是像经典力学中那样, 一个瞬时的矢量方向便代表一个“经典态”. 对一个固定长度的  $\mathbf{S}$  矢量来说, 量子力学只需一个  $S_z = m_z \hbar$ , ( $m_z = \pm \frac{1}{2}$ ), 便决定了一个“本征态”,  $m_z$  称为好量子数, 而经典物理中则需要  $S_z$  和  $S_x$  (或  $S_y$ ) 两个量来确定一个“经典态”.

马上产生问题: 对一般的自旋量子态, 即(1.1.8)式所示之  $|\psi(t)\rangle$ , 两个复数  $C_1(t)$  和  $C_2(t)$  加上一个归一化条件(1.1.12)后, 似尚有 3 个实的自由度, 应如何去理解呢? 为此我们需要引入平均值(或期待值)的概念.

量子力学中的“态”本身不是直接可观察量, 而对应于“角动量”算符的“自旋”, 由 Pauli 矩阵表示, 也不是直接可观察量. 只有将两者结合起来, 取  $\boldsymbol{\sigma}$  在  $|\psi(t)\rangle$  中的平均值, 才对应于直接可观察量, 记它为

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \equiv \mathbf{P} = \langle \psi(t) | \boldsymbol{\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (1.1.21)$$

并称之为极化矢量. 以(1.1.8)式代入后得到  $\mathbf{P}$  的 3 个分量等于

$$\begin{cases} P_x = 2\text{Re}(C_1^* C_2) \\ P_y = 2\text{Im}(C_1^* C_2) \\ P_z = |C_1|^2 - |C_2|^2 \end{cases} \quad (1.1.22)$$

$$\mathbf{P}^2 = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2 = (|C_1|^2 + |C_2|^2)^2 = 1$$

作为一个单位长度的矢量,  $\mathbf{P}$  的方向只需用两个球坐标角度( $\theta$  和  $\phi$ )来确定. 原来在  $|\psi(t)\rangle$  中还包含有一个整体的相角自由度  $|\psi(t)\rangle = e^{i\alpha(t)} |\tilde{\psi}(t)\rangle$ , 这个相角  $\alpha(t)$  在(1.1.21)式的运算中恰好消去, 不同  $\alpha$  角而对应于同一个  $|\tilde{\psi}(t)\rangle$  的态具有同一个  $\mathbf{P}(t)$ :

$$\mathbf{P}(\theta(t), \phi(t)) = \langle \tilde{\psi}(t) | \boldsymbol{\sigma} | \tilde{\psi}(t) \rangle \quad (1.1.23)$$

关于  $\alpha(t)$  是否包含可观察成分的问题, 我们留到第六章去讨论, 这里只关心  $\mathbf{P}$  矢量如何运动? 因为态  $|\psi(t)\rangle$  随时间的变化由薛定谔方程决定:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (1.1.24)$$

其中哈密顿量  $H$  已由 (1.1.5) 式给出. 记  $\boldsymbol{\mu} = -\frac{g}{2}\mu_B\boldsymbol{\sigma}$ ,  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} = 5.788 \times 10^{-11} \text{MeV/T}$  是 Bohr 磁子(磁矩的单位). 将 (1.1.21) 对时间求导后利用 (1.1.19) 式可得

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{P}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | (\boldsymbol{\sigma}H - H\boldsymbol{\sigma}) | \psi \rangle \\ &= \frac{g\mu_B}{\hbar} \mathbf{B} \times \mathbf{P} \end{aligned} \quad (1.1.25)$$

这一个  $\mathbf{P}$  的 Bloch 运动方程可以用经典物理中电荷系统在磁场  $\mathbf{B}$  中的运动方程(荷电陀螺在磁场中的 Larmor 进动)

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \Gamma \mathbf{L} \times \mathbf{B} \quad (1.1.26)$$

相比较. 这里电荷运动产生磁矩  $\mathbf{M} = \Gamma \mathbf{L}$ ,  $\mathbf{L}$  是系统的(轨道)角动量. 注意 (1.1.25) 式的来源是假设电子有自旋角动量  $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ , 而自旋态总是

$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  和  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  两个态的线性叠加, 加上量子运动方程本质上是对易关系这几条, 最后结果证明出发点是正确的.

所以我们看到: 电子的自旋在本质上是一个量子概念, 而在其角动量性质上, 又有其经典的对应. 还要注意: 量子本质表现在  $\mathbf{P}$  矢量的运动中始终存在着起伏, 后者用均方差来量度:

$$\begin{aligned} \langle (\Delta\sigma_j)^2 \rangle &\equiv \langle (\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle)^2 \rangle = \langle \sigma_j^2 \rangle - \langle \sigma_j \rangle^2 \\ &= 1 - \langle \sigma_j \rangle^2 = 1 - P_j^2, \quad (j = 1, 2, 3) \\ \langle (\Delta\boldsymbol{\sigma})^2 \rangle &= \sum_j \langle (\Delta\sigma_j)^2 \rangle = 2 \end{aligned} \quad (1.1.27)$$

这种起伏是量子不确定关系在自旋运动中的表现.

## § 1.2 态矢量、算符和矩阵表示

### 1.2A 右态矢和左态矢

上节讨论的自旋体系是一个“二态体系”，只有两个基本态， $\alpha$  和  $\beta$ ，分别是  $S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$  的本征态。我们常说  $\alpha$  和  $\beta$  张成一个“二维的”Hilbert 空间。Hilbert 空间是一个抽象的有“内积”的复的线性矢量空间\*，一个矢量空间是有“完备性”的，对自旋体系来说，“完备性”是指一切可能量子态（矢量） $|\psi(t)\rangle$  都可以表示成为基矢  $\alpha$  和  $\beta$  的线性组合，但其组合系数一般是时间  $t$  的函数。

现在推广到一般的体系。假设有一个与该体系有关的不显含时间的算符  $\hat{A}$ ，它的一个本征态记为  $|a\rangle$ ，就是说

$$\hat{A} |a\rangle = a |a\rangle \quad (1.2.1)$$

其中本征值  $a$  是一个数，假定它可取  $a, a', a'', \dots$  等共  $N$  个值 ( $N$  可能为  $\infty$ )。记此集合为  $\{a\}$ 。常说  $|a\rangle, |a'\rangle, |a''\rangle, \dots$  等张成一个  $N$  维的 Hilbert 空间。按照 Dirac 的理论，称此抽象的基矢量  $|a\rangle$  为一个 ket (右态矢或刃矢量)，由它们张成的空间为 ket 空间。一个任意的态矢量 ket  $|\alpha\rangle$  可以用基矢  $|a\rangle$  展开：

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} C_{a'} |a'\rangle \quad (1.2.2)$$

系数  $C_{a'}$  一般是复数。

为了定义“内积”，现在引进与 ket 空间对偶的空间，称为 bra 空间。即对应于每一个 ket  $|a\rangle$ ，定义一个 bra (左态矢或刃矢量)  $\langle a|$ 。这种对偶对应 (dual correspondence, 记为 DC) 是数学中常用的抽象映照 (mapping) 概念：

$$|a\rangle \xleftrightarrow{\text{DC}} \langle a| \quad (1.2.3)$$

对 (1.2.2) 式所示之任意 ket，则有对应

$$C_\alpha |\alpha\rangle + C_\beta |\beta\rangle \xleftrightarrow{\text{DC}} C_\alpha^* \langle \alpha| + C_\beta^* \langle \beta| \quad (1.2.4)$$

注意右端的  $C_\alpha$  要取复共轭  $C_\alpha^*$ 。

\* 进一步讨论请见附录 1B。

我们定义一个 bra  $\langle\beta|$  和一个 ket  $|\alpha\rangle$  的“内积”为  $\langle\beta|$  左乘  $|\alpha\rangle$ , 即  $\langle\beta|\alpha\rangle$ , 它对应于一个复数, 有性质

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* \quad (1.2.5)$$

由此可见,  $\langle\alpha|\alpha\rangle$  必定为实数. 进一步可设

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 \quad (1.2.6)$$

(等号仅当  $|\alpha\rangle$  为一零矢量 (null ket) 时才成立). 此式表示态  $|\alpha\rangle$  具有正定的度规, 本书将只考虑这种物理态, 因为它对量子力学的几率假设是至关重要的.

两个右态矢  $|\alpha\rangle$  和  $|\beta\rangle$  如满足条件

$$\langle\alpha|\beta\rangle = 0 \quad (1.2.7)$$

就称为彼此正交. 进一步对一个非 null ket 的态  $|\alpha\rangle$ , 总可以定义一个归一化的 ket  $|\tilde{\alpha}\rangle$  如下:

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \left( \frac{1}{\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}} \right) |\alpha\rangle, \quad \langle\tilde{\alpha}|\tilde{\alpha}\rangle = 1 \quad (1.2.8)$$

于是, 我们总可以假定物理态是归一化的. 不过对于连续谱 ( $a$  为连续变数) 情形, 我们可以取不同于 (1.2.8) 式的归一化条件 (见 § 1.3).

### 1.2B 算符

我们已经知道, 量子力学中的动量和自旋等都必须用算符来表示. 现在从一般的更抽象的观点来加以讨论, 记这些算符为  $\hat{X}$ ,  $\hat{Y}$  等, 而将其中一类对应于可观察量的算符, 则记为  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  等.

算符  $\hat{X}$  或  $\hat{Y}$  从左方向右作用于一个 ket  $|\alpha\rangle$ , 仅当

$$\hat{X}|\alpha\rangle = \hat{Y}|\alpha\rangle \quad (1.2.9)$$

对任意  $|\alpha\rangle$  都成立时, 称此两算符  $\hat{X}$  和  $\hat{Y}$  相等:

$$\hat{X} = \hat{Y} \quad (1.2.10)$$

算符间的加法运算满足交换律和结合律:

$$\hat{X} + \hat{Y} = \hat{Y} + \hat{X} \quad (1.2.11)$$

$$\hat{X} + (\hat{Y} + \hat{Z}) = (\hat{X} + \hat{Y}) + \hat{Z} \quad (1.2.12)$$

除了时间反演算符 (第三章) 外, 本书中的算符都是线性的, 意思是:

$$\hat{X}(C_\alpha|\alpha\rangle + C_\beta|\beta\rangle) = C_\alpha\hat{X}|\alpha\rangle + C_\beta\hat{X}|\beta\rangle \quad (1.2.13)$$

一个算符对一个 bra  $\langle\alpha|$  的作用是从右方向左的, 记为  $\langle\alpha|\hat{X}$ , 注意: 一般地说,  $\langle\alpha|\hat{X}$  并不与  $\hat{X}|\alpha\rangle$  对偶, 要另外引进一个  $\hat{X}^+$ , 才有如下的对偶关系

$$\hat{X}|\alpha\rangle \xleftrightarrow{\text{DC}} \langle\alpha|\hat{X}^+ \quad (1.2.14)$$

算符  $\hat{X}^+$  称为是  $\hat{X}$  的厄密共轭 (Hermitian adjoint), 或简称  $\hat{X}^+$  为  $\hat{X}$  的共轭 (adjoint), 一般地  $\hat{X}^+ \neq \hat{X}$ . 仅当

$$\hat{X} = \hat{X}^+ \quad (1.2.15)$$

成立时, 才说  $\hat{X}$  是自轭 (self-adjoint) 算符, 有时也说  $\hat{X}$  是厄密 (Hermitian) 算符 (见下面 (1.2.23) 式).

两个算符  $\hat{X}$  和  $\hat{Y}$  的乘法运算一般是不对易的:

$$\hat{X}\hat{Y} \neq \hat{Y}\hat{X} \quad (1.2.16)$$

但满足结合律

$$\hat{X}(\hat{Y}\hat{Z}) = (\hat{X}\hat{Y})\hat{Z} = \hat{X}\hat{Y}\hat{Z} \quad (1.2.17)$$

同时也有

$$\begin{aligned} \hat{X}(\hat{Y}|\alpha\rangle) &= (\hat{X}\hat{Y})|\alpha\rangle = \hat{X}\hat{Y}|\alpha\rangle \\ (\langle\beta|\hat{X})\hat{Y} &= \langle\beta|(\hat{X}\hat{Y}) = \langle\beta|\hat{X}\hat{Y} \end{aligned} \quad (1.2.18)$$

注意

$$(\hat{X}\hat{Y})^+ = \hat{Y}^+\hat{X}^+ \quad (1.2.19)$$

证明如下:

$$\hat{X}\hat{Y}|\alpha\rangle = \hat{X}(\hat{Y}|\alpha\rangle) \xleftrightarrow{\text{DC}} (\langle\alpha|\hat{Y}^+) \hat{X}^+ = \langle\alpha|\hat{Y}^+\hat{X}^+$$

证毕. 前面已经看到, “内积”  $\langle\alpha|\beta\rangle$  是一个数, 但“外积”  $|\beta\rangle\langle\alpha|$  却是一个算符. 事实上, 它作用到  $|\alpha\rangle$  上时使后者转变为  $|\beta\rangle$  (假定  $|\alpha\rangle$ ,  $|\beta\rangle$  均已归一化):

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|)|\alpha\rangle = |\beta\rangle \cdot \langle\alpha|\alpha\rangle = |\beta\rangle \quad (1.2.20)$$

一般地它能够将一个任意的 ket  $|\gamma\rangle$  转到  $|\beta\rangle$  方向:

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|)|\gamma\rangle = |\beta\rangle \cdot \langle\alpha|\gamma\rangle \quad (1.2.21)$$

易见如  $\hat{X} = |\beta\rangle\langle\alpha|$ , 则  $\hat{X}^+ = |\alpha\rangle\langle\beta|$ .

还要注意,  $\hat{X}|\alpha\rangle$  的对偶是  $\langle\alpha|\hat{X}^+$ , 故

$$\begin{aligned} \langle\beta|\hat{X}|\alpha\rangle &= \langle\beta|\cdot(\hat{X}|\alpha\rangle) = \{(\langle\alpha|\hat{X}^+)\cdot|\beta\rangle\}^* \\ &= \langle\alpha|\hat{X}^+|\beta\rangle^* \end{aligned} \quad (1.2.22)$$

于是对一个自轭算符  $\hat{X}$  (1.2.15), 我们有

$$\langle \beta | \hat{X} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{X} | \beta \rangle^* \quad (1.2.23)$$

一般书上常把此式作为  $\hat{X}$  是 Hermitian 算符的定义. 严格地说,  $\hat{X}$  的自轭性  $\hat{X} = \hat{X}^\dagger$  是抽象地定义的, 而其厄密性 (1.2.23) 则是它在正确的物理态  $|\alpha\rangle$  和  $|\beta\rangle$  中的实现. 除开一些特别的奇性态 (如电荷数  $Z > 137$  时的点核, 其 Dirac 方程求解时会遇到的情形) 外, 我们将视“自轭性”与“厄密性”为同义语.

### 1.2C 基矢和矩阵表示

关于厄密算符有一条定理:

**定理** 一个厄密算符  $\hat{A}$  的本征值必定是实数, 对应于不同本征值的本征矢彼此正交.

证  $\hat{A}$  作用到一个态矢  $|a\rangle$  给出本征值  $a$ ,

$$\hat{A} |a\rangle = a |a\rangle \quad (1.2.24)$$

对另一本征值  $a'$ , 写出类似式子并取厄密共轭

$$\langle a' | \hat{A} = a'^* \langle a' | \quad (1.2.25)$$

(已用了  $\hat{A}$  的厄密性条件:  $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ ). 将 (1.2.24) 式左乘  $\langle a' |$ , 利用 (1.2.25) 式后即得

$$(a - a'^*) \langle a' | a \rangle = 0 \quad (1.2.26)$$

如果选  $a = a'$ , 则因  $\langle a | a \rangle \neq 0$ , 有

$$a = a^* \quad (1.2.27)$$

这就证明了定理的前一句话. 为证明后一句话, 选  $a \neq a'^* = a'$ , 即得

$$\langle a' | a \rangle = 0, \quad (a \neq a') \quad (1.2.28)$$

它表示  $|a\rangle$  与  $|a'\rangle$  正交. 证毕.

我们总可以使态矢归一化, 于是可写出

$$\langle a | a' \rangle = \delta_{aa'} \quad (1.2.29)$$

我们还常说  $|a\rangle, |a'\rangle, \dots$  等构成一个正交归一完备系, 记为  $\{|a\rangle\}$ . 这就比 (1.2.29) 式更多了一个假定. 所谓完备性是指: Hilbert 空间的一个任意态矢量  $|\alpha\rangle$ , 总可以用  $\{|a\rangle\}$  展开如下:

$$|\alpha\rangle = \sum_a C_a |a\rangle \quad (1.2.30)$$

左乘  $\langle a' |$ , 用(1. 2. 29)式后即得展开系数

$$C_{a'} = \langle a' | \alpha \rangle \quad (1. 2. 31)$$

代回(1. 2. 30)式后便有

$$|\alpha\rangle = \sum_a |a\rangle \langle a | \alpha \rangle \quad (1. 2. 32)$$

利用前面讲过的组合公理, 可把上式看成为一个算符  $\sum_a |a\rangle \langle a |$  作用到态  $|\alpha\rangle$  上, 这个算符

$$\sum_a |a\rangle \langle a | = 1 \quad (1. 2. 33)$$

的右端 1 应理解为单位算符. (1. 2. 33)式称为完备性关系或封闭性关系, 其中每一项

$$P_a = |a\rangle \langle a | \quad (1. 2. 34)$$

叫做投影算符, 当它作用到一个任意态  $|\alpha\rangle$  上时会把  $|\alpha\rangle$  所包含的  $|a\rangle$  成分投影出来:

$$P_a |\alpha\rangle = |a\rangle \langle a | \alpha \rangle = C_a |a\rangle \quad (1. 2. 35)$$

本节讨论的态矢量和算符等还是抽象的对象, 而上节写出的自旋态  $\alpha, \beta$  等则已经是一种具体的矩阵表示, 比如  $S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$  的  $\alpha$  和  $\beta$  常写成

$$\alpha = \left| \frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1. 2. 36)$$

以表示它们分别是厄密算符  $S_z = \frac{1}{2} \hbar \sigma_z$  的两个本征态. 在这一“ $\sigma_z$  表象”中, 3 个厄密算符  $\sigma_x, \sigma_y$  和  $\sigma_z$  的表示如(1. 1. 13)式, 分别是  $2 \times 2$  的矩阵,  $\sigma_z$  是“对角的”, 对角元就是实的本征值,  $\sigma_x$  与  $\sigma_y$  则不是对角的, 矩阵元一般不是实数, 但满足(1. 2. 23)式所示之对称性.

从二态推广到  $N$  态, 我们可把一个抽象的算符  $\hat{X}$  表示成  $N \times N$  的一个矩阵如下:

$$\hat{X} = \sum_{a''} \sum_{a'} |a''\rangle \langle a'' | \hat{X} | a'\rangle \langle a' | \quad (1. 2. 37)$$

右端利用了(1. 2. 33)式, 将两个 1 分别从左和从右作用到  $\hat{X}$  上. 中间  $\langle a'' | \hat{X} | a'\rangle$  是一个复数, 它有  $N^2$  个, 以  $a''$  为行指标,  $a'$  为列指标, 可排成一个矩阵



$$\hat{X} \doteq \begin{pmatrix} \langle a^{(1)} | \hat{X} | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(1)} | \hat{X} | a^{(2)} \rangle & \cdots \\ \langle a^{(2)} | \hat{X} | a^{(1)} \rangle & \langle a^{(2)} | \hat{X} | a^{(2)} \rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (1.2.38)$$

注意这里用记号 $\doteq$ 代表“表示”之意,不同于(1.2.37)式中的等号.一个算符的具体矩阵表示本应依赖于我们决定选择哪一套基矢 $|a\rangle$ 来展开,但实际上为方便起见,人们常常也只讨论算符的矩阵表示而略去(1.2.37)式中的算符因子 $|a''\rangle\langle a'|$ ,并且将记号 $\doteq$ 写成等号,例如对自旋的(1.1.13)式那样.

有了矩阵表示后,两个算符 $\hat{X}$ 和 $\hat{Y}$ 的乘积

$$\hat{Z} = \hat{X}\hat{Y}$$

便变成了矩阵的乘法运算:

$$\begin{aligned} \langle a'' | \hat{Z} | a' \rangle &= \langle a'' | \hat{X}\hat{Y} | a' \rangle \\ &= \sum_{a'''} \langle a'' | \hat{X} | a''' \rangle \langle a''' | \hat{Y} | a' \rangle \end{aligned} \quad (1.2.39)$$

右端只不过是在 $\hat{X}$ 和 $\hat{Y}$ 之间插入了一个恒等算符1而已.

类似地可以讨论两个态矢量的内积 $\langle\beta|\alpha\rangle$ 或外积 $|\beta\rangle\langle\alpha|$ ,前者得到一个复数,后者得到一个 $N \times N$ 的矩阵.还要指出,本节讨论的是本征值 $a$ 为分立(离散)的情况,形式上也可推广到本征值个数 $N \rightarrow \infty$ 的情况,不过 $N$ 有限和 $N \rightarrow \infty$ 是有本质区别的,有时必须十分小心(见下节).

## § 1.3 波函数和薛定谔方程,海森堡运动方程

### 1.3A 连续谱与 $\delta$ 函数

量子力学中有些观察量是分立的,如自旋投影 $S_z$ 只能取 $\pm \frac{\hbar}{2}$ ,有些则是连续的,如动量分量 $p_z$ 可取 $(-\infty, \infty)$ 区间内的一切可能实数值.由这种连续谱的本征矢所张成的矢量空间是一个无限维的 Hilbert 空间,其数学理论相当复杂,好在大部分结果仍可用分立有限( $N$ )维矢量空间的理论作形式推广而得到.

相似于(1.2.24)式,写出

$$\hat{\xi} | \xi' \rangle = \xi' | \xi' \rangle \quad (1.3.1)$$

$\hat{\xi}$ 是算符, $\xi'$ 则是一个数,称 $|\xi'\rangle$ 是算符 $\hat{\xi}$ 具有本征值 $\xi'$ 的一个本征矢.对

连续谱情形,代替(1.2.29),现在有

$$\langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi'') \quad (1.3.2)$$

这里引进了 Dirac 的  $\delta$  函数,其定义由下式给出:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\xi') \delta(\xi' - \xi'') d\xi' = f(\xi'') \quad (1.3.3)$$

其中  $f(\xi')$  是一个足够光滑的函数,特例当  $f(\xi') = 1$  时有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(\xi' - \xi'') d\xi' = 1 \quad (1.3.4)$$

此归一化条件表示  $\delta$  函数具有量纲为其宗量  $\xi'$  的倒数.

代替完备性条件(1.2.33),现在有

$$\int d\xi' | \xi' \rangle \langle \xi' | = 1 \quad (1.3.5)$$

作为一个重要的例子,我们将讨论位置算符  $\hat{x}$  和它的本征矢  $|x'\rangle$ :

$$\hat{x} |x'\rangle = x' |x'\rangle \quad (1.3.6)$$

其中  $x'$  是一个标记位置的数.

### 1.3B 图景和表象,薛定谔方程

量子力学中一个抽象意义下的态矢量  $|\psi(t)\rangle$  是没有表象的,它作为时间  $t$  的函数,其运动规律遵循薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1.3.7)$$

其中哈密顿算符  $\hat{H}$  也是在抽象意义下写出,一般假定它是与时间无关的. 为了得到初学量子力学时就熟悉的薛定谔方程,我们引进位形空间表象(为简单起见,先讨论一维情况). 即引进(1.3.6)式所定义的位置算符基矢  $|x\rangle$  后,定义  $x$  表象的波函数为

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle \quad (1.3.8)$$

为理解此式,不妨与普通二维欧氏空间中一个矢量  $\mathbf{V}$  及其投影表示

$$\mathbf{V}(t) = V_x(t)\mathbf{i} + V_y(t)\mathbf{j} \quad (1.3.9a)$$

作一比较. 态矢  $|\psi(t)\rangle$  对应于  $\mathbf{V}(t)$ , 位置算符基矢  $|x\rangle$  对应于  $\mathbf{i}, \mathbf{j}$  等单位矢量, 而波函数  $\psi(x, t)$  则对应于  $\mathbf{V}$  在  $\mathbf{i}, \mathbf{j}$  上的投影:  $V_x = \mathbf{i} \cdot \mathbf{V}$ ,

$V_y = \mathbf{j} \cdot \mathbf{V}$ . (1.3.8)式中态矢  $|\psi(t)\rangle$  随时间而变而  $|x\rangle$  不含  $t$ , 结果波函数  $\psi(x, t)$  中的宗量  $t$  来自  $|\psi(t)\rangle$  而  $x$  来自  $|x\rangle$ , 这叫做薛定谔图景.

设想(1.3.9a)中的  $\mathbf{V}$  原来顺时针方向转动而固定坐标系的  $i, j$  不动,  $V_x(t)$  是  $t$  的函数. 今如改设  $\mathbf{V}$  不动而坐标系作反时钟方向转动, 仍可使  $V_x(t)$  为原来的函数:

$$V_x(t) = \mathbf{i} \cdot \mathbf{V}(t) = \mathbf{i}(t) \cdot \mathbf{V} \quad (1.3.9b)$$

这一类比在后面引入海森堡图景时是有用的.

先将(1.3.7)式左乘  $\langle x|$ , 得到

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x | \psi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x | \hat{H} | x' \rangle \langle x' | \psi(t) \rangle \quad (1.3.10)$$

其中已用了(1.3.5)式, 设  $\hat{H}$  由两部分组成:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} \quad (1.3.11)$$

其中势能部分假设在位形空间为“定域的”:

$$\langle x | \hat{V} | x' \rangle = V(x) \langle x | x' \rangle = V(x) \delta(x - x') \quad (1.3.12)$$

为表示动能部分, 我们需要动量算符  $\hat{p}$  的一套正交归一完备的本征矢  $|p\rangle$ , 它定义为  $\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$ ,  $\langle p' | p \rangle = \delta(p - p')$ , 因而

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp |p\rangle \langle p| = 1 \quad (1.3.13)$$

$$\begin{aligned} \left\langle x \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| x' \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dp dp' \langle x | p \rangle \left\langle p \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| p' \right\rangle \langle p' | x' \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \langle x | p \rangle \frac{p^2}{2m} \langle p | x' \rangle \end{aligned} \quad (1.3.14)$$

其中  $\langle x | p \rangle$  作为动量本征态的  $x$  表象波函数即熟知的平面波函数

$$\langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[\frac{ipx}{\hbar}\right] \quad (1.3.15)$$

故

$$\begin{aligned} \left\langle x \left| \frac{\hat{p}^2}{2m} \right| x' \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \frac{p^2}{2m} \exp\left[\frac{ip(x-x')}{\hbar}\right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{ip(x-x')}{\hbar}\right] \end{aligned}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \delta(x-x') \quad (1.3.16)$$

代回(1.3.10),即得波函数满足的薛定谔方程:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \int_{-\infty}^{\infty} dx' \delta(x-x') \psi(x', t) \\ &= H(x) \psi(x, t) \end{aligned} \quad (1.3.17)$$

其中

$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (1.3.18)$$

就是哈密顿算符的位形空间( $x$ )表示(表象). 注意(1.3.16)式的严格写法意思是:算符 $\hat{p}$ 的 $x$ 表示为

$$\hat{p} \approx -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (1.3.19a)$$

而算符 $\hat{p}$ 在自身动量空间的表示就简单地是一个数

$$\hat{p} \approx p \quad (1.3.19b)$$

一个态 $|\psi(t)\rangle$ 的波函数,既可以在位形空间表示( $x$ 表象),也可以在动量空间表示( $p$ 表象),它们之间互为 Fourier 变换,如下式所示:

$$\langle x' | \psi(t) \rangle = \int dp' \langle x' | p' \rangle \langle p' | \psi(t) \rangle \quad (1.3.20a)$$

$$\langle p' | \psi(t) \rangle = \int dx' \langle p' | x' \rangle \langle x' | \psi(t) \rangle \quad (1.3.20b)$$

即:

$$\psi(x', t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' \exp\left[\frac{ip'x'}{\hbar}\right] \phi(p', t) \quad (1.3.21a)$$

$$\phi(p', t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' \exp\left[-\frac{ip'x'}{\hbar}\right] \psi(x', t) \quad (1.3.21b)$$

由此可见,态矢 $|\psi(t)\rangle$ 与表象(representation)无关,而其具体表示即波函数却与表象有关. 下面进一步指出:态矢与图景(picture)有关而波函数却与图景无关. 为此先将(1.3.10)中同一个波函数改写为两种形式

$$\psi(x, t) = {}^S \langle x | \psi(t) \rangle = {}^H \langle x, t | \psi \rangle \quad (1.3.22)$$

左上角指标 S 指“薛定谔图景”,这时 $|\psi(t)\rangle^S$ 依赖于时间 $t$ 而基矢 $|x\rangle$ 不含 $t$ ;另一个上标 H 指“海森堡图景”,态矢 $|\psi\rangle^H$ 不含 $t$ ,于是时间依赖性完全转移到基矢 $|x, t\rangle^H$ 中去了. 类似于(1.3.5)和(1.3.13)我们有

$$\int dx' |x', t\rangle^H \langle x', t| = 1 \quad (1.3.23)$$

(现在的  $t$  视为参变量). 把(1.3.10)式改写为

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle x, t| \right) |\psi\rangle^H = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \langle x, t| \hat{H} |x', t\rangle^H \langle x', t| \psi\rangle^H \quad (1.3.10)'$$

设  $\hat{H}$  不含  $t$ , 则在(1.3.10)'中移去右端不含  $t$  的  $|\psi\rangle^H$  后, 再取厄密共轭得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |x, t\rangle^H = -\hat{H} |x, t\rangle^H \quad (1.3.24)$$

(已用了  $\hat{H}(x)$  的厄密性). 此式  $\hat{H}(x)$  前的负号, 可以从(1.3.9b)中关于基矢“反时钟向”旋转的类比来理解. 于是我们证明了: 态矢与图景有关而与表象无关, 波函数作为态矢在基矢上的投影, 却与表象有关而与图景无关.

### 1.3C 时间演化算符, $U$ 矩阵

在量子力学中, 时间  $t$  是一个参数而非算符, 它不是一个可观察量. 因此时间  $t$  与空间坐标  $x$  的地位是不对称的. ( $x$  在非相对论性的量子力学中可以说是一个观察量, 一旦发展到相对论量子力学, 由于有 Lorentz 协变性,  $x$  与  $t$  被平等地加以处理, 那时  $x$  也不再是一个直接可观察量了, 事实上那里的  $x$  和  $t$  都是“场”的流动坐标). 在本小节中我们来讨论在薛定谔图景中的态如何随时间演化.

设在初始时刻  $t = t_0$ , 体系处在  $|\psi(t_0)\rangle$  状态, 它满足归一化条件:

$$\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1 \quad (1.3.25)$$

记以后任意时间  $t$  的状态  $|\psi(t)\rangle$  为

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (1.3.26)$$

$\hat{U}(t, t_0)$  称为演化算符, 按定义应有性质:

$$\hat{U}(t_0, t_0) = 1$$

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0), \quad (t_2 > t_1 > t_0) \quad (1.3.27a)$$

注意时间从右向左增大,  $|\psi(t)\rangle$  的归一化性质要求

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = 1 \quad (1.3.27b)$$

即演化算符是一个么正 (Unitary) 算符 ( $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ ). 将 (1.3.26) 代入 (1.3.7) 式, 即见

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) = \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \quad (1.3.28)$$

这就是演化算符满足的薛定谔方程. 下面研究它的形式解, 分 3 种情形讨论:

(1) 哈密顿算符  $\hat{H}$  与时间无关.

此时 (1.3.28) 之解可以简单地写为

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right] \quad (1.3.29)$$

最简洁的证明办法是对每一段无限短的时间  $\frac{(t-t_0)}{N}$ , ( $N \rightarrow \infty$ ), 用方程 (1.3.28) 积分, 然后用 (1.3.27a) 及数学公式

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[1 - \frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar N}\right]^N = \exp\left[-\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}\right]$$

一个具体的例子可见 (1.1.5) 中自旋  $\frac{1}{2}$  粒子在恒定外磁场中的情形.

(2)  $\hat{H}$  依赖于时间, 但不同时刻的  $\hat{H}$  是对易的.

例如 (1.1.5) 中  $\mathbf{B}$  的强度随时间改变而方向不变的情形. 这时

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t')\right] \quad (1.3.30)$$

(3) 在不同时刻的  $\hat{H}$  是不对易的.

例如 (1.1.5) 中  $\mathbf{B}$  的方向与强度都随时间改变的情形, 这时两个时刻的  $H(t_1)$  与  $H(t_2)$  就不可对易, 方程 (1.3.28) 的形式解可写为

$$\hat{U}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \cdots \hat{H}(t_n) \quad (1.3.31a)$$

其证明将在 § 2.6C 讨论相互作用图景时给出. 上式常在形式上写成

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{T} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'\right\} \quad (1.3.31b)$$

$\hat{T}$  称为编时算符, 它的定义就是展开式 (1.3.31a). 以后在 § 6.4B 讨论二态体系时, 将不用此形式解而直接求解  $2 \times 2$  的  $U$  矩阵.

## 1.3D 算符的海森堡运动方程

设在薛定谔图景中态矢  $|\psi(t)\rangle^S$  随时间  $t$  而变, 而对应可观察量的厄密算符  $A^{(S)}$  不显含  $t$ . 今转到海森堡图景, 态矢  $|\psi\rangle^H$  不随  $t$  变, 于是算符  $A^{(H)}$  将随  $t$  变化. 为求出  $A^{(H)}$  与  $A^{(S)}$  的关系, 我们注意到: 正如波函数与图景无关一样, 一个算符在态中的期待值  $\bar{A}(t)$  也应与图景无关(它作为实验中可测到的值, 还与表象无关). 因此

$$\begin{aligned}\bar{A}(t) &= {}^S\langle\psi(t)|\hat{A}^{(S)}|\psi(t)\rangle^S \\ &= {}^S\langle\psi(t_0)|\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}^{(S)}\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle^S\end{aligned}\quad (1.3.32a)$$

取初时刻  $t = t_0 = 0$  的  $|\psi(0)\rangle^S$  与  $|\psi\rangle^H$  重合, 简记  $\hat{U}(t, 0) = \hat{U}(t)$ , 定义

$$\hat{A}^{(H)}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}^{(S)}\hat{U}(t)\quad (1.3.33)$$

则(1.3.32a)便成为

$$\bar{A}(t) = {}^S\langle\psi(t)|\hat{A}^{(S)}|\psi(t)\rangle^S = {}^H\langle\psi|\hat{A}^{(H)}(t)|\psi\rangle^H\quad (1.3.32b)$$

$\hat{A}^{(H)}(t)$  的运动完全决定了  $\bar{A}(t)$ , 不难求出它的运动方程:

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{A}^{(H)}}{dt} &= \frac{\partial\hat{U}^\dagger}{\partial t}\hat{A}^{(S)}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{A}^{(S)}\frac{\partial\hat{U}}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{A}^{(S)}\hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger\hat{A}^{(S)}\hat{U}\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U} \\ &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}^{(H)}, \hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}]\end{aligned}\quad (1.3.34)$$

其中已插入  $\hat{U}^\dagger\hat{U} = 1$  并用了方程(1.3.28). 若存在体系之外的外场, 则一般  $\hat{H}$  与  $\hat{A}^{(S)}$  均可显含  $t$ , 由(1.3.29)~(1.3.31)可见一般  $\hat{H}$  与  $\hat{U}$  不对易, 故定义  $\hat{H}^{(H)} = \hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{U}$  及  $\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}^{(H)} = \hat{U}^\dagger\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}^{(S)}\hat{U}$  后, 我们有

$$\frac{d\hat{A}^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}^{(H)}, \hat{H}^{(H)}] + \frac{\partial}{\partial t}\hat{A}^{(H)}\quad (1.3.35)$$

这就是海森堡图景中一个算符的运动方程.

(1.3.35)式的右端出现了一个对易关系, 在取具体的表象后, 变为矩阵或微分算符之间的相应运算. 一般地,  $AB \neq BA$ , 这种不可对易性, 是量子力学的一个明显特点, 在第一节讨论自旋时, 就表现为 Pauli 矩阵间的不可对易性.

然而有时(1.3.35)那样的式子也有其经典的对应. 狄拉克(Dirac)注

意到:在经典力学中,一个可观察的物理量  $A$  作为正则坐标  $q$  及其共轭的正则动量  $p$  的函数(但不显含  $t$  时),其运动由泊松括号(Poisson Bracket)给出:

$$\frac{dA}{dt} = \{A, H\}_{\text{PB}} \quad (1.3.36)$$

这里泊松括号定义为

$$\{A, B\}_{\text{PB}} \equiv \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i} \right) \quad (1.3.37)$$

(形式上已推广到  $N$  个自由度). 比较(1.3.35)与(1.3.37)可见,一个经典体系“量子化”的法则是

$$\{A, B\}_{\text{PB}} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] \quad (1.3.38)$$

举一维运动为例:粒子的坐标  $x$  与动量  $p_x$  所构成的泊松括号容易算得为

$$\{x, p_x\}_{\text{PB}} = 1 \quad (1.3.39)$$

过渡到量子力学便有

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad (1.3.40)$$

这就是著名的海森堡不确定关系. 在  $x$  表象中,  $\hat{x} = x$ ,  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ; 在  $p$  表象中,  $\hat{p}_x = p_x$ ,  $\hat{x} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}$ . 下一节中还会看到用无限矩阵表示的形式. 量子力学中的算符运动方程与薛定谔方程处于平等的地位,都是理论的基本假设.

## § 1.4 简谐振子

作为量子力学原理综合应用的最好例子,让我们来研究一维简谐振子. 它不仅在原理上十分典型和重要,而且应用非常广,涉及分子、固体物理、核结构、量子场论和量子光学等领域. 历史上,普朗克发明量子论时,也是从引入振子的分立能级入手的.

### 1.4A 从经典力学经过量子论到量子力学

在经典力学中,一个沿  $x$  方向运动的线性谐振子能量(哈密顿)为



$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (1.4.1)$$

以位置  $x$  为横坐标, 动量  $p$  为纵坐标, 画出相空间, 则一个(有确定能量的)振子沿图上一椭圆形轨道作顺时针方向运动, 每一瞬时到达的点对应于一个经典状态. 到了(旧)量子论阶段, 由 Bohr-Sommerfeld 量子化条件

$$\oint pdq = nh, \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (1.4.2)$$

在本来连续无限可变的轨道上选出一些分立的(总数仍为无限)量子化轨道, 叫做“允许轨道”, 并假定在其上的带电粒子不会辐射. 历史地看, 这些轨道中的每一个, 实际上对应于一个“定态”, 所以一个态在相空间的表示由经典时的一个“点”, 演化为一条闭合曲线, 即由零维增大到一维. 下面将看到, 在量子力学中, 一个定态, 由于不确定关系, 在相空间上将由一个“二维”面积来表示. 这就看清楚了旧量子论是从经典力学过渡到量子力学的跳板.

对应于(1.4.1)式, 在量子力学中有哈密顿算符

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 \quad (1.4.3)$$

注意我们还没有取定表象. 先引入两个无量纲的非厄密算符:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right), \quad \hat{a}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \quad (1.4.4)$$

由对易关系(1.3.40)易证

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1 \quad (1.4.5)$$

于是可引入一个厄密算符

$$\begin{aligned} \hat{N} \equiv \hat{a}^+ \hat{a} &= \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right) \left( \hat{x}^2 + \frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2} \right) + \frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}] \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \hat{H} - \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (1.4.6)$$

即:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right) \quad (1.4.7)$$

$\hat{H}$  既然与  $\hat{N}$  有简单的线性关系, 它们必可同时对角化. 记  $\hat{N}$  的一个本征值为  $n$  的本征态为  $|n\rangle$ :

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle \quad (1.4.8)$$

则

$$\hat{H} |n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega |n\rangle \quad (1.4.9)$$

表示  $|n\rangle$  态的能量本征值为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (1.4.10)$$

下面马上会证明  $n$  只能取  $0, 1, 2, \dots$  等非负的整数.  $n$  是标记一个谐振子的各激发态的量子数. 但在实际应用时, 它的意义灵活多变, 在量子光学中是单模光子数, 在讨论固体中元激发时又可能是单模声子数等.

#### 1.4B 产生算符和湮灭算符, $N$ 表象

由  $\hat{N}$  的定义及 (1.4.5) 式易证

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \quad [\hat{N}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ \quad (1.4.11)$$

$$\hat{N} \hat{a}^+ |n\rangle = ([\hat{N}, \hat{a}^+] + \hat{a}^+ \hat{N}) |n\rangle = (n+1) \hat{a}^+ |n\rangle \quad (1.4.12)$$

$$\hat{N} \hat{a} |n\rangle = ([\hat{N}, \hat{a}] + \hat{a} \hat{N}) |n\rangle = (n-1) \hat{a} |n\rangle \quad (1.4.13)$$

由此可见  $\hat{a}^+ |n\rangle$  和  $\hat{a} |n\rangle$  分别是  $\hat{N}$  的本征值为  $(n+1)$  和  $(n-1)$  的本征态, 故称  $\hat{a}^+$  ( $\hat{a}$ ) 为产生 (湮灭) 算符. 由 (1.4.13) 式可见

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

$c$  是一常数, 由归一化条件  $\langle n | n \rangle = \langle n-1 | n-1 \rangle = 1$  决定之:

$$\langle n | \hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle = n = |c|^2$$

取  $c$  为正实数后得

$$\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (1.4.14)$$

同理可得

$$\hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (1.4.15)$$

若将  $\hat{a}$  连续地作用到一个态  $|n\rangle$  上:

$$\hat{a}^2 |n\rangle = \sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle, \dots$$

则一般地从一个正的  $n$  出发, 必可到达系列中  $n$  为负的态. 但是我们由物

理上的考虑,要求一个态( $\hat{a} | n \rangle$ )的模(norm)不能为负,即要求

$$n = \langle n | \hat{N} | n \rangle = (\langle n | \hat{a}^\dagger) \cdot (\hat{a} | n \rangle) \geq 0$$

可见  $n$  不能为负. 于是肯定  $n$  的系列只能是  $0, 1, 2 \dots$  等. 其中  $|0\rangle$  是体系的基态(真空态), 而  $|1\rangle = \hat{a}^\dagger |0\rangle$  是第一激发态(单光子态), 等等.

由(1.4.14)、(1.4.15)及  $\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$  可得矩阵元

$$\langle n' | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} \delta_{n', n-1}, \quad \langle n' | \hat{a}^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} \quad (1.4.16)$$

回到(1.4.4)式中的  $\hat{x}$  和  $\hat{p}$  算符:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p} = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \quad (1.4.17)$$

便可求出它们的矩阵元(记  $n'$  和  $n$  分别为横行和纵列的指标):

$$\langle n' | \hat{x} | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n} \delta_{n', n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1}) \quad (1.4.18)$$

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

由此可见,  $\hat{x}$ ,  $\hat{p}$  在  $N$  表象中都不是对角的(且只有非对角矩阵元), 因此它们之间不对易, 由(1.4.18)式可算得(见习题 1.2)

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad (1.4.19)$$

与(1.3.40)式一致. 这里有一件事是有趣的: 将此式两端取  $\hat{N}$  表象矩阵的迹, 如果  $\text{Tr}(\hat{x}\hat{p}) = \text{Tr}(\hat{p}\hat{x})$  成立的话, 左端应等于零, 但右端明显不为零. 这一矛盾(佯谬)表明: 当我们遇到无限阶矩阵( $n \rightarrow \infty$ )时, 有限矩阵的运算法则  $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$  对它是不适用的.

### 1.4C $x$ 表象中的波函数

以上是在  $\hat{N}$  表象中讨论, 现在对物理上的谐振子转到位形空间( $x$ )表象, 从基态  $|0\rangle$  开始. 因  $\hat{a} |0\rangle = 0$ , 有

$$\begin{aligned} \langle x' | \hat{a} | 0 \rangle &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left\langle x' \left| \hat{x} + \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right| 0 \right\rangle \\ &= \left\langle x' \left| \left( \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x' + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx'} \right) \right| 0 \right\rangle \end{aligned}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \frac{d}{dx'} + \frac{m\omega}{\hbar} x' \right) \langle x' | 0 \rangle = 0$$

于是解出基态波函数为

$$\psi_0(x') \equiv \langle x' | 0 \rangle = \left( \frac{m\omega}{\hbar \pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x'^2\right) \quad (1.4.20)$$

前面的因子已使波函数归一化. 类似地可得第一激发态的波函数

$$\begin{aligned} \langle x' | 1 \rangle &= \langle x' | \hat{a}^+ | 0 \rangle = \left\langle x' \left| \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( \hat{x} - \frac{i\hat{p}}{m\omega} \right) \right| 0 \right\rangle \\ &= -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \frac{d}{dx'} - \frac{m\omega}{\hbar} x' \right) \langle x' | 0 \rangle = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x' \langle x' | 0 \rangle \end{aligned}$$

如此做下去得到第  $n$  激发态的波函数为

$$\begin{aligned} \langle x' | n \rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x' | (\hat{a}^+)^n | 0 \rangle \\ &= \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!}} \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{n}{2}} \left( \frac{d}{dx'} - \frac{m\omega}{\hbar} x' \right)^n \langle x' | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x' \right) \langle x' | 0 \rangle \quad (1.4.21) \end{aligned}$$

其中  $H_n(\xi)$  是  $n$  阶的 Hermite(厄密)多项式.

## § 1.5 测量中的不确定关系

### 1.5A 观察量的均方差

一个物理可观察量在量子力学中对应于一个厄密算符  $\hat{A}$ ,  $\hat{A}$  只在它自己的本征态  $|A_i\rangle$  中才取一个确定的本征值  $A_i$ , 在一般的态  $|\psi\rangle$  中, 我们只能测得一个平均值(期待值)  $\langle \hat{A} \rangle \equiv \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ . 定义一个算符

$$\Delta \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle \quad (1.5.1)$$

由于  $\Delta \hat{A}$  在态中的平均  $\langle \Delta \hat{A} \rangle = 0$ , 故改而研究它的“均方差”\*

$$\langle (\Delta \hat{A})^2 \rangle = \langle (\hat{A}^2 - 2\hat{A}\langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \rangle^2) \rangle = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 \quad (1.5.2)$$

\* (1.5.2)式的平方根称为“标准偏差”.

显然对一个  $\hat{A}$  的本征态; ( $|\psi\rangle = |A_i\rangle$ ),  $\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle = 0$ , 当一个量的均方差不为零时, 乃是态  $|\psi\rangle$  中此可观察量“模糊性”的一种量度. 在第一节末, 我们曾看到对自旋  $\frac{1}{2}$  的  $S_z = +\frac{1}{2}\hbar$  态, 有  $\langle(\Delta S_z)^2\rangle = 0$ , 但  $\langle(\Delta S_x)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$ , 那时试图用自旋矢量的量子进动来理解这一现象, 本节将一般地讨论这个问题.

### 1.5B 不确定关系的导出

下面将证明对两个可观察量  $\hat{A}$  和  $\hat{B}$ , 成立不等式

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq \frac{1}{4} |\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|^2 \quad (1.5.3)$$

为此先证明一个引理——Schwarz 不等式: 对两个态矢  $|\alpha\rangle$  和  $|\beta\rangle$ , 必有

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \quad (1.5.4)$$

此不等式类似于对实欧氏空间中两个矢量  $\mathbf{a}$  和  $\mathbf{b}$ , 必有

$$|\mathbf{a}|^2 |\mathbf{b}|^2 \geq |\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}|^2 \quad (1.5.5)$$

证 对任意的复常数  $\lambda$ , 我们有

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

取  $\lambda = -\frac{\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\beta|\beta\rangle}$ , 代入上式后即得(1.5.4)式.

现在可以来证明(1.5.3)式了. 取

$$|\alpha\rangle = \Delta\hat{A}|\rangle, \quad |\beta\rangle = \Delta\hat{B}|\rangle \quad (1.5.6)$$

这里用态  $|\rangle$  来强调讨论对任何 ket 矢量都适用, 于是(1.5.4)式给出

$$\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle \geq |\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle|^2 \quad (1.5.7)$$

其中已用了算符  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  的厄密性. 现在来算右端, 因

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} \quad (1.5.8)$$

其中对易子  $[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}]$  是一个反厄密算符, 它的平均值恒为纯虚数, 而反对易子  $\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}$  是厄密算符, 它的平均值恒为实数, 于是

$$\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle = \frac{1}{2}\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle + \frac{1}{2}\langle\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}\rangle$$

的模的平方等于

$$|\langle \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \{\Delta \hat{A}, \Delta \hat{B}\} \rangle|^2 \quad (1.5.9)$$

代回(1.5.7)后略去第二项,使不等式变得更强,这就证明了(1.5.3)式,此即不确定关系.

例如对  $\hat{A} = \hat{x}$ ,  $\hat{B} = \hat{p}_x$ , 因  $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$ , 便有

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p}_x)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \hbar^2 \quad (1.5.10)$$

### 1.5C 谐振子与不确定关系

一个很有兴趣的问题是:什么情况下(1.5.10)式中的等号成立?为此我们看谐振子的高斯型基态波函数(1.4.20), (记  $p_x = p$ ), 显然,在这态中有

$$\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0 \quad (1.5.11)$$

故只需计算  $\langle \hat{x}^2 \rangle$  和  $\langle \hat{p}^2 \rangle$ , 最方便的算法是用  $\hat{a}^+$  和  $\hat{a}$  算符:

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^2 + \hat{a}^{+2} + \hat{a}^+ \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^+) \quad (1.5.12)$$

对基态  $|0\rangle$  求平均时, 只有最后一项有贡献:

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (1.5.13)$$

同理

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \frac{\hbar m \omega}{2} \quad (1.5.14)$$

这表示在基态中, 动能与势能的平均值各为总能量的一半:

$$\left\langle \frac{\hat{p}^2}{2m} \right\rangle = \frac{\hbar \omega}{4} = \frac{1}{2} \langle \hat{H} \rangle, \quad \left\langle \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \right\rangle = \frac{1}{4} \hbar \omega = \frac{1}{2} \langle \hat{H} \rangle$$

这符合于 Virial 定理(见习题 1.3)

$$\langle H \rangle - \langle V \rangle = \langle T \rangle = \left\langle \frac{1}{2} r \frac{dV}{dr} \right\rangle \quad (1.5.15)$$

将(1.5.11、13、14)代入(1.5.10)式的左端, 即见

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle = \frac{1}{4} \hbar^2 \quad (1.5.16)$$

在振子的激发态中,易证(见习题 1.4)

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle = \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \hbar^2 \quad (1.5.17)$$

从半经典观念看,  $\psi_0(x) = \langle x | 0 \rangle$  的模的平方,即基态粒子的几率分布,在相空间中以  $\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$  为中心呈高斯型分布,大体上充满了第一 Bohr 允许轨道(1.4.2)式中  $n = 1$  的内部面积.(1.5.16)式告诉我们:谐振子基态是最小不确定态,不确定性不可能比  $\frac{\hbar^2}{4}$  更小了,这是粒子的量子本性所决定的.同时也可以理解:基态能量  $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$  而不是 0 或者  $\hbar \omega$ .

$n \geq 1$  的激发态都不是“最小不确定态”,虽然它们仍都是“定态”,从而  $\langle n | \hat{x} | n \rangle = \langle n | \hat{p} | n \rangle = 0$  (见(1.4.18)). 一个不显含时间  $t$  的可观察量  $\hat{A}$  在一个定态  $\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) \exp \left[ -\frac{iE_n t}{\hbar} \right]$  中的期待值必定不随  $t$  而变. 定态是量子力学中一种特殊的运动形式,标记它的量子数(在谐振子中是  $n$ )的数目只有标记经典态时(谐振子中是  $x$  和  $p$ )的一半. 一般情形下一个谐振子的任意波函数是

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n(t) \psi_n(x) \quad (1.5.18)$$

$C_n(t)$  是  $t$  的复函数,除受  $\sum_{n=0}^{\infty} |C_n(t)|^2 = 1$  的归一化条件约束之外,可以描写十分复杂的运动(第一节中的自旋体系只对两个定态求和,故还较简单). 现在问:谐振子的量子状态中,是否有与相空间上经典轨道运动最接近的运动状态? 这就是下节要回答的问题.

## § 1.6 相干态和压缩态

### 1.6A 湮灭算符 $\hat{a}$ 的本征态

对上节末所提出的问题,人们可以立刻作出定性的回答:应该寻找使不确定关系中等号成立的态(即最小不确定态). 已经看到谐振子基态  $|0\rangle$  是这样的一个态,它被湮灭算符  $\hat{a}$  所湮灭:  $\hat{a} |0\rangle = 0$ . 因此可以猜测,一般的最小不确定态(称为相干态,理由见后)也是  $\hat{a}$  的本征态,记为  $|z\rangle$ :

$$\hat{a} |z\rangle = z |z\rangle \quad (1.6.1)$$

这里本征值  $z$  是一个复数, 以后将看清它是  $t$  的函数. 让我们在  $N$  表象中来解决此方程, 展开

$$|z\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle \quad (1.6.2)$$

为决定系数  $C_n$ , 以(1.6.2)代入(1.6.1), 用(1.4.14)式可得:

$$\text{左端} \quad \hat{a} |z\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle$$

$$\text{与右端} \quad z |z\rangle = z \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle$$

比较, 即得系数间的递推关系

$$C_{n+1} = \frac{z C_n}{\sqrt{n+1}}$$

故

$$|z\rangle = C_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

再由归一化条件  $\langle z | z \rangle = 1$  决定  $C_0$ , 最后得

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} |z|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (1.6.3)$$

这是 Glauber 最早(1963年)构造的相干态, 它具有如下性质:

(1) 用(1.4.15)式可证

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} |z|^2\right) \exp(z \hat{a}^\dagger) |0\rangle \quad (1.6.4)$$

其中

$$e^{z \hat{a}^\dagger} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (z \hat{a}^\dagger)^n \quad (1.6.5)$$

(2) 相干态不是粒子数  $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$  的本征态, 但有确定的平均粒子数

$$\bar{n} = \langle z | \hat{a}^\dagger \hat{a} | z \rangle = \langle z | z^* z | z \rangle = |z|^2 \quad (1.6.6)$$

(3) 在  $|z\rangle$  态中  $|n\rangle$  态出现的几率, 即粒子数分布几率

$$P_n = |C_n|^2 = e^{-|z|^2} \frac{|z|^{2n}}{n!} = \exp(-\bar{n}) \frac{(\bar{n})^n}{n!} \quad (1.6.7)$$

这正是有名的 Poisson 分布, 易证  $\langle (\Delta n)^2 \rangle = \bar{n}$ .



(4) 不同  $z$  值的相干态一般并不正交.

设两个相干态:  $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ ,  $\hat{a}|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle$ , 则

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)\right] \langle 0 | e^{\beta^* \hat{a}} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} | 0 \rangle$$

(已用了公式(1.6.4)). 再用算符公式(见附录 1A)

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{[\hat{A}, \hat{B}]} \quad (1.6.8)$$

其中  $[\hat{A}, \hat{B}] = [\beta^* \hat{a}, \alpha \hat{a}^\dagger] = \beta^* \alpha$  是一个 C 数(非算符), 于是

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)\right] e^{\alpha\beta^*} \langle 0 | e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{\beta^* \hat{a}} | 0 \rangle$$

$$= \exp\left[-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2 - 2\alpha\beta^*)\right]$$

$$|\langle\beta|\alpha\rangle|^2 = \exp(-|\alpha - \beta|^2) \quad (1.6.9)$$

(5) 虽然相干态相互之间并不正交, 但仍有完备性, 事实上, 全部相干态构成一过完备系, 即存在如下公式:

$$\frac{1}{\pi} \int d^2 z |z\rangle \langle z| \equiv \frac{1}{\pi} \int d(\text{Re}z) d(\text{Im}z) |z\rangle \langle z| = 1 \quad (1.6.10)$$

证  $z$  可以看作为复相空间上的无量纲坐标, 记  $z = \xi + i\eta$ , 并引入平面极坐标  $z = \rho \exp(i\phi)$  后, 因  $d^2 z = d\eta d\xi = \rho d\rho d\phi$ , 则

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\pi} \int d^2 z |z\rangle \langle z| \\ &= \sum_{m, n} \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\phi \exp(-\rho^2) \rho^{m+n} \exp[i(m-n)\phi] \frac{1}{\pi \sqrt{m!n!}} |m\rangle \langle n| \end{aligned}$$

因  $\int_0^{2\pi} \exp[i(m-n)\phi] d\phi = 2\pi \delta_{mn}$

$$\int_0^\infty \exp(-\rho^2) \rho^{2m+1} d\rho = \frac{1}{2} m!$$

故

$$\frac{1}{\pi} \int d^2 z |z\rangle \langle z| = \sum_n |n\rangle \langle n| = 1 \quad \text{证毕.}$$

### 1.6B 相干态是最小不确定态

不难证明: 在相干态中不确定关系取极小值

$$\langle z | \hat{x} | z \rangle = \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \langle z | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | z \rangle = \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{1}{2}} (z^* + z)$$

$$\begin{aligned} \langle z | \hat{p} | z \rangle &= i \left( \frac{1}{2} m \hbar \omega \right)^{\frac{1}{2}} \langle z | (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) | z \rangle \\ &= i \left( \frac{1}{2} m \hbar \omega \right)^{\frac{1}{2}} (z^* - z) \end{aligned}$$

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

$$\langle z | \hat{p}^2 | z \rangle = - \left( \frac{m \hbar \omega}{2} \right) [(z^* - z)^2 - 1]$$

$$\langle z | (\Delta \hat{x})^2 | z \rangle = \langle z | \hat{x}^2 | z \rangle - \langle z | \hat{x} | z \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

$$\langle z | (\Delta \hat{p})^2 | z \rangle = \frac{1}{2} m \hbar \omega$$

故

$$\langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle_c \langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle_c = \frac{1}{4} \hbar^2 \quad (1.6.11)$$

证毕. ( $\langle \rangle_c$  表示  $\langle z | \dots | z \rangle$ ). 我们不妨说相干态是最经典的量子态.

### 1.6C 相干态从基态平移得到

基态  $|0\rangle$  是满足方程  $\hat{a} |z\rangle = z |z\rangle$  而且为  $z=0$  的特例, 是位于  $z=0$  的一个相干态. 因此我们期望  $z \neq 0$  的相干态可以由  $z=0$  的基态通过在复  $z$  平面上的某种位移而得到. 确实, 如定义一位移算符

$$\hat{D}(z) = \exp(z \hat{a}^\dagger - z^* \hat{a}) \quad (1.6.12)$$

则

$$|z\rangle = \hat{D}(z) |0\rangle \quad (1.6.13)$$

证 用公式(1A.4)

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} \exp\left\{-\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]\right\} \quad (1.6.14)$$

其中对易子  $[\hat{A}, \hat{B}]$  与  $\hat{A}, \hat{B}$  都对易, 则

$$\hat{D}(z) = \exp(z \hat{a}^\dagger) \exp(-z^* \hat{a}) \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right)$$

$$\hat{D}(z) |0\rangle = \exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right) e^{z \hat{a}^\dagger} |0\rangle = |z\rangle$$

(见(1.6.4)式), 证毕.

显然  $\hat{D}(z)$  是一个么正算子, 有性质

$$\hat{D}^\dagger(z) = \hat{D}^{-1}(z) = \hat{D}(-z) \quad (1.6.15)$$

至此, 我们已有了对相干态的三个等价的定义: 湮灭算符  $\hat{a}$  的本征态、最小不确定态和从基态  $|0\rangle$  经  $\hat{D}(z)$  平移后得到的态. 现在进一步记

$$\hat{a} = \hat{a}_1 + i\hat{a}_2 \quad (1.6.16)$$

则厄密算符

$$\hat{a}_1 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}, \quad \hat{a}_2 = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p} \quad (1.6.17)$$

满足对易关系

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_2] = \frac{i}{2} \quad (1.6.18)$$

而处于相干态时, 如简记  $\Delta \hat{a}_1 \equiv \sqrt{\langle (\Delta \hat{a}_1)^2 \rangle_C}$ , 则有

$$\Delta \hat{a}_1 \Delta \hat{a}_2 = \frac{1}{4} \quad (1.6.19)$$

由此可见, 在复  $z$  平面上, 相干态可近似地用一个中心位于  $z$  而半径等于  $\frac{1}{2}$  的小圆来代表, 如图 1.6.1 所示.

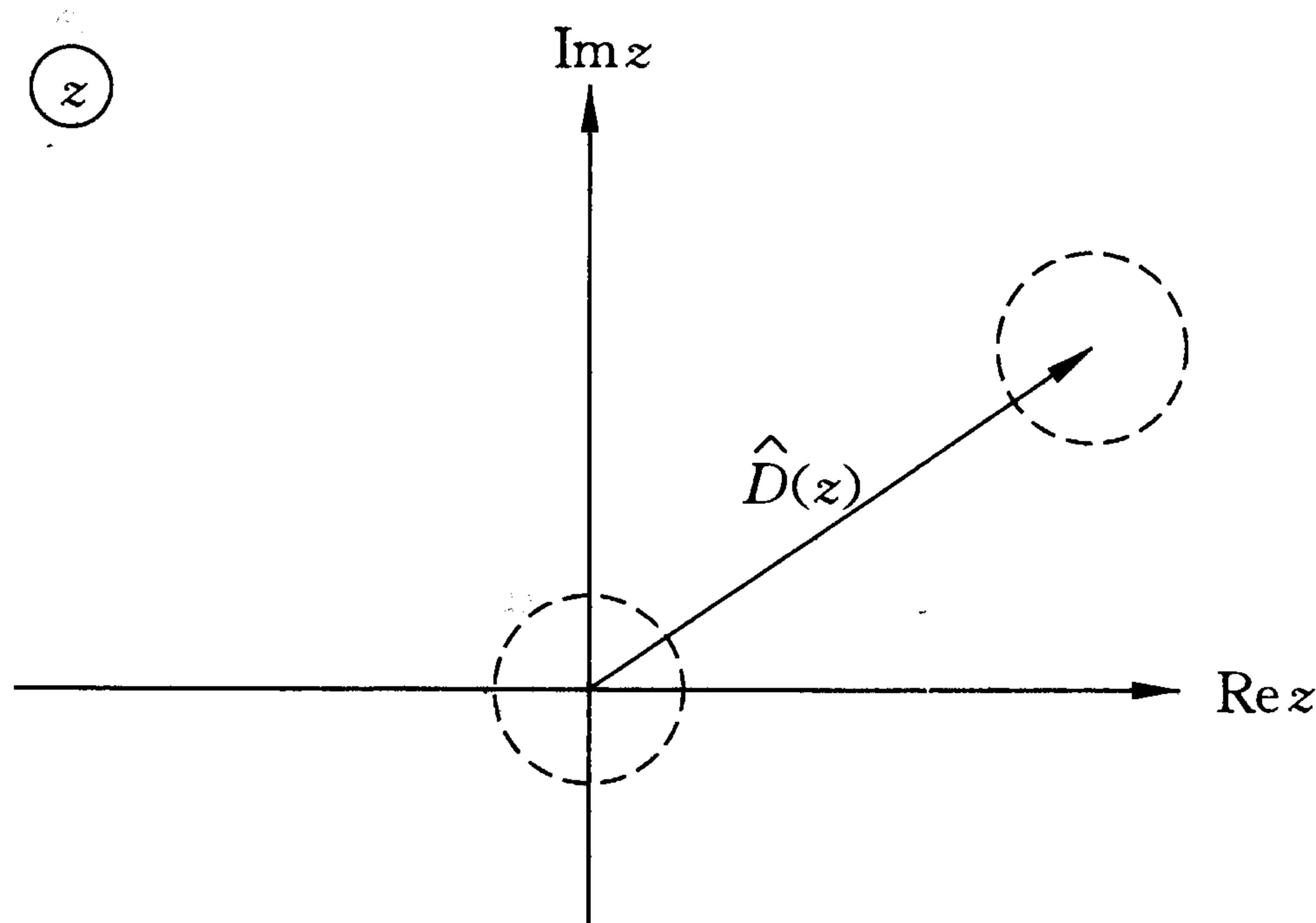


图 1.6.1 一相干态  $|z\rangle$  由  $|0\rangle$  经  $\hat{D}(z)$  平移而得到

经典物理中一个瞬时态由  $z$  平面上一个点表示, 现在扩大为一个圆, 我们看到, 这是量子不确定关系所要求的.

### 1.6D 物理学中的相干态和相位

相干态在物理中应用极广(参见文献[8]), 这里先讲一点: 单模激光

可以近似地由相干态来描写. 我们将在第四章介绍辐射的量子理论, 那时将指出: 将经典平面电磁波的电磁势  $A$  的振幅 (C 数) 化为算符  $\hat{a}$  和  $\hat{a}^+$  ( $q$  数), 便对应于量子化, 而将  $\hat{a} \rightarrow z$ ,  $\hat{a}^+ \rightarrow z^*$ , 又变为相干态, 那么, 相干态激光与经典电磁波的区别在哪里呢? 上面指出的在相干态中必定存在的最小不确定性就对应于量子噪声 (光场的量子起伏), 这里再讲一点关于相位的微妙之处. 经典电磁波有确定的相位  $\phi$ , 那么它在量子力学中是否也会化为一个算符 ( $\phi \rightarrow \hat{\phi}$ ) 呢?

已知光子数  $\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$  是一个厄密算符, Dirac 在 1927 年最早写出

$$\begin{aligned}\hat{a} &= \exp(i\hat{\phi}) \hat{N}^{\frac{1}{2}} \\ \hat{a}^+ &= \hat{N}^{\frac{1}{2}} \exp(-i\hat{\phi})\end{aligned}\quad (1.6.20)$$

又假设  $\hat{\phi}$  为一个厄密算符, 并建立  $\hat{\phi}$  和  $\hat{N}$  的对易关系

$$[\hat{\phi}, \hat{N}] = -i \quad (1.6.21)$$

用附录 1A 中公式即可推出  $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$ , 进一步推出对一个量子化的电磁波态, 存在光子数和相位的不确定关系

$$\Delta N \Delta \phi \geq \frac{1}{2} \quad (1.6.22)$$

其中等号对相干态成立.

Dirac 的开创性思想是很深刻的, 但还存在一些错误 [文献 9a]:

(1)  $\phi$  不是周期函数:  $\phi + 2\pi \neq \phi$ , 不满足周期性边界条件, 不是可观察量, 因而  $\hat{\phi}$  不可能是厄密算符;

(2) 假如  $\hat{\phi}$  是厄密算符, 则  $\hat{U} = \exp(i\hat{\phi})$  应是么正算符:  $\hat{U}^+ \hat{U} = 1$ . 但由 (1.6.21) 可见  $\hat{U} \hat{N} \hat{U}^+ = \hat{N} + 1$ , 而一个么正算符不应改变厄密算符  $\hat{N}$  的本征值, 现在改变了 1, 这表明  $\hat{U}$  不是么正算符, 即  $\hat{\phi}$  不是厄密算符;

(3)  $\hat{U} = \exp(i\hat{\phi}) = \hat{a} \hat{N}^{-\frac{1}{2}}$ , 作用到真空态  $|0\rangle$  上去的时候没有意义.

上述困难表明: 不可能找到一个厄密的相位算符. 近年来, 这个问题已有较好的解决方案, 见文献 [9a]、[9b] 与习题 1.10.

### 1.6E 相干态的运动和几何相

现在我们来讨论相干态如何在相空间运动, 即参数  $z$  是时间  $t$  的函数的情形. 用谐振子的语言说, 是研究一个受力的谐振子; 用激光的语言说, 人们可以用一个激励系统, 使光强 (正比于  $N$ ) 和相位都随时间改变. 这时一个相当实际的哈密顿量可以写成

$$\hat{H}(t) = \hbar[\omega(t) \hat{a}^\dagger \hat{a} + f(t) \hat{a}^\dagger + f^*(t) \hat{a} + g(t)] \quad (1.6.23)$$

下面证明:这个含时间  $t$  的  $\hat{H}(t)$  能保持相干态在运动中不散开,最多乘上一个相位因子.事实上,设

$$|\psi_c(t)\rangle = \exp[i\theta(t)] |z(t)\rangle \quad (1.6.24)$$

代入薛定谔方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_c(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi_c(t)\rangle \quad (1.6.25)$$

左乘  $\langle z(t)|$  后得到

$$\hbar \frac{d\theta}{dt} = \left\langle z(t) \left| \left( i\hbar \frac{d}{dt} - \hat{H}(t) \right) \right| z(t) \right\rangle \quad (1.6.26)$$

我们为要求出  $z$  是  $t$  的什么样的函数,注意:  $|z(t)\rangle = \hat{D}(z(t)) |0\rangle \equiv \hat{D}(t) |0\rangle$ . 今研究算符  $\hat{a}^D(t) \equiv \hat{D}^\dagger(t) \hat{a} \hat{D}(t) = \hat{a} + z(t)$  的运动,像在第三节讨论算符的海森堡运动方程一样,有

$$\frac{d}{dt} \hat{a}^D(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{a}^D(t), \hat{H}^D(t)] \quad (1.6.27)$$

其中

$$\begin{aligned} \hat{H}^D(t) &= \hat{D}^\dagger(t) \hat{H}(t) \hat{D}(t) \\ &= \hbar\{\omega(t) \hat{a}^{D\dagger}(t) \hat{a}^D(t) + f(t) \hat{a}^{D\dagger}(t) + f^*(t) \hat{a}^D(t) + g(t)\} \end{aligned} \quad (1.6.28)$$

用对易关系

$$[\hat{a}^D(t), \hat{a}^{D\dagger}(t)] = 1 \quad (1.6.29)$$

后,(1.6.27)式简化为

$$i \frac{d\hat{a}^D}{dt} = \omega(t) \hat{a}^D(t) + f(t) \quad (1.6.30)$$

将此式放在真空态中求平均,即得  $z(t)$  的方程:

$$i\dot{z} = \omega(t)z + f(t), \quad -i\dot{z}^* = \omega(t)z^* + f^*(t) \quad (1.6.31)$$

可见  $z$  的运动完全由外场决定.再来看(1.6.26)式中的第二项

$$\langle z(t) | \hat{H}(t) | z(t) \rangle = \hbar[\omega(t) |z|^2 + f(t)z^* + f^*(t)z + g(t)] \quad (1.6.32)$$

至于第一项,用  $\hat{a}^\dagger$  作用到  $|z(t)\rangle$  (见(1.6.3)式)上去的公式

$$\dot{z} \hat{a}^\dagger |z(t)\rangle = \frac{d}{dt} |z(t)\rangle + \frac{1}{2}(\dot{z}z^* + z\dot{z}^*) |z(t)\rangle \quad (1.6.33)$$

左乘  $\langle z(t)|$  后即得

$$\left\langle z(t) \left| \frac{d}{dt} \right| z(t) \right\rangle = \frac{1}{2}(\dot{z}z^* - z\dot{z}^*) \quad (1.6.34)$$

将(1.6.31)代入(1.6.34),连同(1.6.32)代入(1.6.26),便有

$$\frac{d\theta}{dt} = -\text{Re}[f^*(t)z(t)] - g(t) \quad (1.6.35)$$

方程(1.6.31)和(1.6.35)完全决定了  $z(t)$  和  $\theta(t)$ ,这就证明了在  $\hat{H}(t)$  (1.6.23)作用下,相干态保持为相干态,但有一总相角  $\theta(t)$  出现.注意,即使  $f(t) = 0$ ,相干态也会沿顺时针向作圆周运动,即像一个经典谐振子那样振动着,这种不扩散的波包是 Schrödinger 首先发现的,见习题 1.8.再要注意, $\theta(t)$ 实际上由两部分组成,

$$\theta(t) = \delta(t) + \gamma(t) \quad (1.6.36)$$

$$\delta(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t \langle z(t') | \hat{H}(t') | z(t') \rangle dt' \quad (1.6.37)$$

$$\begin{aligned} \gamma(t) &= i \int_{t_0}^t \left\langle z(t) \left| \frac{d}{dt} \right| z(t) \right\rangle dt = \frac{i}{2} \int_{z_1(0)}^{z_2(t)} (z^* dz - z dz^*) \\ &= - \int_{z_1}^{z_2} \text{Im}(z^* dz) = \int (y dx - x dy) = 2S \end{aligned} \quad (1.6.38)$$

$\delta$  称为动力学相位,人们在一般的定态运动中早就熟悉了; $\gamma$  的出现更有趣些,它等于相干态对应的  $z(t)$  在运动中顺时针向扫过的面积  $S$  的两倍,因此具有几何性质,称为几何相<sup>[10]</sup>.关于几何相的问题,以后将在第六章中专门讨论.这里先指出两点:

(1) 相干态每顺(反)时钟向转一圈,就在动力学相位  $\delta$  之外,得到一个正(或负)的几何相  $\gamma$ .这个  $\gamma$  的出现有其拓扑学上的根源,并可上溯到经典力学中一个所谓 Hanny 相的存在,不过其本质直到量子力学发展到 1984 年 Berry 的工作后才逐渐被人们看清楚(见第六章).

(2) Glauber 相干态  $|z\rangle$  已足够组成相空间上的“过完备系”,如(1.6.10)式所示.它在运动中变成  $|\psi_c\rangle$  (见(1.6.24)式),我们当然可以说  $|\psi_c\rangle$  张成一个谐振子的无限维 Hilbert 空间  $\mathcal{H}$ ,不过总相角  $\theta$  的存在似乎是多余的,因此不妨定义一个“投影的 Hilbert 空间”,或称 Ray 空间,记为  $\mathcal{R}$ ,它由  $|z\rangle$  张成,记为  $|z\rangle \in \mathcal{R} = \mathcal{H}/\sim$ ,记号  $/\sim$  代表“mod  $\sim$ ”,即表示只差一个相位的态将被认为是等同的.因此复  $z$  相空间就是谐振子的

Ray 空间, 注意这个空间在拓扑上是不平庸的, 其原点  $z = 0$  (对应于基态或真空态  $|0\rangle$ ) 是一个奇点; 态  $|z\rangle$  (见 (1.6.3)) 不是  $z$  的解析函数; 而  $|z\rangle$  前面的因子  $\exp\left(-\frac{|z|^2}{2}\right)$  是由  $|z\rangle$  态的归一化条件引出来的. 正是这一拓扑上的非平庸性导致几何相  $\gamma$  的出现 (见第六章).

### 1.6F 压缩态

相干态  $|z\rangle$  在复平面上用一个半径为  $\frac{1}{2}$  的圆来表示, 它意味着在这态

中沿  $\hat{a}_1 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}$  方向的测量精度与沿  $\hat{a}_2 = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \hat{p}$  的精度是一样的.

一个很自然的想法是: 能否在一个方向 (如  $\hat{a}_1$ ) 上把这个态压缩一下, 使得得到更精密的测量? 回答是可能的. 但由于量子不确定关系的限制, 同时另一方向 (如  $\hat{a}_2$ ) 上的不确定性将更加膨胀, 使原来的圆变成为一个同样面积的椭圆. 这种态叫做压缩态 (Squeezed state). 人们期望它在精密测量 (如探测引力波) 或通讯中对减低噪声可能有重要的应用, 这里只简单地作些理论上的介绍.

定义一个压缩算符  $\hat{S}(r)$ :

$$\hat{S}(r) = \exp\left[\frac{r}{2}(\hat{a}^\dagger)^2 - \frac{r}{2}(\hat{a})^2\right] \quad (1.6.39)$$

这里取  $r$  为实数, 则因

$$\hat{S}^\dagger(r) = \hat{S}^{-1}(r) = \hat{S}(-r) \quad (1.6.40)$$

可见  $\hat{S}(r)$  是一个么正算符, 由  $\hat{S}(r)$  诱导出  $\hat{a}$  和  $\hat{a}^\dagger$  的正则变换, 即给出新的湮灭算符  $\hat{b}$  和产生算符  $\hat{b}^\dagger$ :

$$\hat{b}(r) \equiv \hat{S}^\dagger(r) \hat{a} \hat{S}(r) = \cosh r \hat{a} + \sinh r \hat{a}^\dagger \quad (1.6.41)$$

$$\hat{b}^\dagger(r) \equiv \hat{S}^\dagger(r) \hat{a}^\dagger \hat{S}(r) = \cosh r \hat{a}^\dagger + \sinh r \hat{a}$$

所谓正则变换是指它能够保持对易关系不变:

$$[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (1.6.42)$$

对一般的  $\hat{a}$  和  $\hat{a}^\dagger$  的幂函数  $f(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ , 有变换

$$\hat{S}^\dagger(r) f(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) \hat{S}(r) = \hat{f}(\hat{b}, \hat{b}^\dagger) \quad (1.6.43)$$

例如,

$$\hat{S}^\dagger(r) \hat{x} \hat{S}(r) = \frac{1}{\alpha_1} \hat{x} \quad (1.6.44)$$

其中  $\alpha_1 = e^{-r} > 0$ , 而

$$\hat{S}^\dagger(r) \hat{p} \hat{S}(r) = \alpha_1 \hat{p} \quad (1.6.45)$$

考虑从原来真空态  $|0\rangle$  挤压一下而得到的新的真空态

$$|0, r\rangle \equiv \hat{S}(r) |0\rangle \quad (1.6.46)$$

则在此新态  $|\rangle_{\text{new}} = |0, r\rangle$  中的各期待值将为

$$\langle \hat{x} \rangle_{\text{new}} = \langle \hat{p} \rangle_{\text{new}} = 0 \quad (1.6.47)$$

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle_{\text{new}} = \frac{1}{\alpha_1^2} \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right), \quad \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle_{\text{new}} = \alpha_1^2 \left( \frac{m\hbar\omega}{2} \right) \quad (1.6.48)$$

$$\langle (\Delta \hat{x})^2 \rangle_{\text{new}} \langle (\Delta \hat{p})^2 \rangle_{\text{new}} = \frac{\hbar^2}{4} \quad (1.6.49)$$

比较原来态  $|0\rangle$ , 新态是在  $\hat{x}$  方向和  $\hat{p}$  方向的不确定值(均方偏差)各有一个乘数  $\frac{1}{\alpha_1^2}$  和  $\alpha_1^2$  后的变形高斯波包态. 现在进一步用平移算符  $\hat{D}(z)$  作用于  $|0, r\rangle$ , 使它的中心从原点位移到复平面上的  $z$  点, 得到一般的压缩态(有时称为“相干压缩态”)\*

$$|z, r\rangle \equiv \hat{D}(z) \hat{S}(r) |0\rangle = \hat{D}(z) |0, r\rangle \quad (1.6.50)$$

回到(1.6.17)定义的  $\hat{a}_1$  和  $\hat{a}_2$ , 采用简单记号, 则

$$\langle \hat{a}_1 \rangle = \text{Re}z, \quad \langle \hat{a}_2 \rangle = \text{Im}z$$

$$\Delta \hat{a}_1 = \frac{1}{2\alpha_1}, \quad \Delta \hat{a}_2 = \frac{1}{2}\alpha_1 \quad (1.6.51)$$

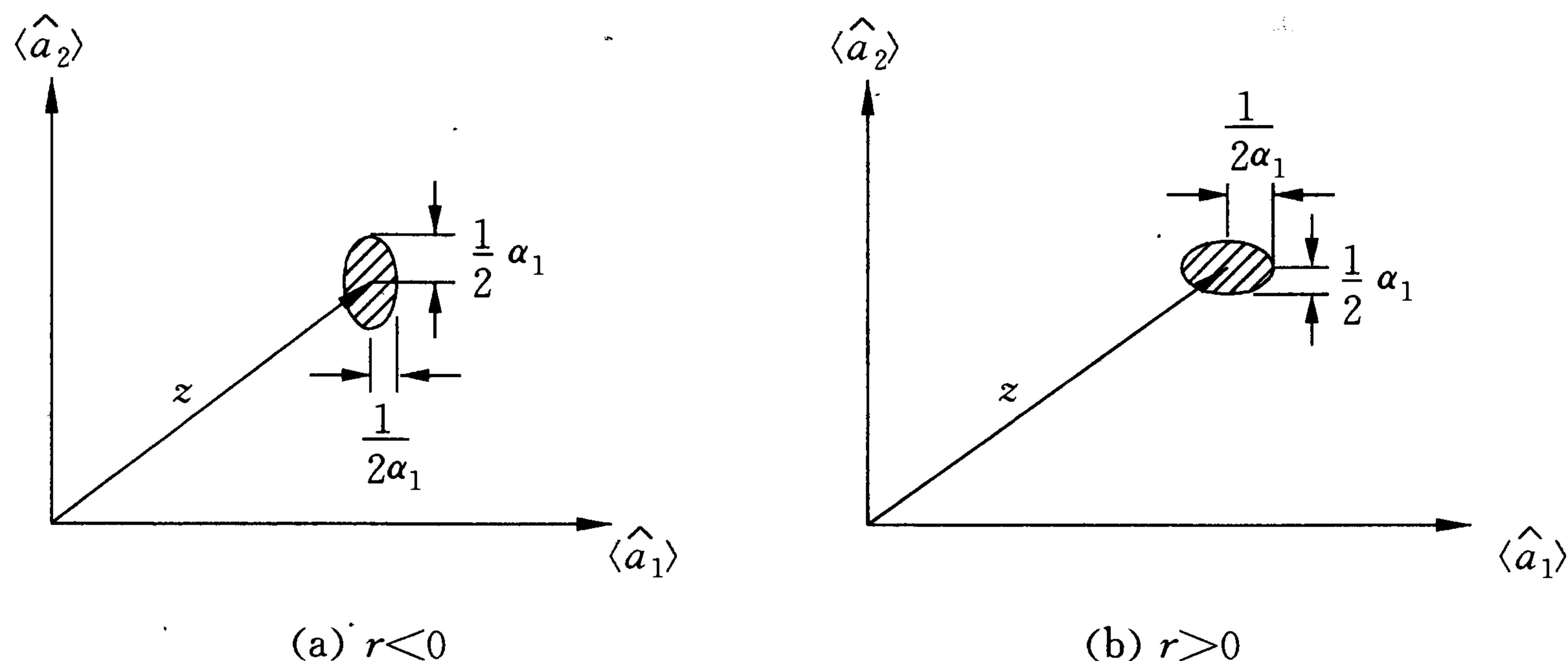
$$\Delta \hat{a}_1 \cdot \Delta \hat{a}_2 = \frac{1}{4} \quad (1.6.52)$$

可见虽然厄密算符  $\hat{a}_1$  和  $\hat{a}_2$  在新态中具有不相等的测不准值, 或者说有不同的量子起伏, 但乘积仍保持不确定关系的极小值.  $|z, r\rangle$  态在复平面上由一个中心位于  $z$  点的椭圆来表示, 它的半主轴长度沿  $\langle \hat{a}_1 \rangle$  和  $\langle \hat{a}_2 \rangle$  方向分别为  $\frac{1}{2\alpha_1}$  和  $\frac{1}{2}\alpha_1$ , 椭圆面积  $\frac{\pi}{4}$  等于原来相干态的圆面积, 如图1.6.2所示.

\* 还有另一类压缩态是“压缩相干态”:

$$|r, z\rangle \equiv \hat{S}(r) \hat{D}(z) |0\rangle = \hat{S}(r) |z\rangle.$$



图 1.6.2 压缩态示意图( $\alpha_1 = e^{-r}$ )

## § 1.7 路径积分和 Green 函数

### 1.7A 从经典力学过渡到量子力学的 3 种途径

从历史上看,从经典力学过渡到量子力学存在 3 种不同形式的途径,后来证明实质上都是等价的。

第一种是 Schrödinger 的表述形式,曾叫做波动力学,它重视描述粒子“波粒二重性”运动的波函数,后者服从 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (1.7.1)$$

第二种表述形式是 Heisenberg 发明的矩阵力学,它重视可观察量.把可观察量和算符间建立了一一对应的关系,研究算符的运动方程,它包含有对易关系的运算,而后者又同经典的 Poisson 括号有联系,见 § 1.3D 节。

第三种表述形式是 1933 年—1948 年间由 Dirac 和 Feynman 发现的<sup>[11]</sup>.他们着眼于经典作用量和量子力学中相位之间的关系,重视“传播函数”或“传播子”的作用.其基本物理思想是:“一个粒子在某一时刻的运动情态决定于它过去所有可能的历史”.写出  $t_a$  时刻的波函数  $\psi(x_a, t_a)$  (为简单起见,采用一维空间记号,推广到三维是明显的),则在后一时刻  $t_b > t_a$  的波函数可以表达为(图 1.7.1 所示)

$$\psi(x_b, t_b) = \int K(b, a) \psi(x_a, t_a) dx_a \quad (1.7.2)$$

其中引进了一个传播函数或核(Kernel)函数  $K(b, a)$ ,注意(1.7.2)中对空间坐标  $x_a$  要积分,而固定  $x_a$  点到  $x_b$  点的可能路径也有无限多条,每一条路径对最后几率幅  $\psi(x_b, t_b)$  都要作出贡献,按照实验显示的相干效

应,彼此线性叠加起来. Feynman 假定

$$K(b, a) = \sum_{\substack{a \rightarrow b \text{ 的} \\ \text{一切路径 } x(t)}} \text{const exp} \left\{ i \frac{1}{\hbar} S[x(t)] \right\} \quad (1.7.3)$$

其中  $S[x(t)]$  是与路径  $x(t)$  对应的经典作用量

$$S[x(t)] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt \quad (1.7.4)$$

而

$$L(\dot{x}, x, t) = T - V = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) \quad (1.7.5)$$

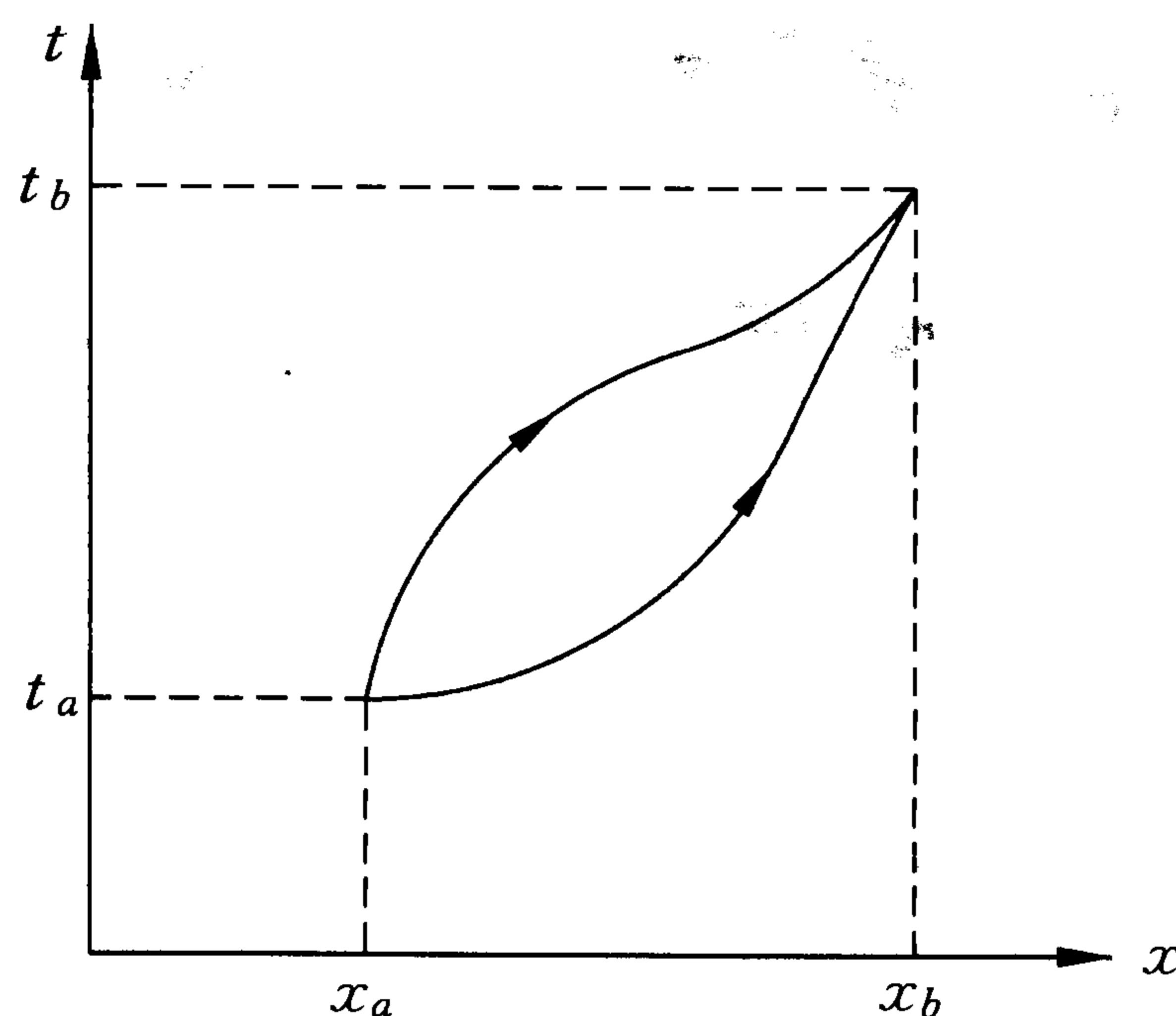


图 1.7.1 微观粒子在  $t_b$  时刻的运动情态决定于它过去所有可能的历史, 故从  $(x_a, t_a)$  到  $(x_b, t_b)$  要考虑无限多路径

是体系的拉格朗日函数.  $S[x(t)]$  是函数  $x(t)$  的函数, 故称为(作用量)“泛函”. 作用量具有与普朗克常数  $\hbar$  一样的量纲, 恰好使  $\frac{S}{\hbar}$  成为无量纲的指数函数的幂.  $\hbar$  在这个位置进入理论有深刻的含义, 一方面保证了正确的经典极限, 即当  $\hbar \rightarrow 0$  时, 由于指数因子的剧烈振荡, (1.7.3) 中只有一项的贡献是决定性的, 那就是使  $S$  取极值的经典轨道  $x_{\text{CL}}(t)$  的贡献, 变分条件给出

$$\delta S[x_{\text{CL}}(t)] = 0 \quad (1.7.6)$$

由此可导出经典力学的拉格朗日方程

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad (1.7.7)$$

另一方面, 当  $\hbar \neq 0$ , 不仅经典轨道, 而且一切轨道都作出贡献时, 我们就从经典力学过渡到量子力学, 而这时  $\hbar = 0$  是理论的一个本性奇点, 只有

$\hbar \rightarrow 0^+$  的方向才能过渡到正确的经典极限. 我们可在量子力学的隧道效应中看清楚这个问题.

Feynman 通过一些具体的例子如粒子的自由运动和谐振子等, 勇敢地构造了计算(1.7.3)式的办法, 即所谓泛函积分或路径积分, 在物理学后来的发展中起了巨大作用. 但下面我们将从另外的角度来讨论(1.7.2)和(1.7.3)式, 使得与本书其余部分有更好的衔接, 并弥补 Feynman 原始表述中对特殊拉氏量存在的不够普遍的缺点(参见文献[12]).

### 1.7B 费曼传播函数和海森堡图景中位置基矢的转换矩阵元

让我们用第三节海森堡图景的表式来改写(1.7.2)式:

$$\begin{aligned}\psi(x', t') &= {}^H\langle x', t' | \psi \rangle^H = \int {}^H\langle x', t' | x, t \rangle^H {}^H\langle x, t | \psi \rangle^H dx \\ &= \int {}^H\langle x', t' | x, t \rangle^H \psi(x, t) dx\end{aligned}\quad (1.7.8)$$

由此可见, (1.7.3)式中的 Feynman 传播函数  $K$  就是海森堡图景中坐标算符本征矢在不同时刻  $t$  和  $t'$  间的转换矩阵元

$$K(x', t' | x, t) = {}^H\langle x', t' | x, t \rangle^H \quad (1.7.9)$$

由(1.3.24)式对  $t$  积分, 得到

$$|x, t\rangle^H = \exp\left[\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)\right] |x, t_0\rangle^H \quad (1.7.10)$$

(已假定  $\hat{H}$  不显含  $t$ ), 取初时刻的  $|x, t_0\rangle^H$  与薛定谔图景中的坐标本征矢  $|x\rangle$  重合, 将(1.7.10)代入(1.7.9), 便有

$$K(x', t' | x, t) = \langle x' | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t'-t)\right] | x \rangle \quad (1.7.11)$$

由(1.7.11)式出发, 把有限时间间隔  $(t' - t)$  分割为  $N$  段等间隔的小区间, 让  $N \rightarrow \infty$  后, 即可证明

$$K(x', t' | x, t) = \int \mathcal{D}x \frac{\mathcal{D}p}{(2\pi\hbar)} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} S[p, x]\right\} \quad (1.7.12)$$

$$\text{其中} \quad \int \mathcal{D}x \frac{\mathcal{D}p}{2\pi\hbar} \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{N-1} \left[ \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \right] \prod_{n=1}^N \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_n}{2\pi\hbar} \right] \quad (1.7.13)$$

是路径积分的定义, 而

$$S[p, x] = \int_t^{t'} dt [p(t)\dot{x}(t) - H(p(t), x(t))] \quad (1.7.14)$$

是从原来(1.7.3)式中的作用量  $S[x(t)]$  变来的. 记得  $H \equiv p\dot{x} - L$ , 经典哈密顿量  $H$  被定义为  $(p, x)$  的函数, 代替拉氏量  $L$  (被定义为  $(x, \dot{x})$  的函数), 与此相应, 路径积分(1.7.13)就不仅要积分  $x$ , 也要对独立的  $p$  积分.

(1.7.13)式是普遍正确的量子力学路径积分的正则形式, 对无限多想像中可能的路径求和, 这就引入了量子的本质, 但被积函数中出现的量却都是普通的 C 数函数. 作为对比, (1.7.11)式中的哈密顿算符  $\hat{H}$  是算符  $\hat{p}$  和  $\hat{x}$  的函数, 那么量子的  $\hat{H}(\hat{p}, \hat{x})$  与经典的  $H(p, x)$  有怎样的对应关系呢? 见下小节.

### 1.7C 算符排列的 Weyl 顺序

我们知道, 在  $x$  表象中,  $\hat{x} = x$ ,  $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ , 但从经典的  $H(p, x)$  中如何作代换  $x \rightarrow \hat{x}$ ,  $p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ , 才能得到正确的  $\hat{H}(\hat{p}, \hat{x})$ , 却需要仔细研究. Weyl 指出的办法是先将经典量  $F(x, p)$  用 Fourier 积分展开:

$$F(x, p) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi, \eta) \exp(i\xi x + i\eta p) d\xi d\eta \quad (1.7.15)$$

则对应的量子力学算符便是

$$\hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi, \eta) \exp(i\xi \hat{x} + i\eta \hat{p}) d\xi d\eta \quad (1.7.16)$$

由于经典观察量  $F$  必为实数, 因此由(1.7.15)有

$$f^*(\xi, \eta) = f(-\xi, -\eta) \quad (1.7.17)$$

故由(1.7.16)式又有

$$\hat{F}^\dagger(\hat{x}, \hat{p}) = \hat{F}(\hat{x}, \hat{p}) \quad (1.7.18)$$

即 Weyl 规则保证了  $\hat{F}$  是一个厄密算符. 注意(1.7.16)式唯一地确定了  $\hat{F}$ , 但形式上还可以有各种等价的表述. 原因是在式(1.7.16)指数上的  $\hat{x}$  和  $\hat{p}$ , 其顺序本来无关紧要, 但在用公式(1A.4)时, 可以有两种不同的写法:

$$\exp(i\xi \hat{x} + i\eta \hat{p}) = \exp(i\xi \hat{x}) \exp(i\eta \hat{p}) \exp\left[i\frac{\hbar}{2}\xi\eta\right] \quad (1.7.19a)$$

$$= \exp(i\eta \hat{p}) \exp(i\xi \hat{x}) \exp\left[-i\frac{\hbar}{2}\xi\eta\right] \quad (1.7.19b)$$

或者取(1.7.19a)与(1.7.19b)式的某一平均. 例如对经典量

$$F(x, p) = f_1(x)p \quad (1.7.20a)$$

(1.7.15)式中之 Fourier 变换为

$$f(\xi, \eta) = i\left(\frac{1}{2\pi}\right)\left[\frac{d}{d\eta}\delta(\eta)\right]\int f_1(\lambda)\exp(-i\xi\lambda)d\lambda$$

但对应之量子算符可取 3 种等价的形式(在  $x$  表象):

$$\begin{aligned} F(\hat{x}, \hat{p}) &= f_1(x)\hat{p} - \frac{1}{2}i\hbar\frac{df_1}{dx} \\ &= \hat{p}f_1(x) + \frac{1}{2}i\hbar\frac{df_1}{dx} \\ &= \frac{1}{2}[f_1(x)\hat{p} + \hat{p}f_1(x)], \quad \left(\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right) \end{aligned} \quad (1.7.20b)$$

最后一式是由(1.7.19)的两个式子各取一半而组合得到的. 上述 Weyl 规则可推广到三维情形. 例如与经典矢量积  $f_1(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}$  对应之量子算符为如下 3 种等价形式:

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}} - \frac{1}{2}i\hbar[\nabla \times f_1(\mathbf{r})] &= -\hat{\mathbf{p}} \times f_1(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}i\hbar[\nabla \times f_1(\mathbf{r})] \\ &= \frac{1}{2}[f_1(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \times f_1(\mathbf{r})] \end{aligned} \quad (1.7.21)$$

其中  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$  要对后面一切含  $\mathbf{r}$  的量作用, 而  $(\nabla \times f_1)$  则只是一个普通的 C 数矢量(不再对后面有微分作用). 又如与经典电流密度

$\mathbf{J} = \frac{q}{m}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\mathbf{p}$  相对应之量子力学算符为(参见文献[14])

$$\hat{\mathbf{J}} = \frac{q}{2m}[\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')] \quad (1.7.22)$$

### 1.7D Green 函数

我们再进一步研究路径积分的核函数与薛定谔方程的 Green 函数之间的关系. 对不显含时间  $t$  的哈密顿量, 可以引进一套完备的能量本征函数系  $\{\phi_n(\mathbf{x})\}$ ,  $\phi_n(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | E_n \rangle$ , 将核函数展开如下:

$$K(\mathbf{x}', t' | \mathbf{x}, t) = {}^H\langle \mathbf{x}', t' | \mathbf{x}, t \rangle^H = \langle \mathbf{x}' | \exp\left[-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t' - t)\right] | \mathbf{x} \rangle$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{n, n'} \langle \mathbf{x}' | E_{n'} \rangle \langle E_{n'} | \exp \left[ -i \frac{\hat{H}}{\hbar} (t' - t) \right] | E_n \rangle \langle E_n | \mathbf{x} \rangle \\
 &= \sum_n \phi_n(\mathbf{x}') \phi_n^*(\mathbf{x}) \exp \left[ -\frac{iE_n(t' - t)}{\hbar} \right], \quad (t' > t)
 \end{aligned}
 \tag{1.7.23}$$

最后我们注明时间顺序是  $t' > t$ , 表示 Feynman 路径积分中一切路径尽管曲曲折折, 在时间指向上却永远朝前而不会反转, 只在以后讨论相对论性量子力学时, 我们才会遇到时间上反转的路径.

另一方面, 定义量子力学中的 Green 函数为如下的非齐次薛定谔方程之解:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}' \right) G(\mathbf{x}', t' | \mathbf{x}, t) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') \tag{1.7.24}$$

用直接代入法可证

$$G(\mathbf{x}', t' | \mathbf{x}, t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n \phi_n(\mathbf{x}') \phi_n^*(\mathbf{x}) \exp \left[ -\frac{iE_n(t' - t)}{\hbar} \right] \theta(t' - t)
 \tag{1.7.25}$$

与(1.7.23)比较可见

$$G(\mathbf{x}', t' | \mathbf{x}, t) = \frac{-i}{\hbar} K(\mathbf{x}', t' | \mathbf{x}, t) \theta(t' - t) \tag{1.7.26}$$

两者实际上是一回事, 不过阶梯函数  $\theta(t' - t)$  的存在明显地表明了  $t' > t$  的条件.

进一步作 Green 函数的 Fourier 变换

$$\tilde{G}(\mathbf{x}', \mathbf{x}; E) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{x}', t' | \mathbf{x}, t) \exp \left[ \frac{iE(t' - t)}{\hbar} \right] d(t' - t) \tag{1.7.27}$$

容易证明

$$\tilde{G}(\mathbf{x}', \mathbf{x}; E) = \sum_n \frac{\phi_n(\mathbf{x}') \phi_n^*(\mathbf{x})}{E - E_n + i\epsilon}, \quad (\epsilon \rightarrow 0) \tag{1.7.28}$$

事实上, 只需利用复变函数论中的约当引理和留数定理就可以证明  $\tilde{G}(\mathbf{x}', \mathbf{x}; E)$  的 Fourier 反演

$$G(\mathbf{x}', t' | \mathbf{x}, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \tilde{G}(\mathbf{x}', \mathbf{x}; E) \exp \left[ -i \frac{E}{\hbar} (t' - t) \right] dE
 \tag{1.7.29}$$

确实就是(1.7.26)式. 证明时区别  $t' > t$  和  $t' < t$  的两种情况. 在前一情况下, 由约当引理可在原来沿实  $E$  轴的积分基础上补充一个在下半  $E$  复平面上的半圆, 得到一个闭合的围道积分, 再注意在下半平面有无数分立的极点位于  $E_n - i\epsilon$ , 用留数定理容易计算它们的贡献, 就是(1.7.26)式 ( $t' > t$ ) 的结果. 对  $t' < t$  的情况, 应补充上半平面的半圆而得到闭合围道, 但此时内部无极点, 故积分结果为零, 证毕.

## 附录 1A 算符代数的若干定理

在本书中会用到一些关于算符运算的定理, 列举如下<sup>[13]</sup>:

**定理一** 设  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  两算符(以下略去  $\wedge$  号)不对易, 则

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \frac{1}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (1A.1)$$

其中  $[A, B] \neq 0$

**证** 作一个算符函数  $f(\lambda) = e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}$ , 其中  $\lambda$  为参数. 对  $f(\lambda)$  在  $\lambda = 0$  点作泰勒展开, 因

$$\begin{aligned} \frac{df}{d\lambda} &= A e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} - e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} A \\ &= A f(\lambda) - f(\lambda) A = [A, f(\lambda)] \\ \frac{d^2 f}{d\lambda^2} &= \left[ A, \frac{df}{d\lambda} \right] = [A, [A, f(\lambda)]] \\ f(\lambda) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} f^{(n)}(0) \\ &= B + \frac{\lambda}{1!} [A, B] + \frac{\lambda^2}{2!} [A, [A, B]] + \dots \end{aligned}$$

令  $\lambda = 1$ , 即得(1A.1)式. 证毕.

**推论 I** 如  $[A, B] = r$ , 而  $r$  是一个数, 则

$$[A, B^n] = nrB^{n-1}, \quad [A, e^B] = re^B \quad (1A.2)$$

**推论 II** 如  $[A, B] = rB$ , 而  $r$  是一个数, 则

$$e^A B e^{-A} = e^r B \quad (1A.3)$$

证明都是简单的, 从略.

定理二 如 $[A, B]$ 与 $A$ 及 $B$ 分别对易,则

$$e^{A+B} = e^A e^B \exp\left\{-\frac{1}{2}[A, B]\right\} \quad (1A.4)$$

证 令 $f(\lambda) = e^{A\lambda} e^{B\lambda}$ , 则

$$\frac{d}{d\lambda} f(\lambda) = (A + e^{A\lambda} B e^{-A\lambda}) f(\lambda)$$

用数学归纳法可以证明(习题)

$$[B, A^n] = nA^{n-1}[B, A]$$

故

$$[B, e^{-A\lambda}] = -e^{-A\lambda} [B, A] \lambda$$

或

$$e^{A\lambda} B e^{-A\lambda} = B - [B, A] \lambda$$

$$\frac{df}{d\lambda} = \{A + B + [A, B] \lambda\} f(\lambda)$$

因 $[A, B]$ 与 $A$ 及 $B$ 分别对易,即 $[A, B]$ 与 $(A+B)$ 对易,我们可把 $\{A + B + [A, B] \lambda\}$ 看作是一个数而将方程对 $\lambda$ 积分,得到

$$\ln f(\lambda) = (A + B) \lambda + \frac{1}{2} [A, B] \lambda^2 + C$$

由 $f(0) = 1$ 定出常数 $C = 0$ , 即得

$$f(\lambda) = \exp[(A + B) \lambda] \exp\left\{\frac{1}{2} [A, B] \lambda^2\right\}$$

取 $\lambda = 1$ , 即得

$$e^A e^B = e^{A+B} \exp\left\{\frac{1}{2} [A, B]\right\} \quad (1A.5)$$

这也就是(1A.4)式, 或者也可写出

$$e^A e^B = e^B e^A e^{[A, B]} \quad (1A.6)$$

证毕. 当 $[A, B]$ 与 $A$ 及 $B$ 分别不可对易时, 我们有更一般的 Baker-Campbell-Hausdorff 公式如下(证明复杂, 从略):

$$e^A e^B = e^C \quad (1A.7)$$

其中算符  $C = A + B + \frac{1}{2} [A, B] + \frac{1}{12} [A - B, [A, B]] + \dots$



## 附录 1B Hilbert 空间及其表示, 量子力学基本原理

作为第一章小结, 附录 1B 将简要地综述量子力学(QM)的数学工具, 同时归纳 QM 的基本原理. 详细的讨论请参见文献[16, 19, 20].

## 一、线性矢量空间与 Hilbert 空间

QM 最引人注目的特点是线性: 设  $\psi$  与  $\varphi$  分别是薛定谔方程的解, 则  $\chi = C_1\psi + C_2\varphi$  也是一个解 ( $C_1, C_2$  是两个任意复常数). 故与此“线性叠加原理”相适应的数学工具是一种特殊的线性空间——Hilbert 空间的理论.

一系列同类的“数学对象”(也称为“元”或“矢量”的集合  $\{\psi, \varphi, \chi, \dots\}$ ) 构成线性空间或矢量空间, 它们满足以下的条件:

$$(1) \text{ 加法规则: } \chi = \psi + \varphi = \varphi + \psi \quad (1B.1)$$

$$(2) \text{ 零矢量(即加法单位元 } 0) \text{ 存在: } \psi + 0 = \psi \quad (1B.2)$$

$$(3) \text{ 加法逆元存在: } \psi + \varphi = 0, \varphi = -\psi \quad (1B.3)$$

$$(4) \text{ 数乘规则: 任一矢量可与一实数或复数 } a \text{ 相乘, 仍在集合之中,}$$

$$\varphi = a\psi = \psi a \quad (1B.4)$$

$$(5) \text{ 结合律: } a(b\psi) = (ab)\psi \quad (1B.5)$$

$$(6) \text{ 分配律: } (a+b)\psi = a\psi + b\psi$$

$$a(\psi + \varphi) = a\psi + a\varphi \quad (1B.6)$$

线性矢量空间再加上一个“内积”存在的条件, 便叫做 Hilbert 空间.

$$(7) \text{ 内积规则: 两个任意矢量按以下次序与一个复数 } C \text{ 对应:}$$

$$(\psi, \varphi) = C \quad (1B.7)$$

$$(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^* = C^* \quad (1B.8)$$

$$(\psi, \varphi + \chi) = (\psi, \varphi) + (\psi, \chi) \quad (1B.9)$$

$$(\psi, a\varphi) = a(\psi, \varphi), (a\psi, \varphi) = a^*(\psi, \varphi) \quad (1B.10)$$

$$(8) \text{ 模(norm)的正定性: 一个矢量的长度或模定义是}$$

$$|\psi| = \sqrt{(\psi, \psi)} \geq 0 \quad (1B.11)$$

仅当  $\psi = 0$  时, 才有  $|\psi| = 0$ .

所以, Hilbert 空间是一个具有内积的完备的复线性矢量空间. 这里我们又加上了一个“完备性”, 它的意思是: 任何在 Cauchy 意义下收敛的序列  $\{\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots\}$  的极限也必须在本空间之内. 而 Cauchy 意义下收

敛是指:对任意给定的小实数  $\epsilon > 0$ , 存在一个(大)数  $N$ , 当  $m, n > N$  时, 有

$$(\psi_m - \psi_n, \psi_m - \psi_n) < \epsilon \quad (1B.12)$$

以上  $\psi, \varphi$  等可以是各种抽象的“数学对象”, 但当应用于 QM 时, 它们代表描写物理体系的“态矢”  $|\psi(t)\rangle$  等. 而写出内积  $(\psi, \varphi) = \langle \psi | \varphi \rangle$  时,  $\langle \psi |$  称为左矢,  $|\varphi\rangle$  称为右矢(见 § 1.2A). 因为我们总可以将模归一化, 使  $|\psi| = 1$ , 于是可建立量子力学原理 1 如下:

**QM 原理 1** 描写微观体系状态的数学量是 Hilbert 空间中的矢量, 只相差一个复数因子的两个矢量, 描写同一个物理状态.

## 二、厄密算符和基矢

一个厄密算符  $\hat{A}$  在抽象意义下称为“自轭算符”( (1.2.15) 式):

$$\hat{A} = \hat{A}^+ \quad (1B.13)$$

**定理** 算符  $\hat{A}$  为厄密算符的充分必要条件是它对其定义域中所有的态矢量  $|\psi\rangle$  都满足

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \text{实数} \quad (1B.14)$$

(证明见文献[16]). 若  $\{|\psi\rangle\}$  中存在一系列态矢  $|a_i\rangle$  使

$$\hat{A} |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle \quad (1B.15)$$

而  $a_i$  是实数, 则称  $|a_i\rangle$  是  $\hat{A}$  的本征矢而  $a_i$  是相应的本征值. 于是我们有

**QM 原理 2** (1) 描写微观体系物理量(可观察量)的是 Hilbert 空间内的厄密算符(如  $\hat{A}$ );

(2) 物理量所能取的值( $a_i$ )是相应算符( $\hat{A}$ )的本征值;

(3) 一个任意态  $|\psi\rangle$  总可以用  $\hat{A}$  的归一化本征态  $|a_i\rangle$  展开如下:

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i |a_i\rangle, \quad C_i = \langle a_i | \psi \rangle \quad (1B.16)$$

而物理量  $A$  在  $|\psi\rangle$  中出现的几率与  $|C_i|^2$  成正比(Born 统计解释).

**定理** 在有限( $D$ )维空间中, 厄密算符的全部本征矢构成正交完全集(证明见文献[16]).

对于无穷维 Hilbert 空间而厄密算符具有可数的离散本征值的情况 [这称为可分离的(separable) Hilbert 空间], 数学上虽难于证明, 但物理上可以认为: 对此厄密算符的全部线性无关的本征矢, 作正交归一化手续后, 总能成立以下关系:

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij}, \quad \sum_{i=1}^{\infty} | a_i \rangle \langle a_i | = 1 \quad (1B.17)$$

因此,物理上常用厄密算符(如 $\hat{A}$ )的本征矢( $| a_i \rangle$ )作为一组“基矢”,去构造一个 Hilbert 空间. 基矢的数目称为 Hilbert 空间的维度(dimension),它可以有限或无限.

对于本征值为连续谱的情形,即 $\hat{A} | a \rangle = a | a \rangle$ ,而 $a$ 为连续实数时,任意态矢 $|\psi\rangle$ 的展开式需写成积分形式

$$|\psi\rangle = \int da | a \rangle \langle a | \psi \rangle \quad (1B.18)$$

即完备性公式是 
$$\int da | a \rangle \langle a | = 1 \quad (1B.19)$$

而正交归一化公式是 
$$\langle a' | a \rangle = \delta(a' - a) \quad (1B.20)$$

与离散本征值情形(1B.17)相比,这里用 $\delta(a' - a)$ 代替了 $\delta_{ij}$ . 由此可见,物理上需要的完备性实际已超出了原来数学上 Cauchy 意义下的完备性,而 Dirac 为 QM 引入 $\delta$ 函数也是完全必要的. 我们不妨说:物理的 Hilbert 空间是扩大了 Hilbert 空间.

**定理** 当且仅当两个厄密算符 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 可互相对易时,它们有一组共同的本征矢量完备集,即

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0, \quad \hat{A} | i \rangle = a_i | i \rangle, \quad \hat{B} | i \rangle = b_i | i \rangle \quad (1B.21)$$

(证明见文献[16]).

### 三、么正算符和么正变换

一个么正算符 $\hat{U}$ 是满足如下条件的算符:

$$\hat{U}^+ \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^+ = I, \quad \text{即 } \hat{U}^+ = \hat{U}^{-1} \quad (1B.22)$$

因此当它同时作用到两个态矢 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 上时,使后者发生变化: $|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle$ ,  $|\varphi\rangle \rightarrow |\varphi'\rangle = \hat{U} |\varphi\rangle$ ,这叫做么正变换,但它们的内积仍保持不变,即

$$\langle \psi | \varphi \rangle \rightarrow \langle \psi' | \varphi' \rangle = \langle \hat{U} \psi | \hat{U} \varphi \rangle = \langle \psi | \hat{U}^+ \hat{U} | \varphi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle \quad (1B.23)$$

与此相应,一个厄密算符 $\hat{A}$ 也受到变换如下:

$$\hat{A} | \psi \rangle = | \varphi \rangle \rightarrow \hat{A}' | \psi' \rangle = | \varphi' \rangle$$

$$\hat{A}' = \hat{U} \hat{A} \hat{U}^{-1} \quad (1B.24)$$

在矩阵表示中,若原来 $\hat{A}$ 是非对角的,我们可以用一个适当的么正变换矩阵 $\hat{U}$ 使 $\hat{A}'$ 变为对角的.这种矩阵对角化在QM中有重要的应用.

无限小的么正 $\hat{U}$ 变换必可与一个厄密算符 $\hat{F}$ 联系起来:

$$\hat{U} = 1 + i\epsilon \hat{F}, \quad \hat{F}^\dagger = \hat{F} \quad (1B.25)$$

这在第三章中将有重要的应用.

#### 四、基本对易关系——量子化的入口(inlet)

**QM 原理 3** 一个微观粒子在直角坐标下的位置算符 $\hat{x}_i$  ( $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$ ,  $x_3 = z$ ) 与相应之正则动量算符 $\hat{p}_i$  有下列对易关系:

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (1B.26)$$

而不同粒子间的所有上述算符均可相互对易.

如等式(1.3.36)~(1.3.40)所指出,上述基本对易关系是从经典的泊松括号升级(量子化)而来.普朗克常数 $\hbar$  ( $\hbar = h/2\pi$ ) 从这里才开始进入QM.还要注意:对一般非直角坐标,并不存在这种关系.例如粒子绕 $z$ 轴的轨道角动量算符 $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$  与对应的极角 $\phi$ 之间,假如写出

$$[\hat{\phi}, \hat{L}_z] = i\hbar \quad (1B.27)$$

那便是错误的!其理由已在§1.6D指出,详见文献[9a].

#### 五、态矢量或厄密算符的运动方程

**QM 原理 4** 在薛定谔图景中,微观体系态矢量 $|\psi(t)\rangle$  随时间变化的规律由薛定谔方程给出:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (1B.28)$$

对此相应,在海森堡图景中,一个厄密算符 $\hat{A}^{(H)}(t)$ 的运动规律由海森堡方程给出(假定 $\hat{A}^{(S)}$ 不显含时间):

$$\frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^{(H)}, \hat{H}] \quad (1B.29)$$

在§1.3D末已指出,(1B.28)与(1B.29)两式在物理上是等价的.还要注意:哈密顿算符 $\hat{H}$ 在QM中有本质的重要性,这是因为(经典)哈密顿量 $H$ 是用基本正则共轭量 $(x, p)$ 来表示的缘故.作为对比,拉氏量 $L$ 用

$x$  和速度 $\dot{x}$ 来表示,在 QM 中的地位就不如  $H$ (见 § 1.7B). 正如 Dirac 强调的那样,一个经典理论要量子化,沿如下的途径

$$x \rightarrow \hat{x}, p \rightarrow \hat{p}, H \rightarrow \hat{H}, \{A, B\}_{\text{PB}} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{B}] \quad (1B.30)$$

将是最可靠的. 不过拉氏量  $L$ (或经典场论中的拉氏密度  $\mathcal{L}$ )也有它的优点,就是较容易找到相对论性(协变形式)的  $\mathcal{L}$ , ( $\mathcal{L}$  是 Lorentz 变换下的四维标量),而  $H$  则不具有简单的 Lorentz 协变性.

### 六、玻色子和费米子的置换对称性

**QM 原理 5** 一个包含多个全同粒子的体系,在 Hilbert 空间中的态矢对于任何一对粒子的交换是对称的(交换前后完全不变)或反对称的(交换前后差一个负号). 服从前者的粒子称为玻色子,服从后者的粒子称为费米子.

这个原理反映了全同粒子的不可分辨性和多粒子量子体系的一种对称性. 尽管我们至今还不大理解它的深刻含义(见第十章),但其应用和数学表述将在第五、第八各章中作充分的讨论. 还要指出的是,近年来已发现此原理有例外(见 § 7.3).

以上 5 条基本原理(QM 原理 1~5)构成了非相对论性量子力学的理论框架(Framework). 然而为了讨论相对论性量子力学,即考虑进一步扩大 Hilbert 空间以容纳反粒子的自由度,我们还需要一条相对论性原理,这将在第九章中讨论.(在那里将看到哈密顿量  $H$  为“相对论性”的条件是满足“空间-时间反演不变性”.)

## 习 题

- 1.1 证明(1.1.16)及(1.1.17)式.
- 1.2 证明对谐振子(1.4.19)式成立.
- 1.3 试用标度变换法  $r \rightarrow r' = \lambda r$ , 证明 Virial 定理:  $\langle H \rangle - \langle V \rangle = \langle T \rangle = \left\langle \frac{1}{2} r \frac{dV}{dr} \right\rangle$  对在势场  $V(r)$  中的一粒子定态成立.
- 1.4 证明对谐振子的各激发态,(1.5.17)式成立.
- 1.5 类氢原子的基态波函数是  $\psi_{1s}(r) = \left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} 2\exp(-Zr/a)$ 
  - (1) 证明它服从 Virial 定理;
  - (2) 沿一个方向(如  $z$  轴)检验不确定关系成立.
- 1.6 考虑一维空间的两个平面波:

$$\psi_1(x, t) = A \exp[i(k_1 x - \omega_1 t)], \psi_2(x, t) = A \exp[i(k_2 x - \omega_2 t)]$$

$$k_1 = k - \Delta k, k_2 = k + \Delta k, (\Delta k \ll k); \omega_1 = \omega - \Delta\omega, \omega_2 = \omega + \Delta\omega, (\Delta\omega \ll \omega).$$

(1) 证明  $\psi_1$  与  $\psi_2$  叠加后,  $\psi = \psi_1 + \psi_2$  仍是一个波, 但其振幅受到调制, 结果波的轮廓或  $|\psi|^2$  以群速度

$$v_g = \frac{\Delta\omega}{\Delta k} \longrightarrow \frac{d\omega}{dk} \text{ 运动};$$

(2) 如果上述波是粒子的德布罗意波, 其动量  $p = \hbar k$ , 能量  $E = \hbar\omega$ , 试分别对  $E = p^2/2m$ ,  $E' = p^2/2m + mc^2$  及  $E'' = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$  计算其相速度  $v_p = \omega/k$  与群速度  $v_g$ , 并说明它们的含义.

1.7 考虑一高斯型的波包 ( $E = p^2/2m, p = \hbar k, E = \hbar\omega$ ):

$$\psi(x, t) = (4\pi\sigma^2)^{-1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-k^2/2\sigma) \exp[i(kx - \omega t)] dk$$

(1) 证明它在任意时刻  $t$  是归一化的;

(2) 证明当  $t = 0$  时, 不确定关系取极小值;

(3) 证明此波包将随时间扩散 (设  $\frac{\hbar k^2}{2m} t \ll 1$ ).

1.8 试导出自由谐振子的相干态在位形空间的波函数 (利用 Hermite 多项式的母函数  $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) s^n = \exp(-s^2 + 2\xi s)$ ).

1.9 设在谐振子的哈密顿量  $H_0 = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$  上加上两个小的非谐项  $H' = \beta x^3$  和  $H'' = \gamma x^4$ , 试用产生 (和湮灭) 算符的方法计算基态的能量修正到  $H'$  和  $H''$  的一级与  $H'$  的二级.

\* 1.10 1963 年, Susskind 和 Glogower (见文献 [9a]) 设法引入了两个厄密算符  $\hat{C}$  和  $\hat{S}$ , 它们是相位  $\phi$  的两个经典周期函数  $\cos\phi$  和  $\sin\phi$  的量子对应, 同时引入另两个算符:

$$\hat{E}_{\pm} \equiv \hat{C} \mp i \hat{S}, \hat{E}_{\pm} = (\hat{E}_{\mp})^{\dagger}$$

注意  $\hat{E}_{+}$  与  $\hat{E}_{-}$  分别和经典函数  $e^{-i\phi}$  及  $e^{i\phi}$  对应, 且应定义为

$$\hat{E}_{-} = (\hat{N} + 1)^{-1/2} \hat{a}, \hat{E}_{+} = \hat{a}^{\dagger} (\hat{N} + 1)^{-1/2}$$

试证明下列关系式:

$$[\hat{E}_{\mp}, \hat{N}] = \pm \hat{E}_{\mp}$$

$$\hat{E}_{+} = \sum_{n=0}^{\infty} |n+1\rangle \langle n|, \hat{E}_{-} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n+1|$$

$$\hat{E}_{-} \hat{E}_{+} = 1, \hat{E}_{+} \hat{E}_{-} = 1 - P_0, P_0 \equiv |0\rangle \langle 0|$$

$$[\hat{C}, \hat{N}] = i \hat{S}, [\hat{S}, \hat{N}] = -i \hat{C}, [\hat{C}, \hat{S}] = -P_0/2i$$

$$\langle (\Delta \hat{N})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{C})^2 \rangle / \langle \hat{S}^2 \rangle \geq 1/4$$

$$\langle (\Delta \hat{N})^2 \rangle \langle (\Delta \hat{S})^2 \rangle / \langle \hat{C}^2 \rangle \geq 1/4$$

## 参 考 文 献

- [1] 周世勋. 量子力学. 上海: 上海科学技术出版社, 1961
- [2] 苏汝铿. 量子力学. 上海: 复旦大学出版社, 1997
- [3] 曾谨言. 量子力学. 北京: 科学出版社, 1997
- [4] L. I. Schiff. *Quantum Mechanics* (3rd Ed.). McGraw-Hill Book Company, 1963 (李淑娴, 陈崇光译. 量子力学. 北京: 人民教育出版社, 1981)
- [5] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics, Nonrelativistic Theory*. Pergamon Press, 1977
- [6] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics* (3rd Ed.). John Wiley & Sons, Inc., 1998
- [7] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, Inc., 1994
- [8] 于祖荣. 物理学进展, **19**, 72(1999)
- [9a] P. Carruther and H. M. Nieto, *Rev. Mod. Phys.*, **40**, 411 (1968)
- [9b] D. T. Pegg and S. M. Barnett. *Phys. Rev.*, **A 39**, 1665 (1989)
- [10] S-q Chen, G-j Ni and Y-l Shen. *Phys. Lett.*, **A 178**, 339 (1993)
- [11] R. P. Feynman and A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. McGraw-Hill, Inc., 1965
- [12] H. Kleinert. *Path Integral in Quantum Mechanics. Statistics and Polymer Physics*. World Scientific, 1990
- [13] A. S. Davydov. *Quantum Mechanics* (2nd Ed.). Pergamon Press, 1965
- [14] 卢书城. 大学物理, **2**, 21(1987)
- [15] 杨泽森. 高等量子力学(第二版). 北京: 北京大学出版社, 1995
- [16] 喀兴林. 高等量子力学. 北京: 高等教育出版社, 1999
- [17] 范洪义. 量子力学表象与变换论——狄拉克符号法进展. 上海: 上海科学技术出版社, 1997
- [18] 关洪. 量子力学基础. 北京: 高等教育出版社, 1999
- [19] A. Messiah. *Quantum Mechanics*. (苏汝铿, 汤家镛译. 量子力学(第一卷). 北京: 科学出版社, 1986)
- [20] Roland Omne's. *Understanding Quantum Mechanics*. Princeton University Press, 1999

## 第二章 量子散射理论

量子力学中的散射(或碰撞)理论,是本书的重点内容之一.本章在介绍严格的形式理论如 Lippmann-Schwinger 方程、Dyson 方程、S 矩阵理论、光学定理等的同时,还努力注意它们的实际应用如玻恩近似、低能散射的有效力程理论和黑核模型等内容. § 2.4 关于 Levinson 定理的讨论把散射相移与束缚态能级数目联系起来,有很强的物理直观性,也希望读者注意.

### § 2.1 弹性散射的严格解

#### 2.1A Lippmann-Schwinger 方程

我们知道,在量子力学中两个粒子(不考虑自旋)的碰撞,在质心坐标系中可以化为一个质量为  $m$  ( $m$  是粒子的约化质量)的粒子在固定势场  $V(\mathbf{r})$  中被散射的问题. 写出描写粒子运动的薛定谔方程

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.1.1)$$

因在弹性散射过程中粒子能量不变,故可令

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\left[-\frac{iEt}{\hbar}\right] \quad (2.1.2)$$

又记  $U(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{r})$ , 可将(2.1.1)化成不含时间的方程

$$(\nabla^2 + k^2) \psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.1.3)$$

其中  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ,  $\mathbf{k}$  叫做波矢,方向沿入射平面波方向,其绝对值  $k$  有时也称为波数.

倘若假设  $V(\mathbf{r})$  在  $r \rightarrow \infty$  时比  $\frac{1}{r}$  趋于零更快,即在所谓短程势的情形,则我们可设(2.1.3)的特解有如下的渐近行为:

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A \left[ \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + f(\theta, \phi) \frac{\exp(ikr)}{r} \right] \quad (2.1.4)$$



式中第一项为入射平面波,第二项为出射球面波.

我们可以从另一种观点来看齐次方程(2.1.3)的求解问题,即把右端形式地看成是一个非齐次项,而用 Green 函数方法写出方程的形式解如下:

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.1.5)$$

其中

$$\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.1.6)$$

是入射平面波,而  $G_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$  是散射的自由 Green 函数,它们分别满足下列方程:

$$(\nabla^2 + k^2)\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = 0 \quad (2.1.7)$$

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.1.8)$$

(2.1.6)中  $\Phi$  的系数已选得使它满足下述正交归一化条件

$$\langle \Phi_{\mathbf{k}'} | \Phi_{\mathbf{k}} \rangle \equiv \langle \mathbf{k}' | \mathbf{k} \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (2.1.9)$$

和完备性条件

$$\int d\mathbf{k} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | = 1 \quad (2.1.10)$$

形式解(2.1.5)实际上是一个积分方程(因被积函数中包含未知的  $\psi$ ),它等价于原来的微分方程(2.1.3)加上(非齐次的)边界条件,这个积分方程称为 Lippmann-Schwinger(L-S)方程.

### 2.1B Green 函数的选择

Green 函数作为(无界空间的)点源影响函数(基本解),是以  $\delta$  函数为非齐次项的最简单的非齐次方程(2.1.8)之解.将  $\delta$  函数展开:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = (2\pi)^{-3} \int \exp\{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} d\mathbf{k}' \quad (2.1.11)$$

相应地简记  $G_0(\mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$  为  $G_0(\mathbf{r} | \mathbf{r}')$ ,也把它作 Fourier 展开:

$$G_0(\mathbf{r} | \mathbf{r}') = (2\pi)^{-3} \int g_0(\mathbf{k}', \mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{k}' \quad (2.1.12)$$

将(2.1.11)和(2.1.12)代入(2.1.8)可得

$$g_0(\mathbf{k}', \mathbf{r}') = \frac{\exp(-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}')}{k^2 - k'^2} \quad (2.1.13)$$

$$G_0(\mathbf{r} | \mathbf{r}') = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\exp\{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\}}{k'^2 - k^2} d\mathbf{k}' \quad (2.1.14)$$

显然,被积函数在  $k' = \pm k$  有两个极点,必须谨慎地加以处理,这就需要用到出射球面波的边界条件(2.1.4).首先在(2.1.14)中记  $r - r' = R$ ,取  $R$  为对  $k'$  积分的极轴方向,则  $k'$  的球坐标表示为  $(k', \theta', \phi')$ :

$$\begin{aligned} G_0(\mathbf{r} | \mathbf{r}') &\equiv G_0(R) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk' k'^2 \int_0^\pi d\theta' \sin\theta' \frac{\exp\{ik'R \cos\theta'\}}{k'^2 - k^2} \int_0^{2\pi} d\phi' \\ &= \frac{-2}{(2\pi)^2 R} \int_0^\infty dk' \frac{k' \sin k'R}{k'^2 - k^2} \\ &= \frac{-1}{16\pi^2 R i} (I_1 - I_2) \end{aligned} \quad (2.1.15)$$

$$I_1 = \int_{-\infty}^\infty \exp(ik'R) \left( \frac{1}{k' - k} + \frac{1}{k' + k} \right) dk' \quad (2.1.16)$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^\infty \exp(-ik'R) \left( \frac{1}{k' - k} + \frac{1}{k' + k} \right) dk'$$

其中已作变量代换使积分区间从  $(0, \infty)$  扩展到  $(-\infty, \infty)$ ,再作解析延拓转到  $k'$  的复平面.注意到被积函数在  $k' = k$  和  $k' = -k$  有两个极点,故在  $I_1$  的复平面积分

$$I_1 = \oint_C \exp(ik'R) \left( \frac{1}{k' - k} + \frac{1}{k' + k} \right) dk' \quad (2.1.17)$$

中,闭合曲线  $C$  沿实轴的一段必须绕过它们,由于因子  $e^{ik'R}$  的存在,根据 Jordan 引理,  $C$  必须在  $k'$  的上半平面沿大圆弧闭合,使圆弧积分以零为极限,才能使(2.1.17)与(2.1.16)中的  $I_1$  等价.但是绕过极点的不同方式将给出不同的结果,  $C$  的四种选择如图 2.1.1 所示.

当讨论  $I_2$  时,  $C$  应换为  $C'$ ,图上 4 种情形的差别仅在于将上半平面的半圆换为下半平面的半圆.积分的结果如表 2.1.1 所示.

表 2.1.1 围道积分的结果

|       | $C_1(C'_1)$                        | $C_2(C'_2)$                       |
|-------|------------------------------------|-----------------------------------|
| $I_1$ | 0                                  | $2\pi i [\exp(ikR) + \exp(-ikR)]$ |
| $I_2$ | $-2\pi i [\exp(ikR) + \exp(-ikR)]$ | 0                                 |
|       | $C_3(C'_3)$                        | $C_4(C'_4)$                       |
| $I_1$ | $2\pi i \exp(-ikR)$                | $2\pi i \exp(ikR)$                |
| $I_2$ | $-2\pi i \exp(-ikR)$               | $-2\pi i \exp(ikR)$               |

显然这 4 种情况在数学上都是允许的,正确的选择只能由物理的考

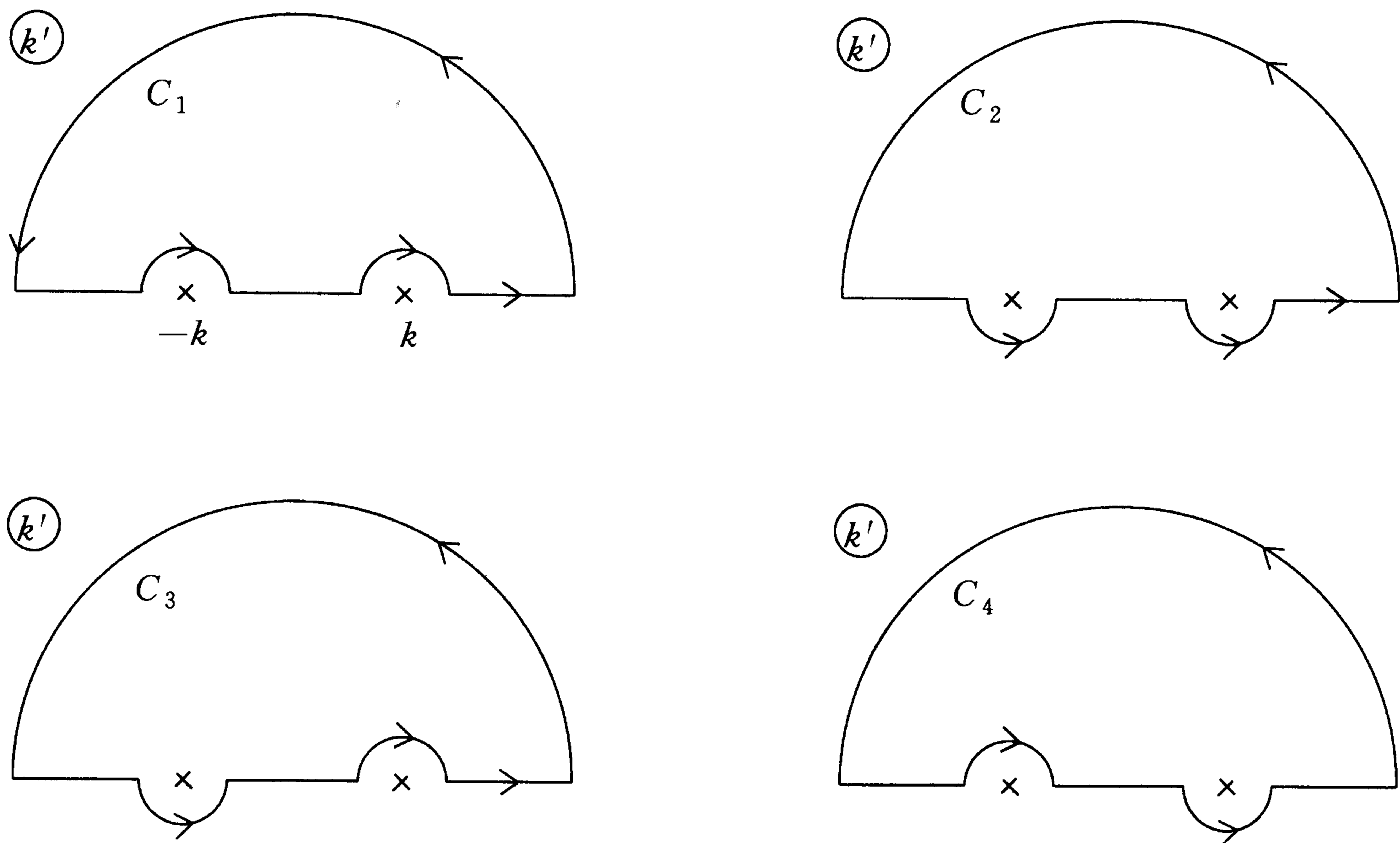


图 2.1.1  $I_1$  中围道  $C$  的 4 种取法  
(对  $I_2$ , 上半平面半圆换为下半平面的半圆)

虑给出. 根据球面出射波的条件 (2.1.4), 我们选择  $C_4$  (或  $C_4'$ ), 这样 (2.1.15) 式给出

$$G_0^{(+)}(R) = -\frac{1}{4\pi^2 R} \oint_{C_4} \frac{k' \sin k' R}{k'^2 - k^2} dk' = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp(ikR)}{R} \quad (2.1.18)$$

或者回到  $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ , 又可记为

$$G_0^{(+)}(\mathbf{r} | \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{\exp\{ik |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|\}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.1.19)$$

现在让我们把两个极点稍许推离实轴, 即使虚部有一微小的位移, 以便积分路线  $C_4$  可以沿实轴无障碍地通过去, 如图 2.1.2 所示.

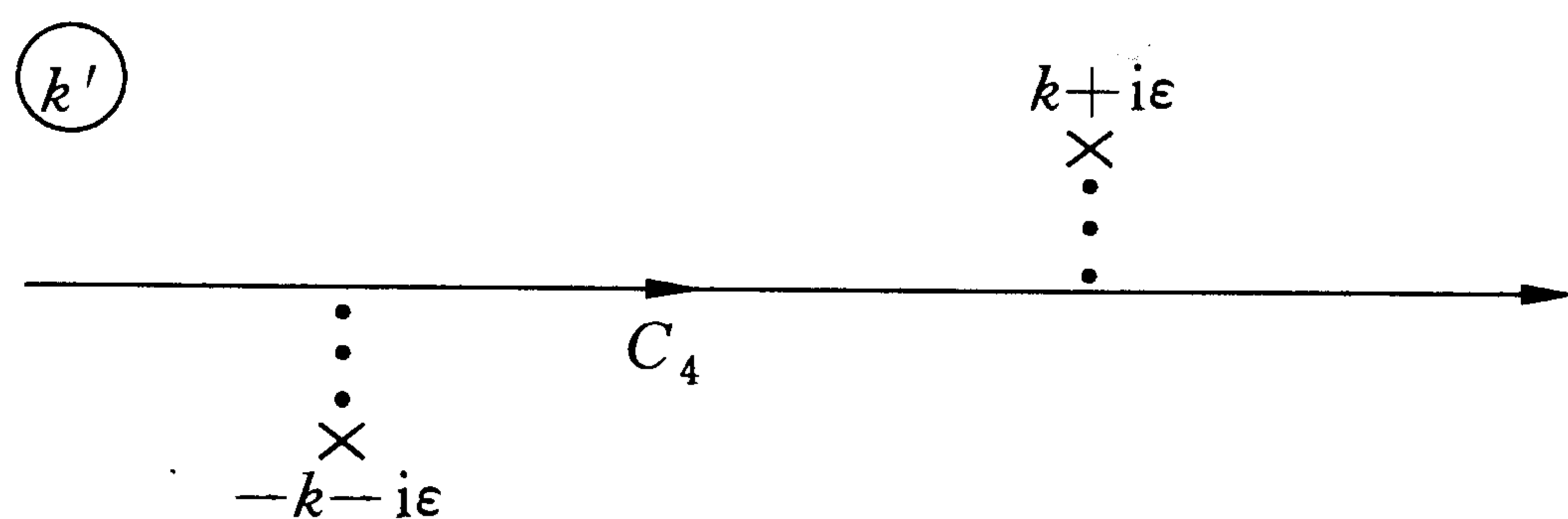


图 2.1.2 动量  $k'$  平面上的极点  
(当  $\epsilon \rightarrow 0$  时, 此图之直线  $C_4$  与图 2.1.1 中的  $C_4$  等价)

$$G_0^{(+)}(\mathbf{r} | \mathbf{r}') = - (2\pi)^{-3} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int \frac{\exp\{ik' \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\}}{k'^2 - k^2 - i\epsilon} dk' \quad (2.1.20)$$

分母  $k'^2 - k^2 - i\epsilon = 0$  给出图 2.1.2 上两个极点的位置. 现在我们写

出“自由”Green 函数的算符表示

$$\hat{G}_0^{(\pm)}(E) = \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) \quad (2.1.21)$$

式中  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ,  $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$  是一个算符. 当取十号时, 易证(2.1.21)与(2.1.20)等价. 事实上,  $\hat{G}_0^{(+)}(E)$  在位形空间的矩阵元就是(2.1.20):

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | G_0^{(+)} | \mathbf{r}' \rangle &\equiv G_0^{(+)}(\mathbf{r} | \mathbf{r}') \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \int d\mathbf{k}' \int d\mathbf{k}'' \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}' \rangle \left\langle \mathbf{k}' \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| \mathbf{k}'' \right\rangle \langle \mathbf{k}'' | \mathbf{r}' \rangle \end{aligned} \quad (2.1.22)$$

其中已插入两个对动量的完备系积分

$$\int d\mathbf{k}' | \mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{k}' | = 1 \quad (2.1.23)$$

及

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \equiv \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.1.24)$$

$$\left\langle \mathbf{k}' \left| \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\epsilon} \right| \mathbf{k}'' \right\rangle = \frac{1}{E - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + i\epsilon} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'') \quad (2.1.25)$$

( $\hat{H}_0$  在动量表象中是对角的, 在位形空间表象中是非对角的). 同理可以讨论  $G_0^{(-)}(\mathbf{r} | \mathbf{r}')$ , 它对应于图 2.1.1 中沿  $C_3$  的积分, 与  $G_0^{(+)}$  不同, 它对应于会聚的(入射)球面波, 乍看起来没有物理意义, 实际上还很有用, 见下面的讨论.

### 2.1C 严格的跃迁矩阵元

由(2.1.5)式已知, 当取正确的出射波边界条件后, Lippmann-Schwinger 方程可写为:

$$\psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) + \int G_0^{(+)}(\mathbf{r} | \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}_i}^{(+)}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.1.26)$$

这个方程的算符记法是

$$\Psi^{(\pm)} = \Phi + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i\epsilon} V \Psi^{(\pm)} \quad (2.1.27)$$

其中  $\Psi^{(-)}$  对应于含会聚球面波的态.

我们来讨论当观察点  $r \rightarrow \infty$  时, L-S 方程的渐近行为:

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = (r^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' + r'^2)^{\frac{1}{2}} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} r - \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}' + \dots$$

其中已记  $\frac{\mathbf{r}}{r} \equiv \hat{\mathbf{r}}$  为  $\mathbf{r}$  方向的单位矢量, 它对应于被散射后粒子的运动方向, 故可记  $k\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{k}_f$  表示末态动量, 以区别于初态动量  $\mathbf{k}_i$ , 当假设  $V(\mathbf{r}')$  是个短程势时, 我们就有

$$\psi_{k_i}^{(+)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[ \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}) + f(\theta, \phi) \frac{\exp(ikr)}{r} \right] \quad (2.1.28)$$

其中

$$f(\theta, \phi) = -\frac{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{4\pi} \int \exp(-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \psi_{k_i}^{(+)}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.1.29)$$

就是(2.1.4)式中定义的散射振幅. 由(2.1.24)式, 可记

$$f(\theta, \phi) = -2\pi^2 \langle \Phi_{k_f} | U | \Psi_{k_i}^{(+)} \rangle \quad (2.1.30)$$

$$= -\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} \langle \Phi_{k_f} | V | \Psi_{k_i}^{(+)} \rangle \quad (2.1.31)$$

定义跃迁矩阵元

$$T_{fi} \equiv \langle \Phi_{k_f} | V | \Psi_{k_i}^{(+)} \rangle = \langle \Phi_{k_f} | T | \Phi_{k_i} \rangle \quad (2.1.32)$$

则

$$f(\theta, \phi) = -\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} T_{fi} \quad (2.1.33)$$

而微分散射截面

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = \frac{(2\pi)^4 m^2}{\hbar^4} |T_{fi}|^2 \quad (2.1.34)$$

由定义式(2.1.32)可以定义一个  $T$  算符(以下略去  $\wedge$  号):

$$V\Psi_{k_i}^{(+)} = T\Phi_{k_i} \quad (2.1.35)$$

$$\Psi_{k_i}^{(+)} = V^{-1} T\Phi_{k_i} \equiv \Omega^{(+)} \Phi_{k_i} \quad (2.1.36)$$

(这里又定义了一个“波算符” $\Omega^{(+)}$ , 也称为 Møller 算符). 以  $V$  左乘方程(2.1.27), 在左端用(2.1.35), 再从右方拿去公共的  $\Phi_{k_i}$ , 我们得到关于算符  $T$  的方程

$$T = V + V \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon} T \quad (2.1.37)$$

反复迭代可得此方程之形式解为无穷级数形式

$$T = V + V\left(\frac{1}{a}\right)V + V\left(\frac{1}{a}\right)V\left(\frac{1}{a}\right)V + \dots \quad (2.1.38)$$

$$\frac{1}{a} = \frac{1}{E - H_0 + i\epsilon}$$

此式在下节将作为 Born 近似的出发点. (2.1.37) 还可以有一个有限的形式解, 把右边第二项移到左端去, 有

$$(E - H + i\epsilon)(E - H_0 + i\epsilon)^{-1}T = V \quad (2.1.39)$$

其中  $H = H_0 + V$  是总哈密顿量. 将上式左乘  $(E - H_0 + i\epsilon)(E - H + i\epsilon)^{-1}$ , 我们得到(右端所含之  $H_0 = H_0 + V - V = H - V$ )

$$T = V + V \frac{1}{E - H + i\epsilon} V \quad (2.1.40)$$

注意分母中包含  $H$  而不是  $H_0$ , 这个算符关系式在实际上只能用来作形式计算.

## 2.1D Dyson 方程

将(2.1.26)式改写成(改记  $\psi^{(+)}(\mathbf{r})$  为  $\Psi^{(+)}(\mathbf{r})$ )

$$\Psi_{k_i}^{(+)}(\mathbf{r}) = \Phi_{k_i}(\mathbf{r}) + \psi_{sc}^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (2.1.41)$$

其中第二项散射球面波满足下列非齐次方程

$$[\nabla^2 + k^2 - U(\mathbf{r})]\psi_{sc}^{(+)}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\Phi_{k_i}(\mathbf{r}) \quad (2.1.42)$$

证明此式时已用了公式(2.1.21), (2.1.35)和(2.1.39)的反演. 现在我们定义势场存在情况下之“完全”Green 函数  $G^{(+)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$  为下列非齐次方程之解

$$[\nabla^2 + k^2 - U(\mathbf{r})]G^{(+)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.1.43)$$

它的算符形式为

$$G^{(\pm)}(E) = \frac{1}{E - H \pm i\epsilon} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right) \quad (2.1.44)$$

于是(2.1.42)之解便可表成

$$\psi_{sc}^{(+)}(\mathbf{r}) = \int G^{(+)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\Phi_{k_i}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \quad (2.1.45)$$

而(2.1.26)的算符形式是

$$\Psi^{(\pm)}(E) = \Phi + G^{(\pm)}(E)U\Phi \quad (2.1.46)$$

这样,原来从 L-S 方程求严格解  $\Psi_k^{(+)}(\mathbf{r})$  的困难便转移到如何求  $G^{(+)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$  的问题上来了. 为此改写(2.1.43),把左边含  $U(\mathbf{r})G^{(+)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}')$  的项移到右边,用自由 Green 函数  $G_0^{(+)}$  求出形式解

$$G^{(+)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = G_0^{(+)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}') + \int G_0^{(+)}(\mathbf{r}|\mathbf{r}'')U(\mathbf{r}'')G^{(+)}(\mathbf{r}''|\mathbf{r}')d\mathbf{r}'' \quad (2.1.47)$$

这把  $G^{(+)}$  用一个积分方程表达出来,叫做 Dyson 方程,其算符形式是

$$G^{(+)} = G_0^{(+)} + G_0^{(+)}UG^{(+)} \quad (2.1.48)$$

反复迭代后,也可得到无穷级数的形式解

$$G^{(+)} = G_0^{(+)} + G_0^{(+)}UG_0^{(+)} + G_0^{(+)}UG_0^{(+)}UG_0^{(+)} + \dots \quad (2.1.49)$$

Dyson 方程比起 L-S 方程来,有一个好处,就是它不依赖于散射时的初始边界条件中入射平面波的方向,因而更具有有一般性,有利于讨论一些严格的理论问题,如本章下面的 Levinson 定理.

### 2.1E 跃迁矩阵元的另一种形式

我们在严格的跃迁矩阵元表式(2.1.32)中可以定义一个函数  $\Psi_f^{(-)}$  (用 Dirac 的 bra 和 ket 记号)

$$\langle \Phi_f | T = \langle \Psi_f^{(-)} | V \quad (2.1.50)$$

为求出  $|\Psi_f^{(-)}\rangle$  所满足的方程,将公式(2.1.50)取厄密共轭,得(假定  $V$  为厄密算符)

$$T^+|\Phi_f\rangle = V|\Psi_f^{(-)}\rangle \quad (2.1.51)$$

由(2.1.40)有

$$T^+ = V + V(E - H - i\epsilon)^{-1}V$$

代入(2.1.51)后,移去左端公共之  $V$ ,即得

$$|\Psi_f^{(-)}\rangle = |\Phi_f\rangle + (E - H - i\epsilon)^{-1}V|\Phi_f\rangle \quad (2.1.52)$$

这就是(2.1.46)(见(2.1.44)),相应之 L-S 方程见(2.1.27).

总起来说,在弹性散射中的跃迁矩阵元有 3 种表达式:

$$T_{fi} = \langle \Phi_f | T | \Phi_i \rangle = \langle \Phi_f | V | \Psi_i^{(+)} \rangle = \langle \Psi_f^{(-)} | V | \Phi_i \rangle \quad (2.1.53)$$

其中  $T$  算子满足(2.1.40)式,势场中的严格解  $\Psi_f^{(-)}$  和  $\Psi_i^{(+)}$  满足积分方

程(2.1.27),其形式解是(2.1.46).注意(2.1.53)中  $\Psi_i^{(+)}$  作为初态时包含有球面出射波,而  $\Psi_f^{(-)}$  作为末态时却包含球面会聚入射波,后一情况可以考虑一下时间反演过程来理解.

## § 2.2 Born 近似

除了个别特殊的势(如方阱势,库仑势等)外,我们无法得到精确的解析形式的解,这时便需要求助于各种近似方法,例如玻恩(Born)近似,分波法,变分法,WKB近似等.这一节和下一节分别讨论 Born 近似和分波法.

### 2.2A Born 近似的级数展开

当我们用逐级迭代法去求解 L-S 方程(2.1.27)时,可得到  $\Psi^{(+)}$  的各级近似解如下(略去脚标  $k$ ):

$$\begin{aligned}
 \Psi^{(0)}(\mathbf{r}) &= \Phi(\mathbf{r}) \\
 \Psi^{(1)}(\mathbf{r}) &= \Phi(\mathbf{r}) + \int G_0^{(+)}(\mathbf{r} | \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\
 \Psi^{(2)}(\mathbf{r}) &= \Phi(\mathbf{r}) + \int G_0^{(+)}(\mathbf{r} | \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \Psi^{(1)}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\
 &\dots\dots\dots \\
 \Psi^{(n)}(\mathbf{r}) &= \Phi(\mathbf{r}) + \int G_0^{(+)}(\mathbf{r} | \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \Psi^{(n-1)}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\
 &\dots\dots\dots
 \end{aligned} \tag{2.2.1}$$

以这个  $\Psi^{(+)}$  的展开式代入(2.1.30)式,即得散射振幅

$$f = \sum_{j=1}^{\infty} f_{Bj} \tag{2.2.2}$$

其中

$$f_{B1} = -2\pi^2 \langle \Phi_f | U | \Phi_i \rangle \tag{2.2.3}$$

$$\begin{aligned}
 f_{B2} &= -2\pi^2 \langle \Phi_f | U G_0^{(+)} U | \Phi_i \rangle \\
 &= -\frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp(-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}) U(\mathbf{r}) G_0^{(+)}(\mathbf{r} | \mathbf{r}') U(\mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}')
 \end{aligned} \tag{2.2.4}$$

如果记



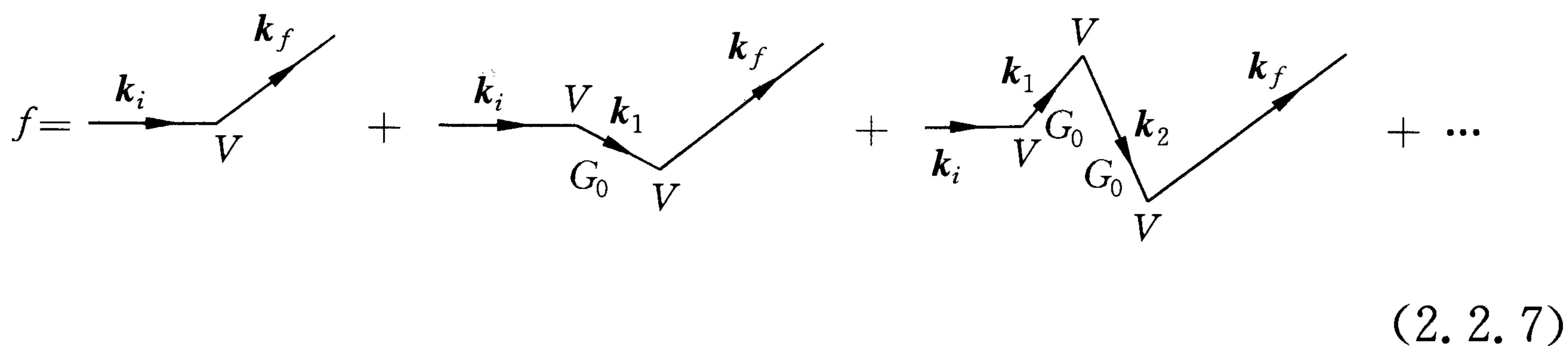
$$\langle \mathbf{q} | U | \mathbf{q}' \rangle = (2\pi)^{-3} \int d\mathbf{r} \exp\{i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}\} U(\mathbf{r}) \quad (2.2.5)$$

则对  $G_0^{(+)}$  用(2.1.20)式的积分表示后,我们有一般式

$$\begin{aligned} f_{B_j} = & -2\pi^2 \int d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 \cdots d\mathbf{k}_{j-1} \langle \mathbf{k}_f | U | \mathbf{k}_{j-1} \rangle \\ & \times \frac{1}{k^2 - k_{j-1}^2 + i\epsilon} \langle \mathbf{k}_{j-1} | U | \mathbf{k}_{j-2} \rangle \\ & \cdots \times \langle \mathbf{k}_2 | U | \mathbf{k}_1 \rangle \frac{1}{k^2 - k_1^2 + i\epsilon} \langle \mathbf{k}_1 | U | \mathbf{k}_i \rangle \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

如果只算到  $f_{B_1}$ ,就称为一级 Born 近似,而若算到  $j = n$  项为止,就称为  $n$  级 Born 近似.

(2.2.2)和(2.2.6)式的 Born 近似展开,可以用如下的费曼图来理解(图 2.2.1).



$$f = \text{[diagram 1]} + \text{[diagram 2]} + \text{[diagram 3]} + \dots \quad (2.2.7)$$

图 2.2.1 弹性散射的 Born 各级近似展开的示意图

关于图 2.2.1 的含义可以说明几点

(1) 外势场  $V$  位于图形的每一个内部顶点上,表示粒子每被势场  $V$  作用一次,它的动量就改变一次. Born 近似算到  $n$  级, $V$  的作用就有  $n$  次.

(2) 在被势场  $V$  相继散射两次的中间,粒子处于自由运动状态,此时出现的自由 Green 函数  $G_0 = (k^2 - k_{j-1}^2 + i\epsilon)^{-1}$  是一个简单的数,常称为传播子.

(3) 在振幅  $f_{B_j}$  一项中,共包含  $\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_0, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_{j-1}$  和  $\mathbf{k}_j = \mathbf{k}_f$  这  $(j+1)$  个动量,除始末两个动量  $\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_f$  之外,其余  $(j-1)$  个内动量  $\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{j-1}$  都要积分.由此可见,介于两次散射之间的中间态是“虚态”,虚态粒子运动的能量与原始能量相差  $(\Delta E)$  可以很大,相应地存在时间  $\Delta t$  极短,符合测不准关系  $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$ . 最后末态能量保持与初态的相等,这是我们在质心系讨论弹性散射时应该有的结果.

## 2.2B 汤川势中弹性散射的一级 Born 近似

作为例子,考虑粒子被汤川势

$$U(r) = -U_0 a \frac{\exp\left(-\frac{r}{a}\right)}{r} \quad (2.2.8)$$

的散射. 其中  $U_0$  是势的强度 (注意  $U = \frac{2m}{\hbar^2}V$ ),  $a$  是表征势场的力程长短的一个参量. 因为这个势是一个中心势,  $U$  只与  $r$  有关而与方向无关, 则由(2.2.3)式的一级 Born 近似为

$$\begin{aligned} f_{B1} &= -2\pi^2 \langle \mathbf{k}_f | U | \mathbf{k}_i \rangle = \frac{2\pi^2 U_0 a}{(2\pi)^3} \int \exp[i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f) \cdot \mathbf{r}] \frac{\exp\left(-\frac{r}{a}\right)}{r} d\mathbf{r} \\ &= \frac{U_0 a}{4\pi} \int \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \frac{\exp\left(-\frac{r}{a}\right)}{r} d\mathbf{r} \end{aligned}$$

令  $\mathbf{q} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f$  表示(质心系中的)入射粒子的动量改变值(弹性散射中的动量转移), 在对  $\mathbf{r}$  积分时取  $\mathbf{q}$  为极轴方向用球坐标  $(r, \theta', \phi')$ , 则  $q$  的大小等于( $\theta$  是  $\mathbf{k}_f$  与  $\mathbf{k}_i$  的夹角, 不可与  $\theta'$  混淆)

$$q = 2k \sin \frac{\theta}{2} \quad (2.2.9)$$

( $k = |\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f|$ ), 一级 Born 近似下的微分散射截面为

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{B1} = |f_{B1}|^2 = \frac{U_0^2 a^2}{\left(\frac{1}{a^2} + q^2\right)^2} \quad (2.2.10)$$

而总截面等于

$$\begin{aligned} \sigma_t^{(B1)} &= \int_0^\pi \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{B1} 2\pi \sin\theta d\theta = \frac{2\pi}{k^2} \int_0^{2k} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{B1} q dq \\ &= \frac{4\pi U_0^2 a^4}{\left(\frac{1}{a^2} + 4k^2\right)}. \end{aligned} \quad (2.2.11)$$

当入射粒子能量  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \gg \frac{\hbar^2}{8ma^2}$  时, 有高能极限

$$\sigma_t^{(B1)} \xrightarrow{E \rightarrow \infty} \frac{A}{E} \quad (2.2.12)$$

其中  $A = \frac{\pi \hbar^2 U_0^2 a^4}{2m}$ .

考虑高能电子与一中性原子的碰撞时,常可以用一个屏蔽库仑势,也就是汤川势(2.2.8)的形式,此时  $U_0 = \frac{2mZe^2}{a\hbar^2}$ ,  $Z$  是原子序数,  $a$  可以看成是一个由于核外电子的存在而产生的屏蔽半径,它与  $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$  (玻尔半径)有同一数量级. 于是

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{B1} = \frac{4Z^2}{a_0^2 \left[ a^{-2} + 4k^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \right]^2} \quad (2.2.13)$$

当  $a \rightarrow \infty$ , 即无屏蔽存在, 电子只与原子核直接碰撞, 此时

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{B1} = \frac{Z^2 e^4}{16E^2 \sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (2.2.14)$$

这就是有名的 Rutherford 公式. 有趣的是: 对于无屏蔽的库仑势, 在非相对论性量子力学中, 由一级 Born 近似得到的(2.2.14)式与由精确解得到的结果完全一致, 也与用经典力学导得的一致. 还要注意, 对库仑势这种长程势( $U \sim r^{-1}$ ), 微分截面在小角度( $\theta \rightarrow 0$ )发散, 我们不能谈论总截面.

一级 Born 近似就是散射中的一级微扰论, 它的正确性一般要求势场较弱, 而入射能量较高. 但这只是一个充分条件而非必要条件. 像上述库仑散射就是一个特例, 一级 Born 近似居然对任何能量都正确. 进一步的问题是: 在级数(2.2.2)中, 振幅的每一项是否随着  $j$  的增大而递减? 整个无穷级数加起来是否收敛? 更需要专门的讨论, 在本书中都从略了.

## §2.3 分波法

在本节以下, 我们着重讨论中心势的情形:  $V(\mathbf{r}) = V(r)$ . 此时方程可以在球坐标下分离变量, 问题完全归结到讨论径向方程的解, 它比较容易解析地或数值地求解, 而同实验联系的弹性散射截面完全只由径向解的渐近行为所得出的相移数值来决定.

### 2.3A 分波展开和相移

在球坐标下, 中心势场  $V(r)$  中的精确解可写为

$$\Psi^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{lm}(k) R_l(kr) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2.3.1)$$

$Y_{lm}(\theta, \phi)$  是球谐函数, 而波函数的径向部分  $R_l(kr)$  则满足方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_l(kr) + V(r)R_l(kr) = ER_l(kr) \quad (2.3.2)$$

引进径向波函数

$$u_l(kr) = rR_l(kr) \quad (2.3.3)$$

它满足方程

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) \right] u_l(kr) = 0 \quad (2.3.4)$$

其中  $U = \frac{2mV}{\hbar^2}$ . 引进无量纲变量  $\rho = kr$ , 先考虑  $V = 0$  的情形, (2.3.2)

变为

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left( 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] R_l(\rho) = 0 \quad (2.3.5)$$

这个方程叫做球 Bessel 方程, 它有两个线性独立解, 一个是球 Bessel 函数  $j_l(\rho) = \left( \frac{\pi}{2\rho} \right)^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(\rho)$  ( $J_\nu(\rho)$  是  $\nu$  阶的 Bessel 函数), 另一个是球 Neumann 函数  $n_l(\rho) = (-1)^{l+1} \left( \frac{\pi}{2\rho} \right)^{\frac{1}{2}} J_{-l-\frac{1}{2}}(\rho)$ , 当  $\rho$  为实数时它们都是实函数, 但前者在原点  $\rho = 0$  解析, 后者在  $\rho = 0$  有奇性, 它们的前几个表示式 ( $l=0, 1, 2$ ) 和渐近行为如表 2.3.1 所示.

有时又引进两个互为复共轭的球 Hankel 函数:

$$h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho) + in_l(\rho) \quad (2.3.6)$$

$$h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho) - in_l(\rho) \quad (2.3.7)$$

它们与因子  $\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$  乘在一起后分别描写  $V = 0$  情况下的球面出射波和(会聚)入射波. 然而  $r = 0$  的无奇性要求限定它们只能以确定的线性组合形式出现, 就是叠加起来得到  $j_l(\rho)$ . 事实上我们有平面波展开式

$$\exp(ikz) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \quad (2.3.8)$$

其中  $P_l(\cos\theta)$  是  $l$  阶的 Legendre 多项式. 上式已假定动量  $\mathbf{k}$  沿  $z$  轴方向, 如果  $\mathbf{k}$  沿单位矢量  $\hat{\mathbf{k}} = (\Theta, \Phi)$  方向, 则平面波展开式应由(记  $\hat{\mathbf{r}} = (\theta, \phi)$ ) Rayleigh 展开式表示

$$\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.3.9)$$

 表 2.3.1  $j_l(\rho)$  和  $n_l(\rho)$  的函数形式

|              | $j_l(\rho)$   | $n_l(\rho)$  |
|--------------|---|--|
| $l=0$        | $\frac{\sin\rho}{\rho}$   | $-\frac{\cos\rho}{\rho}$   |
| $l=1$        | $\frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho}$                                   | $-\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\sin\rho}{\rho}$                                   |
| $l=2$        | $\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\sin\rho - \frac{3}{\rho^2}\cos\rho$ | $-\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\cos\rho - \frac{3}{\rho^2}\sin\rho$ |
| $\rho \ll l$ | $\frac{\rho^l}{(2l+1)!!} = \frac{2^l l!}{(2l+1)!} \rho^l$                           | $-\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}$   |
| $\rho \gg l$ | $\frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{1}{2}l\pi\right)$                            | $-\frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{1}{2}l\pi\right)$                            |

现在讨论势场  $V(r) \neq 0$  的情形, 假定  $V(r)$  有如下性质:

$$(1) \quad V(r) = O(r^{-3-\epsilon}), \quad r \rightarrow \infty \quad (2.3.10)$$

$$(2) \quad V(r) = O(r^{-2+\epsilon}), \quad r \rightarrow 0 \quad (2.3.11)$$

(3)  $V(r)$  在  $0 < r < \infty$  区间上除有限个间断点外均连续。

(2.3.10)式表示在远处  $V(r)$  趋零比  $\frac{1}{r^3}$  还要快, 即是一个短程势,

(2.3.11)式表示  $V(r)$  在原点的奇性比  $\frac{1}{r^2}$  还要弱, 我们说它是一个“非奇性势”。在上述条件下, 方程(2.3.4)的解虽然在近距离处可能很复杂, 但在原点必定满足边界条件

$$u_l(0) = 0 \quad (2.3.12)$$

这是因为  $R_l(0)$  必定有界(见(2.3.2)、(2.3.3)式)的缘故。同时在无限远 ( $r \gg a, \rho \gg l$ ) 处,  $u_l$  有如下的渐近行为:

$$u_l(\rho) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A_l(k) \sin\left(\rho - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l(k)\right) \quad (2.3.13)$$

这句话的证明如下: 在势场范围( $\sim a$ )之外, (2.3.2)式的解必可写成

$$R_l(\rho) = C_l^{(1)}(k) j_l(\rho) + C_l^{(2)}(k) n_l(\rho), \quad (r \gg a)$$

$$= C_l^{(1)}(k) [j_l(\rho) - \tan\delta_l(k) n_l(\rho)] \quad (2.3.14)$$

其中

$$\tan\delta_l(k) = -\frac{C_l^{(2)}(k)}{C_l^{(1)}(k)} \quad (2.3.15)$$

再用表 2.3.1 中最后一行的渐近表达式, 并记

$$A_l(k) = \frac{C_l^{(1)}(k)}{\cos\delta_l(k)} \quad (2.3.16)$$

即得(2.3.13)式. 将此式代回(2.3.1), 有

$$\begin{aligned} \Psi^{(+)}(\mathbf{k}, r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l C_{lm}(k) A_l(k) Y_{lm}(\theta, \phi) \\ &\times \frac{1}{2ikr} \left\{ \exp\left[i\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right)\right] - \exp\left[-i\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right)\right] \right\} \end{aligned} \quad (2.3.17)$$

另一方面, 我们在(2.1.28)中已有

$$\begin{aligned} &\Psi^{(+)}(\mathbf{k}, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \\ &\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l \frac{\sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right)}{kr} P_l(\cos\theta) + f(\theta, \phi) \frac{\exp(ikr)}{r} \right\} \end{aligned} \quad (2.3.18)$$

因为

$$P_l(\cos\theta) = \left(\frac{4\pi}{2l+1}\right)^{\frac{1}{2}} Y_{l0}(\theta, \phi) \quad (2.3.19)$$

所以只要选

$$C_{lm}(k) A_l(k) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} [4\pi(2l+1)]^{\frac{1}{2}} i^l \exp(i\delta_l) \delta_{m0} \quad (2.3.20)$$

就能使(2.3.17)与(2.3.18)一致, 并且定出散射振幅

$$\begin{aligned} f(\theta, \phi) = f(\theta) &= \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \{ \exp[2i\delta_l(k)] - 1 \} P_l(\cos\theta) \\ &= \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp[i\delta_l(k)] \sin\delta_l(k) P_l(\cos\theta) \end{aligned} \quad (2.3.21)$$

### 2.3B 截面和光学定理

由(2.3.21)式可见, 粒子在中心势场  $V(r)$  中的弹性散射截面, 完全

由各分波( $l=0, 1, 2, \dots$ )的相移  $\delta_l(k)$  决定. 在微分截面表达式

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_x}{d\Omega} &= \sigma_x(\theta) = |f(\theta)|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp[i\delta_l(k)] \sin\delta_l(k) P_l(\cos\theta) \right|^2 \end{aligned} \quad (2.3.22)$$

中, 各分波相干地作出贡献, 而在弹性散射总截面中, 它们便不相干地叠加起来了:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \int \sigma_x(\theta) d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_x^{(l)}(k) \end{aligned} \quad (2.3.23)$$

证明时用到了 Legendre 多项式的正交关系

$$\int_{-1}^1 P_l(x) P_{l'}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (2.3.24)$$

显然每一个分波对散射截面的贡献有一个上限

$$\sigma_x^{(l)}(k) \leq \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \quad (2.3.25)$$

近似地说, 如果势场的力程为  $a$ , 则只有  $l \leq ka$  的分波才能对散射有贡献. 特别地说来, 如果粒子能量很低,  $ka \ll 1$ , 则只有  $l=0$  的 S 波受到势场散射, 此时总截面

$$\sigma_x = \sigma_x^{(0)}(k) = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0(k) \quad (2.3.26)$$

在(2.3.21)式中令  $\theta = 0$ , 我们便得到

$$f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp(i\delta_l) \sin\delta_l$$

取此式的虚部

$$\text{Im}f(0) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

再与(2.3.23)式比较, 即得光学定理

$$\sigma_x = \frac{4\pi}{k} \text{Im}f(0) \quad (2.3.27)$$

这个公式把弹性散射的前向( $\theta = 0$ )散射振幅的虚部与散射总截面联系起来,一个方向的散射幅竟包含了向一切方向散射总几率的信息,这是量子力学中粒子波性和散射中几率守恒(么正性)的一种表现.还要指出:现在势场  $V(r)$  假定为实的,相应地相移  $\delta_l$  也是实数,总截面  $\sigma_t$  就是散射总截面  $\sigma_x$ ,但如果势场对粒子有吸收(从入射道移去),有很多反应道开放的话, $V(r)$  和  $\delta_l$  便一般地是复数,于是  $\sigma_x$  只是  $\sigma_t$  的一部分,那时的光学定理将取另外的一般形式,见(2.7.24)式.

### 2.3C 相移的计算及其变化趋势

注意(2.3.14)中归一化系数  $C_l^{(1)}(k)$  的选取有一定的任意性,今选它为 1,则

$$rR_l(kr) = u_l(kr) \longrightarrow r[j_l(kr) - \tan\delta_l n_l(kr)]$$

$$\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{k} \left[ \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) + \tan\delta_l \cos\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) \right] \quad (2.3.28)$$

由(2.3.4)及为  $U(r) \longrightarrow \tilde{U}(r)$  写出之方程

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \tilde{U}(r) \right] \tilde{u}_l(r) = 0 \quad (2.3.29)$$

不难推出

$$\tilde{u}_l u_l'' - u_l \tilde{u}_l'' - (U - \tilde{U}) u_l \tilde{u}_l = 0 \quad (2.3.30)$$

其中记  $u_l'' = \frac{d^2 u_l}{dr^2}$ ,  $\tilde{u}_l(r)$  在  $r \rightarrow \infty$  处的渐近行为也如(2.3.28)式所示,不过  $\delta_l \longrightarrow \tilde{\delta}_l$ ,于是我们定义一个 Wronskian 行列式

$$W(u_l, \tilde{u}_l) = \begin{vmatrix} u_l & u_l' \\ \tilde{u}_l & \tilde{u}_l' \end{vmatrix} = u_l \tilde{u}_l' - \tilde{u}_l u_l' \quad (2.3.31)$$

则(2.3.30)可写成

$$\frac{d}{dr} [W(u_l, \tilde{u}_l)] = -[U - \tilde{U}] u_l \tilde{u}_l$$

对  $r$  从  $0 \rightarrow \infty$  积分,利用  $u_l(0) = \tilde{u}_l(0) = 0$  及(2.3.28),我们有

$$\tan\delta_l - \tan\tilde{\delta}_l = -k \int_0^\infty \tilde{u}_l(r) [U(r) - \tilde{U}(r)] u_l(r) dr \quad (2.3.32)$$

现在取  $\tilde{U} = 0$ ,则  $\tilde{u}_l(r) = r j_l(kr)$ , 所以

$$\tan\delta_l = -k \int_0^\infty j_l(kr) U(r) R_l(r) r^2 dr \quad (2.3.33)$$



其中

$$R_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} j_l(kr) - \tan \delta_l n_l(kr) \quad (2.3.34)$$

是实函数.

(2.3.33)式乍看起来是一个关于相移的严格表达式,实际上积分号下还隐含着相移,如(2.3.34)所示.因此我们只能用它作近似的计算,例如在(2.3.34)中完全略去后项,就得到相移的一级 Born 近似值

$$\tan \delta_l^{(B1)} = -k \int_0^\infty [j_l(kr)]^2 U(r) r^2 dr \quad (2.3.35)$$

再取近似  $\tan \delta_l^{(B1)} \approx \delta_l^{(B1)}$ ,  $\exp[2i\delta_l^{(B1)}] \approx 1 + 2i\delta_l^{(B1)}$ , 则(2.3.21)式给出

$$\begin{aligned} f(\theta) &\longrightarrow f^{(B1)}(\theta) \\ &= -\frac{\pi}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \left\{ \int_0^\infty dr r [J_{l+\frac{1}{2}}(kr)]^2 U(r) \right\} P_l(\cos\theta) \end{aligned}$$

利用公式

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos\theta) [J_{l+\frac{1}{2}}(kr)]^2 = \frac{\sin\left(2kr \sin \frac{\theta}{2}\right)}{\pi \sin \frac{\theta}{2}} \quad (2.3.36)$$

我们得到

$$f^{(B1)}(\theta) = - \int_0^\infty dr r^2 \frac{\sin qr}{qr} U(r) \quad (2.3.37)$$

其中  $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$ .

这正与(2.2.3)式的中心势场中的一级 Born 近似符合.由此可见,球面分波相移的一级 Born 近似与平面波一级 Born 近似在精度上是相当的,但是在计算中用了相移  $\delta_l^{(B1)}$  对一切分波都是小的这一近似,可见这也就是平面波 Born 近似成立的条件.于是我们可以建立如下的改进近似方案:即对于短程势,对若干低分波  $l = 0, 1, \dots, l_m$ , 精确地或较精确地计算它们的相移  $\delta_l$ , 然后写出散射振幅为

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{l_m} (2l+1) [\exp(2i\delta_l) - 1 - 2i\delta_l^{(B1)}] P_l(\cos\theta) + f^{(B1)}(\theta) \quad (2.3.38)$$

式中  $\delta_l^{(B1)}$  和  $f^{(B1)}(\theta)$  分别由(2.3.35)和(2.3.37)计算.

我们很容易从(2.3.35)得到高能极限下的相移趋势

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \tan \delta_l^{(B1)} = -\frac{1}{k} \int_0^\infty \sin^2 \left( kr - \frac{l}{2} \pi \right) \frac{2m}{\hbar^2} V(r) dr \longrightarrow 0 \quad (2.3.39)$$

另一方面,在低能极限,  $ka \ll 1$  ( $a$  为力程), 当  $l > ka$ , 仍可用近似式  $j_l(kr) \sim (kr)^l$  而得到估计式:

$$\tan \delta_l \sim k^{2l+1} \quad (ka \ll 1, l > ka \sim 0) \quad (2.3.40)$$

由此可见,对性质良好的势场  $V(r)$ , Born 近似相当肯定地预告了表 2.3.2 所示的相移极限值.

表 2.3.2 相移极限值

| $\lim_{k \rightarrow 0} \delta_l(k)$ | $\lim_{k \rightarrow \infty} \delta_l(k)$ |
|--------------------------------------|---|
| $l = 0$ ?                            | 0   |
| $l \geq 1$ $n\pi(?)$                 | 0   |

(2.3.41)

我们对表 2.3.2 中 S 波相移的零动量极限特别有兴趣,此外  $l \geq 1$  情况下的正整数  $n$  有什么意义? 这将是下节讨论的问题.

现在我们讨论入射粒子能量固定而势场强度变化时的相移变化趋势. 先设势场  $V(r)$  连续依赖于一个参量  $\lambda$ , 改记为  $\lambda V(r)$  ( $\lambda > 0$ ), 同理取 (2.3.33) 中的  $U(r) \longrightarrow \lambda U(r)$ ,  $\tilde{U}(r) \longrightarrow (\lambda + \Delta\lambda)U(r)$ , 故  $\tilde{U} - U = \Delta\lambda U(r)$ , 因

$$\tan \tilde{\delta}_l(\lambda + \Delta\lambda) - \tan \delta_l(\lambda) = \sec^2 \delta_l \frac{d\delta_l}{d\lambda} \Delta\lambda$$

便有

$$\frac{d\delta_l}{d\lambda} = -k \cos^2 \delta_l \int_0^\infty [u_l(r)]^2 U(r) dr \quad (2.3.42)$$

现在我们改变归一化系数, 代替(2.3.28)而使

$$u_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin \left( kr - \frac{1}{2} l \pi + \delta_l \right)$$

则代替(2.3.42), 我们得到

$$\begin{cases} \frac{d\delta_l}{d\lambda} = -\frac{1}{k} \int_0^\infty [u_l(r)]^2 U(r) dr \\ u_l(r) \longrightarrow \sin \left( kr - \frac{1}{2} l \pi + \delta_l \right) \end{cases} \quad (2.3.43)$$

如果势场更复杂地依赖于参数  $\lambda$ :  $U(r, \lambda) = \frac{2m}{\hbar^2}V(r, \lambda)$ , 则

$$\frac{d\delta_l}{d\lambda} = -\frac{1}{k} \int_0^\infty [u_l(r)]^2 \frac{\partial U(r, \lambda)}{\partial \lambda} dr \quad (2.3.44)$$

由此可见, 当一个吸力势由零开始不断增强(加深)时,  $U < 0$ ,  $\frac{\partial U}{\partial \lambda} < 0$ , 便有  $\frac{d\delta_l}{d\lambda} > 0$ , 相移随之从零开始不断地增大,  $\delta_l > 0$ , 表示径向波函数被拉向势场中心; 斥力势场的情形恰好相反,  $U > 0$ ,  $\frac{\partial U}{\partial \lambda} > 0$ ,  $\frac{d\delta_l}{d\lambda} < 0$ , 相移从零开始不断地变得更负,  $\delta_l < 0$ , 表示波函数被推离中心. 在吸(斥)力场中径向波函数(除原点外)的第一个节点与  $V = 0$  时比较, 其位置向内(或外)移动了  $\frac{\delta_l}{k}$  (或  $-\frac{\delta_l}{k}$ ). 还要注意, 在  $k \rightarrow 0$  时, 相移可能在  $\lambda$  增大的过程中有一突变.

## § 2.4 Levinson 定理

### 2.4A 引言和数学准备

我们在上节中已经看到, 被一个吸力势 ( $V < 0$ ) 散射的粒子分波有正的相移  $\delta_l(k)$ , 它随势场的加深而增大; 另一方面, 一个吸力势场可能容纳若干束缚态, 如记角动量为  $l$  的束缚态数目为  $n_l$  (不计磁量子数  $m$  的简并), 可以想见  $V(r)$  越深,  $n_l$  也越大. 现在问题是:  $n_l$  与相移  $\delta_l$  有什么关系? 1949 年 Levinson 解决了这个问题. 在本节中我们结合自己的工作来介绍这个定理(参见文献[3]~[7]).

首先限制一下短程势性质如式(2.3.10、11)所示, 这时对  $l = 0$  的情形, 代替(2.3.43)中的  $u_0(r)$ , 总可找到一个径向波函数  $\phi(k, r)$ , 满足如下的边界条件:

$$\begin{cases} \phi(k, 0) = 0 \\ \phi'(k, 0) = 1 \end{cases} \quad (2.4.1)$$

( $\phi' = \frac{d\phi}{dr}$ ), 从径向波方程易见  $\phi(k, r)$  是  $k$  的偶函数:

$$\phi(-k, r) = \phi(k, r) \quad (2.4.2)$$

现在如对  $k$  作解析延拓, 使  $\phi(k, r)$  成为  $k$  的开复平面上的解析函数, 则

由复变函数论中的 Schwarz 反射定理可以推出

$$\phi^*(k^*, r) = \phi(k, r) \quad (2.4.3)$$

我们略去对  $\phi(k, r)$  解析性的详细讨论, 而直接指出它在无限远的行为:

$$\phi(k, r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} B(k) [S(k) \exp(ikr) - \exp(-ikr)] \quad (2.4.4)$$

下面我们对  $B(k)$  不感兴趣, 但注意  $S(k)$  这个  $S$  矩阵元, 因为它同相移有直接联系, 对一般的  $l$  有

$$S_l(k) = \exp\{2i\delta_l(k)\} \quad (2.4.5)$$

当限于  $l = 0$  时, 可以证明  $S_0(k)$  能写成如下形式:

$$S_0(k) = \frac{f_0(k)}{f_0(-k)} \quad (2.4.6)$$

$f_0(k)$  称为 Jost 函数, 它也是开复平面上的解析函数, 有如下的解析性质:

$$\begin{cases} f_0^*(k) = f_0(-k) \\ f_0(\pm k) = |f_0(\pm k)| \exp\{i\delta_0(\pm k)\} \\ \delta_0(k) = -\delta_0(-k) \end{cases} \quad (2.4.7)$$

经过仔细讨论, Levinson 证明了如下的定理:

$$\begin{cases} \delta_l(0) = \pi \left( n_l + \frac{1}{2} \right), & l = 0 \text{ 且 } f_0(0) = 0 \\ \delta_l(0) = \pi n_l, & \text{其他情形} \end{cases} \quad (2.4.8)$$

Levinson 的证明是严格的, 但有一些遗憾, 就是  $l = 0$  与  $l > 0$  的情形要分开写, 而且物理上的直观性似乎还不够, 因此也难以推广到相对论性量子力学中的情形. 鉴于 Levinson 定理的重要性和各方面的应用, 近年来研究工作很多, 下面介绍的证明方法基于量子力学中状态的完备性公式(见 (1.2.33))

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1 \quad (2.4.9)$$

这里采用离散指标  $n$  来标记状态, 不论有无吸引性的外势场  $\lambda V(r)$ , 上式总是成立. 当  $\lambda = 0$  时, 它们是无限多个散射态, 当  $\lambda > 0$  时, 有一部分散射态转变为束缚态. 而不论  $\lambda$  如何, 态的总数仍保持守恒, 即  $\infty = \infty$ . 乍看起来, 这在数学上似乎很不明确, 但下面将看到, 经过适当的处理后, 能够得出一个明确的等式

$$n_l = \frac{1}{\pi} [\delta_l(0) - \delta_l(\infty)] - \frac{1}{2} (-1)^l \sin^2 \delta_l(0) \quad (2.4.10)$$

这就是代替(2.4.8)式的 Levinson 定理的新的表示式, 它把同一势场中的束缚态数  $n_l$  和零动量相移  $\delta_l(0)$  联系起来.

作为数学准备, 记自由粒子的定态薛定谔方程之解为  $\psi_\nu^{(0)}(\mathbf{r})$ ,  $\nu$  表示量子数( $k$  或  $k, l, m$ ),

$$H_0 \psi_\nu^{(0)}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_\nu^{(0)}(\mathbf{r}) = E_\nu \psi_\nu^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (2.4.11)$$

此方程的推迟 Green 函数由下式定义(见(1.7.28)):

$$(E - H_0 + i\eta)G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.4.12)$$

$G_0$  可以用(2.4.11)的本征函数展开:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_\nu \frac{\psi_\nu^{(0)}(\mathbf{r}) \psi_\nu^{(0)*}(\mathbf{r}')}{E - E_\nu + i\eta} \quad (2.4.13)$$

其中  $\nu$  是分立的,  $\psi_\nu^{(0)}(\mathbf{r})$  已归一化为 1.

当势场  $V(\mathbf{r})$  存在时, 相应地有

$$H\psi_\nu(\mathbf{r}) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi_\nu(\mathbf{r}) = E_\nu \psi_\nu(\mathbf{r}) \quad (2.4.14)$$

$$(E - H + i\eta)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.4.15)$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_{\nu'} \frac{\psi_{\nu'}(\mathbf{r}) \psi_{\nu'}^*(\mathbf{r}')}{E - E_{\nu'} + i\eta} \quad (2.4.16)$$

这里用  $\nu'$  表示其集合不同于  $\nu$  的集合,  $\psi_{\nu'}(\mathbf{r})$  亦已归一化为 1.  $G$  和  $G_0$  的关系由 Dyson 方程给出(见(2.1.47)式):

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; E) V(\mathbf{r}'') G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; E) d\mathbf{r}'' \quad (2.4.17)$$

我们限于中心势  $V(\mathbf{r}) = V(r)$ , 作球坐标展开:

$$\psi_{\nu'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} u_{l'm'}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2.4.18)$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \sum_{l, m} Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta', \phi') G^l(r, r'; E) \quad (2.4.19)$$

$$G^l(r, r'; E) = \sum_{E_{\nu'}} \frac{u_{l'm'}(r) u_{l'm'}^*(r')}{rr' (E - E_{\nu'} + i\eta)} \quad (2.4.20)$$

其中角动量量子数( $l, m$ )已从 $\nu$ 或 $\nu'$ 分出,而径向波函数 $u_{l\nu}(r)$ 满足方程

$$\frac{d^2}{dr^2}u_{l\nu}(r) + \left[ \frac{2m}{\hbar^2}(E_{\nu'} - V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_{l\nu}(r) = 0 \quad (2.4.21)$$

其边界条件是 $u_{l\nu}(0) = 0$ ,且归一化为1,即:

$$\langle u_{l\nu'} | u_{l\nu''} \rangle \equiv \int_0^\infty dr u_{l\nu'}^*(r) u_{l\nu''}(r) = \delta_{\nu'\nu''} \quad (2.4.22)$$

将(2.4.19)及对应之 $G_0$ 代入(2.4.17)式,我们得到径向 Green 函数满足的 Dyson 方程

$$G^l(r, r'; E) = G_0^l(r, r'; E) + \int_0^\infty G_0^l(r, r''; E) V(r'') G^l(r'', r'; E) r''^2 dr'' \quad (2.4.23)$$

### 2.4B 渐近完备性定理

为建立状态数与 Green 函数虚部之间的联系,我们在(2.4.20)式中用公式<sup>[8]</sup>

$$\frac{1}{E - E_\nu \pm i\eta} = P \frac{1}{E - E_\nu} \mp i\pi\delta(E - E_\nu) \quad (2.4.24)$$

( $P$ 表示主值积分),令 $r = r'$ ,再乘以 $r^2 dr$ 后对 $r$ 积分,得到

$$\text{Im} \int_0^\infty G^l(r, r; E) r^2 dr = -\pi \sum_{E_\nu} \delta(E - E_\nu) \quad (2.4.25)$$

$$\text{Im} \int_0^\infty G_0^l(r, r; E) r^2 dr = -\pi \sum_{E_\nu} \delta(E - E_\nu) \quad (2.4.26)$$

注意(2.4.26)中 $E_\nu > 0$ 而(2.4.25)中除 $E_\nu > 0$ 外尚有 $E_\nu < 0$ ,因此在势场 $V(r)$ 内的束缚态数目可以表示为

$$n_l = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^0 \left\{ \int [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \right\} dE$$

显然,上式中的 $G_0^l$ 一项本来可以不写,它对积分没有贡献,保留它是为了使下面的定理在形式上更整齐些:

#### 定理 I

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^0 dE \left\{ \int [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \right\} = n_l \quad (2.4.27)$$

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_0^{\infty} dE \left\{ \int [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \right\} = -n_l \quad (2.4.28)$$

$$-\frac{1}{\pi} \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} dE \left\{ \int [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \right\} = 0 \quad (2.4.29)$$

证 用方程(2.4.20)和(2.4.23)可把上面各式中的被积函数改写如下:

$$\begin{aligned} & \int [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \\ &= \int dr r^2 \int dr' r'^2 [G_0^l(r, r'; E) V(r') G^l(r', r; E)] \\ &= \sum_{\nu, \nu'} \frac{\langle u_{\nu'} | u_{\nu}^{(0)} \rangle \langle u_{\nu}^{(0)} | V | u_{\nu'} \rangle}{(E - E_{\nu} + i\eta)(E - E_{\nu'} + i\eta)} \end{aligned} \quad (2.4.30)$$

其中

$$\begin{aligned} \langle u_{\nu}^{(0)} | V | u_{\nu'} \rangle &= \int_0^{\infty} dr u_{\nu}^{(0)*}(r) V(r) u_{\nu'}(r) \\ &= \int_0^{\infty} dr u_{\nu}^{(0)*}(r) (H - H_0) u_{\nu'}(r) \\ &= (E_{\nu'} - E_{\nu}) \langle u_{\nu}^{(0)} | u_{\nu'} \rangle \end{aligned} \quad (2.4.31)$$

已用了方程(2.4.21)及  $u_{\nu}^{(0)}(r)$  相应之方程,再用(2.4.24),有

$$\begin{aligned} \text{Im} \frac{(E_{\nu'} - E_{\nu})}{(E - E_{\nu} + i\eta)(E - E_{\nu'} + i\eta)} &= \text{Im} \left[ \frac{1}{E - E_{\nu'} + i\eta} - \frac{1}{E - E_{\nu} + i\eta} \right] \\ &= -\pi [\delta(E - E_{\nu'}) - \delta(E - E_{\nu})] \end{aligned} \quad (2.4.32)$$

于是

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\pi} \text{Im} \int dE \left\{ \int [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \right\} \\ &= \int dE \sum_{\nu, \nu'} [\delta(E - E_{\nu'}) - \delta(E - E_{\nu})] \langle u_{\nu'} | u_{\nu}^{(0)} \rangle \langle u_{\nu}^{(0)} | u_{\nu'} \rangle \end{aligned} \quad (2.4.33)$$

如果我们对  $E$  从  $(-\infty \rightarrow \infty)$  积分,则两项  $\delta$  函数的贡献恰好相消,积分等于零,这正是(2.4.29)式.但若对  $E$  的积分限于区间  $(-\infty, 0)$ ,则由于  $E_{\nu} > 0$ ,  $\delta(E - E_{\nu})$  对积分没有贡献,从而(2.4.33)式的右端等于

$$\sum_{E_{\nu'} < 0} \sum_{\nu} \langle u_{\nu'} | u_{\nu}^{(0)} \rangle \langle u_{\nu}^{(0)} | u_{\nu'} \rangle = \sum_{E_{\nu'} < 0} \langle u_{\nu'} | u_{\nu'} \rangle = n_l \quad (2.4.34)$$

其中已用了完备性公式(2.4.9)和(2.4.22),这样便得到了(2.4.27)式,取(2.4.29)与(2.4.27)之差,就得出(2.4.28)式,定理 I 证毕.

我们称定理 I 为渐近完备性定理,它意味着势场  $V(r)$  的存在实际上并不改变状态的总数,只不过把一些  $E > 0$  的散射态“拉下来”使之成为  $E < 0$  的束缚态罢了,这正是本征函数系完备性的又一表现.

我们不妨用一个简单的模型来看这个定理的含义.考虑一个三维的球形势阱,它位于一个半径为  $R$  的大球的中心:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & (r < a) \\ 0, & (r > a) \end{cases} \quad (2.4.35)$$

( $R \gg a, V_0 > 0$ ). 为简单起见,只考虑  $S$  态( $l=0$ ). 边界  $r=R$  上波函数为零的条件使一切本征态(包括  $E > 0$  的散射态)的能级都变成分立的了.于是我们可以很具体地看到:随着  $V_0$  的增大,散射态中那些最低的能级逐个地、相继地转变成为负能量的束缚态能级.

#### 2.4C Levinson 定理的证明

我们马上要弄清楚:由于加上一个势场后散射态数目的减少同相移有什么关系?为此首先把正能量  $E_{\nu} > 0$  的分立谱改成连续谱,后者由一个连续变量  $k$ (波数)所表征:  $E_{\nu} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . 在自由粒子情形,我们选择系数使

$$u_{ik}^{(0)}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} kr j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi\right) \quad (2.4.36)$$

满足动量连续谱的正交归一化条件

$$\langle u_{ik}^{(0)} | u_{ik'}^{(0)} \rangle = \delta(k - k') \quad (2.4.37)$$

当存在势场时,径向波函数变为

$$u_{ik}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l(k)\right) \quad (2.4.38)$$

注意在渐近行为中,  $u_{ik}$  和  $u_{ik}^{(0)}$  有同样的系数,可是  $u_{ik}$  多了一个相移,虽然它仍正交归一化为

$$\langle u_{ik} | u_{ik'} \rangle = \delta(k - k') \quad (2.4.39)$$



实际上(2.4.37)与(2.4.39)的右端当  $k = k'$  时(等于 $\infty!$ )有微小的差别,正是这一差别导致 Levinson 定理,这一点不久就可以看清楚.

让我们对新的归一化系数选择(2.4.38)式,改写公式(2.3.43)和(2.3.33),设势场为  $\lambda V(r)$ ,相移为  $\delta_l(k, \lambda)$ ,则

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda} \delta_l(k, \lambda) &= -\frac{\pi m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty V(r) [u_{lk}(r, \lambda)]^2 dr \end{aligned} \right. \quad (2.4.40)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \sin \delta_l(k, \lambda = 1) &= -m \sqrt{2\pi} \int_0^\infty r j_l(kr) V(r) u_{lk}(r) dr \end{aligned} \right. \quad (2.4.41)$$

$$\left\{ \begin{aligned} u_{lk}(r, \lambda) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l(k, \lambda)\right) \end{aligned} \right. \quad (2.4.42)$$

现在可以比(2.3.41)式的表 2.3.2 更仔细地来讨论了.  $l=0$  的情形是特别有趣的,因  $j_0(kr) \xrightarrow{k \rightarrow 0} 1$ , 我们有

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow 0} \sin \delta_0(k) &= -\frac{m \sqrt{2\pi}}{\hbar^2} \lim_{k \rightarrow 0} \int_0^R r V(r) u_{0k}(r) dr \\ &= -m \sqrt{2\pi} \lim_{k \rightarrow 0} \int_0^R r \frac{1}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u_{0k}(r) dr \\ &= -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \lim_{k \rightarrow 0} \left\{ R \left( \frac{d}{dr} u_{0k} \right)_{r=R} - u_{0k}(R) \right\} \end{aligned} \quad (2.4.43)$$

这里已取  $R$  足够大以使  $V(R) \sim 0$ , 于是有 3 种可能性:

(1) 如果  $V(r)$  不能支持一个束缚态,波函数将上升超过  $R$  而不弯下来,我们可以放宽归一化的限制而选一足够大的  $R$  使(2.4.43)中两项在  $k \rightarrow 0$  的极限下消去,故

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sin \delta_0(k) = 0 \quad (2.4.44)$$

(2) 如  $V(r)$  至少能支持一个束缚态,总可以选  $R$  以使  $u(R) = 0$ , 则由(2.4.42)代入(2.4.43),有

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sin \delta_0(k) \sim \lim_{k \rightarrow 0} kR \cos(kR + \delta_0(k)) \rightarrow 0 \quad (2.4.45)$$

(3) 如  $V(r)$  的强度刚好能维持一个  $E=0$  的“半束缚态”,就是说,恰可把  $\lim_{k \rightarrow 0} u_{0k}(r)$  在  $r=R$  点弯向水平,则

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sin \delta_0(k) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} u_{0k}(R) = \pm 1 \quad (2.4.46)$$

最后一步已用了归一化(2.4.36)式. 我们不妨将上述结果总结在表 2.4.1 中.

表 2.4.1 相移的极限值

| $\delta_0(0)$   | $\delta_l(0) (l \geq 1)$     | $\delta_l(\infty)$ |
|---|------------------------------|--------------------|
| $n\pi, (n = 0, 1, 2, \dots)$<br>$\frac{\pi}{2} + n\pi$ (半束缚态) | $n\pi, (n = 0, 1, 2, \dots)$ | 0                  |

(2.4.47)

那么,表 2.4.1 中整数  $n$  又有什么意义呢? 这就是 Levinson 定理所要回答的问题.

直观地看,此定理的证明如下. 假设一个半径  $R$  足够大的球,其中心与  $\lambda V(r)$  的中心重合,则由(2.4.38)所示的散射波在球腔内形成一系列驻波,其  $k$  值按下面的边界条件离散化:

$$kR - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l(k, \lambda) = N\pi \quad (2.4.48)$$

由于(2.4.47)式,我们可指定一个足够大的  $k$  值,记为  $k_M$ ,使一切  $k \geq k_M$  的散射波的相移都可以略去,指标比  $k_M$  小 1 的波,在  $0 \rightarrow R$  范围内,其节点数比  $k_M$  波的要少一个,其余依此类推.

现在让势场强度逐渐增大,这些波的相移也随之增加,我们特别注意具有最低能量的两个 S 波. 最低的一个( $k_1$ )径向波函数  $u_{0k_1}(r)$ ,除了在两个端点  $r = 0$  和  $R$  外,在整个区间内别无节点. 可是次最低的  $k_2$  波在球内有一个节点. 当势场强度从零逐渐增强但还不足以在阱内把  $u_{0k_1}(r)$  弯到水平之前,我们应有  $\lim_{k_1 \rightarrow 0} \delta_0(k_1) = 0$  ( $k_1 \rightarrow 0$  的极限相当于

$R \rightarrow \infty$ ). 待到  $u_{0k_1}(r)$  弯向水平,  $\delta_0(0)$  就突变到  $\frac{\pi}{2}$ , (见(2.4.46)), 这表示恰好在此时势场容纳了一个  $E = 0$  的“半束缚态”(相应之散射长度

$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\tan \delta_0(k)}{k}$  变为  $-\infty$ ), 它是不可归一化的. 紧接着,当势阱一旦

能把波函数弯下来,亦即能维持一个束缚态时,  $\delta_0(0)$  便突然跳到  $\pi$ . 随着一个束缚态 ( $E < 0$ ) 在势阱内形成,原先最低的散射态  $u_{0k_1}(r)$  ( $E > 0$ ) 消失了,代替它位置的是原先的  $u_{0k_2}(r)$ .

总之,一个 S 波散射态被势阱“剥掉”的过程伴随着零动量相移的突增:  $\delta_0(0)$  发生跳变,从  $0 \rightarrow \frac{\pi}{2} \rightarrow \pi$ . 对于  $l \geq 1$  的分波,类似的讨论也适用,不过由于离心势垒的存在使得  $E = 0$  的态真的束缚起来了,  $\delta_l(0)$  不能取  $\frac{\pi}{2}$  值,它将直接从 0 跳变到  $\pi$ .

就这样,在 $\lambda$ 增加直至1的全过程中,属于 $l$ 分波的散射态数目每减少1个,相移 $\delta_l(0)$ 便要相应地增加 $\pi$ .这个结论同前面说明的结论(散射态的数目每减少1,束缚态的数目便增加1)合并起来,就是 Levinson 定理(2.4.8).

### 2.4D Levinson 定理新形式的证明

我们希望更严格地从数学上来证明 Levinson 定理的新形式(2.4.10)式.关键是要证明下面的定理 II.

#### 定理 II

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \int_0^{\infty} dE \left\{ \int_0^{\infty} [G^l(r, r; E) - G_0^l(r, r; E)] r^2 dr \right\} \\
 & = \frac{1}{\pi} [\delta_l(\infty) - \delta_l(0)] + \frac{1}{2} (-1)^l \sin^2 \delta_l(0) \quad (2.4.49)
 \end{aligned}$$

很明显,把定理 I 和 II 合并起来,就得出(2.4.10)式.现在来证明定理 II.与上节不同,我们将在连续谱中计算(2.4.49)式的左端,利用(2.4.20)和(2.4.24)并完成对 $E$ 的积分,便得到(将脚标 $\nu$ 改写为 $k$ )

$$(2.4.49) \text{ 式左端} = \int_0^{\infty} dk \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R [u_{lk}^2(r) - u_{lk}^{(0)2}(r)] dr \quad (2.4.50)$$

(已用了 $u_{lk}$ 和 $u_{lk}^{(0)}$ 都是实函数的性质).为了计算对 $r$ 的积分,我们用如下的技巧,先考虑两个不同的 $k$ 和 $k'$ ,则

$$\begin{aligned}
 & \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R u_{lk}(r) u_{lk'}(r) dr \\
 & = \frac{1}{k'^2 - k^2} \lim_{R \rightarrow \infty} \left[ u_{lk'}(r) \frac{d}{dr} u_{lk}(r) - u_{lk}(r) \frac{d}{dr} u_{lk'}(r) \right]_{r=R} \quad (2.4.51)
 \end{aligned}$$

以 $u_{lk}(r)$ 的渐近表达式(2.4.38)代入并注意

$$k = \frac{1}{2}(k+k') + \frac{1}{2}(k-k'), \quad k' = \frac{1}{2}(k+k') - \frac{1}{2}(k-k')$$

我们就得到

$$\begin{aligned}
 & \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R [u_{lk}^2(r) - u_{lk}^{(0)2}(r)] dr \\
 & = \lim_{k' \rightarrow k} \lim_{R \rightarrow \infty} \int_0^R [u_{lk}(r) u_{lk'}(r) - u_{lk}^{(0)}(r) u_{lk'}^{(0)}(r)] dr
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{R \rightarrow \infty} \left\{ \frac{2}{\pi} \lim_{k' \rightarrow k} \cos \left[ (k' - k)R + \frac{1}{2} (\delta_l(k') - \delta_l(k)) \right] \right. \\
 &\quad \left. \cdot \lim_{k' \rightarrow k} \frac{\sin \frac{1}{2} [\delta_l(k') - \delta_l(k)]}{k' - k} - (-1)^l \frac{\cos [2kR + \delta_l(k)]}{\pi k} \sin \delta_l(k) \right\} \\
 &= \frac{1}{\pi} \frac{d\delta_l}{dk} + (-1)^l \delta(k) \sin^2 \delta_l(k) - (-1)^l \sin 2\delta_l(k) \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\cos 2kR}{2\pi k} \quad (2.4.52)
 \end{aligned}$$

其中用了  $\delta$  函数公式

$$\delta(k) = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\sin 2kR}{\pi k} \quad (2.4.53)$$

将(2.4.52)代入(2.4.50)式,完成对  $k$  的积分,最后一项因  $R \rightarrow \infty$  时剧烈振荡及  $\sin 2\delta_l(0) = 0$  (见(2.4.47)的表)在积分后为零,最后得到

$$\begin{aligned}
 (2.4.49) \text{ 式左端} &= \frac{1}{\pi} [\delta_l(\infty) - \delta_l(0)] + \frac{1}{2} (-1)^l \sin^2 \delta_l(0) \\
 &\quad (2.4.54)
 \end{aligned}$$

其中宗量已从  $k$  换为  $E$ , 并利用公式

$$\int_0^\infty \sin^2 \delta_l(k) \delta(k) dk = \int_0^\infty \sin^2 \delta_l(E) \delta(E) dE = \frac{1}{2} \sin^2 \delta_l(0) \quad (2.4.55)$$

至此,定理 II 证毕. 即 Levinson 定理新形式(2.4.10)式成立. 注意:一般  $\delta_l(\infty) = 0$ , 而当  $l = 0$ , 刚产生一个半束缚态时,  $\delta_0(0) = \frac{\pi}{2}$ ,  $n_0 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ , 即半束缚态不计入束缚态数目之内.

我们采用的方法,在物理上有很强的直观性,它可能使我们对量子力学中本征函数系的完备性增加一点新的认识,即完备性反映了某种“刚性”,本征态的数目(虽然等于无限大)在外势场加上后的前后始终保持守恒. 这一理解使 Levinson 定理在诸如量子 Hall 效应或拓扑量子场论中的分数荷问题等的研究有它的重要应用,这里就不多讲了.

我们证明中关键之点是用两种不同的方法去计算(2.4.28)式左端的量:用分立谱的归一化的波函数,我们得到(2.4.28)式的右端;另一方面,改用连续谱中相对于(2.4.36)的系数归一化的径向波函数(2.4.38),便得出定理 II 的右端用相移表示的量. 有趣的是,这样处理的结果,把  $l = 0$  与  $l \geq 1$  的情况合并起来,并计入了可能出现半束缚态的情况.

我们的证明方法还受惠于物理学中一条成功的经验,即若想证明(测量)一个量  $A$  等于  $B$ ,  $A = B$ , 应该去证明(测量)  $A - B = 0$ .

## § 2.5 低能中子和质子的散射,核力

为了研究核力,在原则上可以通过  $n-p$ ,  $p-p$ ,  $n-n$  等二体散射所得到的微分截面随角度和入射能量的变化数据,作相移分析后,确定出一组与实验数据符合的相移,然后反推出核力来. 另外,几个最轻核的基态和低激发态的性质也有助于确定核力. 本节讨论低能  $n-p$  散射实验和氘核基态性质的测量能给我们提供那些核力的性质.

### 2.5A 氘核的基态性质和核力

氘核是由一个中子和一个质子组成的稳定核,由于中子和质子之间的吸引性势阱还不很深,只能形成一个结合能很小( $B = 2.226\text{MeV}$ ),总角动量  $J = 1$  的束缚态. 这个态的磁矩近似地等于质子与中子磁矩之和:  $\mu_D \simeq \mu_p + \mu_n$ , 而且氘核的电四极矩非常小,这两个事实表示质子与中子的相对运动基本上是处于  $S$  态,即球对称态,我们可以忽略  $l = 2$  的  $D$  态的混合(奇宇称的  $P$  态不可能有混合),忽略轨道磁矩,也忽略  $n-p$  之间的非中心力.

记  $m \approx \frac{1}{2}M_p$  为约化质量,  $n-p$  质心系中的定态方程为

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r) \quad (2.5.1)$$

设  $V(r)$  为球方阱势,阱深为  $V_0$ ,宽为  $d$ ,引入  $K_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}$ . 现在讨论  $E < 0$  的束缚态,回忆上节的分析可知,一个  $E = 0$  的  $S$  态能级刚好存在的条件是  $\cot K_0 d = 0$ , 或  $K_0 d = \frac{\pi}{2}$ . 当势阱加深,此束缚态能级下沉,到  $K_0 d = \frac{3\pi}{2}$  时,又出现一个  $E = 0$  的能级,等等.

如今氘核的惟一束缚态是  $l = 0$ ,  $E = -B \approx 0$  的态,故可认为  $(K_0 d)^2 \approx \left(\frac{\pi}{2}\right)^2$ , 或

$$V_0 d^2 \approx \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4M_p} \quad (2.5.2)$$

记

$$\alpha^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2} > 0, K'^2 = K_0^2 - \alpha^2$$

则氘核 S 态径向波函数  $u^D(r) (=rR^D(r))$  满足方程

$$\begin{cases} \left(\frac{d^2}{dr^2} + K'^2\right)u^D(r) = 0, & (r < d) \\ \left(\frac{d^2}{dr^2} - \alpha^2\right)u^D(r) = 0, & (r > d) \end{cases} \quad (2.5.3)$$

其满足束缚态边界条件之解为

$$\begin{cases} u^D(r) = a \sin K' r, & (r < d) \\ u^D(r) = C \exp(-\alpha r), & (r > d) \end{cases} \quad (2.5.4)$$

注意(2.5.2)式已大体上给出了核力势的深度与宽度平方乘积的数量级大小.

### 2.5B 慢粒子在球方势阱中的散射

对低能散射,我们只需讨论  $l=0$  的 S 波,记  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , 方程(2.5.1)

化为

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + K^2\right)u(r) = 0, (r < d) \quad (2.5.5)$$

其中  $K^2 = k^2 + K_0^2$ , 边界条件是

$$u(0) = 0, \quad u(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C \sin(kr + \delta_0) \quad (2.5.6)$$

故方程(2.5.5)之解为

$$u(r) = \begin{cases} C \sin Kr, & (r < d) \\ C' \sin(kr + \delta_0), & (r > d) \end{cases} \quad (2.5.7)$$

由波函数的对数导数在  $d$  处连续的条件可以导出相移  $\delta_0$  所满足的方程

$$k \cot(kd + \delta_0) = K \cot Kd \quad (2.5.8)$$

对于慢速入射的粒子,  $kd \ll 1$ , 可以近似地解出

$$\tan \delta_0 \approx kd \left[ \frac{\tan Kd}{Kd} - 1 \right] \quad (2.5.9)$$

此时弹性散射的总截面为

$$\begin{aligned}\sigma &= \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 \approx \frac{4\pi}{k^2} \tan^2 \delta_0 \\ &\approx 4\pi d^2 \left[ 1 - \frac{\tan Kd}{Kd} \right]^2\end{aligned}\quad (2.5.10)$$

由(2.5.9、10)可知,如果  $Kd \approx K_0 d = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$ , 则  $\tan\delta_0$  和  $\sigma$  均趋于极大值,我们称在该处出现共振,对应的能量称为势阱的虚能级.

让我们把(2.5.7)式中  $r > d$  时的解  $u(r)$  外推到阱内,得到新函数  $v(r)$  并取  $C'$  值为  $\frac{1}{\sin\delta_0}$ , 以使在  $r = 0$  时,函数值为 1, 则得

$$u(r) \rightarrow v(r) = \cos kr + \cot\delta_0 \sin kr \xrightarrow{kr \ll 1} 1 - \frac{r}{a} \quad (2.5.11)$$

其中

$$a = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{-1}{k \cot\delta_0} \quad (2.5.12)$$

称为散射长度,当  $r = a$  时,由(2.5.11)可见,  $k \rightarrow 0$  的散射波的外推函数在该点为零:  $\lim_{k \rightarrow 0} v(a) = 0$ .

现在我们可以把球方阱势的束缚态和散射态以及散射长度等联系起来,得到如下的结论(这一结论对一般形状的势阱也可适用):

当势阱的深度不够,  $K_0 d < \frac{\pi}{2}$  时,阱内束缚不住  $S$  态的粒子,由(2.5.9)式,  $\tan\delta_0 > 0$ , 故散射长度  $a < 0$ .

当阱深到达  $K_0 d = \frac{\pi}{2}$  时,势阱刚能束缚住一个  $S$  态能级,  $E = 0$ , 此时  $\tan\delta_0 \rightarrow \infty$ ,  $a \rightarrow -\infty$ , 散射达到共振.

当势阱深度使  $K_0 d > \frac{\pi}{2}$  时,这个束缚态能级下降,此时  $\tan\delta_0 < 0$ , 故  $a > 0$ .

实际上这里讨论的内容是上节 Levinson 定理的特例.

回到核力问题上来,由于核力程  $d$  很小,约为  $10^{-13}$  cm, 故对低能 ( $E < 10$  MeV) 入射粒子,  $kd \ll 1$  的条件成立,我们只需讨论  $S$  波的散射,而且由于此时入射波长远远大于势阱的宽度,可以预期势阱的形状细节对散射的结果影响不大. 下面将指出,单靠低能散射实验,我们实际上只能得到描述核力势  $V(r)$  的两个参数,一个就是上面提到的散射长度  $a$ , 另一个是所谓有效力程  $r_0$ .

### 2.5C 低能散射的有效力程理论

设核力势为  $V(r)$ , 入射粒子在质心系能量  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , 由方程 (2.5.1),  $l = 0$  的 S 波径向波函数  $u(r)$  ( $=rR(r)$ ) 满足方程

$$u'' + \left[ k^2 - \frac{2mV(r)}{\hbar^2} \right] u = 0 \quad (2.5.13)$$

考虑能量分别为  $E_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m}$  和  $E_2 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m}$  的两个散射态解.

$$u_1'' + \left[ k_1^2 - \frac{2mV(r)}{\hbar^2} \right] u_1 = 0 \quad (2.5.14)$$

$$u_2'' + \left[ k_2^2 - \frac{2mV(r)}{\hbar^2} \right] u_2 = 0 \quad (2.5.15)$$

分别有边界条件

$$u_1(0) = 0, u_1(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_1 \sin(k_1 r + \delta_1) = v_1(r) \quad (2.5.16)$$

$$u_2(0) = 0, u_2(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_2 \sin(k_2 r + \delta_2) = v_2(r) \quad (2.5.17)$$

类似于(2.5.11)式, 我们选  $C_1 = \frac{1}{\sin \delta_1}$ ,  $C_2 = \frac{1}{\sin \delta_2}$ , 以使上面在  $r$  远处定义的  $v(r)$  ( $v$  的方程中  $V = 0$ ) 向  $r \rightarrow 0$  处外推时有如下的极限行为:

$$v_1(0) = v_2(0) = 1 \quad (2.5.18)$$

$$\frac{-1}{k_1 \cot \delta_1} = - (v_1')_{r=0}^{-1} \quad (2.5.19)$$

$$\frac{-1}{k_2 \cot \delta_2} = - (v_2')_{r=0}^{-1} \quad (2.5.20)$$

以  $u_1$  乘(2.5.15)式减去  $u_2$  乘(2.5.14)式, 我们有

$$(u_1 u_2' - u_2 u_1')' = (k_1^2 - k_2^2) u_1 u_2 \quad (2.5.21)$$

对  $r$  积分后可得

$$[u_1(r)u_2'(r) - u_2(r)u_1'(r)] \Big|_0^\infty = (k_1^2 - k_2^2) \int_0^\infty u_1 u_2 dr \quad (2.5.22)$$

类似地对  $v_1$  和  $v_2$  我们有



$$[v_1(r)v_2'(r) - v_2(r)v_1'(r)] \Big|_0^\infty = (k_1^2 - k_2^2) \int_0^\infty v_1 v_2 dr \quad (2.5.23)$$

将(2.5.23)减去(2.5.22),即得

$$[v_1 v_2' - v_2 v_1' - u_1 u_2' + u_2 u_1'] \Big|_0^\infty = (k_1^2 - k_2^2) \int_0^\infty (v_1 v_2 - u_1 u_2) dr \quad (2.5.24)$$

注意到  $r \rightarrow \infty$  时  $v$  和  $u$  一致,而  $r \rightarrow 0$  时之边界条件不同,见(2.5.16~20)诸式.我们令  $k_1 \rightarrow k$ ,  $k_2 \rightarrow 0$ ,改记  $u_1 \rightarrow u$ ,  $v_1 \rightarrow v$ ,  $u_2 \rightarrow u_0$ ,  $v_2 \rightarrow v_0$ ,此时由(2.5.20)及(2.5.12)式定义了散射长度  $a$ ,则(2.5.24)式化为

$$k \cot \delta(k) = -\frac{1}{a} + k^2 \int_0^\infty [v(r)v_0(r) - u(r)u_0(r)] dr \quad (2.5.25)$$

由于  $kd \ll 1$ , 粒子能量比势阱深度小得多,可以预期  $u$  和  $u_0$  很接近,  $v$  和  $v_0$  很接近,(在力程  $d$  外,  $u$  与  $v$  重合,  $u_0$  与  $v_0$  重合),故可合理地作如下近似:

$$\int_0^\infty (v v_0 - u u_0) dr = \int_0^\infty (v_0^2 - u_0^2) dr = \frac{1}{2} r_0$$

或

$$r_0 = 2 \int_0^\infty (v_0^2 - u_0^2) dr \quad (2.5.26)$$

这样定义的  $r_0$  既与  $k$ (粒子能量)无关,也与势阱形状变化的细节无关,但它的确决定于势阱的整体性质,因为  $(v_0^2 - u_0^2)$  在  $r=0$  处为1,而在力程之外为零,故积分并乘以2后可认为平均地反映了力程而称  $r_0$  为有效力程.

把(2.5.26)代入(2.5.25),我们得到决定相移的公式

$$k \cot \delta_0(k) = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2} r_0 k^2 \quad (2.5.27)$$

(恢复相移的脚标,强调它是  $l=0$  的 S 波相移),  
弹性散射总截面

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0(k) = \frac{4\pi}{k^2} \frac{1}{1 + \cot^2 \delta_0(k)} \\ &= \frac{4\pi}{k^2 + \left(-\frac{1}{a} + \frac{r_0}{2} k^2\right)^2}. \end{aligned} \quad (2.5.28)$$

(2.5.27)和(2.5.28)这两个极为漂亮的结果叫做有效力程理论,它告诉

我们:虽然原则上通过散射数据的相移分析,可以获得粒子之间的相互作用势,但单靠低能实验是远远不够的,任何合理的位势如球方势阱,指数型势  $\left[-V_0 \exp\left(-\frac{r}{b}\right)\right]$ , 高斯型势  $\left[-V_0 \exp\left(-\frac{r^2}{d^2}\right)\right]$  或汤川势  $\left[-\frac{V_0 \exp(-\mu r)}{\mu r}\right]$  等,在解释低能散射实验上,都只被决定到两个参数  $a$  和  $r_0$ . 换言之,能给出同一个  $a$  和  $r_0$  的一切势,对低能散射而言都是等价的.

### 2.5D 核力对自旋的依赖性

上面的讨论中没有考虑核力势对自旋的依赖性. 两个核子组成的体系,不论是束缚态或散射态,其波函数的自旋部分,可以是三重态 ( $s = 1$ ) 或单态 ( $s = 0$ ). 如果核力与自旋态有关,可把核力势分别记为  $V^t$  和  $V^s$ . 已知氘核的总角动量为 1 而轨道角动量为  $l = 0$ ,故自旋  $s = 1$ ,  $V^t$  肯定存在,如  $V^s$  不同于  $V^t$ ,对低能  $n-p$  散射应该分别为三重态和单态写出有效力程的散射截面公式:

$$\sigma^t = \frac{4\pi}{\left[k^2 + \left(-\frac{1}{a_t} + \frac{r_0^t k^2}{2}\right)^2\right]} \xrightarrow{k \rightarrow 0} 4\pi |a_t|^2 \quad (2.5.29)$$

$$\sigma^s = \frac{4\pi}{\left[k^2 + \left(-\frac{1}{a_s} + \frac{r_0^s k^2}{2}\right)^2\right]} \xrightarrow{k \rightarrow 0} 4\pi |a_s|^2$$

如果核力与自旋无关,则散射总截面  $\sigma(\text{总}) \equiv \sigma_t = \sigma^t$ ; 如果核力与自旋有关,则

$$\sigma_t = \frac{3}{4}\sigma^t + \frac{1}{4}\sigma^s \quad (2.5.30)$$

我们可以用氘核波函数来估算  $\sigma^t$ . 把(2.5.3)中的  $(-\alpha^2)$  代以  $k^2$ , 即得(2.5.13)式,由于氘核束缚态  $E$  的绝对值很小,可以认为(2.5.4)中阱外的  $u^D(r) = Ce^{-\alpha r} \rightarrow v^D(r) = e^{-\alpha r}$ , (令  $C = 1$  以使  $v^D(0) = 1$ ), 它可以代替(2.5.26)中  $k = 0$  的  $v_0(r)$ , 于是由(2.5.20)式,现在  $\lim_{k \rightarrow 0} k \cot \delta(k) = (v^D)'_{r=0} = -\alpha$ , 代回(2.5.27)式,我们有

$$\alpha = \frac{1}{a_t} + \alpha^2 \frac{r_0^t}{2}$$

或

$$|a_t|^2 = \frac{1}{\alpha^2 \left(1 - \frac{1}{2}\alpha r_0^t\right)^2} \quad (2.5.31)$$

因为氘核波函数的宽度是由  $\frac{1}{\alpha}$  表征的,不妨认为有效力程  $r_0$  不会大于  $\frac{1}{\alpha}$ ,即

$$0 \leq r_0 \leq \frac{1}{\alpha} \quad (2.5.32)$$

如果取上限  $r_0 = \frac{1}{\alpha}$ , 则 (1 靶 = 1 barn =  $10^{-24}$  cm<sup>2</sup>)

$$\sigma^t \approx 4\pi |a_t|^2 \approx \frac{4\pi}{\alpha^2} \frac{1}{\left(1 - \frac{1}{2}\right)^2} \approx 9.3 \text{ (靶)}$$

如果取下限  $r_0 = 0$ , 则

$$\sigma^t \approx \frac{4\pi}{\alpha^2} \approx 2.32 \text{ (靶)}$$

但是实验测得  $\sigma_t = 20.38$  靶,由 (2.5.30) 估算可知

$53.6 \text{ 靶} \leq \sigma^s \leq 74.6 \text{ 靶}$ ,由  $\sigma^s \approx 4\pi |a_s|^2$  时进一步估计

$$2.1 \times 10^{-12} \text{ cm} \leq |a_s| \leq 2.43 \times 10^{-12} \text{ cm} \quad (2.5.33)$$

于是我们看到,低能  $n-p$  散射实验明确告诉我们核力势与自旋有关,但是  $a_s$  的符号无法从散射数据判明.不过从前面关于散射长度  $a$  的分析知道,当势阱内不存在束缚态时  $a$  应为负,今实验上没有找到单态的氘核束缚态,由此可以断定  $a_s$  是负的.现在公认值是

$$a_t = 5.39 \text{ fm}, a_s = -23.7 \text{ fm} \quad (1 \text{ fm} = 10^{-13} \text{ cm})$$

## § 2.6 演化算符和 $S$ 矩阵

### 2.6A 反应道

前面各节讨论的是弹性散射理论,本节以下要介绍更一般的量子碰撞理论.先看一个例子,正电子  $e^+$  入射到氢原子(基态)发生的过程可能有以下 6 种:



$$\longrightarrow p + (e^+ e^-)^* \text{ (形成正负电子偶素的激发态)} \quad (2.6.5)$$

$$\longrightarrow p + 2\gamma \quad \text{(反应中正负电子湮灭)} \quad (2.6.6)$$

过程(2.6.1)中  $e^+$  保持在“弹性散射道”，它与  $H$  之间，在质心系无能量转移(只有动量转移). 过程(2.6.2)中氢原子由基态跃迁到某一激发态  $H^*$ ，入射正电子损失部分能量，我们说  $e^+$  在碰撞后进入“非弹性道”. 过程(2.6.3)这个反应道要开放， $e^+$  的质心系能量必须超过一个阈值，即氢原子的电离能(13.6eV). 过程(2.6.4)或(2.6.5)可看成是入射粒子  $e^+$  与“靶粒子” $H$  的成分进行重排或改组的过程，在初态， $H$  中的质子  $p$  与电子  $e^-$  组成束缚态，而在末态， $e^+$  与  $e^-$  组成一个新的类氢原子束缚态——正负电子偶素. 在过程(2.6.6)中， $e^+$  与  $e^-$  湮灭而成为两个光子，这一过程超出非相对论量子力学范围，下面暂不讨论，要等到电磁场量子化后才能加以考虑.

在上述各过程中，体系的总哈密顿量  $H$  可以有不同的分法，例如可以按初态分解： $H = H_i + V_i$ ，其中

$$H_i = K_{e^+} + K_p + K_{e^-} + V_{pe^-} \quad (2.6.7)$$

前3项分别表示  $e^+$ ， $p$  和  $e^-$  的动能， $V_{pe^-}$  表示  $p$  和  $e^-$  间的相互作用库仑能，而

$$V_i = V_{e^+p} + V_{e^+e^-} \quad (2.6.8)$$

表示入射粒子  $e^+$  与靶粒子  $H$  之间的相互作用. 这种分解可以惟一地用于过程(2.6.1)和(2.6.2)，因为末态粒子的组成没有变化.

但对于过程(2.6.4)和(2.6.5)，存在另一种按末态的分解： $H = H_f + V_f$ ，其中

$$H_f = K_p + K_{e^+} + K_{e^-} + V_{e^+e^-} \quad (2.6.9)$$

$$V_f = V_{pe^+} + V_{pe^-} \quad (2.6.10)$$

为区别各种可能情况，我们引入区分各“反应道”(或称重整道)的指标  $c$ ，总哈密顿  $H$  按反应道  $c$  分解为  $H = H_c + V_c$ ，而  $c$  道中的  $H_c$  当入射粒子与靶粒子远离时确定了一系列由量子数  $\gamma$  标记的渐近自由态  $\Phi_{c,\gamma}$ ：

$$H_c \Phi_{c,\gamma} = E_{c,\gamma} \Phi_{c,\gamma} \quad (2.6.11)$$

上面例子中，(2.6.7)的  $c = i$ ，而(2.6.9)中的  $c = f$ ，相应之一套态矢量记为  $\Phi_{i,\alpha}$  和  $\Phi_{f,\beta}$ ，为记号更简洁起见，记  $a \equiv (i, \alpha)$ ， $b \equiv (f, \beta)$ ， $n = (c, \gamma)$ ，故  $\Phi_a \equiv \Phi_{i,\alpha}$ ， $\Phi_b \equiv \Phi_{f,\beta}$ ， $\Phi_n \equiv \Phi_{c,\gamma}$ .

要注意的是:与某一反应道  $c$  对应的态  $\Phi_{c,\gamma}$ ,一般地说,并不构成一个完备集合,原因是  $\Phi_{c,\gamma}$  集合中没有包括  $H_c$  的那些电离本征态.例如上面例子中  $e^+ + (pe^-)$  这个反应道( $i$ )包括了  $(pe^-)$  的一切束缚态与自由的  $e^+$  这两体组成的无数道,但不包括  $(pe^-)$  电离后的态(因为后者成为三体体系),所以  $\Phi_{i,\alpha}$  并不完备.仅当我们讨论(2.6.3)的末态反应道( $c$ )并认为  $p, e^+, e^-$  都是“基本”粒子时,它对应的态  $\Phi_{c,\gamma}$  才是完备的.

### 2.6B 相互作用图景

我们在第一章已讨论过,对同一个物理问题,量子力学对态和力学量及其随时间演化的描述上,可以有不同的图景(picture):在薛定谔图景中,态随时间而变,但力学算符一般不随时间而变;而在海森堡图景中,态不随时间变化,但力学量算符随时间变化.现在介绍另一种图景——相互作用图景,它介于前述两种图景之间,在处理碰撞动力学和量子场论中的高阶微扰理论等问题时特别有用.

设总哈密顿  $H$  可以分为“未扰动的”部分  $H_0$  与一部分“微扰” $V$  之和,即

$$H = H_0 + V \quad (2.6.12)$$

$H_0$  的一套本征态是  $\Phi_\alpha$ :

$$H_0 \Phi_\alpha = E_\alpha \Phi_\alpha \quad (2.6.13)$$

量子数  $\alpha$  不仅包括  $H_0$  的本征值  $E_\alpha$ ,也包括与  $H_0$  对易的可观察量.

我们希望从总体系的运动中把“自由”运动部分分离出来,为此对薛定谔图景中的态矢量  $\Psi_S(t)$  作一个么正变换:

$$\Psi_I(t) = \exp\left\{\frac{iH_0(t-t_0)}{\hbar}\right\} \Psi_S(t) \quad (2.6.14)$$

代入薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_S(t) = H \Psi_S(t) \quad (2.6.15)$$

得到 Tomonaga-Schwinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_I(t) = V_I(t) \Psi_I(t) \quad (2.6.16)$$

其中

$$V_I(t) = \exp\left\{\frac{iH_0(t-t_0)}{\hbar}\right\} V \exp\left\{-\frac{iH_0(t-t_0)}{\hbar}\right\} \quad (2.6.17)$$

脚标  $I$  表示相互作用图景.  $V_I(t)$  的运动方程是

$$\frac{dV_I(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[V_I, H_0] + \frac{\partial V_I}{\partial t} \quad (2.6.18)$$

即使原来  $V$  不含时间,  $\frac{\partial V}{\partial t} = 0$ , 现在  $V_I(t)$  也会显含时间. 上式对相互作用图景中一个任意的算符  $A$  都正确 ( $V \rightarrow A$ ). 注意第一项对易括号中只有“自由哈密顿量” $H_0$  (不是  $H$ ), 而(2.6.16)式的右端只有  $V_I(t)$  而无  $H_0$  项, 因此算符  $V_I$  (或一般的  $A_I$ ) 的“运动学演化”与态矢的“动力学演化”被明显地分开了. 所以前面说相互作用图景是介于薛定谔图景和海森堡图景之间, 而且应当看到这是一种很普遍而合理的观念. 例如在非相对论薛定谔方程中, 我们只写出粒子的动能  $E = \frac{p^2}{2m_0}$ , 而不写出它的静能  $m_0 c^2$ , 更不讨论  $m_0$  的来由, 所有这些都归入计算时的“本底”了. 事实上, 当我们讨论有限体系的量子力学描述时, 它的环境以至整个宇宙都被当作不受扰动的本底, 在  $[V, H_0] = 0$  的意义上不妨说, 我们一直在利用着相互作用图景.

当然, 算符的期待值与所使用的图景无关:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \Psi_I(t) | A_I(t) | \Psi_I(t) \rangle = \langle \Psi_S(t) | A | \Psi_S(t) \rangle \\ &= \langle \Psi_H | A_H(t) | \Psi_H \rangle \end{aligned} \quad (2.6.19)$$

在(2.6.14)式中的初始时刻  $t_0$ , 这 3 种图景重合, 通常选  $t_0 = 0$  或  $t_0 = -\infty$ .

定义在相互作用图景中 (为简洁起见略去脚标  $I$ ) 的演化算符  $U(t, t')$  如下:

$$\Psi(t) = U(t, t')\Psi(t') \quad (2.6.20)$$

像第一章薛定谔图景中的演化算符一样, 现在有

$$U(t, t) = I \quad (2.6.21)$$

$$U(t, t') = U(t, t'')U(t'', t') \quad (2.6.22)$$

$$U^\dagger(t, t') = U^{-1}(t, t') = U(t', t) \quad (2.6.23)$$

从方程(2.6.16)容易导出  $U$  算符满足的方程为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t') = V(t)U(t, t') \quad (2.6.24)$$

它在初条件(2.6.21)下的形式解为(以下简记  $\hbar = 1$ )

$$U(t, t') = I - i \int_{t'}^t V(t_1) U(t_1, t') dt_1 \quad (2.6.25)$$

实际上,这是一个关于  $U$  的 Volterra 型的积分方程.

### 2.6C 演化算符的微扰展开

我们用迭代法来求解积分方程(2.6.25). 先看零级近似

$$U^{(0)}(t, t') = I \quad (2.6.26)$$

以此代入(2.6.25)右端积分号下的  $U$ , 即得一级近似

$$U^{(1)}(t, t') = I - i \int_{t'}^t V(t_1) dt_1 \quad (2.6.27)$$

类似地可得二级近似为

$$U^{(2)}(t, t') = I - i \int_{t'}^t V(t_1) dt_1 + (-i)^2 \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 V(t_1) V(t_2) \quad (2.6.28)$$

假定序列  $U^{(0)}, U^{(1)}, U^{(2)}, \dots$  向极限  $U$  的精确值收敛, 则可写出

$$U(t, t') = \sum_{n=0}^{\infty} U_n(t, t') \quad (2.6.29)$$

其中  $U_0(t, t') = I$ , 而当  $n \geq 1$  时有

$$U_n(t, t') = (-i)^n \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n V(t_1) V(t_2) \cdots V(t_n) \quad (2.6.30)$$

注意变量的次序是重要的:

$$t' \leq t_n \leq t_{n-1} \cdots \leq t_1 \leq t \quad (2.6.31)$$

因为一般地说,  $V(t_i)$  与  $V(t_j)$  并不对易, 还要注意各积分的上限由  $t_i$  表示, 彼此并不相等. 为处理这一复杂性, Dyson 引入一个“编时算符”  $T$ , 定义为

$$T[A(t_1)B(t_2)] = \begin{cases} A(t_1)B(t_2), & (t_1 > t_2) \\ B(t_2)A(t_1), & (t_2 > t_1) \end{cases} \quad (2.6.32)$$

其中  $A(t)$  和  $B(t)$  是两个任意的含时间的算符, 算符  $T$  的作用是将它们的依序排列得使其时间宗量永远从右向左增大. 推广到  $n$  个算符时有

$$T[A_i(t_i)A_j(t_j)\cdots A_k(t_k)] = A_1(t_1)A_2(t_2)\cdots A_n(t_n) \quad (2.6.33)$$

其中  $t_1 > t_2 \cdots > t_n$

现在我们来证明:(2.6.28)式的最后一项可改写为

$$U_2(t, t') = \frac{1}{2}(-i)^2 \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 T[V(t_1)V(t_2)] \quad (2.6.34)$$

证 写开此式的右端

$$\frac{1}{2} \left\{ (-i)^2 \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 V(t_1)V(t_2) + (-i)^2 \int_{t'}^t dt_1 \int_{t_1}^t dt_2 V(t_2)V(t_1) \right\} \quad (2.6.35)$$

括号中第一项正是(2.6.28)中最后一项  $U_2(t, t')$ , 考察它在  $(t_1, t_2)$  平面上的积分区域, 如图 2.6.1 中直角三角形 ABC 所示.

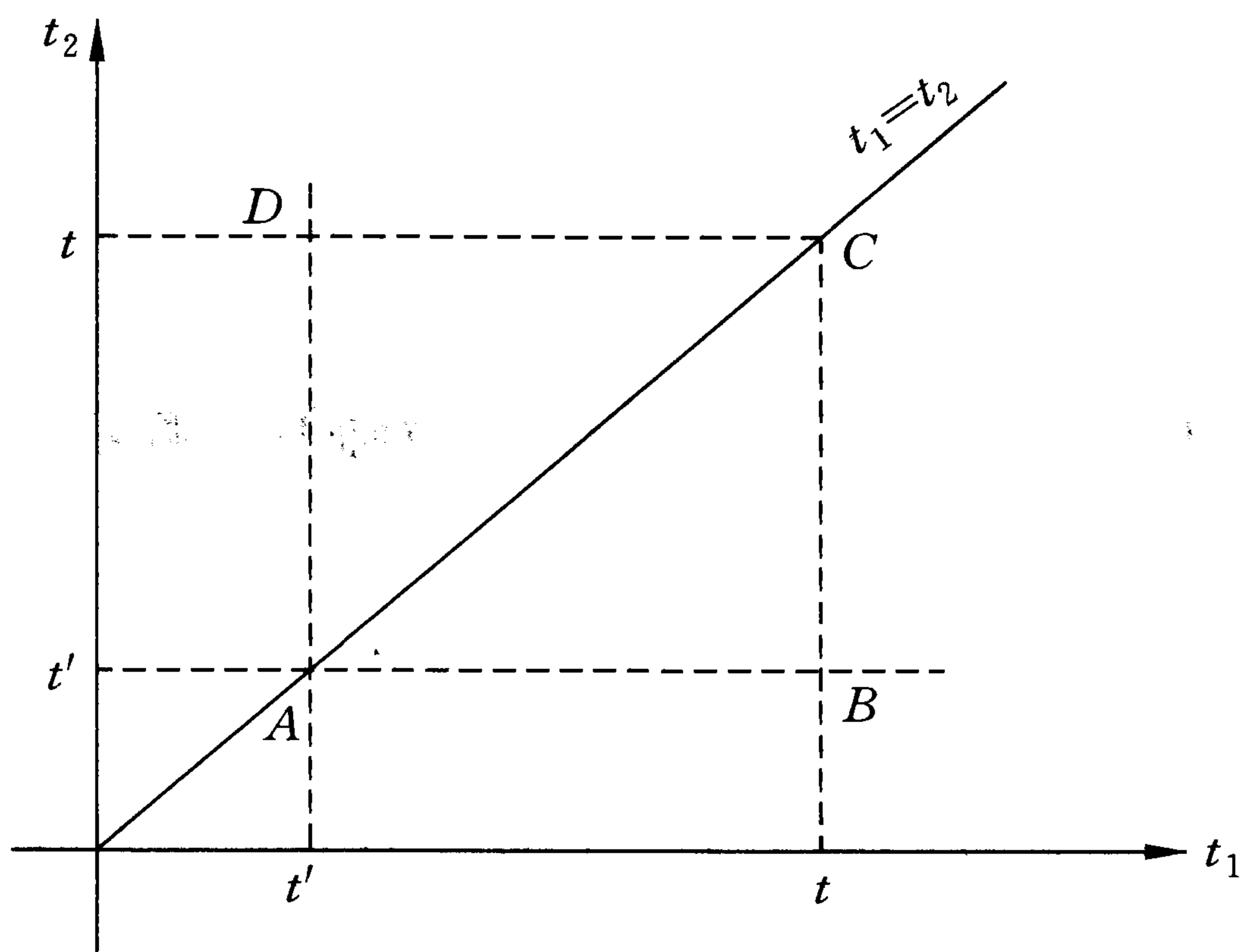


图 2.6.1  $U_2(t, t')$  在  $(t_1, t_2)$  平面上的积分区域

现在我们交换积分号下的  $t_1$  和  $t_2$ , 得到

$$U_2(t, t') = (-i)^2 \int_{t'}^t dt_2 \int_{t'}^{t_2} dt_1 V(t_2)V(t_1) \quad (2.6.36)$$

它的积分区域是图 2.6.1 上另一个直角三角形 CDA, 改变积分的次序, 由“先  $t_1$  后  $t_2$ ”改为“先  $t_2$  后  $t_1$ ”, (2.6.36) 就变为(2.6.35)括号中的第二项, 因为被积函数没有变, 仍是  $U_2(t, t')$ . 注意括号外面的因子  $(\frac{1}{2})$ , 证毕.

上述方法可以推广到(2.6.30)中任意  $n$  的情形, 我们有

$$U_n(t, t') = \frac{(-i)^n}{n!} \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n T[V(t_1)V(t_2)\cdots V(t_n)] \quad (2.6.37)$$



分母中  $n!$  是来自对  $n$  个变量  $t_1, t_2, \dots, t_n$  进行置换的数目, 注意现在各积分的上下限全部统一为  $(t', t)$ , 于是(2.6.29)式的  $U(t, t')$  可以形式地表示为

$$U(t, t') = T \exp \left\{ -i \int_{t'}^t V(t'') dt'' \right\} \quad (2.6.38)$$

在实际计算时, 我们还得回到展开式(2.6.29)和(2.6.37), 并作进一步简化. 例如已知对易子为

$$[V(t_1), V(t_2)] = F(t_1, t_2) \quad (2.6.39)$$

则

$$T[V(t_1)V(t_2)] = V(t_1)V(t_2) - \theta(t_2 - t_1)F(t_1, t_2) \quad (2.6.40)$$

其中

$$\theta(\tau) = \begin{cases} 1, & (\tau > 0) \\ 0, & (\tau < 0) \end{cases} \quad (2.6.41)$$

是阶梯函数. 注意  $F(t_1, t_2)$  还可能是算符, 因此对易子的运算还可以一直做下去, 在量子场论中这种 Dyson 展开要一直做到把“编时乘积”系统地化为“正规乘积”为止, 那时粒子的产生算符总放在湮灭算符的左方, 我们这里不再讨论.

## 2.6D 波算符

回到 2.6A 小节, 在一个具体的碰撞过程中, 对应于  $H = H_c + V_c$  某一特定分解的反应道  $c$ , 在相互作用图景下有一演化算符  $U_c(t, t')$ . 设在时间上无限远过去  $t' \rightarrow -\infty$ , 体系处于  $i$  道, 态记为  $\alpha$ , 而在无限远的将来  $t \rightarrow \infty$ , 体系进入  $f$  道, 态记为  $\beta$ . 现在要研究  $U_c(t, t')$  的宗量趋于无限的极限行为决不是一件平凡的事情, 因为  $U_c(t, t')$  当  $t$  或  $t' \rightarrow \pm\infty$  时有剧烈的振荡, 它是没有定义的.

使它有明确定义的办法不止一种, 例如可以代替平面波, 用波包来描写粒子, 但这在数学上太复杂了, 另一种较简便的方法是使相互作用“绝热地”被引入, 即将  $V_c(t)$  乘上一个“绝热因子”成为

$$V_c(t) \longrightarrow V_c^{\text{ad}}(t) = \exp[-\epsilon |t|] V_c(t) \quad (2.6.42)$$

其中  $\epsilon \rightarrow 0^+$  为无限小的正实数, 则令(2.6.25)中  $t \rightarrow \pm\infty$ ,  $t' \rightarrow t$  时写出

$$U_c(\pm\infty, t) = I - i \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_t^{\pm\infty} \exp(-\epsilon |t'|) V_c(t') U_c(t', t) dt' \quad (2.6.43)$$

同理

$$U_c(t, \pm\infty) = I + i \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_t^{\pm\infty} \exp(-\epsilon |t'|) U_c(t, t') V_c(t') dt' \quad (2.6.44)$$

这两个式子应看成是  $U_c$  的宗量趋于  $\pm\infty$  时的定义式, 由此可以证明它们满足形如(2.6.21~23)那样的“构成群”的性质.

我们特别注意算符  $U_c(0, \pm\infty)$  和  $U_c(\pm\infty, 0)$ . 先看简单情形, 只有一个反应道, 使  $H$  可惟一地分解为

$$H = H_0 + V \quad (2.6.45)$$

记  $H_0$  的本征态为  $\Phi_\alpha$  和  $\Phi_\beta$  等, 先假定  $H$  无束缚态, 定义波算符(Møller算符)为

$$\Omega^{(\pm)} = U(0, \mp\infty) \quad (2.6.46)$$

$$\Omega^{(\pm)\dagger} = U(\mp\infty, 0) \quad (2.6.47)$$

算符  $\Omega^{(\pm)}$  的作用是使两个粒子从分离很远时的  $H_0$  的本征态  $\Phi_\alpha$  演化到  $t = 0$  时刻变为有相互作用  $V$  的  $H$  的本征态:

$$\Psi_\alpha^{(\pm)} = \Omega^{(\pm)} \Phi_\alpha \quad (2.6.48)$$

$\Psi$  的上指标(±)的意义已在第一节讨论(见(2.1.36)式, 那里用的是薛定谔图景), 用 bra 和 ket 记号, 也可写

$$|\Psi_\alpha^{(\pm)}\rangle = \Omega^{(\pm)} |\Phi_\alpha\rangle \quad (2.6.49)$$

$$\langle\Psi_\alpha^{(\pm)}| = \langle\Phi_\alpha| \Omega^{(\pm)\dagger} \quad (2.6.50)$$

于是波算符在自由态间的矩阵元是

$$\langle\Phi_\beta| \Omega^{(\pm)} |\Phi_\alpha\rangle = \langle\Phi_\beta| \Psi_\alpha^{(\pm)}\rangle \quad (2.6.51)$$

$$\langle\Phi_\beta| \Omega^{(\pm)\dagger} |\Phi_\alpha\rangle = \langle\Psi_\beta^{(\pm)}|\Phi_\alpha\rangle \quad (2.6.52)$$

现在进一步研究波算符的性质, 因为

$$\langle\Phi_\beta|\Phi_\alpha\rangle = \delta_{\beta\alpha} \quad (2.6.53)$$

由(2.6.49)式可见

$$\Omega^{(\pm)} = \sum_\alpha |\Psi_\alpha^{(\pm)}\rangle \langle\Phi_\alpha| \quad (2.6.54)$$

$$\Omega^{(\pm)\dagger} = \sum_{\beta} |\Phi_{\beta}\rangle \langle \Psi_{\beta}^{(\pm)}| \quad (2.6.55)$$

则

$$\Omega^{(\pm)\dagger} \Omega^{(\pm)} = I \quad (2.6.56)$$

其中已用了正交归一关系

$$\langle \Psi_{\beta}^{(\pm)} | \Psi_{\alpha}^{(\pm)} \rangle = \delta_{\beta\alpha} \quad (2.6.57)$$

和完备性公式

$$\sum_{\alpha} |\Phi_{\alpha}\rangle \langle \Phi_{\alpha}| = I \quad (2.6.58)$$

(2.6.56)的意义是  $\Omega^{(\pm)}$  保持一个态矢的长度不变,事实上

$$\langle \Omega^{(\pm)} \Psi | \Omega^{(\pm)} \Psi \rangle = \langle \Psi | \Omega^{(\pm)\dagger} \Omega^{(\pm)} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (2.6.59)$$

另一方面,我们来计算

$$\begin{aligned} \Omega^{(\pm)} \Omega^{(\pm)\dagger} &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} |\Psi_{\beta}^{(\pm)}\rangle \langle \Phi_{\beta} | \Phi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}^{(\pm)}| \\ &= \sum_{\alpha} |\Psi_{\alpha}^{(\pm)}\rangle \langle \Psi_{\alpha}^{(\pm)}| \end{aligned} \quad (2.6.60)$$

假定  $H$  可能有一些束缚态,其态矢记为  $|\Psi^{(B)}\rangle$ ,则完备性关系应为

$$\sum_{\alpha} |\Psi_{\alpha}^{(\pm)}\rangle \langle \Psi_{\alpha}^{(\pm)}| + \sum_B |\Psi^{(B)}\rangle \langle \Psi^{(B)}| = I \quad (2.6.61)$$

(回忆在 Levinson 定理的证明中用到过这一思想). 引入一个到  $H$  的一切束缚态的投影算符  $\Lambda$ :

$$\Lambda = \sum_B |\Psi^{(B)}\rangle \langle \Psi^{(B)}| \quad (2.6.62)$$

则

$$\Omega^{(\pm)} \Omega^{(\pm)\dagger} = I - \Lambda \quad (2.6.63)$$

比较(2.6.56)和(2.6.63)可见,波算符  $\Omega^{(\pm)}$  一般不是么正算符( $\Omega^{(\pm)\dagger} \neq (\Omega^{(\pm)})^{-1}$ ). 这一性质与演化算符  $U(t, t')$  当宗量为有限时总是么正算符的性质是很不相同的.

其次,我们注意

$$E_{\alpha} \Psi_{\alpha}^{(\pm)} = H \Psi_{\alpha}^{(\pm)} = H \Omega^{(\pm)} \Phi_{\alpha} \quad (2.6.64)$$

又可写出

$$E_\alpha \Psi_\alpha^{(\pm)} = \Omega^{(\pm)} E_\alpha \Phi_\alpha = \Omega^{(\pm)} H_0 \Phi_\alpha \quad (2.6.65)$$

因为 $\{\Phi_\alpha\}$ 构成一完备集合,就有算符等式

$$H\Omega^{(\pm)} = \Omega^{(\pm)} H_0 \quad (2.6.66)$$

取厄密共轭,因 $H_0$ 和 $H$ 假定为厄密算符,便得到

$$\Omega^{(\pm)\dagger} H = H_0 \Omega^{(\pm)\dagger} \quad (2.6.67)$$

于是,如 $\Psi$ 是 $H$ 的对应于能量为 $E$ 的本征态,可写出

$$H_0 \Omega^{(\pm)\dagger} \Psi = E \Omega^{(\pm)\dagger} \Psi \quad (2.6.68)$$

特别地说,如 $E$ 对应于 $H$ 的一个束缚态 $\Psi^{(B)}$ 的能量,它就不属于 $H_0$ 的谱,则(2.6.68)式要成立,只有一种可能,即 $\Omega^{(\pm)\dagger} \Psi^{(B)}$ 是一零矢量:

$$\Omega^{(\pm)\dagger} |\Psi^{(B)}\rangle = 0 \quad (2.6.69)$$

它表示 $\Omega^{(\pm)\dagger}$ 能湮灭 $H$ 的束缚态 $\Psi^{(B)}$ ,一般地由(2.6.62)式可写出

$$\Omega^{(\pm)\dagger} \Lambda = 0 \quad (2.6.70)$$

现在把上述讨论推广到一般情形,设总哈密顿量 $H$ 可以按各种反应道 $c$ 分解:

$$H = H_c + V_c \quad (2.6.71)$$

引入道 $c$ 的投影算符

$$\Lambda_c = \sum_\gamma |\Phi_{c,\gamma}\rangle \langle \Phi_{c,\gamma}| \quad (2.6.72)$$

注意2.6A小节最后的讨论,属于 $c$ 道的态 $\{\Phi_{c,\gamma}\}$ 一般不一定构成完备系,故 $\Lambda_c$ 一般不为 $I$ ,我们称 $R_c$ 为 $c$ 道的“道空间”,它包含出现在(2.6.72)式求和中那些 $\Phi_{c,\gamma}$ 态,再定义 $c$ 道的波算符为

$$\Omega_c^{(\pm)} = U_c(0, \mp\infty) \Lambda_c \quad (2.6.73)$$

因 $\Lambda_c^\dagger = \Lambda_c$ ,  $U_c^\dagger(0, \mp\infty) = U_c(\mp\infty, 0)$ ,我们有

$$\Omega_c^{(\pm)\dagger} = \Lambda_c U_c(\mp\infty, 0) \quad (2.6.74)$$

由(2.6.73)式可见 $\Omega_c^{(\pm)}$ 只作用在道空间 $R_c$ ,因此如只考虑在(2.6.72)中出现的那些态 $\Phi_n \equiv \Phi_{c,\gamma}$ ,便可将从 $t = -\infty$ 的 $\Phi_n$ 出发而演化到 $t = 0$ 时刻的 $H$ 的本征态 $\Psi_n^{(\pm)}$ 记为

$$\Psi_n^{(\pm)} = \Omega_c^{(\pm)} \Phi_n \quad (2.6.75)$$

特别地说,对初态道  $a \equiv (i, \alpha)$  和末态道  $b \equiv (f, \beta)$ , 有

$$\Psi_a^{(\pm)} = \Omega_i^{(\pm)} \Phi_a \quad (2.6.76)$$

$$\Psi_b^{(\pm)} = \Omega_f^{(\pm)} \Phi_b \quad (2.6.77)$$

类似地有

$$\langle \Psi_n^{(\pm)} | = \langle \Phi_n | \Omega_c^{(\pm)\dagger} \quad (2.6.78)$$

等. 因为  $\Omega_c^{(\pm)}$  只作用在道空间  $R_c$ , 前面(2.6.56)式现在应推广为

$$\Omega_c^{(\pm)\dagger} \Omega_c^{(\pm)} = \Lambda_c \quad (2.6.79)$$

让我们来研究属于不同反应道的波算符. 首先, 对应于不同反应道  $c$  和  $c'$  的“自由”哈密顿量  $H_c$  和  $H_{c'}$ , 其各自的本征态一般并不正交:

$$\langle \Phi_{n'} | \Phi_n \rangle = \langle \Phi_{c', \nu'} | \Phi_{c, \nu} \rangle \neq 0 \quad (2.6.80)$$

特别地说, 对应于初态道和末态道的  $H_i$  和  $H_f$ , 我们有

$$\langle \Phi_b | \Phi_a \rangle = \langle \Phi_{f, \beta} | \Phi_{i, \alpha} \rangle \neq 0 \quad (2.6.81)$$

这与只有一个反应道时的公式(2.6.53)明显不同. 因此一般地说, 属于两个反应道的投影算符  $\Lambda_c$  和  $\Lambda_{c'}$  有性质

$$\Lambda_c \Lambda_{c'} \neq 0 \quad (2.6.82)$$

然而, 另一方面, 方程(2.6.57)却可以推广到多道的情形:

$$\langle \Psi_b^{(\pm)} | \Psi_a^{(\pm)} \rangle = \delta_{ba} \quad (2.6.83)$$

这是因为: 不论我们如何去求解这个总问题, 即使我们选取的作为参考的初态道和末态道并不正交(如(2.6.81)所示), 我们得到的  $H$  的严格解总构成一正交、归一的完备系; 就是说, 一个从  $\Phi_a$  演化过来的严格解必定与  $\Phi_b$  ( $b \neq a$ ) 对应的严格解正交. (2.6.83)式的严格证明超出本书范围, 今从略.

回到波算符, 从(2.6.73、74、79)和(2.6.83), 有

$$\Omega_c^{(\pm)\dagger} \Omega_c^{(\pm)} = \Lambda_c \delta_{c'c} \quad (2.6.84)$$

它应看作是(2.6.56)式在多道情形下之推广.

为了推广(2.6.63)式, 我们再次注意(2.6.83)式, 其中总哈密顿  $H$  的本征态  $\Psi_n^{(\pm)}$  都能在  $t \rightarrow \pm\infty$  时分解为由  $c$  或  $c'$  所标记的二粒子或多粒子体系, 这就把  $H$  的束缚态  $\Psi^{(B)}$  (体系中所有粒子都束缚在一起) 排除在外. 由此可见从(2.6.63)式推广的完备性关系应该是

$$\sum_c \Omega_c^{(\pm)} \Omega_c^{(\pm)\dagger} = 1 - \Lambda \quad (2.6.85)$$

$\Lambda$  仍由(2.6.62)式定义. 我们再次强调, (2.6.85)式中对  $c$  求和时包括一切反应道, 包括反应中一切“基本”粒子都是自由的状态在内, 但是不包括  $H$  的束缚态.

我们也可以推广(2.6.66)式. 从  $H$  和  $H_c$  的薛定谔方程可得

$$H\Omega_c^{(\pm)} = \Omega_c^{(\pm)}H_c \quad (2.6.86)$$

由此可证  $\Omega_c^{(\pm)\dagger}$  能够湮灭  $H$  的束缚态, 即

$$\Omega_c^{(\pm)\dagger} \Lambda = 0 \quad (2.6.87)$$

下面略去证明, 写出多道情形下的 Lippmann-Schwinger 方程

$$\Psi_n^{(\pm)} = \Phi_n + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E_n - H_c \pm i\epsilon} V_c \Psi_n^{(\pm)} \quad (2.6.88)$$

它是单道情形下方程(2.1.27)式的推广, 其形式解为

$$\Psi_n^{(\pm)} = \Phi_n + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E_n - H \pm i\epsilon} V_c \Phi_n \quad (2.6.89)$$

它是单道情形下(2.1.46)式的推广.

## 2.6E S 矩阵

前面的波算符是由演化算符  $U(t, t')$  中一个时间宗量趋于  $\infty$  或  $-\infty$  而定义的, 现在让两个时间宗量都趋于无限 ( $t' \rightarrow -\infty, t \rightarrow \infty$ ) 而定义一个  $S$  算符, 它的矩阵元在理论与实验的联系上显得更为直接.

先考虑只有一个反应道的简单情形, 总哈密顿  $H$  分解为渐近自由的哈密顿  $H_0$  与相互作用  $V$  之和, 在相互作用图景下定义  $S$  算符:

$$S = U(\infty, 0)U(0, -\infty) = \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} \quad (2.6.90)$$

它作用在  $H_0$  的一系列本征态上, 给出  $S$  矩阵元

$$\langle \beta | S | \alpha \rangle \equiv \langle \Phi_\beta | S | \Phi_\alpha \rangle = \langle \Phi_\beta | \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} | \Phi_\alpha \rangle \quad (2.6.91)$$

或

$$\langle \beta | S | \alpha \rangle = \langle \Psi_\beta^{(-)} | \Psi_\alpha^{(+)} \rangle \quad (2.6.92)$$

(已用(2.6.49)和(2.6.50)). 注意  $S$  矩阵元是与时间无关的, 它表示在态矢  $\Psi_\alpha^{(+)}$  中找到态  $\Psi_\beta^{(-)}$  的几率幅,  $\Psi_\alpha^{(+)}$  和  $\Psi_\beta^{(-)}$  都是  $H$  的严格解, 虽然它们

分别从渐近自由的  $\Phi_\alpha$  和  $\Phi_\beta$  ( $H_0$  的本征态) 演化过来.

现在证明  $S$  算符是幺正的.

$$\begin{aligned} \text{证} \quad S^\dagger S &= \Omega^{(+)\dagger} \Omega^{(-)} \Omega^{(-)\dagger} \Omega^{(+)} \\ &= \Omega^{(+)\dagger} (1 - \Lambda) \Omega^{(+)} = \Omega^{(+)\dagger} \Omega^{(+)} = I \end{aligned}$$

其中已用了(2.6.63、70)和(2.6.56)等式. 类似地可证

$$S S^\dagger = I$$

故

$$S^\dagger S = S S^\dagger = I \quad (2.6.93)$$

$S$  的幺正性也可通过  $S$  矩阵元来证明, 为此写出

$$\begin{aligned} \langle \beta | S^\dagger S | \alpha \rangle &= \sum_\gamma \langle \beta | S^\dagger | \gamma \rangle \langle \gamma | S | \alpha \rangle \\ &= \sum_\gamma \langle \Psi_\beta^{(+)} | \Psi_\gamma^{(-)} \rangle \langle \Psi_\gamma^{(-)} | \Psi_\alpha^{(+)} \rangle \end{aligned}$$

其中已用了(2.6.92), 再用(2.6.61、62)后, 有

$$\langle \beta | S^\dagger S | \alpha \rangle = \langle \Psi_\beta^{(+)} | (I - \Lambda) | \Psi_\alpha^{(+)} \rangle$$

因为在  $\Lambda$  中出现的束缚态波函数  $\Psi^{(B)}$  与连续谱波函数  $\Psi^{(\pm)}$  彼此正交, 又由正交归一性(2.6.83)式, 就得到

$$\langle \beta | S^\dagger S | \alpha \rangle = \delta_{\beta\alpha} \quad (2.6.94)$$

同理有

$$\langle \beta | S S^\dagger | \alpha \rangle = \delta_{\beta\alpha} \quad (2.6.95)$$

证毕.

注意证明中用到(2.6.56)和(2.6.63)式, 它们又是从(2.6.58)和(2.6.61)式导出来的, 因此可以说,  $S$  算符(或  $S$  矩阵)的幺正性是量子力学中线性叠加原理和几率守恒的表现.

现在我们把上述讨论推广到有多个反应道( $c, c'$ 等)的情况, 定义一族  $S$  算符为

$$S_{c'c} = \Omega_{c'}^{(-)\dagger} \Omega_c^{(+)} \quad (2.6.96)$$

特别地, 对由  $i$  道到  $f$  道的  $S$  算符是

$$S_{fi} = \Omega_f^{(-)\dagger} \Omega_i^{(+)} \quad (2.6.97)$$

将  $S$  算符夹在两个渐近自由态  $|a\rangle$  和  $|b\rangle$  之间, 给出  $S$  矩阵元

$$\langle b | S | a \rangle \equiv \langle f\beta | S_{fi} | i\alpha \rangle = \langle \Phi_{f,\beta} | S_{fi} | \Phi_{i,\alpha} \rangle$$

$$\begin{aligned}
 &= \langle \Phi_b | S_{fi} | \Phi_a \rangle = \langle \Phi_b | \Omega_f^{(-)\dagger} \Omega_i^{(+)} | \Phi_a \rangle \\
 &= \langle \Psi_b^{(-)} | \Psi_a^{(+)} \rangle
 \end{aligned} \tag{2.6.98}$$

这是对单道情况下(2.6.92)式的推广.

回到(2.6.96)式定义的  $S_{cc}$ , 用公式(2.6.85、87)和(2.6.84), 我们有

$$\begin{aligned}
 \sum_c S_{f'c} S_{fc}^\dagger &= \sum_c \Omega_{f'}^{(-)\dagger} \Omega_c^{(+)} \Omega_c^{(+)\dagger} \Omega_f^{(-)} \\
 &= \Omega_{f'}^{(-)\dagger} (I - \Lambda) \Omega_f^{(-)} \\
 &= \Omega_{f'}^{(-)\dagger} \Omega_f^{(-)} = \Lambda_f \delta_{f'f}
 \end{aligned} \tag{2.6.99}$$

类似地

$$\sum_c S_{a'c}^\dagger S_{ci} = \Lambda_i \delta_{a'i} \tag{2.6.100}$$

用这两个式子可以证明多道情况下  $S$  矩阵的么正性.

$$\begin{aligned}
 \text{证 } \sum_c \langle b | S_{a'c}^\dagger S_{ci} | a \rangle &= \sum_c \sum_\gamma \langle \Phi_{f,\beta} | S_{a'c}^\dagger | \Phi_\gamma \rangle \langle \Phi_\gamma | S_{ci} | \Phi_{i,\alpha} \rangle \\
 &= \sum_c \sum_\gamma \langle \Phi_{f,\beta} | S_{a'c}^\dagger | \Phi_{c,\gamma} \rangle \langle \Phi_{c,\gamma} | S_{ci} | \Phi_{i,\alpha} \rangle \\
 &= \sum_{n=(c,\gamma)} \langle b | S_{a'c}^\dagger | n \rangle \langle n | S_{ci} | a \rangle \\
 &= \delta_{ba}
 \end{aligned} \tag{2.6.101a}$$

其中先插入一套完备系  $\{\Phi_\gamma\}$ , 然后利用波算符中包含的投影算符  $\Lambda_c$ , 使  $\{\Phi_\gamma\}$  缩小到只包含  $c$  道中的态  $\Phi_{c,\gamma}$  (见(2.6.11)后的讨论), 最后一步用(2.6.100)式. 类似地

$$\sum_c \langle b | S_{f'c} S_{fc}^\dagger | a \rangle = \delta_{ba} \tag{2.6.101b}$$

证毕.

注意多道情况下(2.6.100)和(2.6.101)比单道情况的(2.6.94)和(2.6.95)式复杂得多, 但为简化记号, 不妨仍把它们统一为如下的  $S$  矩阵么正性公式:

$$\begin{aligned}
 \sum_n \langle b | S^\dagger | n \rangle \langle n | S | a \rangle &= \delta_{ba} \\
 \sum_n \langle b | S | n \rangle \langle n | S^\dagger | a \rangle &= \delta_{ba}
 \end{aligned} \tag{2.6.102}$$

我们进一步改写  $S$  矩阵元的形式, 为以后应用作准备:



$$\begin{aligned}
\langle b | S | a \rangle &= \langle \Psi_b^{(-)} | \Psi_a^{(+)} \rangle \\
&= \langle \Psi_b^{(+)} | \Psi_a^{(+)} \rangle + \langle \Psi_b^{(-)} - \Psi_b^{(+)} | \Psi_a^{(+)} \rangle \\
&= \delta_{ba} + \langle \Psi_b^{(-)} - \Psi_b^{(+)} | \Psi_a^{(+)} \rangle
\end{aligned}$$

其中已用了(2.6.98)和(2.6.57)式,再用(2.6.89)式的厄密共轭(假定  $H$  为厄密算符),上式便化为

$$\begin{aligned}
\langle b | S | a \rangle &= \delta_{ba} + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left\langle \Phi_b \left| V_f \left( \frac{1}{E_b - H + i\epsilon} - \frac{1}{E_b - H - i\epsilon} \right) \right| \Psi_a^{(+)} \right\rangle \\
&= \delta_{ba} + \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left( \frac{1}{E_b - E_a + i\epsilon} - \frac{1}{E_b - E_a - i\epsilon} \right) \langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle \\
&= \delta_{ba} - \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{2i\epsilon}{(E_b - E_a)^2 + \epsilon^2} \langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle
\end{aligned}$$

利用  $\delta$  函数的表示式

$$\delta(E_a - E_b) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\epsilon}{\pi[(E_b - E_a)^2 + \epsilon^2]} \quad (2.6.103)$$

于是得到  $S$  矩阵元的新表示式

$$\langle b | S | a \rangle = \delta_{ba} - 2\pi i \delta(E_a - E_b) \langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle \quad (2.6.104)$$

类似地可以证明

$$\langle b | S | a \rangle = \delta_{ba} - 2\pi i \delta(E_a - E_b) \langle \Psi_b^{(-)} | V_i | \Phi_a \rangle \quad (2.6.105)$$

比较这两个式子可知,在“能壳”上,即  $E_a = E_b$  时(此时  $\delta(E_a - E_b) = \infty!$ )有关系

$$\langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle = \langle \Psi_b^{(-)} | V_i | \Phi_a \rangle \quad (2.6.106)$$

还要注意,此两式中前一项  $\delta_{ba}$  与后项中  $\delta(E_a - E_b)$  是很不一样的,当  $a \neq b$  时,  $\delta_{ba} = 0$ , 表示不同态之间的跃迁为零,仅在纯弹性散射下考虑前向( $\theta = 0$ )散射时这一项才存在,而  $\delta(E_a - E_b)$  则保证在  $a \rightarrow b$  的跃迁过程中体系的总能量守恒.

## 2.6F 跃迁矩阵

仿照纯弹性散射情况下之(2.1.40)式,现在定义多道情况下(在质壳上)的跃迁算符  $\mathcal{T}_f(E)$  为

$$\mathcal{T}_{fi}(E) = V_i + V_f \frac{1}{E - H + i\epsilon} V_i \quad (2.6.107)$$

记  $\langle b | \mathcal{T} | a \rangle = \delta(\mathbf{P}_a - \mathbf{P}_b) T_{ba}$ , 分出总动量守恒后的  $T_{ba}$  称为约化  $T$  矩阵元, 但为方便起见, 仍常称跃迁算符  $\mathcal{T}$  的矩阵为  $T$  矩阵. 今计算此算符在两个渐近自由态  $\Phi_a \equiv \Phi_{i,\alpha}$  和  $\Phi_b \equiv \Phi_{f,\beta}$  间的  $\mathcal{T}$  矩阵元:

$$\langle b | \mathcal{T} | a \rangle \equiv \langle f, \beta | \mathcal{T} | i, \alpha \rangle = \langle \Phi_b(E) | \mathcal{T}_{fi}(E) | \Phi_a(E) \rangle$$

下面证明, 在质壳上 ( $E_a = E_b = E$ ) 它就是(2.6.106)式, 即

$$\langle b | \mathcal{T} | a \rangle = \langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle = \langle \Psi_b^{(-)} | V_i | \Phi_a \rangle \quad (2.6.108)$$

证 我们先证明在质壳上有公式:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_b | V_i | \Phi_a \rangle &= \langle \Phi_b | H - H_i | \Phi_a \rangle = \langle \Phi_b | H - E | \Phi_a \rangle \\ &= \langle (H - E)\Phi_b | \Phi_a \rangle = \langle V_f \Phi_b | \Phi_a \rangle \\ &= \langle \Phi_b | V_f | \Phi_a \rangle \end{aligned} \quad (2.6.109)$$

然后用(2.6.89)式, 再用(2.6.109)及(2.6.107)式, 就看到

$$\begin{aligned} \langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle &= \left\langle \Phi_b \left| V_f + V_f \frac{1}{E - H + i\epsilon} V_i \right| \Phi_a \right\rangle \\ &= \left\langle \Phi_b \left| V_i + V_f \frac{1}{E - H + i\epsilon} V_i \right| \Phi_a \right\rangle \\ &= \langle \Phi_b | \mathcal{T}_{fi} | \Phi_a \rangle = \langle b | \mathcal{T} | a \rangle \end{aligned}$$

同理可证(2.6.108)的第二个等式, 证毕.

于是(2.6.104)和(2.6.105)式可统一写成:

$$\langle b | S | a \rangle = \delta_{ba} - 2\pi i \delta(E_a - E_b) \langle b | \mathcal{T} | a \rangle \quad (2.6.110)$$

它表示  $S$  矩阵元除在对角元部分含有一项  $\delta_{ba}$  之外, 其非平凡的信息全包含在  $T$  矩阵元之中.

## § 2.7 跃迁几率和截面

### 2.7A 跃迁几率和黄金规则

设体系在总哈密顿量  $H = H_f + V_f$  作用下处于薛定谔图景中的态  $|\Psi_S(t)\rangle$ , 今问在时间  $t$  找到它处于(不含时间的)  $H_f$  的本征态(定态)

$\Phi_b \equiv \Phi_{f, \beta}$  的几率  $W$  是多少?

按量子力学原理,  $W$  等于几率幅的平方:

$$W = \left| \left\langle \Phi_b \exp\left(-\frac{iE_b t}{\hbar}\right) \middle| \Psi_S(t) \right\rangle \right|^2 \quad (2.7.1)$$

记  $\Psi_b(t)$  为相互作用图景中在  $f$  道的态矢, 并设它是由  $i$  道的态矢  $\Psi_a(t)$  演化过来的 ( $H = H_i + V_i$ ):

$$\begin{aligned} \Psi_S(t) &= \exp\left(-\frac{iH_f t}{\hbar}\right) \Psi_b(t) = \exp\left(-\frac{iH_f t}{\hbar}\right) U_f(t, 0) \Psi_b(0) \\ &= \exp\left(-\frac{iH_f t}{\hbar}\right) U_f(t, 0) U_i(0, t') \Psi_a(t') \end{aligned} \quad (2.7.2)$$

(2.7.2)式代入(2.7.1)式后得到

$$W_{ba}(t, t') = \left| \langle \Phi_b | U_f(t, 0) U_i(0, t') | \Psi_a(t') \rangle \right|^2 \quad (2.7.3)$$

这是体系从  $t'$  时刻的态矢  $\Psi_a(t')$  出发, 演化到  $t$  时刻的  $\Phi_b$  态的几率. 让  $t' \rightarrow -\infty$ ,  $t \rightarrow \infty$ , 再插入两个道的投影算符  $\Lambda_i$  和  $\Lambda_f$  (见(2.6.73)和(2.6.74)), 用(2.6.98)式后就得到从道  $a \equiv (i, \alpha)$  到  $b \equiv (f, \beta)$  道的跃迁几率为

$$\lim_{t' \rightarrow -\infty, t \rightarrow \infty} W_{ba}(t, t') = \left| \langle b | S | a \rangle \right|^2 \quad (2.7.4)$$

(已用了  $\Psi_a(t') \xrightarrow{t' \rightarrow -\infty} \Phi_a$ ). 这个无量纲的几率是一个发散量, 因为  $\langle b | S | a \rangle$  包含着一个表示能量守恒的  $\delta$  函数(见(2.6.110)式). 这并不奇怪, 它不过告诉我们, 在无限长的时间内, 从  $a \rightarrow b$  的跃迁可以发生无限多次! 有物理意义的量应该是考虑单位时间的跃迁几率, 它定义为

$$\begin{aligned} w_{ba} &= \frac{d}{dt} W_{ba}(t, -\infty) \\ &= \frac{d}{dt} \lim_{t' \rightarrow -\infty} \left| \langle \Phi_b | U_f(t, 0) U_i(0, t') | \Psi_a(t') \rangle \right|^2 \\ &= \frac{d}{dt} \left| \langle \Phi_b | U_f(t, 0) | \Psi_a^{(+)} \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (2.7.5)$$

(已用了(2.6.73)和(2.6.76)式), 进一步改写此式为

$$w_{ba} = \frac{d}{dt} \left[ \langle \Phi_b | U_f(t, 0) | \Psi_a^{(+)} \rangle \langle \Phi_b | U_f(t, 0) | \Psi_a^{(+)} \rangle^* \right]$$

$$= \left\langle \Phi_b \left| \frac{\partial U_f(t, 0)}{\partial t} \right| \Psi_a^{(+)} \right\rangle \langle \Phi_b | U_f(t, 0) | \Psi_a^{(+)} \rangle^* + \text{c. c.}$$

(c. c. 表示与前一项复共轭的项). 用(2.6.14)、(2.6.15)、(2.6.20)、(2.6.24)和(2.6.17)后有

$$U_f(t, 0) = \exp\left(\frac{iH_f t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} U_f(t, 0) = -\frac{i}{\hbar} \exp\left(\frac{iH_f t}{\hbar}\right) V_f \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) \quad (2.7.6)$$

因  $\Phi_b$  和  $\Psi_a^{(+)}$  分别是  $H_f$  和  $H$  的本征态, 而  $E_a = E_b$ , 故

$$w_{ba} = -\frac{i}{\hbar} \left\langle \Phi_b \left| \exp\left(\frac{iH_f t}{\hbar}\right) V_f \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) \right| \Psi_a^{(+)} \right\rangle \cdot$$

$$\left\langle \Phi_b \left| \exp\left(\frac{iH_f t}{\hbar}\right) \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) \right| \Psi_a^{(+)} \right\rangle^* + \text{c. c.}$$

$$= -\frac{i}{\hbar} \langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle \langle \Phi_b | \Psi_a^{(+)} \rangle^* + \text{c. c.}$$

但

$$\begin{aligned} \langle \Phi_b | \Psi_a^{(+)} \rangle &= \langle \Psi_b^{(+)} | \Psi_a^{(+)} \rangle + \langle \Phi_b - \Psi_b^{(+)} | \Psi_a^{(+)} \rangle \\ &= \delta_{ba} - \left\langle \Phi_b \left| V_f \frac{1}{E_b - H - i\epsilon} \right| \Psi_a^{(+)} \right\rangle \\ &= \delta_{ba} - \frac{1}{E_b - E_a - i\epsilon} \langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle \quad (2.7.7) \end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned} w_{ba} &= -\frac{i}{\hbar} \langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle \left[ \delta_{ba} - \frac{1}{E_b - E_a + i\epsilon} \langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle^* \right] + \text{c. c.} \\ &= \frac{2}{\hbar} \text{Im}[\langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle] \delta_{ba} \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} |\langle \Phi_b | V_f | \Psi_a^{(+)} \rangle|^2 \left( \frac{1}{E_b - E_a - i\epsilon} - \frac{1}{E_b - E_a + i\epsilon} \right) \\ &= \frac{2}{\hbar} \text{Im}\langle b | \mathcal{T} | a \rangle \delta_{ba} + \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_b - E_a) |\langle b | \mathcal{T} | a \rangle|^2 \quad (2.7.8) \end{aligned}$$

最后一步用了(2.6.108)式和与(2.6.103)一样的步骤引入  $\delta$  函数. 对于量子碰撞跃迁, 我们实际上要考虑一种连续谱问题, 例如末态  $\Phi_b$  不是一个态, 而是一群态, 它们既与初态  $\Phi_a$  有几乎一样的能量, 但又不包括与

$\Phi_a$  全同的态(即不包括同样方向的平面波,这样才算是一种真正的跃迁过程),于是(2.7.8)式右端的第一项当  $b \neq a$  时可弃去,而得到“单位时间内由  $a$  态到那一群态  $\Phi_b$  的跃迁几率”或“跃迁速率”等于

$$\omega = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_b \delta(E_b - E_a) |\langle b | \mathcal{T} | a \rangle|^2 \quad (2.7.9)$$

为处理对  $b$  态的求和,我们引入“态密度”  $\rho_b(E) = \frac{dN_b}{dE}$ , 即  $\rho_b dE$  表示在能区  $(E, E+dE)$  内态  $\Phi_b$  的数目. 假设  $\rho_b(E)$  和  $\langle b | \mathcal{T} | a \rangle$  都是在(小的)能量区间  $(E_b - \Delta E_b, E_b + \Delta E_b)$  内随  $E$  缓变的函数,于是跃迁速率

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{b'} \int_{E_b - \Delta E_b}^{E_b + \Delta E_b} \delta(E' - E_a) |\langle b' | \mathcal{T} | a \rangle|^2 \rho_{b'}(E') dE' \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{b'} \rho_{b'}(E) |\langle b' | \mathcal{T} | a \rangle|^2 \end{aligned} \quad (2.7.10)$$

其中对  $b'$  求和表示  $b$  中除能量  $E_b$  外的一切指标( $E_b$  已另外分出作连续谱积分). 注意最后虽然  $\delta$  函数不见了,但要始终记住  $\langle b' | \mathcal{T} | a \rangle$  是在能壳  $E_a = E_b = E$  上计算的.

(2.7.10)是一般量子碰撞中从  $a$  道到  $b$  道(连续谱)单位时间跃迁几率的严格表达式. 当考虑一个道  $H = H_0 + V$  而相互作用  $V$  很小时,在微扰论的一级近似下,可取  $\mathcal{T} = V$  (见(2.6.107)和(2.1.40))于是(2.7.10)近似地成为

$$\omega^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{b'} \rho_{b'}(E) |\langle b' | V | a \rangle|^2 \quad (2.7.11)$$

让我们作几点讨论:

(1) 虽然末态作连续谱处理,但态仍归一化为 1:  $\langle a | b \rangle = \delta_{ab}$ . 故矩阵元  $\langle b' | \mathcal{T} | a \rangle$  或  $\langle b' | V | a \rangle$  具有能量量纲.  $\rho(E) = \frac{dN}{dE}$  具有能量倒数的量纲,于是  $\omega$ (跃迁几率/秒)有  $[T]^{-1}$  的量纲. 下一节中我们会改变态的归一化系数,因而改变矩阵元的量纲,同时改变  $\rho(E)$  与求和的计算方法,但保持  $\omega$  的数值不变.

(2) 公式(2.7.10)和(2.7.11)是用相互作用图景推得的,其中  $V_f(t)$  是  $V_I$ (见(2.6.17)式),但在一阶微扰论中,公式(2.7.11)中(不含时间)的  $V$  就可以理解为薛定谔图景下的  $V$ ,同时态  $|i\rangle = |\Phi_{i,a}\rangle$  作为相互作用图景中的态矢,也就是薛定谔图景中(不含时间的)  $H_0$  的定态(波函数).

(3) 这个  $V$  本身也可以显含时间,  $V = V(t)$ , 即我们可以讨论一个含时间的微扰问题, 这就使公式(2.7.11)不仅可用于量子碰撞, 而且可用于原子中的电磁跃迁研究, 那时  $V(t)$  不但需作频谱的 Fourier 分解, 且还包含光子的湮灭或产生算符, 我们将在第四章讨论. 由于(2.7.11)这个一级含时微扰论公式的广泛用途, 常被称为(费米)黄金规则, 见(4.4.5)式. 它最早是由 Dirac 导出的(见习题 2.9).

(4) 前面推导过程中假定末态是连续谱, 这不是必要的. 事实上, 也可能初态是连续谱或  $V(t)$  是连续谱. 重要的是: 初态、末态和相互作用三者之中, 至少必有一个是连续谱, 否则跃迁便不能发生. 一个严格周期性的电磁场加到一荷电量子定态体系上时, 只能使它在两个定态间来回振荡, 而不会引起辐射(见习题 2.10).

(5) 注意跃迁速率  $w$  是从  $w = \frac{\Delta W}{\Delta t}$  推出来的, 几率  $W$  在长时间看是一个发散量(见(2.7.4)), 所以时间间隔  $\Delta t$  不能太大, 以使  $w$  从一级微扰论算出来后给出的  $\Delta W \approx w\Delta t \ll 1$ ; 另一方面,  $\Delta t$  又不能太小, 这是因为在形式计算中要求  $\Delta t \rightarrow \infty$  才能给出表示能量守恒的  $\delta$  函数  $\delta(E_b - E_a)$ . 为了使能量守恒至少近似地有意义,  $\Delta t$  应远大于  $\frac{\hbar}{\Delta E}$ ,  $\Delta E$  是分立谱体系的某种特征能量间隔, 例如对氢原子,  $\Delta E \sim \frac{e^2}{a_0}$  ( $a_0$  是玻尔半径), 则  $\frac{\hbar}{\Delta E} \sim 10^{-16}$  秒. 合起来说, 我们要求黄金规则适用的时间间隔  $\Delta t$  是“宏观短而微观长”的, 它满足不等式

$$\frac{1}{w_{fi}^{(1)}} \gg \Delta t \gg \frac{\hbar}{\Delta E} \quad (2.7.12)$$

事实上, 只要相互作用  $V$  较弱, 这条件不难满足. 例如原子发光的平均寿命  $\tau \sim 10^{-8}$  秒, 即跃迁速率  $w \sim \frac{1}{\tau} \sim 10^8$  /秒, 我们取  $\Delta t \sim 10^{-10}$  秒是不难满足(2.7.12)式的.

## 2.7B 重整碰撞的截面

我们讨论非相对论情况下的二体重整碰撞



计算对应于(2.7.9)式跃迁几率  $w$  的截面  $\Delta\sigma$ , 它定义为

$$\Delta\sigma = \frac{\omega}{F_i} \quad (2.7.14)$$

$F_i$  是初态  $i$  道中入射粒子  $A$  相对于靶粒子  $B$  的“流强”，即单位时间内打到单位面积的  $A$  粒子数。 $\Delta\sigma$  作为微观过程几率大小的一种量度，具有面积的量纲。为计算流强  $F_i$ ，需确定  $i$  道入射平面波的归一化系数。如把一个  $A$  粒子放在体积为  $V$  的箱子内，则  $\Phi_i = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(ik_i \cdot r)$ ，它归一化为

1. 设  $A$  相对于  $B$  的速率为  $v_i$ ， $m_i v_i = \hbar k_i$ ， $m_i = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}$  是  $i$  道的约化质量，则流强

$$F_i = \frac{v_i}{V} \quad (2.7.15)$$

第二步来计算(2.7.10)式，当不考虑粒子的自旋，计算末态粒子在  $f$  道立体角  $\Delta\Omega_f$  出射的跃迁速率公式是

$$\omega = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \mathcal{T} | i \rangle|^2 \rho_f(E_f) \Delta\Omega_f \quad (2.7.16)$$

其中

$$\rho_f(E_f) = \frac{dN_f}{dE_f d\Omega_f}$$

$dN_f$  由相空间每个态占据体积  $(2\pi\hbar)^3$  来决定，故

$$dN_f = \frac{V dk_f}{(2\pi)^3} = \frac{V}{(2\pi)^3} k_f^2 dk_f d\Omega_f = \rho_f(E_f) dE_f d\Omega_f$$

因  $E_f = E_C + E_D = \frac{1}{2} \hbar^2 k_f^2 \left( \frac{1}{m_C} + \frac{1}{m_D} \right)$

$$\frac{dE_f}{dk_f} = \frac{\hbar^2 k_f}{m_f} \quad (m_f \text{ 为 } f \text{ 道的约化质量})$$

合并(2.7.14、15)和(2.7.16)式，得过程(2.7.13)的微分截面

$$\frac{\Delta\sigma}{\Delta\Omega} \rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{m_i m_f}{(2\pi)^2 \hbar^4} \frac{k_f}{k_i} |\langle f | \mathcal{T} | i \rangle|^2 V^2$$

右端出现的  $V^2$  实际上与波函数中的归一化因子  $\frac{1}{\sqrt{V}}$  消去，因此我们不妨改变归一化，使  $\langle \Phi_i | \Phi_i' \rangle = \delta(k_i - k_i')$  以适合这里的连续谱情况(见弹性散射 § 2.1)，即取  $\Phi_i = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(ik_i \cdot r)$ ，于是

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^4}{\hbar^4} m_i m_f \frac{k_f}{k_i} |\langle f | \mathcal{T} | i \rangle|^2 \quad (2.7.17)$$

注意现在  $T$  矩阵元  $\langle f | \mathcal{T} | i \rangle$  有量纲 [能量  $\times L^3$ ], 而微分截面  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  具有面积 [ $L^2$ ] 的量纲, 且与波函数的归一化选择无关. 此式适用于非相对性的各种二体重整碰撞, 考虑特例弹性散射时,  $i$  道与  $f$  道重合, 便回到(2.1.34)式.

### 2.7C 光学定理

我们已经知道  $S$  矩阵的么正性, 见(2.6.102)式:

$$\sum_n \langle b | S^\dagger | n \rangle \langle n | S | a \rangle = \delta_{ba} \quad (2.7.18)$$

$$\sum_n \langle b | S | n \rangle \langle n | S^\dagger | a \rangle = \delta_{ba} \quad (2.7.19)$$

它的物理意义是几率守恒. 现在要证明一个光学定理, 它是纯弹性散射情形下(2.3.27)式的推广. 从(2.6.110)式出发:

$$\langle b | S | a \rangle = \delta_{ba} - 2\pi i \delta(E_a - E_b) \langle b | \mathcal{T} | a \rangle \quad (2.6.110)$$

将上式代入(2.7.19), 并利用  $\langle n | S^\dagger | a \rangle = \langle a | S | n \rangle^*$ , 得

$$\begin{aligned} & i\delta(E_b - E_a) [\langle b | \mathcal{T} | a \rangle - \langle a | \mathcal{T} | b \rangle^*] \\ &= 2\pi\delta(E_a - E_b) \sum_n \delta(E_n - E_a) \langle b | \mathcal{T} | n \rangle \langle a | \mathcal{T} | n \rangle^* \end{aligned}$$

当  $E_b \neq E_a$  时给出  $0 = 0$  是平凡的, 仅当在质壳上  $E = E_a = E_b$  时, 有

$$\begin{aligned} & i[\langle b | \mathcal{T} | a \rangle - \langle a | \mathcal{T} | b \rangle^*] \\ &= 2\pi \sum_n \delta(E - E_n) \langle b | \mathcal{T} | n \rangle \langle a | \mathcal{T} | n \rangle^* \end{aligned} \quad (2.7.20)$$

同理, 从(2.7.18)又可得到

$$\begin{aligned} & i[\langle b | \mathcal{T} | a \rangle - \langle a | \mathcal{T} | b \rangle^*] \\ &= 2\pi \sum_n \delta(E - E_n) \langle n | \mathcal{T} | b \rangle^* \langle n | \mathcal{T} | a \rangle \end{aligned} \quad (2.7.21)$$

这是两个关于  $T$  矩阵元的非线性方程, 称为  $T$  矩阵的么正性关系.

考虑  $a = b$  的特殊情形, 则上式给出

$$2\text{Im}\langle a | \mathcal{T} | a \rangle = -2\pi \sum_n \delta(E_n - E) |\langle n | \mathcal{T} | a \rangle|^2 \quad (2.7.22)$$



与(2.7.9)式比较,可见右端等于  $-\hbar \sum_n w_n$ , 而由(2.7.14)式可知  $w_n$  与过程  $a \rightarrow n$  的截面  $\sigma_n$  有联系:  $\sigma_n = \frac{w_n}{F_a}$ ,  $F_a$  为  $a$  道入射粒子的通量流强, 对  $n$  求和后给出  $a$  道入射的总截面

$$\sigma_t = \sum_n \sigma_n = -\frac{2}{\hbar F_a} \text{Im} \langle a | \mathcal{T} | a \rangle \quad (2.7.23)$$

以上是在分立谱( $\langle a | b \rangle = \delta_{ab}$ )中计算,但  $\sigma_t$  是与归一化无关的量,故现在可改变为连续谱归一化:  $\langle a | b \rangle = \delta(k_a - k_b)$ , 则上式中的  $\langle a | \mathcal{T} | a \rangle$  就是(2.1.33)式中与前向弹性散射振幅  $f(0)$  联系的  $\mathcal{T}_{aa}$  矩阵元,所以

$$\sigma_t = \frac{2}{\hbar F_a} \text{Im} \frac{\hbar^2}{(2\pi)^2 m_i} f(0)$$

现在通量  $F_a = v_i (2\pi)^{-3} = \left(\frac{\hbar k_i}{m_i}\right) \frac{1}{(2\pi)^3}$ , 最后有

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k_i} \text{Im} f(0) \quad (2.7.24)$$

这个表达式叫做光学定理,  $a$  道( $A$  入射到  $B$ )前向散射振幅的虚部完全决定了到一切道(弹性散射,非弹性散射,到一切反应道的重整碰撞等等)的截面之总和,这一由  $S$  矩阵么正性得出的结论,不能不使人对量子力学理论的优美留下深刻的印象.

## § 2.8 黑核模型

作为本章的一个小结,让我们来讨论一个简单而又有实际意义的模型——高能碰撞下的黑核模型.

已知当球形方势阱  $V(r)$  是实数时,靶核对入射粒子流犹如一个透明的玻璃球,只能引起衍射即弹性散射. 实际上在碰撞过程中还可能发生非弹性散射或其他反应,即发生粒子从“弹性散射道”被“吸收”掉(即转移出去而进入其他“反应道”)的过程. 为了惟象地描述粒子流部分散射部分被“吸收”的现象,在原子核理论中引入所谓“光学模型”,假设  $V(r)$  是一个复数,让虚数部分承担吸收的作用. 形象地说,靶核成为一个半透明的“灰球”了(见习题 2.11).

随着入射粒子能量的增大,灰球也变得越来越黑,原因是开放的反应道数目越来越多,最后可以假定,入射粒子一碰上靶核就被吸收而没有反

射,下面将看到,这时我们能够很快地算出吸收截面  $\sigma_a$  等于靶核的几何截面  $\pi R^2$ ,同时弹性散射截面  $\sigma_{sc}$  也等于  $\pi R^2$ ,最后总截面  $\sigma_t = \sigma_a + \sigma_{sc} = 2\pi R^2$  (再说明一点,被吸收的粒子还有不大的机会回到原来的弹性道,但这时已失去“记忆”,不再与原来的人射波相干,所以  $\sigma_a$  基本上是反应截面  $\sigma_r$ ,但实验上还有一小部分仍属于弹性散射,而不包括在计算值  $\sigma_{sc}$  之内).

设靶核半径为  $R$ ,入射粒子波数为  $k_a$ ,其在弹性散射道中的总波函数按球面波分解后可写为(见(2.1.28)式):

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[ \exp(ik_a z) + \frac{1}{r} f(\theta) \exp(ik_a r) \right] \quad (2.8.1a)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2k_a r} i^{l+1} \left\{ \exp\left[-i\left(k_a r - \frac{1}{2}l\pi\right)\right] - S_{aa}^l(k_a) \exp\left[i\left(k_a r - \frac{1}{2}l\pi\right)\right] \right\} P_l(\cos\theta) \quad (2.8.1b)$$

其中散射振幅  $f(\theta)$  是纯弹性散射情况下(2.3.17)式的推广:

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik_a} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (S_{aa}^l - 1) P_l(\cos\theta) \quad (2.8.2)$$

代替那时的  $\exp(2i\delta_l)$ ,现在  $S_{aa}^l$  是在“球面波表象”下的对角  $S$  矩阵元。(2.8.1b)式括号内第一项是球面会聚入射波,不受靶核存在的影响,第二项是球面出射波,其振幅  $S_{aa}^l$  才会受靶核影响,作为  $l$  和  $k_a$  的函数,它一般是复数,且  $|S_{aa}^l| \leq 1$ .

计算径向出射的散射波  $\psi_{sc}$  ((2.8.1a)的第二项)的径向流与入射流之比,可得微分散射截面

$$\frac{d\sigma_{sc}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{4k_a^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - S_{aa}^l) P_l(\cos\theta) \right|^2 \quad (2.8.3)$$

(比较(2.3.22)式). 积分得总的弹性散射截面

$$\sigma_{sc} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |1 - S_{aa}^l|^2 \quad (2.8.4)$$

总截面  $\sigma_t$  由公式(2.7.24)及(2.8.2)式算得为

$$\sigma_t = \frac{4\pi}{k_a} \text{Im} f(0) = \frac{2\pi}{k_a^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (1 - \text{Re} S_{aa}^l) \quad (2.8.5)$$

于是吸收截面应等于

$$\sigma_a = \sigma_t - \sigma_x = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1 - |S_{aa}^l|^2) \quad (2.8.6)$$

很明显, 如果  $S_{aa}^l = \exp(2i\delta_l)$  是模为 1 的复数, 则  $\sigma_a = 0$ ,  $\sigma_t = \sigma_x$ , 这是纯弹性散射情形. 现在研究“黑核模型”, 当入射粒子波长  $\lambda$  很小,  $k_a = \frac{2\pi}{\lambda}$  很大, 对于从  $l=0$  到  $l_{\max} = k_a R \gg 1$  的那许多低分波, 可以假定都被核吸收了, 而  $l > l_{\max}$  的高分波则不受影响. 因此不妨设

$$\begin{cases} S_{aa}^l = 0, & (l \leq k_a R) \\ S_{aa}^l = 1, & (l > k_a R) \end{cases} \quad (2.8.7)$$

于是由(2.8.4~6)诸式立刻得出

$$\sigma_x = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{l=0}^{k_a R} (2l+1) \xrightarrow{k_a R \gg 1} \pi R^2 \quad (2.8.8)$$

$$\sigma_a \longrightarrow \pi R^2 \quad (2.8.9)$$

$$\sigma_t \longrightarrow 2\pi R^2 \quad (2.8.10)$$

(2.8.9)式的结果从经典粒子观念很好理解, 但为理解(2.8.8)式, 却需求助于“波粒二重性”. 我们不妨考虑一个光学实验, 将一束平行可见光  $\psi_{\text{inc}}$  (相当于(2.8.1a)式中的第一项)照到一半径为  $R$  的黑盘面上时, 其中一部分波  $\psi_a$  被吸收后, 使盘的背面留下阴影区, 而在前方远处出现衍射现象, 这就相当于现在产生了散射波  $\psi_x$  (见(2.8.1a)式的第二项).  $\psi_x$  与  $\psi_{\text{inc}}$  合起来, 就是总的波场  $\psi^{(+)}$

$$\psi^{(+)} = \psi_{\text{inc}} + \psi_x \quad (2.8.11)$$

现在如果设想把原来被盘吸收掉的波  $\psi_a$  再从盘的背面发出去, 则它与  $\psi_x$  相干的结果将会彼此消掉, 使波场复归于原来的  $\psi_{\text{inc}}$ , 即

$$\psi^{(+)} + \psi_a = \psi_{\text{inc}} \quad (2.8.12)$$

与(2.8.11)式合并后即见

$$\psi_a + \psi_x = 0 \quad (2.8.13)$$

或  $\psi_x = -\psi_a$ , 散射波振幅的绝对值与被吸收的波相等, 不过相位恰好相反, 因  $\sigma_x \propto |\psi_x|^2$ ,  $\sigma_a \propto |\psi_a|^2$ , 这就解释了为什么  $\sigma_x = \sigma_a = \pi R^2$  的缘故.

最后我们略去推导,直接写出黑核模型中短波极限下(2.8.2)式所示的散射振幅角分布表达式(见习题 2.5):

$$f(\theta) = ik_a R^2 \frac{J_1\left(2k_a R \sin \frac{\theta}{2}\right)}{2k_a R \sin \frac{\theta}{2}} \quad (2.8.14)$$

由此算出的角分布  $|f(\theta)|^2$  对应于光学中的 Fraunhofer 衍射图样. 积分得总的弹性散射截面

$$\sigma_x = 2\pi R^2 \int_0^{2k_a R} \frac{J_1^2(x)}{x} dx \lesssim 2\pi R^2 \int_0^\infty \frac{J_1^2(x)}{x} dx \quad (2.8.15)$$

用数学公式

$$\int_0^\infty x^{-1} J_{\nu+2n+1}(x) J_{\nu+2m+1}(x) dx = \begin{cases} 0, & (m \neq n, \nu > -1) \\ (4n+2\nu+2)^{-1}, & (m = n, \nu > -1) \end{cases} \quad (2.8.16)$$

即得

$$\sigma_x \xrightarrow{k_a R \gg 1} \pi R^2 \quad (2.8.17)$$

与(2.8.8)式符合,这是我们预期的结果.

在超高能质子-质子碰撞中,随着新粒子不断大量产生,反应道急剧增加, $p-p$  弹性散射的 Fraunhofer 衍射花样逐渐显现,特别是与 Bessel 函数  $J_1\left(2kR \sin \frac{\theta}{2}\right)$  的零点相对应的微分截面  $\sigma_x(\theta)$  取极小值( $\sim 0$ )的第一个和第二个“谷”(dip)已在实验中观察到. 不过  $p-p$  总截面并不像最初预期那样趋于常数(如黑核模型中的 2 倍几何截面),而是随(质心系的相对论性)总能量而不断增长,这符合郑洪与吴大峻理论所预言的<sup>[9]</sup>,当然远超出本书范围,我们不再讨论了.

## 习 题

2.1 考虑高能粒子被势场  $V(r)$  的散射,试用一级 Born 近似法计算下列势场中的微分散射截面:

(1)  $V(r) = \alpha/r^2$ ; (2)  $V(r) = V_0 e^{-br^2}$ ; (3)  $V(r) = -V_0 e^{-r/a}$ .

2.2 考虑低能粒子被势场  $V(r) = \alpha/r^4$  ( $\alpha > 0$ ) 的散射,试求其 S 波的散射截面.

2.3 考虑沿  $z$  轴的中子束流被氢分子  $H_2$  的散射, $H_2$  中两个质子位于  $x = \pm a$ , 设中子与质子间的短程核力可以写为

$$V(\mathbf{r}) = -V_0 a^3 [\delta(x-a)\delta(y)\delta(z) + \delta(x+a)\delta(y)\delta(z)]$$

试用 Born 近似导出散射截面(忽略反冲).

2.4 考虑粒子被刚球势  $V(r) = \begin{cases} \infty, & (r \leq R) \\ 0, & (r > R) \end{cases}$  的散射.

(1) 证明在低能极限 ( $kR \ll 1$ ),  $\sigma_{sc} = 4\pi R^2$ ;

(2) 证明在高能极限 ( $kR \gg 1$ ),  $\sigma_{sc} = 2\pi R^2$ ;

(3) 将上述结果与黑核模型相比较, 并与光学定理结合起来讨论.

2.5 在高能极限下引入碰撞参数  $b = (l+1/2)/k$  后, 散射振幅  $f(\theta)$  (见(2.8.2)式)可以用积分表示如下:

$$f(\theta) = -ik \int_0^\infty db b [S_\omega^l(b) - 1] J_0(2kb \sin\theta/2)$$

其中已用了一个数学公式(参见文献[13]):

$$\lim_{l \rightarrow \infty} P_l(\cos\theta) = J_0((2l+1)\sin\theta/2)$$

试导出黑核模型的  $f(\theta)$  (见(2.8.14)式)并用光学定理证明总截面确由(2.8.10)式给出.

2.6 考虑低能粒子被硬壳势  $V(r) = -V_0 b \delta(r-b)$  的散射:

(1) 试导出低能下 S 波的相移以及有效力程  $r_0$  和散射长度  $a$ ;

(2) 导出在此势壳内粒子的结合能以及刚能容纳一个束缚态时  $V_0$  的最小值;

(3) 针对该例讨论 Levinson 定理以及  $\sigma_{sc} |_{k \rightarrow 0}$  对于  $V_0$  数值的依赖性.

2.7 考虑低能粒子被下述势场的散射:

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} U(r), U(r) = -2\lambda^2 \operatorname{sech}^2 \lambda r$$

(1) 先验证方程  $\left[ \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - U(r) \right] U(r) = 0$  的通解是

$$u(r) = A(\lambda \tanh \lambda r - ik) \exp(ikr) + B(\lambda \tanh \lambda r + ik) \exp(-ikr)$$

其中  $A, B$  是两个任意常数;

(2) 导出 S 波相移和散射截面;

(3) 讨论本例中的 Levinson 定理, 散射长度  $a$  和有效力程  $r_0$ .

\* 2.8 设在时间  $t = 0$  有一带电荷  $e$  的线性谐振子处于基态  $|0\rangle$ . 然后加上一外电场  $\epsilon(t) = \epsilon_0 \exp(-t/\tau)$  ( $t > 0$ ), 试求长时间后此振子处于某个激发态  $|n\rangle$  的几率.

2.9 设在时间  $t = 0$  有一氢原子处于基态, 然后加上一外电场  $\epsilon(t) = \epsilon_0 [\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)]$  使其电离. 假定电离后的电子用动量为  $\mathbf{p}$  的平面波来描写:

(1) 问电场频率  $\omega$  的最小值为若干?

(2) 试用一阶微扰论求出在时间  $t$  电离态的几率幅;

(3) 试导出在共振条件下单位时间内从  $|1s\rangle$  态到一群  $|\mathbf{p}\rangle$  态的跃迁几率.

\* 2.10 假定一个原子只有两个态,  $|1\rangle$  和  $|2\rangle$ , 其能量差等于  $\Delta E = E_2 - E_1 = \hbar\omega_{21}$ , 在  $t = 0$  时原子处于  $|1\rangle$  态, 然后被外电场  $\epsilon(t) = \epsilon_0 [\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)]$  所

驱动. 试求出经时间  $t$  后此原子处于  $|2\rangle$  态或  $|1\rangle$  态的几率各为多少?

2.11 在散射理论中, 靶核对入射粒子的吸收常惟象地用一帶有虚部的势来描写:  $V(\mathbf{r}) = \text{Re}V + i\text{Im}V$ . 试导出此情况下入射粒子的连续性方程并确定  $\text{Im}V$  的符号.

## 参 考 文 献

- [1] R. G. Newton. *Scattering Theory of Waves and Particles*. McGraw-Hill, Inc., 1966
- [2] C. J. Joachain. *Quantum Collision Theory*. North-Holland Publishing Company, 1975
- [3] N. Levinson, *Danske Videnskab. Mat-fys. Medd.*, **25**(1949), No. 9
- [4] J. M. Jauch. *Helv. Phys. Acta.*, **30**, 143 (1957)
- [5] A. Martin. *Nuovo Cimento*, **7**, 607 (1958)
- [6] 倪光炯. 高能物理与核物理, **3**, 432 (1979)
- [7] 倪光炯, 陈苏卿. 莱文森定理, 反常和真空相变. 上海: 上海科学技术出版社, 1995
- [8] 胡嗣柱, 倪光炯. 数学物理方法. 上海: 复旦大学出版社, 1989
- [9] H. Cheng and T. T. Wu. *Phys. Rev. Lett.*, **24**, 1456 (1970)
- [10] A. C. 达维多夫. 原子核理论. 上海: 上海科学技术出版社, 1963
- [11] 余寿绵. 高等量子力学. 济南: 山东科学技术出版社, 1985
- [12] Ta-You Wu and Takashi Ohmura. *Quantum Theory of Scattering*. Prentice-Hall Inc., 1962
- [13] S. Flügge. *Practical Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, 1970
- [14] 尹鸿钧. 量子力学. 合肥: 中国科技大学出版社, 1999

## 第三章 量子力学中的对称性和角动量

在研究生一年级课程中,与“高量”平行的还有一门“群论”课.为避免不必要的重复,本章篇幅并不大.然而在不失数学严格性的条件下,我们力求注意理论的物理意义及其应用,如不同角动量的转动态的描述,Wigner-Eckart 定理和选择规则,不可观察量的对称性变换与可观察量的守恒定律和宇称不守恒的发现等.最后提出一个问题留待第九章再进一步讨论.

### § 3.1 引 言

对称性的观念历史悠久,从人类社会早期开始流传到今天的大量绘画和建筑艺术中,到处可以看见对称的美,每个人都能在日常生活中形成自己关于对称性的看法.但是关于对称性的科学认识,却还要等物理学发展到 19 世纪末才开始形成.在经典物理中开始定量地描写对称性,指出它是与体系在某一变换下的不变性相联系的概念.例如体系在旋转变换下不变,就说它具有相应的旋转对称性.因为体系不仅有静止状态,更普遍的情况是处于运动之中,这就要求研究对称性在运动中是否能够保持以及对称性对体系运动带来的后果等问题.

在经典力学中已知哈密顿量  $H$  决定了体系的运动规律,因此我们要看  $H$  对于某一种对称变换是否不变,如果不变,则体系在变换前后的运动规律也不变.在经典力学中这种不变性表现为某一运动积分等于常数,即表现为一个守恒量.在适当的坐标变换下,如有一个广义坐标在  $H$  中不出现,它就叫做循环坐标,与其正则共轭的广义动量就是一个守恒量.例如在一个中心势场  $V(r)$  中运动的粒子, $H$  中除球坐标的径向坐标  $r$  和极角  $\theta$  外,不含方位角  $\phi$ ,因此  $\phi$  成为一个“循环坐标”,体系具有绕  $z$  轴旋转的对称性,即  $H$  在变换  $\phi \rightarrow \phi + \phi_0$  下是不变的,于是绕  $z$  轴的角动量 ( $p_\phi$ ) 便是一个运动常数(守恒量).

经典力学发展到分析力学时,对两个  $(p, q)$  的函数  $u$  和  $v$ ,定义泊松括号为

$$\{u, v\}_{\text{PB}} = \sum_i \left( \frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial v}{\partial q_i} \frac{\partial u}{\partial p_i} \right) \quad (3.1.1)$$

则  $u$  的运动方程是

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \{u, H\}_{\text{PB}} \quad (3.1.2)$$

如  $u$  和  $H$  不显含时间,  $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$ , 则条件

$$\{u, H\}_{\text{PB}} = 0 \quad (3.1.3)$$

表示  $u$  是一运动常数.

发展到量子力学, 与经典力学相比, 对称性的研究大大地丰富了人们对自然界的认识, 在量和质上都有了明显的变化, 表现在:

(1) 力学量成为算符. 对应于经典力学中的可观察量  $F$ , 量子力学中成为一个厄密算符  $\hat{F}$ , 它是算符  $\hat{q}$ ,  $\hat{p}$  的函数, 而经典力学中的泊松括号升级为对易关系:

$$\{A, B\}_{\text{PB}} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{B}] \quad (3.1.4)$$

特例如  $\{q, p\}_{\text{PB}} = 1$  现在变为  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ .

于是(不显含时间的)  $\hat{F}$  与哈密顿算符  $\hat{H}$  对易的条件

$$[\hat{F}, \hat{H}] = 0 \quad (3.1.5)$$

表示  $\hat{F}$  与  $\hat{H}$  可以有共同的本征函数, 且  $\hat{F}$  是一个守恒量.

(2) 这一可观察量  $\hat{F}$  的守恒性必定与体系中一个“不可观察量”的对称性变换直接联系. 我们希望强调: 量子力学中位形空间波函数的宗量  $(\mathbf{x}, t)$  本身都不是直接可观察量. 下面将指出: 空(时)间平移对称性导致动(能)量守恒.

(3) 量子力学中的对称性还表现为定态间跃迁的选择规则, 有时不需要经过大量计算或具体求解方程即可看出, 这在实际应用中是很重要的.

(4) 除了在经典力学中已研究的连续对称性外, 又有一些分立(离散)对称性成为量子力学的研究对象. 例如空间反演 ( $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ ) 对称性, 在经典物理中不过是一种左右对称性的概念而已, 不导致什么守恒定律, 现在却有了在空间反演下的本征值——宇称, 以及相应的宇称守恒定律, 它是选择定则中重要的组成部分.

又如全同粒子组成的多体体系在置换下的对称性, 在经典物理中除热力学的 Gibbs 佯谬曾予以重视讨论外, 并没有帮助我们对体系的运动状态获得什么更深的认识, 但在量子力学中这种置换对称性将给描述体



系状态的波函数以严格的限制,在三维空间中按置换是对称的或反对称的而把粒子分为玻色子或费米子两大类.

(5) 量子力学中的对称性表现远比经典力学来得丰富多彩而且深刻.例如我们的太阳系,九大行星都在以太阳为中心的一个中心势场  $V(r)$  内运动.  $V(r)$  是球对称的,因此行星的运动(先忽略彼此间的“摄动”)服从各自的角动量守恒定律,但角动量的大小和取向却相当地任意,九大行星的轨道都不在一个平面上,无论个别或整体,都不具有球对称性.以地球轨道平面(黄道面)为基准,木星轨道倾角最小为  $18'$ ,冥王星的最大达  $17^\circ 7'$ ;行星轨道是椭圆形的(太阳位于一个焦点上),椭圆偏心率以金星最小,仅 0.006,又是冥王星最大,达 0.246.实际上椭圆也不是理想的,行星间的引力摄动使它们轨道不断产生不规则的变化,外来的彗星更会使它们受到扰动.由此可见,我们不能说太阳系是一个具有严格对称性的体系,从天文时间标度(比如说一亿年)看,它也不是一个稳定的体系.

量子力学中的类氢原子可比太阳系稳定得多了,每一个定态的波函数,都有其严格的对称性,与角动量量子数  $l$  和  $m$  对应的态,其角度部分的波函数是球谐函数  $Y_{lm}(\theta, \phi)$ ,原子核位于球坐标的中心.如果说,一个定态分布密度  $|Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 \sim |P_l^m(\cos\theta)|^2$  还与  $\theta$  有关,因而还不是球对称的话,那末由  $m = -l, \dots, l$  的全部属于  $l$  的定态电子云密度加起来:

$$\frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = 1 \quad (3.1.6)$$

它就是球对称的了,充分反映了原来势场  $V(r)$  的球对称性.由此可见,对称性是贯彻始终的,原来哈密顿量  $\hat{H}$  有什么对称性,在态中必有相应的表现.量子力学中这种态的对称性直接反映了  $\hat{H}$  的对称性,叫做对称性的 Wigner-Weyl 实现方式.

基态是体系中能量最低的态,它在量子力学中对应于  $\hat{H}$  中所包含的一切对称群共同的一维表示,是惟一(不会有与其简并)的态.例如中心势场  $V(r)$  中的  $1s$  态本身就是一个球对称态  $Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ ; 一个对于原点对称的一维双势阱  $V(x)$  具有  $x \rightarrow -x$  的空间反演对称性,相应之基态不是两个势阱中任一个(原来能量简并的)基态,  $\psi_{1s}(x)$  或  $\psi_{2s}(x)$ , 而是两者经量子隧道效应而耦合起来的一个能量更低的对称基态  $\psi_0(x)$ , 它具有宇称为正(偶)的对称性:

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1s}(x) + \psi_{2s}(x)) = \psi_0(-x) \quad (3.1.7)$$

另一个能量更高的耦合态是奇宇称态成为双势阱中的第一激发态:

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{1s}(x) - \psi_{2s}(x)) = -\psi_1(-x) \quad (3.1.8)$$

这也是 Wigner-Weyl 对称性实现的一个例子.

(6) 到了无限自由度的量子场论时,作为能量最低态的基态便是真空,那时  $H$  中某一连续对称性在真空中可能有破缺,真空出现不惟一性(简并),实际上仔细研究后发现,对称性还是隐含地存在,它表现为一个无质量的标量粒子(Goldstone 粒子)的激发.这种情况叫做对称性的 Nambu-Goldstone 实现方式.(在量子多体理论中也有“Goldstone 粒子”,如铁磁性物质中的自旋波,它的色散关系  $\omega(k)$  在  $k=0$  处无能隙.)

所以,在量子理论中,对称性是同态的分立性和稳定性(它们直接决定了自然界物质的稳定性、同一性和再现性),跃迁中的选择规则以及运动中的守恒定律等都是密切联系的.

## § 3.2 转动态的定义和转动算符

### 3.2A 转动态的定义

在经典物理中,将一个态,例如一个运动粒子,绕空间一个轴  $n$  转过一定角度  $\theta$  后,粒子这时仍处在一完全确定的态,我们称之为原来态的转动态.如果在转动前粒子坐标及动量分别为  $x, y, z$  及  $p_x, p_y, p_z$ ,转动后为  $x', y', z'$  及  $p'_x, p'_y, p'_z$ ,令  $\hat{R}(n, \theta)$  表示这一转动,则转动前后标记态的那些量之间有如下关系:

$$\begin{aligned} \mathbf{r}' &= \hat{R}(n, \theta)\mathbf{r} \\ \mathbf{p}' &= \hat{R}(n, \theta)\mathbf{p} \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

例如取  $n$  沿  $z$  轴,转动角度是  $\theta$ ,则

$$\begin{aligned} x' &= x\cos\theta - y\sin\theta, & p'_x &= p_x\cos\theta - p_y\sin\theta \\ y' &= x\sin\theta + y\cos\theta, & p'_y &= p_x\sin\theta + p_y\cos\theta \\ z' &= z, & p'_z &= p_z \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

在量子力学中,考虑一自旋为零的标量粒子波函数  $\psi(\mathbf{r})$ . 将它绕空间一轴  $n$  转动一定角度  $\theta$  后(记此变换操作为作用在波函数上的算符

$R(\mathbf{n}, \theta)$ , 我们有

$$\hat{R}(\mathbf{n}, \theta)\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}) \quad (3.2.3)$$

如果在转动前后态中所测得的物理量的关系完全和经典物理中一致, 我们就称  $\psi'(\mathbf{r})$  为  $\psi(\mathbf{r})$  的转动态.

根据  $\psi(\mathbf{r})$  是标量函数的性质, 应该想到有关系:

$$\psi'(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r}' = \hat{R}\mathbf{r} \quad (3.2.4)$$

或者  $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(\hat{R}^{-1}\mathbf{r})$ . 下面我们来证明(3.2.4)式确实能给出粒子的位置和动量满足转动态的要求, 为此只需看绕  $z$  轴转过  $\theta$  角度就够了. 原来态的  $x$  平均位置是

$$\langle \psi(\mathbf{r}) | x | \psi(\mathbf{r}) \rangle = \bar{x}$$

转动态的  $x$  平均位置是

$$\langle \psi'(\mathbf{r}) | x | \psi'(\mathbf{r}) \rangle = \bar{x}'$$

$$\begin{aligned} \text{左端} &= \langle \psi'(\mathbf{r}') | x' | \psi'(\mathbf{r}') \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}) | x' | \psi(\mathbf{r}) \rangle \\ &= \langle \psi(\mathbf{r}) | x | \psi(\mathbf{r}) \rangle \cos\theta - \langle \psi(\mathbf{r}) | y | \psi(\mathbf{r}) \rangle \sin\theta \\ &= \bar{x} \cos\theta - \bar{y} \sin\theta \end{aligned} \quad (3.2.5a)$$

其中第一个等号是由于积分变数可以由  $\mathbf{r}$  改为  $\mathbf{r}'$ , 第二, 第三步则用了等式(3.2.4)和(3.2.2). 类似地有

$$\begin{aligned} \bar{y}' &= \langle \psi'(\mathbf{r}) | y | \psi'(\mathbf{r}) \rangle \\ &= \langle \psi(\mathbf{r}) | x | \psi(\mathbf{r}) \rangle \sin\theta + \langle \psi(\mathbf{r}) | y | \psi(\mathbf{r}) \rangle \cos\theta \\ &= \bar{x} \sin\theta + \bar{y} \cos\theta \end{aligned} \quad (3.2.5b)$$

$$\begin{aligned} \bar{p}_x' &= \langle \psi'(\mathbf{r}) | \hat{p}_x | \psi'(\mathbf{r}) \rangle \\ &= \langle \psi(\mathbf{r}) | \hat{p}_x | \psi(\mathbf{r}) \rangle \cos\theta - \langle \psi(\mathbf{r}) | \hat{p}_y | \psi(\mathbf{r}) \rangle \sin\theta \\ &= \bar{p}_x \cos\theta - \bar{p}_y \sin\theta \end{aligned} \quad (3.2.5c)$$

等. 由此可见(3.2.4)式符合转动态的定义, 证毕.

### 3.2B 算符的转动

上面我们把  $\hat{R}(\mathbf{n}, \theta)\psi(\mathbf{r})$  表示  $\psi(\mathbf{r})$  的转动态,  $\hat{R}(\mathbf{n}, \theta)$  称为转动算符, 转动态在  $\mathbf{r}$  点的数值等于原来态在  $\hat{R}^{-1}\mathbf{r}$  处的数值:

$$\hat{R}(\mathbf{n}, \theta)\psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}) = \psi(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \quad (3.2.6a)$$

假定在转动前后的态保持几率守恒,即若原来的态归一化,则转动态也归一化:

$$\langle \psi(\mathbf{r}) | \psi(\mathbf{r}) \rangle = 1 = \langle \hat{R}\psi(\mathbf{r}) | \hat{R}\psi(\mathbf{r}) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}) | \hat{R}^\dagger \hat{R} | \psi(\mathbf{r}) \rangle$$

故

$$\hat{R}^\dagger \hat{R} = 1 \quad (3.2.6b)$$

可见转动算符  $\hat{R}$  是么正算符,即转动变换是一个么正变换.

任一算符  $\hat{F}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$  的平均值可改写如下:

$$\begin{aligned} \bar{F} &= \langle \psi(\mathbf{r}) | \hat{F} | \psi(\mathbf{r}) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}) | \hat{R}^\dagger \hat{R} \hat{F} \hat{R}^\dagger \hat{R} | \psi(\mathbf{r}) \rangle \\ &= \langle \hat{R}\psi(\mathbf{r}) | \hat{R} \hat{F} \hat{R}^\dagger | \hat{R}\psi(\mathbf{r}) \rangle = \langle \psi'(\mathbf{r}) | \hat{F}' | \psi'(\mathbf{r}) \rangle \end{aligned} \quad (3.2.7a)$$

我们已定义算符  $\hat{F}$  在转动后变为新算符

$$\hat{F}' = \hat{R} \hat{F} \hat{R}^\dagger \quad (3.2.7b)$$

由(3.2.7)可见:算符  $\hat{F}$  对原来态  $\psi$  的平均值等于转动后算符  $\hat{F}'$  对转动态  $\psi'$  的平均值. 这相当于如下的物理过程:将产生态  $\psi$  的仪器  $A$  和对应于  $\hat{F}$  的测量仪器  $B$  同时转动,则转动后的仪器  $A'$  将产生转动态  $\psi'$ ,而转动后的仪器  $B'$  将对应于算符  $\hat{F}'$ ,显然在转动前后测量仪器上的计数不变,这就是(3.2.7)式所表示的意义.

现在我们举坐标算符  $\hat{x}$  为例,看它在转动后变为怎样的新算符  $\hat{x}'$ ? 由(3.2.5a)、(3.2.5b)之逆变换  $\bar{x} = \bar{x}' \cos\theta + \bar{y}' \sin\theta$ , 即

$$\langle \psi(\mathbf{r}) | \hat{x} | \psi(\mathbf{r}) \rangle = \langle \psi'(\mathbf{r}) | \hat{x} | \psi'(\mathbf{r}) \rangle \cos\theta + \langle \psi'(\mathbf{r}) | \hat{y} | \psi'(\mathbf{r}) \rangle \sin\theta \quad (3.2.8)$$

出发,改写上式如下:

$$\langle \psi(\mathbf{r}) | \hat{x} | \psi(\mathbf{r}) \rangle = \langle \psi'(\mathbf{r}) | (\hat{x} \cos\theta + \hat{y} \sin\theta) | \psi'(\mathbf{r}) \rangle \quad (3.2.9)$$

与(3.2.7)式比较,即见算符  $\hat{x}$  在转动后变成

$$\hat{x}' = \hat{R} \hat{x} \hat{R}^\dagger = \hat{x} \cos\theta + \hat{y} \sin\theta \quad (3.2.10)$$

此式与作为经典  $C$  数的  $x$  的变换(3.2.2)相比差一个符号,正表明量子力学中波函数的宗量  $x$  不是直接可观察量,同时作为算符( $q$  数)的  $\hat{x}$  也只是对应于可观察量而本身也不是可观察量,只有将算符作用到波函数上面去时才给出可观察量.

## 3.2C 态的无限小转动

为了寻找转动算符 $\hat{R}$ 的具体形式,我们来讨论态的无限小转动,先看绕 $z$ 轴的转角 $\delta\theta$ 为无限小的情形,由(3.2.2)式有

$$\begin{aligned}x' &= x - y\delta\theta \\y' &= x\delta\theta + y\end{aligned}\quad (3.2.11)$$

(1) 自旋为零的粒子波函数(标量场). 由(3.2.6a)有

$$\begin{aligned}\psi'(x, y, z) &= \psi(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) = \psi(x + y\delta\theta, y - x\delta\theta, z) \\&= \psi(x, y, z) + \delta\theta\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi(x, y, z) \\&= \left[1 - \frac{i\delta\theta}{\hbar}\hat{L}_z\right]\psi(x, y, z)\end{aligned}\quad (3.2.12)$$

这里引进了 $z$ 方向的轨道角动量算符

$$\hat{L}_z = i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)\quad (3.2.13)$$

推广到绕任意轴 $\mathbf{n}$ 的微小转动,我们有

$$\psi'(x, y, z) = \left[1 - \frac{i\delta\theta}{\hbar}\hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{n}\right]\psi(x, y, z)\quad (3.2.14a)$$

可见无穷小转动算符是

$$\hat{R}(\mathbf{n}, \delta\theta) = \left[1 - \frac{i\delta\theta}{\hbar}\hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{n}\right]\quad (3.2.14b)$$

我们看到了:轨道角动量算符是转动下标量场的无穷小生成元.

(2) 自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子的波函数(旋量场). 此时波函数为二分量的旋量,记 $\chi_{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $\chi_{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , 则

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \psi_1(\mathbf{r})\chi_{\frac{1}{2}} + \psi_2(\mathbf{r})\chi_{-\frac{1}{2}}\quad (3.2.15)$$

当态绕 $z$ 轴转一小角度 $\delta\theta$ 后, $\Psi(\mathbf{r}) \rightarrow \Psi'(\mathbf{r})$ . 为了求 $\Psi'(\mathbf{r})$ ,我们要求在转动态 $\Psi'(\mathbf{r})$ 的自旋、位置和动量等应当分别与原来态 $\Psi(\mathbf{r})$ 的自旋、位置和动量等满足经典关系,即要求

$$\langle \Psi'(\mathbf{r}) | x | \Psi'(\mathbf{r}) \rangle = \langle \Psi(\mathbf{r}) | x | \Psi(\mathbf{r}) \rangle - \delta\theta \langle \Psi(\mathbf{r}) | y | \Psi(\mathbf{r}) \rangle \quad (3.2.16a)$$

而

$$\langle \Psi'(\mathbf{r}) | \hat{\sigma}_x | \Psi'(\mathbf{r}) \rangle = \langle \Psi(\mathbf{r}) | \hat{\sigma}_x | \Psi(\mathbf{r}) \rangle - \delta\theta \langle \Psi(\mathbf{r}) | \hat{\sigma}_y | \Psi(\mathbf{r}) \rangle \quad (3.2.16b)$$

等. 下面证明,  $\Psi(\mathbf{r})$  的转动态是

$$\Psi'(\mathbf{r}) = \left(1 - \frac{i}{2}\delta\theta \hat{\sigma}_z\right) \Psi(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \quad (3.2.17)$$

证 因为

$$\begin{aligned} \langle \Psi'(\mathbf{r}) | x | \Psi'(\mathbf{r}) \rangle &= \langle \Psi'(\mathbf{r}') | x' | \Psi'(\mathbf{r}') \rangle \\ &= \left\langle \Psi(\mathbf{r}) \left| \left(1 + \frac{i}{2}\delta\theta \hat{\sigma}_z\right) x' \left(1 - \frac{i}{2}\delta\theta \hat{\sigma}_z\right) \right| \Psi(\mathbf{r}) \right\rangle \end{aligned}$$

其中第二步用(3.2.17)式(令  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \hat{R}\mathbf{r}$ ). 考虑到  $x'$  和  $\hat{\sigma}_z$  可以交换, 同时我们只保留到  $\delta\theta$  的一次方, 再以(3.2.2)式代入即得

$$\langle \Psi'(\mathbf{r}) | x | \Psi'(\mathbf{r}) \rangle = \langle \Psi(\mathbf{r}) | x | \Psi(\mathbf{r}) \rangle - \delta\theta \langle \Psi(\mathbf{r}) | y | \Psi(\mathbf{r}) \rangle$$

这就是(3.2.16a)式. 再看

$$\begin{aligned} \langle \Psi'(\mathbf{r}) | \hat{\sigma}_x | \Psi'(\mathbf{r}) \rangle &= \langle \Psi'(\mathbf{r}') | \hat{\sigma}_x | \Psi'(\mathbf{r}') \rangle \\ &= \left\langle \Psi(\mathbf{r}) \left| \left(1 + \frac{i}{2}\delta\theta \hat{\sigma}_z\right) \hat{\sigma}_x \left(1 - \frac{i}{2}\delta\theta \hat{\sigma}_z\right) \right| \Psi(\mathbf{r}) \right\rangle \\ &= \langle \Psi(\mathbf{r}) | \hat{\sigma}_x | \Psi(\mathbf{r}) \rangle - \delta\theta \langle \Psi(\mathbf{r}) | \hat{\sigma}_y | \Psi(\mathbf{r}) \rangle \end{aligned}$$

其中利用了关系式  $\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = 2i \hat{\sigma}_y$ , 这就是(3.2.16b)式. 于是我们证明了(3.2.17)式确是  $\Psi(\mathbf{r})$  的转动态. 现在以(3.2.12)式代入(3.2.17)式, 得到

$$\begin{aligned} \Psi'(\mathbf{r}) &= \left(1 - \frac{i}{2}\delta\theta \hat{\sigma}_z\right) \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta \hat{L}_z\right) \Psi(\mathbf{r}) \\ &= \left[1 - \frac{i\delta\theta \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z + \hat{L}_z\right)}{\hbar}\right] \Psi(\mathbf{r}) \quad (3.2.18) \end{aligned}$$

我们已知  $\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z$  是自旋  $\frac{1}{2}$  粒子沿  $z$  轴的角动量. 考虑绕空间任意方向  $\mathbf{n}$  的无限小转动, 我们得到转动态为

$$\Psi'(\mathbf{r}) = \hat{R}(\mathbf{n}, \delta\theta)\Psi(\mathbf{r}) \quad (3.2.19)$$

$$\hat{R}(\mathbf{n}, \delta\theta) = \left[ 1 - \frac{i\delta\theta \mathbf{n} \cdot \left( \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \hat{\mathbf{L}} \right)}{\hbar} \right] \quad (3.2.20)$$

其中

$$\frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{J}} \quad (3.2.21)$$

是粒子的总角动量,它由内禀自旋角动量  $\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$  与轨道角动量  $\hat{\mathbf{L}}$  相加而成.

我们看到,对自旋  $\frac{1}{2}$  的粒子,总角动量  $\mathbf{J}$  是转动下旋量场的无限小生成元.上面讲的  $\Psi(\mathbf{r})$  是一般的旋量场,如果看  $\hat{\mathbf{J}}$  的本征态,具有总角动量量子数为  $j$ ,其投影为  $m$ ,轨道角动量量子数为  $l$ ,则本征函数为

$$\Psi_{jlm} = \sum_{m_l, \mu} C_{lm_l, \frac{1}{2}\mu}^{jm} Y_{lm_l} \chi_{\mu} \quad (3.2.22)$$

其中  $Y_{lm_l}$  是球谐函数 ( $\hat{\mathbf{L}}$  的本征函数),  $\chi_{\mu}$  ( $\mu = \pm \frac{1}{2}$ ) 是自旋本征态(见(3.2.15)式),而  $C_{lm_l, \frac{1}{2}\mu}^{jm}$  是 Clebsch-Gordon (CG) 系数——角动量耦合系数(见 § 3.4).

### (3) 自旋为 1 粒子的波函数(向量场)

向量(矢量)场是指在空间的 3 个基矢  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$  方向上各有分量为  $\psi_x(\mathbf{r}), \psi_y(\mathbf{r}), \psi_z(\mathbf{r})$  的场.当体系绕  $z$  轴转一小角度  $\delta\theta$  后,  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \hat{R}\mathbf{r}$ , 由于  $\psi_i(\mathbf{r})$  ( $i = x, y, z$ ) 本身也像向量的分量那样地变换,所以转动后在  $\mathbf{r}$  点的场分量是

$$\begin{aligned} \psi'_x(\mathbf{r}) &= \psi_x(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) - \delta\theta\psi_y(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \\ \psi'_y(\mathbf{r}) &= \psi_y(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) + \delta\theta\psi_x(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \\ \psi'_z(\mathbf{r}) &= \psi_z(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (3.2.23)$$

(比较(3.2.11)式),注意右端向量  $\hat{R}^{-1}\mathbf{r}$  的 3 个分量是

$$\hat{R}^{-1}\mathbf{r} = (x + \delta\theta y, y - \delta\theta x, z) \quad (3.2.24)$$

现在让我们把  $\psi_i(\mathbf{r})$  排成一个列矩阵,于是向量场可表示为

$$\begin{pmatrix} \psi_x(\mathbf{r}) \\ \psi_y(\mathbf{r}) \\ \psi_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \psi_x(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_y(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_z(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.2.25)$$

在绕  $z$  轴转动  $\delta\theta$  的情况下,以(3.2.24)代入(3.2.23),我们有

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi'_x(\mathbf{r}) \\ \psi'_y(\mathbf{r}) \\ \psi'_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \psi_x(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \\ \psi_y(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \\ \psi_z(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \end{pmatrix} + \delta\theta \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_x(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \\ \psi_y(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \\ \psi_z(\hat{R}^{-1}\mathbf{r}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \psi_x(\mathbf{r}) \\ \psi_y(\mathbf{r}) \\ \psi_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix} + \delta\theta \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \begin{pmatrix} \psi_x(\mathbf{r}) \\ \psi_y(\mathbf{r}) \\ \psi_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \\ &\quad + \delta\theta \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_x(\mathbf{r}) \\ \psi_y(\mathbf{r}) \\ \psi_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

令

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hbar \quad (3.2.26)$$

则

$$\begin{pmatrix} \psi'_x(\mathbf{r}) \\ \psi'_y(\mathbf{r}) \\ \psi'_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \psi_x(\mathbf{r}) \\ \psi_y(\mathbf{r}) \\ \psi_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = -\frac{i}{\hbar} \delta\theta (\hat{L}_z + \hat{S}_z) \begin{pmatrix} \psi_x(\mathbf{r}) \\ \psi_y(\mathbf{r}) \\ \psi_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (3.2.27)$$

类似地,当绕  $x$  或  $y$  轴作无穷小转动时,向量场波函数的变化将分别为

$$-\frac{i}{\hbar} \delta\theta (\hat{L}_x + \hat{S}_x) \begin{pmatrix} \psi_x(\mathbf{r}) \\ \psi_y(\mathbf{r}) \\ \psi_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad -\frac{i}{\hbar} \delta\theta (\hat{L}_y + \hat{S}_y) \begin{pmatrix} \psi_x(\mathbf{r}) \\ \psi_y(\mathbf{r}) \\ \psi_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

其中

$$\hat{S}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \hbar, \quad \hat{S}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \hbar \quad (3.2.28)$$

不难验证(3.2.26)与(3.2.28)这3个矩阵满足对易关系如下:

$$\begin{aligned} \hat{S}_x \hat{S}_y - \hat{S}_y \hat{S}_x &= i\hbar \hat{S}_z \\ \hat{S}_y \hat{S}_z - \hat{S}_z \hat{S}_y &= i\hbar \hat{S}_x \\ \hat{S}_z \hat{S}_x - \hat{S}_x \hat{S}_z &= i\hbar \hat{S}_y \end{aligned} \quad (3.2.29)$$

且其平方和为对角矩阵:



$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 = s(s+1)\hbar^2, (s=1) \quad (3.2.30)$$

由此可见  $\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z$  为一个内禀自旋角动量量子数为 1 的角动量分量。 $S$  与  $L$  合成的总角动量  $J$ , 是这个向量场在转动下的无穷小生成元。

我们还可以为向量场写出另一种表示:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \psi_x(\mathbf{r}) \\ \psi_y(\mathbf{r}) \\ \psi_z(\mathbf{r}) \end{pmatrix} &= \psi_1(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_{-1}(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_0(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \psi_1 \xi_1 + \psi_{-1} \xi_{-1} + \psi_0 \xi_0 \end{aligned} \quad (3.2.31)$$

其中

$$\psi_1(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_x - i\psi_y)$$

$$\psi_{-1}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_x + i\psi_y) \quad (3.2.32)$$

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \psi_z(\mathbf{r})$$

$$\xi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \xi_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}, \xi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.2.33)$$

具体验算一下即见

$$\hat{S}_z \xi_1 = \hbar \xi_1, \hat{S}_z \xi_{-1} = -\hbar \xi_{-1}, \hat{S}_z \xi_0 = 0 \quad (3.2.34)$$

故  $\xi_1, \xi_0, \xi_{-1}$  分别是  $\hat{S}_z$  的本征值为 1, 0, -1 的本征矢量, 记得我们的矩阵是在取直角坐标基矢  $e_x, e_y, e_z$  的表象中写出的, (3.2.33) 式启发我们改取球坐标的基矢

$$e_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x + ie_y), e_0 = e_z, e_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_x - ie_y) \quad (3.2.35)$$

它们分别是  $S_z$  的本征值为 1, 0, -1 的本征矢量, 于是我们可以构造一个总角动量  $\hat{J}$  的本征函数, 让它的向量场性质直接用这 3 个球基矢表示出:

$$\mathbf{Y}_{JM} = \sum_{m_l, \mu} C_{lm_l, 1\mu}^{JM} Y_{lm_l} e_\mu \quad (3.2.36)$$

( $\mu = 1, 0, -1$ ) 这叫做向量球谐函数, 在下一章讨论电磁跃迁理论时将用到它。

总结起来可以说: 不论是标量场, 旋量场或向量场, 无限小的转动算

符都是  $\hat{R}(\mathbf{n}, \delta\theta) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\theta \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right)$ .

### 3.2D 态的有限转动

现在考虑绕任一轴  $\mathbf{n}$  转动有限角度  $\theta$ , 我们可以把它看为是连续地绕  $\mathbf{n}$  轴转动无限小角度  $\delta\theta = \frac{\theta}{m}$  ( $m \rightarrow \infty$ ) 的结果. 于是转动算符是

$$\hat{R}(\mathbf{n}, \theta) = \lim_{m \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\theta}{m} \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right)^m = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \theta \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right\} \quad (3.2.37)$$

除了这种绕固定  $\mathbf{n}$  轴转动  $\theta$  角度的描述方式外, 三维空间中的有限转动还常常用 3 个欧勒角 ( $\alpha, \beta, \gamma$ ) 来描述. 一个任意的绕  $\mathbf{n}$  轴的转动可以分解成相继的 3 个转动: 第一步绕  $z$  轴转  $\alpha$  角, 第二步绕转动后的  $y'$  轴转  $\beta$  角, 最后绕新的  $z''$  轴转  $\gamma$  角. 用算符表示时由右向左地排列先后次序, 这样得到一个转动算符为

$$\hat{R} = \hat{R}_\gamma \hat{R}_\beta \hat{R}_\alpha = \exp\left[\frac{-i\gamma \hat{J}_z''}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{-i\beta \hat{J}_y'}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{-i\alpha \hat{J}_z}{\hbar}\right] \quad (3.2.38)$$

为计算方便, 最好直接用空间固定坐标系  $x, y, z$  轴方向的角动量分量算符  $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$  来表示. 为此, 利用(3.2.76)有

$$\begin{aligned} \exp\left[\frac{-i\gamma \hat{J}_z''}{\hbar}\right] &= \exp\left[\frac{-i\beta \hat{J}_y'}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{-i\gamma \hat{J}_z'}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{i\beta \hat{J}_y'}{\hbar}\right] \\ \exp\left[\frac{-i\beta \hat{J}_y'}{\hbar}\right] &= \exp\left[\frac{-i\alpha \hat{J}_z}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{-i\beta \hat{J}_y}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{i\alpha \hat{J}_z}{\hbar}\right] \\ \exp\left[\frac{-i\gamma \hat{J}_z'}{\hbar}\right] &= \exp\left[\frac{-i\alpha \hat{J}_z}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{-i\gamma \hat{J}_z}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{i\alpha \hat{J}_z}{\hbar}\right] \end{aligned} \quad (3.2.39)$$

即得

$$\hat{R} = \exp\left[\frac{-i\alpha \hat{J}_z}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{-i\beta \hat{J}_y}{\hbar}\right] \exp\left[\frac{-i\gamma \hat{J}_z}{\hbar}\right] \quad (3.2.40)$$

有趣的是: 在(3.2.40)式中  $\alpha, \beta, \gamma$  的次序恰好与(3.2.38)式中的完全反过来了.

## § 3.3 角动量算符的一般性质

我们已经在上一节讨论了轨道角动量算符  $\hat{L}$  和自旋为  $\frac{1}{2}$  或 1 的粒子的自旋算符  $\hat{S}$ , 一般地说, 如果有 3 个算符  $\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z$ , 满足下列对易关系:

$$\begin{aligned} [\hat{j}_x, \hat{j}_y] &= i\hbar\hat{j}_z \\ [\hat{j}_y, \hat{j}_z] &= i\hbar\hat{j}_x \\ [\hat{j}_z, \hat{j}_x] &= i\hbar\hat{j}_y \end{aligned} \quad (3.3.1)$$

则以  $\hat{j}_x, \hat{j}_y, \hat{j}_z$  三者为 3 个分量的矢量算符  $\hat{j}$ , 称为角动量算符. 定义角动量平方算符

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_x^2 + \hat{j}_y^2 + \hat{j}_z^2 \quad (3.3.2)$$

再定义角动量的升降算符, 它们互为厄密共轭(故非自轭):

$$\begin{aligned} \hat{j}_+ &= \hat{j}_x + i\hat{j}_y = \hat{j}_-^\dagger \\ \hat{j}_- &= \hat{j}_x - i\hat{j}_y = \hat{j}_+^\dagger \end{aligned} \quad (3.3.3)$$

则易证下面这些对易关系:

$$[\hat{j}^2, \hat{j}_i] = 0, \quad (i = x, y, z) \quad (3.3.4)$$

$$[\hat{j}_z, \hat{j}_\pm] = \pm\hbar\hat{j}_\pm \quad (3.3.5)$$

$$[\hat{j}_+, \hat{j}_-] = 2\hbar\hat{j}_z \quad (3.3.6)$$

由于(3.3.4)式,  $\hat{j}^2$  与  $\hat{j}_z$  对易, 它们可以有共同的本征态, 记为  $|jm\rangle$ .

$$\hat{j}^2 |jm\rangle = j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle \quad (3.3.7)$$

$$\hat{j}_z |jm\rangle = m\hbar |jm\rangle \quad (3.3.8)$$

这几个式子和  $j, m$  的意义可以如下地论证. 先设(3.3.8)中的实本征值  $m$  暂时还没有定下来, 让我们来看态  $\hat{j}_+ |jm\rangle$  被  $\hat{j}_z$  的作用:

$$\begin{aligned} \hat{j}_z \hat{j}_+ |jm\rangle &= [\hat{j}_z, \hat{j}_+] |jm\rangle + \hat{j}_+ \hat{j}_z |jm\rangle \\ &= \hat{j}_+ |jm\rangle (m+1)\hbar \end{aligned}$$

可见  $\hat{j}_+ |jm\rangle$  或者也是  $\hat{j}_z$  的本征态, 不过本征值是  $(m+1)\hbar$ , 或者  $\hat{j}_+ |jm\rangle$  是一个零矢量, 即是不存在的态. 同理可证态  $\hat{j}_- |jm\rangle$  或者不存在, 或者也是  $\hat{j}_z$  的本征态, 不过本征值是  $(m-1)\hbar$ . 显然, 这就是为什么

称  $\hat{j}_+$  ( $\hat{j}_-$ ) 为升(降)算符的缘故.

设  $\hat{j}_+ |jm\rangle \neq 0$ , 把它归一化后记为  $|j, m+1\rangle$ , 再以  $\hat{j}_+$  作用于它, 又得到  $|j, m+2\rangle$  或者 0. 如此一直做下去, 可产生一系列态  $\{|j, m+k\rangle, k=0, 1, 2, \dots\}$ . 这个系列将会在有限个态范围内中断, (用群论的语言说, 我们在找一个转动群 ( $SO(3)$  群) 的有限维不可约表示.) 此序列中最后一个不为零的态是  $|jj\rangle$ , 即

$$\hat{j}_z |jj\rangle = j\hbar |jj\rangle, \quad \hat{j}_+ |jj\rangle = 0 \quad (3.3.9)$$

因为

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_z^2 - \hat{j}_z \hbar + \hat{j}_+ \hat{j}_- = \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z \hbar + \hat{j}_- \hat{j}_+ \quad (3.3.10)$$

故 
$$\hat{j}^2 |jj\rangle = j(j+1)\hbar^2 |jj\rangle \quad (3.3.11)$$

现在用降算符  $\hat{j}_-$ , 在上述序列中作反方向搜索, 考察态  $(\hat{j}_-)^n |jj\rangle$ ,  $n=0, 1, 2, \dots$ , 它们都是  $\hat{j}_z$  的本征态, 其本征值为 ( $\hbar$  乘以)  $j, j-1, j-2, \dots$ . 同时它们也是  $\hat{j}^2$  的本征态, 本征值都是  $j(j+1)\hbar^2$ . 我们仍然可在每一步使其归一化而得到一系列态  $\{|jm\rangle, m=j, j-1, j-2, \dots\}$ . 如前, 此序列经有限步后在一不为零的态  $|jl\rangle$  处中断, 即  $\hat{j}_- |jl\rangle = 0$ , 或

$$\begin{aligned} 0 &= \langle jl | \hat{j}_+ \hat{j}_- |jl\rangle = \langle jl | \hat{j}_+ \hat{j}_- |jl\rangle \\ &= \langle jl | (\hat{j}^2 - \hat{j}_z^2 + \hat{j}_z \hbar) |jl\rangle = [j(j+1) - l(l-1)]\hbar^2 \end{aligned}$$

此条件给出  $l = -j$ . 记住这个态  $|jl\rangle$  是从  $|jj\rangle$  出发用  $\hat{j}_-$  作用有限整数次而得到的, 故  $j - (-j) = 2j = n, n=0, 1, 2, \dots$ , 或

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots \quad (3.3.12)$$

对每一个固定的  $j$ , 这样的态  $|jm\rangle$  有  $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$  共  $2j+1$  个, 在物理上, 这表示一个角动量为  $j$  的态, 其  $z$  方向角动量的投影可以取从  $-j\hbar$  到  $j\hbar$  这  $(2j+1)$  个量子化数值, 在数学上, 这  $(2j+1)$  个态张成了  $SO(3)$  群的一个有限维的不可约表示空间, 量子数  $m$  称为权,  $j$  称为最高权, 最高权标志了一个不可约表示.

至此, 我们已经证明了(3.3.7)和(3.3.8)两式, 再可以补充一个实际上很有用的式子:

$$\hat{j}_\pm |jm\rangle = |jm \pm 1\rangle [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{\frac{1}{2}} \hbar \quad (3.3.13)$$

当然, 所有的态都已归一化. 还要注意, 本来上式还可能有一个相位上的

任意性, 即可能乘上一个模为 1 的复数, 但这里我们选择了 Condon-Shortley 的约定后采取了最简洁的形式(有时称为正则基的表示), 此时轨道角动量的本征函数是球谐函数  $Y_{lm}(\theta, \phi) = N_{lm} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}$  (见 (3.5.11) 式).

在这样的正则基  $|jm\rangle$  下, 算符  $\hat{j}^2$  和  $\hat{j}_z$  是对角的, 如 (3.3.7) 和 (3.3.8) 所示, 而非厄密算符  $\hat{j}_{\pm}$  的矩阵元都是非对角的, 如 (3.3.13) 所给出的, 它们是

$$\begin{aligned} \langle j, m+1 | \hat{j}_+ | jm \rangle &= \hbar [(j-m)(j+m+1)]^{\frac{1}{2}} \\ \langle j, m-1 | \hat{j}_- | jm \rangle &= \hbar [(j+m)(j-m+1)]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.3.14)$$

由此易得厄密算符  $\hat{j}_x$  和  $\hat{j}_y$  也只有非对角矩阵元

$$\begin{aligned} \langle j, m+1 | \hat{j}_x | jm \rangle &= \frac{1}{2} \hbar [(j-m)(j+m+1)]^{\frac{1}{2}} \\ \langle j, m-1 | \hat{j}_x | jm \rangle &= \frac{1}{2} \hbar [(j+m)(j-m+1)]^{\frac{1}{2}} \\ \langle j, m+1 | \hat{j}_y | jm \rangle &= -\frac{i}{2} \hbar [(j-m)(j+m+1)]^{\frac{1}{2}} \\ \langle j, m-1 | \hat{j}_y | jm \rangle &= \frac{i}{2} \hbar [(j+m)(j-m+1)]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (3.3.15)$$

注意第一个角动量量子数  $j$  (最高权) 是公共(不变)的, 所以在正则基  $|jm\rangle$  张成的  $(2j+1)$  维空间中, 各个角动量算符的这些矩阵元构成了一个  $(2j+1) \times (2j+1)$  的矩阵, 称为各算符在这个不可约表示空间中的矩阵表示, 它们也就是在物理空间无限小转动的“不可约表示”, 在第五节将讨论有限转动的不可约表示, 下节先讨论角动量的耦合问题.

### § 3.4 两个角动量的耦合, Clebsch-Gordan 系数

现在考虑两个角动量耦合的问题, 这在原子、原子核和粒子物理中是遇到很多的, 例如(以下略去算符帽子):

- (a) 一个粒子的轨道角动量  $l$  和它的自旋角动量  $s$  耦合成单粒子总角动量  $j$ :

$$l + s = j$$

- (b) 两个粒子的自旋  $s_1$  和  $s_2$  耦合成总自旋角动量  $S$ :

$$s_1 + s_2 = S$$

(c) 两个粒子的轨道角动量  $l_1$  和  $l_2$  耦合总轨道角动量:

$$l_1 + l_2 = L$$

(d) 上述(b)、(c)中的  $S$  和  $L$  进一步耦合总角动量  $J$ :

$$S + L = J$$

(e) 上述(b)、(c)中两粒子各自的单粒子(总)角动量耦合总角动量  $J$ :

$$j_1 + j_2 = J, (j_1 = l_1 + s_1, j_2 = l_2 + s_2)$$

当然,对具体两个粒子来说,究竟是经过(a)-(e)方式耦合总角动量  $J$  (称为  $j-j$  耦合)呢? 还是经过(b)-(c)-(d)方式耦合总角动量  $J$  (称为  $L-S$  耦合)? 需要具体分析各种相互作用的相对强弱,实际上很可能既非  $j-j$ , 又非  $L-S$  耦合,而是混合的居间情况,不过我们在实际计算中,作为一级近似,总可把(a)-(e)中任一种耦合先作为理想的数学问题来处理. 一般地记两个属于不同的“表示空间”的角动量为  $j_1$  和  $j_2$ , 它们耦合为  $J$  这个总角动量,可以严格地写成

$$J = j_1 \otimes I + I \otimes j_2 \quad (3.4.1)$$

右端第一项中的  $I$  表示在  $j_2$  表示空间中的恒等算符,第二项的  $I$  则表示在  $j_1$  表示空间中的恒等算符,记号  $\otimes$  表示我们是在两个空间的直乘空间中考虑问题,这两个空间是独立的,可以有不同的维数,(例如自旋空间是二维的 Hilbert 空间,而轨道表示空间则是无限维的 Hilbert 空间,它按不同的  $l$  分成一个个  $(2l+1)$  维的子空间),但既然  $j_1$  和  $j_2$  这两个角动量通过相互作用而彼此耦合,与它们相应的体系在物理空间中只能作同样的转动,于是两个转动群的直乘便约化为耦合体系的总转动群,同时上述的直乘空间对总转动群而言,就不再是不可约的了. 我们的问题可以归结为:如何把两个不可约表示的直乘(它不是不可约的)重新约化为总转动群的不可约表示的直和. 这两种表示之间的么正变换的矩阵元就叫做 Clebsch-Gordan (CG) 系数,或称矢量耦合系数. 具体写法如下:

直乘空间的基是由两个子空间的基直乘而得,记为

$$|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = |j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle \quad (3.4.2)$$

因为  $j_1$  与  $j_2$  是可以对易的,显然有性质:

$$j_1^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = j_1(j_1 + 1) \hbar^2 |j_1 j_2; m_1 m_2\rangle \quad (3.4.3a)$$

$$j_{1z} | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle = m_1 \hbar | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle \quad (3.4.3b)$$

$$j_2^2 | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle = j_2(j_2 + 1) \hbar^2 | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle \quad (3.4.3c)$$

$$j_{2z} | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle = m_2 \hbar | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle \quad (3.4.3d)$$

在基  $| j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle$  中,  $j_1 m_1$  和  $j_2 m_2$  都是确定的本征值, 或者说, 它们分别是好量子数. 原因是在直乘空间中两个角动量被当成是独立的, 彼此不耦合的缘故.

一旦引入相互作用,  $j_1$  与  $j_2$  耦合起来, 我们考虑总转动群不可约表示的基时, 虽然  $j_1$  和  $j_2$  仍是好量子数, 但  $m_1$  和  $m_2$  都不再取确定值了, 它们的地位被新的好量子数——总角动量  $J$  的量子数  $j$  及其投影值  $m$ ——所代替, 这时的基可表示为  $| j_1 j_2; j m \rangle$ , 它的性质如下:

$$j_1^2 | j_1 j_2; j m \rangle = j_1(j_1 + 1) \hbar^2 | j_1 j_2; j m \rangle \quad (3.4.4a)$$

$$j_2^2 | j_1 j_2; j m \rangle = j_2(j_2 + 1) \hbar^2 | j_1 j_2; j m \rangle \quad (3.4.4b)$$

$$J^2 | j_1 j_2; j m \rangle = j(j + 1) \hbar^2 | j_1 j_2; j m \rangle \quad (3.4.4c)$$

$$J_z | j_1 j_2; j m \rangle = m \hbar | j_1 j_2; j m \rangle \quad (3.4.4d)$$

因为  $J = j_1 + j_2$ , 故其平方

$$J^2 = j_1^2 + j_2^2 + 2j_{1z}j_{2z} + j_{1+}j_{2-} + j_{1-}j_{2+} \quad (3.4.5)$$

易证虽然  $[J^2, J_z] = 0$ , 但是

$$[J^2, j_{1z}] \neq 0, [J^2, j_{2z}] \neq 0 \quad (3.4.6)$$

这就说明了为什么  $m_1$  和  $m_2$  不再是好量子数.

为了实现上述两种基之间的么正变换, 我们利用(3.4.2)式那一套基的完备性公式:

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | = 1 \quad (3.4.7)$$

右端是给定  $j_1$  和  $j_2$  条件下直乘空间的单位算符, 于是从

$$| j_1 j_2; j m \rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle \quad (3.4.8)$$

我们马上看到一个数  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j m \rangle$ , 它正是在两种基之间作么正变换的矩阵元, 就是 CG 系数.

CG系数的性质可列举如下:

(1) 3个磁量子数存在简单代数关系:

$$m = m_1 + m_2 \quad (3.4.9)$$

证 因  $J_z = j_{1z} + j_{2z}$ , 故

$$(J_z - j_{1z} - j_{2z}) | j_1 j_2; jm \rangle = 0$$

左乘  $\langle j_1 j_2; m_1 m_2 |$ , 让  $J_z$  向右作用而  $j_{1z}$ ,  $j_{2z}$  向左作用, 即得

$$(m - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle = 0$$

只要CG系数不为零, 就证明了(3.4.9)式. 由此亦可见将CG系数写成一个bra和ket的缩并形式确实有好处.

(2) 3个角动量量子数存在三角形不等式关系:

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2 \quad (3.4.10)$$

此式的严格证明并不简单, 今从略. 但可说明两点, 首先是它表示了角动量相加的矢量模型,  $\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 = \mathbf{J}$ ,  $j_{\max} = j_1 + j_2$  表示两个矢量  $\mathbf{j}_1$  和  $\mathbf{j}_2$  尽可能地平行, 而  $j_{\min} = |j_1 - j_2|$  则表示它们尽可能地反平行; 耦合使得这个三角形框架在保持夹角不变条件下绕空间固定  $z$  轴进动, 同时  $\mathbf{J}$ ,  $\mathbf{j}_1$ ,  $\mathbf{j}_2$  的投影值满足(3.4.9)式. 其次, 可以通过表示空间维数的计算来显示(3.4.10)的正确性. 由(3.4.2)式可见基  $\{|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle\}$  张成的直乘空间维数等于

$$N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \quad (3.4.11)$$

另一方面, 总转动群不可约表示的基  $\{|j_1 j_2; jm\rangle\}$  对一个固定的  $j$  张成  $(2j + 1)$  维的不可约子空间, 现在  $j$  可取满足(3.4.10)式的各个数值, 于是总维数(不失一般性, 设  $j_1 \geq j_2$ ):

$$\begin{aligned} N &= \sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) \\ &= \frac{1}{2} \{ [2(j_1 - j_2) + 1] + [2(j_1 + j_2) + 1] \} (2j_2 + 1) \\ &= (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) \end{aligned} \quad (3.4.12)$$

这与(3.4.11)式符合, 表示直乘空间惟一地分解为各个  $(2j + 1)$  维不可约子空间的直和.



(3) 作为么正变换系数的 CG 系数构成么正矩阵, 按习惯取它为实数, 即  $\langle j_1 j_2; jm | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle = \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle$ , 于是么正矩阵就变为正交矩阵, 行与列的正交条件分别给出:

$$\sum_j \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m'_1 m'_2 | j_1 j_2; jm \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (3.4.13)$$

及

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j'm' \rangle = \delta_{jj'} \delta_{mm'} \quad (3.4.14)$$

上式的特例是令  $j = j'$ ,  $m' = m = m_1 + m_2$ , 则

$$\sum_{m_1} \sum_{m_2} |\langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle|^2 = 1$$

左端 =  $\langle j_1 j_2; jm | j_1 j_2; jm \rangle$ , 这就是态的归一化条件.

$$(4) \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; jm \rangle = (-1)^{j_1+j_2-j} \langle j_2 j_1; m_2 m_1 | j_2 j_1; jm \rangle \quad (3.4.15)$$

(5) CG 系数在文献上记法很多, 例如  $C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm}$  或  $C(j_1 j_2 j; m_1 m_2 m)$  或  $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 jm \rangle$  等, 都和上面的一样, 不过另有一种叫做“Wigner 3- $j$  记号”的, 它的定义与 CG 系数却有一些差别:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m}}{\sqrt{2j+1}} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j-m \rangle \quad (3.4.16)$$

注意  $j$  的磁量子数前面的负号! 这一记号的好处是它在角动量轮换下有更高的对称性:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix} \quad (3.4.17)$$

(6) 几个常用的 CG 系数是

$$\langle j_1 0; m_1 0 | j_1 0; j_3 m_3 \rangle = \delta_{j_1 j_3} \delta_{m_1 m_3} \quad (3.4.18)$$

$$\langle jj; m-m | jj; 00 \rangle = (-1)^{j-m} (2j+1)^{-\frac{1}{2}} \quad (3.4.19)$$

表 3.4.1  $\langle j_1 \frac{1}{2}; m - m_2, m_2 | j_1 \frac{1}{2}; jm \rangle$ 

| $j$                 | $m_2 = \frac{1}{2}$  | $m_2 = -\frac{1}{2}$  |
|---------------------|--|---|
| $j_1 + \frac{1}{2}$ | $\left[ \frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1} \right]^{\frac{1}{2}}$  | $\left[ \frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1} \right]^{\frac{1}{2}}$ |
| $j_1 - \frac{1}{2}$ | $-\left[ \frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1} \right]^{\frac{1}{2}}$ | $\left[ \frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1} \right]^{\frac{1}{2}}$ |

### § 3.5 转动算符的矩阵表示, $D$ 函数

现在我们来寻找(3.2.37)或(3.2.40)所表示的有限转动算符在正则基  $|jm\rangle$  中的矩阵表示, 记矩阵元为

$$D_{m'm}^{(j)}(\hat{R}) = \langle jm' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right) | jm \rangle \quad (3.5.1)$$

这个  $D$  函数也称为 Wigner 函数. 注意角动量量子数  $j$  在上式中是确定的, 原因是算符  $\hat{\mathbf{J}}^2$  与  $\hat{R}$  对易. 当然,  $\hat{J}_z$  与  $\hat{R}$  不对易, 故(3.5.1)式中磁量子数  $m$  和  $m'$  一般不等, 即  $D$  矩阵一般是  $(2j+1) \times (2j+1)$  的非对角矩阵, 称为转动算符  $\hat{R}$  (或为行文方便也称为  $D(\hat{R})$ ) 的  $(2j+1)$  维不可约表示. 下面列举它的性质.

(1) 当无转动即(3.5.1)中  $\theta = 0$  时, 它退化为单位矩阵.

(2) 因  $\hat{R}^\dagger = \hat{R}^{-1}$ ,  $\hat{R} \hat{R}^{-1} = \hat{R}^{-1} \hat{R} = 1$ , 故  $D$  是幺正的, 即:

$$D_{m'm}^{(j)}(\hat{R}^{-1}) = D_{mm'}^{(j)*}(\hat{R}) \quad (3.5.2)$$

其中  $\hat{R}^{-1}$  表示  $\hat{R}$  中  $\theta \rightarrow -\theta$  的转动 ( $\mathbf{n}$  保持不变).

(3) 两个相继的转动仍是一个转动, 这时  $D$  矩阵有相应的乘法运算:

$$\sum_{m''} D_{m''m'}^{(j)}(\hat{R}_1) D_{m''m}^{(j)}(\hat{R}_2) = D_{m''m}^{(j)}(\hat{R}_1 \hat{R}_2) \quad (3.5.3)$$

特例: 如  $\hat{R}_2 = \hat{R}$ ,  $\hat{R}_1 = \hat{R}^{-1}$ , 则由上面两式得出  $D$  矩阵的幺正性:

$$\sum_{m''} D_{m''m'}^{(j)*}(\hat{R}) D_{m''m}^{(j)}(\hat{R}) = \delta_{m''m} \quad (3.5.4)$$

(4)  $D$  矩阵元的物理意义可如下地看出

$$D(\hat{R}) | jm \rangle = \sum_{m'} | jm' \rangle \langle jm' | D(\hat{R}) | jm \rangle = \sum_{m'} | jm' \rangle D_{m'm}^{(j)}(\hat{R}) \quad (3.5.5)$$

可见  $D_{m'm}^{(j)}(\hat{R})$  是  $D(\hat{R})$  对  $|jm\rangle$  态作用后产生的  $|jm'\rangle$  态的振幅。

(5) 为具体地计算  $D$  矩阵, 我们不用(3.5.1)而改取(3.2.40)式用欧勒角来表示一般的转动, 于是记

$$\begin{aligned} D_{m'm}^{(j)}(\alpha\beta\gamma) &= \langle jm' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{J}_z \alpha\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{J}_y \beta\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{J}_z \gamma\right) | jm \rangle \\ &= \exp[-i(m'\alpha + m\gamma)] \langle jm' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{J}_y \beta\right) | jm \rangle \end{aligned} \quad (3.5.6)$$

可见  $D$  矩阵元对  $\alpha$  和  $\gamma$  的依赖性十分简单, 不平凡的性质完全包含在一个新矩阵元之中:

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) = \langle jm' | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{J}_y \beta\right) | jm \rangle \quad (3.5.7)$$

让我们先看  $j = \frac{1}{2}$  的简单情形, 这时  $\hat{J}_y = \frac{1}{2} \hbar \sigma_y$ ,  $\sigma_y^2 = 1$ , 故展开指数函数为级数后易证:

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{J}_y \beta\right) = \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) - i\sigma_y \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \quad (3.5.8)$$

$$d^{(\frac{1}{2})}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (3.5.9)$$

下面写出 Wigner 导得的一般公式(证略):

$$\begin{aligned} d_{m'm}^{(j)}(\beta) &= [(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \sum_k [(-1)^{k-m+m'} (j+m-k)! k! (j-k-m')! \\ &\times (k-m+m')!]^{-1} \\ &\times \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j+m-m'-2k} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{m'-m+2k} \end{aligned} \quad (3.5.10)$$

其中整数  $k$  的取值保证各阶乘式内的宗量为非负整数。

(6)  $D$  矩阵元与球谐函数的关系. 令  $\alpha = \phi$ ,  $\beta = \theta$ ,  $\gamma = 0$ , 与

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\theta, \phi) &= \frac{(-1)^l}{2^l l!} \left[ \frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\times \exp(im\phi) \frac{1}{\sin^m \theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}} (\sin\theta)^{2l}, \quad (m \geq 0) \end{aligned}$$

$$Y_{l-m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\theta, \phi) \quad (3.5.11)$$

比较后可见

$$D_{m0}^{(l)}(\phi, \theta, 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{lm}^*(\theta, \phi) \quad (3.5.12)$$

(7) 磁量子数翻转的对称性.

$$D_{m'm}^{(j)*}(\alpha\beta\gamma) = (-1)^{m'-m} D_{-m', -m}^{(j)}(\alpha\beta\gamma) \quad (3.5.13)$$

(8)  $D$  矩阵的耦合规则.

从(3.4.8)和(3.4.13)式, 可以写出

$$|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle = \sum_j C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm} |j_1 j_2; jm\rangle \quad (3.5.14)$$

两边用转动算符  $\hat{R}$  从左方作用, 用(3.5.5)式, 注意  $|j_1 j_2; jm\rangle$  是一个耦合态而  $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$  是两个态的直乘, 它们受到同步的转动, 故有

$$\begin{aligned} & \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} D_{m'_1 m_1}^{(j_1)}(\hat{R}) D_{m'_2 m_2}^{(j_2)}(\hat{R}) |j_1 j_2; m'_1 m'_2\rangle \\ &= \sum_j C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm} \sum_{m'} D_{m' m}^{(j)}(\hat{R}) |j_1 j_2; jm'\rangle \\ &= \sum_j \sum_{m'} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm} D_{m' m}^{(j)}(\hat{R}) \sum_{m'_1} C_{j_1 m'_1, j_2 m'_2}^{jm'} |j_1 j_2; m'_1 m'_2\rangle \end{aligned}$$

注意因  $m' = m'_1 + m'_2$ , 对  $m'$  的求和等价于对  $m'_2$  的求和, 故可比较此等式两端同类项的系数而得出  $D$  矩阵的耦合公式:

$$D_{m'_1 m_1}^{(j_1)}(\hat{R}) D_{m'_2 m_2}^{(j_2)}(\hat{R}) = \sum_j C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm} C_{j_1 m'_1, j_2 m'_2}^{jm'} D_{m' m}^{(j)}(\hat{R}) \quad (3.5.15)$$

(9)  $D$  矩阵的积分公式. 我们来计算积分

$$K = \int d\Omega D_{m'_1 m_1}^{(j_1)*}(\alpha\beta\gamma) D_{m'_2 m_2}^{(j_2)}(\alpha\beta\gamma) \quad (3.5.16)$$

其中积分遍及欧勒角的全部取值范围:

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{2\pi} d\gamma \int_0^\pi \sin\beta d\beta \quad (3.5.17)$$

利用(3.5.13)和(3.5.15)两式, 我们有

$$K = (-1)^{m'_1 - m_1} \int d\Omega D_{-m'_1 - m_1}^{(j_1)}(\alpha\beta\gamma) D_{m'_2 m_2}^{(j_2)}(\alpha\beta\gamma)$$

$$= (-1)^{m'_1 - m_1} \sum_j C_{j_1 - m'_1, j_2 m'_2}^{j m'_2 - m'_1} C_{j_1 - m_1, j_2 m_2}^j \int d\Omega D_{m'_2 - m'_1, m_2 - m_1}^{(j)}(\alpha\beta\gamma)$$

按(3.5.6)的  $D$  函数形式,先完成对  $\alpha$  和  $\gamma$  的积分:

$$\int_0^{2\pi} d\alpha \exp[-i(m'_2 - m'_1)\alpha] \int_0^{2\pi} d\gamma \exp[-i(m_2 - m_1)\gamma] = \delta_{m'_2 m'_1} \delta_{m_2 m_1} (2\pi)^2$$

故

$$K = (2\pi)^2 \delta_{m'_2 m'_1} \delta_{m_2 m_1} (-1)^{m'_1 - m_1} \sum_j C_{j_1 - m'_1, j_2 m'_1}^{j_0} C_{j_1 - m_1, j_2 m_1}^{j_0} \int_0^\pi d_{00}^{(j)}(\beta) \sin\beta d\beta \quad (3.5.18)$$

假定  $j$  为正整数(即  $j_1, j_2$  同为整数或同为半整数),则

$$d_{00}^{(j)}(\beta) = D_{00}^j(o, \beta, o) = \sqrt{\frac{4\pi}{2j+1}} Y_{j_0}^*(\beta, o) = P_j(\cos\beta) \quad (3.5.19)$$

(3.5.18)中的积分等于  $2\delta_{j_0}$ ,最后再用(3.4.19)式,并注意  $2(j_1 + m'_1)$  必为偶数,得到

$$\int d\Omega D_{m'_1 m_1}^{(j_1)*}(\alpha\beta\gamma) D_{m'_2 m_2}^{(j_2)}(\alpha\beta\gamma) = \frac{8\pi^2}{2j_1 + 1} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_2} \delta_{m'_1 m'_2} \quad (3.5.20)$$

这个  $D$  函数的正交归一化公式可以有物理上的应用. 对一个作为刚体的对称陀螺来说,  $D_{m'm}^{I*}(\alpha\beta\gamma)$  就是它量子运动的波函数,例如一形变的原子核,  $I$  是核的角动量,  $m$  是它沿对称轴分量的本征值,  $m'$  是它沿空间固定轴的投影,于是像(3.5.20)这种式子就是核转动态波函数的正交归一化公式(见(3.6.21)式).

## § 3.6 不可约张量算符, Wigner-Eckart 定理和选择规则

### 3.6A 标量算符和不可约张量算符

现在我们可以开始来讨论体系在转动下的对称性如何会影响跃迁过程的选择规则了. 首先回忆第二节(3.2.7)式,任何一个算符  $\hat{F}$  在转动后变为新算符

$$\hat{F}' = \hat{R} \hat{F} \hat{R}^\dagger \quad (3.6.1)$$

例如  $\hat{R} \hat{F} \hat{R}^\dagger = \hat{F}$ , 即算符在转动下不变,则称该算符为标量算符. 因为任一有限转动可以看作是连续地进行无穷小转动的结果,因此要研

究算符是否为标量算符,只须看它在无穷小转动下是否不变就够了.在转动角  $\delta\theta$  很小的情况下作展开:

$$\begin{aligned}\hat{R} \hat{F} \hat{R}^{-1} &= \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\delta\theta\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right] \hat{F} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\delta\theta\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right] \\ &\approx \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right) \hat{F} \left(1 + \frac{i}{\hbar}\delta\theta\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right) \\ &\approx \hat{F} - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\mathbf{n} \cdot [\hat{\mathbf{J}}, \hat{F}]\end{aligned}\quad (3.6.2)$$

因此要算符转动不变,必须有

$$[\hat{\mathbf{J}}, \hat{F}] = 0 \quad (3.6.3)$$

即该算符与体系的总角动量  $\hat{\mathbf{J}}$  可以对易.反过来,如(3.6.3)式成立,则  $\hat{F}$  是一个标量算符.

现在推广考虑非标量算符的情形.倘若有  $2\lambda + 1$  个算符  $\hat{T}_{\lambda\mu}$  (这里  $-\lambda \leq \mu \leq \lambda$ ) 满足关系:

$$\hat{R} \hat{T}_{\lambda\mu} \hat{R}^{-1} = \sum_{\mu'} D_{\mu'\mu}^{(\lambda)}(\hat{R}) \hat{T}_{\lambda\mu'} \quad (3.6.4)$$

( $D_{\mu'\mu}^{(\lambda)}(\hat{R})$  是转动  $\hat{R}$  的  $D$  矩阵元) 则称  $\hat{T}_{\lambda\mu}$  为一个  $\lambda$  阶的不可约张量算符. 此式左端对无穷小转动

$$\text{左端} \approx \hat{T}_{\lambda\mu} - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\mathbf{n} \cdot [\hat{\mathbf{J}}, \hat{T}_{\lambda\mu}]$$

右端用(3.5.1)式,等于

$$\begin{aligned}\text{右端} &\approx \sum_{\mu'} \langle \lambda\mu' | \left(1 - \frac{i}{\hbar}\delta\theta\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}\right) | \lambda\mu \rangle \hat{T}_{\lambda\mu'} \\ &= \hat{T}_{\lambda\mu} - \frac{i}{\hbar} \sum_{\mu'} \delta\theta\mathbf{n} \cdot \langle \lambda\mu' | \hat{\mathbf{J}} | \lambda\mu \rangle \hat{T}_{\lambda\mu'}\end{aligned}$$

可见(3.6.4)式等价于下述对易关系:

$$\mathbf{n} \cdot [\hat{\mathbf{J}}, \hat{T}_{\lambda\mu}] = \mathbf{n} \cdot \sum_{\mu'} \langle \lambda\mu' | \hat{\mathbf{J}} | \lambda\mu \rangle \hat{T}_{\lambda\mu'}$$

取  $\mathbf{n}$  分别沿  $z$ 、 $x$  和  $y$  方向,即得

$$\begin{aligned}[\hat{J}_z, \hat{T}_{\lambda\mu}] &= \mu \hbar \hat{T}_{\lambda\mu} \\ [\hat{J}_{\pm}, \hat{T}_{\lambda\mu}] &= [\lambda(\lambda+1) - \mu(\mu \pm 1)]^{\frac{1}{2}} \hbar \hat{T}_{\lambda, \mu \pm 1}\end{aligned}\quad (3.6.5)$$

据此不难证明(3.5.11)式定义的球谐函数  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  当  $l = 1$  时有

$$\begin{aligned} Y_{11} &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{r} \left[-\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy)\right] \\ Y_{10} &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{z}{r} \\ Y_{1-1} &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{r} \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy)\right] \end{aligned} \quad (3.6.6)$$

是  $\lambda = 1$  的一阶不可约张量算符, 又称为向量算符. 同样, 在(3.2.26)及(3.2.28)式定义的内禀角动量为 1 的自旋算符

$$\hat{S}_0 = \hat{S}_z, \quad \hat{S}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{S}_x \pm i\hat{S}_y) \quad (3.6.7)$$

也是  $\lambda = 1$  的一阶不可约张量算符. 而由(3.2.36)定义的向量球谐函数则是  $\lambda = J$  的不可约张量算符.

现在我们讨论一个态(它是由  $\hat{T}_{\lambda\mu}$  作用到某个角动量本征态  $\psi_{jm}$  上构成)

$$\Psi_{JM} = \sum_{\mu} C_{\lambda\mu, jm}^{JM} \hat{T}_{\lambda\mu} \psi_{jm} \quad (3.6.8)$$

在转动下的变换性质, 为此将转动算符  $\hat{R}(\alpha\beta\gamma)$  作用上去:

$$\begin{aligned} \hat{R} \Psi_{JM} &= \sum_{\mu} C_{\lambda\mu, jm}^{JM} \hat{R} \hat{T}_{\lambda\mu} \hat{R}^{-1} \hat{R} \psi_{jm} \\ &= \sum_{\mu} C_{\lambda\mu, jm}^{JM} \sum_{\mu'} D_{\mu'\mu}^{(\lambda)} \hat{T}_{\lambda\mu'} \sum_{m'} D_{m'm}^{(j)} \psi_{jm'} \\ &= \sum_{\mu} C_{\lambda\mu, jm}^{JM} \sum_{\mu'} \sum_{m'} \sum_{J'} C_{\lambda\mu', jm'}^{J'M'} C_{\lambda\mu, jm}^{J'M} D_{MM}^{(J')} \hat{T}_{\lambda\mu'} \psi_{jm'} \end{aligned}$$

对第一, 三两个 CG 系数, 对  $\mu$  求和时由(3.4.14)式给出  $\delta_{JJ'}$ , 于是

$$\begin{aligned} \hat{R} \Psi_{JM} &= \sum_{\mu'} \sum_{m'} C_{\lambda\mu', jm'}^{JM'} D_{MM}^{(J)} \hat{T}_{\lambda\mu'} \psi_{jm'} \\ &= \sum_{M'} D_{MM}^{(J)}(R) \left( \sum_{\mu'} C_{\lambda\mu', jm'}^{JM'} \hat{T}_{\lambda\mu'} \psi_{jm'} \right) \\ &= \sum_{M'} D_{MM}^{(J)}(R) \Psi_{JM'} \end{aligned} \quad (3.6.9)$$

由此可见, 一个不可约张量算符  $\hat{T}_{\lambda\mu}$  作用到一个态  $\psi_{jm}$  上所得的态  $\Psi_{JM}$  具有角动量量子数  $J$  和  $M$ , 彼此关系犹如角动量的相加:  $J = \lambda + j$ ,  $M = \mu + m$ .

### 3.6B Wigner-Eckart 定理

当我们计算不可约张量算符  $\hat{T}_{\lambda\mu}$  在两个角动量本征态间的矩阵元时, 可以证明它必能分为两个因子的乘积:

$$\langle \psi_{j'm'} | \hat{T}_{\lambda\mu} | \psi_{jm} \rangle = C_{\lambda\mu, jm}^{j'm'} \langle \psi_{j'} || \hat{T}_{\lambda} || \psi_j \rangle \quad (3.6.10)$$

其中 CG 系数与磁量子数  $\mu, m$  和  $m'$  有关, 即与体系的空间取向有关, 它反映了矩阵元在空间转动下的对称性, 从而决定了矩阵元的角动量选择规则: 仅当  $j$  量子数满足不等式条件  $|\lambda - j| \leq j' \leq \lambda + j$  时, 矩阵元才不为零. 式中第二个因子  $\langle \psi_{j'} || \hat{T}_{\lambda} || \psi_j \rangle$  称为约化矩阵元, 它与磁量子数无关, 其大小体现了过程的物理实质. (3.6.10) 式叫做 Wigner-Eckart 定理.

证 从 (3.6.8) 式出发, 乘上一个 CG 系数用 (3.4.13) 式后可以得到 (3.6.8) 之逆变换为:

$$\hat{T}_{\lambda\mu} \psi_{jm} = \sum_J C_{\lambda\mu, jm}^{JM} \Psi_{JM} \quad (3.6.11)$$

故

$$\langle \psi_{j'm'} | \hat{T}_{\lambda\mu} | \psi_{jm} \rangle = \sum_J \langle \psi_{j'm'} | \Psi_{JM} \rangle C_{\lambda\mu, jm}^{JM} \quad (3.6.12)$$

而

$$\begin{aligned} \langle \psi_{j'm'} | \Psi_{JM} \rangle &= \langle \psi_{j'm'} | \hat{R}^+(\alpha\beta\gamma) \hat{R}(\alpha\beta\gamma) | \Psi_{JM} \rangle \\ &= \sum_{m''} \sum_M D_{m''m'}^{(j')*}(\alpha\beta\gamma) D_{MM}^{(J)}(\alpha\beta\gamma) \langle \psi_{j'm''} | \Psi_{JM'} \rangle \end{aligned}$$

上式对任意的欧勒角  $\alpha, \beta, \gamma$  都成立, 我们可以对它们积分, 注意左端与  $\alpha, \beta, \gamma$  无关, 故

$$\text{左端} = \int \langle \psi_{j'm'} | \Psi_{JM} \rangle \sin\beta d\alpha d\beta d\gamma = 8\pi^2 \langle \psi_{j'm'} | \Psi_{JM} \rangle$$

$$\text{右端} = \sum_{m''} \sum_M \langle \psi_{j'm''} | \Psi_{JM'} \rangle \int D_{m''m'}^{(j')*}(\alpha\beta\gamma) D_{MM}^{(J)}(\alpha\beta\gamma) \sin\beta d\alpha d\beta d\gamma$$

我们现在用公式 (3.5.20), 便得到

$$\begin{aligned} \langle \psi_{j'm'} | \Psi_{JM} \rangle &= \frac{1}{2j'+1} \sum_{m'', M} \delta_{Jj'} \delta_{Mm'} \delta_{Mm''} \langle \psi_{j'm''} | \Psi_{JM'} \rangle \\ &= \delta_{Jj'} \delta_{Mm'} \left[ \frac{1}{2j'+1} \sum_{m''} \langle \psi_{j'm''} | \Psi_{JM'} \rangle \right] \end{aligned}$$

注意括号 [ ] 中的量是对  $m''$  平均后的, 因而与磁量子数无关, 故特别记它为  $\langle \psi_{j'} || \hat{T}_{\lambda} || \psi_j \rangle$ , 代回 (3.6.12) 式, 就有



$$\begin{aligned}\langle \psi_{j'm'} | \hat{T}_{\lambda\mu} | \psi_{jm} \rangle &= \sum_J C_{\lambda\mu, jm}^{JM} \delta_{Jj'} \delta_{Mm'} \langle \psi_{j'} || \hat{T}_\lambda || \psi_j \rangle \\ &= C_{\lambda\mu, jm}^{j'm'} \langle \psi_{j'} || \hat{T}_\lambda || \psi_j \rangle\end{aligned}\quad (3.6.13)$$

这正是(3.6.10)式, Wigner-Eckart 定理证毕.

### 3.6C 选择规则

有了 W-E 定理(3.6.13)式, 我们可以讨论一些应用的例子.

#### (1) 电偶极(E1)跃迁矩阵元和选择规则

将在下一章详细讨论的电磁跃迁(光辐射或吸收)中最常遇到的决定几率大小的一个积分是两个定态间的矩阵元

$$\langle j_f m_f | \hat{r} | j_i m_i \rangle = \int d\mathbf{r} \psi_{j_f m_f}^+(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_{j_i m_i}(\mathbf{r}) \quad (3.6.14)$$

$\mathbf{r}$  是原子中电子的位置矢量, 按(3.6.13)式, 因  $\mathbf{r}$  是  $\lambda = 1$  的不可约张量 [见(3.6.6)式], 要这个偶极矩阵元不为零, 初态和末态的角动量  $j_i$  和  $j_f$  必须满足条件:

$$|j_i - j_f| \leq 1 \leq j_i + j_f \quad (3.6.15)$$

否则(3.6.13)前面的 CG 系数将等于零, 这是角动量的选择规则. 实际上还不止此, 因为(3.6.14)是一个对  $\mathbf{r}$  的积分, 所以  $\psi_{j_i m_i}(\mathbf{r})$  与  $\psi_{j_f m_f}(\mathbf{r})$  作为  $\mathbf{r}$  的函数必须一奇一偶, 才能使(3.6.13)中的约化矩阵元不为零, 这就涉及态的宇称性质, 宇称  $\Pi$  决定于电子轨道角动量量子数  $l$ :  $\Pi = (-1)^l$ , 所以(3.6.14)的宇称选择规则是

$$\Pi_i \Pi_f = -1 \quad (E1) \quad (3.6.16)$$

下一章我们再讨论这两个选择规则的具体应用, 这里只指出一个特例: 一个定态是不可能由电偶极矩的(因这时  $l_i = l_f$ ,  $\Pi_i \Pi_f = (-1)^{2l_i} = 1 \neq -1$ , 违反(3.6.16)式).

#### (2) 磁偶极(M1)跃迁矩阵元和选择规则

这时要考虑一个粒子的磁矩算符  $\hat{\boldsymbol{\mu}} = g_s \hat{\mathbf{S}} + g_l \hat{\mathbf{L}}$  在两个定态间的矩阵元  $\langle j_f m_f | \hat{\boldsymbol{\mu}} | j_i m_i \rangle$ ,  $\hat{\mathbf{S}}$  和  $\hat{\mathbf{L}}$  是粒子的自旋和轨道角动量,  $g_s$  和  $g_l$  分别是相应的回转磁比率.  $\hat{\mathbf{S}}$  和  $\hat{\mathbf{L}}$  都是  $\lambda = 1$  的不可约张量算符, 故我们仍有选择规则(3.6.15), 但是代替 E1 情况下的(3.6.16), 现在有

$$\Pi_i \Pi_f = 1 \quad (M1) \quad (3.6.17)$$

特例: 一个原子或原子核中的定态可以有磁偶极矩.

## (3) 原子核的电四极矩

取一个形变(通常呈拉长型旋转椭球形状)的原子核的“体坐标系”对称轴为  $z'$  轴, 定义“经典的”电四极矩为

$$Q_0 = \int d\mathbf{r}' (3z'^2 - r'^2) \rho(\mathbf{r}') \quad (3.6.18)$$

$\rho$  是电荷密度, 它对应于一个二阶张量算符:

$$\hat{Q}_{20}^{(0)} = 2\sqrt{\frac{4\pi}{5}} \sum_{i=1}^A e_i r_i'^2 Y_{20}(\theta_i', \phi_i') \quad (3.6.19)$$

$e_i$  表示  $A$  个核子中第  $i$  个的电荷 ( $e_p = e, e_n = 0$ ), 使得

$$\langle \Phi_K(\cdots \mathbf{r}_i' \cdots) | \hat{Q}_{20}^{(0)} | \Phi_K(\cdots \mathbf{r}_i' \cdots) \rangle = Q_0 \quad (3.6.20)$$

其中  $\Phi_K(\cdots \mathbf{r}_i' \cdots)$  是“体坐标系”中写出的核子内部运动波函数,  $K$  是核总角动量  $I$  在  $z'$  轴上的投影. 按量子力学, 在绝热近似下, 此原子核的多体波函数可以写为因式化形式:

$$\Psi_{MK}^I(\cdots \mathbf{r}_i \cdots) = \Phi_K(\cdots \mathbf{r}_i' \cdots) \left[ \sqrt{\frac{2I+1}{8\pi^2}} D_{MK}^{(I)*}(\alpha\beta\gamma) \right] \quad (3.6.21)$$

其中  $\mathbf{r}_i$  是第  $i$  个核子在实验室的坐标,  $M$  是  $I$  在固定  $z$  轴上的投影,  $(\alpha, \beta, \gamma)$  是从实验室坐标系转到体坐标系的欧勒角, 而括号内的  $D$  函数正是归一化的陀螺(转动核)的波函数. 我们定义在实验室系的电四极矩算符

$$\hat{Q}_{2\mu} = 2\sqrt{\frac{4\pi}{5}} \sum_{i=1}^A e_i r_i^2 Y_{2\mu}(\theta_i, \phi_i) \quad (3.6.22)$$

和在实验室测得之核电四极矩为

$$Q \equiv \langle \Psi_{MK}^I | \hat{Q}_{20} | \Psi_{MK}^I \rangle |_{M=I} \quad (3.6.23)$$

以(3.6.22)代入转到体坐标系计算时还需要将  $\hat{Q}_{2\mu}$  与  $\hat{Q}_{2\mu}^{(0)}$  联系起来, 根据(3.6.4)及(3.5.2)式

$$\hat{Q}_{2\mu} = \sum_{\mu'} D_{\mu\mu'}^{(2)*}(\alpha\beta\gamma) \hat{Q}_{2\mu'}^{(0)} \quad (3.6.24)$$

$$\langle \hat{Q}_{2\mu} \rangle = \frac{2I+1}{8\pi^2} \sum_{\mu'} \langle \Phi_K | \hat{Q}_{2\mu'}^{(0)} | \Phi_K \rangle \int d\Omega D_{MK}^{(I)}(\alpha\beta\gamma) D_{\mu\mu'}^{(2)*}(\alpha\beta\gamma) D_{MK}^{(I)*}(\alpha\beta\gamma)$$

其中 3 个  $D$  函数对欧勒角的积分由(3.5.15), (3.5.20)可知等于

$$\delta_{\mu 0} \delta_{\mu' 0} \frac{8\pi^2}{2I+1} C_{2\mu, IM}^{IM} C_{2\mu', IK}^{IK}, \text{ 注意(3.6.20)及(3.6.23)式(令 } M=I \text{):}$$

$$Q = C_{20, II}^{II} C_{20, IK}^{IK} Q_0 = \frac{3K^2 - I(I+1)}{(I+1)(2I+3)} Q_0 \quad (3.6.25)$$

在原子核基态,转动不激发,必有  $K = I$ , 于是我们得到核在实验室的电四极矩  $Q$  与其“内禀”电四极矩  $Q_0$  的关系:

$$Q = \frac{I(2I-1)}{(I+1)(2I+3)} Q_0 \quad (3.6.26)$$

有趣的是,即使  $Q_0 \neq 0$  (核偏离球形),只要  $I = 0$  或  $I = \frac{1}{2}$ , 必有  $Q = 0$ ,

在实验室中电荷仍呈球对称分布,这当然是因为量子运动使原来不均匀的空间分布重新均匀化的缘故. 这件事当然可以从(3.6.23)式直接用 W-E 定理(3.6.13)式去看,

$$Q = \langle \hat{Q}_{20} \rangle |_{M=I} = [C_{20, IM}^{IM} \langle \Psi_K^I | \hat{Q}_2 | \Psi_K^I \rangle]_{M=I} \quad (3.6.27)$$

其中 CG 系数  $C_{20, II}^{II}$  固然对  $I = 0, \frac{1}{2}$  给出零,但实际上约化矩阵元作为对不同磁量子数  $M$  的  $\langle \hat{Q}_{20} \rangle$  平均值,也等于零. 所以为什么  $Q = 0$  的物理意义,最好还是转到体坐标系后才能看清楚,如(3.6.26)所示.

## § 3.7 对称性和守恒律

### 3.7A 可观察量和不可观察量

我们在前几节角动量理论中已经看到:一个有限转动算符  $\hat{R}(\alpha\beta\gamma)$  是一个么正算符,它不对应于直接可观察量,但是它的无限小生成元,即角动量算符  $\hat{J}$ , 却对应于可观察量. 以绕  $z$  轴转动无限小角度  $\theta$  为例(以下记  $\hbar = 1$ ):

$$\hat{R}_z(\theta) = \exp(-i\theta \hat{J}_z) \approx 1 - i\theta \hat{J}_z \quad (3.7.1)$$

如果说:“有一个态  $|\psi\rangle$  在  $\hat{R}_z$  作用下不变”,或者说:“它具有绕  $z$  轴的旋转对称性”,这句话的意思是指:

$$\hat{R}_z(\theta) |\psi\rangle = \exp(-i\delta) |\psi\rangle \quad (3.7.2)$$

即  $|\psi\rangle$  在准确到一个(绝对)相因子  $e^{-i\delta}$  乘数时是不变的,这是因为量子力学中的态矢量或波函数,都不是直接可观察量. 然而相对的相因子又是重要的,我们让  $\theta$  从 0 变到  $2\pi$ , 态  $|\psi\rangle$  便绕  $z$  轴一圈回到了原处,这时如要求  $e^{-i\delta} = 1$ , 结合(3.7.1)和(3.7.2)两式,立刻得出等式:

$$\hat{J}_z |\psi\rangle = m |\psi\rangle, m = 0, \pm 1, \dots \quad (3.7.3)$$

这意味着 $|\psi\rangle$ 是 $\hat{J}_z$ 的具有本征值为 $m$ 的本征态. 如果允许 $e^{-i\theta} |_{\theta=2\pi} = -1$ 的话, $m$ 还可以为半整数 $\pm \frac{1}{2}, \dots$ . 用群论的语言讲, 允许 $m$ 由整数扩大到半整数, 我们就由正交转动群 $SO(3)$ 扩大到考察它的覆盖群 $SU(2)$ , 这在物理上就对应于电子等自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的存在.

从特殊到一般, 我们不妨建立如下的理论范式: 假定体系在某个变换 $\hat{Q}$ 下具有对称性, 即态 $|\psi\rangle$ 在变换后

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle = \hat{Q} |\psi\rangle \quad (3.7.4)$$

既保持几率不变:

$$\langle \psi' | \psi' \rangle = \langle \psi | \hat{Q}^\dagger \hat{Q} | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle \quad (3.7.5)$$

又保持运动规律不变:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi'\rangle = \hat{H} |\psi'\rangle \quad (3.7.6)$$

(3.7.5)式意味着 $\hat{Q}^\dagger = \hat{Q}^{-1}$ , 即 $\hat{Q}$ 是一个么正算符. (3.7.6)式应与 $|\psi\rangle$ 的原来方程比较:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (3.7.7)$$

设 $\hat{Q}$ 不显含时间, 从左方作用于(3.7.7)式, 与(3.7.6)(以(3.7.4)代入)式比较, 即见 $\hat{Q}$ 与哈密顿量 $\hat{H}$ 对易:

$$[\hat{Q}, \hat{H}] \equiv \hat{Q} \hat{H} - \hat{H} \hat{Q} = 0 \quad (3.7.8)$$

这就是体系具有 $\hat{Q}$ 变换下不变性(对称性)的条件. 让我们考虑无限小变换:

$$\hat{Q} = 1 + i\epsilon \hat{F} \quad (3.7.9)$$

$\epsilon$ 是无限小变换的参量, 于是由 $\hat{Q}^\dagger \hat{Q} = 1$ , 有

$$(1 - i\epsilon \hat{F}^\dagger)(1 + i\epsilon \hat{F}) = 1 + i\epsilon(\hat{F} - \hat{F}^\dagger) + o(\epsilon^2) = 1$$

所以 $\hat{F} = \hat{F}^\dagger$ , 即 $\hat{F}$ 是一个厄密(自轭)算符, 它对应于可观察量. 以(3.7.9)代入(3.7.8)式, 可见体系具有变换 $\hat{Q}$ 对称性的条件, 等价于 $\hat{F}$ 与 $\hat{H}$ 对易的条件:

$$[\hat{H}, \hat{F}] = 0 \quad (3.7.10)$$

即 $\hat{F}$ 是运动中的一个守恒量.

总之,量子力学中一个不可观察量(在转动情况下是角度)的对称性变换往往联系于一个可观察量(在转动情况下是角动量)的守恒性.下面我们将进一步运用这个经验.

### 3.7B 空间的均匀性及动量守恒

把体系沿  $x$  轴方向平移一无限小距离  $\epsilon$ ,并用算符  $\hat{D}_x(\epsilon)$  来记这个变换操作,则体系具有空间平移不变性意味着:

$$[\hat{D}_x(\epsilon), \hat{H}] = 0 \quad (3.7.11)$$

将  $\hat{D}_x(\epsilon)$  作用到一个态  $|\psi\rangle$  的波函数  $\psi(x)$  上,按平移的意义:

$$\begin{aligned} \psi(x) \rightarrow \psi'(x) &= \hat{D}_x(\epsilon)\psi(x) = \psi(x-\epsilon) \\ &\approx \psi(x) - \epsilon \frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = (1 - i\epsilon \hat{p}_x)\psi(x) \end{aligned} \quad (3.7.12)$$

可见平移算符的无限小生成元不是别的,正是我们熟悉的动量算符

$$\hat{p}_x = -i \frac{\partial}{\partial x}.$$

不难推广到在  $x$  方向平移有限距离  $a$  的平移算符为

$$\hat{D}_x(a) = \exp(-ia \hat{p}_x) \quad (3.7.13)$$

当然,动量的本征态是平面波,但具有空间平移不变性的体系,所处的状态并不一定是动量本征态,一般说来,可以是许多平面波的叠加,即是一个波包.

### 3.7C 时间的均匀性与能量守恒

把一个体系的态  $|\psi(t)\rangle$  在时间上平移一无限小量  $\tau$ ,相应之操作记为

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi'(t)\rangle &= \hat{D}(\tau) |\psi(t)\rangle \approx \left(1 + \tau \frac{\partial}{\partial t}\right) |\psi(t)\rangle \\ &\approx \exp\left[-i\tau \left(i \frac{\partial}{\partial t}\right)\right] |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (3.7.14)$$

于是我们看到,时间平移算符的无限小生成元就是能量算符

$$\hat{E} = i \frac{\partial}{\partial t} \quad (3.7.15)$$

注意它与动量算符  $\hat{p}_x = -i \frac{\partial}{\partial x}$  有一个符号之差,原因是(3.7.14)式的

说法与(3.7.12)式不同. 在那里, 我们可以沿  $x$  轴移动一个体系  $\epsilon$  距离而认定在  $x$  点的波函数就是原来在  $(x-\epsilon)$  点的波函数; 而在这里, 我们顺其自然, 让体系在  $t$  时刻的状态在我们操作下演化到  $(t+\tau)$  时刻的状态, 相当于我们把时钟拨快了  $\tau$  秒, 使一切现象都提前  $\tau$  秒发生.

假设体系的演化具有时间不变性, 即虽然现象不同,  $|\psi'(t)\rangle \neq |\psi(t)\rangle$ , 但规律不变, 即它们服从同样的薛定谔方程, 则和上小节一样, 我们得到结论:

$$[\hat{D}(\tau), \hat{H}] = 0 \quad (3.7.16)$$

这表示哈密顿量  $\hat{H}$  不含时间,  $\frac{\partial}{\partial t} \hat{H} = 0$ . 于是薛定谔方程

$$\hat{H} |\psi(t)\rangle = i \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{E} |\psi(t)\rangle \quad (3.7.17)$$

就可能存在一种定态解:  $\langle x | \psi(t) \rangle = \psi(x) \exp(-iEt)$ ,  $E$  是能量本征值.

总结本章以上所说, 我们列出下面的表 3.7.1.

表 3.7.1

| 不可观察量     | 对称性变换   | 可观察的守恒定律或选择规则      |
|-----------|---|--------------------|
| 全同粒子之间的区别 | 粒子置换 ( $i \leftrightarrow j$ )                                | 玻色-爱因斯坦统计或费米-狄拉克统计 |
| 绝对空间位置    | 空间平移<br>$r \rightarrow r + \Delta$                            | 动量 $p$             |
| 绝对时间      | 时间平移 $t \rightarrow t + \tau$                                 | 能量 $E$             |
| 绝对空间方向    | 转动: $\hat{r} \rightarrow \hat{r}' = \hat{D}(\hat{R}) \hat{r}$ | 角动量 $J$            |
| 绝对速度      | 洛伦兹变换   | 洛伦兹群的生成元           |
| 绝对的左或右    | 空间反演<br>$r \rightarrow -r$                                    | 宇称                 |

注: 表上新增的内容将在下一节及本书以后各章讨论. (引自文献[5])

## § 3.8 空间反演和宇称

上面表 3.7.1 中第二到第五行讨论的都是连续的对称性变换, 而第一和第六行却涉及分立(离散, discrete)变换的对称性, 现在我们来讨论空间反演.

### 3.8A 量子态和算符的宇称

在经典物理中早有左, 右对称的概念, 例如取一面镜子来看, 镜外的

一个右手坐标系在镜内就变成了左手坐标系(注意:观察者只是一个“我”,永远耽在镜外,同时去看镜外和镜内的现象。)但是这种对称观念并没有带来多少物理上有意义的新结果。

在量子物理中情况完全不同了.首先注意“照镜子”这一操作在相关一个平庸的转动外就等价于空间反演: $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ .将这个反演算符记为  $\hat{\Pi}$ ,则一个粒子态  $|\psi\rangle$  的波函数  $\psi(\mathbf{x}) = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle$  在  $\hat{\Pi}$  作用下变为 ( $\hat{\Pi} | \mathbf{x} \rangle = | -\mathbf{x} \rangle$ ):

$$\psi(\mathbf{x}) \rightarrow \langle \mathbf{x} | \hat{\Pi} | \psi \rangle = \langle -\mathbf{x} | \psi \rangle = \psi(-\mathbf{x}) \quad (3.8.1)$$

连续作用二次还原:

$$\langle \mathbf{x} | \hat{\Pi}^2 | \psi \rangle = \langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}) \quad (3.8.2)$$

故  $\hat{\Pi}^2 = 1$ , 或  $\hat{\Pi}^{-1} = \hat{\Pi}^{\dagger} = \hat{\Pi}$ , 即  $\hat{\Pi}$  既是么正算符又是厄密算符,它只有两个本征值: +1 或 -1, 相应之本征态是

$$\psi_{\text{even}}(-\mathbf{x}) = \psi_{\text{even}}(\mathbf{x}), \quad \psi_{\text{odd}}(-\mathbf{x}) = -\psi_{\text{odd}}(\mathbf{x}) \quad (3.8.3)$$

分别叫做偶宇称态和奇宇称态.对于在中心场  $V(r)$  中运动的粒子,因为  $\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ , 而  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  相当于  $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \phi \rightarrow \phi + \pi$ , 可见这个宇称本征值等于

$$\Pi = (-1)^l \quad (3.8.4)$$

量子力学中的算符也可以按其在空间反演下的性质分为奇宇称的和偶宇称的.例如动量算符  $\hat{\mathbf{p}}$  和  $\mathbf{x}$  一样是奇宇称的:

$$\hat{\Pi} \hat{\mathbf{p}} \hat{\Pi}^{-1} = -\hat{\mathbf{p}} \quad (3.8.5)$$

这可以从  $\hat{\mathbf{p}}$  的位形空间表示  $\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla$  来理解.同理轨道角动量算符  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$  是偶宇称的.

这里加一个附注:讨论变换可以有两种讲法,主动式和被动式,前几节我们用的都是主动式.对空间反演又多了第三种用镜子的讲法:

(1) 主动式:一个矢量如  $\mathbf{x}$  或  $\mathbf{p}$  在空间反向,而坐标系不动,于是矢量的分量  $x_i$  或  $p_i$  ( $i = x, y, z$ ) 都改了符号,因此说矢量是空间反演下的奇宇称算符.易见角动量  $\mathbf{L}$  的分量不变号(偶宇称).

(2) 被动式: $\mathbf{x}$  或  $\mathbf{p}$  不动,但坐标系反向, $x_i$  或  $p_i$  仍变号,注意因坐标系由右手的变为左手的,矢量积规则随之改变,故一个角动量如  $\mathbf{L}$  的分量仍不变号.凡是在空间反演下其分量不变号的矢量叫做赝矢量(或轴矢量),如角动量,自旋等.

(3) 镜像法:人在镜外看镜外的一个矢量在镜内的像,认为它在镜外

坐标系上的分量改了号,所以是奇宇称的(已计入坐标系的一个平庸的 $180^\circ$ 转动)。(虽然在镜内左手坐标系上的投影不改号,但我们记住自己不要跑进去)。相反地,一个赝矢量在镜内的像从镜外的“我”看来,并没有改变方向,所以是偶宇称的。

两个矢量的标积如  $\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{x}$  是一个标量,它在空间反演下不变号,但一个矢量与一个赝矢量的标量积,如  $\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{s}$  这个动量与自旋的乘积却不是真的标量,而叫做赝标量,因为它在空间反演下要变号:

$$\hat{\Pi} \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{x} \hat{\Pi}^{-1} = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{x}, \quad \hat{\Pi} \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{s} \hat{\Pi}^{-1} = -\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{s} \quad (3.8.6)$$

### 3.8B 宇称守恒定律

量子态可以有宇称量子数这件事极为重要,它使得经典物理中关于“自然界存在基本的左右对称性”这个信念变成了一个定律——宇称守恒定律。首先,人们相信,支配运动规律的哈密顿量  $\hat{H}$  是一个在空间反演下不变号的标量,例如它可以含有  $\boldsymbol{p}^2, \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S}$  (自旋-轨道耦合) 等项,但不能含有  $\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{S}$  这种赝标量项。其次,我们还必须为多粒子体系在有粒子产生和湮灭的情形下规定体系的总宇称。假设体系处在中心势场中,则第  $j$  个粒子的“轨道宇称”,如前述,等于  $(-1)^{l_j}$ ,但它还有一个内禀宇称,记为  $P_j$  (它的标定当然是相对的,通常令电子、质子等的  $P = 1$ ,再由宇称守恒定律标定其他粒子的内禀宇称)。则在反应过程前初态  $N_i$  个粒子的总宇称等于反应后末态  $N_f$  个粒子的总宇称:

$$\prod_j^{N_i} (-1)^{l_j} P_j = \prod_k^{N_f} (-1)^{l_k} P_k \quad (3.8.7)$$

这一表述叫做宇称守恒定律。

### 3.8C 宇称不守恒的发现

1956年,李政道和杨振宁根据当时粒子物理研究中一个关于荷电  $K$  介子衰变问题的困惑( $\theta\tau$  之谜,今从略),怀疑宇称守恒定律不一定普遍正确<sup>[6]</sup>。他们仔细地分析了到那时为止的全部物理实验,发现宇称守恒定律在强相互作用和电磁相互作用中有充分的实验支持。因为如果宇称不守恒的话,那些原子或原子核的定态,将不再是通常标定的宇称纯态,而是混杂有相反宇称的混合态,后者混合的程度就是宇称不守恒(破坏)的一种量度。然而,根据原子光谱(见下章)中存在选择定则这个事实,可以估计混合的程度约为  $10^{-6}$ ,在核反应中实验精确度要差一些,混合程度



$<10^{-4}$ , 由质子特别是中子的电偶极矩(见(3.6.16)式后的讨论)的实测上限又可判定混合程度  $<3 \times 10^{-13}$ , 所以在电磁和强作用过程中, 宇称守恒定律以很高的精确度成立.

那么, 在包括各种衰变在内的弱相互作用领域, 情况又如何呢? 实验少得多, 精确度也差, 他们决定仔细研究当时相对地做得最多的  $\beta$  衰变. 原子核中的一个中子  $n$  在下面过程

$$n \longrightarrow p + e^{-} + \bar{\nu}_e \quad (3.8.8)$$

中变成一个质子  $p$ 、一个电子  $e^{-}$  和一个反中微子  $\bar{\nu}_e$ . 因为要考虑宇称可能不守恒, 他们假定哈密顿量可分成两项:

$$\hat{H} = C\hat{H}_S + C'\hat{H}_P \quad (3.8.9)$$

这里(我们已简化了叙述)  $\hat{H}_S$  和  $\hat{H}_P$  分别是标量和赝标量,  $C$  和  $C'$  是分别的耦合常数. 李-杨经过计算证明, 过去所有的观察量, 例如  $\beta$  衰变几率的表示式中, 只是以  $|C|^2 + |C'|^2$  代替过去的  $|C|^2$ , 而这是实验上无法区分的. 因此得出结论: 到那时为止的一切  $\beta$  衰变实验, 完全没有涉及宇称是否守恒的问题! 这真是惊人之语.

下一步是“画龙点睛”之笔. 李-杨指出: 要肯定(3.8.9)式中  $C'$  项的存在, 必须测量出正比于干涉项  $CC'$  的观察量, 而这些量一定是在空间反演下变号的赝标量.

李-杨想到的第一个可能测量的赝标量是  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{S}$  (见(3.8.6)式), 让原子核自旋  $\mathbf{S}$  在低温下沿外磁场固定方向排列起来, 测量这种“极化核”  $\beta$  衰变时放出来的电子(动量  $\mathbf{p}$ ) 对  $\mathbf{S}$  方向的角分布:

$$I(\theta)d\theta = (\text{常数})(1 + \alpha\cos\theta)\sin\theta d\theta \quad (3.8.10)$$

计算表明, 式中的系数  $\alpha$  正比于  $CC'$  干涉项, 而  $\cos\theta \sim \mathbf{p} \cdot \mathbf{S}$ : 确实是一个赝标量.  $\alpha \neq 0$  就将是宇称不守恒的确定证据. 实验上只要测量  $\theta < 90^\circ$  (朝上) 和  $\theta > 90^\circ$  (朝下) 两个半球内的出射电子的不对称性, 便可直接测定  $\alpha$  之值为

$$\alpha = \frac{2 \left[ \int_0^{\frac{\pi}{2}} I(\theta) d\theta - \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} I(\theta) d\theta \right]}{\int_0^{\pi} I(\theta) d\theta} \quad (3.8.11)$$

李-杨具体建议用  $^{60}\text{Co}$  核来做这种实验, 很快地, 由吴健雄等人成功地实现了. 实验测出  $\alpha < 0$ , 且达到理论上最大的可能性. 从而证明了在  $\beta$  衰变中宇称不守恒, 且不守恒的程度达到极大<sup>[7]</sup>.

不久,其他实验如测量 $\beta$ 衰变中出射电子的纵向极化,即平均值 $\langle \hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} \rangle \neq 0$  ( $\hat{\boldsymbol{p}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{S}}$ 分别为电子的动量和自旋方向的单位矢量),都一致地证明在弱相互作用过程中宇称守恒定律不复成立. 对于有中微子参与的过程,一种最吸引人的理论<sup>[8]</sup>是把宇称不守恒的根源完全归之于中微子的本性:正中微子 $\nu$ 永远是左旋的( $\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} = -1$ ),反中微子 $\bar{\nu}$ 永远是右旋的( $\hat{\boldsymbol{p}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} = 1$ ),自然界不存在右旋的 $\nu$ 和左旋的 $\bar{\nu}$ . (这已由Goldhaber等的实验<sup>[10]</sup>证明). 中微子可能有这种永远纵向极化的性质是因为当时大家都认为它的静质量等于零因而永远以光速运动. 关于这种“二分量中微子”理论及中微子质量等问题,我们将在附录9B再讨论. 最后指出:由于弱作用中宇称不守恒,所有轻子如电子, $\mu$ 子, $\tau$ 子及相应的中微子(它们只参与弱作用和电磁作用,而不参与强作用)的内禀宇称 $P$ 都没有意义,故在粒子表上它们只标明自旋 $J = \frac{1}{2}$ 而不再标明 $P$ .

最近,史志强和倪光炯预言了一种新的宇称不守恒现象<sup>[11]</sup>:以同一速率 $v$ 飞行的左手(纵向)极化费米子的衰变寿命 $\tau_L$ 比右手极化时的寿命 $\tau_R$ 要短:

$$\tau_L = \frac{\tau_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \cdot \frac{c}{c + v}, \quad \tau_R = \frac{\tau_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \cdot \frac{c}{c - v} \quad (3.8.12)$$

( $\tau_0$ 是静止时的寿命),这一预言是否正确需要实验的检验.

## § 3.9 时间反演对称性

### 3.9A 时间反演算符

1932年,Wigner在量子力学中引进了时间反演,乍一看来,这是与空间反演相似的一个分立对称性,实际上不然. 这是用词不当(misnomer). 严格地说,所谓时间反演对称乃是指运动的可逆性(reversal of motion),即把一个过程用摄像机拍下来,然后把胶卷倒过来放映,假如看上去运动规律(当然不是指“现象”)与顺放时一样,就叫做“时间反演守恒”<sup>[12]</sup>.

对一个无自旋粒子在位形空间写出薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\boldsymbol{x}, t) = \hat{H} \psi(\boldsymbol{x}, t) \quad (3.9.1a)$$

按上述定义,让我们先作变换 $t \rightarrow -t$ ,看变换后对 $t$ 的薛定谔方程是否能保持与原来有同样形式? 显然不能! 这是因为方程对 $t$ 的微商是一阶而非二阶的缘故. 于是在第二步,对整个方程取一次复共轭运算,才能

得到预期的“时间反演不变的”薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{x}, -t) = \hat{H} \psi^*(\mathbf{x}, -t) \quad (3.9.1b)$$

其中已假设  $\hat{H}$  不含时间, 于是原来的  $\psi(\mathbf{x}, t)$  变成了它的“时间反演态”:

$$\psi(\mathbf{x}, t) \longrightarrow \psi^*(\mathbf{x}, -t) \quad (3.9.2)$$

由此可见, 所谓“时间反演守恒”乃是指  $\psi(\mathbf{x}, t)$  与  $\psi^*(\mathbf{x}, -t)$  这两个解之间有某种对称性或等价性的关系. 这是可能的, 试看一个定态波函数, 我们有

$$\psi_n(\mathbf{x}, t) = u_n(\mathbf{x}) \exp\left[\frac{-iE_n t}{\hbar}\right], \quad \psi_n^*(\mathbf{x}, -t) = u_n^*(\mathbf{x}) \exp\left[\frac{-iE_n t}{\hbar}\right] \quad (3.9.3)$$

于是有两种可能性:

(1)  $u_n(\mathbf{x}) = u_n^*(\mathbf{x})$  是实函数, (3.9.3) 的两个态是同一个态. 即当  $\hat{H}$  在时间反演下不变且本征态  $|\psi_n\rangle$  (在能量上) 非简并时, 其相应之本征波函数必可写成 (实函数)  $\exp\left[-\frac{iE_n t}{\hbar}\right]$  的形式.

(2)  $u_n(\mathbf{x}) \neq u_n^*(\mathbf{x})$ , (3.9.3) 的两个态不同, 但有同样能量  $E_n$ , 所以是简并态. 例如在中心势场中的能量本征态  $|n, l, m\rangle$ ,  $u_n(\mathbf{x}) \sim R_n(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$ , 而  $u_n^*(\mathbf{x})$  对应于  $|n, l, -m\rangle$ , 当  $m \neq 0$  时它们是简并的, 且互为“时间反演态”. 另一例子是平面波, 此时  $u(\mathbf{x}) = \exp\left[\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right]$ , 它与  $u^*(\mathbf{x}) = \exp\left[-\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right]$  在能量上简并.

上述对一个无自旋粒子的讨论告诉我们: 在时间反演下能一般地把一个态  $|\alpha\rangle$  变为其时间反演态  $|\tilde{\alpha}\rangle$ , 但能够使

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |\tilde{\alpha}\rangle = \hat{T} |\alpha\rangle, \quad |\beta\rangle \longrightarrow |\tilde{\beta}\rangle = \hat{T} |\beta\rangle \quad (3.9.4)$$

的时间反演算符  $\hat{T}$  很不简单, 它不是一个通常的么正算符, 而是一个反么正算符, 它具有下面两点性质:

$$\langle \tilde{\beta} | \tilde{\alpha} \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^* \quad (3.9.5a)$$

$$\hat{T}(C_1 |\alpha\rangle + C_2 |\beta\rangle) = C_1^* \hat{T} |\alpha\rangle + C_2^* \hat{T} |\beta\rangle \quad (3.9.5b)$$

$C_1, C_2$  是普通的复数. 单独有 (3.9.5b) 性质的算符叫做“反线性算符”, 加上 (3.9.5a) 才叫做反么正算符. 一个反么正算符可以写成两个算符的

乘积:

$$\hat{T} = \hat{U} \hat{K} \quad (3.9.6)$$

$\hat{U}$  是一个么正算符, 而  $\hat{K}$  是复共轭算符, 它对右面所有的态矢连同系数都取复共轭(见(3.9.5b)式).

我们不拟详细讨论, 只把结果叙述于下:

一个算符在  $\hat{T}$  算符作用下可能有两种性质. 像作为讨论出发点的哈密顿算符  $\hat{H}$  应该是时间反演不变的:

$$\hat{H} \longrightarrow \hat{T} \hat{H} \hat{T}^{-1} = \hat{H}, \quad \hat{T} \hat{H} = \hat{H} \hat{T} \quad (3.9.7)$$

位置算符  $\hat{x}$  也是如此:

$$\hat{x} \longrightarrow \hat{T} \hat{x} \hat{T}^{-1} = \hat{x} \quad (3.9.8)$$

另一类算符如动量  $\hat{p}$ , 角动量  $\hat{J}$  等则在时间反演下改号:

$$\hat{T} \hat{p} \hat{T}^{-1} = -\hat{p} \quad (3.9.9)$$

$$\hat{T} \hat{J} \hat{T}^{-1} = -\hat{J} \quad (3.9.10)$$

显然这两个式子满足最初我们直观上的要求. 自旋也是一种角动量, 故对 Pauli 算符  $\sigma$  有

$$\hat{T} \sigma \hat{T}^{-1} = -\sigma \quad (3.9.11)$$

有时称有性质如(3.9.7、8)的算符为“实”算符, 而如(3.9.9、10、11)的算符为“虚”算符. 为实现(3.9.11)式, 注意在通常对  $\sigma_z$  为对角的表象中,  $\sigma_z$  和  $\sigma_x$  是实的  $2 \times 2$  矩阵, 而  $\sigma_y$  是纯虚的, 因此  $\hat{T}$  算符中的么正算符  $\hat{U}$  可取为  $\sigma_y$  或  $i\sigma_y$ , 习惯上取  $\hat{U} = i\sigma_y$ , 这是为了我们统一取角动量本征态的时间反演态如下:

$$\hat{T} |jm\rangle = (-1)^{j+m} |j-m\rangle \quad (3.9.12)$$

### 3.9B 时间反演对称性带来的后果

由于时间反演包含复共轭运算,  $\hat{T}$  算符不存在本征值(这和上节的空间反演算符不同, 那里有“宇称”作为本征值), 但是  $\hat{T}$  反演不变性仍带来一系列后果, 我们略去证明, 罗列于下:

#### (1) Kramers 简并

1930年, Kramers 具体计算晶体中原子的电子能级因邻近原子静电场的影响引起劈裂, 本来不期望有任何的简并性, 结果发现当电子数为奇数时, 至少有一个二重简并. 这件事很快由 Wigner 解释为时间反演不变性的结果. 但是晶体能级的这种“Kramers 简并”在外磁场中可被消除, 这

是因为哈密顿量中形如  $\hat{L} \cdot \nabla \times \mathbf{A}$  或  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \mathbf{A}$  的项, 在  $\hat{T}$  反演下要改号 ( $\hat{L}$  和  $\boldsymbol{\sigma}$  改号而  $\mathbf{A}$  作为“外磁场”的势不受  $\hat{T}$  的作用) 于是体系不再具有  $\hat{T}$  反演不变性的缘故.

### (2) 反应过程中的倒易定理和细致平衡

考虑一反应过程中由初态  $a$  道到末态  $b$  道的跃迁矩阵元:

$$\mathcal{T}_{ba} = \langle \psi_b | \mathcal{T} | \psi_a \rangle \quad (3.9.13)$$

(见第二章, 注意不少书上记为  $T_{ba}$ , 但这里我们已用  $\hat{T}$  记时间反演了). 把这过程用摄影机拍下来再倒放, 我们看到过程  $\tilde{b} \rightarrow \tilde{a}$ ,  $\tilde{b}(\tilde{a})$  为  $b(a)$  的时间反演态, 则  $T$  反演不变性要求

$$\mathcal{T}_{\tilde{a}\tilde{b}} = \mathcal{T}_{ba} \quad (3.9.14)$$

过程的跃迁几率正比于矩阵元的平方乘上各自的末态密度:

$$P_{ba} \sim |\mathcal{T}_{ba}|^2 \rho(E_b), \quad P_{\tilde{a}\tilde{b}} \sim |\mathcal{T}_{\tilde{a}\tilde{b}}|^2 \rho(E_a) \quad (3.9.15)$$

于是我们得到联系一个过程及其时间反演过程的跃迁几率的倒易定理:

$$\frac{P_{ba}}{\rho(E_b)} = \frac{P_{\tilde{a}\tilde{b}}}{\rho(E_a)} \quad (3.9.16)$$

进一步, 假定体系的哈密顿量不仅在时间反演下不变, 而且在空间反演下也不变, 则当空间-时间一起反演时, 粒子的动量分量不变号, 但角动量分量变号. 态  $|a\rangle$  与其时空反演态  $|\tilde{a}'\rangle$  只差角动量磁量子数的符号, 按 Wigner-Eckart 定理, 跃迁矩阵元  $\mathcal{T}_{\tilde{a}'\tilde{b}'}$  与  $\mathcal{T}_{ab}$  最多差一个相因子, 因此我们有关系

$$|\mathcal{T}_{ba}|^2 = |\mathcal{T}_{\tilde{a}'\tilde{b}'}|^2 = |\mathcal{T}_{ab}|^2 \quad (3.9.17)$$

称为细致平衡原理, 虽然在上述证明中多用了空间反演操作, 实际上在自旋取平均的意义上, 这个原理就等价于微观过程可逆性 ( $T$  反演不变) 的表述. 它在统计物理中论证热平衡状态建立的过程时是重要的.

### (3) 时间反演态相因子的约定及其应用

我们已统一地规定角动量本征态  $|jm\rangle$  与其时间反演态  $\hat{T}|jm\rangle$  的关系如 (3.9.12) 式所示, 现在把它应用于原子 (或原子核) 物理中的壳层模型. 假定电子 (核子) 们在一个球对称的自洽场中运动, 单粒子能级态可以用  $|\alpha\rangle \equiv |nlsjm_j\rangle \equiv |\alpha, m_\alpha\rangle$  来标记, 当体系处于基态时, 粒子们按 Pauli 原理, 能量由低到高地填充单粒子能级  $E_\alpha$ . 直到费米能级  $E_F$ , 形成一个“闭壳层”  $|F\rangle$ , 它的角动量等于零. 为方便起见, 最好用两次量子化表象 (见第八章) 来研究在  $|F\rangle$  基础上的激发态. 记在  $|\alpha\rangle$  态的一个粒子的产生

或湮灭算符为  $c_\alpha^+$  或  $c_\alpha$ , 则当把体系的基态定义为新的真空时, 我们可以定义如下的粒子和空穴的产生或湮灭算符:

$$\begin{aligned} \text{当 } E_\alpha > E_F, \quad a_\alpha^+ &\equiv c_\alpha^+, \quad a_\alpha \equiv c_\alpha \\ \text{当 } E_\alpha < E_F, \quad b_\alpha^+ &\equiv (-1)^{j_\alpha+m_\alpha} c_{-\alpha} \\ & \\ b_\alpha &\equiv (-1)^{j_\alpha+m_\alpha} c_{-\alpha}^+ \end{aligned} \quad (3.9.18)$$

它们满足同样的反对易关系

$$\{c_\alpha, c_{\alpha'}^+\} = \{a_\alpha, a_{\alpha'}^+\} = \{b_\alpha, b_{\alpha'}^+\} = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (3.9.19)$$

等等, ( $2(j+m)$  一定是偶数).

注意定义式(3.9.18)中相因子  $(-1)^{j_\alpha+m_\alpha}$  的存在保证  $b_\alpha^+$  作为一个“空穴”(具有角动量  $j_\alpha$  及其投影  $m_\alpha$ ) 的产生算符等价于一个(角动量为  $j_\alpha, m_\alpha$  的)粒子态的时间反演态(见(3.9.12)式)的湮灭算符, 这样保证了  $b_\alpha^+$  是一个  $\alpha$  阶张量算符, 像一个普通粒子的产生算符一样. 特别地说, 一个空穴与一个粒子的产生算符可以组合起来产生一个角动量( $j, m$ )的本征态:

$$|jm\rangle = \sum C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^m a_{j_1 m_1}^+ b_{j_2 m_2}^+ |0\rangle \quad (3.9.20)$$

$|0\rangle$  就是与闭壳层对应的新真空态. 详细的证明和在原子(核)壳层理论中对体系激发态的描述等问题都从略了.

#### (4) 粒子的发射和吸收矩阵元是实数的性质

从上面讨论的量子力学单体和多体问题进一步发展到量子场论, 我们来考虑一个粒子  $c$  衰变为两个粒子  $a$  和  $b$  的过程:

$$c \longrightarrow a + b \quad (3.9.21)$$

假定时间反演不变性成立, 则可以证明此过程的跃迁矩阵元

$$\Gamma = \langle r_a j_a m_a, r_b j_b m_b | \mathcal{T} | r_c j_c m_c \rangle \quad (3.9.22)$$

是实数. 其中  $r_a, r_b, r_c$  是标记角动量( $jm$ )外的其他量子数.  $\Gamma$  是实数的这一性质同下面要讲的实验上证明  $T$  反演不守恒有密切关系.

### 3.9C 关于时间反演不守恒的一点评注

继 1956 年宇称( $P$ )不守恒的发现之后, 1964 年在中性  $K$  介子  $K^0-\bar{K}^0$  体系的衰变中发现了  $CP$  也不守恒, 根据  $CPT$  定理( $C$  表示正反粒子变换, 对电子而言, 即  $e \rightarrow -e$  的电荷共轭变换, 根据相对论和量子场

论基本原理,在  $C, P, T$  这 3 个变换的共同作用下,理论一定是不变的),这就相当于  $T$  反演不守恒,即(3.9.22)式表示的中性  $K$  介子衰变(非对角)矩阵元不是实数,而是复数(有一个不为零的相角).然而和  $P$  不守恒不同的是:这次  $T$  反演不守恒只有千分之三的数量级,这对一个分立对称性的破坏来说,开始时很难理解.经过 30 多年对  $K^0-\bar{K}^0$  和  $B^0-\bar{B}^0$  体系的研究,有一种看法逐渐被接受,就是所谓  $CP$  不守恒很可能最终可以归结为目前粒子物理标准模型中描写夸克强作用本征态和弱作用本征态之间么正变换的 Cabbibo-Kobayashi-Maskawa (CKM) 矩阵中存在的一个相角.倘若事实果真如此,则所谓  $T$  反演不守恒并不与量子力学的任何基本原理相矛盾,它只不过意味着:在绝大多数情形下,像(3.9.2)这种对称性是确实存在的,而在夸克有两种本征态,即有味混合的情况下这种对称性就不复存在罢了.

这也就是说,在我们看来,在绝大多数  $T$  反演守恒的场合,这种  $T$  反演变换当然是有意义的,不过它实际上是意味着微观运动的逆转或(3.9.2)这样的对应关系,而不是真正的时间反演<sup>[1]</sup>.真正的时间反演应该是只做  $t \rightarrow -t$  的变换,那么在非相对论性的量子力学中明显地是百分之百地不守恒的.我们回忆在费曼路径积分(见第一章第七节)中无限多路径都只向前演化而不许反转,或在薛定谔方程的 Green 函数中存在一个阶梯函数  $\theta(t'-t)$  (见(1.7.26)式)限定  $t' > t$  的性质都反映了这一点.所以在我们看来,自然界存在一个微观的“时间箭头”,虽然它不是直接可观察的.

至此,我们留下两个问题:(1)这个微观时间箭头同宏观上由热力学不可逆性所表征的时间箭头有什么联系?(2)虽然微观的时间反演没有简单的对称性,是否存在更大范围的对称性?它同目前的  $CPT$  定理有什么关系?我们将在本书最后第九和第十章再讨论这两个问题.

## 习 题

3.1 (1) 证明对易关系(3.2.29)式也可以在  $\hat{S}_z$  为对角的表象中实现如下:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

(2) 证明  $\hat{S}_z^3 = \hbar^2 \hat{S}_z$  及  $(\hat{S}_x \pm i\hat{S}_y)^3 \equiv \hat{S}_z^3 = 0$ .

3.2 Schwinger 首先发现:角动量算符  $\mathbf{J}$  可以用两类谐振子的产生(湮灭)算符,  $a_1^\dagger(a_1)$  与  $a_2^\dagger(a_2)$ , 以及 Pauli 矩阵  $\boldsymbol{\sigma}$  来实现如下:

(1) 先证明  $\mathbf{J} = \frac{1}{2} a^\dagger \boldsymbol{\sigma} a$   $\left[ a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \right]$  具有角动量的性质, 即对易关系  $[J_x, J_y] = iJ_z$  (见(3.3.1)式) 成立;

(2) 再证明  $J_+ = J_x + iJ_y = a_1^\dagger a_2$ ,  $J_- = J_x - iJ_y = a_2^\dagger a_1$ ;

(3) 然后证明算符  $J = \frac{1}{2} a^\dagger a$  的本征值是  $j$ , 它可以取值为  $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ . 进一步再证明角动量算符  $J^2$  的本征值等于  $j(j+1)$ .

3.3 (1) 证明公式  $(\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$

其中  $\boldsymbol{\sigma}$  是 Pauli 矩阵, 而  $\mathbf{A}$  与  $\mathbf{B}$  是普通的矢量.

(2) 证明对自旋  $\frac{1}{2}$  粒子绕  $\mathbf{n}$  轴作有限转动  $\theta$  角的转动算符是  $R(\mathbf{n}, \theta) = \exp\left(-\frac{i}{2}\theta \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right) = \cos \frac{\theta}{2} - i \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin \frac{\theta}{2}$ .

3.4 证明 3 个算符  $T_{11} = -\sqrt{2}\sigma_+ = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + i\sigma_y)$ ,  $T_{10} = \sigma_z$  与  $T_{1-1} = \sqrt{2}\sigma_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x - i\sigma_y)$  构成不可约张量算符  $T_{\lambda\mu}$  的  $\lambda = 1$  而  $\mu = 1, 0, -1$  的 3 个分量, 即要证明方程(3.6.5)式对它们成立, 而其中  $J_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$  及  $J_\pm = J_x \pm iJ_y = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$  是自旋  $\frac{1}{2}$  粒子的角动量算符. (Pauli 算符之间的对易关系请参见(8.1.16)式)

3.5 设有两个自旋  $\frac{1}{2}$  的粒子耦合总自旋为  $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)$  的体系, 记  $S$  为总自旋角动量量子数:

(1) 证明此体系可以或者处于单重态  $\chi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2)$  ( $S = 0$ ), 或者处于三重态  $\chi_{11} = \alpha_1\alpha_2$ ,  $\chi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2)$ ,  $\chi_{1-1} = \beta_1\beta_2$  ( $S = 1$ ); ( $\alpha$  与  $\beta$  是  $\sigma_z$  的两个本征值为 1 与 -1 的本征态)

(2) 证明  $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \chi_{00} = -3\chi_{00}$ , 而  $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \chi_{1\mu} = \chi_{1\mu}$ .

\* 3.6 对一由两个自旋  $\frac{1}{2}$  粒子组成的体系, 我们可定义一算符  $T_{12} = \frac{(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{r})}{r^2} - \frac{1}{3} \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2$ , ( $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ):

(1) 证明  $T_{12}$  与算符  $\mathbf{S}^2$  对易 ( $\mathbf{S}$  的定义见上题);

(2) 证明对  $S = 0$ , 有  $T_{12}^2 = 2T_{12}$ , 而  $S = 1$  时,  $T_{12}^2 = \frac{8}{9} - \frac{2}{3}T_{12}$ .

(3) 证明  $T_{12} \chi_{00} = 0$ , 其中  $\chi_{00}$  定义见习题 3.5.

\* 3.7 “同位旋”的概念是由海森堡首先引入来描写强相互作用的: 质子  $p$  与中子  $n$  组成同位旋量子数  $I = \frac{1}{2}$  的同位旋二重态, 分别有第三分量  $I_3 = \frac{1}{2}$  与  $-\frac{1}{2}$ ;



类似地,  $\pi^+$ ,  $\pi^0$ ,  $\pi^-$  三个介子组成  $I = 1$  的同位旋三重态, 分别有  $I_3 = 1, 0, -1$ . 假定如下的 3 种强作用过程:

(a)  $\pi^+ p \rightarrow \pi^+ p$ , (b)  $\pi^- p \rightarrow \pi^- p$ , (c)  $\pi^- p \rightarrow \pi^0 n$ , 都只能在同位旋守恒的条件下发生, 也就是说, 只有或者通过  $I = \frac{3}{2}$  的  $\Delta$  共振态, 或者通过  $I = \frac{1}{2}$  的  $N^*$  共振态, 这 3 个过程才能发生, 试估计两种情况下 3 种过程的截面之比:

$$(1) \sigma_a\left(\frac{3}{2}\right) : \sigma_b\left(\frac{3}{2}\right) : \sigma_c\left(\frac{3}{2}\right); \quad (2) \sigma_a\left(\frac{1}{2}\right) : \sigma_b\left(\frac{1}{2}\right) : \sigma_c\left(\frac{1}{2}\right).$$

## 参 考 文 献

- [ 1 ] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, Inc., 1994
- [ 2 ] A. R. Edmonds. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. Princeton University Press, 1960
- [ 3 ] M. E. Rose. *Elementary theory of Angular Momentum*. John Wiley & Sons, Inc., 1957
- [ 4 ] 马中骥. 物理学中的群论. 北京: 科学出版社, 1998
- [ 5 ] T. D. Lee. *Particle Physics and Introduction to Field Theory*. Harwood Academic Publisher, 1981
- [ 6 ] T. D. Lee and C. N. Yang. *Phys. Rev.*, **104**, 254 (1956)
- [ 7 ] C. S. Wu, E. Ambler, R. W. Hayward, D. D. Hoppes and R. P. Hudson. *Phys. Rev.*, **105**, 1413 (1957)
- [ 8 ] T. D. Lee and C. N. Yang. *Phys. Rev.*, **105**, 1671 (1957)
- [ 9 ] Wu-ki Tung. *Group Theory in Physics*. World Scientific, 1985
- [ 10 ] M. Goldhaber, L. Grodzins and A. W. Sunyar. *Phys. Rev.*, **109**, 1015 (1958)
- [ 11 ] Zhi-qiang Shi and G. j Ni. *Chin. Phys. Lett.*, **19**, 1427 (2002), *hep-ph/0202017; Preprint, hep-ph/0211051*

## 第四章 电磁场的量子化及其与荷电粒子的相互作用

电磁场量子化,即电磁波的振幅变成光子的湮灭或产生算符,从而显示出光的“波粒二重性”,这是“高量”的又一重点内容.考虑到这一理论在原子、原子核和粒子物理等多方面的应用,本章不仅介绍平面波的量子化,也介绍球面波的量子化,并对电磁跃迁的选择规则和几率大小作比较具体的讨论.对黑体辐射普朗克公式的讨论是有历史兴趣的,希望引起读者注意.最后对 Casimir 效应的讨论是本书第一次遇见发散的例子,这是场量子化后不可避免的现象,我们将在第九章 § 9.6 及其附录中再次遇见发散,并将作进一步的讨论.

### § 4.1 电磁场的库仑规范,荷电粒子和电磁场的总哈密顿量

#### 4.1A 麦克斯韦方程和四维势

在高斯单位制(参见本书附录)下,真空中麦克斯韦方程写为<sup>[1, 2]</sup>:

$$\begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho \\ \nabla \times \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \end{cases} \quad (4.1.1)$$

我们用泡利度规,把电场强度  $\mathbf{E}$  和磁场(磁感应)强度  $\mathbf{B}$  合并成一个对脚标  $\mu$  和  $\nu$  为反对称的“场张量” $F_{\mu\nu}$  如下:

$$F_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & B_3 & -B_2 & -iE_1 \\ -B_3 & 0 & B_1 & -iE_2 \\ B_2 & -B_1 & 0 & -iE_3 \\ iE_1 & iE_2 & iE_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.1.2)$$

与  $x_\mu = (\mathbf{x}, ict)$  类似地引入四维电流密度矢量  $j_\mu = (\mathbf{j}, ic\rho)$ , 其中第四

分量是 $(ic)$ 乘以电荷密度 $\rho$ ,而前3个空间分量即通常的三维电流密度 $\mathbf{j}$ .  
则方程(4.1.1)的前两个可合并写为

$$\frac{\partial F_{\mu\nu}}{\partial x_\nu} = \frac{4\pi}{c} j_\mu \quad (4.1.3)$$

式中同一项中出现的重复指标 $\nu$ 表示要对它求和( $\nu=1, 2, 3, 4$ ). $\mu=4$ 给出(4.1.1)的第一个方程, $\mu=1, 2, 3$ 则给出(4.1.1)的第二个方程.至于(4.1.1)的第三、四两个方程,则我们定义四维矢势 $A_\mu = (\mathbf{A}, i\phi) = (\mathbf{A}, iA_0)$ 与 $F_{\mu\nu}$ 的关系

$$\frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu} = F_{\mu\nu} \quad (4.1.4)$$

由此推出

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (4.1.5)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (4.1.6)$$

便立刻可以证明(4.1.1)的后两个方程.这两个方程与电流密度 $j_\mu$ 无关,表示了电磁场的内在约束关系[同时(4.1.6)也表示磁场是无源的(磁荷不存在),]它们与(4.1.1)前两个依赖于源的动力学方程不同.

将(4.1.4)代入(4.1.3),把后者改写为

$$\square A_\mu - \frac{\partial}{\partial x_\mu} \left( \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\nu} \right) = -\frac{4\pi}{c} j_\mu \quad (4.1.7)$$

其中 $\square \equiv \frac{\partial^2}{\partial x_\nu^2} = \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$ 是达朗贝尔算符.

#### 4.1B 电磁场的哈密顿量,库仑规范

仿照分析力学的做法,我们可以建立如下的拉氏量密度:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{em}} + \mathcal{L}_{\text{int}} \quad (4.1.8)$$

其中

$$\mathcal{L}_{\text{em}} = -\frac{1}{16\pi} F_{\mu\nu} F_{\mu\nu} = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2) \quad (4.1.9)$$

是自由电磁场的拉氏量密度,而

$$\mathcal{L}_{\text{int}} = \frac{1}{c} A_\mu j_\mu \quad (4.1.10)$$

是场与(四维)电流密度的相互作用拉氏量密度. 然后通过变分原理得到欧拉-拉格朗日方程\*

$$\partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu A_\nu)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial A_\nu} \quad (4.1.11)$$

则以(4.1.8)代入(4.1.11)后便立刻得到方程(4.1.3). 为了将来过渡到量子理论, 我们需要从拉氏量密度转到哈密顿量密度. 它被定义为

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left( \frac{\partial A_\mu}{\partial x_4} \right)} \frac{\partial A_\mu}{\partial x_4} - \mathcal{L} \\ &= -\frac{1}{4\pi} F_{4\mu} \left( F_{4\mu} + \frac{\partial A_4}{\partial x_\mu} \right) + \frac{1}{8\pi} (\mathbf{B}^2 - \mathbf{E}^2) - \frac{1}{c} \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} \\ &= \frac{1}{8\pi} (\mathbf{B}^2 + \mathbf{E}^2) - \frac{i\mathbf{E}}{4\pi} \cdot \nabla A_4 - \frac{1}{c} A_\mu j_\mu \\ &= \frac{1}{8\pi} (\mathbf{B}^2 + \mathbf{E}^2) - \rho A_0 + \frac{1}{4\pi} \nabla \cdot (A_0 \mathbf{E}) - \frac{1}{c} A_\mu j_\mu \\ &= \frac{1}{8\pi} (\mathbf{B}^2 + \mathbf{E}^2) - \frac{1}{c} \mathbf{A} \cdot \mathbf{j} + \frac{1}{4\pi} \nabla \cdot (A_0 \mathbf{E}) \end{aligned} \quad (4.1.12)$$

将此式对空间积分. 假定在无穷远边界上,  $\mathbf{E}$  和  $A_0 = \phi$  趋于零, 于是第三项积分为零, 得到总哈密顿量为

$$H = \int \mathcal{H} d^3x = H_{em} + H_{int} \quad (4.1.13)$$

其中

$$H_{em} = \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{B}^2 + \mathbf{E}^2) d^3x \quad (4.1.14)$$

是电磁场的总能量而

$$H_{int} = -\frac{1}{c} \int (\mathbf{j} \cdot \mathbf{A}) d^3x \quad (4.1.15)$$

是电流与电磁场(矢势)的相互作用哈密顿量.

读者也许会感到奇怪: 为什么没有电荷与电场(标势)之间的相互作用呢? 而它似乎曾在(4.1.12)的导出过程中出现了一下, 又马上被消去了. 为弄清楚这个问题, 我们首先要注意用势  $A_\mu$  来描写电磁场, 既是必要

\* 此式推导从略, 可参见 D. Lurie: *Particles and Fields*, Chapter 2. Interscience Publishers, 1968, 有中译本.

的,但又存在着非物理的自由度,因此可以对  $A_\mu$  作某种“规范变换”而不改变电磁场的物理实质(详见第六章).现在让我们从一个老的矢势  $A_\mu^{\text{old}}$  出发,作如下的规范变换以变到新的  $A_\mu^{\text{new}}$ :

$$A_\mu^{\text{new}} = A_\mu^{\text{old}} + \frac{\partial \chi}{\partial x_\mu} \quad (4.1.16)$$

其中  $\chi$  是某个任意的四维标量函数.为确定它,我们要求新的矢势  $A^{\text{new}}$  满足如下的“横场条件”,即它的散度为零:

$$\nabla \cdot \mathbf{A}^{\text{new}}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (4.1.17)$$

由(4.1.16),这意味着

$$\nabla \cdot \mathbf{A}^{\text{old}} + \nabla^2 \chi = 0$$

或

$$\chi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{4\pi} \int \frac{d^3 x'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \nabla' \cdot \mathbf{A}^{\text{old}}(\mathbf{x}', t) \quad (4.1.18)$$

在这一规范选择下,方程(4.1.7)对  $\mu = 0$  给出(以后略去上标 new):

$$\nabla^2 A_0 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A_0}{\partial t^2} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left( \nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial A_0}{\partial t} \right) = -4\pi\rho$$

注意规范条件(4.1.17),即见  $A_0$  满足泊松方程:

$$\nabla^2 A_0(\mathbf{x}, t) = -4\pi\rho(\mathbf{x}, t) \quad (4.1.19)$$

此方程在满足无穷远处  $A_0 \rightarrow 0$  的边界条件下有解

$$A_0(\mathbf{x}, t) = \int \frac{d^3 x'}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \rho(\mathbf{x}', t) \quad (4.1.20)$$

以后称条件(4.1.17)为库仑规范条件,此时  $A_\mu$  中的标势  $A_0$  不再是一个独立的场自由度,而由瞬时的电荷分布密度  $\rho$  决定.(注意(4.1.20)式两端有同一时刻  $t$ ,所以不是“推迟势”.)

下面我们将(4.1.13)式在库仑规范下改写.首先注意(4.1.5)式( $\phi = A_0$ ),令  $\mathbf{E} = \mathbf{E}_{\parallel} + \mathbf{E}_{\perp}$ ,即把电场分成两部分,分别满足条件:

$$\nabla \times \mathbf{E}_{\parallel} = 0, \quad \nabla \cdot \mathbf{E}_{\perp} = 0 \quad (4.1.21)$$

这就表示  $\mathbf{E}$  的纵场部分( $\mathbf{E}_{\parallel}$ )无旋而横场部分( $\mathbf{E}_{\perp}$ )则无源.再注意

$$\nabla \times (\nabla A_0) \equiv 0, \quad \text{而} \quad \nabla \cdot \frac{\partial \mathbf{A}^{\perp}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{A}^{\perp}) = 0 \quad (\text{这里记} \mathbf{A} = \mathbf{A}^{\perp} \text{以}$$

强调它满足横场条件(4.1.17)).于是可见  $\mathbf{E}$  的分解是惟一的:

$$\mathbf{E}_{\parallel} = -\nabla A_0, \quad \mathbf{E}_{\perp} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}^{\perp} \quad (4.1.22)$$

易证(留作习题)

$$\int \mathbf{E}^2 d^3x = \int (\mathbf{E}_{\perp}^2 + \mathbf{E}_{\parallel}^2) d^3x \quad (4.1.23)$$

而

$$\frac{1}{4\pi} \int \mathbf{E}_{\parallel}^2 d^3x = \int \rho A_0 d^3x \quad (4.1.24)$$

故

$$\begin{aligned} H_{em} + H_{int} &= \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{B}^2 + \mathbf{E}_{\perp}^2) d^3x + \int \left( \frac{1}{2} \rho A_0 - \frac{1}{c} \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}^{\perp} \right) d^3x \\ &= \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{B}^2 + \mathbf{E}_{\perp}^2) d^3x \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3x d^3x' \frac{\rho(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - \frac{1}{c} \int \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}^{\perp} d^3x \end{aligned} \quad (4.1.25)$$

其中已将(4.1.20)式代入. 再把  $\mathbf{B}$  和  $\mathbf{E}_{\perp}$  用  $\mathbf{A}^{\perp}$  表示出来:

$$\begin{aligned} H_{em} + H_{int} &= \frac{1}{8\pi} \int \left( |\nabla \times \mathbf{A}^{\perp}|^2 + \left| \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}^{\perp} \right|^2 \right) d^3x \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3x d^3x' \frac{\rho(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} - \frac{1}{c} \int \mathbf{j} \cdot \mathbf{A}^{\perp} d^3x \end{aligned} \quad (4.1.26)$$

我们再次强调: 在库仑规范下, 静电势  $A_0$  完全被瞬时库仑作用项所替代, 只留下横向的矢势  $\mathbf{A}^{\perp}$  与电流密度  $\mathbf{j}$  相互作用. 1932年, 费米首先指出这一方法, 在处理荷电粒子与辐射场相互作用时, 只要将  $\mathbf{A}^{\perp}$  量子化就可以了(见下节). 因此, 库仑规范有时也称为辐射规范. 还要指出, 已满足规范条件(4.1.17)的矢势  $\mathbf{A}^{\perp}$ , 还可以再作规范变换, 不过新的变换函数  $\chi'$  满足齐次的拉普拉斯方程 ( $\nabla^2 \chi' = 0$ ) 罢了.

#### 4.1C 最小电磁相互作用原理

现在我们要在(4.1.26)式基础上, 引入带电粒子的哈密顿量  $H_{\text{粒}}$ . 在非相对论描述中, 许多(静)质量为  $m_i$  的无自旋粒子的动能为 ( $\mathbf{x}_i$  为粒子坐标):

$$H_{\text{粒}} = \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 \quad (4.1.27)$$

这里我们已过渡到量子力学,所以  $p_i$  成为算符( $-i\hbar\nabla_i$ ).

(4.1.15)式中的电流密度是由这些荷电粒子(带电量  $q_i$ )并以速度  $v_i = \frac{p_i}{m_i}$  运动而形成的(略写时间  $t$  变量):

$$j(\mathbf{x}) = \rho(\mathbf{x}) \mathbf{v}(\mathbf{x}) = \sum_i \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) q_i \frac{\mathbf{p}}{m_i}$$

这里引入三维  $\delta$  函数,并理解  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  是宗量为流动坐标  $\mathbf{x}$  的算符.于是(4.1.15)式可以改写为:

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{2c} \int (\mathbf{A}^\perp \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}^\perp) \sum_i \frac{q_i}{m_i} \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) d^3x \quad (4.1.28)$$

其中因在库仑规范 ( $\nabla \cdot \mathbf{A}^\perp = 0$ ) 下,  $\mathbf{A}^\perp \cdot \mathbf{p} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}^\perp$  ( $\mathbf{p}$  作为算符,对右边的一切量包括  $\mathbf{A}^\perp$  和没有写出的量子力学波函数都要作用). 写成这一对称形式的好处是可以进一步修改(4.1.28)式为(完成对  $\mathbf{x}$  的积分)

$$H_{\text{int}} = \sum_i \frac{1}{2m_i} \left( \mathbf{p}_i - \frac{q_i}{c} \mathbf{A}^\perp \right)^2 - \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} \quad (4.1.29)$$

这里增加了一项  $\sum_i \frac{q_i^2}{2m_i c^2} (\mathbf{A}^\perp)^2$ . 这是在量子理论水平上对前面经典理论的又一实质性修改,它是否正确,要由理论与实验的比较来确定,以后的研究进展证明它是正确的.

这样,对荷电粒子与电磁场组成的体系,其总哈密顿量等于

$$\begin{aligned} H &= H_{\text{粒}} + H_{\text{em}} + H_{\text{int}} \\ &= \sum_i \frac{1}{2m_i} \left( \mathbf{p}_i - \frac{q_i}{c} \mathbf{A}^\perp \right)^2 + \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{B}^2 + \mathbf{E}_\perp^2) d^3x \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3x d^3x' \frac{\rho(\mathbf{x}, t) \rho(\mathbf{x}', t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \end{aligned} \quad (4.1.30)$$

最后一项中  $\rho$  没有用  $\sum_i q_i \delta^{(3)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$  表示,是因为在量子力学计算中,它将用波函数来表示.

(4.1.30)式告诉我们:在量子力学水平上,矢势  $\mathbf{A}^\perp$  比电场强度  $\mathbf{E}$  和磁场强度  $\mathbf{B}$  更基本,因为  $\mathbf{E}$  的纵向部分( $\mathbf{E}_\parallel$ )已并入最后一项(瞬时库仑作用能),而横向部分  $\mathbf{E}_\perp = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}^\perp$  与  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}^\perp$  都可以用  $\mathbf{A}^\perp$  表出.

重要的是:电磁场与电荷间的相互作用是通过如下的替换规则:

$$p_i = -i\hbar \nabla_i \longrightarrow \left( p_i - \frac{q_i}{c} \mathbf{A}^\perp \right) \quad (4.1.31)$$

而引入的. 这一规则叫做最小电磁相互作用原理, 它对无自旋荷电粒子与电磁场的相互作用有普适性.

敏感的读者也许会问: 前面强调过矢势  $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\perp$  有规范任意性, 即  $\mathbf{A}$  与  $(\mathbf{A} + \nabla\chi)$  在物理上是没有区别的, 那么引入一个新的任意函数  $\chi$  岂不是会改变总哈密顿量  $H$  吗?

回答是要注意这个  $H$  作用到波函数  $\psi$  上. 只要我们规定(为简单起见, 只写出一个粒子而略去脚标  $i$ ): 在规范变换

$$\mathbf{A} \longrightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi = \mathbf{A}'$$

的同时,

$$\psi \longrightarrow \psi \exp\left[\frac{iq}{c\hbar}\chi\right] = \psi' \quad (4.1.32)$$

即波函数也作一个相位变换, 于是在  $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$  的作用下

$$\left[ \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right]^2 \psi \longrightarrow \left[ \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}' \right]^2 \psi' = \exp\left[\frac{iq}{c\hbar}\chi\right] \left[ \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right]^2 \psi$$

(准确到前面的相位)是不变的. 注意现在规范变换函数  $\chi$  是位置  $\mathbf{x}$  的函数, 即在(4.1.32)中相位的变换也随位置而变. 这叫做定域规范变换(当  $\chi = \text{常数}$  时叫做整体规范变换). 于是我们有了深一层的认识: 最小电磁相互作用原理原来是定域规范变换不变性的必然结果.

我们以上的叙述方法是从实验归纳得到的麦克斯韦方程出发, 结合量子力学原理, 分析出定域规范不变性这一基本的对称性, 这可说是一种“从特殊到一般”的分析归纳方法, 这中间当然也包含一些概念上的飞跃. 然而一旦有了一种基本对称性的认识之后, 我们便可以运用“从一般到特殊”的演绎法, 来讨论多种具体的特殊问题, 包括电磁相互作用的特殊问题(见后面各节)和非电磁相互作用的问题(这超出本书的范围).

## § 4.2 自由电磁场的平面波解和量子化

### 4.2A Fourier 分解和辐射振子

在(4.1.30)式中令  $p_i = -i\hbar \nabla_i$ ,  $\rho$  用波函数表示, 这在初等量子力学中已讲过了, 那时的量子化使原来只有粒子性的粒子获得波性, 即使物



质粒子有了波粒二重性. 然而(4. 1. 30)中的  $\mathbf{A}$  还只是一个  $(\mathbf{x}, t)$  的普通函数, 就是说, 电磁场还没有量子化, 还只有“波性”. 为了反映实验上反复证明的光也有波粒二重性, 以便讨论光的自发辐射等问题, 我们必须通过电磁场的量子化赋予它以“粒子性”. 这件事是高等量子力学最重要的内容之一.

我们先考察纯(自由)电磁场, 如上节所说, 只要看矢势  $\mathbf{A}^\perp = \mathbf{A}$  就可以了. 把电磁场关在一个边长  $L = V^{\frac{1}{3}}$  的立方体匣子内, 采用周期性边界条件把  $\mathbf{A}$  作 Fourier 级数展开, 则在某一时刻如  $t = 0$ , 可写出

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, 0) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha=1, 2} [C_{\mathbf{k}, \alpha}(0) \mathbf{u}_{\mathbf{k}, \alpha}(\mathbf{x}) + C_{\mathbf{k}, \alpha}^*(0) \mathbf{u}_{\mathbf{k}, \alpha}^*(\mathbf{x})] \quad (4. 2. 1)$$

注意  $\mathbf{A}$  的实数性, 后项为前项的共轭复数. 其中

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}, \alpha}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) \quad (4. 2. 2)$$

而  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)}$  称为极化矢量. 对给定的  $\mathbf{k}$ , 选择  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{(1)}$  和  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{(2)}$ , 使  $(\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{(1)}, \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{(2)}, \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|})$  这 3 个互相正交的单位矢量构成右手系. 不难看出, 横场条件  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  相当于  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{k} = 0$  ( $\alpha = 1, 2$ ), 这正表示电磁波是横波, 极化矢量与传播方向垂直.

作为 Fourier 展开的基矢(分量)  $\mathbf{u}_{\mathbf{k}, \alpha}$  满足正交归一化条件:

$$\frac{1}{V} \int d^3x \mathbf{u}_{\mathbf{k}, \alpha} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}', \alpha'}^* = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\alpha\alpha'} \quad (4. 2. 3)$$

其中波矢  $\mathbf{k}$  由于周期性边界条件取如下的分立数值:

$$k_x, k_y, k_z = \frac{2n\pi}{L}, \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (4. 2. 4)$$

为了得到  $t \neq 0$  时的  $\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)$ , 我们简单地用

$$C_{\mathbf{k}, \alpha}(t) = C_{\mathbf{k}, \alpha}(0) \exp(-i\omega t) \quad (4. 2. 5)$$

$$C_{\mathbf{k}, \alpha}^*(t) = C_{\mathbf{k}, \alpha}^*(0) \exp(i\omega t)$$

来代替原来的常数系数  $C_{\mathbf{k}, \alpha}(0)$  和  $C_{\mathbf{k}, \alpha}^*(0)$ , 其中

$$\omega = |\mathbf{k}| c \quad (4. 2. 6)$$

是波的角频率. 所以自由电磁场矢势可写为

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} [C_{\mathbf{k}, \alpha}(0) \boldsymbol{\epsilon}^{(\alpha)} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + C_{\mathbf{k}, \alpha}^*(0) \boldsymbol{\epsilon}^{(\alpha)} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})] \quad (4.2.7)$$

其中  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t$ .

现在我们来计算电磁场的哈密顿量  $H_{em}$ :

$$\begin{aligned} H_{em} &= \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{B}^2 + \mathbf{E}^2) d^3x \\ &= \frac{1}{8\pi} \int \left[ |\nabla \times \mathbf{A}|^2 + \left| \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right|^2 \right] d^3x \end{aligned} \quad (4.2.8)$$

在  $\mathbf{B}^2$  项积分中一个典型的项是(用公式  $\nabla \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot (\nabla \times \mathbf{a}) - \mathbf{a} \cdot (\nabla \times \mathbf{b})$ )

$$\begin{aligned} &\int (\nabla \times \mathbf{u}_{\mathbf{k}, \alpha}) \cdot (\nabla \times \mathbf{u}_{\mathbf{k}', \alpha'}^*) d^3x \\ &= \int \nabla \cdot [\mathbf{u}_{\mathbf{k}, \alpha} \times (\nabla \times \mathbf{u}_{\mathbf{k}', \alpha'}^*)] d^3x + \int \mathbf{u}_{\mathbf{k}, \alpha} \cdot [\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}_{\mathbf{k}', \alpha'}^*)] d^3x \end{aligned}$$

第一项由于边界条件而等于零,第二项再用公式

$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla^2 \mathbf{u}$ , 于是有

$$- \int \mathbf{u}_{\mathbf{k}, \alpha} \cdot \nabla^2 \mathbf{u}_{\mathbf{k}', \alpha'}^* d^3x = V \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\alpha, \alpha'}$$

同理,在关于  $\mathbf{E}^2$  的积分中,我们有等式

$$\int \left[ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (C_{\mathbf{k}, \alpha} \mathbf{u}_{\mathbf{k}, \alpha}) \right] \cdot \left[ \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (C_{\mathbf{k}', \alpha'}^* \mathbf{u}_{\mathbf{k}', \alpha'}^*) \right] d^3x = V \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\alpha, \alpha'} C_{\mathbf{k}, \alpha} C_{\mathbf{k}', \alpha'}^*$$

合起来,我们得到

$$H_{em} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} \frac{1}{2\pi} \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 C_{\mathbf{k}, \alpha}^* C_{\mathbf{k}, \alpha} \quad (4.2.9)$$

注意其中  $C_{\mathbf{k}, \alpha}(t)$  是  $t$  的函数,满足方程(见(4.2.5)式)

$$\ddot{C}_{\mathbf{k}, \alpha} = -\omega^2 C_{\mathbf{k}, \alpha} \quad (4.2.10)$$

这强烈地暗示我们:对确定的  $\mathbf{k}$  和  $\alpha$ , 即对某一确定的经典电磁波模式, 振幅  $C_{\mathbf{k}, \alpha}$  的运动像一个经典谐振子, 能量正比于它的平方. 为使这个相似性更加明显, 我们定义

$$\begin{cases} Q_{\mathbf{k}, \alpha} = \frac{1}{c\sqrt{4\pi}} (C_{\mathbf{k}, \alpha} + C_{\mathbf{k}, \alpha}^*) \\ P_{\mathbf{k}, \alpha} = \frac{-i\omega}{c\sqrt{4\pi}} (C_{\mathbf{k}, \alpha} - C_{\mathbf{k}, \alpha}^*) \end{cases} \quad (4.2.11)$$

则

$$H_{em} = \sum_{k, \alpha} \frac{1}{2} (P_{k, \alpha}^2 + \omega^2 Q_{k, \alpha}^2) \quad (4.2.12)$$

其中第一和第二项完全与一个经典(单位质量的)谐振子的动能和势能相对应.  $Q_{k, \alpha}$  是正则坐标,  $P_{k, \alpha}$  是正则动量, 它们满足正则方程:

$$\frac{\partial H_{em}}{\partial Q_{k, \alpha}} = -\dot{P}_{k, \alpha}, \quad \frac{\partial H_{em}}{\partial P_{k, \alpha}} = \dot{Q}_{k, \alpha} \quad (4.2.13)$$

于是辐射场可以认为是独立的谐振子的集合, 其中每一个模式用确定的  $k$  和  $\alpha$  来标记, 而它的动力学变量就是场的 Fourier 展开系数.

#### 4.2B 辐射振子的量子化

既然我们已将一种模式的电磁波与一个谐振子对应, 如(4.2.12)式所示, 辐射场的量子化问题便化为等价的振子运动量子化的问题, Dirac 于 1927 年最早指出, 把  $P$  和  $Q$  不再看作是普通的数( $C$  数), 而把它们看作为一种算符( $q$  数), 满足如下的对易关系:

$$\begin{cases} [\hat{Q}_{k, \alpha}, \hat{P}_{k', \alpha'}] = i\hbar \delta_{kk'} \delta_{\alpha\alpha'} \\ [\hat{Q}_{k, \alpha}, \hat{Q}_{k', \alpha'}] = 0 \\ [\hat{P}_{k, \alpha}, \hat{P}_{k', \alpha'}] = 0 \end{cases} \quad (4.2.14)$$

(4.2.12)式哈密顿量中的  $C$  数一旦变为  $q$  数, 就意味着由脚标( $k, \alpha$ )表征的经典谐振子已变为量子化的谐振子了. 下面我们进一步指出, 这样一来, 辐射场便已量子化为一个个的“光子”了. 为此我们定义算符:

$$\begin{cases} \hat{a}_{k, \alpha} = (2\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}} (\omega \hat{Q}_{k, \alpha} + i \hat{P}_{k, \alpha}) \\ \hat{a}_{k, \alpha}^{\dagger} = (2\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}} (\omega \hat{Q}_{k, \alpha} - i \hat{P}_{k, \alpha}) \end{cases} \quad (4.2.15)$$

比较(4.2.11)式可见,  $\hat{a}_{k, \alpha}$  和  $\hat{a}_{k, \alpha}^{\dagger}$  是经典电磁场展开时 Fourier 系数(即振幅)  $C_{k, \alpha}$  和  $C_{k, \alpha}^*$  的量子化对应:

$$C_{k, \alpha} \longrightarrow c \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \hat{a}_{k, \alpha}, \quad C_{k, \alpha}^* \longrightarrow c \sqrt{\frac{\hbar}{\omega}} \hat{a}_{k, \alpha}^{\dagger} \quad (4.2.16)$$

注意, 和振幅不同, 现在  $\hat{a}_{k, \alpha}$  和  $\hat{a}_{k, \alpha}^{\dagger}$  是无量纲的, 它们所满足的对易关系可以从(4.2.14)式推出

$$\begin{cases} [\hat{a}_{k,\alpha}(t), \hat{a}_{k',\alpha'}^\dagger(t)] = \delta_{kk'} \delta_{\alpha\alpha'} \\ [\hat{a}_{k,\alpha}, \hat{a}_{k',\alpha'}] = [\hat{a}_{k,\alpha}^\dagger, \hat{a}_{k',\alpha'}^\dagger] = 0 \end{cases} \quad (4.2.17)$$

还要注意,这些对易关系是对同一时刻的算符才有意义,例如第一式的宗量  $t$  所标明的那样.

请读者比较第一章 § 1.4 中讨论的谐振子公式与这里的式子,除那里有质量  $m$  (这里  $m = 1$ ) 而这里又多了脚标  $k, \alpha$  之外,两者完全一样. 所以我们可定义“光子数”的算符为

$$\hat{N}_{k,\alpha} = \hat{a}_{k,\alpha}^\dagger \hat{a}_{k,\alpha} \quad (4.2.18)$$

它的本征态记为  $|n_{k,\alpha}\rangle$

$$\hat{N}_{k,\alpha} |n_{k,\alpha}\rangle = n_{k,\alpha} |n_{k,\alpha}\rangle \quad (4.2.19)$$

表示态中有  $n_{k,\alpha}$  个“单模”(由确定的  $k$  和  $\alpha$  表征)光子存在. 类似于(1.4.14)和(1.4.15)式,现在有

$$\hat{a}_{k,\alpha} |n_{k,\alpha}\rangle = \sqrt{n_{k,\alpha}} |n_{k,\alpha} - 1\rangle \quad (4.2.20)$$

$$\hat{a}_{k,\alpha}^\dagger |n_{k,\alpha}\rangle = \sqrt{n_{k,\alpha} + 1} |n_{k,\alpha} + 1\rangle$$

这表明  $\hat{a}_{k,\alpha}$  和  $\hat{a}_{k,\alpha}^\dagger$  分别是  $(k, \alpha)$  模式光子的湮灭和产生算符. 同理,类似于(1.4.7)式,(整个)辐射场的哈密顿算符是:

$$\hat{H}_{em} = \sum_k \sum_\alpha \hbar \omega \left( \hat{N}_{k,\alpha} + \frac{1}{2} \right) \quad (4.2.21)$$

假设空间只有  $n_{k,\alpha}$  个单模光子,其他模式一个光子也没有,问体系能量等于多少? 因

$$\begin{aligned} & \hat{H}_{em} |0, 0, \dots, n_{k,\alpha}, 0, 0, \dots\rangle \\ &= \left[ \hbar \omega_k n_{k,\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{k',\alpha'} \hbar \omega_{k'} \right] |0, 0, \dots, n_{k,\alpha}, 0, 0, \dots\rangle \end{aligned}$$

括号中第一项表示  $n_{k,\alpha}$  个可见的光子能量,而后面一项

$$E_{\text{vac}} = \frac{1}{2} \sum_{k',\alpha'} \hbar \omega_{k'} \quad (4.2.22)$$

表示真空中电磁场作量子起伏的能量,又称为零点能,它包含一切模式,通常认为它是不可观察的发散(等于 $\infty$ )的量. 但是 1948 年 Casimir 指出它还是有可观察的效应,见后面 § 4.6 节的讨论.

总之,电磁场的量子化很简单,只要把矢势  $\mathbf{A}$  的 Fourier 展开式(4.2.7)中的振幅按规则(4.2.16)式化为算符,得到

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha} c \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega}} \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} [\hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}(t) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + \hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}^{\dagger}(t) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})] \quad (4.2.23)$$

对自由电磁场,算符  $\hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}(t)$  满足的 Heisenberg 运动方程是

$$\dot{\hat{a}}_{\mathbf{k},\alpha} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) [\hat{H}_{\text{em}}, \hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}] \quad (4.2.24)$$

以(4.2.21)式(改  $\mathbf{k}, \alpha$  为  $\mathbf{k}', \alpha'$ )代入,利用对易关系(4.2.17),即见

$$\dot{\hat{a}}_{\mathbf{k},\alpha} = -i\omega \hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}$$

或

$$\ddot{\hat{a}}_{\mathbf{k},\alpha} = -\omega^2 \hat{a}_{\mathbf{k},\alpha} \quad (4.2.25)$$

同理,

$$\dot{\hat{a}}_{\mathbf{k},\alpha}^{\dagger} = i\omega \hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}^{\dagger}, \quad \ddot{\hat{a}}_{\mathbf{k},\alpha}^{\dagger} = -\omega^2 \hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}^{\dagger} \quad (4.2.26)$$

它们的解是

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}(t) &= \hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}(0) \exp(-i\omega t) \\ \hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}^{\dagger}(t) &= \hat{a}_{\mathbf{k},\alpha}^{\dagger}(0) \exp(i\omega t) \end{aligned} \quad (4.2.27)$$

这同经典情形下之振幅(4.2.5)式是相似的.然而当电磁(辐射)场与带电粒子有量子耦合时,(4.2.24~27)各式不再成立,不过(4.2.23)式及对易关系(4.2.17)仍然保持正确.

#### 4.2C 黑体辐射的普朗克公式

1900年普朗克为解释黑体辐射的能谱公式,曾假设一些频率为  $\nu$  的“振子”,它们只能吸(或放)能量为  $nh\nu$  的电磁波,而  $n=1,2,3,\dots$  取不连续的整数值.然而对一定的平衡态温度  $T$ ,他又用了玻尔兹曼统计法去计算体系的平均能量,得出正确的结果.他的“振子”难道是空腔内壁上分子、原子的化身吗?初想起来,这种讲法是通得过的.因为第一,分子(原子)能级是分立的;第二,它们都定域在器壁上,所以可以用玻尔兹曼统计(只要子系(粒子)是定域的,它们的波函数不会重叠,原来全同粒子也变成可分辨的了,这时就无所谓交换简并,玻尔兹曼统计便是道地的量子统计而非经典统计了).然而,后来知道原子或分子内并不存在间隔确定为  $h\nu$  的一系列能级,能够吸放频率为  $\nu$  的光的能级只有两个,它们的能量之差等于  $h\nu$ .所以,1900年的普朗克“振子”决不是分子或原子的化身.现在我们看清楚了:原来它就是直到1928年才了解的电磁场量子化后的“等价物”.一种模式  $(\mathbf{k}, \alpha)$  的电磁波既然只对应于一个(而不是多个)振子,该种模式的光子数直

接对应于量子力学中一个振子的激发量子数. 在一定温度下的平衡态统计便当然是玻尔兹曼统计了. 由此可见, 普朗克通过总结 19 世纪物理学的全部成就而超越了他的时代, 天才地猜测到了电磁场的量子化规律. 同时我们也看到了物理学研究中数学的超前性, 有时只要能找到某种数学上的对应, 即使意义还不大清楚时便已经取得很大成功了.

现在我们来介绍黑体辐射普朗克公式的一种新的推导法. 首先假定空腔内壁存在两种原子定态  $|A\rangle$  和  $|B\rangle$ ,  $|A\rangle$  比  $|B\rangle$  在能量上高出  $h\nu = \hbar\omega$ , 于是原子就可以与空腔内模式为  $(k, \alpha)$  的电磁波 ( $k = \frac{\omega}{c}$ ) 相互作用而达到热平衡态. 相互作用(耦合)是通过(4.1.30)式中的  $H_{\text{int}}$  项而实现的(略去对本问题不重要的  $A^2$  项):

$$A \rightleftharpoons B + \gamma \quad (4.2.28)$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = - \sum_i \frac{q_i}{m_i c} \hat{\mathbf{p}}_i \cdot \hat{\mathbf{A}} = \sum_i \frac{e}{m c} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i \quad (4.2.29)$$

$i$  对原子中的电子求和,  $q_i = -e < 0$ ,  $m_i = m_e = m$ ;  $\hat{\mathbf{p}}_i = -i\hbar \nabla_i$  向右作用到电子波函数的坐标上(已用了库仑规范条件  $\nabla \cdot \hat{\mathbf{A}} = 0$ ). 量子化的矢势  $\hat{\mathbf{A}}$  用(4.2.23)式代入. 在一级微扰论里, 我们要考虑在  $H_{\text{int}}$  作用下, 从初态  $|B; n_{k,\alpha}\rangle (= |B\rangle \otimes |n_{k,\alpha}\rangle)$  表示原子态与光子态的“直积”)吸收一个光子后跃迁到末态  $|A; n_{k,\alpha} - 1\rangle$  的矩阵元:

$$\begin{aligned} & \langle A; n_{k,\alpha} - 1 | \hat{H}_{\text{int}} | B; n_{k,\alpha} \rangle \\ &= \frac{e}{m c} \langle A; n_{k,\alpha} - 1 | \sum_i c \sqrt{\frac{\hbar}{\omega V}} \hat{a}_{k,\alpha}(0) \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i - \omega t)] \boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i | B; n_{k,\alpha} \rangle \\ &= \frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega V}} \sqrt{n_{k,\alpha}} \sum_i \langle A | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i) \boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i | B \rangle \exp(-i\omega t) \quad (4.2.30) \end{aligned}$$

其中已以(4.2.27)式及(4.2.20)式代入. 注意  $\hat{\mathbf{A}}$  中的产生算符  $\hat{a}_{k,\alpha}^\dagger$  部分及模式与  $(k, \alpha)$  不同的其他成分对上述吸收矩阵元都没有贡献. 显然, 当  $n_{k,\alpha} = 0$  时, 此矩阵元也为零.

作为吸收的逆过程, 我们考虑原子从  $A$  态发射一个光子后自己跃迁到  $B$  态的过程, 此时矩阵元是:

$$\begin{aligned} & \langle B; n_{k,\alpha} + 1 | \hat{H}_{\text{int}} | A; n_{k,\alpha} \rangle \\ &= \frac{e}{m} \sqrt{\frac{\hbar}{\omega V}} \sqrt{n_{k,\alpha} + 1} \sum_i \langle B | \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i) \boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i | A \rangle \exp(i\omega t) \quad (4.2.31) \end{aligned}$$

奇妙的是:即使空腔内不存在 $(k, \alpha)$ 光子,即 $n_{k,\alpha} = 0$ 时,跃迁照样会发生,这正是所谓“自发辐射”;同时已有光子的存在,即 $n_{k,\alpha} \neq 0$ 时,将使跃迁矩阵元增大,这不是别的,正是爱因斯坦在1916年假设的受激辐射过程:伴随着原子的退激( $A \rightarrow B$ ),初态内 $n_{k,\alpha}$ 个光子中的一个光子变为末态同样 $(k, \alpha)$ 模式的二个光子.大家知道,这一理论上的预见引导到激光的发明.现在我们看到,无论自发辐射或受激辐射,都自动地从电磁场量子化后的量子力学推出.从定性的观念上不妨说,受激辐射是“真光子”感应出来的过程,而自发辐射是电磁场的真空起伏(见(4.2.22)式)所感应出来的过程.

因为跃迁几率 $\omega$ 正比于矩阵元的模的平方,所以

$$\begin{aligned} \frac{\omega_{A \rightarrow B}}{\omega_{B \rightarrow A}} &= \frac{(n_{k,\alpha} + 1) \left| \sum_i \langle B | \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i) \boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i | A \rangle \right|^2}{n_{k,\alpha} \left| \sum_i \langle A | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i) \boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i | B \rangle \right|^2} \\ &= \frac{n_{k,\alpha} + 1}{n_{k,\alpha}} \end{aligned} \quad (4.2.32)$$

最后一步利用了

$$\begin{aligned} \langle B | \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i) \boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i | A \rangle &= \langle A | \hat{\mathbf{p}}_i \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i) | B \rangle^* \\ &= \langle A | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_i) \boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i | B \rangle^* \end{aligned} \quad (4.2.33)$$

且 $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} = 0$ 的事实.

考虑辐射在空腔内达到平衡态,则原子处于上能级 $A$ 的居布数 $N(A)$ 与下能级的居布数 $N(B)$ 在平衡时应有关系:

$$N(A)\omega_{A \rightarrow B} = N(B)\omega_{B \rightarrow A} \quad (4.2.34)$$

结合(4.2.32)和(4.2.33)两式,即得

$$\frac{N(B)}{N(A)} = \frac{n_{k,\alpha} + 1}{n_{k,\alpha}} \quad (4.2.35)$$

另一方面,如前面所说,腔壁上原子随能量 $E$ 的分布是玻尔兹曼分布.即

$N(A) \sim \exp\left(-\frac{E_A}{k_B T}\right)$ ,  $N(B) \sim \exp\left(-\frac{E_B}{k_B T}\right)^*$ , 所以

$$\frac{N(B)}{N(A)} = \exp\left[\frac{(E_A - E_B)}{k_B T}\right] = \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \quad (4.2.36)$$

\* 有趣的是:假如原子服从 Fermi-Dirac 分布或 Bose-Einstein 分布,腔内光子仍由 Planck 公式(4.2.37)描述<sup>[12]</sup>.

合并(4.2.36)和(4.2.35)两式,我们得到空腔内角频率为 $\omega$ 模式为 $(k, \alpha)$ 的光子数等于

$$n_{k, \alpha} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} \quad (4.2.37)$$

注意,它是与空腔体积 $V$ 无关的!增大 $V$ 的效果是增加模式的密度,从 $k \rightarrow k + dk$ 的模式数等于

$$2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 4\pi k^2 dk \quad (4.2.38)$$

前面的2来自两种横极化自由度.(4.2.38)乘以(4.2.37)再乘光子能量 $\hbar\omega$ ,除以体积 $V = L^3$ ,注意 $k = \frac{\omega}{c}$ ,我们得到从 $\omega \rightarrow \omega + d\omega$ 的辐射(单位体积)能量密度等于

$$U(\omega) d\omega = \frac{8\pi\hbar}{c^3} \left(\frac{\omega}{2\pi}\right)^3 \left[ \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1} \right] d\omega$$

或对频率 $\nu$ 的能量密度分布

$$U(\nu) = U(\omega) \frac{d\omega}{d\nu} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} \quad (4.2.39)$$

这就是1900年划时代的普朗克公式.值得注意的是1916年爱因斯坦对此式的导出与上面有类似之处,不过他明显地假设了除受激(共振)吸收和自发辐射过程之外尚有受激辐射存在,3种过程达到“细致平衡”.因此爱因斯坦对激光的发明作出了历史性贡献.现在我们看到,在电磁场量子化后,自发辐射和受激辐射统一在(4.2.32)公式的 $(n_{k, \alpha} + 1)$ 因子中,不再明显地加以区别,而“细致平衡”不再是个独立的原理而被包含在算符的厄密性(4.2.33)式之中.

### § 4.3 自由电磁场的球面波解和量子化

当我们讨论一个原子、一个分子、一个原子核或一个粒子时,这样一个体系在量子力学描述下具有确定的角动量,同时在空间反演下又有不变性,因此又是宇称的本征态.当这一体系在两个定态(初态 $|i\rangle$ 和末态 $|f\rangle$ )之间发生跃迁时,会放出一个光子,根据角动量守恒和宇称守恒定律,这个光子也将有确定的角动量和宇称.显然,为了讨论这类问题,用上



节那样的电磁场平面波及其量子化表示来描述是不方便的. 在本节中我们将在球坐标下分解电磁场, 得到角动量和宇称的本征态, 再进行量子化得到相应的光子, 然后才可能处理上述荷电体系的量子跃迁.

如前述, 在库仑规范下, 考虑自由电磁场时, 不必引入标势  $A_0$ , 只需讨论矢势  $\mathbf{A}$ , 它满足横场条件

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (4.3.1)$$

和自由场方程

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} = 0 \quad (4.3.2)$$

### 4.3A 矢量球谐函数

在球坐标下用分离变量法解(4.3.2)式, 可得一个定态特解:

$$\mathbf{A}_{JlM}(r, \theta, \phi) = \mathbf{Y}_{JlM}(\theta, \phi) j_l(kr) \quad (4.3.3)$$

其中

$$\mathbf{Y}_{JlM}(\theta, \phi) = \sum_{m, \mu} C_{lm, 1\mu}^{JM} Y_{lm}(\theta, \phi) \mathbf{e}_\mu \quad (4.3.4)$$

而

$$\mathbf{e}_0 = \mathbf{e}_z, \quad \mathbf{e}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y), \quad \mathbf{e}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y) \quad (4.3.5)$$

是描写一个自旋  $S = 1$  的矢量场的 3 个本征矢量, 分别对应于  $S_z$  的本征值为 0, 1 和 -1 的 3 种极化本征态, 其中  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$  分别是沿直角坐标的单位矢量(总称为直角基矢),  $C_{lm, 1\mu}^{JM}$  是 CG 系数(参见第三章(3.2.36)式等).

(4.3.3) 式中的径向部分像标量场情况一样, 仍由球 Bessel 函数  $j_l(kr)$  表示. 这个式子和(4.3.4)式, 表示电磁场作为一个矢量场, 它的“总角动量” $\mathbf{J}$ (其量子数记为  $J$ )由两部分组成, 一部分是“轨道角动量” $\mathbf{L}$ (量子数为  $l = 0, 1, 2, \dots$ ), 另一部分是“自旋角动量” $\mathbf{S}$ (量子数  $S = 1$ ), 以下为简洁起见, 记角动量单位  $\hbar = 1$ , 于是

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (4.3.6)$$

而

$$J = l - 1, l, l + 1 \quad (4.3.7)$$

$\mathbf{J}$  的投影量子数, 即  $\hat{J}_z$  的本征值是

$$M = -J, -J + 1, \dots, 0, \dots, J - 1, J \quad (4.3.8)$$

我们称  $\mathbf{Y}_{JlM}$  为“矢量球谐函数”, 它是  $\hat{\mathbf{J}}^2$  和  $\hat{J}_z$  的共同本征函数(且满足正

交归一化性质):

$$\hat{J}^2 Y_{JM} = J(J+1)Y_{JM} \quad (4.3.9)$$

$$\hat{J}_z Y_{JM} = MY_{JM} \quad (4.3.10)$$

(4.3.3)式对确定的  $J$  和  $M$ , 有 3 种可能的特解:

$$Y_{J, J+1, M}(\theta, \phi) j_{J+1}(kr), Y_{J, J, M}(\theta, \phi) j_J(kr), \\ Y_{J, J-1, M}(\theta, \phi) j_{J-1}(kr) \quad (4.3.11)$$

但是, 我们还必须检查一下它们是否满足约束条件(4.3.1)式. 为此首先给出一些数学关系, 易证球基矢(4.3.5)满足正交归一条件

$$\mathbf{e}_p^* \cdot \mathbf{e}_{p'} = \delta_{pp'}, \quad (p, p' = 0, 1, -1) \quad (4.3.12)$$

而其中

$$\mathbf{e}_p^* = (-1)^p \mathbf{e}_{-p} \quad (4.3.13)$$

于是任何矢量  $\mathbf{A}$  都可表示成为

$$\mathbf{A} = \sum_p A_p \mathbf{e}_p^* = \sum_p (-1)^p A_p \mathbf{e}_{-p} \quad (4.3.14)$$

其中  $A_p = \mathbf{A} \cdot \mathbf{e}_p$ , 具体地说

$$A_{\pm} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(A_x \pm iA_y), \quad A_0 = A_z \quad (4.3.15)$$

作为习题, 请自己证明径向矢量可展开为\*

$$\mathbf{r} = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_p (-1)^p Y_{1p} \mathbf{e}_{-p} \quad (4.3.16)$$

任何两个矢量  $\mathbf{A}$  和  $\mathbf{B}$  的标积可以写成

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \sum_p (-1)^p A_p B_{-p} \quad (4.3.17)$$

与(4.3.15)式相应, 定义角动量算符 ( $\hbar = 1$ )

$$\hat{J}_0 = \hat{J}_z, \quad \hat{J}_{\pm} = (\hat{J}_x \pm i \hat{J}_y) \quad (4.3.18)$$

而对本征态  $\psi_{JM}$  有

\* 在本章中, 我们对球谐函数  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  仍用 Condon-Shortley 的定义[不包括考虑时间反演后的附加因子( $i^l$ )], 见(3.5.11)式:

$$Y_{l-m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{lm}^*(\theta, \phi)$$

$$\hat{J}_0 \psi_{JM} = M \psi_{JM} \quad (4.3.19)$$

$$\hat{J}_{\pm} \psi_{JM} = \sqrt{(J \mp M)(J \pm M + 1)} \psi_{J, M \pm 1} \quad (4.3.20)$$

[比较(3.3.14)式], 这两个式子可以利用 CG 系数合并写成简洁的形式:

$$\hat{J}_p \psi_{JM} = (-1)^p \sqrt{J(J+1)} C_{J, M+p; 1, -p}^{JM} \psi_{J, M+p}, \quad (p = -1, 0, 1) \quad (4.3.21)$$

利用(4.3.14)式, 便有

$$\begin{aligned} \hat{J} \psi_{JM} &= \sum_{p=0, \pm 1} (-1)^p \hat{J}_p \psi_{JM} \\ &= \sqrt{J(J+1)} \sum_p C_{J, M+p; 1, -p}^{JM} \psi_{J, M+p} \mathbf{e}_{-p} \end{aligned} \quad (4.3.22)$$

如果  $\hat{J} = \hat{L} = -i(\mathbf{r} \times \nabla)$ , 只是轨道角动量, 则  $\psi_{JM} = Y_{JM}$ , 于是

$$\hat{L} Y_{JM} = \sqrt{J(J+1)} \sum_p C_{J, M+p; 1, -p}^{JM} Y_{J, M+p} \mathbf{e}_{-p} \quad (4.3.23)$$

因为由(4.3.4)式

$$\mathbf{Y}_{J, l=J, M}(\theta, \phi) = \sum_p C_{l, M+p; 1, -p}^{JM} \mathbf{Y}_{l, M+p}(\theta, \phi) \mathbf{e}_{-p} \quad (4.3.24)$$

比较上面这两个式子, 便得到

$$\mathbf{Y}_{JJM} = \frac{1}{\sqrt{J(J+1)}} \hat{L} Y_{JM} \quad (4.3.25)$$

这个式子更使我们理解它为什么叫做矢量球谐函数.

现在我们来证明(4.3.11)式中的中间一个波函数满足条件(4.3.1)式, 即

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [\mathbf{Y}_{JJM} \mathbf{j}_J(kr)] &= \frac{1}{\sqrt{J(J+1)}} \nabla \cdot [(\hat{L} Y_{JM}) \mathbf{j}_J(kr)] \\ &= \frac{-i}{\sqrt{J(J+1)}} \nabla \cdot [\mathbf{r} \times \nabla (Y_{JM} \mathbf{j}_J)] = 0 \end{aligned} \quad (4.3.26)$$

最后一步利用了公式

$$\nabla \cdot [\mathbf{r} \times \nabla (Y_{JM} \mathbf{j}_J)] = (\nabla Y_{JM} \mathbf{j}_J) \cdot (\nabla \times \mathbf{r}) - \mathbf{r} \cdot [\nabla \times \nabla (Y_{JM} \mathbf{j}_J)] = 0$$

(因  $\nabla \times \mathbf{r} = 0$ ,  $\nabla \times (\nabla \Phi) = 0$ ), 证毕.

为进一步讨论, 下面再给出几个公式.

## (1) 梯度公式

$$\begin{aligned} \nabla \Phi(r) Y_{lM} = & - \left( \frac{l+1}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) \Phi Y_{l, l+1, M} \\ & + \left( \frac{l}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r} \right) \Phi Y_{l, l-1, M} \end{aligned} \quad (4.3.27)$$

其中  $\Phi(r)$  是任意的以  $r$  为宗量的标量函数. 注意  $Y_{l, l', M}(\theta, \phi)$  中不含  $r$ .

## (2) 旋度公式

$$\nabla \times [\Phi(r) Y_{l, l+1, M}] = i \left( \frac{d}{dr} + \frac{l+2}{r} \right) \Phi \left( \frac{l}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{lM} \quad (4.3.28)$$

$$\begin{aligned} \nabla \times [\Phi(r) Y_{lM}] = & i \left( \frac{d}{dr} - \frac{l}{r} \right) \Phi \left( \frac{l}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{l, l+1, M} \\ & + i \left( \frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r} \right) \Phi \left( \frac{l+1}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{l, l-1, M} \end{aligned} \quad (4.3.29)$$

$$\nabla \times [\Phi(r) Y_{l, l-1, M}] = i \left( \frac{d}{dr} - \frac{l-1}{r} \right) \Phi \left( \frac{l+1}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{lM} \quad (4.3.30)$$

## (3) 散度公式

$$\nabla \cdot [\Phi(r) Y_{l, l+1, M}] = - \left( \frac{l+1}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{d}{dr} + \frac{l+2}{r} \right) \Phi Y_{lM} \quad (4.3.31)$$

$$\nabla \cdot [\Phi(r) Y_{l, l, M}] = 0 \quad (4.3.32)$$

$$\nabla \cdot [\Phi(r) Y_{l, l-1, M}] = \left( \frac{l}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{d}{dr} - \frac{l-1}{r} \right) \Phi Y_{lM} \quad (4.3.33)$$

注意, (4.3.32) 的证明与 (4.3.26) 式的证明完全相似.

 (4) 单位矢量  $\frac{\mathbf{r}}{r}$  与球谐函数的乘积用矢量球谐函数展开:

$$\frac{\mathbf{r}}{r} Y_{lm} = - \left( \frac{l+1}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{l, l+1, m} + \left( \frac{l}{2l+1} \right)^{\frac{1}{2}} Y_{l, l-1, m} \quad (4.3.34)$$

## (5) 球 Bessel 函数的微商公式

$$\frac{d}{dr} j_l(kr) = \frac{l}{r} j_l(kr) - k j_{l+1}(kr) \quad (4.3.35)$$

$$\frac{d}{dr}j_l(kr) = -\frac{(l+1)}{r}j_l(kr) + kj_{l-1}(kr) \quad (4.3.36)$$

### 4.3B 电多极场(TM波)和磁多极场(TE波)

我们在(4.3.26)式中已证明(4.3.11)式中一个解满足(4.3.1)式这个规范约束条件,现在指出(4.3.11)的另两个解分别都不满足(4.3.1)式,这一点可从(4.3.31)和(4.3.33)看出.但是它们的某种线性组合能够满足条件(4.3.1).这种组合可以从物理的考虑求出.

首先注意由(4.3.4)式定义的矢量球谐函数  $Y_{J JM}$  在空间反演下得到宇称乘积因子  $(-1)^J$  (直角坐标改号使  $\theta \rightarrow \pi - \theta$ ,  $\phi \rightarrow \phi + \pi$  而坐标基矢  $e_\mu$  不动),而  $Y_{J, J+1, M}$  或  $Y_{J, J-1, M}$  的宇称则相反,为  $(-1)^{J\pm 1}$ ,由(4.3.25)式又看出  $Y_{J JM}$  与矢径  $r$  垂直,这个  $r$  可看作是沿着观测辐射的方向,即量子化后的光沿着  $n = \frac{r}{r}$  方向传播.以后我们记“磁多极场”的矢势为

$$A_{JM}^{(m)} = \sqrt{\frac{2k^2}{R}} Y_{J JM}(\theta, \phi) j_J(kr) \quad (4.3.37)$$

其中系数是这样确定的:考虑电磁场被关在半径为  $R$  的球形空腔内,  $R \gg \lambda$  (波长),则因

$$j_J(kr) \approx \frac{1}{kr} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}J\right), \quad (kr \gg J) \quad (4.3.38)$$

取第一类边界条件

$$j_J(kr) |_{r=R} = 0$$

后波矢大小  $k$  便取分立值  $k_n$ :

$$k_n R - \frac{\pi}{2}J = n\pi, \quad (n = \text{大整数}) \quad (4.3.39)$$

于是(4.3.37)式所示之  $A_{JM}^{(m)}$  满足在球腔内的正交归一化条件:

$$\begin{aligned} & \int \mathbf{A}_{JM}^{(m)*}(k, \mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_{J'M'}^{(m)}(k', \mathbf{r}) d\tau \\ &= \frac{2kk'}{R} \int \mathbf{Y}_{J JM}^* \mathbf{Y}_{J' J' M'} d\Omega \int_0^R j_J(kr) j_{J'}(k'r) r^2 dr \\ &= \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \delta_{kk'} \end{aligned} \quad (4.3.40)$$

其中先利用对  $\Omega$  积分的正交性及  $J = J'$  时之积分公式:

$$\int_0^{kR} j_l^2(x) x^2 dx = \left[ \frac{1}{2} x^3 (j_l^2(x) - j_{l-1}(x)j_{l+1}(x)) \right]_0^{kR} = \frac{1}{2} (kR)$$

注意从归一化性质可见这里的  $\mathbf{A}_{JM}^{(m)}$  具有(长度) $^{-\frac{3}{2}}$  的量纲, 还不具有一个物理上矢势应有的正确量纲[(能量) $^{\frac{1}{2}}$ (长度) $^{-\frac{1}{2}}$ ], 这将在下面予以补充.

(4.3.37)式前已指出,  $\mathbf{A}_{JM}^{(m)}$  与光的传播方向  $\mathbf{n}$  相互垂直, 故又可定义一个与它们两者都垂直的“电的矢量球谐函数”:

$$\mathbf{Y}_{JM}^{(e)} = -i[\mathbf{n} \times \mathbf{Y}_{JJM}(\mathbf{n})] \equiv -i[\mathbf{n} \times \mathbf{Y}_{JM}^{(m)}(\mathbf{n})] \quad (4.3.41)$$

这里, 我们又定义了  $\mathbf{Y}_{JM}^{(m)}(\mathbf{n}) \equiv \mathbf{Y}_{JJM}(\mathbf{n})$ , 以(4.3.25)式代入得

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_{JM}^{(e)} &= \frac{(-i)(-i)}{\sqrt{J(J+1)}} [\mathbf{n} \times (\mathbf{r} \times \nabla Y_{JM})] \\ &= \frac{\mathbf{r}}{\sqrt{J(J+1)}} \nabla Y_{JM} \end{aligned} \quad (4.3.42)$$

(用了公式  $\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{c})\mathbf{b} - (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbf{c}$  及  $\mathbf{n} \cdot \nabla Y_{JM} = 0$ ). 令梯度公式(4.3.27)式中  $\Phi(r) = 1$ , 便有

$$\mathbf{Y}_{JM}^{(e)} = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} [\sqrt{J} \mathbf{Y}_{J, J+1, M}(\mathbf{n}) + \sqrt{J+1} \mathbf{Y}_{J, J-1, M}(\mathbf{n})] \quad (4.3.43)$$

$\mathbf{Y}_{JM}^{(e)}$  从它的构造(4.3.41)式可见是既垂直于  $\mathbf{Y}_{JM}^{(m)} = \mathbf{Y}_{JJM}$ , 又垂直于  $\mathbf{n}$  的, 于是我们从(4.3.11)式的3个独立解中, 又可以寻找  $\mathbf{Y}_{J, J+1, M}$  和  $\mathbf{Y}_{J, J-1, M}$  的另一种不同于(4.3.43)的线性组合来得到一个平行于  $\mathbf{n}$  的纵向的电多极场如下:

$$\mathbf{Y}_{JM}^{(L)}(\mathbf{n}) = \mathbf{n} Y_{JM}(\theta, \phi) \quad (4.3.44)$$

用(4.3.34)式后, 即见

$$\mathbf{Y}_{JM}^{(L)}(\mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{2J+1}} [-\sqrt{J+1} \mathbf{Y}_{J, J+1, M}(\mathbf{n}) + \sqrt{J} \mathbf{Y}_{J, J-1, M}(\mathbf{n})] \quad (4.3.45)$$

于是我们找到了球坐标下自由电磁辐射场的3个线性独立解, 两个横向(与  $\mathbf{n}$  垂直), 一个纵向(与  $\mathbf{n}$  平行), 它们满足如下的正交归一化条件:

$$\int \mathbf{Y}_{JM}^{(\lambda)*} \cdot \mathbf{Y}_{J'M'}^{(\lambda')} d\Omega = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (\lambda, \lambda' = m, l, L) \quad (4.3.46)$$

现在我们把径向波函数也考虑进去, 定义“电多极场”如下:

$$\mathbf{A}_{JM}^{(e)}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2k^2}{R}} \frac{1}{\sqrt{2J+1}} \left[ \sqrt{J} \mathbf{Y}_{J, J+1, M}(\mathbf{n}) j_{J+1}(kr) - \sqrt{J+1} \mathbf{Y}_{J, J-1, M}(\mathbf{n}) j_{J-1}(kr) \right] \quad (4.3.47a)$$

注意与(4.3.43)式比较,第二项前改了一个符号,这是由于  $\mathbf{A}_{JM}^{(e)}(\mathbf{r})$  和  $\mathbf{A}_{JM}^{(m)}(\mathbf{r})$  一样,必须满足横场条件

$$\nabla \cdot \mathbf{A}_{JM}^{(e)}(\mathbf{r}) = 0 \quad (4.3.47b)$$

这一点可用散度公式(4.3.31)及(4.3.35)等式证明之(习题4.10).

这样,与在平面波情形类似,我们从横场条件  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$  选出了两种独立的球面电磁波解,其矢势分别为  $\mathbf{A}_{JM}^{(m)}$  和  $\mathbf{A}_{JM}^{(e)}$ ,同时摒弃另一个不满足横场条件的沿  $\mathbf{n}$  方向的(纵向的)  $\mathbf{A}_{JM}^{(L)}$  解.以后称整数  $J$  为“多极级”,在(4.3.37)式前已解释,  $\mathbf{A}_{JM}^{(m)}$  的宇称为  $(-1)^J$ ,而由(4.3.47)式可见  $\mathbf{A}_{JM}^{(e)}$  的宇称为  $(-1)^{J+1}$ .由  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  及  $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}$  可见,“电多极场”和“磁多极场”中各自的电、磁场互为对偶场,意思是

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_{JM}^{(e)} &= -\mathbf{E}_{JM}^{(m)} = -ik\mathbf{A}_{JM}^{(m)} \\ \mathbf{E}_{JM}^{(e)} &= \mathbf{B}_{JM}^{(m)} = \nabla \times \mathbf{A}_{JM}^{(m)} \end{aligned} \quad (4.3.48)$$

要证明这关系只需从上面第二式 ( $\mathbf{E}_{JM}^{(e)} = ik\mathbf{A}_{JM}^{(e)}$ ) 解出

$$\mathbf{A}_{JM}^{(e)} = \frac{1}{ik} \nabla \times \mathbf{A}_{JM}^{(m)} = \frac{1}{i} \nabla \times \sqrt{\frac{2}{R}} \mathbf{Y}_{JJM} j_J \quad (4.3.49)$$

后再用旋度公式(4.3.29).需要强调的是:无论电多极场或磁多极场,都各有电场和磁场,但前者的磁场与传播方向  $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}$  严格垂直,故电多极场又称 TM 波;而磁多极场的电场与  $\mathbf{r}$  严格垂直,故又称 TE 波,即

$$\mathbf{B}_{JM}^{(e)} \cdot \mathbf{r} = 0, \quad \mathbf{E}_{JM}^{(m)} \cdot \mathbf{r} = 0 \quad (4.3.50)$$

另一方面,  $\mathbf{E}_{JM}^{(e)}$  或  $\mathbf{B}_{JM}^{(m)}$  在  $r$  较小时并不和  $\mathbf{n}$  垂直.仅当  $r$  很大时才有  $(\mathbf{E}_{JM}^{(\lambda)}, \mathbf{B}_{JM}^{(\lambda)}, \mathbf{n})$  ( $\lambda = e, m$ ) 三者相互垂直的右手螺旋关系,这时能量流都沿  $\mathbf{n}$  方向传出.电多极场和磁多极场的这种区别,也就是命名的道理,要等到后面与发射源联系起来时才能讲清楚.

### 4.3C 矢势的多极场展开和量子化

现在我们写出满足方程(4.3.2)而又同时满足规范约束条件(4.3.1)

的矢势的通解,它可以表示成  $\mathbf{A}_{JM}^{(e)}$  和  $\mathbf{A}_{JM}^{(m)}$  的一切可能的线性组合形式:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_{\substack{k, J, M, \lambda=e, m \\ J=1, \dots, \infty}} \{a_\lambda(k, J, M) \mathbf{A}_{JM}^{(\lambda)}(k, \mathbf{r}) + a_\lambda^*(k, J, M) \mathbf{A}_{JM}^{(\lambda)*}(k, \mathbf{r})\} \quad (4.3.51)$$

其中  $a_\lambda(k, J, M)$  为任意复数振幅,后项为前项的复共轭以保证  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  为实数. 整个球形空腔内的自由电磁场能量即经典哈密顿量等于

$$H_{em} = \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) d\tau = \frac{1}{8\pi} \int \left[ \frac{1}{c^2} \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 + (\nabla \times \mathbf{A})^2 \right] d\tau \quad (4.3.52)$$

以(4.3.51)式代入,并利用形如(4.3.40)式之正交归一化条件

$$\int \mathbf{A}_{JM}^{(\lambda)*}(k, \mathbf{r}) \cdot \mathbf{A}_{J'M'}^{(\lambda')}(k', \mathbf{r}) d\tau = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{kk'} \quad (4.3.53)$$

即得

$$H_{em} = \sum_{k, J, M, \lambda} \frac{\omega^2}{4\pi c^2} [a_\lambda^*(k, J, M) a_\lambda(k, J, M) + a_\lambda(k, J, M) a_\lambda^*(k, J, M)] \quad (4.3.54)$$

注意  $\mathbf{A}$  应该有(能量) $^{\frac{1}{2}}$ (长度) $^{-\frac{1}{2}}$ 的量纲,故现在  $a_\lambda(k, J, M)$  的量纲为(能量) $^{\frac{1}{2}}$ (长度), ( $k = \frac{\omega}{c}$  是(长度) $^{-1}$ 的量纲). 为作正确的场量子化,先引入无量纲的  $C_\lambda(k, J, M)$  使

$$a_\lambda(k, J, M) = \frac{1}{k} (h\omega)^{\frac{1}{2}} C_\lambda(k, J, M) \quad (4.3.55)$$

进一步,令  $C_\lambda$  从  $C$  数变为  $q$  数(算符)

$$\begin{cases} C_\lambda(k, J, M) \longrightarrow \hat{C}_\lambda(k, J, M) \\ C_\lambda^*(k, J, M) \longrightarrow \hat{C}_\lambda^\dagger(k, J, M) \end{cases} \quad (4.3.56)$$

并引入量子对易关系

$$\begin{cases} [\hat{C}_\lambda(k, J, M), \hat{C}_{\lambda'}^\dagger(k', J', M')] = \delta_{kk'} \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \delta_{\lambda\lambda'} \\ [\hat{C}_\lambda, \hat{C}_{\lambda'}] = [\hat{C}_\lambda^\dagger, \hat{C}_{\lambda'}^\dagger] = 0 \end{cases} \quad (4.3.57)$$

经过此种量子化处理后,经典的  $H_{em}$  便提升为量子场论中的哈密顿算符

$$\hat{H}_{em} = \sum_{k, J, M, \lambda} \frac{1}{2} \hbar \omega [\hat{C}_\lambda^\dagger(k, J, M) \hat{C}_\lambda(k, J, M)$$



$$\begin{aligned}
& + \hat{C}_\lambda(k, J, M) \hat{C}_\lambda^\dagger(k, J, M) ] \\
& = \sum_{k, J, M, \lambda} \hbar \omega \left[ \hat{C}_\lambda^\dagger(k, J, M) \hat{C}_\lambda(k, J, M) + \frac{1}{2} \right] \quad (4.3.58)
\end{aligned}$$

显然

$$\hat{n}_\lambda(k, J, M) = \hat{C}_\lambda^\dagger(k, J, M) \hat{C}_\lambda(k, J, M) \quad (4.3.59)$$

是对应于某一特定多极级( $J$ )的光子数算符,  $J(M)$ 是一个光子的总角动量(投影), 磁多极光子( $\lambda = m$ )的“轨道角动量”量子数  $L = J$ , 而电多极光子( $\lambda = l$ )的  $L = J \pm 1$  [见(4.3.37)和(4.3.47)式]. 作为一个矢量场, 光子场具有自旋  $S = 1$  (见 § 3.2 节),  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ,  $\mathbf{L}$  与  $\mathbf{S}$  耦合在一起, 不可能明确区分它们, 所以对一定的  $J, L$  不是好量子数.

## § 4.4 电磁多极辐射的跃迁几率

### 4.4A 荷电粒子体系与电磁场的耦合

在非相对论量子力学中, 荷电粒子体系和光子相互作用的总哈密顿量应为

$$\hat{H} = \sum_i \frac{1}{2m_i} \hat{\mathbf{p}}_i^2 + \sum_{kJM\lambda} \hbar \omega_k \hat{C}_{kJM\lambda}^\dagger \hat{C}_{kJM\lambda} + \hat{H}_{\text{int}} \quad (4.4.1)$$

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_i \left\{ \frac{-q_i}{2m_i c} (\hat{\mathbf{p}}_i \cdot \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i) + \frac{q_i^2}{2m_i c^2} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}} \right\} \quad (4.4.2)$$

其中  $\hat{H}_{\text{int}}$  的经典原型已在(4.1.29)式给出, 但下面我们将略去与  $e_i^2$  成正比的  $\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}$  项, 因为它对应于在一瞬间同时吸、放两个光子的过程, 它在通常的一级微扰论中可不予考察\*. 不过对于电子、质子或中子这些自旋为  $\frac{1}{2}$  的费米子, 它们固有的内禀磁矩  $\boldsymbol{\mu}_i$  及其与外磁场的耦合却是重要的, 耦合能量等于

$$-\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{B} = -\mu_i \frac{e \hbar}{2m_i c} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \mathbf{B} \quad (4.4.3a)$$

这里对电子  $\frac{e \hbar}{2m_e c} = \mu_B = 5.788\,382\,63 \times 10^{-11} \text{MeV} \cdot \text{T}^{-1}$  (T 是磁场的

\* 但在另外一些特殊情况下, 例如在考察光被电子散射的理论中, 必须同时考察  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$  项的二级微扰贡献和  $\mathbf{A}^2$  的一级微扰贡献(见习题 4.8, 4.9).

Tesla 单位), 是玻尔磁子单位, 而对质子或中子,  $\frac{e\hbar}{2m_p c} = \mu_N = 3.152\,451\,66 \times 10^{-14} \text{MeV} \cdot \text{T}^{-1}$  是核磁子单位,  $\sigma_i$  是泡利矩阵, 而  $\mu_i$  是无量纲数, 等于(1.1.3)式中引入的回转磁比率  $g_i$  的  $\frac{1}{2}$  倍:  $g_i = 2\mu_i$ . 我们将把(4.4.3)式唯象地加到  $\hat{H}_{\text{int}}$  中去, 因为虽然按照相对论性的 Dirac 方程, 理论上(见后面第九章)能够推出电子的  $\mu_e = -1$ , 质子的  $\mu_p = 1$ , 而中子的  $\mu_n = 0$ , 但实验上测得

$$\begin{cases} \mu_e = -1.001\,159\,652\,2 \\ \mu_p = 2.792\,847\,39 \\ \mu_n = -1.913\,042\,7 \end{cases} \quad (4.4.3b)$$

它们与 Dirac 理论的预告值偏离的部分称为各该粒子的反常磁矩, 对电子还不算大, 且可用量子电动力学精确地解释, 而对质子或中子, 反常磁矩部分无论在定量上或定性上(符号上), 差别都非常之大, 至今还很难在理论上满意地予以解释, 因此下面我们将采用实验值(4.4.3)而写出

$$\hat{H}_{\text{int}} = - \sum_i \left\{ \frac{q_i}{m_i} (\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i) + \mu_i \frac{e}{2m_i} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \hat{\mathbf{B}} \right\} \quad (4.4.4)$$

这里为方便起见, 我们取“自然单位制 ‘ $\hbar = c = 1$ ’”, 只剩下一个量纲[长度]~[时间]~[能量] $^{-1}$ , 在最后的結果如跃迁几率等表达式中再由量纲分析补充  $\hbar$  和  $c$ , 以得到正确的量纲(见本书附录).

#### 4.4B 放单光子的跃迁几率

设粒子体系初态为  $|i\rangle$ , 放出一个光子后变为末态  $|f\rangle$ , 光子数从 0 增加为 1, 则总体系(计入辐射场)从  $|i, 0\rangle$  转变到  $|f, 1\rangle$ . 按照量子力学一级微扰论的 Fermi 黄金规则, 单位时间内在  $4\pi$  立体角内的跃迁几率为(见(2.7.11)式, 改记  $\omega$  为  $\lambda$ ):

$$\frac{dW}{dt} = \lambda = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f, 1 | \hat{H}_{\text{int}} | i, 0 \rangle|^2 \rho(E_f) \quad (4.4.5)$$

其中  $\lambda$  称为衰变常数, 而  $\rho(E_f) = \frac{dn}{dE_f}$  为末态的能级密度, 假定粒子体系处于分立的量子态, 则这一末态密度完全来自于辐射场的连续谱性质.

用前述在大圆球(半径  $R \gg$  波长  $\lambda$ ) 内使频谱分立的办法, 我们很容易计算  $\rho(E_f)$ . 事实上, 由(4.3.39)式已经得到  $\frac{dn}{dk} = \frac{R}{\pi}$ , 因为光子能量

$E = \hbar\omega = \hbar kc$ , 所以

$$\rho(E_f) = \frac{dn}{dE_f} = \frac{1}{\hbar c} \frac{dn}{dk} = \frac{R}{\hbar c \pi} \rightarrow \frac{R}{\pi} \quad (4.4.6)$$

同一能量不同  $J, M$  的光子态可能有简并, 测量时也可能不区分角动量投影态, 这些问题将在分析矩阵元和计算实际几率时予以考虑.

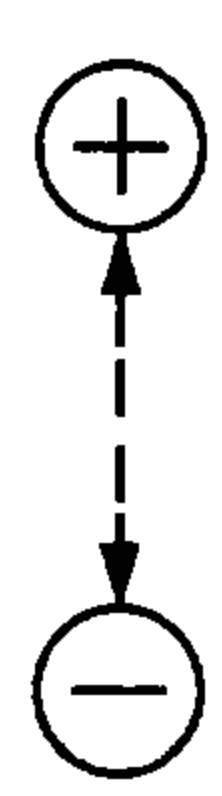
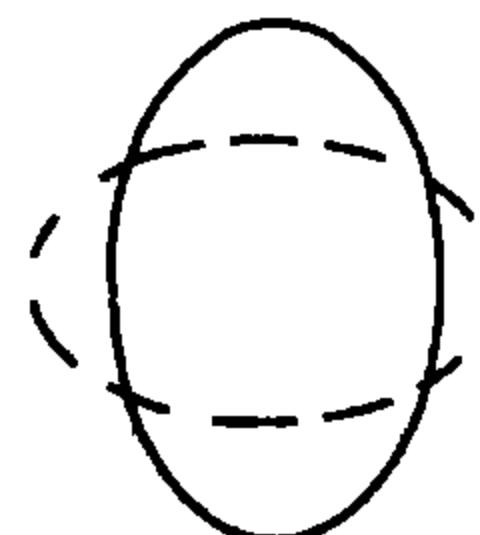
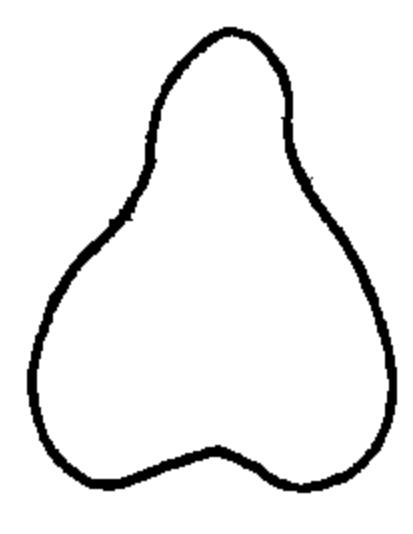
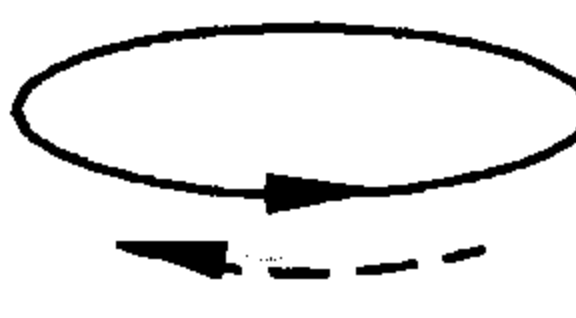
#### 4.4C 电磁多极跃迁矩阵元和跃迁几率

从现在起我们改变记号, 将电磁场的总角动量量子数由  $J$  改为  $L$ , 这样记法有个好处,  $J$  将专门用来标记原子的总角动量, 同时原子核的总角动量习惯上记为  $I$ . 我们已讨论了两种电磁多极场(以后为简单起见, 算符上面的帽子  $\wedge$  省略了):

$$\begin{cases} \text{“电的”多极场 } A_{LM}^{(e)}, \text{ 宇称} = (-1)^{L\pm 1}, \\ \text{“磁的”多极场 } A_{LM}^{(m)}, \text{ 宇称} = (-1)^L, \end{cases} \quad (L = 1, 2, \dots) \quad (4.4.7)$$

多极级定名为  $2^L$  级, 如表 4.4.1 所示. 下面将看到各多极级场对应于放出或吸收具有角动量为  $LM$  的电磁波(光子), 所以表上同时列出了能产生各该电(或磁)多极级辐射的源的经典图像, 请注意这种图像与辐射场性质(4.3.48)式的联系.

表 4.4.1 电磁辐射的多极级

|      | $L$ | $2^L$ | 名称      | 对应发射源的经典图像  |
|------|-----|-------|---------|---|
| 电(E) | 1   | 2     | 电偶极(E1) |  电偶极子振荡      |
|      | 2   | 4     | 电四极(E2) |  电四极矩(椭球形)振荡 |
|      | 3   | 8     | 电八极(E3) |  电八极矩(梨形)振荡  |
| 磁(M) | 1   | 2     | 磁偶极(M1) |  闭合线圈中交流电振荡  |
|      | 2   | 4     | 磁四极(M2) |   |

现在先讨论电多极跃迁矩阵元. 在矩阵元  $\langle f, 1 | H_{\text{int}} | i, 0 \rangle$  中, 将  $A$

用(4.3.49)式的  $A_{LM}^{(e)}$  代入, 则

$$\mathbf{A} = \sum_{kLM} a_{kLM} \mathbf{A}_{kLM}^{(e)} + a_{kLM}^{\dagger} \mathbf{A}_{kLM}^{(e)*} \quad (4.4.8)$$

其中

$$a_{kLM}^{\dagger} \mathbf{A}_{kLM}^{(e)*} = C_{kLM}^{\dagger} i \sqrt{\frac{4\pi}{\omega R}} \frac{\nabla \times (\mathbf{L} Y_{LM}^* j_L)}{\sqrt{L(L+1)}} \quad (4.4.9)$$

(已用了(4.3.25)式的复共轭). 显然, 只有当光子的产生算符  $C^{\dagger}$  起作用时, 矩阵元才不为零. 下面为书写清楚起见, 略写  $H_{\text{int}}$  中对粒子  $i$  的求和  $\sum_i$  及相应之脚标  $i$ , 于是电  $LM$  极的跃迁矩阵元等于

$$\begin{aligned} \langle f, 1^{kLM} | H_{\text{int}} | i, 0 \rangle = & \langle \psi_f | -\frac{iq}{2m} \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{L(L+1)R\omega}} \{ \mathbf{p} \cdot (\nabla \times \mathbf{L} Y_{LM}^* j_L) \\ & + (\nabla \times \mathbf{L} Y_{LM}^* j_L) \cdot \mathbf{p} \\ & + \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \nabla \times \mathbf{L} Y_{LM}^* j_L \} | \psi_i \rangle \quad (4.4.10) \end{aligned}$$

注意电子电荷  $q = -e < 0$ , 故上式用于电子时  $\mu = \mu_e$ . 另外要十分注意式中算符  $\mathbf{p}$  要向右作用到一切含空间坐标的波函数上, 而  $\mathbf{A}$  中的梯度算符  $\nabla$  只作用到  $\mathbf{A}$  的波函数而不作用到粒子的波函数  $\psi_i$  上.

一般情形下, 原子核半径约为  $r \sim 10^{-14}$  m, 而  $\gamma$  跃迁能量约为 MeV 量级, 即  $k \sim 5 \times 10^{12} \text{ m}^{-1}$ , 故  $kr \sim 5 \times 10^{-2} \ll 1$ ; 对于原子,  $r \sim 10^{-10}$  m,  $k \sim 10^7 \text{ m}^{-1}$ , 同样也有  $kr \sim 10^{-3} \ll 1$ , 故在这样的长波近似下, 我们有

$$\begin{aligned} j_L(kr) Y_{LM}^* & \approx \frac{(kr)^L}{(2L+1)!!} Y_{LM}^* \\ \frac{dj_L}{dr} & \approx \frac{L}{r} j_L \quad (4.4.11) \end{aligned}$$

(见(4.3.35)式), 在长波近似下还有等式

$$\nabla \times (\mathbf{L} Y_{LM}^* j_L) \approx i(L+1) \nabla \left[ \frac{(kr)^L}{(2L+1)!!} Y_{LM}^* \right] \quad (4.4.12)$$

(证明中用(4.3.25), (4.3.27), (4.3.47)及(4.3.49)等式.)

记  $\phi = r^L Y_{LM}^*$ , 因  $\mathbf{p} = -i\nabla$ , 注意(4.4.10)中括号内第一项是  $\nabla \cdot [(\nabla \phi) \psi_i] = \nabla \cdot [\nabla(\phi \psi_i) - \phi \nabla \psi_i] = \nabla^2(\phi \psi_i) - \phi \nabla^2 \psi_i - \nabla \phi \cdot \nabla \psi_i$ , 最后一项与(4.4.10)括号内第二项消去, 于是(4.4.10)式中轨道部分引起的矩阵元为

$$\frac{iq}{2m} \frac{4\pi}{\sqrt{L(L+1)R\omega}} \left( \frac{2m(L+1)k^L}{(2L+1)!!} \right) \\ \times \left\langle \psi_f \left| \left\{ \frac{p^2}{2m} r^L Y_{LM}^* - r^L Y_{LM}^* \frac{p^2}{2m} + V r^L Y_{LM}^* - r^L Y_{LM}^* V \right\} \right| \psi_i \right\rangle \quad (4.4.13)$$

(含  $V$  的两项加起来为零), 这样可利用定态薛定谔方程:

$$\left( \frac{p^2}{2m} + V \right) | \psi_i \rangle = E_i | \psi_i \rangle \\ \langle \psi_f | \left( \frac{p^2}{2m} + V \right) = \langle \psi_f | E_f \quad (4.4.14)$$

$$E_f - E_i = \hbar\omega = \hbar kc$$

(4.4.13)式简化为

$$i \sqrt{\frac{4\pi}{R\omega}} \sqrt{\frac{L+1}{L}} \frac{k^{L+1}}{(2L+1)!!} \langle \psi_f | q r^L Y_{LM}^* | \psi_i \rangle \quad (4.4.15)$$

称为电多极矩引起的电跃迁矩阵元。(4.4.10)式磁矩部分(含  $\mu$  项)引起的矩阵元中需如下计算式

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \nabla \times \mathbf{L} Y_{LM}^* j_L) = -i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \nabla \times [\mathbf{r} \times \nabla Y_{LM}^* j_L]) \\ = -i \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times [\mathbf{r} \nabla^2 Y_{LM}^* j_L]) \quad (\text{用波动方程(4.3.2)式}) \\ = ik^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot [\nabla \times (\mathbf{r} Y_{LM}^* j_L)] = ik^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot [\nabla (Y_{LM}^* j_L) \times \mathbf{r}] \\ \approx -ik^2 (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{r}) \cdot \frac{\nabla [(kr)^L Y_{LM}^*]}{(2L+1)!!}$$

故得磁矩引起的跃迁矩阵元为

$$+ i \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{R\omega}} \sqrt{\frac{L+1}{L}} \frac{1}{(2L+1)!!} k^{L+1} \\ \times \left\langle \psi_f \left| \frac{iqk\mu}{2m} \frac{1}{L+1} (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) \right| \psi_i \right\rangle \quad (4.4.16)$$

把(4.4.15)与(4.4.16)合并起来, 得电跃迁的总矩阵元为

$$\langle f, 1^{kLM(e)} | H_{\text{int}} | i, 0 \rangle = i \frac{\sqrt{4\pi}}{\sqrt{R\omega}} \sqrt{\frac{L+1}{L}} \frac{1}{(2L+1)!!} k^{L+1} \\ \times \left\langle \psi_f \left| q r^L Y_{LM}^* + \frac{iqk\mu}{2m} \frac{1}{L+1} (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) \right| \psi_i \right\rangle \quad (4.4.17)$$

用(4.4.5)式计算单位时间的跃迁几率,即衰变常数为

$$\frac{dW}{dt} = \lambda_e(LM) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f, 1^{kLM(e)} | H_{\text{int}} | i, 0 \rangle|^2 \frac{dn}{dE_f}$$

以(4.4.6)式代入,即见空腔半径  $R$  不再出现,结果

$$\lambda_e(LM) = \frac{8\pi(L+1)}{L[(2L+1)!!]^2} k^{2L+1} \frac{1}{\hbar} |Q_{LM} + Q'_{LM}|^2 \quad (4.4.18)$$

其中

$$Q_{LM} = \langle \psi_f | qr^L Y_{LM}^* | \psi_i \rangle$$

$$Q'_{LM} = \frac{i\hbar\omega q\mu}{2mc^2} \frac{1}{(L+1)} \langle \psi_f | (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) | \psi_i \rangle \quad (4.4.19)$$

以上是  $H_{\text{int}}$  中  $A_{LM}^{(e)}$  引起的“电多极”跃迁几率。 $H_{\text{int}}$  中另一项  $A_{LM}^{(m)}$  引起的跃迁称为磁多极跃迁,经过类似的计算得到

$$\lambda_m(LM) = \frac{8\pi(L+1)}{L[(2L+1)!!]^2} k^{2L+1} \frac{1}{\hbar} |M_{LM} + M'_{LM}|^2 \quad (4.4.20)$$

其中

$$M_{LM} = \frac{1}{(L+1)} \frac{\hbar}{mc} \langle \psi_f | q\mathbf{L} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) | \psi_i \rangle$$

$$M'_{LM} = \frac{e\hbar}{2mc} \langle \psi_f | \mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) | \psi_i \rangle \quad (4.4.21)$$

通常在实验上测量一条能级因辐射而有确定的平均寿命时,对初态角动量  $J_i$  的  $2J_i + 1$  种可能投影状态是不加限制的,我们也不去区别光子和末态原子(或原子核)的角动量取向,因此理论上应该对初态的磁量子数  $M_i$  求平均,而对末态的磁量子数  $M_f$  和光子的磁量子数  $M = M_i - M_f$  求和,即实验测量的衰变常数应等于

$$\lambda(L) = \sum_{M_i, M_f, M} \frac{\lambda(LM)}{2J_i + 1} \quad (4.4.22)$$

$$= \frac{8\pi(L+1)}{L[(2L+1)!!]^2} \left(\frac{\omega}{c}\right)^{2L+1} \frac{1}{\hbar} B_\lambda(L) \quad (4.4.23)$$

其中脚标  $\lambda = l$  时

$$B_e(L) = \sum_{M_i, M_f, M} \frac{1}{2J_i + 1} |Q_{LM} + Q'_{LM}|^2 \quad (4.4.24)$$

或  $\lambda = m$  时

$$B_m(L) = \sum_{M_i, M_f, M} \frac{1}{2J_i + 1} |M_{LM} + M'_{LM}|^2 \quad (4.4.25)$$

分别称为“电的”或“磁的”第  $L$  级约化跃迁几率。

## § 4.5 电磁跃迁几率的数量级估计和选择规则

### 4.5A 电磁跃迁几率相对大小的定性估计

(1) 对同一 ( $L$ ) 级的电 (或磁) 跃迁, 我们将来比较轨道项的贡献和自旋磁矩项的贡献。因为

$$Q_{LM} = \langle \psi_f | q r^L Y_{LM}^* | \psi_i \rangle \approx q R^L \quad (4.5.1)$$

其中  $R$  为荷电体系的半径大小, 对原子,  $R \sim 10^{-10} \text{m}$ , 对原子核,  $R \sim 10^{-14} \text{m}$ ,

$$\begin{aligned} Q'_{LM} &= \frac{i \hbar \omega q \mu}{2mc^2} \frac{1}{L+1} \langle \psi_f | (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) | \psi_i \rangle \\ &\approx \frac{\hbar \omega q}{mc^2} R^L \end{aligned} \quad (4.5.2)$$

所以它们的相对比值

$$\left| \frac{Q_{LM}}{Q'_{LM}} \right| \approx \frac{mc^2}{\hbar \omega} \quad (4.5.3)$$

对于原子发光的情形,  $mc^2 = m_e c^2 = 0.511 \text{MeV}$ ,  $\hbar \omega \approx 10^{-6} \text{MeV}$  故

$\left| \frac{Q_{LM}}{Q'_{LM}} \right| \approx 10^6$ ; 对于原子核的  $\gamma$  辐射,  $mc^2 = m_p c^2 \sim 10^3 \text{MeV}$  而  $\hbar \omega \approx$

$1 \text{MeV}$ , 故  $\left| \frac{Q_{LM}}{Q'_{LM}} \right| \approx 10^3$ . 由此可见, 我们可一般地在电  $L$  级跃迁中只考虑

$Q_{LM}$  的贡献而忽略  $Q'_{LM}$ .

对于磁 ( $L$  级) 跃迁, 我们可类似地估计

$$M_{LM} \approx \frac{q \hbar}{mc} R^{L-1}, \quad M'_{LM} \approx \frac{q \hbar}{mc} R^{L-1} \quad (4.5.4)$$

所以  $M_{LM}$  与  $M'_{LM}$  具有相同的数量级. 即在原子核中, 纯粹中子的磁跃迁也应当和质子的磁跃迁有差不多的贡献.

(2) 对同一种电 (或磁) 跃迁, 当  $L$  每升高一级, 其强度降低的比例. 此比例因子可估计为

$$\frac{\lambda_e(L+1)}{\lambda_e(L)} \sim \frac{\lambda_m(L+1)}{\lambda_m(L)} \sim (kR)^2 = \left(\frac{2\pi R}{\lambda}\right)^2 \quad (4.5.5)$$

对于原子放出可见光时,  $(kR)^2 \approx (10^{-3})^2 \approx 10^{-6}$ , 对于原子核放 1MeV 的  $\gamma$  光子时,  $(kR)^2 \approx \left(\frac{1}{20}\right)^2$ .

(3) 对同一级 ( $L$ ) 的“磁”跃迁与“电”跃迁的强度之比. 这可由 (4.5.1) 与 (4.5.4) 两式的比值看出为

$$\frac{\lambda_m(L)}{\lambda_e(L)} \sim \left(\frac{\hbar}{mcR}\right)^2 \sim \left(\frac{v}{c}\right)^2 \quad (4.5.6)$$

其中  $v$  是荷电粒子在体系中的运动速度. 我们知道, 在玻尔模型中, 一个类氢原子 (电荷数为  $Z$ ) 的  $1s$  电子在轨道上的运动速度最大, 达到  $v \sim \frac{Zc}{137}$ . 在原子核中可以估计核子的运动速度约为  $\frac{c}{10}$  左右. 所以粗略地说, 同级的电跃迁比磁跃迁其强度比约从 100 倍 (原子核的情形) 到 10 000 倍 (原子的外层电子跃迁).

#### 4.5B 电磁跃迁的选择规则

设荷电体系初态的宇称和角动量为  $\Pi_i$  和  $J_i$ , 末态的为  $\Pi_f$  和  $J_f$ , 根据 (4.4.18) 和 (4.4.20) 式, 为了讨论选择规则, 可略去系数 (这在上面讨论强度时是十分重要的) 而写出:

$$\begin{aligned} \lambda_e(L) &\propto |\langle f | r^L Y_{LM}^* | i \rangle|^2 \\ \lambda_m(L) &\propto |\langle f | \mathbf{L} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) | i \rangle + \langle f | \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) | i \rangle|^2 \end{aligned} \quad (4.5.7)$$

##### 1. 角动量的选择规则

注意  $Y_{LM}$  是  $L$  阶张量算符 (见第三章 § 3.6), 而因为  $r^L$  在转动下是不变的, 所以  $r^L Y_{LM}$  仍是  $L$  阶张量. 类似地, 可以认为  $\mathbf{L} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*)$  或  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*)$  也仍然是  $L$  阶张量, 这是因为  $\mathbf{L}$ ,  $\nabla$  与  $\boldsymbol{\sigma}$  三者都分别是矢量, 它们中两者之间的标积是转动下的不变量. 根据 Wigner-Eckart 定理, 对于任何一个  $L$  阶张量  $T_{LM}$  在两个角动量本征态间的矩阵元必可写成

$$\langle J_f M_f | T_{LM} | J_i M_i \rangle = C_{J_f, M_f; L, M}^{J_i, M_i} \langle J_f || T_L || J_i \rangle \quad (4.5.8)$$

其中不可约矩阵元  $\langle J_f || T_L || J_i \rangle$  前面的 CG 系数决定了选择规则 (见 § 3.6). 根据 CG 系数不为零的条件

$$|J_i - J_f| \leq L \leq |J_i + J_f| \quad (4.5.9)$$



可见,跃迁中所放出的光子角动量  $L$  只允许在上式限定的范围之内.

### 2. 宇称的选择规则

记空间反演( $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ , 即  $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \phi \rightarrow \pi + \phi$ )算符为  $\hat{P}$ , 对于电  $L$  级跃迁,我们在矩阵元中插入两个  $\hat{P}^+ \hat{P} = 1$  的算符:

$$\begin{aligned} \langle f | r^L Y_{LM}^* | i \rangle &= \langle f | \hat{P}^+ \hat{P} r^L Y_{LM}^* \hat{P}^+ \hat{P} | i \rangle \\ &= \Pi_f \Pi_i (-1)^L \langle f | r^L Y_{LM}^* | i \rangle \end{aligned} \quad (4.5.10)$$

由此可见,仅当

$$\Pi_i \Pi_f = (-1)^L \quad (4.5.11)$$

时跃迁矩阵元才不为零,电  $L$  级跃迁才能发生.

对于磁  $L$  级跃迁,我们有

$$\begin{aligned} &\langle f | \mathbf{L} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) | i \rangle + \langle f | \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) | i \rangle \\ &= \langle f | \hat{P}^+ \hat{P} \mathbf{L} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) \hat{P}^+ \hat{P} | i \rangle + \langle f | \hat{P}^+ \hat{P} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) \hat{P}^+ \hat{P} | i \rangle \\ &= \Pi_f \Pi_i (-1)^{L-1} \{ \langle f | \mathbf{L} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) | i \rangle + \langle f | \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla (r^L Y_{LM}^*) | i \rangle \} \end{aligned} \quad (4.5.12)$$

最后一步利用了  $\mathbf{L} \cdot \nabla$  (或  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla$ ) 是赝标量,即在  $\hat{P}$  算符作用下会改变一个符号的性质. 由此可见,仅当

$$\Pi_i \Pi_f = (-1)^{L-1} \quad (4.5.13)$$

时,磁  $L$  级跃迁才能发生.

### 3. 电磁跃迁选择规则小结

上面两小节的结果可以归纳为表 4.5.1.

表 4.5.1 电磁跃迁的选择规则

| $ J_i - J_f  \leq L \leq J_i + J_f$ |                                       |
|-------------------------------------|---------------------------------------|
| 电多极(EL)<br>$\Pi_i \Pi_f = (-1)^L$   | 磁多极(ML)<br>$\Pi_i \Pi_f = (-1)^{L+1}$ |

对于确定的初态和末态,可以发生不止一种跃迁,只要该跃迁满足(4.5.9)式和(4.5.11)(或(4.5.13))式就可以了.但是根据前面跃迁几率的讨论,各级跃迁几率随  $L$  增大而迅速减小,所以角动量改变  $\Delta J$  很大的跃迁,实际上不能发生或只能以极小的几率发生,常被叫做禁戒跃迁.有一个特例是从  $J_i = 0$  到  $J_f = 0$ ,按选择规则只能有  $L = 0$ ,表示这种跃迁对单光子( $L$  从 1 开始)是严格禁戒的,这时只可能通过放两个光子或通过无辐射的跃迁如原子核的  $0^+ \rightarrow 0^+$  内转换过程来实现态的跃迁(见下节).

另外,由于宇称选择规则的限制,同一类(电或磁)的多极级  $L$  要相隔 2 才能混合,例如  $E1$  只可能与  $E3$  在同样的初末态跃迁中出现,但  $E1$  不可能与  $E2$  跃迁同时出现;另一方面,同一( $L$ )级的电跃迁和磁跃迁也不可能同时发生,要相混时  $L$  必须相差 1. 例如  $M1$  不可能与  $E1$  相混,但  $M1$  与  $E2$  却常常混在一起,其原因是这两者的跃迁强度是比较接近的,如表 4.5.2 所示.

表 4.5.2 确定初、末态间的电磁跃迁 ( $\Delta J = |J_i - J_f|$ )

| $\Pi_i \Pi_f \backslash \Delta J$ | 0 或 1    | 2        | 3        | 4        | 5        |
|-----------------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| +                                 | $M1(E2)$ | $E2$     | $M3(E4)$ | $E4$     | $M5(E6)$ |
| -                                 | $E1$     | $M2(E3)$ | $E3$     | $M4(E5)$ | $E5$     |

#### 4. 原子的偶极辐射

从上节的定性估计可以看到,在原子发可见光(或紫外线)的范围, $E1$  跃迁几率远远凌驾于其他跃迁之上, $L$  较大的高级跃迁基本上都是禁戒跃迁,在通常实验室条件下很难被观察到.

让我们考虑原子中单电子的  $E1$  跃迁,写出它在单位时间内的跃迁几率:

$$\lambda_e(1) = \lambda(E1) = \frac{16\pi}{9} (k)^3 \frac{1}{\hbar} B_e(1)$$

$$B_e(1) \equiv B(E1) = \sum_{M_i, M_f} \frac{1}{2J_i + 1} |\langle J_f M_f | q r Y_{1M}(\theta, \phi) | J_i M_i \rangle|^2 \quad (4.5.14)$$

我们可以定性地估计

$$\begin{aligned} B(E1) &\sim e^2 \langle r \rangle^2 \sim e^2 (10^{-10} \text{ m})^2 \\ \lambda(E1) &\sim \frac{16\pi}{9} \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^3 \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right) c (10^{-10} \text{ m})^2 \\ &\geq \frac{16\pi}{9} (10^{-7} \text{ m})^{-3} \frac{1}{137} (3 \times 10^8 \text{ m/s}) (10^{-20} \text{ m}^2) \\ &\sim 1.2 \times 10^8 \text{ s}^{-1} \end{aligned} \quad (4.5.15)$$

(其中已取可见光波长  $\lambda \sim 6 \times 10^{-7} \text{ m}$ )

这就意味着原子  $E1$  跃迁的典型平均寿命为

$$\tau = \frac{1}{\lambda} \lesssim 10^{-8} \text{ s} \quad (4.5.16)$$

让我们看一下氢原子基态  $1s_{\frac{1}{2}}$  附近的能级图(图 4.5.1).

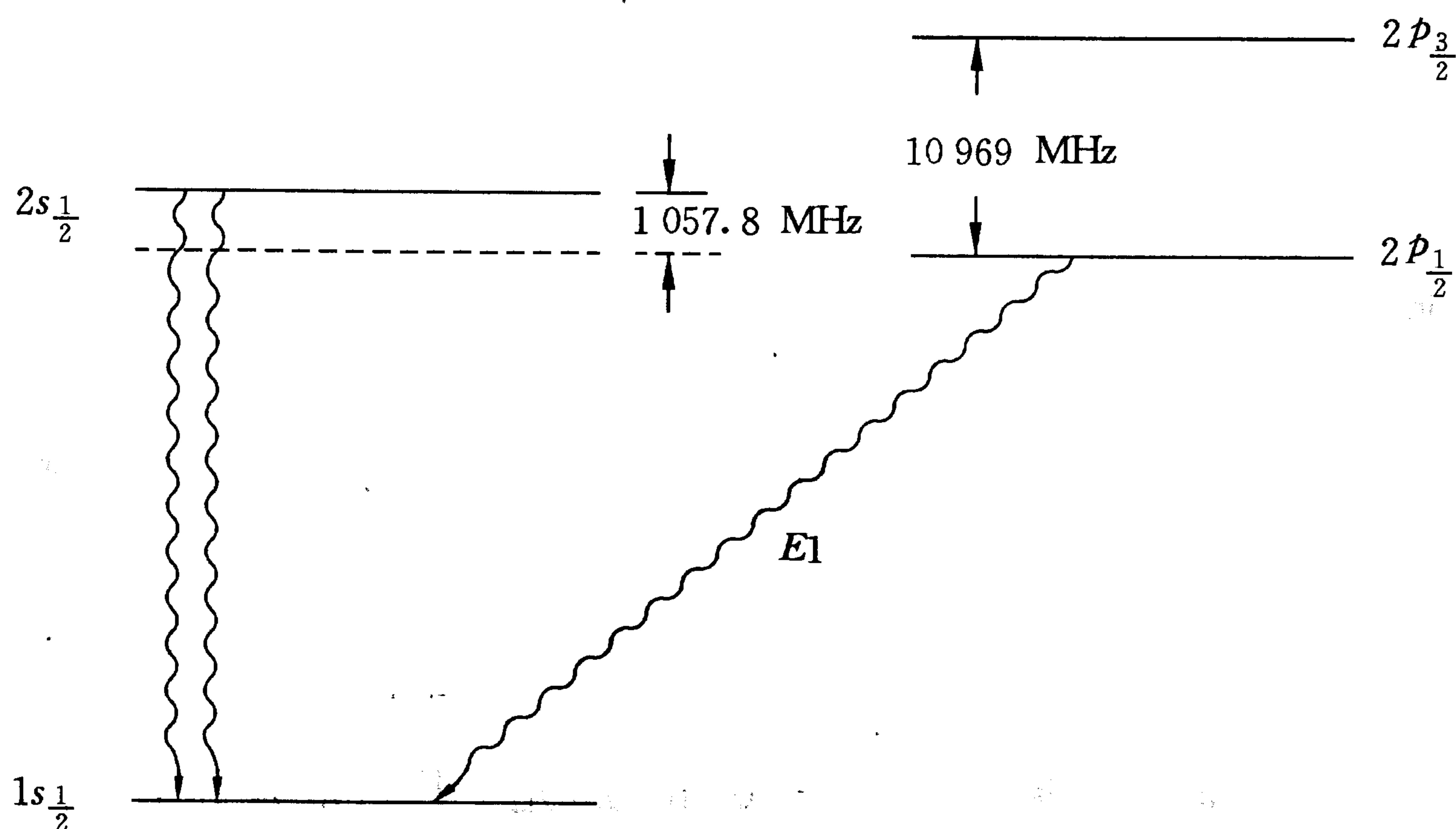


图 4.5.1 氢原子基态附近能级图

(1MHz =  $4.13 \times 10^{-9}$  eV)

图 4.5.1 上显示  $2p$  态因电子自旋与轨道耦合而引起的“精细结构”分裂： $2p_{\frac{3}{2}}$  态比  $2p_{\frac{1}{2}}$  态高出一些，用(微波)频率表示为 10 969MHz. 从  $2p_{\frac{1}{2}}$  (或  $2p_{\frac{3}{2}}$ ) 态到  $1s_{\frac{1}{2}}$  基态的自发跃迁是典型的  $E1$  跃迁，( $\Delta J = 0$ ,  $\Pi_i \Pi_f = -1$ )，放出波长  $\lambda = 121.5\text{nm}$  的紫外线光子(含谱线的“精细结构”，实际还有“超精细结构”，见 § 9.6)，能量 10.2eV(叫做 Lyman  $\alpha$  线)，其平均寿命实测为  $1.6 \times 10^{-9}$  秒，正符合(4.5.16)式的估计(习题4.5). 注意，在玻尔理论中(甚至在相对论性的 Dirac 方程理论中)， $2s_{\frac{1}{2}}$  与  $2p_{\frac{1}{2}}$  态在能量上应该是简并的，实际上前者要高出一些，本来它们两者之间的跃迁也符合  $E1$  跃迁的选择规则，但因能量差实在太小，辐射波长达到  $\lambda \sim 30\text{cm}$ ，落在微波区，使  $kR \ll 1$ ，从而使自发辐射几率  $\lambda_e(E1)$  小到测不出来(平均寿命长达  $5 \times 10^8$  秒). 实验上，1947 年后，Lamb 等用微波共振吸收的技术精密地测出  $2s_{\frac{1}{2}}$  比  $2p_{\frac{1}{2}}$  态高出(以微波频率计量)约 1 057MHz，被称为 Lamb 移位(Shift). 关于这一微小能量移动在理论上的解释，我们将在第九章讨论.

这里我们还对  $2s_{\frac{1}{2}}$  到  $1s_{\frac{1}{2}}$  态的跃迁感兴趣，虽然它们的能量差达到 10.2eV，却测不到单光子辐射. 原因如下：从  $J_i = \frac{1}{2} \rightarrow J_f = \frac{1}{2}$  ( $\Delta J = 0$ )，又  $\Pi_i \Pi_f = +1$ ，角动量和宇称都不变，虽然在形式上符合  $M1$  跃迁的选择规则，但跃迁矩阵元实际上等于零. 为此要仔细看  $M1$  跃迁矩阵元：

$$\langle 1s_{\frac{1}{2}} | \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla (rY_{1M}^*) | 2s_{\frac{1}{2}} \rangle \sim \langle 1s \uparrow | \sigma_+ | 2s \downarrow \rangle \sim \langle 1s | 2s \rangle = 0$$

(式中  $\sigma_+$  使自旋反向), 最后一步利用了  $1s$  与  $2s$  态波函数的正交性. 因此  $2s_{\frac{1}{2}}$  到  $1s_{\frac{1}{2}}$  态的单光子跃迁是严格禁戒的, 实际上,  $2s_{\frac{1}{2}}$  态只能自发地通过双光子跃迁才能回到基态, 这也是一种几率很小的禁戒跃迁, 其寿命长达  $1/8$  秒, 从而使  $2s_{\frac{1}{2}}$  态成为一个“亚稳态”(习题 4.7, 4.8).

### 5. 原子核的 $\gamma$ 跃迁

原子核处于激发态时放出的  $\gamma$  辐射, 其波长与原子核半径之比约  $10 \sim 100$ , 比原子放出可见光的情形 ( $\sim 10^3$ ) 要小得多(见(4.5.5)式后的讨论), 即  $(kR)^2$  要大得多, 所以高多极级的跃迁是比较重要的, 让我们看几个例子, 见图 4.5.2.

(1) 从  $1^- \rightarrow 0^+$  的跃迁, 按表 4.5.2 的选择规则, 只可能是纯  $E1$  跃迁.

(2) 这是一些强形变的偶-偶核(中子数  $N$  和质子数  $Z$  都是偶数)的低能转动激发态间的跃迁, 从  $2^+ \rightarrow 0^+$  的  $\gamma_1$  光子只可能是纯  $E2$  跃迁, 从  $4^+ \rightarrow 2^+$  的  $\gamma_2$  光子既可能是  $E2$ , 也可能是  $M3$  跃迁, 不过  $M3$  在强度上比  $E2$  要弱  $10^3$  倍左右, 故实际上  $\gamma_2$  也可当作纯  $E2$  处理.

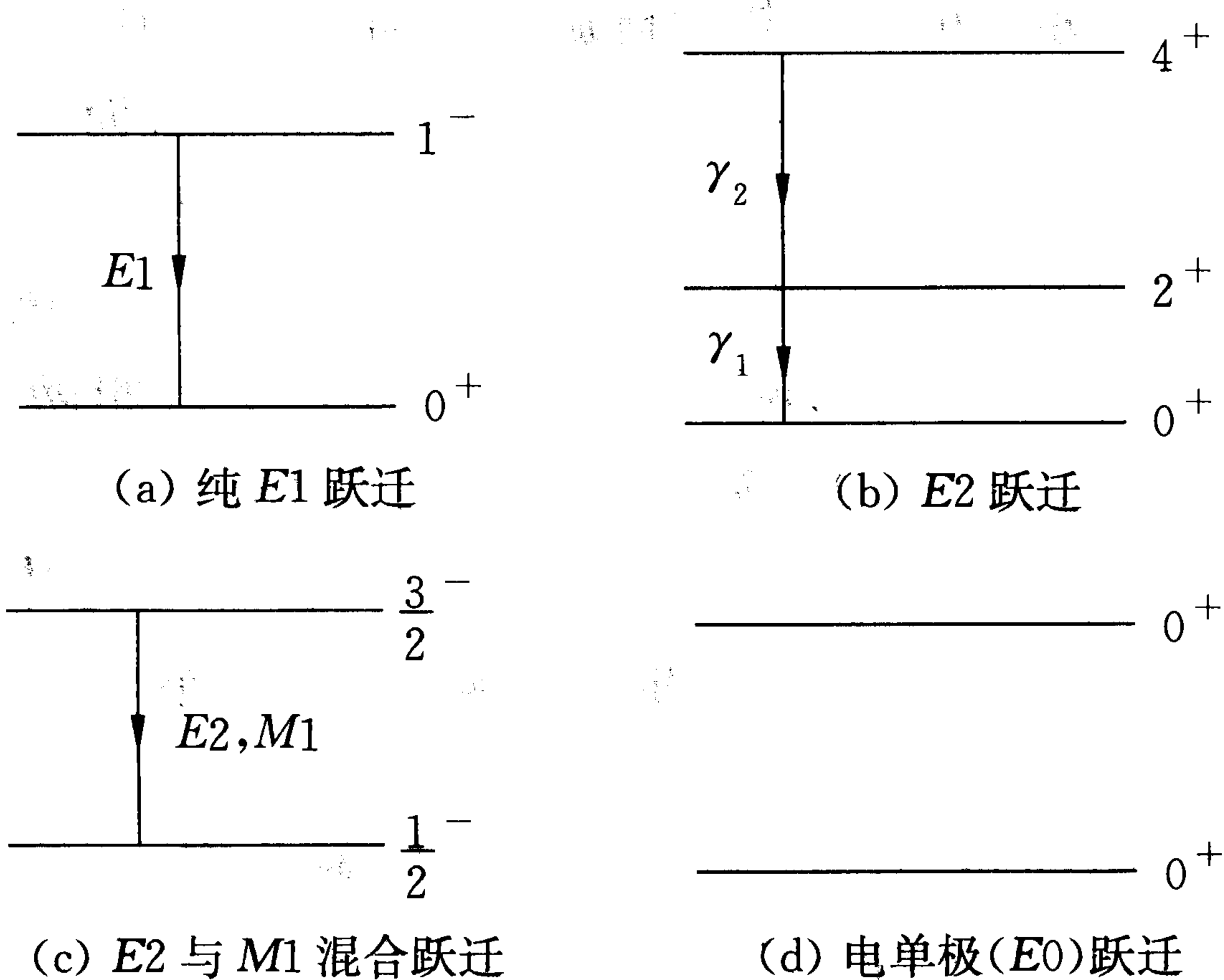


图 4.5.2 原子核的若干跃迁

(3) 考虑奇  $A$  核, 总角动量为半整数的情形, 则从  $\left(\frac{3}{2}\right)^-$  到  $\left(\frac{1}{2}\right)^-$  的跃迁既可能为  $M1$ , 也可能为  $E2$ , 且两者的强度差不多.

(4) 宇称不变的  $0 \rightarrow 0$  跃迁不可能通过放一个光子而实现, 即  $0^+ \rightarrow 0^+$  的单光子辐射跃迁是严格禁戒的. 但是这种跃迁可以通过无辐射的方式实现, 就是所谓“内转换”的过程. 具体又分两种: 一种是  $0^+$  激发态的能量直接转移给核外的  $K$ (或  $L$ ) 壳层电子, 使后者脱离原子(注意, 不能看成是先放出  $\gamma$  光子再打出这个电子的“光电效应”); 另一种是当激发能大于

$2m_e c^2 = 1.02\text{MeV}$  时,  $0^+$  激发态的能量可以在核场内产生  $e^+ e^-$  电子对, 并使它们飞出原子. 例如  $^{16}\text{O}$  核的第一激发态能量高达  $6\text{MeV}$ , 且和基态一样, 都是  $0^+$  态, 就会发生这种形成电子对的内转换过程. 这种无辐射跃迁有时也叫做电单极 ( $E0$ ) 跃迁.

## § 4.6 Casimir 效应

### 4.6A 电磁场零点能与 Casimir 能量

电磁场量子化后有一个令人感到奇怪的特点, 就是存在着真空中的“零点能”, 如(4.2.22)式所示:

$$E_{\text{vac}} = \sum_{k, \alpha} \frac{1}{2} \hbar \omega_k$$

由于实验上从未观察到过“半个光子 ( $\frac{1}{2} \hbar \omega$ )”, 在通常的量子场论计算中都把这一真空能量当作不可观察量而采用算符的正规排列方法略去了它. 可是在 1948 年, Casimir 指出这一能量还是可能有其观察效应. 为此考虑真空中两块边长为  $L$  的正方形金属板(见图 4.6.1), 当它们平行放置而相距为  $a$  时, 会产生一种微弱的吸引力, 其数值等于

$$F = -\frac{\partial}{\partial a} E_c = -\frac{\pi^2 \hbar c L^2}{240 a^4} \quad (4.6.1)$$

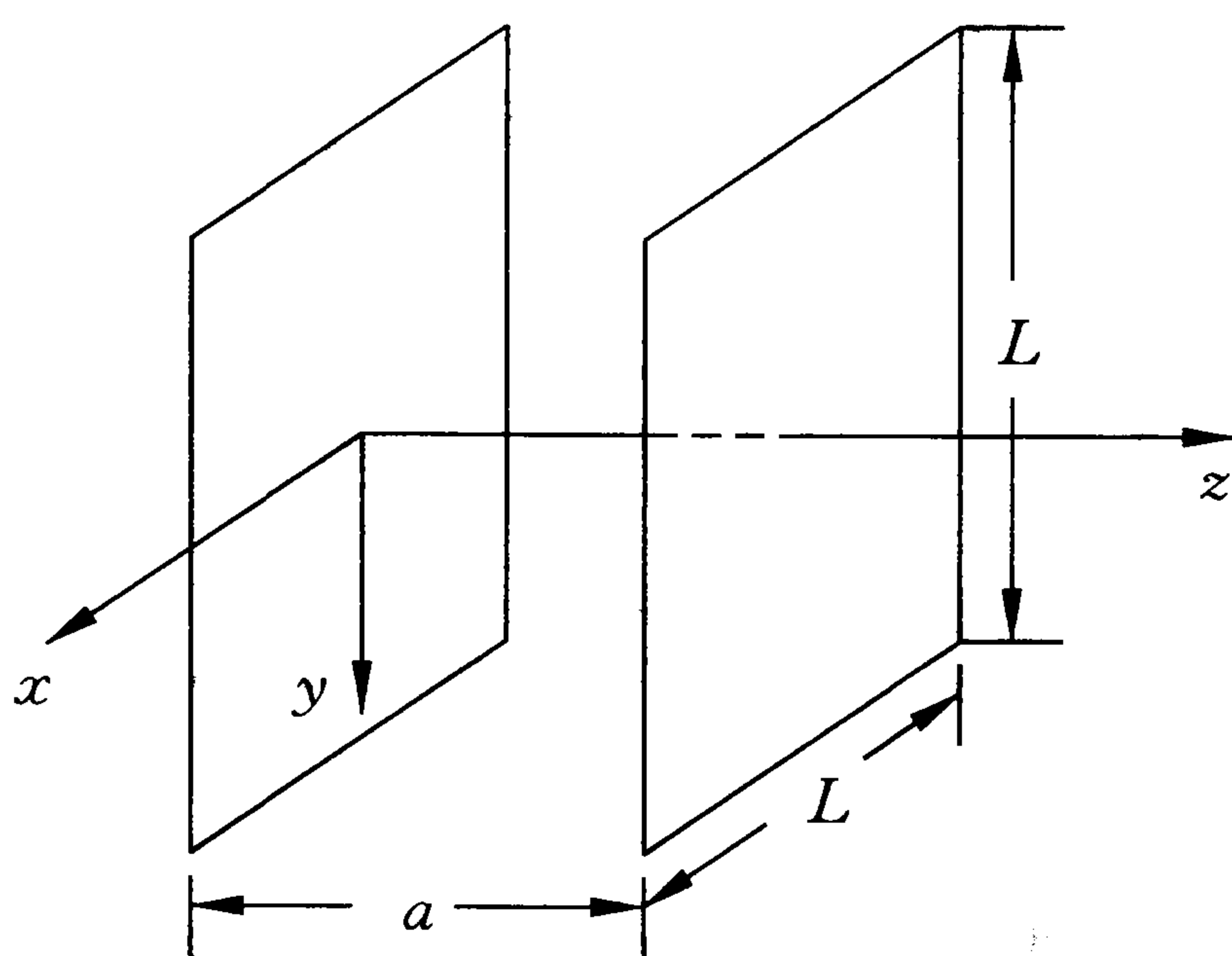


图 4.6.1 两平行板间的 Casimir 效应

其中  $E_c$  就被称为 Casimir 能量, 它等于金属板间真空的零点能与两板不存在时的零点能之差

$$\begin{aligned}
 E_c &= \sum_{k_\alpha} \frac{1}{2} \hbar \omega_k (\text{板存在时}) - \sum_{k', \alpha'} \frac{1}{2} \hbar \omega_{k'} (\text{无板时}) \\
 &= \frac{\hbar c}{2} L^2 \int \frac{d^2 k_{//}}{(2\pi)^2} \left\{ |k_{//}| + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left( k_{//}^2 + \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right. \\
 &\quad \left. - 2 \int_0^{\infty} dn \left( k_{//}^2 + \frac{n^2 \pi^2}{a^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right\} . \tag{4.6.2}
 \end{aligned}$$

这里我们要注意几点:

- (1) 在有板和无板两种情况下, 平行于板面的波矢  $k_{//}$  是一样的;
- (2) 垂直于板面的波数 ( $k_{\perp}$ ) 在有板和无板情况下分别是分立的 ( $n$  取离散的正整数值) 和连续的 ( $n$  连续可变);
- (3) 对每一确定的波数, 电磁波的驻波存在两种横极化模式, 惟独对  $n=0$  即  $k_{\perp}=0$  的分立模式, 它只有一种横极化 (垂直于金属板面).

显然, (4.6.2) 式中求和与积分分别都是发散的. 常用的计算方法是引入一个光滑的截断函数  $f(k)$ <sup>[6]</sup>, 使求和与积分各自变为有限, 取差值后的结果可证明与  $f(k)$  的引入无关, 从而给出 (4.6.1) 式的结果, 这种计算方法类似于量子场论中常用的正规化手续. Casimir 效应已由实验证明, 对它的理论研究和各方面应用有大量的文献<sup>[13]</sup>, 下面我们的目的是探讨一种严格的计算方法, 根据是 (4.6.2) 式作为一个和式与积分之差, 可以在复变函数理论中找到一个直接计算的公式<sup>[7,8]</sup>.

#### 4.6B Plana 求和公式

**定理** 设函数  $f(z)$  当  $\text{Re } z > 0$  为解析, 则

$$\begin{aligned}
 \sum_{n=1}^{\infty} f(n) + \frac{1}{2} f(0) - \int_0^{\infty} f(x) dx \\
 = \int_{0(C_2)}^{i\infty} \frac{f(z) dz}{\exp(-2\pi iz) - 1} - \int_{-i\infty(C_1)}^0 \frac{f(z) dz}{\exp(2\pi iz) - 1}
 \end{aligned} \tag{4.6.3}$$

其中  $C_1$  和  $C_2$  是复平面 (黎曼面上的一叶) 上沿虚轴从  $(-i\infty)$  到 0 和从 0 到  $(i\infty)$  的积分路线. 当复平面上沿  $C_1$  和  $C_2$  积分时不遇到割线, 即  $f(z)$  为单值函数时, 可直接令积分中的  $z = it$ , 便有公式

$$\sum_{n=1}^{\infty} f(n) + \frac{1}{2} f(0) = \int_0^{\infty} f(x) dx + i \int_0^{\infty} \frac{f(it) - f(-it)}{\exp(2\pi t) - 1} dt \tag{4.6.4}$$

在文献中曾用过这个公式, 但为计算这里的 Casimir 能量(4.6.2)式, 必须回到原始的公式(4.6.3), 因为现在函数  $f(z)$  是一个多值函数\*.

#### 4.6C 三维空间电磁场的 Casimir 效应

让我们把(4.6.2)式改写一下, 并简记  $|k_{//}| = k$ , 则

$$\begin{aligned}
 E_c &= \hbar c \frac{L^2}{2a} \int_0^\infty k dk \left\{ \frac{1}{2} \left( \frac{ka}{\pi} \right) + \sum_{n=1}^\infty \left[ n^2 + \left( \frac{ka}{\pi} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right. \\
 &\quad \left. - \int_0^\infty dn \sqrt{n^2 + \left( \frac{ka}{\pi} \right)^2} \right\} \\
 &= \hbar c \frac{L^2}{2a} \int_0^\infty k dk \left\{ \frac{1}{2} f(0) + \sum_{n=1}^\infty f(n) - \int_0^\infty dn f(n) \right\} \quad (4.6.5)
 \end{aligned}$$

其中

$$f(n) = \sqrt{n^2 + \left( \frac{ka}{\pi} \right)^2} \quad (4.6.6)$$

有趣的是(4.6.5)式括号内恰好具有(4.6.3)式左端的形状, 如改记变量  $n = z$ ,  $\frac{ka}{\pi} = \mu$ , 则有

$$f(z) = \sqrt{(z + \mu i)(z - \mu i)} \quad (4.6.7)$$

于是我们可以在  $(-\mu i)$  与  $(\mu i)$  之间连一割线. 重要的是确定  $f(z)$  在割线两边的值, 记  $z + \mu i = \rho_1 \exp(i\theta_1)$ ,  $z - \mu i = \rho_2 \exp(i\theta_2)$ , 并规定辐角  $\theta_1$  和  $\theta_2$  都从割线左岸算起,  $\theta_1$  反时针量度为正,  $\theta_2$  顺时针量度为负, 如图4.6.2所示. 这样  $f(z)$  成为在(有割线的)黎曼面一叶上定义的单值函数.

当辐角规定之后, 取积分线路  $C_1$  和  $C_2$  沿割线右岸经过, 变量数值便可记为  $it$  ( $t$  为实数), 即

\* 原始文献 Lindelöf E. *Le Calcul des Residues Paris*: Gauthier-Villars, 1905, Chap. III 中曾要求函数  $f(z)$  当  $z$  趋于正实轴无限远处时趋于零, 但我们在物理上多次应用中发现, 这一条件不是必要的, 此处对 Casimir 效应的计算就有实验的证明, 虽然  $f(z)$  如(4.6.6)式所示, 不满足  $f(n) \rightarrow 0 (n \rightarrow \infty)$  的条件, 而且物理上最有趣的问题正是  $f(n)$  在  $n \rightarrow \infty$  处发散的情况. (也许原文的条件只是充分条件, 此问题值得进一步研究)

$$f(z) = \begin{cases} \sqrt{\rho_1 \rho_2} e^{-\frac{i\pi}{2}} = -i\sqrt{(\mu-t)(-\mu-t)}, & (-\infty < t < -\mu) \\ \sqrt{\rho_1 \rho_2} = \sqrt{(\mu+t)(\mu-t)}, & (-\mu < t < 0) \\ \sqrt{\rho_1 \rho_2} = \sqrt{(\mu+t)(\mu-t)}, & (0 < t < \mu) \\ \sqrt{\rho_1 \rho_2} e^{\frac{i\pi}{2}} = i\sqrt{(\mu+t)(t-\mu)}, & (\mu < t < \infty) \end{cases} \quad (4.6.8)$$

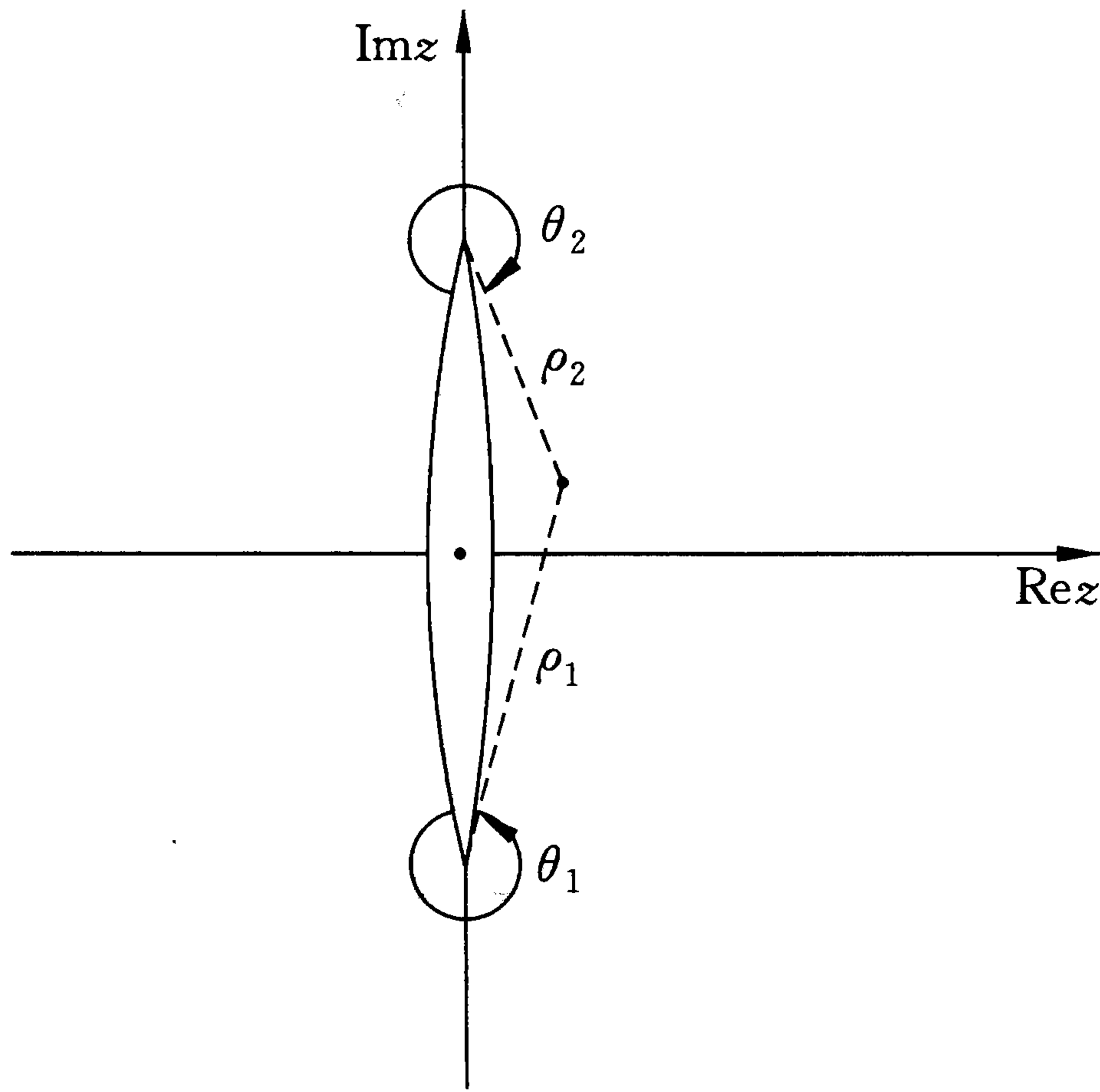


图 4.6.2 复平面上割线与辐角的规定

于是(4.6.3)式变成

$$\sum_{n=1}^{\infty} f(n) + \frac{1}{2} f(0) - \int_0^{\infty} f(n) dn = -2 \int_{\mu}^{\infty} dt \frac{\sqrt{(\mu+t)(t-\mu)}}{\exp(2\pi t) - 1} \quad (4.6.9)$$

$(f(n) = \sqrt{n^2 + \mu^2})$ , 而

$$\begin{aligned} E_c &= -\frac{\hbar c L^2}{a} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \int_0^{\infty} \mu d\mu \int_{\mu}^{\infty} dt \frac{\sqrt{t^2 - \mu^2}}{\exp(2\pi t) - 1} \\ &= -\hbar c \frac{L^2}{a} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \frac{1}{3} \int_0^{\infty} dt \frac{t^3}{\exp(2\pi t) - 1} \\ &= -\hbar c \frac{L^2}{a} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \frac{1}{3} \frac{1}{(2\pi)^4} \Gamma(4) \zeta(4) \end{aligned} \quad (4.6.10)$$

用公式

$$\int_0^{\infty} dx \frac{x^{n-1}}{e^x - 1} = \Gamma(n) \zeta(n) \quad (4.6.11)$$



其中  $\Gamma(4) = 3!$ ,  $\zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$  [11]. 最后便有

$$E_c = -\hbar c \frac{\pi^2 L^2}{720 a^3} \quad (4.6.12)$$

这正是(4.6.1)式的结果,这里计算方法的好处是利用了数学中一条严格的定理,因而不需要引入任何截断函数或截断参数.

有兴趣的读者可参看文献[8].关于 Plana 求和公式的应用,还可见文献[9].

## 习 题

4.1 (1) 证明真空中电磁场的 Maxwell 方程可以写成如下的“哈密顿程式”:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad (a)$$

$$\text{其中 } \psi = \begin{pmatrix} E_x + iB_x \\ E_y + iB_y \\ E_z + iB_z \end{pmatrix}, \hat{H} = c \left( \hat{S} / \hbar \right) \cdot \hat{p}, \hat{p} = -i\hbar \nabla$$

而“光子”的自旋角动量算符  $\hat{S}$  正是在(3.2.26)和(3.2.28)式表示的  $3 \times 3$  矩阵;

(2) 用海森堡运动方程证明总角动量  $\hat{J} = \hat{S} + \hat{L}$  ( $\hat{L} = \mathbf{r} \times \hat{p}$ ) 是守恒的;

(3) 证明这个 Maxwell 方程(a)是宇称守恒的,即它在空间反演  $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$  ( $t \rightarrow t$ ) 下在本质上是 invariant 的.

4.2 试从一荷电量为  $q$  的粒子在外矢势  $\mathbf{A}$  场中的薛定谔方程导出其连续性方程,并证明电流密度  $\mathbf{j}$  在规范变换下是不变的.

4.3 假定一体系具有哈密顿量  $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(x)$  及相应之定态  $|n\rangle$ :  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ ,  $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$ , 试证明“求和规则(Sum rule)”:

$$\sum_n f_{nm} \equiv \sum_n \frac{2\mu\omega_{nm}}{\hbar} |\langle n | x | m \rangle|^2 = 1$$

其中  $f_{nm}$  称为  $E1$  跃迁中的“振子强度”.

4.4 试证一电子在原子态  $|\psi_i\rangle$  与  $|\psi_f\rangle$  中具有哈密顿量为  $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$  时,如下关系式成立:

$$\langle \psi_f | \hat{p} | \psi_i \rangle = \frac{m}{i\hbar} (E_i - E_f) \langle \psi_f | \mathbf{x} | \psi_i \rangle$$

其中  $H|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle$ ,  $H|\psi_f\rangle = E_f|\psi_f\rangle$ .

4.5 在长波近似 [ $\exp(ik \cdot x) \sim 1$ ] 下, 讨论原子自发辐射的  $E1$  跃迁:

(1) 证明跃迁几率等于  $\Gamma_{fi} = \frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3} |\langle\psi_f|\mathbf{x}|\psi_i\rangle|^2$ ;

(2) 由此估计氢原子  $2p$  态衰变到  $1s$  态的平均寿命.

4.6 试证明: 氢原子基态在线性偏振光照射下, 其光电效应的截面在平面波近似和长波近似下可以表示为:

$$\sigma(\omega) = \frac{8\pi\alpha}{3} \frac{\omega m p}{\hbar^2} \left(\frac{1}{a}\right)^3 \left[ \frac{12ka^5}{(1+k^2a^2)^3} \right]^2$$

$$\left( \frac{p^2}{2m} = \hbar\omega - \frac{1}{2}\alpha^2 mc^2, a = \frac{\hbar^2}{me^2}, \alpha = \frac{e^2}{\hbar c}, \text{见习题 2.9.} \right)$$

4.7 试证明氢原子的  $2s$  态通过单光子辐射 ( $H_{\text{int}}^{(1)} = \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ ) 而跃迁到  $1s$  态是严格禁戒的.

\* 4.8 试估计氢原子  $2s$  态的自发辐射平均寿命:

(1) 先估计从  $|2s\rangle \rightarrow |2p\rangle$  的  $E1$  (单光子) 跃迁几率  $\Gamma^{(1)}$ ;

(2)  $2s$  态可以通过双光子辐射 (由  $H_{\text{int}}^{(2)} = \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}$ ) 而跃迁到  $1s$  态, 试估计

其相应的几率  $\Gamma^{(2)} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | H_{\text{int}}^{(2)} | i \rangle|^2 \frac{dN_f}{dE_f}$  (用长波近似).

\* 4.9 试证明光被自由电子散射的截面在一阶微扰论下可以归结为  $H_{\text{int}}^{(2)} = \frac{e^2}{2mc^2} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}$  的贡献, 并表示为 Thomson 截面:

$$\sigma_{\text{sc}} = \frac{8}{3} \pi r_0^2, r_0 = \frac{e^2}{mc^2} \text{ 称为电子的经典半径.}$$

4.10 检验方程 (4.3.47)'.

4.11 设有两准稳恒态  $n$  和  $m$ , 可以用如下波函数描写:

$$\psi_n(\mathbf{x}, t) = \psi_n(\mathbf{x}) \exp\left(-iE_n t/\hbar - \frac{1}{2}\lambda_n t\right), (t \geq 0, \lambda_n = 1/\tau_n)$$

$$\psi_m(\mathbf{x}, t) = \psi_m(\mathbf{x}) \exp\left(-iE_m t/\hbar - \frac{1}{2}\lambda_m t\right), (t \geq 0, \lambda_m = 1/\tau_m)$$

则当此两态间发生自发辐射或共振吸收时, 试证明其辐射强度对角频率  $\omega$  的分布正比于:

$$R(\omega) = \frac{1}{(\omega - \omega_{nm})^2 + \frac{1}{4}(\lambda_n + \lambda_m)^2}, [\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar]$$

## 参 考 文 献

[1] J. J. Sakurai. *Advanced Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing

Company, 1978

- [ 2 ] B. R. Holstein. *Topics in Advanced Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, 1992
- [ 3 ] A. S. Davydov. *Quantum Mechanics* (2nd Ed. ). Pergamon Press, 1965
- [ 4 ] A. R. Edmonds. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. Princeton University Press, 1957
- [ 5 ] H. A. Bethe and R. W. Jackiw. *Intermediate Quantum Mechanics* (3rd Ed. ). Benjamin Cummings Publishing Company, 1986
- [ 6 ] C. Itzykson, J-B Zuber. *Quantum Field Theory*. McGraw-Hill, 1980(杜东生, 沈齐兴, 徐德之, 黄涛译. 量子场论. 北京:科学出版社,1986)
- [ 7 ] 倪光炯, 张敏, 宫学文. 高能物理与核物理, **15**(8), 695(1991)
- [ 8 ] 倪光炯, 陈苏卿. 莱文森定理, 反常和真空相变. 上海:上海科学技术出版社, 1985
- [ 9 ] Ni Guang-jiong, Chen Su-qing. *Acta Physica Sinica* (Overseas Edition), **7**(6), 401(1998)
- [10] 徐在新. 高等量子力学. 上海:华东师范大学出版社,1994
- [11] 林文隆. 物理(中国台湾), **23** (2), 372 (2001)
- [12] R. N. Zitter and R. C. Hilborn. *Am. J. Phys.* , **55**, 522 (1987)
- [13] A. Lambrecht. *Physics World* , 29, Sep. 2002

## 第五章 密度矩阵与量子统计

本章是全书中最短的一章,目的仅限于介绍密度算符(矩阵)的基本知识并使其与高等(量子)统计物理学(这是研究生另一门基础理论课)初步联系起来.我们还是遵循由“特殊”到“一般”,再从“一般”回到“特殊”的叙述方法,用最简单(也最典型)的电子自旋极化以及与之联系的顺磁性和反磁性作为讨论对象.

### § 5.1 密度算符和系综

#### 5.1A 极化束流与非极化束流

迄今为止,我们讨论的态基本上是量子力学中的单粒子态,若记为 $|\alpha\rangle$ ;在与实验联系时又应用了几率假设.这意味着在同样条件下大量的全同粒子,都处于相对独立的 $|\alpha\rangle$ 态,因此理论上对单粒子态的预言,便理解为是对大量粒子组成的系综的统计平均(参见文献[1]、[2]).

举例来说,Stern-Gerlach(SG)实验中,原子束穿过磁场后,在理想情况下可以说,每个原子的自旋都指着同一个方向,即束流是100%地极化的.但一般情况下,例如许多原子刚从一个热炉子中蒸发出来时,自旋取向是混乱的,非极化的,应该如何去描写它们呢?

先考虑把自旋 $\frac{1}{2}$ 的体系的一般状态记为

$$|\alpha\rangle = C_+|+\rangle + C_-|-\rangle \quad (5.1.1)$$

其中 $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 与 $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 分别表示自旋“朝上”与“朝下”的态.

(5.1.1)式是否能描写一个其自旋有混乱取向的原子集合呢?答案是否定的.我们已知当自旋取向固定在 $(\theta, \phi)$ 角度的情况下,二分量系数之比值等于:

$$\frac{C_+}{C_-} = \frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)}{\exp(i\phi)\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (5.1.2)$$

另一方面,如果我们说,一个束流中有 50% 的原子自旋朝上而 50% 的原子自旋朝下,记为  $w_+ = w_- = 0.5$ , 对这种 50-50 的混合态,按量子力学的统计解释,似乎应该对应于  $|C_+|^2 = |C_-|^2 = 0.5$  的态,它能不能由 (5.1.1) 式中  $C_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ,  $C_- = \frac{1}{\sqrt{2}}$  来描写呢? 假如是这样的话,由 (5.1.2) 式,岂非对应于  $\phi = 0$ ,  $\theta = \frac{\pi}{2}$  的态? 那岂不是对应于一个其自旋有固定取向的原子了? 由此可见,对实验上的混合态,用 (5.1.1) 式那样的波函数去描写是不合适的. 原因在于:  $C_+$ ,  $C_-$  是复数,它们不但包含着一相对相位 ( $e^{i\phi}$ ), 而且包含着一个绝对相位. 当我们把态  $|\alpha\rangle$  写成为确定的  $|+\rangle$  和  $|-\rangle$  态的相干(线性)叠加的时候,它所描写的是一个纯粹系综,对应于极化束流;而描写实验上混合态(它对应于相位完全混乱的非极化束流)的系综应该叫作混合系综,它应该抹去波函数中关于相位的信息. 当然,完全极化或完全非极化只是一种极端情形,对更一般的情形,即所谓部分非极化的情况(例如,70% 的原子处于  $|\alpha\rangle$  态,30% 的原子处于  $|\beta\rangle$  态,同时  $|\alpha\rangle$  与  $|\beta\rangle$  不一定正交,例如  $|\alpha\rangle$  指沿着正  $x$  轴的极化态,  $|\beta\rangle$  指沿着负  $z$  轴的极化态,等等),我们仍将采用“混合系综”这一名称.

### 5.1B 系综平均和密度算符

能够统一地描写混合系综和纯粹系综的办法是 1927 年 von Neumann 提出的密度算符方法,它并不限于自旋  $\frac{1}{2}$  的体系.

如前述,一个纯粹系综是由同一种纯态  $|\alpha\rangle$  组成的体系的集合,而在一个混合系综中处于  $|\alpha^{(1)}\rangle$  态中的相对几率(丰度)百分比为  $w_1$ , 处于  $|\alpha^{(2)}\rangle$  态中的丰度为  $w_2$ , 等等. 粗略地说,混合系综就是许多纯粹系综的混合,它们的丰度满足归一化条件

$$\sum_i w_i = 1 \quad (5.1.3)$$

如上面所指出,  $|\alpha^{(1)}\rangle$  与  $|\alpha^{(2)}\rangle$  不一定正交,因此 (5.1.3) 式中对  $i$  求和的项数不一定等于态矢(ket)空间的维度  $N$ , 事实上,它可以超过  $N$ . 例如对自旋  $\frac{1}{2}$  的体系,  $N = 2$ , 但我们可以考虑如下的混合态:40% 的自旋沿正  $z$  方向,30% 沿正  $x$  方向,而剩下 30% 则沿负  $y$  方向.

设我们对一个混合系综,测其某一可观察量  $\hat{A}$ , 问作大量观测后  $\hat{A}$  的平均值为多少? 回答是由下面的“系综平均”给出:

$$\langle \hat{A} \rangle \equiv \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \hat{A} | \alpha^{(i)} \rangle = \sum_i \sum_{a'} w_i |\langle a' | \alpha^{(i)} \rangle|^2 a' \quad (5.1.4)$$

其中已将  $|\alpha^{(i)}\rangle$  用  $\hat{A}$  的本征态  $|a'\rangle$  展开:

$$|\alpha^{(i)}\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a' | \alpha^{(i)} \rangle \quad (5.1.5)$$

而  $a'$  是  $\hat{A}$  在  $|a'\rangle$  态中的本征值:

$$\hat{A} |a'\rangle = a' |a'\rangle \quad (5.1.6)$$

在(5.1.4)式中  $\langle \alpha^{(i)} | \hat{A} | \alpha^{(i)} \rangle$  是  $\hat{A}$  对纯态  $|\alpha^{(i)}\rangle$  的量子平均(期待值), 而系综平均  $\langle \hat{A} \rangle$  则是这种期待值的“加权平均”, 其中的“统计权重”就是  $w_i$ . 注意, 这里用了二次几率概念, 首先是纯态  $|\alpha^{(i)}\rangle$  被找到在  $\hat{A}$  本征态  $|a'\rangle$  中出现的几率是  $|\langle a' | \alpha^{(i)} \rangle|^2$ , 第二次则是在混合系综中找到纯态  $|\alpha^{(i)}\rangle$  的几率是  $w_i$ .

为进一步改写(5.1.4)式, 引进一套完备正交系  $|b'\rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_i w_i \sum_{b'} \sum_{b''} \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \langle b' | \hat{A} | b'' \rangle \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \\ &= \sum_{b'} \sum_{b''} \left( \sum_i w_i \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \right) \langle b' | \hat{A} | b'' \rangle \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

这里对  $b'$  ( $b''$ ) 求和的项数等于 ket 空间的维度  $N$ , 而对  $i$  求和的项数则有赖于把混合系综看成为多少种纯粹系综的混合. (5.1.7) 式中括号内的量并不与特别的观察量  $\hat{A}$  有关, 故可引入密度算符  $\hat{\rho}$

$$\hat{\rho} \equiv \sum_i w_i |\alpha^{(i)}\rangle \langle \alpha^{(i)}| \quad (5.1.8)$$

而  $\hat{\rho}$  在以  $|b'\rangle$  为基的表象中被表示成为一个矩阵, 其矩阵元是

$$\langle b'' | \hat{\rho} | b' \rangle = \sum_i w_i \langle b'' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \quad (5.1.9)$$

于是由(5.1.7)式可见  $\hat{A}$  的系综平均被写成

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{b'} \sum_{b''} \langle b'' | \hat{\rho} | b' \rangle \langle b' | \hat{A} | b'' \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{A}) \quad (5.1.10)$$

由矩阵理论知道, 对  $\hat{\rho} \hat{A}$  的求迹运算与表象是无关系的, 我们可以代替  $|b'\rangle$  而取任意的基, 故(5.1.10)式是普遍的公式, 用起来十分方便.

## 5.1C 密度矩阵的性质

由定义(5.1.8)式可见,密度算符是厄密算符:

$$\hat{\rho}^{\dagger} = \hat{\rho} \quad (5.1.11)$$

其次易证密度算符满足归一化条件,即它的迹等于1:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\hat{\rho}) &= \sum_i \sum_{b'} w_i \langle b' | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | b' \rangle \\ &= \sum_i w_i \langle \alpha^{(i)} | \alpha^{(i)} \rangle = 1 \end{aligned} \quad (5.1.12)$$

对于纯粹系综,  $w_i$  中某一个  $i = n$  的  $w_n = 1$ , 其余均为零,  $w_i = 0$  ( $i \neq n$ ), 相应之密度算符为

$$\hat{\rho} = | \alpha^{(n)} \rangle \langle \alpha^{(n)} |, \quad (n \text{ 不求和}) \quad (5.1.13)$$

此时有“幂零性”(idempotent), 即

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \quad (5.1.14)$$

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = 1 \quad (5.1.15)$$

即对于纯粹系综,除一般之(5.1.12)式外,尚有(5.1.15)式成立.

(5.1.14)式也可写为  $\hat{\rho}(\hat{\rho} - 1) = 0$ , 这表示:对纯粹系综而言,密度算符的本征值不是0,便是1. 故在对角表象中,其密度矩阵取如下的简单形式:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 0 & & & & 0 \\ & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 0 & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 0 & \ddots \\ 0 & & & & & & & 0 \end{pmatrix} \quad (5.1.16)$$

可以证明,  $\text{Tr}(\hat{\rho}^2)$  是恒正的不大于1的实数,对纯粹系综它取极大值1, 即

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \begin{cases} = 1, & (\text{纯粹系综}) \\ < 1, & (\text{混合系综}) \end{cases}$$

以后为行文方便起见,我们常不区分密度算符与密度矩阵这两个名词. 当然,严格地说,密度矩阵是密度算符在特定表象下的表示,见(5.1.8)和(5.1.9)两式.

### 5.1D 二态体系的密度矩阵与极化

我们在第一章 § 1.1 节已介绍过(一般的)二态体系及其与自旋 $\frac{1}{2}$ 体系的对应. 当取基矢为  $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  后,  $2 \times 2$  的密度矩阵  $\hat{\rho}$  只含有 3 个独立的实参数, 这里从厄密性条件(5.1.11)和归一化条件(5.1.12)也得出同一结论. 相应地  $\hat{\rho}$  可以参数化为

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (5.1.17)$$

其中  $\boldsymbol{\sigma}$  是 Pauli 矩阵, 而  $\mathbf{P}(\theta, \phi)$  是长度为  $P$ , 极坐标角度为  $(\theta, \phi)$  的一个矢量.  $(P, \theta, \phi)$  就是描写二态体系的 3 个独立参数. 显然由(5.1.17)式有

$$\text{Tr } \hat{\rho} = 1 \quad (5.1.18)$$

$$\mathbf{P} = \text{Tr}(\hat{\rho} \boldsymbol{\sigma}) = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \quad (5.1.19)$$

注意, 这里与 § 1.1 不同, 那里是讨论纯粹系综, 所以  $P = 1$ . 现在讨论一般的二态体系的混合系综时, 幂零性(5.1.14)式不再成立, 由(5.1.17)式算出

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} + \frac{1}{4}(\mathbf{P}^2 - 1) \quad (5.1.20)$$

其中用了公式

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \quad (5.1.21)$$

于是可见, 当  $\hat{\rho}^2 < \hat{\rho}$ , 一般有  $\mathbf{P}^2 < 1$ , 通常称  $\mathbf{P}$  为极化矢量, 它的长度  $P$  是关于系综混合程度的一种量度:

$$\begin{cases} P = 1, & (\text{纯粹系综}) \\ 0 \leq P < 1, & (\text{混合系综}) \end{cases} \quad (5.1.22)$$

下面是几个例子:

(1) 一完全极化束 ( $S_z = \frac{\hbar}{2}$ ) 的密度矩阵

$$\hat{\rho} = |+\rangle\langle +| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.1.23)$$

这是一个纯粹系综.

(2) 在同样( $z$ )表象下看沿  $x$  轴完全极化 ( $S_x = \frac{\hbar}{2}$ ) 的束流:



$$\begin{aligned}
 \hat{\rho} &= |S_x +\rangle \langle S_x +| \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle +| + \langle -|) \\
 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.1.24)
 \end{aligned}$$

此式与(5.1.17)式进行比较,即见极化矢量的各分量为:  $P_x = 1$ ,  $P_y = P_z = 0$ , (亦可见(5.1.2)式中  $\theta = \frac{\pi}{2}$ ,  $\phi = 0$  的情况),这也是一个纯粹系综.

(3) 完全非极化束流. 它可以看成是自旋分别朝上与朝下的两个纯粹系综以相对权重各为 50% 的不相干混合:

$$\hat{\rho} = \left(\frac{1}{2}\right)|+\rangle\langle +| + \left(\frac{1}{2}\right)|-\rangle\langle -| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.1.25)$$

此时  $\mathbf{P} = 0$  取极小值. 我们看到: 一个完全混合系综的特点是其密度矩阵的非对角元素恒为零.

(4) 部分极化束流. 设我们考虑一个混合系综由 75% 的  $S_x = \frac{1}{2}\hbar$  的纯粹系综和 25% 的  $S_x = -\frac{1}{2}\hbar$  的纯粹系综混合而成, 即

$$w(S_x +) = 0.75, \quad w(S_x -) = 0.25 \quad (5.1.26)$$

于是利用(5.1.23)、(5.1.24)两式, 易得

$$\hat{\rho} = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{7}{8} & \frac{1}{8} \\ \frac{1}{8} & \frac{1}{8} \end{pmatrix} \quad (5.1.27)$$

由它计算出

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \sigma_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \text{Tr}(\rho \sigma_z) = \frac{3}{8} \hbar \quad (5.1.28)$$

$$\langle S_x \rangle = \frac{1}{8} \hbar, \quad \langle S_y \rangle = 0$$

而极化度

$$P = |\mathbf{P}| = \sqrt{\frac{5}{8}} < 1$$

## § 5.2 密度矩阵的运动方程

让我们从(5.1.8)式出发推导密度算符  $\rho$  所满足的动力学方程. 假定权重  $w_i$  不随时间改变, 则  $\rho$  的变化完全来自态  $|\alpha^{(i)}\rangle$  的演变, 后者由薛定谔方程给出:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha^{(i)}\rangle = \hat{H} |\alpha^{(i)}\rangle \quad (5.2.1)$$

$\hat{H}$  是体系的哈密顿算符. 同理

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \alpha^{(i)} | = \langle \alpha^{(i)} | \hat{H} \quad (5.2.2)$$

将(5.1.8)式对  $t$  求导, 即得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = \hat{H} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (5.2.3)$$

有趣的是把此方程(也叫 Master 方程或 Liouville 方程)与海森堡图景中一个可观察量算符  $\hat{A}$  的运动方程去比较:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}^{(H)} = [\hat{A}^{(H)}, \hat{H}] \quad (5.2.4)$$

(见(1.3.35)式). 两者十分相似, 但右边差一个符号, 我们决不可把这两者混为一谈. 现在密度算符  $\hat{\rho}$  是在薛定谔图景中从态矢量  $|\alpha^{(i)}\rangle$  与  $\langle \alpha^{(i)} |$  的外积所组成的一个算符, 虽然是厄密的, 却并不是海森堡图景中的一个可观察量.

对自旋  $\frac{1}{2}$  的电子二态体系, 记

$$\hat{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{2} g\mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (5.2.5)$$

这里记  $\boldsymbol{\mu} = -\frac{1}{2} g\mu_B \boldsymbol{\sigma}$ ,  $g$  为电子回转磁比率,  $\mu_B$  是玻尔磁子 ( $g = 2$ ). 记

$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (1 + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma})$  ((5.1.17)式), 则方程(5.2.3)式成为

$$\frac{d}{dt}\mathbf{P} = \frac{g\mu_B}{\hbar}\mathbf{B} \times \mathbf{P} \quad (5.2.6)$$

这在第一章(1.1.25)式已得到过了. 但是需要再提醒一下, 这里对混合系综的情形,  $|\mathbf{P}| = P < 1$ , 而如果假定 $\hat{H}$ 为厄密的话, 则(5.2.6)式告诉我们, 虽然在运动中 $\mathbf{P}$ 的方向要不断改变, 但极化度 $P$ 的大小是不会改变的. 仅当体系与环境间存在耗散机制即当讨论一种“弛豫过程”的时候,  $P$ 才会随时间而减小.

以上是基矢(ket)空间为 $|n\rangle$ 所张成且 $|n\rangle$ 可用分立指标 $n$ 去标记的情形. 如果推广到连续本征值, 特别是位形空间的基矢 $|x\rangle$ 用连续的 $x$ 去标记时, 密度矩阵仍可类似地定义:

$$\begin{aligned} \langle x' | \hat{\rho} | x'' \rangle &= \langle x' | \left( \sum_i w_i | \alpha^{(i)} \rangle \langle \alpha^{(i)} | \right) | x'' \rangle \\ &= \sum_i w_i \psi_i(x') \psi_i^*(x'') \end{aligned} \quad (5.2.7)$$

其中 $\psi_i(x) = \langle x | \alpha^{(i)} \rangle$ 是态 $|\alpha^{(i)}\rangle$ 在位形空间的波函数. 注意当 $x' = x''$ 时, 此密度矩阵的对角元正是量子力学几率密度的加权平均. 由此可见“密度矩阵”这一名称是合适的.

作为本节结束, 我们要加一个说明: 一个混合系综分解为纯粹系综的方式并不是惟一的. 例如在分立的二态自旋体系情形, 选择量子化坐标轴的方向可以是任意的, 又如一个实际的粒子束流, 既可分解为平面波态的混合, 也可分解成为一些波包态的混合.

## § 5.3 极化和散射

### 5.3A 散射的 $S$ 矩阵依赖于自旋的情形

前面第二章介绍的散射理论中假定粒子没有自旋, 现在要考虑引起散射的力可能与自旋有关的情形. 为此将自旋 $\frac{1}{2}$ 的入射粒子用二分量的波函数来描写:

$$\exp(ikz)\chi_{inc} = \exp(ikz) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}, \quad \chi_{inc}^+ \chi_{inc} = 1 \quad (5.3.1)$$

相应地薛定谔方程在无限远之渐近解具有形式:

$$\exp(ikz)\chi_{inc} + f(\theta, \phi) \frac{\exp(ikr)}{r} \quad (5.3.2)$$

与  $\chi_{inc}$  相应, 散射振幅  $f(\theta, \phi)$  也是一个二分量的旋量. 我们假设能够产生与自旋有关的散射的哈密顿量为(略去算符的“帽子” $\wedge$ ):

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r) + W(r)\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (5.3.3)$$

此式除中心力势  $V(r)$  外, 尚有一项“自旋-轨道耦合”相互作用, 因  $\mathbf{L}$  与  $\boldsymbol{\sigma}$  都是轴矢量, 它们的标积是一个标量.

由于薛定谔方程是线性的, 要找(5.3.2)式这样的解, 可以由两个特解的线性叠加去组成, 一个相当于  $\chi_{inc} = \alpha$ , 另一个相当于  $\chi_{inc} = \beta$ , 它们分别表示入射束流中的自旋沿着或反着初始动量的方向, 各表示一种“纵向极化”状态. 因此我们可以预期有如下渐近行为的两个特解:

$$\begin{aligned} \psi_1 &\sim \exp(ikz)\alpha + (S_{11}\alpha + S_{21}\beta) \frac{\exp(ikr)}{r} \\ \psi_2 &\sim \exp(ikz)\beta + (S_{12}\alpha + S_{22}\beta) \frac{\exp(ikr)}{r} \end{aligned} \quad (5.3.4)$$

把第一式乘以  $C_1$ , 第二式乘以  $C_2$ , 两者相加后得到

$$\exp(ikz) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} + \frac{\exp(ikr)}{r} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \left[ \exp(ikz) + \frac{\exp(ikr)}{r} S \right] \chi_{inc} \quad (5.3.5)$$

其中  $S$  代表由矩阵元  $S_{ij}$  ( $i, j = 1, 2$ ) 组成的  $2 \times 2$  散射矩阵:

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (5.3.6)$$

$S$  既依赖于散射角  $(\theta, \phi)$ , 又依赖于动量大小  $k$ . 下面我们用一般的原理来确定这种函数关系的一般形式, 基本思想是利用问题中的对称性考虑来确定运动常数. 我们知道, 如算符  $A$  与哈密顿量  $H$  对易, 则如  $\psi$  是  $H$  的一个本征态,  $A\psi$  也必仍是  $H$  的本征态, 且与  $\psi$  具有同一能量. 当然,  $\psi$  与  $A\psi$  的线性组合形式要取决于边界条件, 即取决于散射波函数的渐近行为.

假设散射势如(5.3.3)式所示, 有球对称性(转动不变性), 则  $H$  与总角动量  $\mathbf{J}$  ( $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ ) 的各分量都对易. 在(5.3.4)式中  $\psi_1$  或  $\psi_2$  的入射波都是  $J_z$  的本征态, 分别有本征值  $\frac{\hbar}{2}$  或  $-\frac{\hbar}{2}$ . 因算符  $J_z$  不会改变散射波的径向依赖性, 故  $\psi_1$  或  $\psi_2$  仍应都是  $J_z$  的本征解, 满足各自的本征方程:

$$J_z \psi_1 = (L_z + S_z) \psi_1 = \hbar \left( \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{2} \sigma_z \right) \psi_1 = \frac{\hbar}{2} \psi_1 \quad (5.3.7)$$

$$J_z \psi_2 = \hbar \left( \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{2} \sigma_z \right) \psi_2 = -\frac{\hbar}{2} \psi_2$$

以(5.3.4)式代入后,比较 $\alpha$ 或 $\beta$ 的系数,即见对角元 $S_{11}$ 和 $S_{22}$ 只可能是仅含 $\theta$ 的函数,而非对角元则具有如下的形式:

$$S_{12} = \exp(-i\phi), (\theta \text{ 的函数}); S_{21} = \exp(i\phi), (\theta \text{ 的函数}) \quad (5.3.8)$$

进一步考虑 $H$ 应在空间反演下不变.可以证明(证略):对 $yz$ 平面的空间反演算符是 $P_x \sigma_x$ ,  $P_x$ 表示将 $x$ 换成 $(-x)$ ,而 $\sigma_x$ 使 $\alpha$ 和 $\beta$ 互换( $\sigma_x \alpha = \beta$ ,  $\sigma_x \beta = \alpha$ ).故在 $P_x \sigma_x$ 作用下,入射波 $\exp(ikz)\alpha \rightarrow \exp(ikz)\beta$ 而散射波 $\exp(ikr)/r$ 不变.因此(5.3.4)中上、下两式互换,连同(5.3.8)式可见( $P_x$ 使 $\theta$ 不变,而 $\phi \rightarrow \pi - \phi$ ):

$$S_{11} = S_{22} = g(\theta), \quad S_{21}(-\phi, \theta) = -S_{12}(\phi, \theta) = -\exp(-i\phi)h(\theta)$$

结果 $S$ 矩阵应有形式

$$S = \begin{pmatrix} g(\theta) & h(\theta)\exp(-i\phi) \\ -h(\theta)\exp(i\phi) & g(\theta) \end{pmatrix} = g(\theta)I + ih(\theta)(\sigma_y \cos\phi - \sigma_x \sin\phi) \quad (5.3.9)$$

其中 $I$ 是 $2 \times 2$ 的单位矩阵,再引入一个单位矢量 $\mathbf{n}$ ,使得它垂直于由 $\mathbf{k}_i(0, 0, k)$ 和 $\mathbf{k}_f(k \sin\theta \cos\phi, k \sin\theta \sin\phi, k \cos\theta)$ 所组成的散射平面:

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}_i \times \mathbf{k}_f}{|\mathbf{k}_i \times \mathbf{k}_f|} = (-\sin\phi, \cos\phi, 0). \text{ 于是}$$

$$S = g(\theta)I + ih(\theta)\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (5.3.10)$$

这就是从 $H$ 的不变性所导出的对散射矩阵的一般限制.其中 $g(\theta)$ 和 $h(\theta)$ 的具体函数形式当然随势场的不同而不同,要求解薛定谔方程后才能知道.(5.3.10)式表示非极化束流的散射引起的极化只能沿 $\mathbf{n}$ 方向,这是宇称守恒定律的结论.

一旦知道了 $S$ ,便可以计算在给定方向 $(\theta, \phi)$ 上散射束流的强度.由渐近行为(5.3.5)导出微分散射截面等于:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (S\chi_{inc})^\dagger S\chi_{inc} = \chi_{inc}^\dagger S^\dagger S\chi_{inc} \quad (5.3.11)$$

这是散射理论中常见的公式 $\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$ 在考虑粒子有自旋情况下的

推广. 注意即使散射后沿  $k_f$  方向的束流有沿  $n$  方向的极化, 因探测器对极化不灵敏, 并不在截面(5. 3. 11)中表现出来, 实验上往往通过第二次散射来探测这种极化(见下).

### 5.3B 极化束流引起散射的左右不对称性

现在我们用密度矩阵来描写入射束流, 引入

$$\rho_{inc} = \chi_{inc} \chi_{inc}^\dagger \quad (5.3.12)$$

则(5. 3. 11)式可改写为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \text{Tr}(\rho_{inc} S^\dagger S) \quad (5.3.13)$$

如(5. 1. 17)式, 记

$$\rho_{inc} = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{P}_0 \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (5.3.14)$$

$\mathbf{P}_0$  表示入射束流的极化矢量, 将(5. 3. 10)和(5. 3. 14)两式代入(5. 3. 13)式, 我们得到微分散射截面:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (|g|^2 + |h|^2) \left( 1 + i \frac{g^* h - g h^*}{|g|^2 + |h|^2} \mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{n} \right) \quad (5.3.15)$$

$\mathbf{P}_0$  的纵向极化分量为  $(\mathbf{P}_0 \cdot \hat{k}_i) \hat{k}_i$ ,  $\left( \hat{k}_i \equiv \frac{\mathbf{k}_i}{|\mathbf{k}_i|} \right)$ ; 而横向极化分量为  $\mathbf{P}_0 - (\mathbf{P}_0 \cdot \hat{k}_i) \hat{k}_i$ , 若选取  $y$  轴沿着这一方向(已选  $\hat{k}_i$  沿着  $z$  方向), 则  $\mathbf{P}_0(0, |\mathbf{P}_0 - (\mathbf{P}_0 \cdot \hat{k}_i) \hat{k}_i|, \mathbf{P}_0 \cdot \hat{k}_i)$  与  $\mathbf{n}$  的标积等于

$$\mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{n} = |\mathbf{P}_0 - (\mathbf{P}_0 \cdot \hat{k}_i) \hat{k}_i| \cos\phi \quad (5.3.16)$$

故(5. 3. 15)式告诉我们: 散射强度对角度  $\theta$  和  $\phi$  的依赖关系一般是

$$I(\theta, \phi) = a(\theta) + b(\theta) \cos\phi \quad (5.3.17)$$

这正是实验上发现的极化粒子束流被散射后呈现左右不对称的表示(注意  $\phi$  角的量度由  $\mathbf{P}_0$  的方向决定). 当  $\mathbf{P}_0 = 0$ ,  $b(\theta) = 0$ ,  $I(\theta, \phi) \rightarrow I(\theta) = a(\theta) = |f(\theta)|^2$ , 散射对入射束流是旋转对称的, 这就回到第二章讨论的情形. 实验上常常通过第一次散射产生极化束流, 再由第二次散射的左右不对称性来测量它的极化.

虽然密度矩阵方法对纯粹系综(即粒子都处在同一种量子态中)也很方便, 但它的优越性只有当讨论混合系综时才充分显示出来. 仍以二态体系为例, 如果粒子是由旋量  $\chi_i$  表示的纯态的混合态, 第  $i$  态的统计权重  $w_i$

是粒子的丰度比,则这一混合系综的平均极化为

$$P = \sum_{i=1}^N \langle \sigma \rangle_i \omega_i \quad (5.3.18)$$

如(5.1.18)式以后的讨论,对混合系综一般有  $P < 1$ . 这时如讨论此极化束流的散射,仍可用密度矩阵方法,如(5.3.15)式所示.

最后我们简单地说几句关于测量的概念<sup>[1]</sup>. 纯粹系综由纯态组成,纯态保持着完全的量子相干性,即保持着波函数的相位信息. 测量(例如对自旋作 SG 实验测量,见第一章)时必然抹掉了一部分相位信息,即破坏了原来的量子相干性(一种说法是使波包编缩),使体系由纯粹系综转变为混合系综,测量得到的数据出现的几率就是对应的态在混合系综中的统计权重,它相当于原来纯粹系综中纯态波函数中对应系数的模的平方. 本书将在第十章进一步讨论有关的问题.

## § 5.4 量子统计学简介

### 5.4A 密度矩阵与熵

让我们简单地介绍一下密度矩阵的表述方法与量子统计学的关系. 首先注意一个纯粹系综的密度矩阵在对角化后具有如下的简单形式(见(5.1.16)式):

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & & & & 0 \\ & 0 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 0 & \\ & & & & 1 & \\ & & & & & 0 & \\ & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & 0 \\ 0 & & & & & & & & 0 \end{pmatrix}, \text{ (纯粹系综)} \quad (5.4.1)$$

它表示体系只处于一个纯态,而一个完全混乱的混合系综对应于密度矩阵为( $N$ 表示状态总数):

$$\rho = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & \\ & & & & \ddots \\ & & & & & 1 & \\ & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & 1 \\ 0 & & & & & & & & 0 \end{pmatrix}, \text{ (完全混乱的混合系综)} \quad (5.4.2)$$

它表示体系在各状态的占有数相等(有等丰度分布),而在各态之间没有

相位关联(表现为密度矩阵的非对角元为 0). 虽然(5.4.1)和(5.4.2)两式都满足归一化条件  $\text{Tr}\rho = 1$ , 它们的性质是很不相同的. 现在设法构造一个量来表征它们之间的深刻区别.

对于一个密度系综  $\rho$ , 定义系综的“熵”为

$$S = -k_B \text{Tr}(\rho \ln \rho) \quad (5.4.3)$$

其中  $k_B$  是玻尔兹曼常数. 注意, 对一个矩阵  $\rho$ , 其对数函数  $\ln \rho$  的一般定义是

$$\ln \rho = \ln[1 - (1 - \rho)] = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (1 - \rho)^n \quad (5.4.4)$$

但当  $\rho$  为对角情形如(5.4.1)或(5.4.2)式所示时, 计算十分简单, 记此  $\rho = \rho^{(\text{diag})}$ , 则

$$S = -k_B \sum_n \rho_{nn}^{(\text{diag})} \ln \rho_{nn}^{(\text{diag})} \quad (5.4.5)$$

因每一个对角元  $\rho_{nn}^{(\text{diag})}$  均为介于 0 与 1 之间的正数, 故  $S$  必为半正定的:  $S \geq 0$ . 对(5.4.1)式所示之纯粹系综特例:

$$S = 0 \quad (5.4.6)$$

而对(5.4.2)式所示之完全混乱的混合系综情形有

$$S = -k_B \sum_{n=1}^N \frac{1}{N} \ln\left(\frac{1}{N}\right) = k_B \ln N \quad (5.4.7)$$

由此可见, 熵  $S$  可以作为组成系综的体系状态的混乱(无序)程度的一种量度. 纯粹系综描写一种最有序的状态, 因为系综中所有成员都处在同一个量子状态, 此时熵取极小值 0, 如(5.4.6)式所示. 对另一极端情形, 由完全混乱的混合系综所描写, 每一个量子态都等几率地被占据,  $N$  个量子态彼此独立, 几率幅相互之间也没有相位关联, 此时熵  $S$  上升到  $k_B \ln N$ , 如(5.4.7)式所示. 下面来说明, 这是  $S$  在归一化条件

$$\text{Tr}\rho = \sum_n \rho_{nn} = 1 \quad (5.4.8)$$

约束下所能取的最大可能值. 从物理上看, 在给定的哈密顿量  $H$  下, 体系的熵  $S$  将单调上升, 直至到达热平衡态, 此时  $S$  达到极大值, 这一趋向热平衡的动态过程十分复杂, 超出我们讨论的能力范围. 我们所能断言的是: 一旦平衡到达之后, 密度矩阵  $\rho$  将不再变化; 即



$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (5.4.9)$$

与方程(5.2.3)式比较后可见,此时  $\rho$  与  $H$  必可同时对角化,因此(5.4.5)式中的基矢  $|n\rangle$  可以取为  $H$  的本征矢:  $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ , 而  $\rho_{nn}$  就表示在能量为  $E_n$  的本征态中体系的占据几率(丰度百分比).

让我们取  $S$  的极值,即要求变分

$$\delta S = 0 \quad (5.4.10)$$

或 
$$\delta\left(\sum_n \rho_{nn} \ln \rho_{nn}\right) = \sum_n (\ln \rho_{nn} + 1) \delta \rho_{nn} = 0 \quad (5.4.11)$$

然而不要忘记两个约束条件,一个是  $H$  的平均值给定为  $E$ :

$$\langle H \rangle = \text{Tr}(\rho H) = E \quad (5.4.12)$$

另一个约束是(5.4.8)式,所以(5.4.11)式中的  $\delta \rho_{nn}$  不能够认为是独立的. 数学上处理这种有约束的极值问题的方法是熟知的拉格朗日不定乘子法,步骤如下:取(5.4.12)和(5.4.8)两式的变分

$$\delta \langle H \rangle = \sum_n \delta \rho_{nn} E_n = 0 \quad (5.4.13)$$

$$\delta \text{Tr} \rho = \sum_n \delta \rho_{nn} = 0 \quad (5.4.14)$$

把(5.4.13)式乘以  $\beta$ , (5.4.14)式乘以  $\alpha$ ,与(5.4.11)式加起来得到

$$\sum_n \delta \rho_{nn} [(\ln \rho_{nn} + 1) + \beta E_n + \alpha] = 0$$

上面引入了两个待定的常数  $\alpha$  和  $\beta$  后,各个变分  $\delta \rho_{nn}$  便可以视为独立,取  $\delta \rho_{nn} \neq 0$  立刻解出

$$\rho_{nn} = \exp(-\beta E_n - \alpha - 1) \quad (5.4.15)$$

现在由归一化条件(5.4.8)式决定  $\alpha$  之值,易得

$$\rho_{nn} = \frac{\exp(-\beta E_n)}{\sum_{m=1}^N \exp(-\beta E_m)} \quad (5.4.16)$$

这里我们已假定各不同  $E_n$  的能级都没有简并,即简并度  $g_n = 1$ , 否则应在指数前补充一个  $g_n$  因子.但利用  $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$  及  $\hat{\rho} = \sum_n \rho_{nn} |n\rangle \langle n|$ , 总有

$$\hat{\rho} = \exp(-\beta \hat{H}) / \text{Tr} \exp(-\beta \hat{H}) \quad (5.4.17)$$

(5.4.17)式是我们在统计物理中熟知的“正则系综”分布公式,其中  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ ,  $T$  表示温度(绝对温标). 假如我们在求  $S$  的极值时不考虑约束条件(5.4.12)式,则代替(5.4.16)式,我们将得到

$$\rho_{nn} = \frac{1}{N}, \quad (\text{与 } n \text{ 无关}) \quad (5.4.18)$$

这正是(5.4.2)式所表示的完全混乱的混合系综情形.(5.4.18)式相当于(5.4.17)式中  $\beta \rightarrow 0$  的极限情况,它表示在高温极限 ( $T \rightarrow \infty$ ) 下,一切不同  $E_n$  的能态都将被等几率地占据.

### 5.4B 配分函数,电子的顺磁性

(5.4.17)式的分母叫做“配分函数”,记为

$$Z = \text{Tr}[\exp(-\beta H)] \equiv \exp(-\beta F) \quad (5.4.19)$$

其中又定义了

$$F = -k_B T \ln Z \quad (5.4.20)$$

为 Helmholtz 自由能. 与此相应,密度矩阵  $\rho$  可以写成

$$\rho = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H) = \exp[\beta(F - H)] \quad (5.4.21)$$

一个可观察量  $A$  的系综平均,可以计算如下:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr}[\exp(-\beta H) A] \\ &= \left[ \sum_{n=1}^N \langle A \rangle_n \exp(-\beta E_n) \right] \left[ \sum_{n=1}^N \exp(-\beta E_n) \right]^{-1} \end{aligned} \quad (5.4.22)$$

$A$  的一个特例是体系的“内能” $U$ ,它被定义为

$$\begin{aligned} U = \langle E \rangle &= \left[ \sum_{n=1}^N E_n \exp(-\beta E_n) \right] \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-\beta E_n) \right]^{-1} \\ &= -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Z) \end{aligned} \quad (5.4.23)$$

再举一个简单例子:自由电子处于沿  $z$  轴的磁场  $\mathbf{B}$  中,每个电子有电荷  $-e$ ,磁矩  $\boldsymbol{\mu}$ ,其大小等于  $\frac{e\hbar}{2mc}$ ,则其哈密顿量等于

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{e\hbar}{2mc} B \sigma_z = \omega_c S_z \quad (5.4.24)$$

其中  $\omega_c = \frac{eB}{mc}$  称为同步回旋(角)频率,它就是经典物理中电子在磁场中作圆周运动的(角)频率(见第七章).  $S_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ .

由(5.4.21)式,密度矩阵为

$$\rho = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{-\beta\hbar\omega_c}{2}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(\frac{\beta\hbar\omega_c}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (5.4.25)$$

而配分函数

$$Z = \exp\left(\frac{-\beta\hbar\omega_c}{2}\right) + \exp\left(\frac{\beta\hbar\omega_c}{2}\right) \quad (5.4.26)$$

由此不难算出

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \langle S_y \rangle = 0 \\ \langle S_z \rangle &= -\frac{\hbar}{2} \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega_c}{2}\right) \end{aligned} \quad (5.4.27)$$

记一个电子的平均磁化强度等于

$$-\frac{e}{mc} \langle S_z \rangle = \chi B \quad (5.4.28)$$

其中定义了单电子的“磁化率” $\chi$ ,故得正值的

$$\chi = \frac{e\hbar}{2mcB} \tanh\left(\frac{\beta\hbar\omega_c}{2}\right) \quad (5.4.29)$$

在高温极限下

$$\chi \Big|_{T \rightarrow \infty} \sim \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2} \frac{1}{k_B T} = \frac{\boldsymbol{\mu}^2}{k_B T} \quad (5.4.30)$$

磁化率与磁矩平方  $\boldsymbol{\mu}^2$  成正比,与温度  $T$  成反比. 这种  $\chi > 0$  的顺磁性与  $T$  成反比的规律叫做居里定律. 我们要注意上述推导过程假定了电子不过是彼此独立的(既无运动也无相互作用)的经典磁偶极子,它们服从近独立子系的玻尔兹曼统计,顺磁性是它们在外磁场中磁矩取向的经典效应.(5.4.29)式最早是 Brillouin 用经典观念导出的,而事实上当温度不太高时,朗道(Landau)发现,即使是自由电子在外磁场中的运动轨道也要量子化,并服从费米-狄拉克统计规律,这导致它们产生一种新的“反磁

性”，见下节讨论。

### 5.4C 巨正则系综, 电子的反磁性

#### 1. 巨配分函数

实际上统计物理讨论的正则系综中的体系并不限于单粒子体系, 原则上也适用于多粒子体系. 不过为了讨论由许多全同粒子组成的体系, 最好将粒子数严格不变的条件放宽为平均粒子数不变的约束条件, 记  $N$  为粒子数算符(不要与上节总态数  $N$  相混淆), 则  $N$  的系综平均为

$$\langle N \rangle = \text{Tr}(\rho N) = \bar{N} \quad (5.4.31)$$

再加上原来的两个约束条件(5.4.8)和(5.4.12)式. 这意味着: 体系不但与周围环境交换能量, 还与环境交换粒子. 这样的系综叫做巨正则系综. 然后我们像上节一样去求熵  $S$  的极值方程:

$$\delta \text{Tr}[\rho \ln \rho - \rho \beta \mu N + \beta \rho H + \alpha \rho] = 0 \quad (5.4.32)$$

这里除原来的  $\alpha, \beta$  外, 又引入第三个拉格朗日不定乘子  $\mu$ , 由上式解出密度矩阵为

$$\rho = \frac{1}{Z_G} \exp[-\beta(H - \mu N)] \quad (5.4.33)$$

其中

$$Z_G = \text{Tr}\{\exp[-\beta(H - \mu N)]\} \quad (5.4.34)$$

称为巨配分函数.

#### 2. 理想玻色-爱因斯坦统计和费米-狄拉克统计

作为最简单的例子, 我们来考虑由全同玻色子组成的“理想气体”, 这时体系的哈密顿量为\*

$$H = \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i = \sum_i \epsilon_i n_i \quad (5.4.35)$$

其中在单粒子能级  $\epsilon_i$  上的粒子数算符  $n_i = a_i^\dagger a_i$  ( $i$  不求和),  $N = \sum_i n_i$ ,

而产生(湮灭)算符  $a_i^\dagger$  ( $a_i$ ) 满足对易关系:

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \quad (5.4.36)$$

如前, 一个物理量  $A$  的系综平均为

\* 一个体系对其总能量  $E$  的正则分布是 Boltzmann 分布, 而近独立子系对其部分能量  $\epsilon_i$  的分布则可能有 Boltzmann, Bose-Einstein 或 Fermi-Dirac 三种分布.

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho A) = \frac{1}{Z_G} \text{Tr}\{A \exp[-\beta(H - \mu N)]\} \quad (5.4.37)$$

记

$$\text{Tr}\{\exp[-\beta(H - \mu N)]\} = Z_G \equiv \exp(-\beta\Omega), \quad \Omega = -k_B T \ln Z_G \quad (5.4.38)$$

$$\rho = \exp[\beta(\Omega - H + \mu N)]$$

以后称  $\Omega$  为“热力学势”。

现在我们对理想玻色气来计算  $\Omega$ 。对玻色子, 能级占有数  $n_i$  可以取 0, 1, 2, ... 等一切可能的正整数值, 故

$$\begin{aligned} Z_G &= \text{Tr} \exp\left\{-\beta \sum_{i=1}^{\infty} (\epsilon_i - \mu) a_i^\dagger a_i\right\} \\ &= \prod_{i=1}^{\infty} \text{Tr}_i \exp\{-\beta(\epsilon_i - \mu) n_i\} = \prod_{i=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} [\exp\beta(\mu - \epsilon_i)]^n \\ &= \prod_{i=1}^{\infty} \{1 - e^{\beta(\mu - \epsilon_i)}\}^{-1} \end{aligned}$$

而

$$\Omega_0^{(B)} = k_B T \sum_{i=1}^{\infty} \ln\{1 - \exp[\beta(\mu - \epsilon_i)]\} \quad (5.4.39)$$

这里对  $\Omega$  加上脚标 (B) 表示玻色气体, 下脚标 (0) 强调它是对理想气体的。

例如要计算在能级  $\epsilon_i$  上的平均粒子数

$$\begin{aligned} \langle n_i \rangle &= \langle a_i^\dagger a_i \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \epsilon_i} \ln Z_G = \frac{\partial}{\partial \epsilon_i} \Omega_0^{(B)} \\ &= \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_i - \mu)] - 1} \end{aligned} \quad (5.4.40)$$

如果粒子是费米子, 服从费米-狄拉克统计, 则代替对易关系 (5.4.36) 式, 要引入反对易关系:

$$\begin{cases} [a_i, a_j^\dagger]_+ \equiv \{a_i, a_j^\dagger\} \equiv a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \delta_{ij} \\ [a_i, a_j]_+ = [a_i^\dagger, a_j^\dagger]_+ = 0 \end{cases} \quad (5.4.41)$$

此时每个  $\epsilon_i$  能级(无简并)上的粒子占有数  $n_i = a_i^\dagger a_i$  只可能取 0 或 1 两种数值(Pauli 不相容原理)\*, 易证

\* 易见  $n_i^2 = n_i$ , 即  $n_i(n_i - 1) = 0$ , 参见(8.1.4) ~ (8.1.7) 式。

$$\Omega_0^{(F)} = -k_B T \sum_{i=1}^{\infty} \ln\{1 + \exp[\beta(\mu - \epsilon_i)]\} \quad (5.4.42)$$

而

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp[\beta(\epsilon_i - \mu)] + 1} \quad (5.4.43)$$

(5.4.40)和(5.4.43)两式中的  $\mu$  称为化学势,有时还记

$$z = \exp(\beta\mu) \quad (5.4.44)$$

称为 fugacity(逸度),引进  $z$  后,不论玻色子或费米子,体系的总粒子数平均值可以表示成为:

$$\langle N \rangle = z \frac{\partial}{\partial z} \ln Z_G \quad (5.4.45)$$

(见习题 5.1)在(5.4.43)中当  $T=0$  ( $\beta=\infty$ ) 时,  $\mu$  就是体系中费米子填充的最高能级,称为费米能级. 一般情况下化学势  $\mu$  应视为  $(N, T, V)$  三者的函数,而热力学势  $\Omega$  则是  $(T, V, \mu)$  3 个变量的函数(参见图 8.3.1). 下面分别为 Bose-Einstein 统计和 Fermi-Dirac 统计各举一个例子<sup>[3]</sup>.

### 3. 光子气和普朗克公式

让我们再回到黑体辐射的普朗克公式,研究一种不同于 § 4.2C 节的推导方式. 事实上那里的(4.2.37)式与(5.4.40)式已十分相像了,只要转到连续频谱,记  $\epsilon_i = h\nu$  表示光子的能量并令  $\mu = 0$  即可. 理由如下:光子是非定域的玻色气体,它们服从玻色-爱因斯坦统计(而不是玻尔兹曼统计),同时在光子与腔壁分子、原子作用过程中,光子可吸可放,其总数  $N$  即使在平均意义上也并不受到约束,所以不必引进作为不定乘子的化学势  $\mu$ . 由(4.2.37)到(4.2.39)式在此不再重复. 我们已给出两种推导方式,一种着眼于分子、原子(它们满足玻尔兹曼统计)吸放光子而达到平衡的过程,一种着眼于平衡态已到达后的光子气性质,结果殊途同归. 关键的结合点在于光子的吸、放算符所满足的对易关系(5.4.36)式及其对应的(4.2.20)式.

### 4. 电子气的反磁性<sup>[4]</sup>

在第七章将证明:在沿  $z$  轴有外磁场  $B$  的自由电子气,哈密顿量  $H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2$  经量子力学处理后,沿  $z$  方向仍近似为自由运动,但  $x-y$  平面运动受到磁场约束,结果单粒子能量量子化为

$$\epsilon = \frac{p_z^2}{2m} + \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c, \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (5.4.46)$$

$\left(\omega_c = \frac{eB}{mc}\right)$ ,  $n = 0, 1$  等分别称为第一、第二等等朗道能级. 注意对每一固定的  $n$ , 在  $x$ - $y$  平面上的运动状态是高度简并的, 即每一朗道能级包含的状态数(简并度)等于(见(7.1.12)式):

$$\frac{L_x L_y}{h^2} \iint dp_x dp_y \equiv G = \frac{eBL_x L_y}{hc} = \frac{\Phi}{\phi_0} \quad (5.4.47)$$

$L_x$  和  $L_y$  分别是体系沿  $x$  和  $y$  方向的宽度,  $\Phi = BL_x L_y$  为总磁通量,  $\phi_0 = \frac{hc}{e}$  是单位的量子化磁通量.

让我们用公式(5.4.38)和(5.4.42)来计算上述电子气的巨配分函数:

$$\ln Z_G = \sum_{\epsilon} \ln[1 + z \exp(-\beta \epsilon)] \quad (5.4.48)$$

式中对  $\epsilon$  的求和理解不仅对(5.4.46)式的  $n$  求和, 还要乘上简并度(5.4.47)式, 故

$$\ln Z_G = L_x L_y \frac{eB}{hc} \int \frac{L_z dp_z}{h} \sum_{n=0}^{\infty} \ln \left\{ 1 + z \exp \left[ -\beta \hbar \omega_c \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\beta p_z^2}{2m} \right] \right\} \quad (5.4.49)$$

先考虑高温下的近似, 设  $z \ll 1$  且  $k_B T \gg \hbar \omega_c$  (此两条件的意义见下), 在上式对数函数展开中可只取一项:

$$\begin{aligned} \ln Z_G &\approx \frac{zVeB}{h^2 c} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\beta p_z^2}{2m}\right) dp_z \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\beta \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right)\right] \\ &= \frac{zVeB}{h^2 c} \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ 2 \sinh\left(\frac{\beta \hbar \omega_c}{2}\right) \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (5.4.50)$$

( $V = L_x L_y L_z$ ), 由公式(5.4.45), 电子气的总粒子数等于

$$N = \left( z \frac{\partial}{\partial z} \ln Z_G \right)_{B, V, T} \quad (5.4.51)$$

下标表示求偏微商时保持  $B, V, T$  不变. 记

$$x = \frac{1}{2} \beta \hbar \omega_c = \beta \mu_B B, \quad \left( \mu_B = \frac{e \hbar}{2mc} \text{ 是玻尔磁子} \right) \quad (5.4.52)$$

并定义

$$\lambda_T = \frac{h}{(2\pi m k_B T)^{\frac{1}{2}}} \quad (5.4.53)$$

为粒子的(平均)“热波长”,这是一定温度( $T$ )下粒子运动波性的量度,则(5.4.51)式可以表示为

$$N = \frac{zV}{\lambda_T^3} \frac{x}{\sinh x} \quad (5.4.54)$$

其中  $z$  应认为由此式决定为  $N, T, B, V$  的函数,设  $x \ll 1$ ,也就是说,  $\mu_B B \ll k_B T$ , 同时  $\lambda_T^3 \ll V$ , 则对一定的  $N$ , 必有  $z \ll 1$ , 此时

$$N \approx \frac{zV}{\lambda_T^3} \quad (5.4.55)$$

现在进一步看电子气的磁矩和磁化率. 首先改写(5.4.46)式为

$$\epsilon = \frac{1}{2m} p_z^2 - \mu_z^{(n)} B \quad (5.4.56)$$

其中

$$\mu_z^{(n)} = -(2n+1)\mu_B < 0 \quad (5.4.57)$$

是一个电子在沿  $z$  方向的外磁场  $B$  中被诱导出来的磁矩,它是负的,即表现出“反磁性”! 电子气的平均总磁矩  $\bar{M}$  的计算如下:体系的总哈密顿量为  $H$ , 则

$$\bar{M} = \left\langle -\frac{\partial}{\partial B} H \right\rangle \quad (5.4.58)$$

这是因为整体地看,每一特定的总磁矩  $M$  在磁场  $B$  中贡献能量为  $(-MB)$ . 从系综平均的角度看,(5.4.58)式也可表示为

$$\begin{aligned} \bar{M} = \langle M \rangle &= \text{Tr}(M\rho) = \frac{1}{Z_G} \text{Tr}\{M \exp[-\beta(H - \mu N)]\} \\ &= \frac{1}{\beta} \left( \frac{\partial}{\partial B} \ln Z_G \right) \end{aligned} \quad (5.4.59)$$

而  $\ln Z_G$  用(5.4.50)式代入,于是得出 ( $x = \beta\mu_B B$ )

$$\bar{M} = \frac{zV}{\lambda_T^3} \mu_B \left\{ \frac{1}{\sinh x} - \frac{x \cosh x}{\sinh^2 x} \right\} \quad (5.4.60)$$

再以(5.4.54)式代入,得到

$$\bar{M} = -N\mu_B L(x) \quad (5.4.61)$$

其中  $L(x)$  称为 Langevin 函数:

$$L(x) = \coth x - \frac{1}{x} \quad (5.4.62)$$



在  $z \ll 1$ ,  $x \ll 1$ , 即(5.4.55)式同样的近似下, 我们有  $L(x) \sim x/3$ ,

$$\bar{M} \approx \frac{-N\mu_B^2 B}{3k_B T} \quad (5.4.63)$$

由此可见, 单电子的“磁化率”等于

$$\chi = \frac{\bar{M}}{NB} = -\frac{1}{3} \frac{\mu_B^2}{k_B T} \quad (5.4.64)$$

它是负的. 正如(5.4.57)式后预期的那样, 自由电子气应表现出“反磁性”. 这种(朗道)反磁性是量子理论的结果. (当  $\hbar \rightarrow 0$  时,  $L(x) \rightarrow 0$ ). 在经典理论中, 可以严格地证明(从略), 反磁性不可能存在. 还要说明, 电子的实际哈密顿量应是两项之和:

$$H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} \quad (5.4.65)$$

第一项轨道运动引起的最小电磁相互作用给出反磁性, 如(5.4.64)式所示, 而第二项自旋磁矩引起的(见(5.4.24)式)称为 Pauli 相互作用项, 则给出顺磁性, 如(5.4.30)式所示, 总的(单电子)磁化率应等于两者之和,

$$\chi = \frac{\left( \mu_B^2 - \frac{1}{3} \mu_B'^2 \right)}{k_B T} \quad (5.4.66)$$

其中  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ ,  $\mu_B' = \frac{e\hbar}{2m'c}$ ,  $m$  是电子质量, 而  $m'$  是电子在所处体系中的“有效质量”, 它们可能不相等.

最后指出, 如果在(5.4.49)式的计算中取另一种低温下的极限情况,  $k_B T \ll \epsilon_F$  ( $\epsilon_F$  表示费米能级), 因而  $z \gg 1$ , 同时磁场相当强, 所以有  $\mu_B B \approx k_B T$ , 则可以证明磁化率随磁场  $B$  的变化会出现奇怪的振荡现象, 实验上于 1930 年被发现, 叫做 de Haas-van Alphen 效应, 理论上是 1933 年 Peierls 首先讨论的, 这里从略了(参见文献[3][4]).

## 习 题

5.1 检验方程(5.4.45).

5.2 考虑谐振子的哈密顿量为  $H = (n + 1/2) \hbar \omega$ :

(1) 计算其配分函数  $Z$ , 平均能量  $U = \langle E \rangle$  以及比热  $C_V = \frac{\partial U}{\partial T}$ . 讨论其高温极限

与低温极限;

(2) 用修正的哈密顿量  $\tilde{H} = n\hbar\omega$  (去掉零点能), 重新计算上述 3 个量.

5.3 (1) 设  $H = H_0 + H_1$ , 且  $H_1 \ll H_0$ , 试在相互作用图景下导出密度算符的运动方程;

(2) 若将二态体系的哈密顿量(5.2.5)式表示成  $H = H_0 + H_1$ ,  $H_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z$ ,  $H_1 = \hbar\omega_0[\sigma_-\exp(i\omega t) + \sigma_+\exp(-i\omega t)]$ , 问方程(5.2.6)在相互作用图景中的意义是什么?

5.4 设有  $N$  个荷电量  $q$  粒子的哈密顿量是  $H_0 = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{p}}_i^2 + \sum_{i < j} U_{ij}(r_{ij})$ , 然后引入外电势  $\Phi(\mathbf{r}, t)$  与矢势  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ :

(1) 请写出体系的总哈密顿量;

(2) 导出第  $j$  个粒子位置算符  $\mathbf{x}_j$  的海森堡运动方程;

(3) 如果  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  在  $N$  个粒子所处体积  $V$  的范围内是一个缓变函数, 试证明电流密度算符是  $\mathbf{J} = \frac{q}{m}(\mathbf{P}/V) - \frac{q^2}{mc^2} \left(\frac{N}{V}\right) \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ , 其中  $\mathbf{P} = \sum_i \mathbf{p}_i$ .

5.5 设上述  $N$  个粒子是玻色子并处于由(5.4.1)式所描写的基态(即由纯粹系综来描写), 试证明可能出现正比于外矢势  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  (设它与时间无关) 的电流密度.

5.6 (1) 试证明对易关系:

$$\left[ p_\mu - \frac{q}{c} A_\mu(\mathbf{r}), p_\nu - \frac{q}{c} A_\nu(\mathbf{r}) \right] = i\hbar \frac{q}{c} \epsilon_{\mu\nu\lambda} B_\lambda, \quad (\mu, \nu, \lambda = 1, 2, 3)$$

其中  $B_\lambda$  是磁场强度  $\mathbf{B}$  的第  $\lambda$  分量;

(2) 证明第  $j$  个粒子的速度算符  $\mathbf{x}_j$  (见习题 5.4) 的运动方程是经典 Lorentz 方程的量子对应;

(3) 设  $\mathbf{A}$  与  $\Phi$  都与时间无关, 且处于纯粹系综的  $N$  个粒子(在小体积  $V$  内) 的加速度算符  $\ddot{\mathbf{x}}$  的平均值等于零, 试证明上述方程将给出量子 Hall 效应的横向导电率

$$\sigma_{xy} = \frac{J_x}{E_y} = \frac{nqc}{B}, \quad \left(n = \frac{N}{V}\right), \quad (\text{见 } \S 7.2)$$

5.7 在平均场近似下, 由二态原子组成的体系, 其密度矩阵可以用(5.1.17)式来表示:

$$\rho(t) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z(t) & P_+(t) \\ P_-(t) & 1 - P_z(t) \end{pmatrix}, \quad (P_-(t) = P_+^*(t))$$

(1) 试证明体系的熵可以表示为

$$S = k_B \left[ \ln 2 - \frac{1}{2} \ln(1 - P^2) - \frac{P}{2} \ln \frac{1 + P}{1 - P} \right]$$

其中  $P = \sqrt{P_z^2 + P_+ P_-}$ .

(2) 如由于原子与其环境(包括辐射在内)的耦合使  $P(t)$  随时间  $t$  而减小, 请证

明此时  $S$  随  $t$  而增加.

### 参 考 文 献

- [ 1 ] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics* (3rd Ed. ). John Wiley & Sons, Inc. , 1998
- [ 2 ] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics* (Revised Edition). John Wiley & Sons, Inc. , 1994
- [ 3 ] Kerson Huang. *Statistical Mechanics* (2nd Ed. ). Wiley, New York, 1987
- [ 4 ] R. K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Pergamon Press, 1972

## 第六章 量子力学中的相位

量子力学波函数在1926年被发现后,相位的重要性逐步被认识.即使如此,Aharonov-Bohm (A-B)效应(1959)和Berry(贝里)相位(1984)的发现仍然出乎绝大多数物理学家的意料之外.在1984年之前,已有不少科学家通过各种具体的研究,一次次地接近问题的核心.但是他们都擦肩而过,没有能像Berry那样“从特殊到一般”,抓住本质,形成概念的飞跃.即使在1984年以后相当长的一段时间内,物理学工作者中能真正懂得这一相位的“几何性”(即“拓扑性”或“整体性”)的人,恐怕还只占少数.

目前,“量子力学相位”的重要性已受到公认,必然会纳入量子力学(特别是研究生的“高量”)教材,笔者和许多人的经验都一再体会到:“相位”实在太深刻了,太妙了,而一不小心,就可能出错,因此我们郑重建议广大教师和同学重视“相位”,这对研究工作一定大有裨益.

研究量子力学中的“几何相”也是学习现代数学(拓扑学)的捷径.杨振宁教授曾经说过:现代数学的书可以分为两类,一类是看了一页,便看不下去了,另一类是看了一行便看不下去了.这种话只有杨先生敢讲,笔者过去是听(或者看)不懂,而又不敢讲的.后来反复体会,才发现原来是数学家习惯于“从一般到特殊”的思维和叙述方法,而我们学物理的则不习惯的缘故.通过学习和研究“几何相”,我们才逐渐学到一些拓扑学知识,并且学到一些物理与数学的对应(反映在§6.4C中).至于“几何相”更全面的讨论及严格的数学概念和术语,请读者参看更专门的书,如文献[9]、[15]、[16]等.

### §6.1 电磁势和规范变换

在经典物理学中一个粒子用它的位置  $x$  和速度  $\dot{x} = v$  来描写,同时电磁场用电场强度  $E$  和磁场强度  $B$  来描写,  $x, v, E, B$  等都被认为是直接可观察量.到了量子力学,情况发生变化,代替  $v$ , 我们应该考虑动量  $p$ , 并进一步把它用算符  $p = -i\hbar \nabla$  来代替(在位形空间表象中,  $x$  仍是一个普通的  $C$  数).那么,对电磁场的描写又有什么变化呢?

正如把经典力学纳入分析力学的框架后大有教益一样,让我们把存在电磁场情况下的粒子运动也纳入哈密顿力学的形式.一个电荷  $q$  的经典哈密顿量被写出为

$$H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right)^2 + q\phi(\mathbf{x}) \quad (6.1.1)$$

其中电磁场矢势  $\mathbf{A}$  和标势  $\phi$  与  $\mathbf{E}$  和  $\mathbf{B}$  的关系是

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla \phi, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (6.1.2)$$

然后假定正则(哈密顿)方程成立(认为  $H$  是  $(\mathbf{x}, \mathbf{p})$  的函数):

$$\dot{x}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (6.1.3)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial x_i} \quad (6.1.4)$$

由(6.1.3)式给出正则动量

$$p_i = m\dot{x}_i + \frac{q}{c} A_i(\mathbf{x}, t) \quad (6.1.5)$$

代入(6.1.4)对  $t$  求导时注意  $\dot{A}_i = \frac{\partial A_i}{\partial t} + \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \dot{x}_j$ , 则结合(6.1.2)式便给出粒子的 Lorentz 运动方程

$$m\ddot{\mathbf{x}} = q \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right) \quad (6.1.6)$$

由此得到的教益是:经典物理学完全可以从只用  $\mathbf{A}, \phi$  (代替  $\mathbf{E}$  和  $\mathbf{B}$ ) 的哈密顿量(6.1.1)式加上电磁场本身的哈密顿量  $H_{em}$  (也用  $\mathbf{A}, \phi$  来表示,见第四章(4.1.14)式或(4.1.26)式)出发.  $\mathbf{E}, \mathbf{B}$  是四维空间的二阶反对称张量的分量而  $\mathbf{A}, \phi$  组成四维矢量,后者计算起来比较方便,反正结果是等价的.

然而上述情况到了量子力学,便从根本上改观了.用  $\mathbf{A}, \phi$  来代替  $\mathbf{E}, \mathbf{B}$  决不是方便不方便的问题,而是本质上的需要.我们对无自旋荷电粒子在电磁场中运动的薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (6.1.7)$$

中哈密顿算符必须写成(6.1.1)式量子化的形式:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + q\phi \quad (6.1.8)$$

其中  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ , 就是说只含  $\mathbf{A}$  和  $\phi$ , 而不能有与(6.1.6)式对应的含  $\mathbf{E}$  或  $\mathbf{B}$  的方程.当然,当考虑荷电粒子还有内禀磁矩  $\boldsymbol{\mu}$  时,才需要在

(6.1.8)式中加上一项 Pauli 相互作用项  $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ , 才会出现磁场  $\mathbf{B}$ , 如在前面第四、第五章讨论的那样, 不过在本章这里, 我们暂不考虑这一项, 而集中注意(6.1.8)式.

在量子力学中, 对称性的考虑具有头等重要性. 虽然过去已经说像(6.1.8)式那样引入电磁相互作用的原理叫做“最小电磁相互作用原理”, 但现在我们还要进一步问: 这样做有没有更深刻的理由呢?

注意到在(6.1.8)式中  $\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right)$  以一个组合形式出现, 单独的  $\hat{\mathbf{p}}$  或  $\mathbf{A}$  都不出现, 经典力学中的正则动量 (canonical momentum)  $\mathbf{p}$  现在直接量子化为算符  $\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ , 而经典力学中的机械动量  $m\mathbf{v}$  才与量子化后的  $\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) = \hat{\boldsymbol{\Pi}}$  相对应, 我们今后称  $\hat{\boldsymbol{\Pi}}$  为“运动学动量” (kinematical momentum)\*. 这一对比使我们感到: 无论  $\hat{\mathbf{p}}$  或  $\mathbf{A}$  都不可能是非常直观的, 甚至很可能分别是不确定的. 事实果真如此, 我们在电动力学和第四章都讲了电磁势的规范不变性, 一种只涉及  $\mathbf{A}$  的空间坐标的规范变换是

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \Lambda(\mathbf{x}) \quad (6.1.9)$$

我们要求薛定谔方程在这变换下具有不变性 (否则物理规律就变了), 这是办得到的, 只要波函数也相应地作如下的变换:

$$\psi(\mathbf{x}) \rightarrow \psi'(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}) \exp\left[\frac{iq}{\hbar c} \Lambda(\mathbf{x})\right] \quad (6.1.10)$$

方程便变为

$$i\hbar \frac{\partial \psi'}{\partial t} = \left[ \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A}' \right)^2 + q\phi \right] \psi'(\mathbf{x}) \quad (6.1.11)$$

它与原来的(6.1.7、8)式完全等价. 由此可见, 对矢势  $\mathbf{A}$  的规范变换被吸收进入波函数的相角了. 当  $\Lambda(\mathbf{x})$  是  $\mathbf{x}$  的函数时, 称为“定域的 (local) 规范变换”; 当  $\Lambda(\mathbf{x}) = \text{常数}$  时, 则称为“整体 (global) 规范变换”.

薛定谔方程在定域规范变换下的不变性, 是一种对称性. 根据波函数的几率解释, 这一变换不影响可观察量如模的平方:

$$|\psi|^2 \longrightarrow |\psi'|^2 = |\psi|^2 \quad (6.1.12)$$

一般地说, 物理学中一个不可观察量 (这里指波函数的相角) 的对称性

\*  $[\hat{\Pi}_i, \hat{\Pi}_j] = i\hbar \frac{q}{c} \epsilon_{ijk} B_k$ , 当存在磁场时,  $\hat{\boldsymbol{\Pi}}$  的各分量不对易.

变换常常可能导致一个可观察量的守恒定律,或者导致一种选择规则,或者,像在这里,导致一种特殊相互作用的耦合方式.我们可以说,电磁相互作用在量子力学中之所以必须靠  $\mathbf{A}$  来引入,而不是靠直接可观察的  $\mathbf{E}$  和  $\mathbf{B}$  来引入,就是因为空间每一点的波函数总是具有任意的相角变换的自由度,它必须靠  $\mathbf{A}$  的规范变换来吸收掉.换言之,电磁相互作用是靠规范不变性这一对称性原理引入的,因此电磁场是一种规范场. (“规范变换”实际上是“相位变换”,“规范”(gauge)这个名词有“尺度”之意,是历史上最早由 Weyl 引入的词, Weyl 是规范场观念的杰出先驱者).当然,这是一种最简单的规范场. 1954 年杨振宁和 Mills 指出:像 (6.1.10) 式中波函数的相位函数  $\Lambda(\mathbf{x})$  可以不再是一个分量的数,而是一个  $SU(N)$  群表示中的矩阵,与此相应  $\psi(\mathbf{x})$  也成为“列矢矩阵”,这样一来,由于矩阵间的不可对易性,为描述新型相互作用的规范场是“非 Abel(即非可对易的)规范场”(Yang-Mills 场),以区别于电磁场这种 Abel(可对易的)规范场.在物理学的进一步发展证明,不但电磁相互作用,而且弱相互作用、强相互作用,甚至引力相互作用,都是靠各自的规范场来传递的.正如杨振宁所说:“对称性支配相互作用.”\* 规范对称性原理已成为物理学中最基本和最重要的原理之一.

现在我们来证明定态薛定谔方程

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar \nabla - \frac{q\mathbf{A}}{c} \right)^2 \psi + V\psi = E\psi \quad (6.1.13)$$

(假定  $\mathbf{A}$  和  $V$  都不随时间  $t$  而变)的形式解可以写成

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi^{(0)}(\mathbf{x}) \exp \left[ \frac{iq}{\hbar c} \int^{S(\mathbf{x})} \mathbf{A}(\mathbf{x}') \cdot d\mathbf{x}' \right] \quad (6.1.14)$$

其中线积分可相当任意地沿可连续变形的路径  $S(\mathbf{x})$  (端点在  $\mathbf{x}$  点)来作,而  $\psi^{(0)}(\mathbf{x})$  满足方程

$$\frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla)^2 \psi^{(0)} + V\psi^{(0)} = E\psi^{(0)} \quad (6.1.15)$$

证明时只要用代入法并注意

$$\left( -i\hbar \nabla - \frac{q\mathbf{A}}{c} \right) \psi = \exp \left( \frac{iq}{\hbar c} \int^{S(\mathbf{x})} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}' \right) \left[ \left( -i\hbar \nabla - \frac{q\mathbf{A}}{c} \right) \psi^{(0)} \right]$$

---

\* 杨振宁.《科学、教育与中国现代化》.人民日报出版社,1987;《读书教学再十年》(杨振宁文选).时报文化出版企业有限公司,1995.

$$\begin{aligned}
 & + \psi^{(0)} (-i\hbar) \left( \frac{iq}{\hbar c} \right) A(x) \Big] \\
 & = \exp\left( \frac{iq}{\hbar c} \int^{S(x)} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}' \right) (-i\hbar \nabla \psi^{(0)}) \\
 \left( -i\hbar \nabla - \frac{q\mathbf{A}}{c} \right)^2 \psi & = \exp\left( \frac{iq}{\hbar c} \int^{S(x)} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}' \right) (-\hbar^2 \nabla^2 \psi^{(0)})
 \end{aligned}$$

证明完毕. 由此可见, 电磁场矢势  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  的作用确实是对波函数相位进行调制. 于是马上产生问题: 作为一个可以作任意定域规范变换的量,  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  不是直接可观察量, 那么, 什么情况下,  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  的物理效应才成为可观察的呢? 这就是下节要讨论的问题.

## § 6.2 Aharonov-Bohm 效应和磁通量子化

### 6.2A Aharonov-Bohm 效应及其含义

磁场强度  $\mathbf{B}$  与矢势  $\mathbf{A}$  的关系是  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ , 既然在量子力学中非直接可观察的  $\mathbf{A}$  比可直接观察的  $\mathbf{B}$  似乎更基本, 那么设想在空间某个无磁场的区域,  $\mathbf{B} = 0$ , 但  $\mathbf{A} \neq 0$ , 问这时的  $\mathbf{A}$  有没有可观察的效应呢? 为此于 1959 年, Y. Aharonov 和 D. Bohm 建议做一个非常重要的实验, 其装置的示意图如图 6.2.1<sup>[1]</sup> 所示.

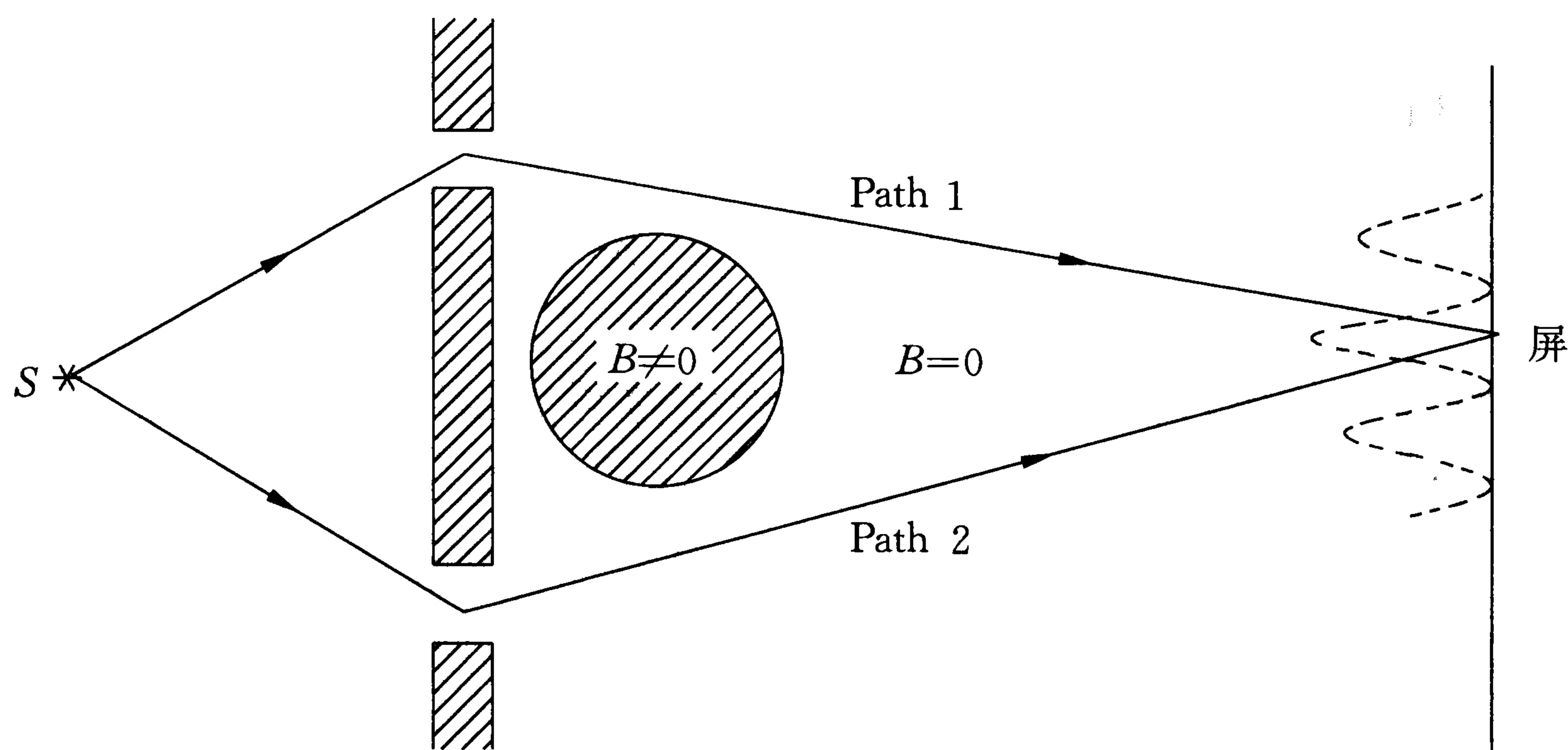


图 6.2.1 Aharonov-Bohm 效应实验装置示意图

从电子枪  $S$  出来的电子束流经双缝后被分成两部分, 一部分沿路径 (Path) 1 运动, 另一部分沿路径 (Path) 2 运动, 然后它们又到屏幕处会合, 发生干涉, 干涉条纹的出现证明电子的波性, 这种实验在 30 年代就已



做过了, A-B 实验的新颖之处在于: 他们在两条路径中放一个载有电流的长螺线管, 管内产生强度为  $B$  沿  $z$  轴(垂直纸面向上)的磁场. 在柱坐标  $(r, \phi, z)$  表示下, 此时的矢势  $\mathbf{A}$  只有沿  $\phi$  方向( $\hat{\phi}$ )的分量:

$$\mathbf{A} = \begin{cases} \hat{\phi} \frac{1}{2} Br, & (r < R) \\ \hat{\phi} \frac{1}{2} B \frac{R^2}{r} = \hat{\phi} \frac{\Phi}{2\pi r}, & (r > R) \end{cases} \quad (6.2.1)$$

( $R$  为螺线管的半径,  $\Phi = \pi R^2 B$  是管内磁通量), 而磁场强度只有沿  $z$  方向( $\hat{z}$ )的分量:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = \hat{z} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r A_\phi) = \begin{cases} B \hat{z}, & (r < R) \\ 0, & (r > R) \end{cases} \quad (6.2.2)$$

注意, 在管外 ( $r > R$ ) 的  $\mathbf{B} = 0$  而  $\mathbf{A} \neq 0$ ! 所以电子无论沿 Path 1、或是沿 Path 2 运动, 都会经过  $\mathbf{A} \neq 0$  的区域. 因此在整个保持相干性的复连通空间, 根据(6.1.14)式, 电子波函数应写成两部分的线性叠加:

$$\begin{aligned} \psi &= \psi_1^{(0)} \exp \left[ \frac{-ie}{\hbar c} \int_{\text{Path 1}}^{\text{S(x)}} \mathbf{A}(\mathbf{x}') \cdot d\mathbf{x}' \right] \\ &+ \psi_2^{(0)} \exp \left[ \frac{-ie}{\hbar c} \int_{\text{Path 2}}^{\text{S(x)}} \mathbf{A}(\mathbf{x}') \cdot d\mathbf{x}' \right] \end{aligned} \quad (6.2.3)$$

(已记  $q = -e < 0$ ) 在屏上一点, 干涉条纹的明暗程度决定于该点处两部分波函数叠加时的相位差  $\delta$  (略写因路程差而引起的相位差):

$$\psi \sim \psi^{(0)} [1 + \exp(i\delta)], \quad |\psi|^2 \sim |\psi^{(0)}|^2 4 \cos^2 \frac{\delta}{2} \quad (6.2.4)$$

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{-e}{\hbar c} \left\{ \int_{\text{Path 2}}^{\text{S(x)}} \mathbf{A}(\mathbf{x}') \cdot d\mathbf{x}' - \int_{\text{Path 1}}^{\text{S(x)}} \mathbf{A}(\mathbf{x}') \cdot d\mathbf{x}' \right\} \\ &= \frac{-e}{\hbar c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x}' = \frac{-e}{\hbar c} \int (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\boldsymbol{\sigma} \\ &= \frac{-e}{\hbar c} \int \mathbf{B} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = \frac{-e}{\hbar c} \Phi \end{aligned} \quad (6.2.5)$$

其中沿 Path 2 的积分减去沿 Path 1 的积分相当于沿闭合路径的线积分, 然后用 Stokes 定理使线积分变为闭合路径包围的面上磁场强度  $\mathbf{B}$  的面积分, 最后表示成为螺线管内的总磁通量  $\Phi$ .

注意, 虽然电子在螺线管外  $\mathbf{B} = 0$  而  $\mathbf{A} \neq 0$  的区域运动, 从经典物理中 Lorentz 力(6.1.6)式的观点看, 电子没有受到力, 但是现在按照

(6.2.4)和(6.2.5)式,量子力学却预告电子在屏上的干涉条纹会受到螺线管内磁通量  $\Phi$  的调制,改变管内电流便可改变干涉图样.

经过 20 多年的怀疑和争论,1986 年的几个实验<sup>[2]</sup>令人信服地证明了 A-B 效应是确实存在的,这个发现大大加深了人们对量子力学以及电磁场的认识.过去经典物理中对电磁场用  $\mathbf{E}$  和  $\mathbf{B}$  来描写,虽然似乎很直观,但实际上漏掉了一些重要的物理信息(例如反映在不能理解 A-B 效应,不理解在  $B = 0$  而  $A \neq 0$  的空间区域,电磁场还是有它的整体效应).那么用矢势  $\mathbf{A}$  和标势  $\phi$ ,或合起来用四维势  $A_\mu = (\mathbf{A}, i\phi)$  来描写电磁场是否更好呢?是好一些,理论本来是需要抽象的.但它们又失之于过分不确定了,这表现在它们有规范变换这一任意性上,后者不是别的,正反映了一种非物理的自由度,也正因如此, $\mathbf{A}$  和  $\phi$  是不可直接观察的.现在从 A-B 效应等实验的结果来看,沿闭合路径的线积分(从三维空间线积分推广到四维空间)

$$\frac{e}{\hbar c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} \longrightarrow \frac{e}{\hbar c} \oint A_\mu dx_\mu, [dx_\mu = (d\mathbf{x}, icdt)] \quad (6.2.6)$$

之所以是重要的,正因为它表达了量子力学波函数的相位差.更确切的说法是吴大峻和杨振宁提出的:不是相位,而是下述相位因子

$$\exp\left(\frac{-ie}{\hbar c} \oint A_\mu dx_\mu\right) \quad (6.2.7)$$

才是描写电磁场最恰当的量,它在物理上既不丢失信息(如  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  那样),也不会有附加的非物理的(不确定的)信息(如  $\mathbf{A}$ ,  $\phi$  那样),他们称这个因子为规范场的不可积相位因子.“不可积”的意思是指它的数值与闭合路径的取法有关,例如在 A-B 实验中,当路径中包含螺线管时,  $\exp\left(\frac{-ie}{\hbar c}\Phi\right) \neq 1$ , 而不包含时它等于 1.

## 6.2B 超导环中的磁通量子化

1911 年昂纳斯发现超导现象,1933 年迈斯纳又从实验上发现:当导体经冷却由正常态过渡到超导态时,原来进入此导体中的磁力线会突然地被完全排斥到导体之外,即超导体内的场强  $\mathbf{B} = 0$ , 超导体成为完全抗磁体,这叫做迈斯纳效应.1957 年 BCS 理论发明后,成功地解释了当时的各种超导现象(在本书第八章有简单介绍),此理论中的一个关键概念是:超导体中的载流子不是单个电子,而是两个动量相反、自旋相反的电子通过交换(晶格振动的)声子而关联起来的“库柏(Cooper)对”,这种关

联是在动量空间的配对关联,在位形空间的关联长度相当长,达到微米的数量级,但从宏观上看,可以当它是一个电荷为 $(-2e)$ 的粒子.

图 6.2.2 是一个原来置于磁场(垂直纸面)中的金属环,当温度降到临界温度以下,此环中出现超导电流流经环的表面,把磁场突然排斥出超导体之外,我们来研究陷在环内的那一部分磁场,证明它的通量是量子化的.

注意在超导体内既没有电流,也无磁场,但有矢势  $\mathbf{A} \neq 0$ , 它是由超导体的表面电流和外磁场的源所产生的. 考虑体内一个电荷  $q$ , 它满足的定态薛定谔方程如(6.1.13)式所示,其解如(6.1.14)

式所示,而且  $\psi^{(0)}$  满足方程(6.1.15)式. 因为  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = 0$ ,  $\mathbf{A}$  是“纯规范”,必可写成为一个标量函数  $\Lambda(\mathbf{x})$  的梯度:  $\mathbf{A} = \nabla \Lambda$ .

取(6.1.14)式中的路径为首尾相接的闭合曲线  $C$  如图 6.2.2 中所示,则对  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  的闭合路径线积分,一方面表示转一圈后  $\Lambda$  的增量  $\Delta\Lambda$ :

$$\oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{x} = \oint_C \nabla \Lambda(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x} = \Delta\Lambda$$

另一方面又表示陷在超导环中的磁通量  $\Phi$  (犹如上小节 A-B 效应中那样). 所以保持量子相干性的 Cooper 对波函数在绕  $C$  转一圈后变为

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi^{(0)}(\mathbf{x}) \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \Delta\Lambda\right) = \psi^{(0)}(\mathbf{x}) \exp\left(\frac{iq}{\hbar c} \Phi\right) \quad (6.2.8)$$

因为这是一个定态波函数,不论转几圈都是允许的,物理上就要求波函数有“单值性”,即

$$\frac{q}{\hbar c} \Phi = 2\pi n, \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots)$$

或

$$\Phi = n \frac{\hbar c}{q}, \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (6.2.9)$$

这意味着陷在超导环中的磁通量  $\Phi$  只能是  $\frac{\hbar c}{q}$  的整数倍! 1961 年 B. S. Deaver 和 W. M. Fairbank 以及 R. Doll 和 M. Näbauer<sup>[3]</sup> 两个研究组在实验上分别测到了这种“磁通量量子化”现象. 但是他们发现作为

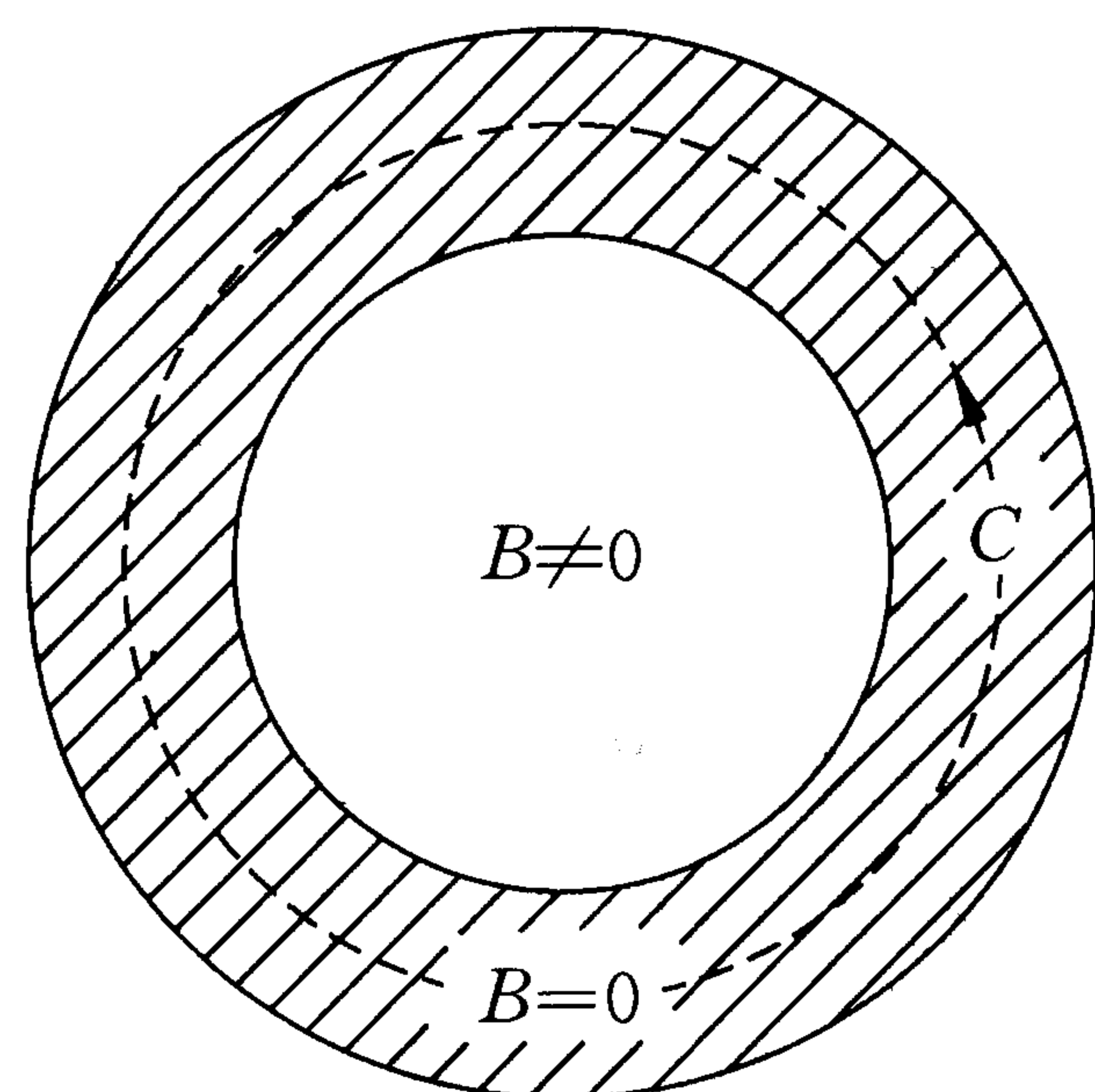


图 6.2.2 陷在一个超导环中的磁通量是量子化的

量子化单位的  $\frac{hc}{q}$  中的  $q$  不等于电子电荷  $e$ , 而等于  $e$  的 2 倍:  $q = 2e$  (只记绝对值). 换言之,

$$\Phi = n\phi'_0, \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (6.2.10)$$

其中  $\phi'_0 = \frac{hc}{2e} = 2.07 \times 10^{-11} \text{ Tesla} \cdot \text{cm}^2$  是超导环内的单位磁通. 这一事实正好证明了 BCS 理论中关于“Cooper 对” ( $q = -2e$ ) 的真实性.

最后说明, 并非任何温度任何环内的磁通量都是量子化的. 例如 A-B 效应中螺线管内的磁通量便可以随电流连续地变化. 此一问题的深入讨论请参见杨振宁和 Byers 的文章<sup>[4, 5]</sup>. 此外, 磁通量子化与第四章讨论的电磁场量子化没有关系.

## § 6.3 绝热近似与 Berry 相因子

### 6.3A 绝热近似

我们来考虑量子力学一类问题, 设哈密顿量包含两族变量,  $\mathbf{r}$  和  $\mathbf{R}(t)$ ,  $\mathbf{r}$  描写粒子的快速运动, 可以是粒子的空间坐标, 但也可以不是, 称  $\mathbf{r}$  为“快变量”, 而  $\mathbf{R}(t)$  则描写一种调制快变量的某种随时间  $t$  而缓慢变化的参量, 称  $\mathbf{R}(t)$  为“慢变量”. 举例说, 如  $\mathbf{r}$  是电子在双原子分子中的坐标,  $\mathbf{R}(t)$  是两个原子间的距离, 它在原子振动时会变化, 但比电子运动慢得多; 又如  $\mathbf{R}(t)$  可能是外界缓慢变化的磁场, 等等(参见文献[6, 7]).

我们的目的是求解含时间的薛定谔方程, 以  $|\psi(t)\rangle$  表示待定的态矢量:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(\mathbf{R}(t)) |\psi(t)\rangle \quad (6.3.1)$$

当参数  $\mathbf{R}$  与时间  $t$  无关时, 我们有本征方程

$$H(\mathbf{R}) |n, \mathbf{R}\rangle = E_n(\mathbf{R}) |n, \mathbf{R}\rangle \quad (6.3.2)$$

其中  $|n, \mathbf{R}\rangle$  和  $E_n(\mathbf{R})$  分别为本征态矢和能量本征值. 当  $\mathbf{R}(t)$  缓慢变化时, 对某一瞬时  $t$ , 我们仍可取  $|n, \mathbf{R}(t)\rangle$  为一个“基矢”而写出瞬时的本征方程:

$$H(\mathbf{R}(t)) |n, \mathbf{R}(t)\rangle = E_n(\mathbf{R}(t)) |n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (6.3.3)$$

而基矢的完备正交性表示为

$$\langle n, \mathbf{R}(t) | m, \mathbf{R}(t) \rangle = \delta_{nm} \quad (6.3.4)$$

因此方程(6.3.1)在  $t$  时刻之解总可用  $|n, \mathbf{R}(t)\rangle$  展开为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(\mathbf{R}(t'))\right] |n, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (6.3.5)$$

将这个“假设”(Ansatz)代入(6.3.1)式,我们得到

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(\mathbf{R}(t'))\right] \left(\dot{a}_n + \frac{1}{i\hbar} a_n E_n + a_n \frac{\partial}{\partial t}\right) |n, \mathbf{R}(t)\rangle \\ = \sum_n a_n(t) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(\mathbf{R}(t'))\right] H(\mathbf{R}(t)) |n, \mathbf{R}(t)\rangle \end{aligned}$$

用(6.3.3)式后,左、右消去一项,得

$$\sum_n \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(\mathbf{R}(t'))\right] \left(\dot{a}_n + a_n \frac{\partial}{\partial t}\right) |n, \mathbf{R}(t)\rangle = 0$$

上式左乘  $\langle m, \mathbf{R}(t) | \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_m(\mathbf{R}(t'))\right]$ , 利用(6.3.4)式乃得

$$\begin{aligned} \dot{a}_m(t) = - \sum_n a_n(t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [E_m(\mathbf{R}(t')) - E_n(\mathbf{R}(t'))]\right\} \\ \times \left\langle m, \mathbf{R}(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n, \mathbf{R}(t) \right\rangle \quad (6.3.6) \end{aligned}$$

为计算最后那个对基矢的时间微商,让我们对(6.3.3)式求导:

$$\frac{\partial H}{\partial t} |n, \mathbf{R}(t)\rangle + H \frac{\partial}{\partial t} |n, \mathbf{R}(t)\rangle = \frac{\partial E_n}{\partial t} |n, \mathbf{R}(t)\rangle + E_n \frac{\partial}{\partial t} |n, \mathbf{R}(t)\rangle$$

左乘  $\langle m, \mathbf{R}(t) |$  并利用(6.3.4)式,便可求得(对  $m \neq n$ )

$$\left\langle m, \mathbf{R}(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n, \mathbf{R}(t) \right\rangle = \frac{\left\langle m, \mathbf{R}(t) \left| \frac{\partial H}{\partial t} \right| n, \mathbf{R}(t) \right\rangle}{E_n(\mathbf{R}(t)) - E_m(\mathbf{R}(t))}, \quad (m \neq n) \quad (6.3.7)$$

代回(6.3.6)式,分出  $m = n$  项,有

$$\begin{aligned} \dot{a}_m(t) = -a_m(t) \left\langle m, \mathbf{R}(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m, \mathbf{R}(t) \right\rangle \\ - \sum_{n \neq m} a_n(t) \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [E_m(t') - E_n(t')]\right\} \frac{\left\langle m, \mathbf{R}(t) \left| \frac{\partial H}{\partial t} \right| n, \mathbf{R}(t) \right\rangle}{E_n(t) - E_m(t)} \quad (6.3.8) \end{aligned}$$

以上在形式上是严格解,下面要做一种所谓“绝热近似”,它归结为假定

(要求):

$$\left\langle m, \mathbf{R}(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| n, \mathbf{R}(t) \right\rangle = 0, \quad (m \neq n) \quad (6.3.9)$$

则方程(6.3.8)便简化为

$$\dot{a}_m(t) = -a_m(t) \left\langle m, \mathbf{R}(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m, \mathbf{R}(t) \right\rangle \quad (6.3.10)$$

上述“绝热近似”的物理意义(猜测)是:当慢变量  $\mathbf{R}(t)$  变化足够慢(绝热地变化)时,即当  $\left| \frac{d\mathbf{R}}{dt} \right| / |\mathbf{R}| \ll \omega_{mn} = \frac{(E_n - E_m)}{\hbar}$  时,我们可以忽略从  $m \rightarrow n$  态的跃迁而期望体系仍待在原来的(虽然一直在缓慢地变化着的)态  $m$ :  $|m, \mathbf{R}(0)\rangle \rightarrow |m, \mathbf{R}(t)\rangle$ . 这个“绝热近似”假定的合理性或有效性的范围,我们将在下节讨论. 现在既已略去(6.3.8)式后面  $m \neq n$  的项,便可直接积分而得到

$$a_m(t) = \exp\left[-\int_0^t dt' \left\langle m, \mathbf{R}(t') \left| \frac{\partial}{\partial t'} \right| m, \mathbf{R}(t') \right\rangle\right] a_m(0) \quad (6.3.11)$$

其中初条件为  $a_m(0) = 1$ . 对(6.3.4)式 ( $m = n$ ) 求时间的偏微商:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \langle m, \mathbf{R}(t) | \right) |m, \mathbf{R}(t)\rangle + \left\langle m, \mathbf{R}(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m, \mathbf{R}(t) \right\rangle = 0$$

因左端第一项等于  $\left\langle m, \mathbf{R}(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m, \mathbf{R}(t) \right\rangle^*$ , 所以

$$\operatorname{Re} \left\langle m, \mathbf{R}(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| m, \mathbf{R}(t) \right\rangle = 0 \quad (6.3.12)$$

由此可见(6.3.11)式中的指数内的被积函数是纯虚数,可记为

$$a_m(t) = \exp[i\gamma_m(t)], \quad (6.3.13)$$

其中  $\gamma_m(t)$  是实数,

$$\gamma_m(t) = i \int_0^t dt' \left\langle m, \mathbf{R}(t') \left| \frac{\partial}{\partial t'} \right| m, \mathbf{R}(t') \right\rangle \quad (6.3.14)$$

于是在绝热近似下,(6.3.5)式之解可表达为

$$|\psi(t)\rangle = \exp[i\gamma_m(t)] \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_m(\mathbf{R}(t'))\right] |m, \mathbf{R}(t)\rangle \quad (6.3.15)$$

现在的问题是：这个相角  $\gamma_m(t)$  有什么物理意义呢？在 1984 年之前，除了极少数作者在文章中模糊地感到它不可随便忽略外，绝大多数作者都明确地认为它是无足轻重的，可以放心地令  $\gamma_m = 0$ 。因为这个带有任意性的相角总可以被吸收进态矢的定义式之内（一个线性齐次方程的解只准确到一个任意常数系数）。但下面我们将看到上述观点是错误的，因为定义一次是可以的，而当态矢在运动中回到希尔伯特空间的出发点时，一般第二次再任意定义就不可以了。

### 6.3B Berry 的发现

可是 1984 年 Berry 在一篇非常出色的文章<sup>[8]</sup>中明确地指出：这个  $\gamma_m(t)$  不可轻易略去，它有重要而深刻的物理意义，而且是可能被观察到的。为此要考察慢变量  $\mathbf{R}(t)$  在它自身的“参数空间”沿闭合路径  $C$  转一圈，在  $t = T$  时刻回到出发点的情形： $\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$ 。注意  $|n, \mathbf{R}(t)\rangle$  仅通过  $\mathbf{R}(t)$  才依赖于  $t$ ，故 (6.3.14) 式在  $t = T$  时等于

$$\begin{aligned}\gamma_m(C) &= i \int_0^T dt \frac{d\mathbf{R}(t)}{dt} \langle m, \mathbf{R}(t) | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R}(t) \rangle \\ &= i \oint_C d\mathbf{R} \cdot \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle\end{aligned}\quad (6.3.16)$$

积分是在  $\mathbf{R}$  空间沿闭合曲线  $C$  作的， $t$  可视为其上的参数。

Berry 接着引入一个  $\mathbf{R}$  空间的“矢势”：

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}) = i \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle \quad (6.3.17)$$

$$\gamma_m(C) = \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) \quad (6.3.18)$$

利用  $\mathbf{R}$  空间的 Stokes 定理，上面线积分便可化为曲线  $C$  所包围的曲面  $S$  上的面积分（ $d\mathbf{S}$  表示微小面元矢量）

$$\gamma_m(C) = \int_S d\mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) \quad (6.3.19)$$

$$= \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V}, \quad (\mathbf{V} = \nabla \times \mathbf{A}) \quad (6.3.20)$$

这里引入旋度记号，因为下面讨论的  $\mathbf{R}$  空间都是三维的，像普通空间一样。

到了这里，问题与电磁学十分相似了。假如  $\mathbf{A}$  可以表成为一个标量函数  $\phi$  的梯度， $\mathbf{A} = \nabla\phi$ ，而  $\phi$  又到处无奇性的话，这个  $\gamma_m(C)$ （以后称为“Berry 相”）必定为零，这相当于在电磁学中“ $\mathbf{A}$  是纯规范”的情形，是平凡

的(trivial)不令人感兴趣的情况. 下面将看到, 当不平凡的情况(Berry 相不为零)出现时,  $\mathbf{R}$  空间的“磁场” $\mathbf{V}$  居然会呈现一种有奇性的“磁单极”组态(而在普通空间迄今从未发现过“磁单极”).

让我们在三维  $\mathbf{R}$  空间作计算 (记  $\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial R_i}$ ):

$$\begin{aligned} (\nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A})_i &= i(\nabla_{\mathbf{R}} \times \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle)_i \\ &= i\epsilon_{ijk} \partial_j (\langle m, \mathbf{R} | \partial_k | m, \mathbf{R} \rangle) \\ &= i\epsilon_{ijk} (\partial_j \langle m, \mathbf{R} |) (\partial_k | m, \mathbf{R} \rangle) \\ &= i(\nabla_{\mathbf{R}} \langle m, \mathbf{R} |) \times (\nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle)_i \end{aligned}$$

故 Berry 相可以表成

$$\begin{aligned} \gamma_m(C) &= i \int_S d\mathbf{S} \cdot [(\nabla_{\mathbf{R}} \langle m, \mathbf{R} |) \times (\nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle)] \\ &= \sum_n i \int_S d\mathbf{S} \cdot [(\nabla_{\mathbf{R}} \langle m, \mathbf{R} |) | n, \mathbf{R} \rangle \times \langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle] \end{aligned} \quad (6.3.21)$$

其中插入了完备性公式  $\sum_n | n, \mathbf{R} \rangle \langle \mathbf{R}, n | = I$ ,  $I$  是单位矩阵. 进一步化简时先注意(6.3.21)式中带有对角元 ( $m = n$ ) 的一项是等于零的, 证明如下:

由(6.3.4)式 ( $n = m$ ) 有类似于(6.3.12)的性质, 即

$$\begin{aligned} (\nabla_{\mathbf{R}} \langle m, \mathbf{R} |) | m, \mathbf{R} \rangle + \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle &= 0 \\ \operatorname{Re} \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (6.3.22)$$

故

$$\begin{aligned} &(\nabla_{\mathbf{R}} \langle m, \mathbf{R} |) | m, \mathbf{R} \rangle \times \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle \\ &= - \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle \times \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle \\ &= \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle \times (\nabla_{\mathbf{R}} \langle m, \mathbf{R} |) | m, \mathbf{R} \rangle \\ &= - (\nabla_{\mathbf{R}} \langle m, \mathbf{R} |) | m, \mathbf{R} \rangle \times \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle = 0 \end{aligned}$$

证毕. 因此在(6.3.21)式中只需对  $n \neq m$  的非对角元求和, 为此写出  $n = m$  时之(6.3.3)式, 对它作梯度运算:

$$\begin{aligned} &(\nabla_{\mathbf{R}} H) | m, \mathbf{R} \rangle + H \nabla_{\mathbf{R}} (| m, \mathbf{R} \rangle) \\ &= (\nabla_{\mathbf{R}} E_m(\mathbf{R})) | m, \mathbf{R} \rangle + E_m(\mathbf{R}) (\nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle) \end{aligned}$$



左乘  $\langle n, \mathbf{R} |$  后用(6.3.3)和(6.3.4)式, 即得

$$\langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle = \frac{\langle n, \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} H) | m, \mathbf{R} \rangle}{E_m(\mathbf{R}) - E_n(\mathbf{R})}, \quad (n \neq m)$$

类似地有

$$(\nabla_{\mathbf{R}} \langle m, \mathbf{R} |) | n, \mathbf{R} \rangle = \frac{\langle m, \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} H) | n, \mathbf{R} \rangle}{E_m(\mathbf{R}) - E_n(\mathbf{R})}, \quad (n \neq m)$$

将这两个式子代入(6.3.21)式, 便得到

$$\gamma_m(C) = - \int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V}_m(\mathbf{R}) \quad (6.3.23)$$

$$\mathbf{V}_m(\mathbf{R}) \equiv \text{Im} \sum_{n \neq m} \frac{\langle m, \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} H) | n, \mathbf{R} \rangle \times \langle n, \mathbf{R} | (\nabla_{\mathbf{R}} H) | m, \mathbf{R} \rangle}{(E_m(\mathbf{R}) - E_n(\mathbf{R}))^2} \quad (6.3.24)$$

其中利用了(6.3.16)中  $\langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | m, \mathbf{R} \rangle$  是纯虚数(见(6.3.22)式)的性质。(6.3.23)式的意义是:  $\gamma_m(C)$  可表达为穿过闭合曲线  $C$  的“磁场强度”  $\mathbf{V}_m(\mathbf{R})$  的“磁通量”(之负值)。下面马上会看到这个磁通量竟像是从  $\mathbf{R}$  空间中一个“磁单极子”发出来的, 对某个  $n$ , 这个“磁单极”位于  $\mathbf{R}^*$ , 它就是(6.3.24)式中使分母为零的点,  $E_m(\mathbf{R}^*) = E_n(\mathbf{R}^*)$ , 亦即本征能级在  $\mathbf{R}$  空间交叉(能量简并)的点。

**例** 自旋  $\frac{1}{2}$  的粒子在外磁场  $\mathbf{R}(t) \equiv \mathbf{B}(t) = (X(t), Y(t), Z(t))$  中的运动。设粒子磁矩为  $\mu\boldsymbol{\sigma}$ , 则哈密顿量是

$$H(\mathbf{R}(t)) = -\mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{R}(t) = -\mu \begin{pmatrix} Z(t) & X(t) - iY(t) \\ X(t) + iY(t) & -Z(t) \end{pmatrix} \quad (6.3.25)$$

能量本征值  $E(\mathbf{R})$  容易由本征方程 ( $\tilde{E} = E/(-\mu)$ )

$$\begin{vmatrix} Z - \tilde{E} & X - iY \\ X + iY & -Z - \tilde{E} \end{vmatrix} = 0$$

解出, 等于

$$E_{\pm}(\mathbf{R}) = \pm \mu \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2} = \pm \mu R \quad (6.3.26)$$

其中  $R = |\mathbf{R}|$ , 因此  $\mathbf{R}$  空间能级简并发生在原点  $R = 0$ 。

现在(6.3.24)式中易见

$$\nabla_{\mathbf{R}} H(\mathbf{R}) = -\mu\boldsymbol{\sigma} \quad (6.3.27)$$

如果假设初态是瞬时 ( $t = 0$ ) 本征态  $|-\rangle$ , 表示那时的自旋反着  $\mathbf{R}(0)$  方向, 则我们在(6.3.24)式中只遇到一项:

$$\frac{\langle - | (\nabla_{\mathbf{R}} H) | + \rangle \times \langle + | (\nabla_{\mathbf{R}} H) | - \rangle}{(E_- - E_+)^2} \quad (6.3.28)$$

其中  $|+\rangle$  和  $|-\rangle$  都是对  $\mathbf{R}(t)$  的瞬时本征态, 以(6.3.27)式代入上式, 注意到  $\sigma_z |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle$ ,  $\sigma_x |\pm\rangle = |\mp\rangle$ ,  $\sigma_y |\pm\rangle = \pm i |\mp\rangle$ ,  $\langle + | - \rangle = 0$ ,  $\langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1$ , 则(6.3.28)式的分子只有  $z$  分量不为零, 而是等于  $\mu^2 (\langle - | \sigma_x | + \rangle \langle + | \sigma_y | - \rangle - \langle - | \sigma_y | + \rangle \langle + | \sigma_x | - \rangle) = -2i\mu^2$ , 代回(6.3.24), 注意  $(E_+ - E_-) = 2\mu R$ , 得

$$\mathbf{V}_-(\mathbf{R}) = -\frac{\mathbf{R}}{2R^3} \quad (6.3.29)$$

$\mathbf{V}$  的脚标表示初态为  $|-\rangle$ , 类似地当初态为  $|+\rangle$  时, 有

$$\mathbf{V}_+(\mathbf{R}) = +\frac{\mathbf{R}}{2R^3} \quad (6.3.30)$$

正如 Berry 所指出的那样, 上述两式表示了在  $\mathbf{R}$  空间原点处有强度为  $\pm \frac{1}{2}$  单位的“磁单极”存在,  $R = 0$  这一点的奇性正是由于能级的简并  $E_+(0) = E_-(0)$  所引起的. 于是 Berry 相又可表成

$$\gamma_{\pm}(C) = -\int_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V}_{\pm}(\mathbf{R}) = \mp \frac{1}{2} \Omega(C) \quad (6.3.31)$$

其中  $\Omega(C)$  是闭合曲线  $C$  对参量空间原点 ( $R = 0$ ) 所张的立体角.

我们可以把上述结果用更明显的式子写出来, 设旋转磁场  $\mathbf{R}(t)$  在空间固定坐标系中绕  $z$  轴以固定夹角  $\theta$  进动, 周期  $T = \frac{2\pi}{\omega}$ , 则

$$\mathbf{R}(t) = R(\sin\theta\cos\phi(t), \sin\theta\sin\phi(t), \cos\theta) \quad (6.3.32)$$

其中  $\phi(t) = \omega t$ , 则沿瞬时  $\mathbf{R}(t)$  方向极化的自旋态  $|\uparrow, \mathbf{R}\rangle$  是本征方程

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{R}(t) |\uparrow, \mathbf{R}\rangle = R |\uparrow, \mathbf{R}\rangle \quad (6.3.33)$$

的解, 因

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{R} = R \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \exp(-i\phi) \\ \sin\theta \exp(i\phi) & -\cos\theta \end{bmatrix}$$

用代入法易证

$$|\uparrow, \mathbf{R}\rangle = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \exp[i\phi(t)] \end{pmatrix} \quad (6.3.34)$$

以此代入(6.3.14)式,我们得到

$$\begin{aligned} \gamma_{\uparrow}(t) &= i \int_0^t dt' \left\{ \cos \frac{\theta}{2}, \sin \frac{\theta}{2} \exp[-i\phi(t')] \right\} \begin{pmatrix} 0 \\ i \dot{\phi}(t') \sin \frac{\theta}{2} \exp[i\phi(t')] \end{pmatrix} \\ &= -\frac{1}{2} (1 - \cos\theta) \int_0^t dt' \frac{d\phi}{dt'} \end{aligned}$$

令  $t = T$ , 即得 Berry 相

$$\gamma_{\uparrow}(C) = -\frac{1}{2} (1 - \cos\theta) 2\pi = -\frac{1}{2} \Omega(C) \quad (6.3.35)$$

这正与(6.3.31)式符合,证毕.

Berry 相用参数空间的一个立体角来表达,显示了它的“几何性”. 最后还要强调说明:这里曲线  $C$  的闭合性(慢参数经时间  $T$  还原)是极其关键的,不然的话,波函数的相位可以做一个规范(相位)变换变掉,没有直接观察效应.

### 6.3C 再论 Aharonov-Bohm 效应

Berry 引入“矢势” $\mathbf{A}$ (6.3.17)式)时,当然想到了电磁势,因此他的文章中接下来便讨论 Aharonov-Bohm (A-B)效应的一种新的导出方式.

设沿  $z$  轴方向有一很窄的磁通量管(通量为  $\Phi$ ),离开它距离  $\mathbf{R}$  远处有一密闭的小箱子(不被磁通量所穿透),箱内装有一个荷电  $q$  的粒子,它从磁通量管(固定坐标系)测量的坐标为  $\mathbf{r}$ .  $\mathbf{r}$  是问题中的“快变量”,而  $\mathbf{R}$  相当于前面 Berry 定义的“慢变量”.下面我们来证明:当小箱子绕磁通量管沿闭合曲线  $C$  转一圈,粒子将获得一个附加相位

$$\gamma_n(C) = \frac{q}{\hbar c} \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) = \frac{q}{\hbar c} \Phi \quad (6.3.36)$$

这里的  $\mathbf{A}(\mathbf{R})$  确实是由  $\Phi$  产生的电磁势,而与(6.3.18)比较可见,它也是一个 Berry 相.

证明中第一步是注意当  $\Phi = 0$  ( $\mathbf{A} = 0$ ) 时,粒子在箱内的哈密顿量是正则动量  $\mathbf{p}$  和位置  $\mathbf{r}' = (\mathbf{r} - \mathbf{R})$  的函数:  $H = H(\mathbf{p}, \mathbf{r} - \mathbf{R})$ , 相应于定态

能量为  $E_n$  的本征波函数为  $\psi_n(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ ,  $E_n$  与  $\mathbf{R}$  是无关的.

第二步考虑曲线  $C$  中有磁通量  $\Phi$  穿过, 因此空间  $\mathbf{A} \neq 0$ , 描写粒子定态  $|n, \mathbf{R}\rangle$  的薛定谔方程变为 ( $E_n$  不受矢势的影响):

$$H\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}), \mathbf{r} - \mathbf{R}\right) |n, \mathbf{R}\rangle = E_n |n, \mathbf{R}\rangle \quad (6.3.37)$$

在(6.1.14)式中说明: 满足方程(6.3.37)式的波函数可以因式化如下:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | n, \mathbf{R} \rangle &= \exp\left\{\frac{iq}{\hbar c} \int_{\mathbf{R}}^{\mathbf{r}} d\mathbf{r}' \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}')\right\} \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \\ &\equiv \exp[i\Theta(\mathbf{r})] \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \end{aligned} \quad (6.3.38)$$

( $\equiv$ 表示定义或“记为”之意), 现在让我们把小箱子平移地绕磁通量管转一圈(速度快慢是无关紧要的), 按照公式(6.3.16)来计算 Berry 相:

$$\begin{aligned} \langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle &= \int d^3\mathbf{r} \langle n, \mathbf{R} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle \\ &= \int d^3\mathbf{r} \exp(-i\Theta) \psi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \nabla_{\mathbf{R}} \{ \exp[i\Theta(\mathbf{r})] \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \} \\ &= \int d^3\mathbf{r} \exp(-i\Theta) \psi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \left[ -\frac{iq}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \right. \\ &\quad \left. \exp(i\Theta) \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + \exp(i\Theta) \nabla_{\mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \right] \\ &= -\frac{iq}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{R}) + \int d^3\mathbf{r} \psi_n^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \nabla_{\mathbf{R}} \psi_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \end{aligned}$$

在第二项中作变换  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{R}$ , 即见它等于  $\int d^3\mathbf{r} \langle n | \mathbf{r} \rangle \nabla_{\mathbf{R}} \langle \mathbf{r} | n \rangle = \nabla_{\mathbf{R}} \langle n | n \rangle = 0$ , 于是从(6.3.16)式( $m \rightarrow n$ )给出(6.3.36)式, 这就是所要证明的.

所以在一定意义上可以说 A-B 效应也是一种 Berry 相, 但是注意两点:

(1) A-B 相(6.3.36)式的数值不受闭合曲线  $C$  连续形变的影响, 只要形变时始终保持磁通量管在  $C$  之内即可(A-B 相并不是正比于一个立体角, 而是正比于磁通量). 因此有时说 A-B 相具有“拓扑性”, “拓扑”两字含有“整体几何性质”的意思, “整体性”当然与“局域性”有区别, 不过我们今后将不十分区别“拓扑性”、“几何性”与“整体性”这 3 个词, 请参见李华钟的书<sup>[9]</sup>.

(2) 从证明过程可见, A-B 相(6.3.36)式成立的条件并不与我们搬动小箱子时的速度快慢有什么关系, 也就是说, A-B 效应是严格的结果, 并不需要什么绝热近似的条件.

## § 6.4 二态体系中的几何相问题

## 6.4A 动力学相和几何相

我们在第一章已介绍过自旋这个二态体系,现在要进一步强调两点.一方面,从实际应用看,二态体系很多,不但有自旋,还有 MASER(受激辐射的微波放大器)中的氨( $\text{NH}_3$ )分子在二态间的跃迁,光学中一束光的两种极化态(如左右两种圆偏振态),分子物理中的氢分子( $\text{H}_2$ )问题,以及高能物理中两种中性  $K$  介子问题等等(参见[10]).另一方面,从理论上讲,二态体系是最简单的量子体系,较易或较有希望求得它的严格解,同时它又是最典型的量子性质最强的体系,几乎可以说它没有经典对应.物理学研究的经验一再表明:最简单最典型的模型往往是最重要的,有时候它会告诉我们最多的东西.

在相当一般的条件下,二态问题可以用如下的哈密顿量来描述

$$H(t) = \Delta(t)(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2|) + Z(t)|2\rangle\langle 1| + Z^*(t)|1\rangle\langle 2| \quad (6.4.1)$$

其中只出现两个态  $|1\rangle$  和  $|2\rangle$ ,  $2\Delta$  表示不计它们耦合相互作用  $Z(t)$  时二态间的能量差,  $Z(t)$  会引起它们之间的跃迁.当能级劈裂也是由外场所引起的时候,  $\Delta(t)$  和  $Z(t)$  都可以是时间  $t$  的显函数.

我们也可以记  $|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $|2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , 将(6.4.1)式改写为

$$H(t) = \Delta(t)\sigma_z + Z(t)\sigma_- + Z^*(t)\sigma_+ \quad (6.4.2)$$

这里用了 Pauli 矩阵,  $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ ,  $\sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ , 我们

还可以进一步把(6.4.2)式简写为  $(\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y))$ :

$$H(t) = \frac{1}{2}g\mu\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (6.4.3)$$

$$\text{以使得} \begin{cases} \Delta(t) = \frac{1}{2}g\mu B_z(t) \\ Z(t) = \frac{1}{2}g\mu[B_x(t) + iB_y(t)] \equiv Z_1(t) + iZ_2(t) \end{cases} \quad (6.4.4)$$

可见任何一个“二态体系”都等价于一个自旋  $\frac{1}{2}$  的粒子在随时间变化的外磁场  $\mathbf{B}(t)$  中的问题. 假如(6.4.3)描写一个电子,  $\mu$  是玻尔磁子  $\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)$ , 则  $g = 2$  (见第一章).

现在我们来求解薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad (6.4.5)$$

一个任意的态矢量  $|\psi(t)\rangle$  总可以表示为一个二分量的列矢量  $\begin{pmatrix} a + ib \\ c + id \end{pmatrix}$ , 其中含有 4 个实参数, 考虑归一化条件作为一个约束之后, 剩下 3 个自由度. 仿照(1.1.21)式引入一个极化矢量  $\mathbf{P}$ , 它定义为  $\boldsymbol{\sigma}$  在态  $|\psi(t)\rangle$  中的平均值:

$$\mathbf{P} = \langle \psi(t) | \boldsymbol{\sigma} | \psi(t) \rangle \quad (6.4.6)$$

单位长度的  $\mathbf{P}$  是单位球面上两个角度  $(\theta, \phi)$  的函数, 于是  $|\psi(t)\rangle$  还剩下一个自由度便表现为  $|\psi(t)\rangle$  的总相位角, 记它为  $f(t)$ , 则可写出

$$|\psi(t)\rangle = \exp[if(t)] |\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (6.4.7)$$

$$\mathbf{P}(\theta, \phi) = \langle \tilde{\psi}(t) | \boldsymbol{\sigma} | \tilde{\psi}(t) \rangle \quad (6.4.8)$$

表明  $|\tilde{\psi}(t)\rangle$  与  $\mathbf{P}(\theta, \phi)$  之间有一一对应的关系. 具体地说, 如记

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = |\omega(\theta, \phi)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta(t)}{2} \\ \sin \frac{\theta(t)}{2} \exp[i\phi(t)] \end{pmatrix} \quad (6.4.9)$$

则它是下面这个本征方程

$$\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma} |\omega(\theta, \phi)\rangle = |\omega(\theta, \phi)\rangle \quad (6.4.10)$$

之解(比较(6.3.33)式).

量子力学中常说归一化的  $|\psi(t)\rangle$  张成一个 Hilbert 空间  $\mathcal{H}$ , 记成  $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$ . 则称  $|\tilde{\psi}(t)\rangle$  张成一投影的 Hilbert 空间或“射线(Ray)空间”  $\mathcal{R}$ , 记成  $|\tilde{\psi}(t)\rangle \in \mathcal{R} = \mathcal{H}/\sim$ . 记号  $/\sim$  表示在  $|\psi(t)\rangle$  中只差一个(总)相位的态在  $|\tilde{\psi}(t)\rangle$  中将被视为等同的态(这个相位被“抹”(mod)掉了). 由上述可见, Ray 空间是由两个实参数  $(\theta, \phi)$  标志的单位球面  $S^2$  (上标 2 表示

球面是二维曲面),有时在自旋问题中叫做 Bloch 球面,在光学极化态问题中则叫做 Poincare 球面.

现在来研究隐藏在这个二态体系运动中的几何相问题<sup>[11]</sup>. 假设从  $t = 0$  开始经过时间  $T$  后,体系回复(cyclic),意思是  $\mathbf{P}$  矢量在球面上的位置还原:

$$|\psi(T)\rangle = \exp(i\alpha) |\psi(0)\rangle, \quad |\tilde{\psi}(T)\rangle = |\tilde{\psi}(0)\rangle \quad (6.4.11)$$

注意(6.4.7)式,  $f(T) - f(0) = \alpha$ , 将(6.4.7)式代入方程(6.4.5). 左乘  $\langle\psi(t)|$ , 对  $t$  从  $0 \rightarrow T$  积分, 即见

$$\alpha = \delta + \beta \quad (6.4.12)$$

其中

$$\delta = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T \langle\psi(t)| H(t) |\psi(t)\rangle dt \quad (6.4.13)$$

$$\beta = \int_0^T \langle\tilde{\psi}(t)| i \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle dt \quad (6.4.14)$$

$\delta$  叫做“动力学相”,它是量子力学建立后大家很快就熟悉的,在“绝热近似”下,  $\langle H(t)\rangle = E(t)$ ,  $\delta = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T E(t) dt$ . 新的(一直被大家忽视的)东西是  $\beta$  这个“几何相”,因为有了 Berry 相,大家才开始理解它. 试比较(6.4.14)式和(6.3.14)式,两者十分相似,不过那里为计算“绝热近似”下的 Berry 相,要求体系追随外参量  $\mathbf{R}(t)$  (慢变量)的运动,后者沿闭合路径回复原状  $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(T)$ , 对时间  $t$  的微商是对  $\mathbf{R}$  作的,而这里对一般的非绝热近似情形下计算几何相  $\beta$  时,则要求态  $|\tilde{\psi}(t)\rangle$  在外场驱动下运动还原,见(6.4.11)式,而对  $t$  的微商是对 Ray 空间坐标(这里是  $\theta, \phi$ )作的(见下). 当然,对一个具体的二态体系,几何相的绝热近似极限应该给出 Berry 相. 因此文献上有时也称几何相  $\beta$  为“非绝热的 Berry 相”或“Aharonov-Anadan (A-A)相”<sup>[11]</sup>.

由上述可见,为计算几何相  $\beta$ ,要解决两个问题:

- (1) 回复(cyclic)条件(6.4.11)式如何实现?
- (2) 怎样在 Ray 空间中方便地计算  $\beta$  之值?

下面依次讨论这两个问题.

### 6.4B 演化算符的么正矩阵法

薛定谔方程(6.4.5)的形式解可以用演化算符  $\hat{U}(t)$  表出如下:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle \quad (6.4.15)$$

$$\hat{U}(t) = \hat{T} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(t') dt'\right\} \quad (6.4.16)$$

见(1.3.31)式( $\hat{T}$ 是编时算符). 对一般的量子体系, 因为算符 $\hat{H}(t')$ 在不同时刻的不可对易性, 这个解不过是个形式解, 没有严格的封闭的解析表达式. 但对于“二态体系”, 我们能严格地求出 $\hat{U}(t)$ 来. 作为一个么正算符, 它在自旋表象中可用一个 $2 \times 2$ 的矩阵表示如下<sup>[12]</sup>:

$$\hat{U}(t) = \begin{pmatrix} \exp(i\xi) \cos\zeta & \exp(i\eta) \sin\zeta \\ -\exp(-i\eta) \sin\zeta & \exp(-i\xi) \cos\zeta \end{pmatrix} \quad (6.4.17)$$

它是满足么正条件 $\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$ 及么模条件 $\det(\hat{U}) = 1$ 的所谓 $SU(2)$ 群表示的一般形式, 其中包含了3个实参数 $\xi$ ,  $\eta$ 和 $\zeta$ , 它们都是时间 $t$ 的函数, 将(6.4.15)式和(6.4.2)式代入方程(6.4.5), 便可解出:

$$\begin{cases} \hbar \dot{\xi} = -\Delta + \tan\zeta [Z_1 \cos(\xi + \eta) - Z_2 \sin(\xi + \eta)] \\ \hbar \dot{\eta} = -\Delta - \cot\zeta [Z_1 \cos(\xi + \eta) - Z_2 \sin(\xi + \eta)] \\ \hbar \dot{\zeta} = -[Z_1 \sin(\xi + \eta) + Z_2 \cos(\xi + \eta)] \end{cases} \quad (6.4.18)$$

因 $\hat{U}(t)$ 满足初条件 $\hat{U}(0) = 1$ , 故(6.4.18)式也附有初条件:

$$\begin{cases} \xi(0) = \zeta(0) = 0 \\ [Z_1(0) \cos\eta(0) - Z_2(0) \sin\eta(0)] = 0 \end{cases} \quad (6.4.19)$$

最后一式是为了保证 $\dot{\eta}(0)$ 有限.

现在考虑回复(cyclic)条件(6.4.11)式, 记 $|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} x(0) \\ y(0) \end{pmatrix}$ ,

$|\psi(T)\rangle = \begin{pmatrix} x(T) \\ y(T) \end{pmatrix}$ , (6.4.11)式意味着 $\frac{y(T)}{x(T)} = \frac{y(0)}{x(0)} = w$ 是同一个复

数, 而方程(6.4.15)式给出代数方程:

$$aw^2 + bw + c = 0 \quad (6.4.20)$$

其中

$$a = \exp[i\eta(T)] \tan\zeta(T), \quad b = 2i \sin\xi(T), \quad c = \exp[-i\eta(T)] \tan\zeta(T)$$

代数方程(6.4.20)的两个解是熟知的:



$$\omega_{\pm} = -i \exp[-i\eta(T)] \cot\zeta(T) \{ \sin\xi(T) \pm [\sin^2\xi(T) + \tan^2\zeta(T)]^{\frac{1}{2}} \} \quad (6.4.21)$$

对给定的外场,从方程(6.4.18)在初条件(6.4.19)下的解求得 $\xi(T)$ ,  $\eta(T)$ 及 $\zeta(T)$ 后,我们可以选初始组态为 $\omega_+$ 或 $\omega_-$ ,则经过 $T$ 时刻后状态一定复原.

我们希望强调,时间间隔 $T$ 不一定是外场的“周期”,对任意的外场 $T$ 也可以取任意的指定值,所以我们建议采用比“cyclic”更好的词是“复归”(reversionary)(见下面的例).

有一种特殊情况值得注意,即当

$$\sin\xi(T) = \sin\zeta(T) = 0 \quad (6.4.22)$$

时(6.4.21)式给出不定式 $0/0$ ,这时我们必须回到(6.4.15)式才能看到,此条件下体系不论在什么初始组态,经时间 $T$ 后总能够复归,所以(6.4.22)式可称为自然复归条件(见下例).

例  $\frac{1}{2}$  自旋粒子在旋转磁场中

$$\Delta = \hbar\omega_3, Z = \hbar\omega_0 \exp(i\omega t) \quad (6.4.23)$$

此时方程(6.4.18)取如下形式

$$\begin{cases} \dot{\xi} = -\omega_3 + \omega_0 \tan\zeta \cos(\xi + \eta + \omega t) \\ \dot{\eta} = -\omega_3 - \omega_0 \cot\zeta \cos(\xi + \eta + \omega t) \\ \dot{\zeta} = -\omega_0 \sin(\xi + \eta + \omega t) \end{cases} \quad (6.4.24)$$

记  $f = \cos(\xi + \eta + \omega t)$ , 则

$$\begin{cases} \frac{df}{d\zeta} + (\cot\zeta - \tan\zeta) f = -2\cot\theta_+ \\ \cot\theta_+ \equiv \frac{\left(\omega_3 - \frac{\omega}{2}\right)}{\omega_0} \end{cases} \quad (6.4.25)$$

易证一阶线性微分方程(6.4.25)之解是

$$f = -\cot\theta_+ \tan\zeta \quad (6.4.26)$$

于是我们找到

$$\begin{cases} \xi = -\frac{1}{2}\omega t + \arctan(\cos\theta_+ \tan\Omega t) \\ \eta = -\frac{\pi}{2} - \frac{1}{2}\omega t \\ \sin\zeta = -\sin\theta_+ \sin\Omega t \end{cases} \quad (6.4.27)$$

其中

$$\Omega = \left[ \omega_0^2 + \left( \omega_3 - \frac{\omega}{2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (6.4.28)$$

并已取了  $\eta(0) = -\frac{\pi}{2}$ . 倘若我们希望体系状态能以外场周期  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  为周期而复归的话, 以此  $T$  值代入(6.4.21)式, 结果得到

$$\omega_{\pm} = \begin{cases} \tan\left(\frac{\theta_+}{2}\right) \\ -\cot\left(\frac{\theta_+}{2}\right) \end{cases} \quad (6.4.29)$$

这是两个在特殊初条件下才能出现的周期复归的特解, 最早是 Aharonov-Anadan 1987 年指出的(关于几何相的计算见下一小节).

再进一步, 如果要求状态能够不依赖于特殊的初条件而能“自然地周期性复归”, 那就需要利用(6.4.22)式给出的条件, 它是

$$2\Omega = 2 \left[ \omega_0^2 + \left( \omega_3 - \frac{\omega}{2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} = n\omega, \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (6.4.30)$$

这应看作是对  $\omega$ ,  $\omega_3$  和  $\omega_0$  3 个频率之间的一个约束关系<sup>[13, 14]</sup>. 一旦条件(6.4.30)满足, 对任意给定的初始组态, 体系总能够在每经过  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  时间后而周期性地回复.

## 6.4C 用密度矩阵法算几何相, 纤维丛和联络

### 1. 密度矩阵

从(6.4.11)和(6.4.14)式可见, 为研究态的复归和几何相的计算, 实际上重要的是要去看 Hilbert 空间中态  $|\psi(t)\rangle$  的投影  $|\tilde{\psi}(t)\rangle$  所组成的投影 Hilbert 空间(Ray 空间), 后者由前者略去一个总相位而得到. 在量子力学中有一种很简洁的办法可以略去总相位, 那就是引入密度矩阵, 如前面第五章所讨论的那样. 用到这里二态问题的密度矩阵是再简单不过的了, 它只有二行二列, 可记成

$$\hat{\rho}(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = |\tilde{\psi}(t)\rangle\langle\tilde{\psi}(t)| \quad (6.4.31)$$

它的参数化形式是我们已熟悉的(5.1.17)式:

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(1 + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (6.4.32)$$

其中极化矢量

$$\mathbf{P}(t) = \text{Tr}(\hat{\rho} \boldsymbol{\sigma}) = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \quad (6.4.33)$$

因  $\mathbf{P}^2 = 1$ ,  $\mathbf{P}$  矢量由单位球面( $S^2$ )上两个角度( $\theta, \phi$ )来标记,即  $\theta(t)$  和  $\phi(t)$  完全决定了态  $|\tilde{\psi}(t)\rangle$  的运动,  $\mathbf{P}$  的运动方程已在(1.1.25)式给出:

$$\hbar \frac{d\mathbf{P}}{dt} = g\mu\mathbf{B} \times \mathbf{P} \quad (6.4.34)$$

它也就是  $\theta$  和  $\phi$  的运动方程. 在讨论下面具体的例子之前,让我们先了解一下纤维丛和联络问题.

## 2. 纤维丛和联络一形式

我们先研究几何相  $\beta$  如何计算? 为此我们将最低限度地引用一些现代数学的语言,本书不打算也不可能系统地介绍现代数学(参见文献[9]或[15, 16]),读者在这惟一的一小节中稍微了解一些就可以了.

我们研究的对象是  $S^2$  球面上的态  $|\tilde{\psi}(t)\rangle = |\omega(\theta, \phi)\rangle$ , 见(6.4.9)式,加上与它乘在一起的一个总相位因子  $\xi = e^{if(t)}$ , 常称

$$|\psi\rangle = \xi |\omega\rangle \quad (6.4.35)$$

为“纤维丛”(fiber bundle)上的一个元素,(6.4.35)式是它的定域表示.  $|\omega\rangle$  是基空间(base space)(在这里是 Ray 空间)的一个元素而  $\xi$  是纤维(fiber)上的坐标,  $|\xi|^2 = 1$ , 有时写出  $\xi \in C_1$ , 以表示  $\xi$  是属于模为1的复数这个范畴.  $\xi$  可以看作是  $S^2$  球面上的一个“矢量”,当它在  $S^2$  上转一圈而回到原处时,会得到一个新的因子  $e^{i\beta}$ , 下面将证明,这个  $\beta$  就是所谓“几何相”. 一个类似的例子是:在球面  $S^2$  上的一条切线经  $S^2$  上一条闭合曲线  $C$  “平行移动”<sup>\*</sup> 后回到原处时一般会改变方向(例如在地球赤道上取一沿赤道的切线,沿着赤道平行地移动,转过经度  $90^\circ$  后,再沿着一条经度线平移到北极,然后再平行移动回到赤道上的出发点,就会发现切线方

\* 在三维空间一个二维曲面上把单位切矢量“平行移动”的规则如下:首先把此矢量按三维空间的平行规则从 A 点移到相邻的 B 点;第二步把此平移后的矢量投影到 B 点的切平面上;第三步是沿这个投影后的矢量方向取单位矢量,并把后者看成是原来在 A 点的矢量“平行移动”到 B 点的结果.

向转过了  $90^\circ$ ). 由此可见,重要的是需规定一个“平行输运”的法则,一个复数  $\xi$  的“平行输运”虽然没有像刚才例子中一个切线矢量的平行输运那样的直观性,但本章介绍的 A-B 效应以及 Berry 相的讨论都可以给我们一些启发. 那就是需要定义一个“联络”(connection),现在是基空间诱导出来的“自然联络”:

$$A = i\langle w | d | w \rangle \quad (6.4.36)$$

以(6.4.9)式代入,立刻得到

$$A = -\frac{1}{2}(1 - \cos\theta)d\phi \quad (6.4.37)$$

注意求微分后把坐标微分( $d\phi$ )也写在一起的记法,是现代微分几何中的一种新观念,它表示 A 这个“联络一形式”(connection one form)在本质上是一种不依赖于坐标选取的几何客体,具体在球坐标中把 A 的分量写出来,便是

$$A_\theta = 0, \quad A_\phi = -\frac{1}{2} \left( \frac{1 - \cos\theta}{\sin\theta} \right)$$

它正是吴大峻-杨振宁在 1975 年<sup>[17]</sup>为磁单极写出的矢势.

把(6.4.36)式与(6.3.17)式相比较可见,讨论 Berry 相时的“联络”(即那里的“矢势”)是外场的“参数空间”诱导出来的,而这里则是从态的“Ray 空间”诱导出“联络”来.

于是  $\xi$  的“平行输运”被定义为对  $\xi$  的“协变微商”等于零:

$$D\xi \equiv (d - iA)\xi = 0 \quad (6.4.38)$$

或

$$\frac{d\xi}{\xi} = -\langle w | d | w \rangle \quad (6.4.39)$$

相应地,我们定义对基空间元素  $|w\rangle$  的“协变微商”为

$$\tilde{D} | w \rangle \equiv (d + iA) | w \rangle \quad (6.4.40)$$

这意味着

$$d | \psi \rangle = \xi \tilde{D} | w \rangle \quad (6.4.41)$$

且

$$\langle \psi | d | \psi \rangle = \langle w | \tilde{D} | w \rangle = 0 \quad (6.4.42)$$

(用(6.4.36)式). 在  $U(1)$  的规范变换  $G_\eta$  下,即当  $|w\rangle$  作一个定域的相位变换时:  $|w\rangle \longrightarrow |w'\rangle = \eta |w\rangle = e^{i\gamma} |w\rangle$ ,  $\tilde{D} | w \rangle$  的变换是协变的,即只获得一个整体的相因子  $e^{i\gamma}$  如下:

$$G_\eta \tilde{D} |w\rangle \longrightarrow \tilde{D}' |w'\rangle = (d + iA') |w'\rangle = e^{i\gamma} (d + iA) |w\rangle \quad (6.4.43)$$

其中  $A \longrightarrow A' = i\langle w' | d | w'\rangle = A + i\eta^{-1} d\eta$

由于(6.4.43)这种协变性质,可见 $\langle \tilde{D}w | \tilde{D}w \rangle$ 是一个规范不变量,即在 $S^2$ 基空间上被诱导出一个规范不变的度规(metric):

$$ds^2 = 4\langle \tilde{D}w | \tilde{D}w \rangle = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2 \quad (6.4.44)$$

(其中 $x^1 = \theta$ ,  $x^2 = \phi$ ,  $g_{11} = 1$ ,  $g_{22} = \sin^2\theta$ ,  $g_{12} = 0$ )它正是球面上弧元的平方.同时它也可以通过密度矩阵来表达:

$$ds^2 = 2\text{Tr}(d\rho d\rho), \quad d\rho = d(|w\rangle\langle w|) \quad (6.4.45)$$

如果 $|\tilde{\psi}(t)\rangle$ 的演化是复归的,即 $\mathbf{P}$ 矢量沿 $S^2$ 上一闭合曲线运动后回到原处,则 $\xi$ 亦按(6.4.39)式的“平行输运”规则而获得一个附加的相位因子 $e^{i\beta}$ , $\beta$ 就是几何相:

$$\beta = -i \oint_C \frac{d\xi}{\xi} = \oint_C A \quad (6.4.46)$$

(见(6.4.14)式),以(6.4.37)式代入,即得

$$\beta = -\frac{1}{2} \int_{0C}^{2\pi} [1 - \cos\theta(\phi)] d\phi \quad (6.4.47)$$

其中 $\theta(\phi)$ 是曲线 $C$ 的参数方程.

有趣的是:即使 $C$ 不闭合,即 $\theta(0) \neq \theta(2\pi)$ ,或更一般地,即使在时间间隔 $(0, T)$ 内, $\phi$ 从 $\phi_0$ 变到 $\phi_1 \neq \phi_0 + 2\pi$ ,且 $\theta(\phi_0) \neq \theta(\phi_1)$ ,我们也可以形式地定义几何相为

$$\beta = -\frac{1}{2} \int_{\phi_0}^{\phi_1} [1 - \cos\theta(\phi)] d\phi \quad (6.4.48)$$

这是因为:我们总可以在不闭合的 $C$ 上加上两条“测地线”(geodesic line)\*,它们分别是连接 $\theta(\phi_0)$ 与北极以及 $\theta(\phi_1)$ 与北极的经线,这样便得到一条闭合的 $C'$ 线.然而在附加的测地线上因 $d\phi = 0$ ,对 $\beta$ 不会产生新的贡献.

### 3. Bargmann 不变量

几何相还有一种有趣的导出法,它的出发点是 $S^2$ 球面上另一个规范不变量——Bargmann 不变量,定义为

---

\* 测地线是球面上的最短程线,即连接两点的大圆弧,后者是通过球心的平面与球面的交线(见习题 6.2).

$$\Phi_B(0, 1, 2) = \arg\langle w_0 | w_1 \rangle \langle w_1 | w_2 \rangle \langle w_2 | w_0 \rangle = \arg(\text{Tr} \rho_0 \rho_1 \rho_2) \quad (6.4.49)$$

其中  $|w_0\rangle$ ,  $|w_1\rangle$  和  $|w_2\rangle$  是球面上 3 个任意的态. Bargmann 不变量  $\Phi_B(0, 1, 2)$  有一几何意义, 它等于  $\mathbf{P}_0$ ,  $\mathbf{P}_1$  和  $\mathbf{P}_2$  3 个矢量所张立体角的一半. 而且满足如下的性质:

$$\Phi_B(0, 1, 2) + \Phi_B(0, 2, 3) = \Phi_B(0, 1, 3) + \Phi_B(1, 2, 3) \quad (6.4.50)$$

这个关系在拓扑学上叫做 two-cocycle(二维上循环)性质, 这里的几何意义是: 在  $S^2$  球面上由  $(0, 1, 2, 3)$  4 点张成的四边形(每条边都由测地线画出)可以有两种办法分成两个三角形而保持面积不变. 由 Bargmann 不变量理论推出的几何相公式与(6.4.48)式完全一致<sup>[18]</sup>, 见习题 6.1.

#### 4. 几何相计算举例

**例 1**  $\Delta(t) = \frac{1}{2} g\mu B_z(t) = \hbar \omega_3(t), \quad B_x = B_y = 0$

此时只有  $z$  方向存在随时间任意变化的磁场, 方程(6.4.34)式简化为

$$\begin{cases} \dot{\theta} = 0 \\ \dot{\phi} = 2\omega_3(t) \end{cases} \quad (6.4.51)$$

可见自旋矢量  $\mathbf{P}$  进动时保持由初条件决定的极角  $\theta = \theta_0$  不变, 但进动的角速度  $2\omega_3$  随时间变化, 在  $t = 0, T_1, T_2, \dots$  等时刻状态复原的条件是

$$\int_0^{T_1} \omega_3(t) dt = \int_{T_1}^{T_2} \omega_3(t) dt = \dots = \pi \quad (6.4.52)$$

这正好是“自然复归条件”(6.4.22)式所要求的. 在每一段时间间隔  $(T_i \rightarrow T_{i+1})$  内, 状态都获得一个几何相等于

$$\beta = -\pi(1 - \cos\theta_0) \quad (6.4.53)$$

另一方面, 我们又可由(6.4.13)式计算同一时间间隔内的动力学相, 得到

$$\delta = -\pi \cos\theta_0 \quad (6.4.54)$$

故在一次复归中体系的总位相等于

$$\alpha = \beta + \delta = -\pi \quad (6.4.55)$$

它既与外场  $\omega_3(t)$  无关, 也与初始组态  $\theta_0$  无关, 正表示了“一个旋量波函

数在空间转  $2\pi$  角度后会改变符号”这样一个非常基本的量子力学性质。

**例 2**  $\Delta = \hbar\omega_3, Z(t) = \hbar\omega_0 \exp(i\omega t)$  (6.4.56)

我们又回到(6.4.23)那个例子,不过现在要解方程(6.4.34)式:

$$\begin{cases} \dot{\theta} = 2\omega_0 \sin(\omega t - \phi) \\ \dot{\phi} = 2\omega_3 - 2\omega_0 \cot\theta \cos(\omega t - \phi) \end{cases} \quad (6.4.57)$$

令  $h = \cos(\omega t - \phi)$ , 得到  $h$  满足的一阶线性微分方程:

$$\frac{dh}{d\theta} + h \cot\theta = \cot\theta_+ \quad (6.4.58)$$

( $\cot\theta_+$  的定义见(6.4.25)式). 上式之解为

$$\cos(\omega t - \phi) = \csc\theta_+ [\cot\theta_+ (\cos\theta_0 - \cos\theta) + \cos\phi_0 \sin\theta_0] \quad (6.4.59)$$

其中已用了初条件:  $\theta(0) = \theta_0, \phi(0) = \phi_0$ . 最后

$$\cos\theta(t) = \pm \sin\theta_+ \sin(\theta_0 \pm \theta_+) \cos 2\Omega t + \cos\theta_+ \cos(\theta_0 \pm \theta_+) \quad (6.4.60)$$

其中士号分别对应于  $\phi_0 = \pi$  或  $0$ .  $\Omega$  的定义已在(6.4.28)式给出.

于是我们找到了两个特解(设  $2\omega_3 > \omega$ ):

$$\begin{cases} \phi_0 = \pi, \theta_0 = \pi - \theta_+, \cos\theta = -\cos\theta_+ = \cos(\pi - \theta_+), \phi = \omega t + \pi \\ \phi_0 = 0, \theta_0 = \theta_+, \cos\theta = \cos\theta_+, \phi = \omega t \end{cases} \quad (6.4.61)$$

它们分别对应于(6.4.29)式中的  $w_-$  和  $w_+$  那两个解,注意  $\theta = \theta_0$  不随时间而变,所以是稳恒的进动解,它们当然是复归(cyclic)的.

如果初条件  $\theta_0 \neq \theta_+$  或  $(\pi - \theta_+)$ ,  $\mathbf{P}$  的运动就不是平稳的进动,而是像力学中陀螺的“章动”,并且一般不可能复归. 仅当  $\omega_0, \omega_3$  和  $\omega$  三者满足条件(6.4.30)式时,不论什么初条件(任意的  $\theta_0, \phi_0$ )都能以周期  $T = \frac{2\pi}{\omega}$  一次次地复归.

具体看(6.4.61)式中  $\cos\theta = \cos\theta_+$  (对应于(6.4.29)式中的  $w_+$ ) 那个稳恒解,它绕磁场进动一圈后获得的几何相由(6.4.47)式给出等于

$$\beta = -\pi(1 - \cos\theta_+) \quad (6.4.62)$$

注意这是严格的结果,对外场的频率  $\omega$  大小没有限制. 现在再来做绝热近似的极限,即令  $\omega \rightarrow 0$ , 则因

$$\cos\theta_+ \longrightarrow \frac{\omega_3}{\sqrt{\omega_0^2 + \omega_3^2}} = \frac{B_z}{|\mathbf{B}|} \quad (6.4.63)$$

(6.4.62)式的几何相便趋近于 Berry 相(6.3.31)(即(6.3.35)式)的结果.

有趣的是,我们现在可尝试找到另一种绝热近似的方案.那就是取初条件,让自旋沿着磁场方向,即  $\cos\theta_0 = \frac{B_z}{|\mathbf{B}|}$ ,同时让磁场频率  $\omega$  一步步逐渐小下来,始终保持满足条件(6.4.30式):

$$2\Omega = 2 \left[ \omega_0^2 + \left( \omega_3 - \frac{\omega}{2} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} = n\omega, \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (6.4.64)$$

即  $n$  不断地大起来,这时  $\mathbf{P}$  矢量作章动运动,如(6.4.59)和(6.4.60)式所示,但能够复归.而章动时  $\cos\theta$  的振幅  $\sin\theta_+ \sin(\theta_0 - \theta_+)$  随  $\omega \rightarrow 0$  而趋于零,  $\cos\theta$  的平均值  $\cos\theta_+ \cos(\theta_0 - \theta_+) \rightarrow \cos\theta_0$ ,这种绝热近似的“构想”似乎较易在实验上实现,其极限情况出现 Berry 相.

#### 6.4D 二态体系与受力谐振子相干态在几何相上的比较

做理论物理研究时,应该多注意“从特殊到一般”(当然也要与“从一般到特殊”的演绎法相结合),特殊的例子中往往越简单的,便越有典型性;另一方面,我们要多作比较,寻找联系或共性(当然也要明确相互的区别,即个性),这样往往能获得新的启迪.现在让我们把本章讨论的二态体系(Two-state System 简记为 TSS)的几何相与第一章 § 1.6E 节讨论的受力谐振子相干态(Coherent State of Forced Oscillator, CSFO)的几何相作一比较.我们已说过,TSS 只有两个量子态,所以是最“量子”的体系,而 CSFO 则包含无限多个态,所以它有很自然的经典对应态,相干态就是这种态.请看表 6.4.1.

下面是几点比较中的说明:

(1) 从 1925 年量子力学建立后,在很长一段时间内,大家对波函数的相位不大重视,因为波函数的模的平方  $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$  才与在  $\mathbf{x}$  点找到粒子的几率有联系.近 30 年来的重要进展之一是认识到相位的重要性,认识到它在一定条件下是可以在实验上观察的量,如 A-B 效应和 Berry 相等(请参看文献[9]).

(2) 一个绝对的相位还是不可观察的,可测量的相位总是指某种相对的相位变化(即比较相位差).例如在 A-B 效应中测量沿两个不同路径传来的电子波的干涉;在绝热近似下测 Berry 相是指体系追随外场(慢变量)转一圈后的相位(减去动力学相位);在非绝热近似情况下则



指态在 Ray 空间转一圈回到初始态后所获得的几何相. 它们都是不可积的相位.

表 6.4.1 TSS 和 CSFO 中几何相的比较

|  | TSS   | CSFO   |
|--|---|--|
| 状态数  | 2   | $\infty$   |
| 复归(cyclic)条件   | 容易实现<br>(6.4.21)式<br>(6.4.22)式  | 一般较难于实现(6.4.66)式   |
| Ray 空间 $\mathcal{R}$<br>(投影的 Hilbert 空间)                         | 单位球面 $S^2$<br>坐标 $(\theta, \phi)$   | 复 $z$ 相平面<br>$z = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip)$  |
| 归一化量子态<br>$ \tilde{\psi}\rangle (\in \mathcal{R})$<br>(纤维丛的局部截面) | 旋量波函数<br>$ w\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} \exp(i\phi) \end{pmatrix}$ | Glauber 相干态<br>$ z\rangle = \exp\left(-\frac{ z ^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}  n\rangle$ |
| 奇点   | 北极和南极   | 原点 $ 0\rangle$   |
| $\mathcal{R}$ 上的弧长微元的平方  | $ds^2 = d\theta^2 + \sin^2\theta d\phi^2$   | $ds^2 = dq^2 + dp^2$   |
| 联络 1-形式 $A$  | $A = i\langle w   d   w \rangle$<br>$= -\frac{1}{2}(1 - \cos\theta)d\phi$                                       | $A = i\langle z   d   z \rangle = -\text{Im}z^* dz$<br>$= \frac{1}{2}(pdq - qdp)$                                  |
| $A$ 的物理意义  | 磁单极的矢势  | 涡旋速度场的矢势   |
| 几何相及其拓扑意义  | $\beta = \oint_C A = -\frac{1}{2}S$<br>$S$ 是 $S^2$ 上的面积,<br>亦即曲线 $C$ 所张的立体角                                     | $\gamma = \oint_C A = 2S$<br>$S$ 是 $z$ 平面上顺时针向<br>曲线 $C$ 所包的面积   |
| 几何相的绝热近似极限   | Berry 相   | Berry 相  |
| 经典对应   | 无(?)  | Hanny 角  |

(3) 从表上可见:几何相起源于 Ray 空间 ( $\mathcal{R} = \mathcal{H}/\sim$ ) 的拓扑非平庸性. 对 TSS 来说,  $\mathcal{R}$  是  $S^2$  球面, 球面上的南、北两极是球坐标的奇点. 用拓扑学的语言来说,  $S^2$  流形不可能与一个平面对应(“同胚映射”), (我们不可能在一张纸上同时把地球的南北极区域都画上去). 类似地, 对 CSFO 而言,  $\mathcal{R}$  就是复  $z$  相平面, 原点是它的奇点, 这种奇性反映在归一化的 Glauber 相干态上便出现  $\exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right)$  这个因子,  $|z|$  不是  $z$  的解析函数.

(4) 与上述相应, 几何相总是一个联络 1-形式  $A$  沿  $\mathcal{R}$  上一条闭合曲线  $C$  的线积分, 而这个  $A$  作为一种态的“联络”是从  $\mathcal{R}$  空间诱导出来的,

它的拓扑(几何)意义又同  $\mathcal{R}$  的奇性有联系,在 TSS 情形下是虚拟的位于球心的“磁单极”产生的矢势,而在 CSFO 情形下则是位于  $z = 0$  点的虚拟“涡旋”中心引起的(流体速度场的)“势”. 最后几何相都简单地正比于  $C$  所包围的面积.

(5) 在绝热近似的极限情况下,即当外场频率  $\omega \rightarrow 0$  时,  $\mathcal{R}$  空间的拓扑非平庸性便转移到外场慢参数空间的拓扑非平庸性上去了. 与此相应,几何相便可叫做 Berry 相. 请注意这是绝热极限的结果.(而一般的“绝热近似”仅指略去虽小却非零的非对角矩阵元  $\left\langle m(t) \left| \frac{d}{dt} \right| n(t) \right\rangle$ , 严格地说,对导出 Berry 相是不够的).

(6) 与 TSS 不同,CSFO 是有其经典对应态的,相干态本身就是“最经典的量子态”. 因此人们要问:与 CSFO 的几何相(或 Berry 相)的经典对应是什么呢? Hanny 回答了这个问题,他指出:在经典水平上,一个谐振子在相空间上运动,当沿一闭合曲线  $C$  转一圈后会获得一个“几何相角”—— $\theta(C)$ ,这个 Hanny 角与量子水平上沿  $C$  获得的 Berry 相  $\gamma(C)$  有如下的关系<sup>[19, 20]</sup>:

$$\theta(C) = -\frac{\partial}{\partial n} \gamma_n(C) \quad (6.4.65)$$

其中  $n$  是主量子数,这个关系可视为 Berry 相问题中的“对应原理”.

(7) 还要谈一下复归(cyclic)条件. TSS 因为只有两个态,比较容易复归,它的条件已讨论过了,但 CSFO 因为涉及无限多的态,复归是较难的. 一个恒定固有频率为  $\omega$  的谐振子在外力  $f(t)$  作用下经过时间  $T$  后复归的条件是<sup>[21]</sup>:

$$\int_0^T f(t) \exp(i\omega t) dt = 0 \quad (6.4.66)$$

在此证明从略,见习题 6.3.

(8) 关于光子系统中的几何相,请参看文献[22].

(9) 对转动系统中的干涉效应与几何相,在文献[23]中有很好的讨论.

(10) 几何相一般只在含时哈密顿  $H(t)$  系统或非定态运动中才会出现,在  $H$  不含  $t$  的定态运动中是没有几何相的.

## 习 题

6.1 试从 Bargmann 不变量(6.4.49)式导出方程(6.4.48).

6.2 测地线的方程由度规(6.4.44)式导出,为\*

$$\frac{d^2 x^\rho}{ds^2} + \Gamma_{\alpha\beta}^\rho \frac{dx^\alpha}{ds} \frac{dx^\beta}{ds} = 0$$

其中  $\Gamma_{\alpha\beta}^\rho = g^{\rho\sigma} \Gamma_{\sigma\alpha\beta}$  称为 Christoffel 记号,而

$$\Gamma_{\sigma\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial g_{\sigma\alpha}}{\partial x^\beta} + \frac{\partial g_{\sigma\beta}}{\partial x^\alpha} - \frac{\partial g_{\alpha\beta}}{\partial x^\sigma} \right)$$

(1) 试证明在  $S^2$  上坐标  $x^1 = \theta$ ,  $x^2 = \phi$  的测地线方程是

$$\begin{cases} \frac{d^2 \theta}{ds^2} - \sin\theta \cos\theta \left( \frac{d\phi}{ds} \right)^2 = 0 \\ \frac{d^2 \phi}{ds^2} + 2 \cot\theta \frac{d\theta}{ds} \frac{d\phi}{ds} = 0 \end{cases}$$

(2) 用直接代入法证明在  $S^2$  上连接两点  $(\theta_1, \phi_1)$  与  $(\theta_2, \phi_2)$  的测地线可以表示为:

$$\cot\theta(\phi) = \csc(\phi_2 - \phi_1) [\cot\theta_2 \sin(\phi - \phi_1) - \cot\theta_1 \sin(\phi - \phi_2)].$$

6.3 试通过相干态表象来证明方程(6.4.66)式.

## 参 考 文 献

- [1] Y. Aharonov and D. Bohm. *Phys. Rev.*, **115**, 485 (1959)
- [2] R. Chambers. *Phys. Rev. Lett.*, **5**, 3 (1960);  
A. Tonomura *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **51**, 331 (1983); **56**, 792 (1986)
- [3] B. S. Deaver and W. M. Fairbank. *Phys. Rev. Lett.*, **7**, 43 (1961);  
R. Doll and M. Näbauer. *Phys. Rev. Lett.*, **7**, 51 (1961)
- [4] N. Byers and C. N. Yang. *Phys. Rev. Lett.*, **7**, 46 (1961)
- [5] Chen Ning Yang. *Selected Papers 1945-1980 with Commentary*. W. H. Freeman and Company, 1983
- [6] B. R. Holstein. *Topics in Advanced Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, 1992
- [7] W. Dittrich and M. Reuter. *Classical and Quantum Dynamics* (2nd Ed.). Springer-Verlag, 1994
- [8] M. V. Berry. *Proc. Roy. Soc.*, **A 392**, 45 (1984)
- [9] 李华钟. 简单物理系统的整体性——贝里相位及其他. 上海:上海科学技术出版社, 1998
- [10] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands. *The Feynman Lecture of Phys-*

---

\* M. Carmeli, *Classical Fields: General Relativity and Gauge Theory*. John Wiley & Sons, Inc., 1982.

ics, *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company. Inc., 1968

(费曼物理学讲义第3卷. 上海:上海科学技术出版社,1989)

- [11] Y. Aharonov and J. Anadan. *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 1593 (1987)
- [12] G-j Ni, P. Sun, D-x Kong. 复旦学报(自然科学版), **38** (3), 257 (1999)
- [13] R. Bhandari. *Phys. Lett.*, **A 180**, 15 (1993)
- [14] G-j Ni, S-q Chen and Y-l Shen. *Phys. Lett.*, **A 197**, 100 (1995)
- [15] 侯伯元,侯伯宇. 物理学家用微分几何. 北京:科学出版社,1990
- [16] 余扬政,冯承天. 物理学中的几何方法. 北京:高等教育出版社,1998
- [17] T. T. Wu, C. N. Yang. *Phys. Rev.*, **D 12**, 3845 (1975)
- [18] G-j Ni, D-x Kong, P. Sun, S-q Chen. 复旦学报(自然科学版), **39**(2), 119 (2000)
- [19] J. H. Hannay. *J. Phys.*, **A 18**, 221 (1985)
- [20] 沈月林,倪光炯. 复旦学报(自然科学版), **31**, 282 (1992)
- [21] D. J. Moore. *J. Phys.*, **A 23**, 5523 (1990)
- [22] J. Lu. *Eur. Phys. J.* **D 5**, 307(1999)
- [23] 蔡建华. 量子力学(第二版). 北京:高等教育出版社,1999

## 第七章 电子在磁场中的运动

本章讨论电子在强磁场中的运动,这是量子物理学中一个非常有趣的领域,充满了各种令人惊奇的发现,尤其是在1998年崔琦、Störmer和Laughlin等科学家因“分数量子 Hall 效应”(FQHE)研究而获得诺贝尔物理学奖之后,我们觉得本章内容非大大充实不可.虽然笔者远非这一领域的专家(仅对二维分数统计做过一些研究,反映在§7.3 B、C中),但也努力学习并编写了有关的内容,希望年轻的读者及早进入这一诱人的领域,并努力作出新的发现或发明来.

### §7.1 Landau 能级和简并度

在经典物理学中,一个电子在均匀磁场中绕一螺旋形轨道运动,其能量与轨道中心(轴线)位置无关.因此从自由度对应的原则可以预期:在量子理论中,其能级也将高度简并,而简并度将正比于磁场展布的面积,又正比于磁场的强度.下面将介绍 Landau 于1930年作出的理论来显示这一简并性质,他成功地解释了物质的反磁性,而后者却使经典理论无能为力.这一点已在§5.4C中讲过了,但那里还没有给出波函数.

#### 7.1A Landau 规范下的解

已知在量子力学中引入磁场  $\mathbf{B}$  的方式是通过矢势  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ , 同时使粒子的正则动量  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}$ . 今记电子的电荷  $q = -e$ ,  $e > 0$ , 而磁场  $\mathbf{B}$  沿  $z$  轴, 则  $\mathbf{A}$  可以有两种选择, 一种是<sup>[1]</sup>:

$$A_x = -\frac{1}{2}By, \quad A_y = \frac{1}{2}Bx, \quad A_z = 0 \quad (7.1.1)$$

这叫做“对称规范”, 另一种是不对称的选择:

$$A_x = -By, \quad A_y = 0, \quad A_z = 0 \quad (7.1.2)$$

这叫做“Landau 规范”. 如果用后一种, 则一个电子在均匀磁场中运动的问题便归结为求解如下的定态薛定谔方程(暂不考虑电子的自旋, 见下):

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( p_x - \frac{eB}{c} y \right)^2 + p_y^2 + p_z^2 \right] \psi = E \psi \quad (7.1.3)$$

其中  $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ . 设波函数  $\psi$  可以因式化如下:

$$\psi(x, y, z) = \exp \left\{ \frac{i(p_x x + p_z z)}{\hbar} \right\} \chi(y) \quad (7.1.4)$$

代入(7.1.3)式后记  $y_p = \frac{cp_x}{eB}$ , 则得  $\chi(y)$  满足的方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi'' + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - y_p)^2 \chi = \left( E - \frac{p_z^2}{2m} \right) \chi \quad (7.1.5)$$

其中

$$\omega_c = \frac{eB}{mc} \quad (7.1.6)$$

称为同步回旋(cyclotron)频率, 见(5.4.24)式, 它就是经典电动力学中电子作圆运动的(角)频率. 注意(7.1.5)式在形式上很像一个一维的定态谐振子方程, 振子频率为  $\omega_c$ , 中心在  $y_p$ , 而能量本征值是

$$E(K, p_z) = \frac{1}{2m} p_z^2 + \left( K + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c, \quad (K = 0, 1, 2, \dots) \quad (7.1.7)$$

我们看到, 沿磁场  $z$  方向的动能是连续的, 但在垂直于磁场的平面上能量则取分立值.  $K = 0, 1, 2$  等分别称为第一、二、三 Landau 能级. (7.1.5) 式的归一化波函数是熟知的:

$$\chi_K(y) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}} l_B^{\frac{1}{2}} (2^K K!)^{\frac{1}{2}}} \exp \left[ -\frac{(y - y_p)^2}{2l_B^2} \right] H_K \left( \frac{y - y_p}{l_B} \right) \quad (7.1.8)$$

其中  $H_K(\xi)$  ( $\xi = \frac{y - y_p}{l_B}$  是无量纲数) 是 Hermite 多项式, 而

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c}} = \left( \frac{\hbar c}{eB} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.1.9)$$

称为“磁长度”(magnetic length). 当  $B = 15$  Tesla,  $l_B = 6.63 \times 10^{-9}$  m.

### 7.1B Landau 能级的简并度

(7.1.8) 式中的  $y_p = \frac{cp_x}{eB}$ , 因  $p_x$  在(7.1.4)式中是守恒量, 故  $y_p$  (对

应于经典圆运动中心的  $y$  坐标) 也是在量子理论中的守恒量,  $p_x$  在 (7.1.7) 式中不出现, 故  $y_p$  的数值不影响能量  $E$  的值, 它的变动正反映了量子理论中的简并度. 经典圆运动中心还有一个  $x$  坐标, 它在量子理论中对应的算符是  $x_p = \frac{-cp_y}{eB} + x$ , 容易证明

$$[x_p, H] = 0 \quad (7.1.10)$$

$x_p$  与哈密顿量对易, 所以它也是一个守恒量, 但是易见

$$[x_p, y_p] \neq 0 \quad (7.1.11)$$

这表示在量子理论中,  $x_p$  与  $y_p$  不可能同时取确定值(不确定关系!) 因此, 虽然  $p_x$  和  $p_y$  在 (7.1.7) 式中都不出现, 下面计算能级的简并度时只要考虑  $p_x$  的变化就可以了.

设电子的运动被限制在一个面积为  $S = L_x L_y$  的矩形平面上. 这时沿  $x$  方向的平面波动量  $p_x$  由周期性边界条件变为分立:  $p_x = \frac{2\pi\hbar}{L_x} n_x$ , ( $n_x = 1, 2, \dots$ ), 其间隔为  $\Delta p_x = \frac{2\pi\hbar}{L_x}$ , 对应于  $\Delta y_p = \frac{2\pi l_B^2}{L_x} \ll L_y$ , 故在  $0 < y_p < L_y$  的范围内,  $p_x$  取值从 0 变到最大  $\frac{eB}{c} L_y$ , 共取分立值的数目, 也就是 (7.1.7) 式中  $K$  和  $p_z$  固定条件下状态的简并度. 记为  $G$ , 等于

$$G = \frac{\frac{eB}{c} L_y}{(\Delta p_x)} = \frac{eB L_y L_x}{c 2\pi\hbar} = \frac{eBS}{hc} = \frac{\Phi}{\phi_0} \quad (7.1.12)$$

其中

$$\phi_0 = \frac{hc}{e} = 4.14 \times 10^{-15} \text{ Tesla} \cdot \text{m}^2 \text{ (韦伯)} \quad (7.1.13)$$

是量子化的单位磁通[为 (6.2.10) 式中的 2 倍], 而  $\Phi = BS$  则是穿过  $S$  面的总磁通量. (7.1.12) 式的物理意义十分明显, 它就是每一个 Landau 能级 ( $K, p_z$  固定且也不考虑电子自旋时) 的简并度. 单位面积的简并度用小写  $g$  表示:

$$g = \frac{G}{S} = \frac{eB}{hc} = \frac{1}{2\pi l_B^2} \quad (7.1.14)$$

它与  $B$  成正比.

我们注意到, 属于同一 Landau 能级的波函数 [(7.1.4) 和 (7.1.8)] 表示电子的几率分布沿  $y$  方向集中在  $y_p = \frac{cp_x}{eB}$  附近而沿  $x$  方向的分布则

是均匀的. 这似乎很难与经典运动图像对应. 为得到更接近经典图像的量子波函数, 我们可以把上述能量上简并的各个波函数线性组合起来, 使合成波函数描写一个正方的格点阵, 每一格点占有面积  $2\pi l_B^2$ , 包围一个单位磁通  $\phi_0$ , 这样整个平面  $S$  能容纳的格点数, 即总简并度, 仍等于

$$G = \frac{S}{2\pi l_B^2} = \frac{\Phi}{\phi_0} \quad (7.1.15)$$

具体计算见下一小节.

### 7.1C 对称规范下的解

现在我们代替 Landau 规范(7.1.2)式, 改取对称规范(7.1.1)式, 则方程为

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( p_x - \frac{eB}{2c} y \right)^2 + \left( p_y + \frac{eB}{2c} x \right)^2 + p_z^2 \right] \psi = E \psi \quad (7.1.16a)$$

引入无量纲的复数坐标<sup>[2]</sup>:

$$z = \frac{(x - iy)}{2l_B} = \frac{1}{2l_B} r \exp(-i\theta), \quad z^* = \frac{(x + iy)}{2l_B} = \frac{1}{2l_B} r \exp(i\theta) \quad (7.1.16b)$$

并引入互为厄密共轭的算符:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( z + \frac{\partial}{\partial z^*} \right), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( z^* - \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad (7.1.17)$$

它们满足对易关系

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (7.1.18)$$

而哈密顿量  $H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2$  可以表示为(令  $p_z = 0$ )

$$H = \hbar \omega_c \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (7.1.19)$$

很明显, (7.1.19)式的“对角化”即求解后立刻得出 Landau 能级

$$E = \left( K + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c, \quad (K = 0, 1, 2, \dots) \quad (7.1.20)$$

这不奇怪, 谐振子本来是可以在这种“数表象”中讨论的(见 § 1.4), 问题是: 现在 Landau 能级的简并度到哪里去了呢? 为此要考虑另外两个算符:

$$b = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( z^* + \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( z - \frac{\partial}{\partial z^*} \right) \quad (7.1.21)$$



不难证明

$$[b, b^\dagger] = 1, [a, b] = [a, b^\dagger] = 0 \quad (7.1.22)$$

它们有什么意义呢? 让我们看平面上粒子的正则角动量, 可以证明:

$$[\mathbf{r} \times \mathbf{p}]_z = (a^\dagger a - b^\dagger b) \hbar = -i \hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (7.1.23)$$

它明显地与  $H$  对易, 故有共同的本征函数  $\psi_{KL}$ :

$$H\psi_{KL} = \left(K + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c \psi_{KL}, \quad (K = 0, 1, 2, \dots) \quad (7.1.24)$$

$$b^\dagger b \psi_{KL} = L \psi_{KL}, \quad (L = 0, 1, 2, \dots) \quad (7.1.25)$$

注意  $z$  的定义(7.1.16)', 当  $K = 0$ , (7.1.23)式虽等于  $(-L)\hbar$ , 但  $(-L)$  可以看成是粒子在平面上的角动量量子数, 如图 7.1.1(b)所示. 让我们来算固定  $K$  而  $L$  不同的取值数, 它对应于 Landau 能级的简并度. 最低的 Landau 能级  $K = 0$  中  $L = 0$  的态  $\psi_{00}$  由下面两个方程决定:

$$\begin{cases} a\psi_{00} = \left(z + \frac{\partial}{\partial z^*}\right)\psi_{00} = 0 \\ b\psi_{00} = \left(z^* + \frac{\partial}{\partial z}\right)\psi_{00} = 0 \end{cases} \quad (7.1.26)$$

易证它的一个最简单的解是

$$\psi_{00} = \text{const} \exp(-z^* z) \quad (7.1.27)$$

一般的态可以由算符  $a^\dagger$  和  $b^\dagger$  同时作用到  $\psi_{00}$  上面而得到

$$\begin{aligned} \psi_{KL} &= \text{const} (b^\dagger)^L (a^\dagger)^K \psi_{00} \\ &= \text{const} \left(z - \frac{\partial}{\partial z^*}\right)^L \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z}\right)^K \exp(-z^* z) \end{aligned} \quad (7.1.28)$$

特别是

$$\psi_{K0} = \text{const} (z^*)^K \exp(-z^* z) \quad (7.1.29)$$

$$\psi_{0L} = \text{const} (z)^L \exp(-z^* z) \quad (7.1.30)$$

Landau 能级的简并度决定于量子数  $L$  的上限, 为此计算在态  $\psi_{0L}$  中半径平方的平均值, 用公式  $\int_0^\infty \rho^L \exp(-\beta\rho) d\rho = L!/\beta^{L+1}$  可得

$$\langle r^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 \rangle = 4l_B^2 \langle z^* z \rangle = 2l_B^2 (L + 1) \quad (7.1.31)$$

故不同  $L$  的波函数几率的极值分布构成一个个半径不同的同心圆, 从每个  $L \rightarrow L+1$  的圆环面积是  $2\pi l_B^2$ , 设每个圆环有一个单位量子磁通  $\phi_0$  穿过, 则可令最大的圆面积  $\pi \langle r^2 \rangle_{\max} = S$ , (对应的  $L_{\max} \gg 1$ ) 便可决定简并度

$$G = L_{\max} = \frac{\langle r^2 \rangle_{\max}}{2l_B^2} = \frac{S}{2\pi l_B^2} = \frac{SeB}{hc} = \frac{\Phi}{\phi_0} \quad (7.1.32)$$

这与从 Landau 规范下求出的(7.1.12)式符合.

(7.1.28)式构成方程  $H\psi_{KL} = E\psi_{KL}$  的正交完备本征函数系, 它是以展开中心在原点  $z = 0 (x = y = 0)$  的一系列“同心圆分布”, 不妨形式上记为

$$\psi_{KL}(z) \equiv \psi_{KL}(x, y | 0, 0) = [\langle x, y | x_0 = 0, y_0 = 0 \rangle^{(K, L)}] \quad (7.1.33)$$

这里  $(x, y)$  表示场的流动坐标, 而  $(x_0, y_0)$  表示涡旋的中心坐标. 如果我们希望把一个  $K = L = 0$  的电子态中心从原点  $(0, 0)$  移到一般的点  $(x_0, y_0)$ , 则代替(7.1.27)式, 应该有

$$\begin{aligned} [\langle x, y | x_0, y_0 \rangle^{(0, 0)}] &= \text{const} \exp\left[i \frac{1}{2l_B^2} (xy_0 - yx_0)\right] \\ &\quad \cdot \exp\left\{-\frac{1}{4l_B^2} [(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2]\right\} \\ &= \text{const} \exp(z_0^* z - z_0 z^*) \exp[-|z - z_0|^2] \\ &= \text{const} \exp\{-|z|^2 - |z_0|^2 + 2z_0^* z\} \quad (7.1.34) \end{aligned}$$

此式的正确性可由第一行直接代入方程(7.1.16)式而证明之. 我们必须注意(7.1.34)式并不是简单地在(7.1.27)式中将  $z \rightarrow z - z_0$ , 而是前面要多一个依赖于位置的相因子.

下面来证明这个中心位移后的电子态(7.1.34), 可用在 origin 展开的取各  $L$  值的 Landau 态 ( $K = 0$ ) 波函数的线性组合来表示. 事实上,

(7.1.30)式前面的归一化因子是  $\frac{1}{l_B} \left(\frac{2^{L-1}}{\pi L!}\right)^{\frac{1}{2}}$ , 则可计算

$$\begin{aligned} \sum_L \psi_{0L}^*(z_0) \psi_{0L}(z) &= \frac{1}{2\pi l_B^2} \sum_L \frac{2^L}{L!} (z_0^* z)^L \exp\{-(z_0 z_0^* + z z^*)\} \\ &= \frac{1}{2\pi l_B^2} \exp\{-|z|^2 - |z_0|^2 + 2z_0^* z\} \quad (7.1.35) \end{aligned}$$

这正是(7.1.34)式, 不妨写成更对称的形式如下:

$$\langle x, y | x_0, y_0 \rangle^{(0,0)} = \sum_L \langle x, y | 0, 0 \rangle^{(0,L)} \langle 0, 0 | x_0, y_0 \rangle^{(0,L)} \quad (7.1.36)$$

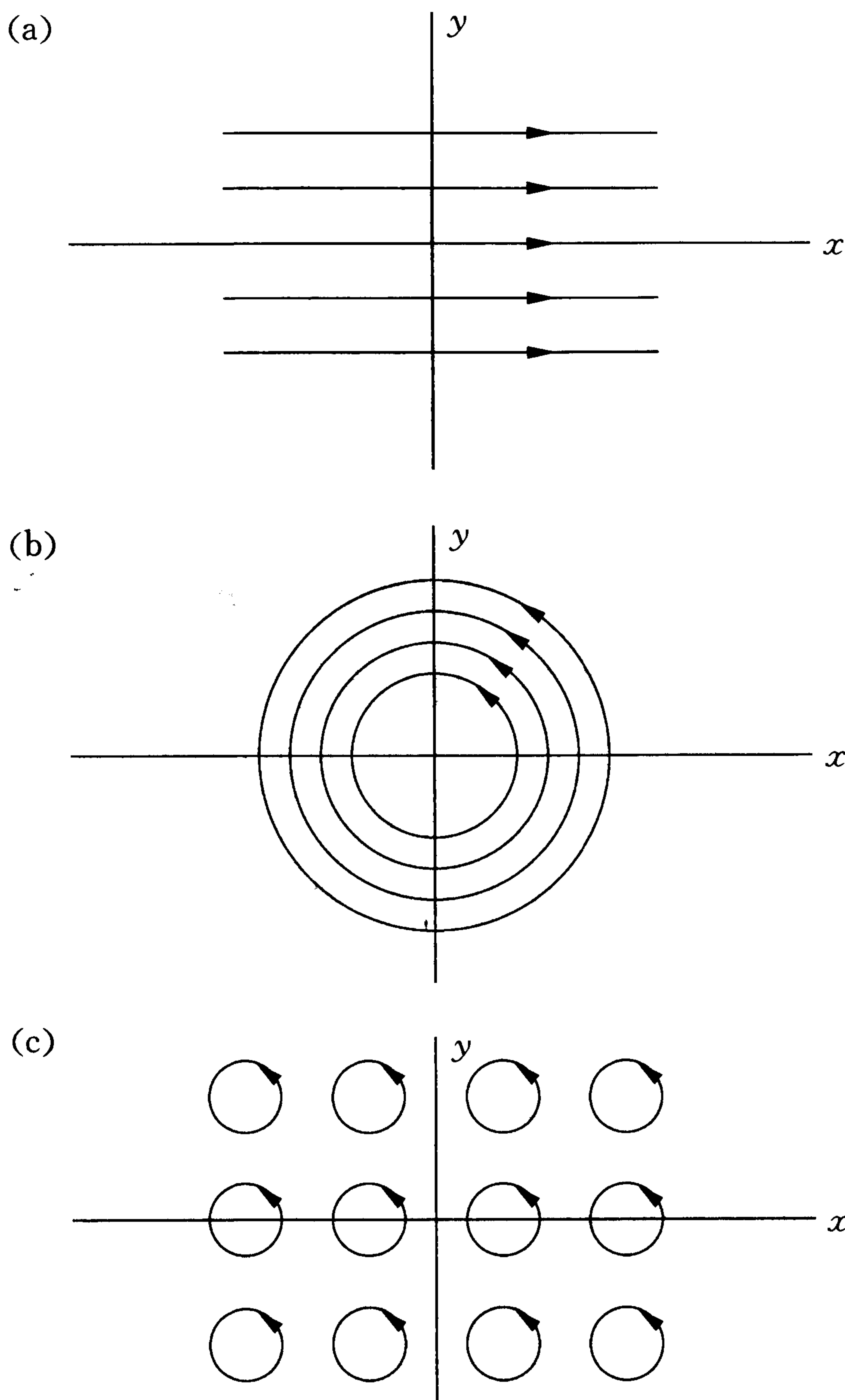


图 7.1.1 一个 Landau 能级(最低的  $K = 0$ )的 3 种不同电子态的基

- (a) 在 Landau 规范下,电子沿  $x$  轴方向是平面波,在沿  $y$  方向以谐振子波函数描写,各简并态在不同  $y$  高度上各出现一个峰;
- (b) 在对称规范下,以固定原点为展开中心,各不同量子数  $L$  的波函数在各不同的半径的同心圆周上有峰值,相邻两个圆周所包环形区域穿过一个单位磁通  $\phi_0$ ;
- (c) 与(b)等效的另一种“图像”,在各正方晶格中心( $z_0$ )上各有一个  $K = L = 0$  的小涡旋,它也被一个单位磁通  $\phi_0$  穿过.

其中

$$\langle x, y | x_0, y_0 \rangle^{(0,L)} \equiv [\langle x_0, y_0 | x, y \rangle^{(0,L)}]^*$$

这就意味着,  $S$  平面上以  $z = 0$  为中心展开的  $K = 0$  而取各  $L$  值的电子态简并度,可以等效地换为平面上许多  $z_0$  点上  $K = L = 0$  的电子态所形成

的简并度,它们以小涡旋形式排成晶格,同样反映最低 Landau 能级的简并度等于  $\frac{\Phi}{\phi_0}$ .

以上讲了描述 Landau 能级电子态的 3 种等效的波函数(展开电子态的基),如图 7.1.1 所示.

## §7.2 量子 Hall 效应简介

### 7.2A 经典 Hall 效应

Hall 效应是 1879 年发现的,如图 7.2.1 所示,一块金属导体或半导体材料中,在  $z$  方向加上磁场  $\mathbf{B}$ ,沿  $(-x)$  方向加上电场  $E_x$  使电子(电荷  $-e < 0$ ) 沿  $x$  方向运动,速度为  $v$ ,则由于 Lorentz 力  $\mathbf{F} = -e\left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{B}\right)$ ,电子将向正  $y$  轴运动,正负电荷分离堆积的结果,会建立一个稳恒的状态,这时在  $y$  方向将产生电场  $E_y > 0$ ,即在  $y$  方向建立一个电势差  $V$ (现在情况是电势沿正  $y$  方向跌落),这个  $V$  的符号决定于电子的电荷符号(现在  $(-e) < 0$ ). 如果换一种带正电荷的“载流子”, $V$  将会改号,所以这一“Hall 效应”可以明确地判定半导体材料中载流子的电荷符号.

记平面上的电流密度为

$$J_i = \sigma_{ij}E_j, \quad (i, j = x, y) \quad (7.2.1)$$

$\sigma_{ij}$  为电导率,具体对  $x$  方向写出:

$$J_x = \sigma_{xx}E_x + \sigma_{xy}E_y \quad (7.2.2)$$

定态到达时,载流子在  $y$  方向不受力,  $F_y = 0$ , 因此

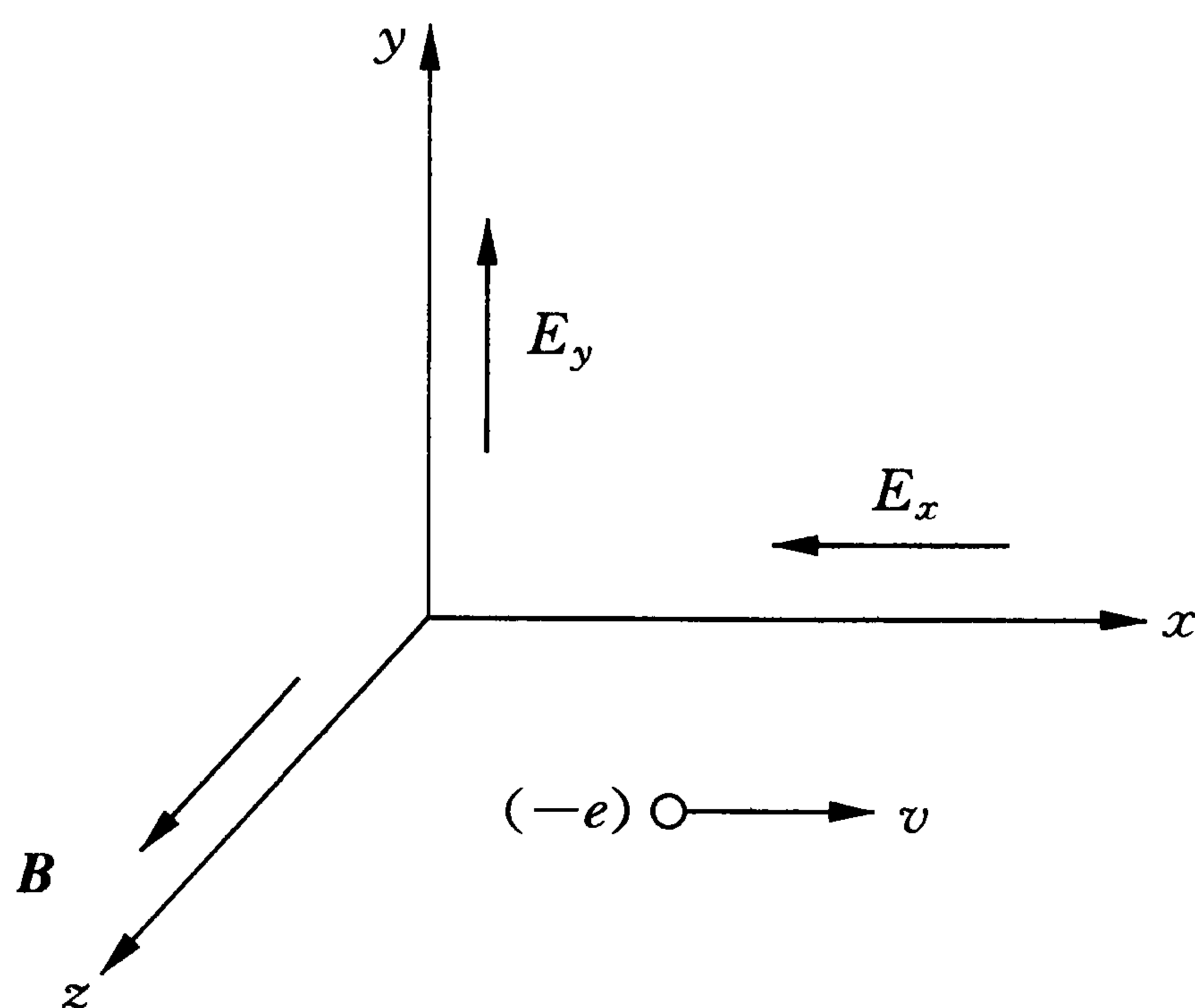


图 7.2.1 经典 Hall 效应示意图

$$E_y = \frac{1}{c}v_x B_z = \frac{1}{c}vB \quad (7.2.3)$$

又设单位面积的载流子数目为  $n$ , 则对电子的情形有

$$J_x = -nev_x \quad (7.2.4)$$

故横向电导率为

$$\sigma_{xy} \equiv \frac{J_x}{E_y} = -\frac{nevc}{B} \quad (7.2.5)$$

其倒数称为横向电阻率

$$\frac{1}{\sigma_{xy}} \equiv \rho_{xy} = -\frac{B}{nevc} \quad (7.2.6)$$

(7.2.2)式中的  $\sigma_{xx}$  叫做纵向电导率, 而  $(\sigma_{xx})^{-1} \equiv \rho_{xx}$  则称为纵向电阻率.

### 7.2B 量子力学的计算

我们可以在量子力学单粒子理论的框架中, 重新导出(7.2.5)式. 假设磁场  $B$  沿  $z$  方向, 电场  $E$  沿  $y$  方向, 则单电子(电荷  $-e$ )的定态薛定谔方程为

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{p}_x - \frac{eB}{c}y \right)^2 + \hat{p}_y^2 \right] + eEy \right\} \psi = \epsilon \psi \quad (7.2.7)$$

易证其解具有如下形式(见 § 7.1):

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \exp\left(ip_x \frac{x}{\hbar}\right) \chi(y - y_p) \quad (7.2.8)$$

$$y_p = \frac{c}{eB} \left( p_x - \frac{mcE}{B} \right) \quad (7.2.9)$$

$$\epsilon(p_x, K) = \hbar \omega_c \left( K + \frac{1}{2} \right) + eEy_p + \frac{m}{2} \left( \frac{cE}{B} \right)^2 \quad (7.2.10)$$

与 § 7.1 节相比, 现在电场  $E \neq 0$  的情况下, 能量  $\epsilon$  对  $p_x$  的简并被消除了, 每一固定  $K$  量子数的 Landau 能级扩展为一个能带, 能带中两相邻能级的间隔等于

$$\Delta\epsilon = eE \frac{c}{eB} \Delta p_x = \frac{cE}{B} \frac{h}{L_x} \quad (7.2.11)$$

如前, 一个 Landau 能带的总状态数  $G = \frac{eBL_x L_y}{ch}$ , 于是每个能带的总宽度将正比于  $y$  方向的电势差  $V$ :

$$\Delta\epsilon \cdot G = eEL_y = eV \quad (7.2.12)$$

现在来计算电流密度. 量子力学中的几率流密度等于

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2m}(\psi^* \mathbf{p}\psi - \psi \mathbf{p}\psi^*) - \frac{q}{mc}\mathbf{A}\psi^* \psi = \text{Re}(\psi^* \mathbf{v}\psi) \quad (7.2.13)$$

其中速度算符

$$\mathbf{v} = \frac{1}{m}\left(\mathbf{p} - \frac{q}{c}\mathbf{A}\right) \quad (7.2.14)$$

今  $q = -e$ ,  $\mathbf{A}$  只有  $x$  分量 ( $-By$ ), 则  $x$  方向的电流密度为

$$J_x = -ej_x = \left[-\frac{p_x e}{m} + \frac{e^2 By}{mc}\right] |\chi(y - y_p)|^2 \frac{1}{L_x}$$

而  $x$  方向的总电流等于

$$I_x = \int J_x dy = -\frac{ecE}{L_x B} = -\frac{ecV}{\Phi} \quad (7.2.15)$$

$\Phi$  是穿过平面的总磁通量. 注意  $I_x$  与  $p_x$  的大小是无关的. 以上只用了单电子波函数, 设平面  $S = L_x L_y$  上共有  $N$  个电子, 则

$$I_x = -\frac{necV}{B} \quad (7.2.16)$$

(以后用  $n = \frac{N}{L_x L_y}$  记电子面密度), 而平均电流密度等于

$$J_x = \frac{I_x}{L_y} = -\frac{necE}{B}$$

即横向电导率为

$$\sigma_{xy} = \frac{J_x}{E_y} = -\frac{nec}{B} \quad (7.2.17)$$

这与经典方程导出的结果(7.2.5)完全符合.

### 7.2C 量子 Hall 效应的实验发现

20 世纪 70 年代以来, 半导体工艺的进展导致了量子 Hall 效应的发现. 1980 年 Klitzing 等<sup>[3]</sup> 在“金属-氧化物-半导体场效应三极管”(metal-oxide-semiconductor-field-effect transistor, 简记为 MOSFET) 这样一种特殊的界面上, 把电子约束在厚度仅 50 纳米左右的薄层内, 电子可视为在二维  $x$ - $y$  平面内运动, 把温度降到 1.5K 左右, 改变  $z$  方向的磁场  $B$ , 测

量其横向电阻率.

我们已知对一个  $K$  固定的 Landau 能级, 其简并度  $G$  等于穿过  $S$  面的磁通量以  $\phi_0 = \frac{hc}{e}$  为单位的个数:  $G = N_\phi = \frac{\Phi}{\phi_0} = \frac{eBS}{hc}$ , 这意味着单位面积可填充的状态数为  $g = \frac{eB}{hc}$  (因为磁场很强, 自旋反转需要能量很高, 我们便可假定电子完全极化, 即不考虑电子的自旋简并度). 定义单位面积电子数目  $n$  与  $g$  之比为填充因子(百分比), 记为

$$\nu = \frac{n}{g} = \frac{nhc}{eB} \quad (7.2.18)$$

可见当固定  $n$  而增强  $B$  时, 相当于使  $\nu$  减小. 于是(7.2.17)式所示之横向(Hall)电导率(不计负号)可表达为

$$\sigma_{xy} = \frac{nec}{B} = \nu \frac{e^2}{h} \quad (7.2.19)$$

它与  $\nu$  成正比. 或者看其倒数——横向(Hall)电阻率,

$$\rho_{xy} = \frac{B}{nec} = \frac{1}{\nu} \frac{h}{e^2} \quad (7.2.20)$$

它与  $\nu$  成反比, 或者说与  $B$  成正比.

实验发现: 虽然平均地说, (7.2.19)式或(7.2.20)式随  $B$  的变化在实验上确实被看到了, 但在  $\nu = 1$  处, 即最低 ( $K = 0$ ) Landau 能级刚好填满时,  $\sigma_{xy}$  (或  $\rho_{xy}$ ) 在  $10^{-5}$  的精度内对  $B$  的变化却保持不变(见图7.2.2), 即呈现出一个小小的平台. 同样有趣的是: 当  $\sigma_{xy}$  (或  $\rho_{xy}$ ) 出现平台时, 相应的纵向电阻率  $\rho_{xx} = (\sigma_{xx})^{-1}$  突然跌落到接近于零. 以后将这种“量子化现象”叫作“整数量子 Hall 效应”(简记为 IQHE), 见图 7.2.2.

1982 年, 崔琦等人<sup>[4]</sup>进一步用更纯净的(电子迁移率更高的)GaAs-GaAlAs 异质结界面, 在更低的温度 ( $< 100\text{mK}$ ) 下用更强的磁场 ( $\geq 10\text{Tesla}$ ) 测量, 发现在  $\nu = \frac{1}{3}, \frac{2}{3}$  等处(后来又发现  $\frac{4}{3}, \frac{5}{3}, \frac{2}{5}, \frac{4}{5}, \frac{2}{7}$  等),  $\sigma_{xy}$  ( $\rho_{xy}$ ) 出现平台, 以后被称为“分数量子 Hall 效应”, 简记为 FQHE. 以上实验中  $\nu$  的数值都是高度精确的, 故量子 Hall 效应成为测量精细结构常数  $\alpha \equiv \frac{e^2}{hc}$  最可靠的办法之一, 也可作为电阻测量的标准.

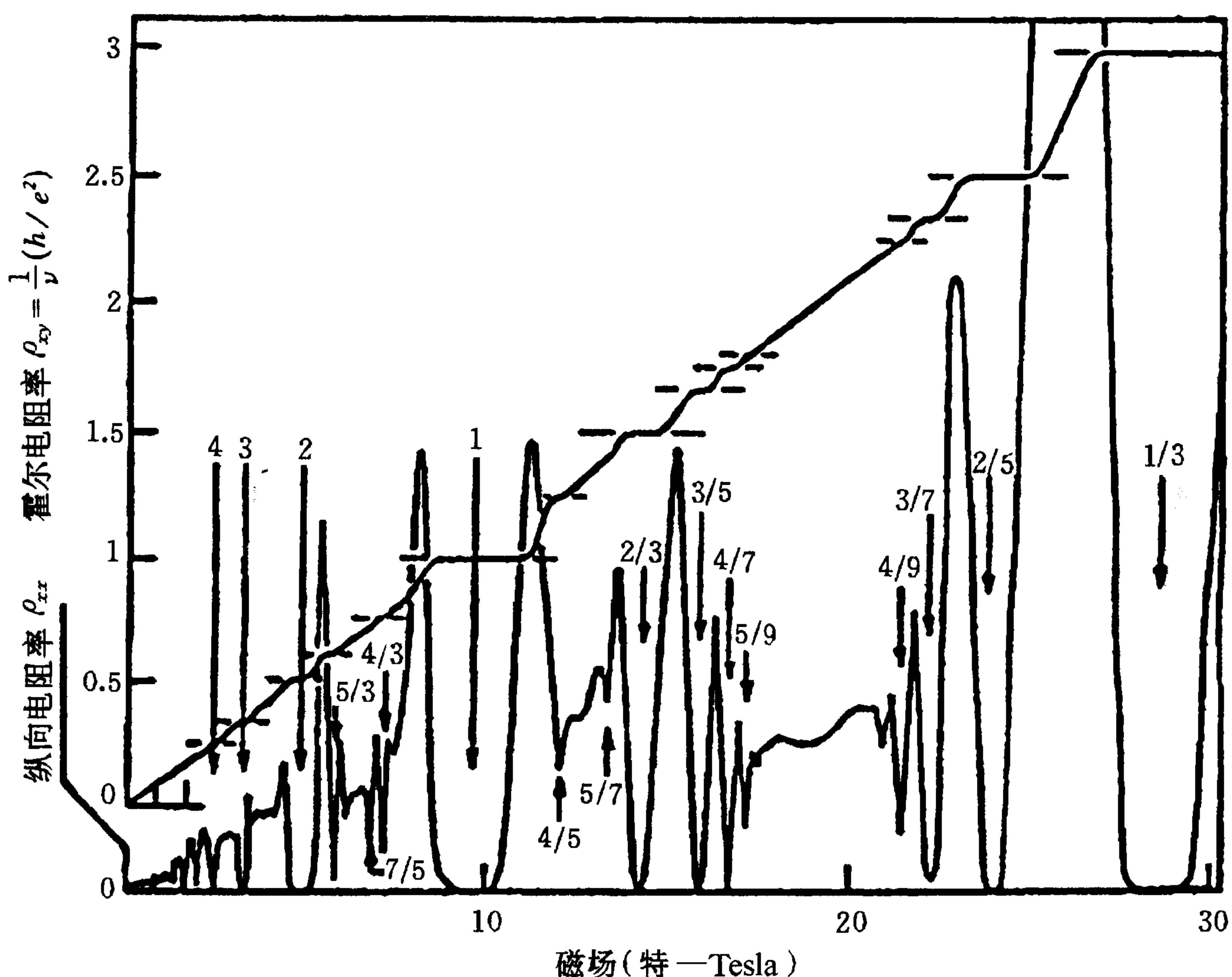


图 7.2.2 整数量子 Hall 效应和分数量子 Hall 效应中低温输运性质

图中的数字为 Landau 填充因子  $\nu$  的值. 例如当磁场  $B$  为 10 特左右、温度为 1.5K 时, MOSFET 界面的 Hall 电阻率  $\rho_{xy}$  等于  $\frac{1}{\nu} \left( \frac{h}{e^2} \right)$  而  $\nu = 1$ , 注意它能在  $B$  变化的一个小范围内保持不变, 即  $\rho_{xy}$  在这里出现一个“平台”, 与此同时, 纵向电阻率  $\rho_{xx}$  跌落到零, 这叫做整数量子 Hall 效应 (IQHE). 另一种 GaAs-GaAlAs 异质结界面, 在更低的温度 ( $< 100\text{mK}$ ) 和更强的磁场 ( $\sim 28$  特) 下, 又出现了  $\nu = \frac{1}{3}$  的  $\rho_{xy}$  平台及相应的  $\rho_{xx} \approx 0$ , 称为分数量子 Hall 效应 (FQHE), 详见正文.

### 7.2D 整数量子 Hall 效应的解释

考虑上面  $\nu = 1$  的情况, 此时最低的 ( $K = 0$ ) Landau 能级刚好被填满, 在这个费米面之上有一个能隙, 使低能量的激发成为不可能, 电子轨道中心的运动好像理想气体分子一样. 乍一看来, 这时从 (7.2.20) 式有

$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2} \quad (7.2.21)$$

与量子力学单粒子理论计算一致, 似乎很好理解. 实际上问题并不如此简单: 为什么实验上在  $\nu = 1$  处会出现平台呢?

Laughlin 指出<sup>[5]</sup>: IQHE 源于电子波函数在整个样品中的相位相干性. 为说明这一点, 他将  $S = L_x L_y$  平面沿  $x$  方向闭合, 圈成一个圆柱面的形状, 如图 7.2.3 所示, 磁场  $B$  垂直地穿过表面, 外加电压  $V$  跨接在带的两侧. 现在来推导沿  $x$  方向的 Hall 电流  $I$  与  $y$  方向电势差  $V$  的关系.



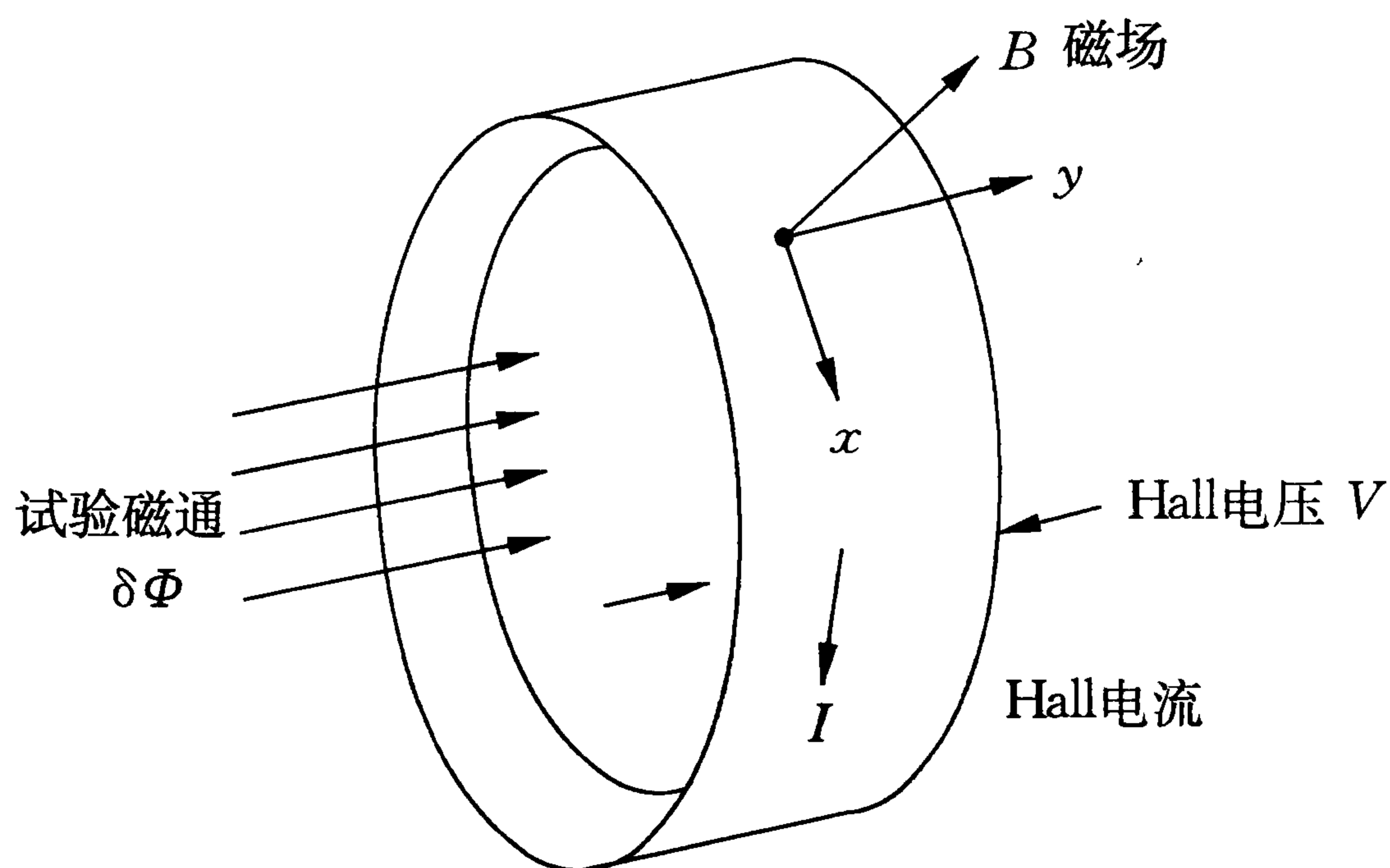


图 7.2.3 Laughlin 为解释 IQHE 而引入的圆柱面及磁通量  $\delta\Phi$

电流  $I$  产生一个磁矩  $\mu = \frac{IA}{c}$ ,  $A$  是带所包围的圆形面积. 考虑将一个小磁通量  $\delta\Phi$  引入闭合面, 相当于垂直于  $A$  面的磁场获得一个增量  $\delta B = \frac{\delta\Phi}{A}$ , 于是体系的能量便增加了  $\delta E = \mu\delta B = \left(\frac{IA}{c}\right)\left(\frac{\delta\Phi}{A}\right)$ , 即

$$\frac{I}{c} = \frac{\delta E}{\delta\Phi} \quad (7.2.22)$$

我们要注意, 正是那些由 (7.1.4) 式描写的在  $x$  方向扩展的 (extended) 电子才会对  $\delta\Phi$  的引入产生响应, (另外有些定域的 (localized) 电子不会对  $\delta\Phi$  产生响应, 它们的作用将在下面讨论), 而正如 (7.1.8) 式所示, 那些电子的波函数在  $y$  方向呈高斯分布, 中心在  $y_p$  处, 而 Landau 能级的简并度正是通过  $y_p$  从 0 移到  $L_y$  时状态的可能取值数来计算的 (见 (7.1.12) 式). 故如考虑一完全填满的 Landau 能级, 电子密度沿  $y$  的分布如图 7.2.4 所示.

位于右端边上的电子因电场沿  $y$  方向而有较高的静电能量, 设想磁通量  $\delta\Phi$  绝热地从零增大, 则电荷分布相应地向右移动, 体系能量随之增

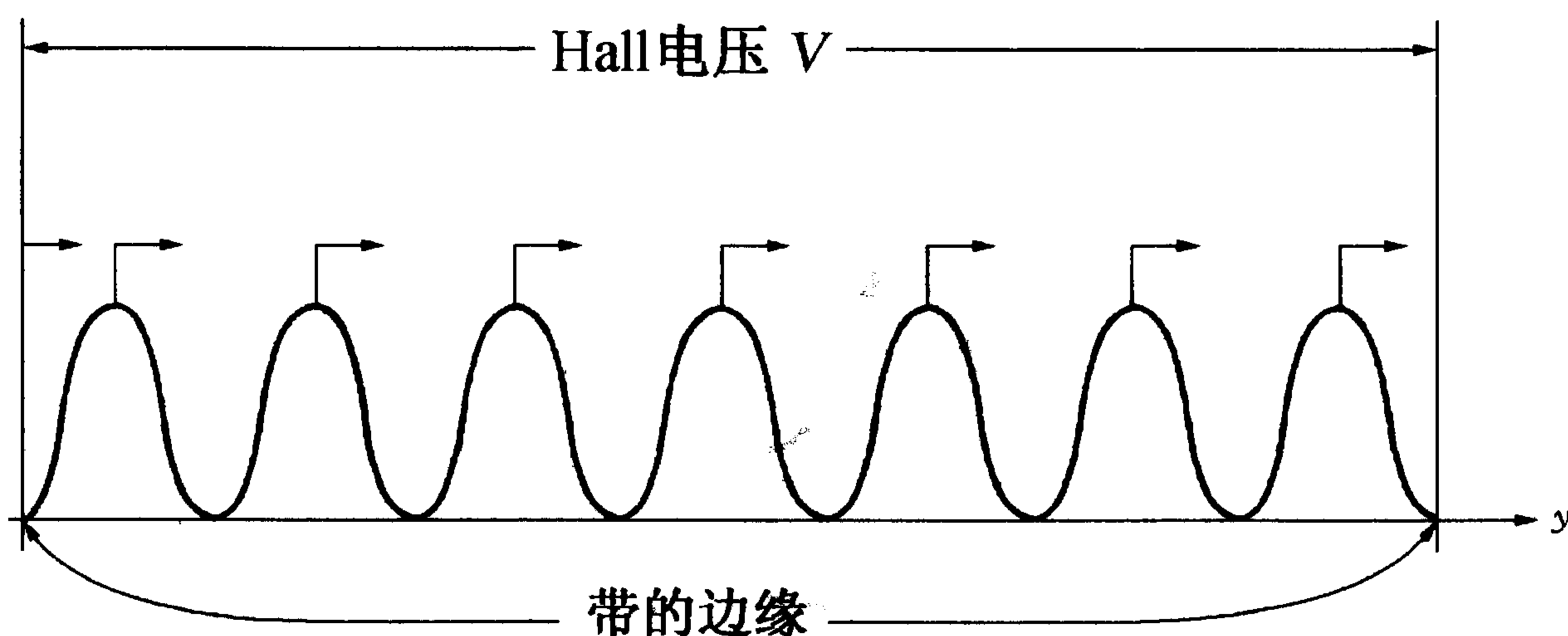


图 7.2.4 电子密度在图 7.2.3 中带沿  $y$  方向的分布, 箭头表示当引入磁通量  $\delta\Phi$  时密度分布移动的方向

高,直至  $\delta\Phi$  达到一个单位磁通  $\phi_0 = \frac{hc}{e}$  时,电荷分布刚好移动一格使情况复原. 在此过程中体系获得的能量为  $\delta E = eV > 0$ , 故由(7.2.22)式有

$$I = c \frac{\delta E}{\delta\Phi} = \frac{e^2}{h} V$$

这正好给出正确的横向电导率

$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2}$$

倘若电子总数  $N$  是固定不变的话,改变磁场就要改变简并度  $G$ (见(7.2.18)式),原来填满的 Landau 能级便要变成不填满或者过填满的了. 上述分析将不复有效. 可是在一个实际的样品中,总有一些杂质存在,它们会捕获电子使之成为定域态,如图 7.2.5 所示.

图上(a)表示理想情况的 Landau 能级分布,一个个  $\delta$  函数表示分立的( $K$  标记的)能级上的电子对能量的分布.(b)则表示有掺杂的情况,每一 Landau 能级已扩展为能带,加上阴影表示它们被可导电的电子填充,但不同  $K$  值的带还没有重叠起来,中间则有些杂质引起的“定域”态.

重要之点在于:当改变磁场使费米面  $E_F$  位于两个 Landau 能带(下面一个完全填满而上面一个完全空着)之间时,定域态中电子虽也在填充,但它们不能作为载流子参与导电,因此此时磁场的微小改变不会改变 Hall 电流,这样便解释了为什么  $\rho_{xy}$  当  $\nu = 1$  时会出现一个平台.

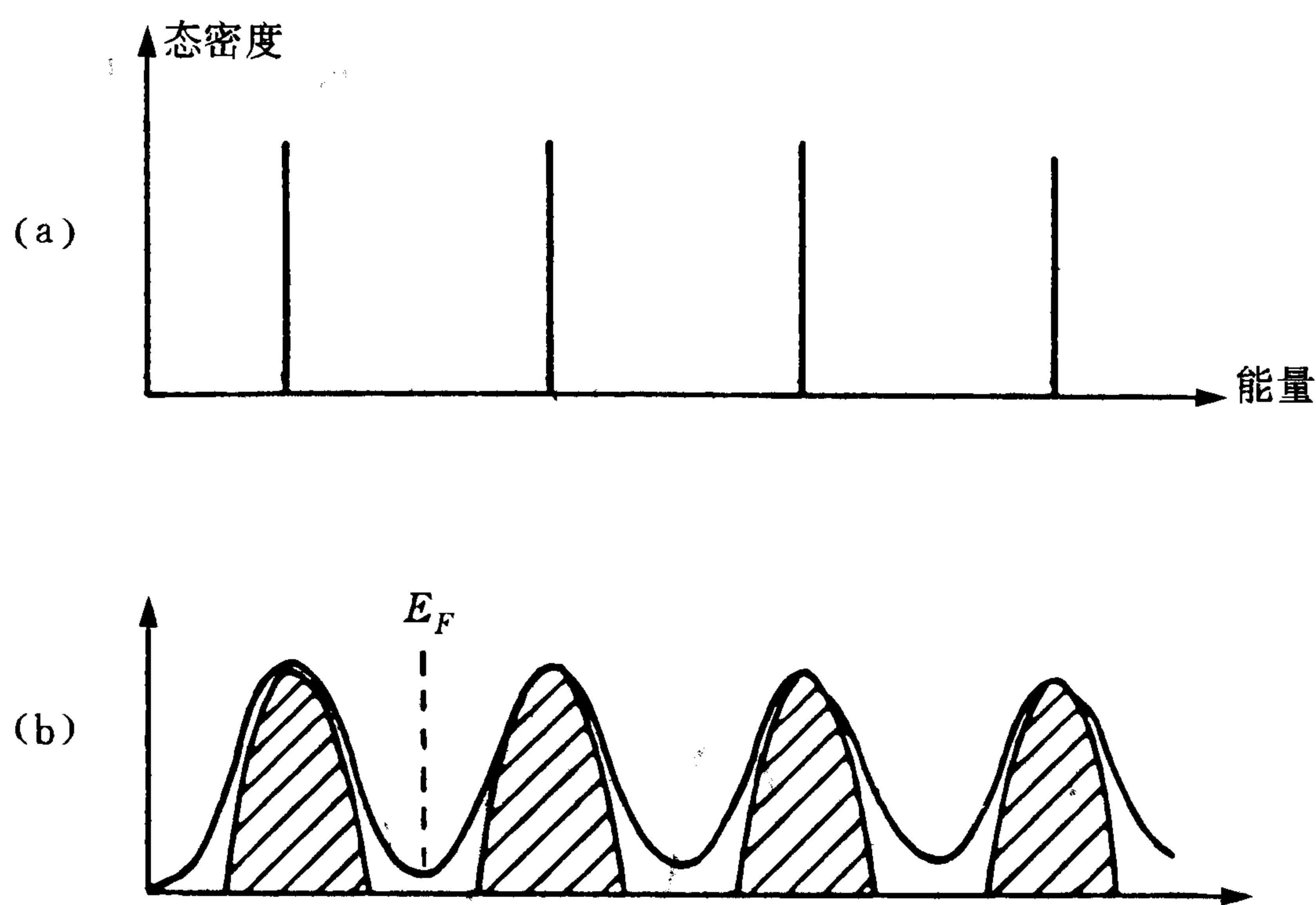


图 7.2.5 磁场中的电子态

- (a) 理想情况下的 Landau 能级,相应之电子态分布是  $\delta$  函数;
- (b) 掺杂情况下 Landau 能带由扩展态组成,而能带之间存在定域态,磁场改变引起费米面  $E_F$  的移动(见正文).

### 7.2E 分数量子 Hall 效应的解释

上一小节对 IQHE 的解释不能适用于 FQHE. 例如看  $\nu = \frac{1}{3}$  的情况,乍看起来,此时  $E_F$  处在  $\frac{1}{3}$  满带处,似乎在它的上面根本没有能隙,怎么可能像存在能隙那样,在  $\rho_{xy}$  中出现平台同时沿  $x$  方向的电流能无阻碍地流动( $\rho_{xx} \sim 0$ )呢?

上述看法是错的,原因在于忽视了电子间的相互作用. 因为既然能级只是部分地被填充,在量子力学“单粒子”的描写中,零级近似下基态便接近于无限简并,真正的(不简并的)基态必须在计入电子间的长程库仑相互作用消除简并后才能确定. 这一理论推测的实验根据是:FQHE 只能在更低的温度和非常纯净的材料中才能被观察到. 另一有关的事实是当填充因子  $\nu$  很小 ( $\nu \leq 1/9$ ) 时,理论和实验都证明,电子会排成 Wigner 晶格. 故理论上可考虑哈密顿量(略去动能)为

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \quad (7.2.23)$$

因  $N \sim 10^{11} / \text{cm}^2$ , 此问题无法解析求解,必须另想聪明的办法. 可以这样考虑:让电子填充最低 ( $K = 0$ ) Landau 能级的一个百分比  $\nu$  并考虑它们之间的库仑相互作用,使基态不可能有无能隙的激发. 这也就是说,要考虑  $N$  个电子的多体波函数,使之满足费米统计,而同时再计入电子间的强关联. 从 § 7.1 的讨论可见,在  $K = 0$  的 Landau 能级中的各个态可以用  $1, z, \dots, z^{G-1}$  等分别乘上  $e^{-z^* z}$  来表示[见 (7.1.30) 式]. Laughlin 据此提出了一个非常简单而含义深刻的尝试波函数<sup>[6]</sup>:

$$\psi_m(z_1, \dots, z_N) = \left[ \prod_{i < j}^N (z_i - z_j)^m \right] \exp\left(-\sum_{j=1}^N z_j^* z_j\right) \quad (7.2.24)$$

其中  $z_j$  是第  $j$  个电子的复坐标  $z_j = \frac{1}{2l_B}(x_j - iy_j)$ . 因为假定电子的自旋都已极化,即自旋波函数是对称的,故 Pauli 原理要求  $z_i \leftrightarrow z_j$  间的交换应该使  $\psi_m$  改号,即  $m$  必须是一个奇数. 注意这里  $m$  是固定的,故 Laughlin 波函数(7.2.23)不含有任何变分参数. 但它竟取得了极大的成功. 事实上,它是(7.2.23)式严格解的最佳近似.

首先让我们来看  $m$  和前面讲的填充因子  $\nu$  之间的关系. 把  $\psi_m$  中的因子乘开来(设所有的  $z_j$  都固定),最高的  $z_j$  的幂次是  $m(N-1)$ , 因为总的态数  $G$  不因库仑相互作用(它们的作用是使电子运动遍及一切可能的

态)而改变,故  $m(N-1) = G-1$ , 已知在最低 Landau 能级的填充百分比是  $\nu = \frac{N}{G}$ , 所以

$$m = \frac{(G-1)}{(N-1)} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\nu}$$

最早在实验上发现  $\nu = \frac{1}{3}$ , 即  $m = 3$ .

其次,我们将第一个电子当作“试验电荷”,让它围绕某一个(如第二个)电子转一圈,波函数相位便改变  $2\pi m$ . 按照 A-B 效应的讨论(见 § 6.2),这意味着一个电子好像带有  $m$  个单位量子磁通  $\phi_0 = \frac{hc}{e}$ . 这一点也可从平均场观点来解释:总磁通  $\Phi = G\phi_0$ , 而总电子数为  $N$ , 故每个电子平均带有磁通  $\frac{\Phi}{N} = \frac{G\phi_0}{N} = \frac{1}{\nu}\phi_0 = m\phi_0$ .

现在我们来论证:  $\psi_m$  确实描写了能量为极小的态. 为此考察当改变  $\nu = \frac{hcn}{eB}$  时体系能量的改变.  $\nu$  的改变有两种可能,一是固定电子的面密度 ( $n \sim 10^{11}/\text{cm}^2$ ) 而改变磁场  $B$ , 另一则是固定  $B$  而改变  $n$ .

倘若固定  $n$  而改变  $B$ , 每增加一个磁通  $\phi_0$  (不论从面上或面下穿入) 需做功  $\epsilon_0$ , 在样品中增加(或减少)  $M$  个磁通, 将使体系能量增加

$$\delta E = |M| \epsilon_0 \quad (7.2.25)$$

另一方面,注入磁通也使 Landau 能级的总简并度  $G$  增大了  $\delta G = M$ , 故

$$\frac{\delta E}{N} = \frac{|\delta G|}{N} \epsilon_0 = \epsilon_0 \left| \delta \left( \frac{1}{\nu} \right) \right| = \frac{\epsilon_0}{\nu^2} |\delta \nu| \quad (7.2.26)$$

记  $g \equiv \frac{G}{S}$ , 则  $\frac{1}{\nu} = \frac{g}{n} = g \frac{S}{N}$ , 实际上此时  $\left( \frac{1}{\nu} \right)$  的改变相当于固定  $B$  和  $N$  而改变面积  $S$  (见后面(7.4.17)式):

$$\delta E = N\epsilon_0 \left| \delta \left( \frac{1}{\nu} \right) \right| = g\epsilon_0 |\delta S| \quad (7.2.27)$$

$\delta E$  对  $\delta S$  的这种依赖关系意味着体系具有某种不可压缩的性质. (作为对比,一种可压缩的媒质在能量极小处受力变形能量升高的行为应是  $\delta E \propto (\delta S)^2$ ), 图 7.2.6 用数值计算表示了最低 Landau 能级中一个粒子的平均能量  $\frac{E}{N}$  随  $\nu$  的变化, 可见在  $\nu = \frac{1}{5}, \frac{1}{3}$  等处有一个极小值“尖点”

(cusp), 它表示了体系在此处的不可压缩性和内部导电性质的相对稳定性, 我们只须将  $n = \nu \dot{g}$  及 (7. 1. 14) 式代入横向电阻率  $\rho_{xy}$  的表示式 (7. 2. 6), 就得到

$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2} \left( \frac{1}{\nu} \right), \quad \left( \nu = \frac{1}{3}, \frac{1}{5}, \dots \right) \quad (7. 2. 28)$$

这就解释了 FQHE 中平台的出现.

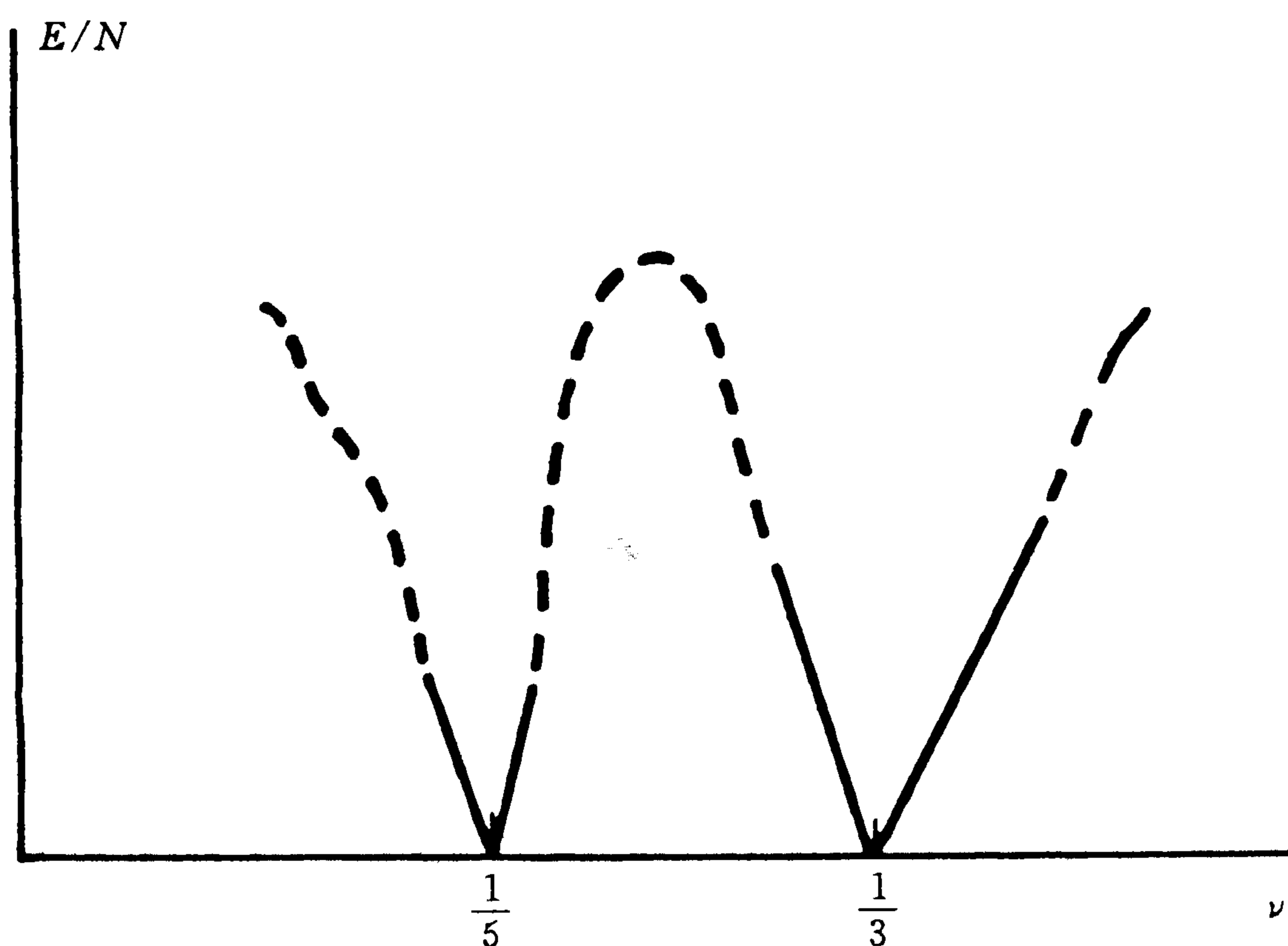


图 7.2.6 最低 Landau 能级中一个电子的平均能量随填充因子  $\nu$  的变化

以上论证说明了在 FQHE 中与  $\rho_{xy}$  平台 ( $\nu = \frac{1}{3}, \frac{1}{5}, \dots$ ) 对应的多电子体系处于能量极小的基态, 这种体系与 IQHE ( $\nu =$  整数) 中电子可看成是自由的情况完全不同, 它是一种强关联的电子体系, 是一种具有不可压缩性的“量子液体”. 这又是在二维电子气(电子运动被约束在  $x$ - $y$  平面)体系中才可能出现的特点, 下面两节将进一步说明在这种基态上产生的元激发——准粒子——又具有分数统计和分数电荷的奇异特性. 但在本节最后, 我们先从 Laughlin 波函数出发, 把 FQHE 体系映照成一种二维的中性等离子体. 为此定义  $N$  个电子的联合几率分布函数(joint probability distribution function)

$$\rho(z_1, z_2, \dots, z_N) = |\psi_m(z_1, z_2, \dots, z_N)|^2 \quad (7. 2. 29)$$

以 (7. 2. 24) 式代入, 可将上式改写为

$$\begin{aligned} \rho(z_1, \dots, z_N) &= \exp \left\{ -2 \sum_j (z_j^* z_j) + \sum_{i < j}^N 2m \ln |z_i - z_j| \right\} \\ &\equiv \exp \{ -\beta U \}, \quad (\beta = m) \end{aligned} \quad (7. 2. 30)$$

其中定义了一个函数  $U$

$$U(z_1, \dots, z_N) = \frac{2}{m} \sum_{j=1}^N |z_j|^2 - 2 \sum_{i < j}^N \ln |z_i - z_j|. \quad (7.2.31)$$

满足如下的二维泊松方程:

$$\nabla_i^2 U = \frac{2}{m} - 4\pi \sum_{j(\neq i)} \delta^2(z_i - z_j) \quad (7.2.32)$$

见习题 7.1. (注意, 已取二维平面上的长度单位为  $l_B = \left(\frac{\hbar c}{eB}\right)^{\frac{1}{2}}$ ,  $z_i = \left(\frac{x_i - iy_i}{2l_B}\right)$  为无量纲数, 故  $\nabla_i^2 |z_i|^2 = 1$ ). 于是  $U(\dots, z_i, \dots)$  可视为经典电动力学中一个带电为  $q = -1$  的粒子 ( $i$ ) 的静电势能, 它与其他粒子  $j$  ( $j \neq i$ , 也带电  $q = -1$ ) 之间 (在二维空间) 有静电库仑势能  $V_c(\dots, z_i, z_j, \dots) = -2 \ln |z_i - z_j|$ , 另外存在一均匀的正电荷本底, 其面密度为  $\rho_0 = \frac{1}{2\pi m}$ , (7.2.32) 中第一项即表示了  $q = -1$  的电荷  $i$  与此正电荷本底间的相互作用. 把  $\rho_0$  换算到实际空间 (面积  $S$ ) 的正电荷个数等于  $\frac{\rho_0 S}{l_B^2} = \frac{1}{2\pi m} \frac{eBS}{\hbar c} = \frac{\Phi}{\phi_0} \nu = G\nu = N$ , 恰好等于分立的 (负) 点电荷总数. 由此可见, 方程 (7.2.32) 描写了一个经典的电中性的二维等离子体.

## § 7.3 二维分数统计简介

### 7.3A 引言, Wilczek 模型

多年以来, 物理学中讨论全同粒子的多体统计问题时, 总是讲有两种统计. 有一类玻色子服从玻色-爱因斯坦 (Bose-Einstein) 统计, 它们的波函数对粒子坐标的交换是对称的:

$$\begin{aligned} \psi_S(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) \\ = \psi_S(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (\text{B-E}) \end{aligned} \quad (7.3.1)$$

另一类费米子则服从费米-狄拉克 (Fermi-Dirac) 统计, 它们的波函数对粒子坐标的交换是反对称的 (假定其他自旋等坐标是对称的):

$$\begin{aligned} \psi_A(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) \\ = -\psi_A(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (\text{F-D}) \end{aligned} \quad (7.3.2)$$

人们对三维空间 ( $D = 3$ ) 这两类物理问题实在是太熟悉了,以至于常常没有深思其原因,也没有问一问,在什么样的情况下可能会出现新的统计? 一直到 1977 年,Leinaas 和 Myrheim<sup>[8]</sup> 在一篇很出色的文章中通过仔细的分析指出这个问题需要认真地重新讨论,特别地说,在二维空间 ( $D = 2$ ),可能出现介于玻色统计和费米统计之间的新的“分数统计”(Fractional statistics). 多体波函数对两个粒子坐标的交换不是获得一个简单的正(或负)号,而是获得一个附加的相位因子,如下式所示:

$$\begin{aligned} \psi_F(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) \\ = \exp(i\theta)\psi_F(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_N) \end{aligned} \quad (7.3.3)$$

这里当相角  $\theta = 0$ (或  $2\pi$ ) 或  $\pi$  时,分别回到玻色或费米统计,但对一般  $0 < \theta < 2\pi$  的值,便是一种新的分数统计(或称  $\theta$  统计)了. 当然, $\theta$  的具体数值既与二粒子坐标  $\mathbf{r}_i$  及  $\mathbf{r}_j$  如何交换有关,也与所取的模型有关. 文献[8]还讨论了  $\theta$  的出现对二粒子体系能谱的影响.

文献[8]刚发表时,尚未受到普遍重视,五年之后,Wilczek 等提出了一个具体实现分数统计的模型<sup>[9]</sup>,使这个问题的研究进入了高潮. Wilczek 模型的大意如下:

在二维 ( $D = 2$ ) 平面上有一些粒子在运动,假设每个粒子都是一个复合体,既带有电荷  $q$ ,又附着一个磁通量  $\Phi$ (磁力线垂直于平面). 则如图 7.3.1,考虑两个粒子  $i$  和  $j$ ,当它们交换位置时,相当于反(或顺)钟向相

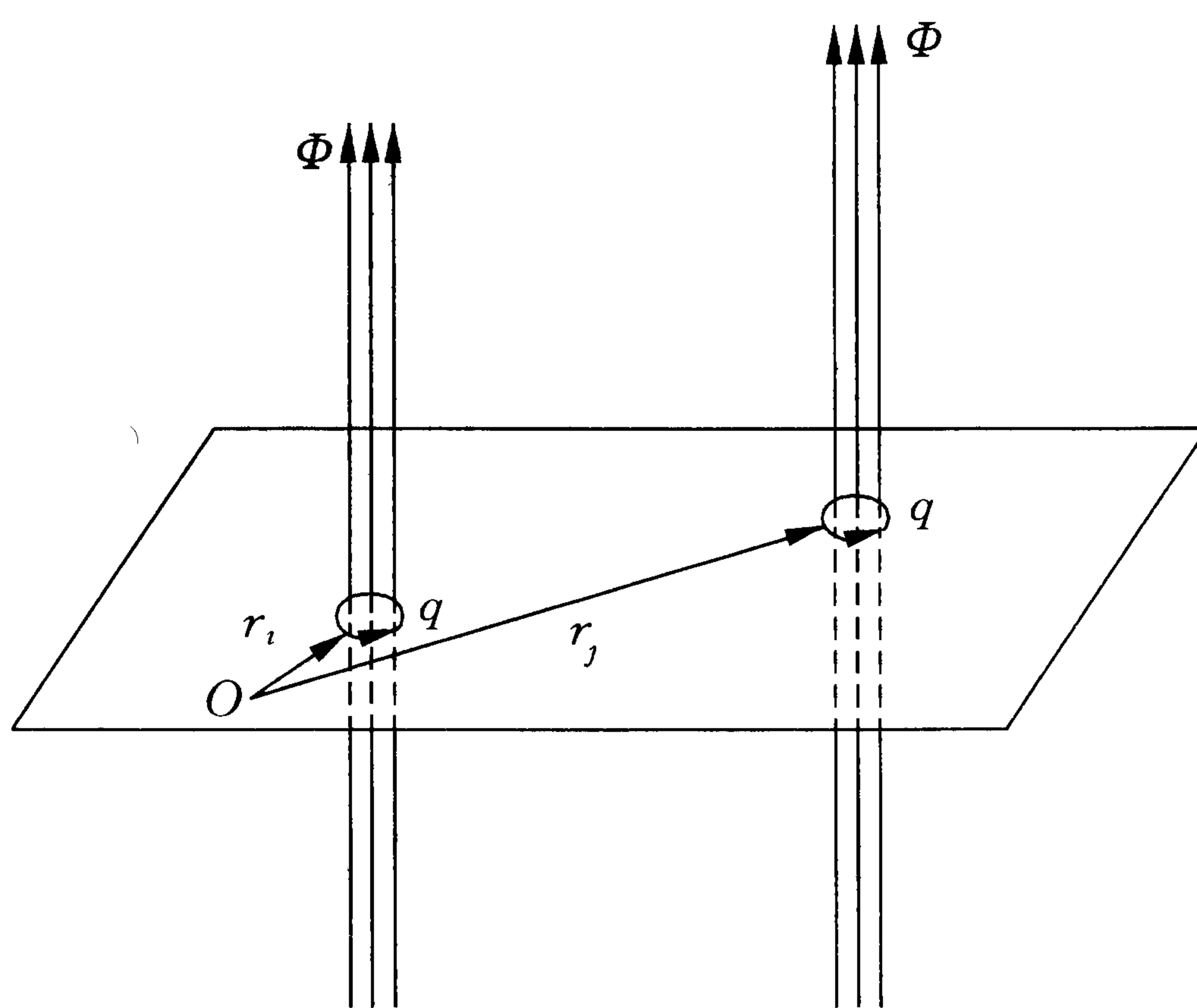


图 7.3.1 任意子(anyon)的 Wilczek 模型

一个粒子带电荷  $q$ ,与一个磁通量  $\Phi$  联结在一起,当这样两个粒子相互换位时,其波函数因 A-B 效应而获得附加的相位.

互旋转了  $180^\circ$ , 每个电荷  $q$  都绕着对方的磁通量转了半圈, 结果相当于 Aharonov-Bohm 效应中电荷  $q$  绕磁通量  $\Phi$  转了一圈. 于是二粒子波函数获得一个相位:

$$\psi(\dots, r_i, \dots, r_j, \dots) = \exp\left(\pm i \frac{q\Phi}{\hbar c}\right) \psi(\dots, r_j, \dots, r_i, \dots) \quad (7.3.4)$$

其中正(负)号视绕行为反(顺)钟向而定. 以后常令  $\hbar = c = 1$ , 则可见当  $q\Phi$  在  $0 \rightarrow 2\pi$  范围内连续变化时, 二粒子服从的统计便是介于 B-E 统计和 F-D 统计之间的任意分数统计. 因此 Wilczek 称这种既非玻色子、又非费米子的粒子为任意子(anyon).

进一步的发展是由吴咏时作出的, 他和合作者将数学中的辫子群(Braid group)概念引入分数统计, 并用路径积分方法更严格地讨论了这个问题<sup>[10]</sup>. 很快地, 分数统计概念被用来解释分数量子 Hall 效应(FQHE), 稍后又进一步尝试去讨论高  $T_c$  超导性. 我们不可能在本书中去追随这两方面的新进展, 本节的目的只是介绍一些分数统计的基本概念, 在本小节的下面, 先导出由 anyon 组成的气体的哈密顿量, 然后在第二小节, 讨论这种气体的第二维里(Virial)系数, 第三小节将指出二维空间理论的拓扑学特点, 最后一小节则介绍用 Chern-Simons 规范场来实现分数统计的办法\*.

为研究 anyon 气体的哈密顿量, 先从非相对论近似下单粒子在电磁势( $\mathbf{A}$ ,  $\phi$ )作用下的拉氏量出发:

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 + \frac{q}{c} \mathbf{A} \cdot \dot{\mathbf{r}} - q\phi \quad (7.3.5)$$

设有另一参考系以速度  $v$  沿  $x$  轴运动, 在该参考系中电磁势变为( $\mathbf{A}'$ ,  $\phi'$ ), 则按照洛伦兹变换

$$\begin{cases} A'_x = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \left( A_x - \frac{v}{c} \phi \right) \\ A'_y = A_y \\ A'_z = A_z \\ \phi' = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \left( \phi - \frac{v}{c} A_x \right) \end{cases} \quad (7.3.6)$$

现在考虑一个以速度  $v$  沿  $x$  轴运动的静磁场源, 在相对于该源为静

\* 有兴趣的读者可参看文献[7]一书的第三章及那里所引的文献.



止的运动坐标系中电磁势为  $(\mathbf{A}, 0)$  (没有标势), 则在实验室坐标系中由 (7.3.6) 式可知电磁势  $(\mathbf{A}', \phi)$  为 (取非相对论极限  $\beta = \frac{v}{c} \rightarrow 0$ ):

$$\begin{cases} A'_x = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} A_x \approx A_x \\ A'_y = A_y \\ A'_z = A_z \\ \phi = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \left( 0 - \frac{(-v)}{c} A_x \right) = \frac{1}{c} v A_x = \frac{1}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} \end{cases} \quad (7.3.7)$$

即以速度  $\mathbf{v}$  运动的静磁场源产生的电磁势为  $\mathbf{A}' = \mathbf{A}$ ,  $\phi = \frac{\mathbf{v}}{c} \cdot \mathbf{A}$ , 以此代入 (7.3.5) 式, 我们得到一个粒子 (以速度  $\dot{\mathbf{r}}$  运动) 与它耦合的拉氏量为

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\mathbf{r}}^2 + \frac{q}{c} \mathbf{A} \cdot (\dot{\mathbf{r}} - \mathbf{v}) \quad (7.3.8)$$

再讨论由两个全同 anyon 组成的体系. 在一个静止的 anyon 周围是没有电磁场  $\mathbf{E}$  和  $\mathbf{B}$  的, 但由于 anyon 中心磁通量管  $\Phi$  的存在, 在它的周围有不为零的矢势, 取适当规范后是

$$\mathbf{A}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) = \frac{\Phi}{2\pi} \frac{\hat{\theta}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|}, \quad \phi = 0 \quad (7.3.9)$$

( $\phi$  是标势) 这里  $\mathbf{r}_i$  是 anyon 中心的坐标矢量,  $\hat{\theta}$  是垂直于  $\mathbf{r} - \mathbf{r}_i$  的角度增长方向的单位矢量. 现在设在  $\mathbf{r}$  处有另一个 anyon, 将  $\mathbf{r}$  改为  $\mathbf{r}_j$ , 则根据 (7.3.8) 式, 这两粒子体系的拉氏量为

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} m (\dot{\mathbf{r}}_i^2 + \dot{\mathbf{r}}_j^2) + \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot (\dot{\mathbf{r}}_i - \dot{\mathbf{r}}_j) \\ &\quad + \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \cdot (\dot{\mathbf{r}}_j - \dot{\mathbf{r}}_i) \\ &= \frac{1}{2} m (\dot{\mathbf{r}}_i^2 + \dot{\mathbf{r}}_j^2) + \frac{2q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \cdot (\dot{\mathbf{r}}_i - \dot{\mathbf{r}}_j) \end{aligned} \quad (7.3.10)$$

其中已用了  $\mathbf{A}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = -\mathbf{A}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$ . 由此得正则动量:

$$\mathbf{p}_i = \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i} L = m \dot{\mathbf{r}}_i + \frac{2q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \quad (7.3.11)$$

$$\mathbf{p}_j = \frac{\partial}{\partial \dot{\mathbf{r}}_j} L = m \dot{\mathbf{r}}_j + \frac{2q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)$$

于是两粒子体系的(经典)哈密顿量等于

$$H = \dot{\mathbf{r}}_i \mathbf{p}_i + \dot{\mathbf{r}}_j \mathbf{p}_j - L$$

$$= \frac{1}{2m} \left\{ \left[ \mathbf{p}_i - \frac{2q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right]^2 + \left[ \mathbf{p}_j - \frac{2q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i) \right]^2 \right\} \quad (7.3.12)$$

把这个结果推广到  $N$  个全同 anyon 的体系,并作量子化后,即得量子 anyon 体系的哈密顿算符及相应之薛定谔方程为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \left[ -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} - \frac{2q}{c} \sum_{j(\neq i)}^N \mathbf{A}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \right]^2 \quad (7.3.13)$$

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \quad (7.3.14)$$

我们知道,电磁势  $\mathbf{A}$  容许作规范变换而不影响体系的物理性质,现在对  $N$  个 anyon 的波函数作一特殊的变换:

$$\psi'(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) = \prod_{i < j} \exp\left(-i \frac{q\Phi}{\pi} \phi_{ij}\right) \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, t) \quad (7.3.15)$$

其中  $\phi_{ij}$  是矢径  $(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$  的辐角,  $\phi_{ij} = \arg(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ . 作此规范变换后,  $\psi'$  所满足的薛定谔方程将不再有明显的  $\mathbf{A}$  出现(见(6.1.14)式):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = \hat{H}' \psi' = \left\{ \sum_{i=1}^N \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right\} \psi' \quad (7.3.16)$$

形式上,它是一个自由粒子的运动方程,但必须注意,  $\psi'$  不再具有通常对波函数(如  $\psi$ )所要求的单值性:当  $\phi_{ij}$  反钟向改变  $2n\pi$  时,虽然  $(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$  未变,波函数  $\psi'$  却改变了一个相因子  $\exp(-i2nq\Phi)$ . 同时,如果  $\psi$  具有  $\mathbf{r}_i$  与  $\mathbf{r}_j$  的交换对称性(或反对称性),  $\psi'$  却具有一般的分数统计对称性:交换  $\mathbf{r}_i$  与  $\mathbf{r}_j$ , 使波函数得到一个相因子  $\exp(i\theta)$ ,  $\theta = q\Phi$ . 由此可见,(7.3.13)式中的势  $\mathbf{A}$  是引起分数统计性质的原因,记  $\hbar = c = 1$ ,

$$\sum_j' \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) = \frac{q\Phi}{2\pi} \sum_j' \frac{\mathbf{n} \times (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2} = \mathbf{A}_i^{st} \quad (7.3.17)$$

为作用在第  $i$  个粒子上的“统计规范势”,  $\sum_j'$  表示对  $j$  求和时除去  $j = i$  的情况,  $\mathbf{n}$  为垂直于二维平面的单位矢量,则(7.3.13)式可改写为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m} \left[ -i\nabla_i - 2\mathbf{A}_i^{st} \right]^2 \quad (7.3.18)$$

很明显,统计规范势是一种很特殊的长程相互作用.

### 7.3B 任意子气体的第二维里系数

作为准备,我们先讨论在一本底谐振子势场中两个任意子的运动.体系的哈密顿量<sup>[10]</sup>是

$$H = -\frac{1}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \right) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x_1^2 + y_1^2 + x_2^2 + y_2^2) \quad (7.3.19)$$

以下为简单起见,令质量  $m = 1$ , 既然运动限制在二维平面上,不妨引进复坐标  $z_1 = x_1 + iy_1$ ,  $z_2 = x_2 + iy_2$ , 进一步引入质心坐标  $Z = \frac{1}{2}(z_1 + z_2)$  和相对运动坐标  $z = z_1 - z_2$ , 于是总哈密顿量  $H$  便可分解为质心运动的哈密顿量

$$H_c = -\frac{\partial^2}{\partial Z \partial Z^*} + \omega^2 Z Z^* \quad (7.3.20)$$

与相对运动的哈密顿量

$$H_r = -4 \frac{\partial^2}{\partial z \partial z^*} + \frac{1}{4} \omega^2 z z^* \quad (7.3.21)$$

之和. 我们看到,原来两粒子分别在谐振子势场中运动,现在则不但在质心运动中,而且在相对运动中都诱导出相应的简谐势作用了. 这两个任意子之间的统计势作用,如上节末所说,将在波函数的奇性边界条件中引入. 于是定态薛定谔方程

$$H\Psi(Z, z) = (H_c + H_r)\Psi(Z, z) = E\Psi(Z, z) \quad (7.3.22)$$

可以用分离变量法求解. 令  $\Psi(Z, z) = \phi(Z)\chi(z)$ , 代入后(令  $E = E_c + E_r$ ), 得质心运动方程

$$H_c\phi(Z) = E_c\phi(Z) \quad (7.3.23)$$

再引入极坐标,  $Z = Re^{i\alpha}$ ,  $\phi(Z) = \xi(R)\Theta(\alpha)$ , 则

$$\left( -\frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{1}{4R} \frac{\partial}{\partial R} - \frac{1}{4R^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} \right) \xi\Theta + \omega^2 R\xi\Theta = E_c\xi\Theta \quad (7.3.24)$$

我们把解此方程稍搁一下, 因为更使我们感兴趣的是包含在(7.3.22)中的相对运动方程:

$$H_r \chi(z) = E_r \chi(z) \quad (7.3.25)$$

也引进极坐标  $z = r \exp(i\phi)$ , 则方程写为

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \chi(z) + \frac{1}{4} \omega^2 r^2 \chi(z) = E_r \chi(z) \quad (7.3.26)$$

但在  $\chi(z)$  分离变量时引进奇性边界条件如下:

$$\chi(z) = (z_1 - z_2)^{\frac{\theta}{\pi}} f(z) = r^{\frac{\theta}{\pi}} \eta(r) \exp\left(i\theta \frac{\phi}{\pi}\right) \Phi(\phi) \quad (7.3.27)$$

这里参数  $\theta$  依赖于具体的任意子模型, 例如在 Wilczek 模型中  $\theta = q\Phi$ . 以 (7.3.27) 代入 (7.2.26) 式, 并取

$$\Phi(\phi) = \exp(il\phi), \quad (l = 0, \pm 2, \pm 4, \dots) \quad (7.3.28)$$

满足  $\Phi(0) = \Phi(2\pi)$ , 同时  $\Phi(0) = \Phi(\pi)$ , 这表示当  $\theta = 0$ , 这两个全同粒子是玻色子, 具有交换对称性, 但现在设  $\theta \neq 0$ , (7.3.27) 式所示的  $\chi(z)$  就描写了任意子, 其径向部分满足如下的方程, 记  $\tilde{\eta}(r) \equiv r^{\frac{\theta}{\pi}} \eta(r)$ ,

$$-\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} - \frac{1}{r^2} (2\Delta + l)^2 \right] \tilde{\eta}(r) + \frac{1}{4} \omega^2 r^2 \tilde{\eta}(r) = E_r \tilde{\eta}(r) \quad (7.3.29)$$

其中  $\Delta = \frac{\theta}{2\pi}$ .

如果令  $(E_r - \omega)r^2 = k^2 r^2$ ,  $\tilde{\eta}(r) = \exp\left(-\frac{1}{4}\omega r^2\right) \zeta(r)$ , 则有

$$\frac{d^2 \zeta}{d(kr)^2} + \frac{1}{(kr)} \frac{d\zeta}{d(kr)} + \left[ 1 - \frac{(2\Delta + l)^2}{(kr)^2} \right] \zeta = 0 \quad (7.3.30)$$

其解为  $\zeta(r) = J_{|2\Delta+l|}(kr)$ \*, 易于取  $\omega \rightarrow 0$  的极限, 如果我们改令

$$\tilde{\eta} = \frac{1}{\sqrt{r}} \omega = \frac{1}{\sqrt{r}} \exp\left(-\frac{1}{4}\omega r^2\right) r^{(2\Delta+l+\frac{1}{2})} y(r) = r^{2\Delta+l} \exp\left(-\frac{1}{4}\omega r^2\right) y(r)$$

记  $\rho = \frac{1}{2}\omega r^2$ , 则得到  $y(\rho)$  的方程为

$$\rho \frac{d^2 y}{d\rho^2} + [ |2\Delta + l| + 1 - \rho ] \frac{dy}{d\rho} + \frac{1}{2} [\epsilon - ( |2\Delta + l| + 1 )] y = 0 \quad (7.3.31)$$

\*  $|2\Delta + l|$  阶的 Bessel 函数, 见文献[12].

其中  $\epsilon = \frac{E_r}{\omega}$ . 把上式与数学中标准的 Laguerre 多项式的方程

$$\rho L^{(\alpha)''}_n(\rho) + (\alpha + 1 - \rho)L^{(\alpha)'}_n(\rho) + nL^{(\alpha)}_n(\rho) = 0 \quad (7.3.32)$$

比较, 即见  $|2\Delta + l| = \alpha$ , 而

$$\frac{1}{2}[\epsilon - (|2\Delta + l| + 1)] = n = \text{整数}, (0, 1, 2, \dots) \quad (7.3.33)$$

亦即能量量子化为

$$E_r = (2n + |2\Delta + l| + 1)\omega, (n = 0, 1, 2, \dots, l = 0, \pm 2, \dots) \quad (7.3.34)$$

$y(\rho)$  用 Laguerre 多项式表示:

$$y(\rho) = L_n^{|\Delta+l|}(\rho) \quad (7.3.35)$$

回到(7.3.27), 得两任意子的相对运动波函数为

$$\chi(z) = z^{|\Delta+l|} \exp\left(-\frac{1}{4}\omega z z^*\right) L_n^{|\Delta+l|}\left(\frac{1}{2}\omega z z^*\right) \quad (7.3.36)$$

注意因为(7.3.29)中出现的是  $(2\Delta + l)^2$ , 故我们只取绝对值  $|2\Delta + l|$ . 类似地, 可解出质心运动方程(7.3.24)而得

$$E_c = \omega[2N + |L| + 1],$$

$$(L = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, N = 0, 1, 2, \dots) \quad (7.3.37)$$

$$\psi(Z) = Z^{|L|} L_N^{|L|}(2\omega Z Z^*) \exp(-\omega Z Z^*) \quad (7.3.38)$$

现在我们来讨论任意子气体的第二维里系数. 首先回忆一种气体的状态方程可以对它的密度  $n$  展开如下:

$$p = nk_B T [1 + Bn + Cn^2 + \dots] \quad (7.3.39)$$

其中  $n = \frac{N}{V}$  (在三维空间体积  $V = L^3$ ) 或  $n = \frac{N}{A}$  (在二维空间面积  $A = L^2$ ),  $N$  为总分子数,  $p$  和  $T$  是压强和温度.

如果  $B$ 、 $C$  这些第二、第三维里系数不为零, 就表示气体的行为偏离理想玻尔兹曼气体的性质. 不过要注意, 不仅气体中两个分子间的相互作用一般会使  $B \neq 0$  ( $C \neq 0$  等等, 下同), 而且不同于玻尔兹曼的统计约束也会使  $B \neq 0$ . 例如在三维空间 ( $D = 3$ ), “理想的量子气体”有如下的第二维里系数<sup>[11]</sup>:

$$B_0(\dot{T}) = \frac{-\epsilon \lambda_T^3}{(2)^{\frac{5}{2}}}, (D = 3) \quad (7.3.40)$$

其中

$$\lambda_T = \left( \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7.3.41)$$

称为“热波长”，见(5.4.53)式，而

$$\epsilon = \begin{cases} +1, & (\text{玻色子}) \\ -1, & (\text{费米子}) \end{cases} \quad (7.3.42)$$

用类似的方法可以证明，对二维 ( $D = 2$ ) 空间，有

$$B_0(T) = \frac{-\epsilon\lambda_T^2}{4}, \quad (D = 2) \quad (7.3.43)$$

下面我们来验证这个公式。从一般的公式出发\*：

$$B(T) = \frac{1}{2}A - \frac{1}{2A}\lambda_T^4 Z_2 \quad (7.3.44)$$

其中  $Z_2$  是无量纲的二粒子配分函数。它可以因式化为

$$Z_2 = Z_2^{cm} \tilde{Z}_2 \quad (7.3.45)$$

这里  $Z_2^{cm}$  是由二粒子的质心运动决定的 ( $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ )：

$$Z_2^{cm} = \text{Tr}[\exp(-\beta H_0^{cm})] = \frac{2A}{\lambda_T^2} \quad (7.3.46)$$

而  $\tilde{Z}_2$  则完全决定于二粒子的相对运动 ( $\mathbf{k} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2), \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ )：

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_2 &= \text{Tr}[\exp(-\beta H_{rel})] = \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{r} | \exp(-\beta H_{rel}) | \mathbf{r} \rangle \\ &= \left[ \frac{A^2}{(2\pi)^4} \right] \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{k} \int d\mathbf{k}' \langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{k} | \exp\left(\frac{-\beta\hbar^2 k^2}{m}\right) | \mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{k}' | \mathbf{r} \rangle \end{aligned} \quad (7.3.47)$$

于是 3 种统计的差别可归结为波函数的不同选择：

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{A}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (\text{Boltzmann}) \quad (7.3.48)$$

\* 不妨比较三维情形下之公式，见 R. K. Pathria, *Statistical Mechanics* (Pergamon Press, 1972) § 9.4.

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle_{\text{even}} = \sqrt{\frac{2}{A}} \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (\text{B-E}) \quad (7.3.49)$$

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle_{\text{odd}} = \sqrt{\frac{2}{A}} \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (\text{F-D}) \quad (7.3.50)$$

注意 B-E 统计或 F-D 统计分别由波函数对于相对运动坐标  $\mathbf{r}$  是偶函数 (even) 或奇函数 (odd) 来描写. 引入二维空间极坐标后, 完成 (7.3.47) 式中的积分 (见习题 7.2, 请查阅文献 [29]、[30]), 我们即得

$$\begin{cases} B_0(T) |_{\text{Boltzmann}} = 0 \\ B_0(T) |_{\text{B-E}} = -\left(\frac{1}{4}\right)\lambda_T^2 \\ B_0(T) |_{\text{F-D}} = \left(\frac{1}{4}\right)\lambda_T^2 \end{cases} \quad (7.3.51)$$

这就证明了 (7.3.43) 式. 无论 (7.3.40) 式或 (7.3.43) 式都表明, 相对于经典的玻尔兹曼气体来说, B-E 型 (或 F-D 型) 的量子关联相当于某种吸引性的 (或排斥性的) 粒子间相互作用.

现在可讨论一般的任意子气体了. 用方程 (7.3.44) ~ (7.3.46) 后:

$$B(T) - B_0(T) = \lambda_T^2 [\tilde{Z}_2(0) - \tilde{Z}_2(\Delta)] \quad (7.3.52)$$

其中  $\Delta = 0$  指 B-E 统计, 故  $B_0(T) = -\left(\frac{1}{4}\right)\lambda_T^2$ , ( $0 \leq \Delta \leq 1$ ).

关键是要计算自由任意子的两体相对运动的配分函数  $\tilde{Z}_2(\Delta)$ . 在文献 [12] 中把任意子放在一半径为  $R$  的圆柱体内讨论, 下面我们换一种更简便的算法<sup>[13][14]</sup>, 即先设想任意子被约束在一个谐振子势阱内运动, 最后再去掉这个势. 这样我们可以直接利用二任意子相对运动的能谱公式 (7.3.34), 使  $\tilde{Z}_2(\Delta)$  在能量表象中对角化:

$$\tilde{Z}_2(\Delta) = \text{Tr} e^{-\beta H_{\text{rel}}} = \lim_{\omega \rightarrow 0} \text{Tr} \exp\{-\beta\omega(2n + |2\Delta + l| + 1)\} \quad (7.3.53)$$

如上述, 最后一步取  $\omega \rightarrow 0$  的极限.

注意 (7.3.34) 假定任意子是由玻色子组成, 这与 (7.3.52) 式一致, 因此 (7.3.53) 式求迹时径向量子数  $n = 0, 1, 2, \dots$  而相对轨道角动量量子数只限于偶数,  $l = 0, \pm 2, \dots$  故

$$B(T) - B_0(T) = 2\lambda_T^2 \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_{\substack{n=0, 1, 2, \dots \\ l=0, \pm 2, \dots}} \{\exp[-\beta\omega(2n + |l| + 1)]\}$$

$$- \exp[-\beta\omega(2n + |2\Delta + l| + 1)] \quad (7.3.54)$$

前面系数 2 来自用(7.3.34)时要计入两个玻色子交换引起的能谱双重简并.

因为  $0 \leq \Delta \leq 1$ ,

$$\begin{aligned} |2\Delta + l| &= 2\Delta + l, \quad (l = 0, 2, 4, \dots) \\ |2\Delta + l| &= |l| - 2\Delta, \quad (l = -2, -4, \dots) \end{aligned} \quad (7.3.55)$$

$$\begin{aligned} B(T) - B_0(T) &= \lim_{\omega \rightarrow 0} 2\lambda_T^2 \frac{e^{-\beta\omega}}{1 - e^{-2\beta\omega}} \left\{ \frac{1 - e^{-2\beta\omega\Delta}}{1 - e^{-2\beta\omega}} + \frac{e^{-2\beta\omega}(1 - e^{2\beta\omega\Delta})}{1 - e^{-2\beta\omega}} \right\} \\ &= 2\lambda_T^2 \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{\sinh(\beta\omega\Delta) \sinh[\beta\omega(1 - \Delta)]}{\sinh^2(\beta\omega)} \\ &= 2\lambda_T^2 \Delta(1 - \Delta) \end{aligned} \quad (7.3.56)$$

或

$$\left(\frac{4}{\lambda_T^2}\right)B(T) = 8\Delta(1 - \Delta) - 1 \quad (7.3.57)$$

此式代表的曲线以  $\Delta$  为自变量, 具有周期为 1,  $\Delta = 0$  或 1 表示 B-E 统计, 是曲线上的一个奇点,  $\Delta = \frac{1}{2}$  (即  $\theta = \pi$ ) 代表 F-D 统计, 文献中有时称  $\Delta = \frac{1}{4}$  ( $\theta = \frac{\pi}{2}$ ) 的任意子为 semion, 这是在高  $T_c$  超导研究中提出来的. 一种可能机制, 尚无定论, 但  $\theta = \frac{\pi}{3}$  的 Anyon 已在 FQHE 的实验中发现. 见 § 7.4 和图 7.3.2.

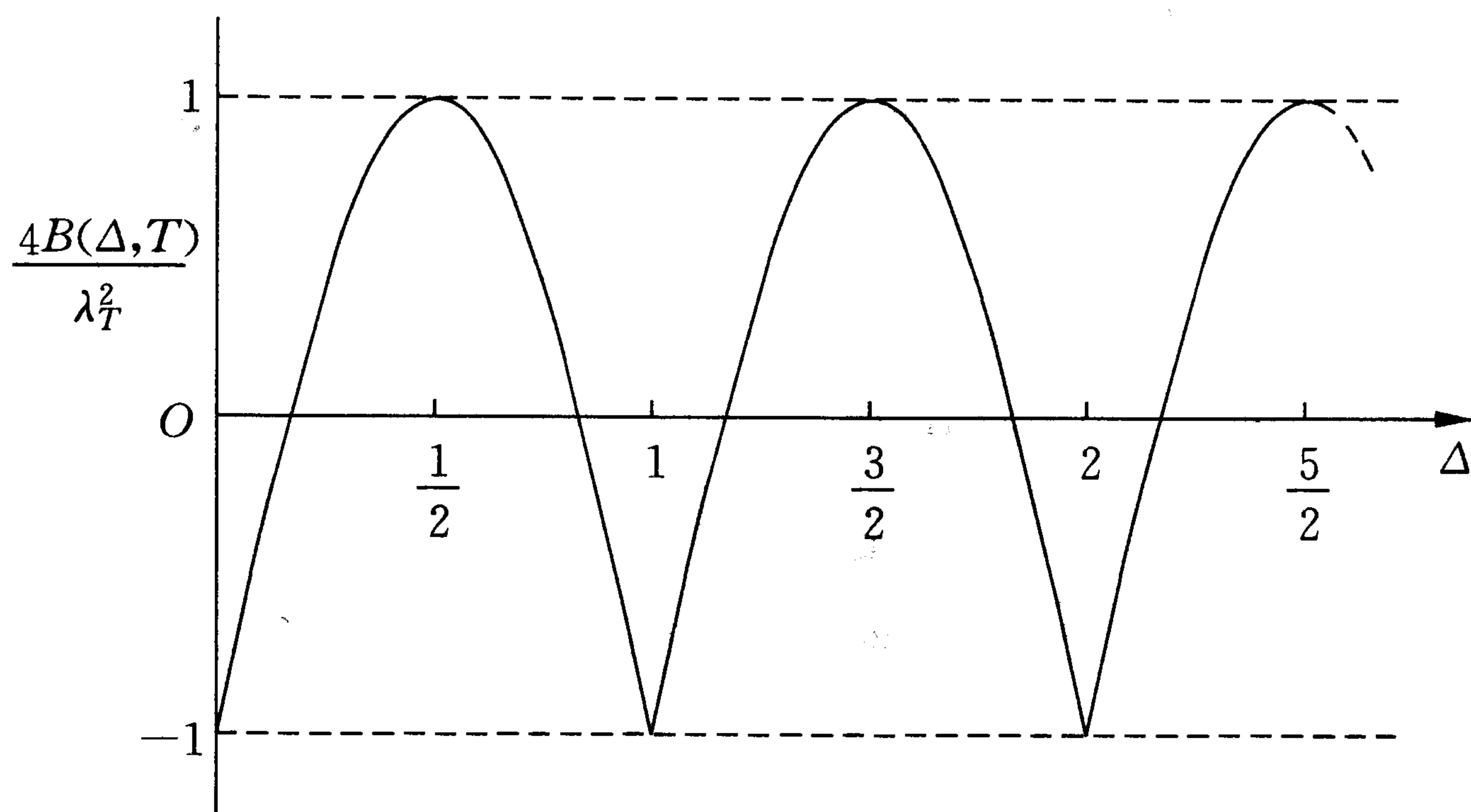


图 7.3.2 第二维里系数  $B(\Delta, T)$  作为  $\Delta$  的函数



## 7.3C 分数统计的拓扑学特点

## 1. 单粒子量子力学的简单回顾(参见文献[7])

在第一章我们已经知道,在  $(D+1)$  维空时的单粒子量子态是用在无限维 Hilbert 空间的一个抽象态矢量来代表的,在薛定谔图景下它与时间有关,服从如下的方程:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle^S = \hat{H}^S |\psi(t)\rangle^S \quad (7.3.58)$$

这里上标  $S$  表示薛定谔图景,而  $\hat{H}^S = \hat{H}$  假定为与时间无关.为更具体地描述这个粒子态,人们引进位形空间表象,定义一个基矢  $|\mathbf{x}\rangle^S$ ,它是位置算符  $\hat{\mathbf{x}}^S$  的本征矢:

$$\hat{\mathbf{x}}^S |\mathbf{x}\rangle^S = \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle^S \quad (7.3.59)$$

其本征值  $\mathbf{x}$  表示有  $D$  个分量的位置矢量.

粒子的波函数定义为刁矢(bra) $\langle \mathbf{x} |$ 与刃矢(ket) $|\psi(t)\rangle^S$ 的缩并,即

$$\psi(\mathbf{x}, t) = {}^S\langle \mathbf{x} | \psi(t)\rangle^S = {}^H\langle \mathbf{x}, t | \psi\rangle^H \quad (7.3.60)$$

这里我们同时引进了海森堡图景以显示波函数与图景的无关性.在海森堡图景中,态矢  $|\psi\rangle^H$  与时间无关,而基矢  $|\mathbf{x}, t\rangle^H$  含有时间,它随时间的演化如下:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\mathbf{x}, t\rangle^H = -\hat{H} |\mathbf{x}, t\rangle^H \quad (7.3.61)$$

注意(7.3.61)中比(7.3.58)有一个符号之差.不论(7.3.58)或(7.3.61)都给出通常的薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = H(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) \quad (7.3.62)$$

作为类比,波函数  $\psi(\mathbf{x}, t)$  颇有点像普通空间一个矢量  $\mathbf{v}$  的分量  $v_i$ , 因为  $v_i = \mathbf{v} \cdot \mathbf{e}_i$ , 或  $\mathbf{v} = v_i \mathbf{e}_i$ ,  $\mathbf{e}_i$  是基矢量.为了数学上的严格性,我们要采用纤维丛的术语.  $D$  维的位形空间是纤维丛  $E$  的一个基流形  $B$ , 在  $B$  的每一点  $\mathbf{x}$  上有一根一维的纤维  $F$ , 它是单分量的 Hilbert 空间  $h_x$ . 局部地看总有  $E = B \times F$ , 因此有时宽泛地把波函数  $\psi(\mathbf{x}, t) \in h_x$  说成是纤维丛的截面,因为它是一个复函数,定义在基流形每一点的纤维上.但是实际上,比如说,对于一个切矢量丛  $E = T(X^n)$ , 纤维是切平面,而截面是矢量场  $\mathbf{v}$ , 它给出一个映照  $B \rightarrow E$ , 或  $\mathbf{x} \rightarrow (\mathbf{x}, v_x)$ . 因

$$|\psi(t)\rangle = \int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x} | \psi(t)\rangle = \int d\mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle \psi(\mathbf{x}, t) \quad (7.3.63)$$

可见对应关系是  $|\psi\rangle \leftrightarrow \psi$ ,  $\psi(\mathbf{x}, t) \leftrightarrow \psi_{\mathbf{x}}$ . 所以  $|\psi(t)\rangle$  是截面的整体的抽象表示, 而  $\psi(\mathbf{x}, t)$  则是截面的局域的具体表示.  $|\psi(t)\rangle$  在不依赖于基矢  $|\mathbf{x}\rangle$  的局域性质这一点上来说是惟一的和客观的, 但  $\psi(\mathbf{x}, t)$  依赖于  $|\mathbf{x}\rangle$ , 就不能说是惟一的和客观的. 不过我们常常会忽视这一点而对波函数提出诸如单值性的要求, 这是因为当基流形  $R$  的拓扑性质是可缩的 (contractible) 时候, 在它上面构造的纤维丛总是平庸的: 我们总可以通过平行移动在整个流形上定义基矢  $|\mathbf{x}\rangle$  而在每一点得到惟一的结果, 即总有  $\langle \mathbf{x}' | \mathbf{x} \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ . 我们将在下一小节中看到在二维 ( $D=2$ ) 平面有许多全同粒子的情形, 这样做一般是办不到的.

在单粒子量子力学中常写出 Feynman 路径积分形式:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, t) &= {}^H \langle \mathbf{x}, t | \psi \rangle^H = \int d\mathbf{x}' {}^H \langle \mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t_0 \rangle^{HH} \langle \mathbf{x}', t_0 | \psi \rangle^H \\ &= \int d\mathbf{x}' K(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t_0) \psi(\mathbf{x}', t_0) \quad (7.3.64) \end{aligned}$$

其中 Feynman 核函数

$$K(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}', t_0) = \int \mathcal{D}\mathbf{x}'' \exp \left\{ i \int_{t_0}^t dt' L \right\} \quad (7.3.65)$$

是一个泛函积分, 包含了从  $(\mathbf{x}', t_0)$  开始而终止于  $(\mathbf{x}, t)$  的一切路径  $\mathbf{x}''(t)$ , 其中每一条路径都可以连续地无阻碍地变到另一条路径, 下面将看到这在  $D=2$  的多粒子情形一般也是不可能的.

## 2. 物理组态空间、Hilbert 丛和截面

考虑在  $D=2$  的欧氏空间  $R$  上有  $n$  个全同粒子在运动. 如在文献 [8]、[10] 中所解释的那样, 物理组态空间并不简单地就是  $R^n$ . 首先, 任何两个粒子的位置重合是不允许的, 因此基流形从  $R^n$  收缩到  $M^n = R^n - D$ ,  $D$  表示  $R^n$  中的对角点, 即  $D = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ , 而其中对某个  $i \neq j$  有  $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j$ . 其次, 即使在经典水平上也必须计入全同粒子的不可区别性, 于是基流形进一步由  $M^n$  缩到  $\widetilde{M}^n \equiv \frac{M^n}{S_n}$ , 表示任何两个组态若能通过粒子间的一个置换  $S_n$  联系起来时将被认为是等同的.

为简单起见, 让我们考虑  $n=2$  的情形. 因为质心坐标  $\mathbf{x}_{cm} = \frac{(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)}{2}$  是平庸的, 只需要研究相对坐标  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ . 在平面  $\mathbf{x} = (x, y)$  上, 原点  $\mathbf{x} = 0$  (对应于  $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$ ) 必须作为一个奇点被除去. 从原点  $O$  沿一直线把此平面剪开, 然后把它折成一个半角为  $30^\circ$  的圆锥, 如果将此

具有两叶的圆锥面在割线处交叉地连接两叶,便得到  $M^2$  流形;如果将上下两叶相互等同起来,便得到  $\tilde{M}^2$ ,它正是在  $R^2$  上两个全同粒子的正确的物理组态空间. 在  $R^2$  上粒子坐标  $x_1$  和  $x_2$  可通过反钟向  $180^\circ$  的旋转而交换(见图 7.3.3a),相当于在  $\tilde{M}^2$  上绕锥顶的一个反钟向闭曲线  $C_1$ (图 7.3.3b);若位置的交换  $x_1 \leftrightarrow x_2$  通过  $R^2$  上一顺钟向的  $180^\circ$  转动而实现,它便相当于  $\tilde{M}^2$  上一顺钟向的闭曲线  $C_{-1}$ . 由于  $\tilde{M}^2$  上存在奇点  $O$ ,  $C_1$  和  $C_{-1}$  既不能通过连续变形互变,也不能缩成一点. 事实上,  $C_1$ ,  $C_{-1}$ , 还有  $C_0$ (它可以连续变形收缩为一点)是一阶同伦群  $\Pi_1(\tilde{M}^2)$  的 3 个基本元素(生成元).

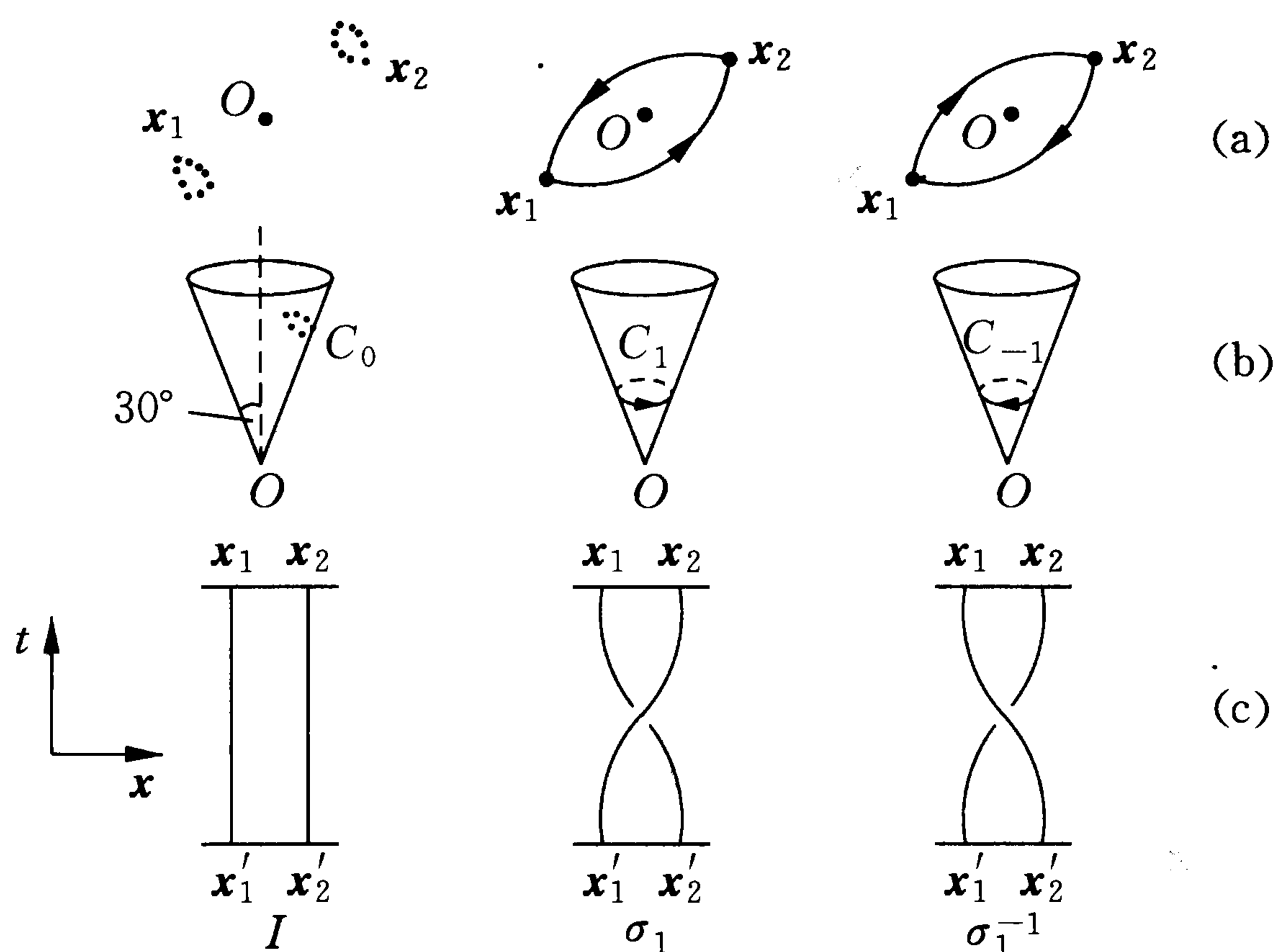


图 7.3.3

(a) 在  $R^2$  ( $D = 2$ ) 平面上两个全同粒子的位置交换; (b) 在  $\tilde{M}^2$  流形上相应的曲线; (c) 在  $x-t$  图上相应的轨迹,算符  $\sigma_1$  和  $\sigma_1^{-1}$  是辫子群的两个生成元

很明显,在图 7.3.3a 上进一步旋转  $180^\circ$  相当于在图 7.3.3b 中  $\tilde{M}^2$  上的  $(C_1)^2$  和  $(C_{-1})^2$ ,它们又分别对应于图 7.3.3c 中的  $(\sigma_1)^2$  和  $(\sigma_1^{-1})^2$ . 一般地,我们可以期望  $\sigma_1^m$  的一维么正表示有如下形式:

$$\chi(\sigma_1^m) = \exp(im\theta) \quad (7.3.66)$$

这里  $\theta$  是模型的参数,  $m$  称为绕数. 为证明这一点,让我们求助于上节引入的 Hilbert 丛的概念. 首先定义记号: 在  $M^2$  上的某一个位置基矢记为  $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle$ , 它表示第一个粒子在位置  $\mathbf{x}_1$  而第二个粒子在位置  $\mathbf{x}_2$ ,  $(|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\rangle)^\dagger = \langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 |$ . 另一方面, 在  $\tilde{M}^2$  上的一个位置基矢记为  $|\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \rangle\rangle = |\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 \rangle\rangle$ , 它表示有一个粒子位于  $\mathbf{x}_1$  而另一个位于  $\mathbf{x}_2$ . 考虑在 Hilbert 空间两全同粒子的一个态矢  $|\Psi(t)\rangle$ , 我们可以在整体上定义一个单值的截面, 它取值在基流形  $\tilde{M}^2$  上的一根纤维上:

$$\langle\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \Psi(t) \rangle\rangle \equiv \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) = \Psi(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1, t) \quad (7.3.67)$$

又可表示成如下的形式:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t) &= \int d\mathbf{x}'_1 d\mathbf{x}'_2 \langle\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2 \rangle\rangle \langle\langle \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2 | \Psi(t) \rangle\rangle \\ &= \lim_{t' \rightarrow t} \sum_m \int d\mathbf{x}'_1 d\mathbf{x}'_2 \xi_m(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) \phi_m(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, t') \end{aligned} \quad (7.3.68)$$

这里定义两类基矢之间的转换函数为

$$\xi_m(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2) \equiv \langle\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2 \rangle\rangle_m \quad (7.3.69)$$

其中

$$\xi_0 \leftrightarrow \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \delta(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}'_2) \quad (7.3.70)$$

对应于辫子群中的单位元,而

$$\phi_m(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, t) \equiv_m \langle\langle \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2 | \Psi(t) \rangle\rangle \quad (7.3.71)$$

是在基矢  $\xi_m$  上定义的多值波函数.

注意方程(7.3.69)和(7.3.71)中对  $m$  的依赖关系的符号应该相反,以保证  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, t)$  的单值性,即使  $\phi_m(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, t)$  为多值的. 进一步的位置交换  $\mathbf{x}'_1 \leftrightarrow \mathbf{x}'_2$  将把  $\phi_m(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, t)$  改为  $e^{\pm i\theta} \phi_{m\pm 1}(\mathbf{x}'_2, \mathbf{x}'_1, t)$ , 它已经包含在(7.3.68)的求和式之中.  $\xi_m(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2)$  的多值性可以在图7.3.3c上看出,那里引入了一个虚拟的时间  $t$  并用  $m$  来表示两根弦相互缠绕的数目,从下面坐标  $\mathbf{x}'_i (i = 1, 2)$  出发的弦不妨对应于第  $i$  个粒子的“轨迹”,故  $\mathbf{x}'_i$  对应于  $M^2$  流形上的坐标. 另一方面,上部坐标  $\mathbf{x}_i$  应当理解为在  $\tilde{M}^2$  上位置的标记,因此并不联系于特定的粒子而是对  $\mathbf{x}_1$  与  $\mathbf{x}_2$  的交换为对称的. 当我们在讨论多粒子 ( $n > 2$ ) 情形时上述看法仍然保持正确,它对我们应用辫子群理论将有所裨益\*.

### 7.3D 分数统计与 Chern-Simons 规范场

在这最后一节中,我们要简单地介绍一下:(2+1)维情形下分数统计性质可以从一种特殊的规范场与粒子耦合而得到,这种规范场叫做 Chern-Simons 规范场(Chern 是数学家陈省身). 写出粒子(电荷  $q$ )的拉氏量为(见(7.3.5)式):

\* 进一步讨论请见: Yi-xin Chen and G-j Ni, *Phys. Rev. D* **43**, 4133(1991).

$$L = \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{2} m \dot{x}_i^2 + q[-a_0(x_i) + \dot{x}_i \cdot a(x_i)] \right\} + \frac{\mu}{2} \int d^2x \epsilon^{\rho\sigma\tau} a_\rho \partial_\sigma a_\tau \quad (7.3.72)$$

这里  $x_i$  是第  $i$  个粒子的平面位置矢量,  $a(x_i)$  是粒子所在点的一个矢量场, 另有“标势”  $a_0$ , 共有 3 个分量, 组成 C-S 规范场, 它的拉氏量如 (7.3.72) 式最后一项所示, 称为 C-S 项,  $\epsilon^{\rho\sigma\tau}$  ( $\rho, \sigma, \tau = 0, 1, 2$ ) 是三阶完全反对称张量,  $\epsilon^{012} = 1$ . 有趣的是, (7.3.72) 式中不包含通常规范场的拉氏量  $-\frac{1}{16\pi} f_{\mu\nu}^2$ , ( $f_{\mu\nu} = \partial_\mu a_\nu - \partial_\nu a_\mu$ ). 这里  $a_\mu$  不是一个矩阵, 叫做阿贝尔的 C-S 规范场. 注意 C-S 项的指标缩并中是靠  $\epsilon^{\rho\sigma\tau}$  而不是常见的度规张量  $g^{\mu\nu}$ , 这意味着 C-S 项具有一种标度(scale)不变性\*; 另外, C-S 项也是规范不变的, 即它在变换  $a_\rho \rightarrow a_\rho + \partial_\rho \Lambda(x)$  下保持不变(这种不变性正靠  $\epsilon^{\rho\sigma\tau}$  来保证).  $\mu$  是无量纲参数, 下面将看到它决定了统计性质.

我们马上就可见到, 这个 C-S 场  $a_\rho$  实际上是一种虚拟的场, 它并不代表真实的物理自由度. 为此来看拉氏量对  $a_\rho$  的变分, 即得  $a$  场的运动方程

$$\frac{\delta L}{\delta a_\rho(x)} = 0 \quad (7.3.73)$$

它给出

$$qj^\rho(x) = -\frac{\mu}{2} \epsilon^{\rho\sigma\tau} f_{\sigma\tau}, \quad (\rho \neq 0) \quad (7.3.74)$$

其中

$$j^\rho(x) = \sum_i (\dot{x}_i)^\rho \delta^2(x - x_i), \quad (\rho \neq 0) \quad (7.3.75)$$

是粒子的流密度. 由 (7.3.74) 式可见,  $j^\rho$  完全决定了 C-S 场的场强  $f_{\sigma\tau}$ , 还要注意, 不为零的场强 ( $f \neq 0$ ) 完全定域在粒子的世界线上, 因此粒子间不存在经典的洛伦兹力. 特别地说, 我们令 (7.3.73) 式中  $\rho = 0$ , 得到

$$qN = \mu \int d^2x f_{12} = \mu \Phi \quad (7.3.76)$$

其中  $\Phi = \int d^2x f_{12}$  是 C-S 项所带的虚拟的磁通量, 每个粒子平均带有磁通

$$\frac{\Phi}{N} = \frac{q}{\mu} \quad (7.3.77)$$

\* 作标度变换  $x_\alpha \rightarrow \lambda x_\alpha$ , ( $\alpha = 1, 2$ ), C-S 项不变(考虑  $\sigma = 0$ ,  $\partial_0 \rightarrow \partial_0$ ,  $a_\alpha \rightarrow a_\alpha/\lambda$ ,  $d^2x \rightarrow \lambda^2 d^2x$ ).

另一方面,每个粒子又带有电荷  $q$ ,这时粒子在运动中相互缠绕的结果,由 Aharonov-Bohm 效应而得到附加的相位,于是改变了量子统计的性质,设原来为玻色子,现在则当交换二粒子位置时,波函数得到相因子  $e^{i\theta}$ ,而

$$\theta = \frac{q^2}{2\mu} \quad (7.3.78)$$

为进一步弄清楚这一点,我们转到哈密顿表述,先改写拉氏量为

$$L = \sum_i \frac{m}{2} \dot{x}_i^2 + \int d^2x a_0 \{-qj_0 + \mu\epsilon_{\alpha\beta} \partial_\alpha a_\beta\} + q \sum_i \dot{x}_i \cdot a - \frac{\mu}{2} \int d^2x \epsilon_{\alpha\beta} a_\alpha \dot{a}_\beta \quad (7.3.79)$$

这里  $\alpha, \beta = 1, 2$  是空间指标,  $\epsilon_{12} = 1$ . 可见除第一项外,其余各项或者对  $a_0$  为线性,或者对  $\dot{x}_i$  或  $\dot{a}_\beta$  也是线性,同时并不含有  $\dot{a}_0$  项,故由方程  $\frac{\delta L}{\delta a_0} = 0$ , 得到约束条件

$$qj_0(x) = q \sum_i \delta^{(2)}(x - x_i) = \mu\epsilon_{\alpha\beta} \partial_\alpha a_\beta(x) \quad (7.3.80)$$

这等价于(7.3.76)式.

定义与  $a_\beta(x)$  及  $x_i$  分别对应的正则动量如下:

$$\Pi_{\alpha\beta} = \frac{\delta L}{\delta \dot{a}_\beta(x)} = \frac{\mu}{2} \epsilon_{\alpha\beta} a_\alpha(x) \quad (7.3.81)$$

$$p_{x_i} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} = m\dot{x}_i + qa(x_i) \quad (7.3.82)$$

则哈密顿量等于

$$\begin{aligned} H &= \sum_i \dot{x}_i p_{x_i} + \int d^2x \dot{a}_\beta(x) \Pi_{\alpha\beta}(x) - L \\ &= \sum_i \frac{1}{2m} (p_i - qa(x_i))^2 \end{aligned} \quad (7.3.83)$$

因为 C-S 场  $a$  是一个非物理的变量,我们可从约束方程(7.3.80)解出它,即在规范条件

$$\partial_\beta a_\beta = 0 \quad (7.3.84)$$

下得到

$$a_\alpha(x) = -\frac{q}{2\pi\mu} \int d^2y \epsilon_{\alpha\beta} \frac{(x-y)_\beta}{|x-y|^2} \rho(y)$$

$$= -\frac{q}{2\pi\mu} \sum_i \epsilon_{\alpha\beta} \frac{(x-x_i)_\beta}{|x-x_i|^2} \quad (7.3.85)$$

把方程(7.3.83)、(7.3.85)与前面(7.3.17)、(7.3.18)式比较,我们就证明了(7.3.78)式.

由此可见,加入 C-S 规范场与粒子耦合,就可以在二维空间给分数统计以新的场论实现方式. 1988 年, Polyakov 指出这一点——一个玻色子可以转化为费米子或者相反<sup>[15], [16]</sup>, 引起了人们很大的兴趣. 近年来, 对 C-S 规范场的研究一直是理论物理的热点之一, 我们在下一节将看到它在 QHE 理论中的应用.

## §7.4 复合玻色子和复合费米子

### 7.4A 量子 Hall 效应的 CSLG 理论

前面的讨论已指出: 处于强磁场下在二维空间运动的电子还填不满第一 Landau 能级时 ( $\nu < 1$ ), 它们是自旋完全极化的费米子(相反方向极化的能态因巨大的 Zeeman 劈裂超过 Landau 能级的间距而可略去不计). 当  $\nu = \frac{1}{2k+1}$ ,  $k = 1, 2, \dots$  等整数时,  $N$  个电子的强关联态由 Laughlin 波函数

(7.2.24) 式所描写, 其中  $m = \frac{1}{\nu} = 2k+1$  是奇数. 1989 年后, 由张首晟

(S. C. Zhang) 和 H. Hansson, S. Kivelson 以及李东海(D. H. Lee)、Girvin、MacDonald 等人又发展出进一步统一解释 IQHE 和 FQHE 的理论, 仿照过去超导理论中引入序参量的 Landau-Ginsberg 理论, 又引进 Chern-Simons 规范场把相互作用的电子气映照成为自由的玻色子, 即电子在数学上等价于一些带有虚拟的 C-S 磁通量的“复合玻色子”, 故此理论可称为 CSLG 理论, 又称为“复合玻色子理论”. 下面介绍其大意<sup>[17]</sup>.

记  $\rho(x)$  为电子的粒子数密度,  $x$  是二维空间的流动坐标, 在“二次量子化”理论(详见下章)中,  $\rho(x)$  与复的“序参量” $\phi(x)$  的关系是

$$\rho(x) = \phi^\dagger(x)\phi(x) \quad (7.4.1)$$

$\phi(x)$  是玻色场算符, 满足如下的对易关系:

$$[\phi(x), \phi^\dagger(y)] = \delta^2(x-y) \quad (7.4.2)$$

电子之所以能用玻色场来描写是因为如上节所说, 引进一个 C-S 规范场  $\mathbf{a}(x)$  可以使费米子与玻色子互相转变, 即可用如下的哈密顿量来描写

FQHE 体系:

$$H = \int d^2x \phi^\dagger(x) \left[ \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{q}{c} \mathbf{A}(x) - \frac{q}{c} \mathbf{a}(x) \right)^2 + qA_0(x) \right] \phi(x) + \frac{1}{2} \int d^2x d^2y \delta\rho(x) V(x-y) \delta\rho(y) \quad (7.4.3)$$

其中  $\delta\rho(x) = \rho(x) - \bar{\rho}$  是  $\rho(x)$  对平均密度  $\bar{\rho}$  的偏离,  $V$  是电子间的长程库仑作用,  $\mathbf{A}(x)$  是外磁场的矢势 ( $A_0$  为标势), 而  $\mathbf{a}(x)$  是 C-S 规范场, 它与  $\rho(x)$  的关系是 (见 (7.3.77) 式)

$$\frac{q}{e} \epsilon^{\alpha\beta} \partial_\alpha a_\beta(x) = (2k+1) \phi_0 \rho(x) \quad (7.4.4)$$

( $\phi_0 = \frac{hc}{e}$ ), 其解为 (见 (7.3.82) 式)

$$\frac{q}{e} a^\alpha(x) = -\frac{\phi_0}{2\pi} (2k+1) \epsilon^{\alpha\beta} \int d^2y \frac{x^\beta - y^\beta}{|x-y|^2} \rho(y) \quad (7.4.5)$$

现在具体讨论  $k=1$  即  $\nu = \frac{1}{3}$  的情况, 这时每个电子平均分到 3 个  $\phi_0$  量子磁通. 这是指与  $\mathbf{A}$  联系的外磁场. 但是在 (7.4.1) ~ (7.4.5) 的模型中还有一个 C-S 规范场  $\mathbf{a}$ , 每个由  $\phi(x)$  场描写的玻色子带有 3 个  $\phi_0$  的“虚拟磁通量”, (请参见 (7.3.71) ~ (7.3.74) 式) 玻色子与 3 个  $\phi_0$  的虚拟磁通结合后形成的一个个复合体, 它们相互交换时因 A-B 效应而获得一个附加的相位因子:

$$\exp\left[ i \frac{q}{\hbar c} \int_0^\pi \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} \right] = \exp[i(2k+1)\pi] = -1 \quad (7.4.6)$$

使玻色子换位时的对称性转变为反对称性, 即复合体成为费米子, 成为原来电子的“化身”. 因  $q/e = -1$ , 由 (7.3.74) 式可见, 这些“虚拟的 ( $\mathbf{a}$ ) 磁通”方向恰好与外  $\mathbf{A}$  场的磁通的方向相反, 彼此抵消的结果使这些玻色子看不到任何磁通, 即成为自由的玻色子. (后面还会进一步讨论.)

已知无磁场的低温下的玻色子会产生“玻色-爱因斯坦凝结”, 会产生超导性 (即带电的超流性). 由此也可以解释强关联电子体系的不可压缩性. 因为任何电子密度的局域改变, 必然引起相伴随的  $\mathbf{a}$  场磁通的变化, 使原来被抵消了的外磁场又冒出来了, 而超导的 Meissner 效应告诉我们, 超导体内是排斥 (弱) 磁场的 (太强的磁场会破坏超导), 所以现在电子体系的密度必须保持均匀不变, 即它是不可压缩的. 下面表 7.4.1 是在这



种“复合玻色子理论”框架下量子 Hall 效应(QHE)与超导性的比较:

表 7.4.1 超导性与 QHE 的比较

| 超 导 性                  | QHE  |
|------------------------|--|
| 电子对(Cooper 对)是基本载流子    | 复合玻色子是基本载流子  |
| 完全导电                   | 纵向完全导电 ( $\rho_{xx} = 0$ )                             |
| 在磁场和有缺陷的材料中能够维持超<br>导性 | 横向电阻率 $\rho_{xy}$ 出现量子化 Hall 平台,其值在磁场<br>强度的小范围变化内保持不变 |
| 排斥一个弱的磁场(Meissner 效应)  | 电子体系在一固定磁场中保持密度不变<br>(不可压缩性)                           |
| 磁通量子化                  | 分数电荷(元激发的电荷以 $e$ 的分数为单位)                               |

最后一点“分数电荷”将在下一小节解释,现在要说明第三点中 Hall (横向)电压是怎么来的?乍一想来,玻色子既然看不到净的磁场,也就受不到洛伦兹力,何来 Hall 电压呢?为此看下面图 7.4.1. 一个复合玻色子运动时不仅带有电流,与它连在一起的“虚拟磁通” $3\phi_0$  (图上是垂直纸面向下)也随之流动,当它穿过图上的闭合环路时,由法拉第感应定律,便会产生横向的电动势 ( $\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \Phi}{\partial t}$ ),对  $N$  个复合玻色子来说,电流是

$I_c = q \frac{dN}{dt}$ , 虚拟磁通量流是  $I_v = \frac{q}{e} (2k + 1) \phi_0 \frac{dN}{dt}$ , 则诱导出来的 Hall 电压将等于

$$V_H = \frac{1}{c} (2k + 1) \phi_0 \frac{dN}{dt} \tag{7.4.7}$$

而相应之 Hall 电阻率

$$\rho_{xy} = \frac{V_H}{I_c} = \frac{(2k + 1)h}{e^2} \tag{7.4.8}$$

这就解释了 FQHE(比较图 7.2.1).

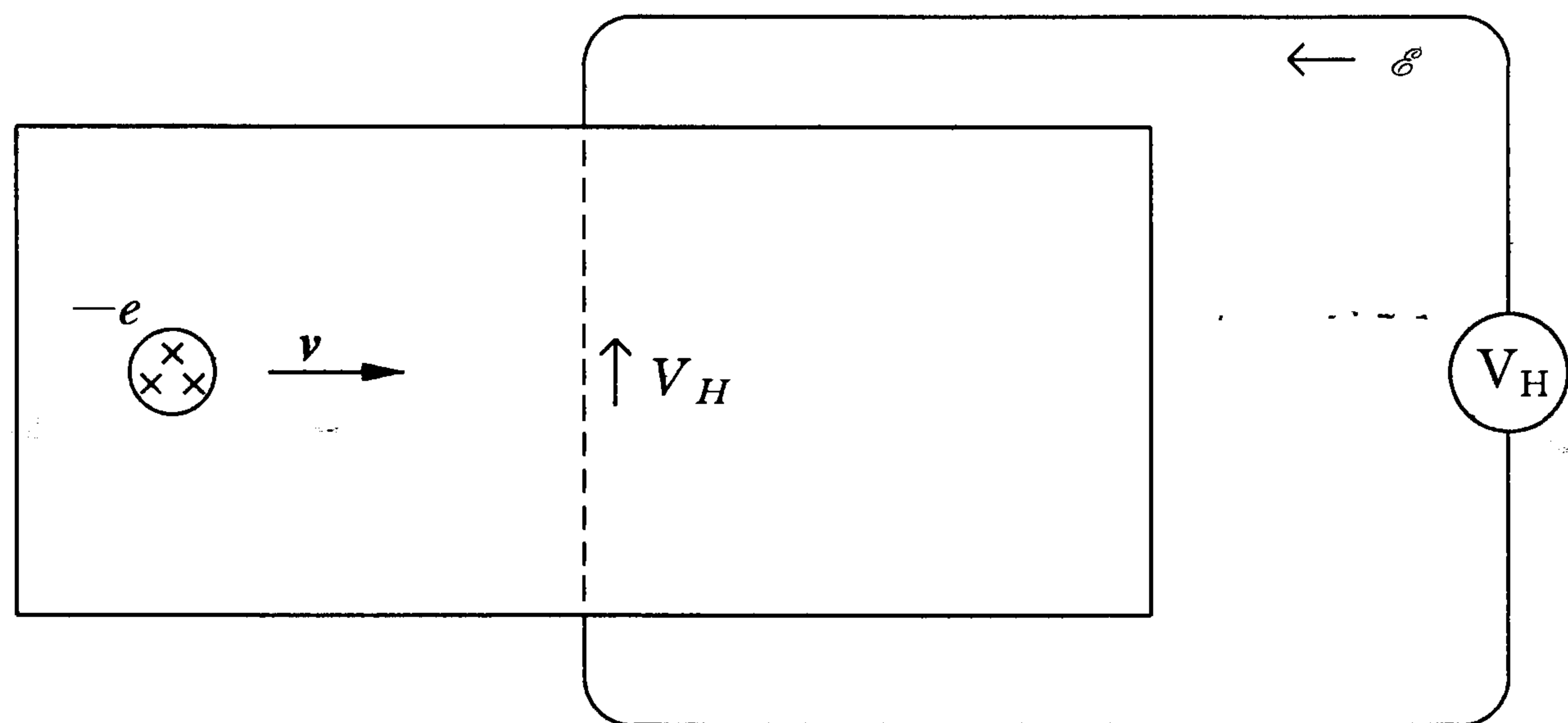


图 7.4.1 用“复合玻色子”理论解释 QHE

### 7.4B FQHE 中的元激发具有分数电荷和分数统计性质

现在我们来证明在 Laughlin 波函数(7.2.24)  $\psi_m$  所描写的 FQHE 基态上的元激发具有分数电荷  $q = \pm \frac{e}{m}$  和分数统计  $\theta = \frac{\pi}{m}$  的性质(参见文献[18]). 一个元激发(elementary excitation)又称为“准粒子”(quasi-particle), 是可以如下地形成的: 在基态  $\psi_m$  上“绝热地”引入一个单位量子磁通量  $\phi_0 = \frac{hc}{e}$ , 先设  $\phi_0$  在  $z_0 = 0$  (原点) 穿过半径为  $R$  的盘面. 我们先证明体系的总角动量会增加  $N$  (总电子数) (以  $\hbar$  为单位), 为此将  $\psi_m$  展开为形式  $(z_i = \frac{(x_i - iy_i)}{2l_B})$ :

$$\psi_m(z_1, \dots, z_N) = \sum_{\{k_1, \dots, k_N\}} C_{k_1, \dots, k_N} z_1^{mk_1} \cdots z_N^{mk_N} \exp\left\{-\sum_{j=1}^N |z_j|^2\right\} \quad (7.4.9)$$

其中整数  $\{k_1, \dots, k_N\}$  从 0 变到  $N$ , 但受到如下条件的限制:

$$\sum_{j=1}^N k_j = \frac{1}{2}N(N-1) \quad (7.4.10)$$

系数  $C_{k_1, \dots, k_N}$  对其中任何二个电子的脚标的交换必须是反对称的.

若将体系绕原点转过一个角度  $\theta$ , 第  $j$  个电子的坐标  $z_j$  得到一个相因子  $e^{i\theta}$ , 则  $\psi_m$  变为(参见 § 3.2C)

$$\psi_m(e^{i\theta}z_1, \dots, e^{i\theta}z_N) = \exp\left[im \frac{N}{2}(N-1)\theta\right] \psi_m(z_1, \dots, z_N) \quad (7.4.11)$$

这意味着  $\psi_m$  的总角动量  $L_z$  等于

$$M_m = \frac{1}{2}mN(N-1) \quad (7.4.12)$$

在  $z_0 = 0$  绝热地引入量子磁通  $\phi_0$  后, 单电子态的波函数由  $z^n e^{-|z|^2}$  变为  $z^{n+1} e^{-|z|^2}$ , 即从第一 Landau 能级的第  $n$  个态变为同一能级的第  $(n+1)$  个态(见(7.1.30)式). 现在类似地,  $\psi_m$  中的  $z_j^{mk_j}$  变为  $z_j^{mk_j+1}$ , 但这一绝热过程不改变指数因子. 如果不计系数也作相应的变化, 则这一变化相当于

在  $\psi_m$  上乘以因子  $\prod_{j=1}^N z_j$ . 由上述论证 Laughlin 写出一种元激发态如下, 它是在  $z_0$  点绝热地引入一个  $\phi_0$  磁通而得到的:

$$\psi_m^{(+)}(z_0; z_1, \dots, z_N) = \prod_{j=1}^N (z_j - z_0) \psi_m(z_1, \dots, z_N) \quad (7.4.13)$$

而这一个态有总角动量  $M_m^{(+)} = M_m + N$ .

从(7.4.13)式可见,当  $z_j \rightarrow z_0$ ,  $\psi_m^{(+)} \rightarrow 0$ ,这表示在  $z_0$  点引入的磁通抑制了在该点的电荷密度,所以这种元激发态叫做“准空穴”(quasihole).当然,体系的总电荷守恒而远离  $z_0$  点的电荷密度又是均匀的,故由电子液体的不可压缩性可以预期体系将发生膨胀,半径从  $R$  略微增大到  $R + \delta R$ . 在  $z_0$  点电子被挤出意味着准空穴带有正电荷  $q$ ,下面用 § 7.2 节最后的等离子体模拟法来证明  $q = \frac{e}{m}$ . 由(7.4.13)式有

$$|\psi_m^{(+)}(z_0; z_1, \dots, z_N)|^2 = \prod_{j=1}^N |z_j - z_0|^2 |\psi_m(z_1, \dots, z_N)|^2 \quad (7.4.14)$$

则仿照(7.2.29)~(7.2.32)式,现在的经典静电势能变为

$$U(z_0; z_1, \dots, z_N) = U(z_1, \dots, z_N) - \frac{2}{m} \sum_{j=1}^N \ln |z_j - z_0| \quad (7.4.15)$$

其中  $U(z_1, \dots, z_N)$  是由(7.2.31)式表示的原来的“一种分量的等离子体”的势能. 现在多了一项表示一个在  $z_0$  点外来的“探针”电荷为  $\left(\frac{-1}{m}\right)$  与在  $z_j$  的各粒子(电荷-1)间的相互作用能量. 由于它们之间的排斥力,在离探针距离  $|z - z_0| < \lambda_D$  的小距离内,等离子体密度被压低,而在超过  $\lambda_D$  的距离,探针的作用完全被屏蔽了( $\lambda_D$  叫做等离子体中的 Debye 屏蔽长度,  $\lambda_D = \sqrt{2}l_B$ ). 既然在  $z_0$  点附近被推斥开去的电荷等于  $\frac{-1}{m}$  (注意公式(7.4.15)中的电荷以  $e$  为单位),这意味着在  $z_0$  点的“准空穴”具有正电荷  $q = \frac{e}{m}$ .

被准空穴挤出去的电荷跑到半径为  $R$  的盘面边界上,在 § 7.2 已知电荷的(粒子数)面密度为  $\rho_0 = \frac{1}{2\pi m l_B^2}$ ,  $\pi R^2 \rho_0 = N$ , 故

$$\frac{R}{l_B} = \sqrt{2mN} \quad (7.4.16)$$

$R$  增大后新增的面积刚可容纳  $\frac{1}{m}$  的电荷,即

$$[\pi(R + \delta R)^2 - \pi R^2] \frac{1}{2\pi m l_B^2} = \frac{1}{m}$$

$$\text{或} \quad \frac{\delta R}{l_B} = \frac{l_B}{R} = (\sqrt{2mN})^{-1} \quad (7.4.17)$$

与准空穴相反的元激发叫做“准电子”，它由在  $z_0$  点绝热地引入一个方向与外磁场相反的磁通量  $\phi_0$  而形成。它的引入使原已填充的 Landau 能态上各电子的角动量分别减小一个单位，但其中原来角动量为零的电子将被迫转移到第一 Landau 激发能级 ( $K = 1$ ) 上去。我们略去详细的讨论，只写出准电子波函数用 Laughlin 波函数被微分算符作用的表达形式为：

$$\psi_m^{(-)}(z_0; \{z_j\}) = \exp\left\{-\sum_{j=1}^N |z_j|^2\right\} \prod_{j=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial z_j} - z_0^*\right) \prod_{1 \leq j < k \leq N} (z_j - z_k)^m \quad (7.4.18)$$

而类似于准空穴的论证表明准电子带有负的分数电荷  $q = \frac{-e}{m}$ 。

刚才强调为产生准空穴(或准电子)而引入(或减去)一个量子磁通  $\phi_0$  的过程必须是绝热的,这样才能使不可压缩的电子液体发生绝热的膨胀而刚好容纳一个新的 Landau 轨道,否则便可能产生向更高 Landau 能级的跃迁或能量更高的激发了。当  $m = 3$  时,一个准空穴或准电子的激发能量可估计约为<sup>[6]</sup>  $\Delta = 0.02e^2/l_B$ ,再计入介电常数  $\epsilon$ (对 GaAs,  $\epsilon = 13$ ),当磁场为  $B = 15$  Tesla 时,  $\Delta \approx \frac{0.02e^2}{\epsilon l_B} \approx 4\text{K}$ 。

引入单位磁通  $\phi_0$  而引起的元激发(即准粒子)带有分数电荷  $q = \pm \frac{e}{m}$  可简单地理解如下: FQHE 基态中电子刚好填满第一 Landau 能级的  $\frac{1}{m}$ , 即平均每个电子带有  $m$  个  $\phi_0$  单位的磁通, 即一个  $e$  对应于  $m\phi_0$ , 由此可见, 当绝热地引入一个  $\phi_0$  而不破坏状态的量子相干性时, 表现出来的激发电荷应为分数荷  $q = \pm \frac{e}{m}$ 。

现在用 FQHE 的复合玻色子理论(CSLG 理论)来说明上述元激发服从分数统计。注意从(7.4.4)式, 即从

$$\left(\frac{q}{e}\right) \nabla \times \mathbf{a}(x) = (2k+1)\phi_0 \rho(x) \quad (7.4.19)$$

式出发可得围绕一闭合曲线的 C-S 场的线积分

$$\left(\frac{q}{e}\right)\oint \mathbf{a} \cdot d\mathbf{l} = (2k+1)\phi_0 = m\phi_0 \quad (7.4.20)$$

如图 7.4.2 所示,这是指一个单位电荷  $e$  带有磁通  $\Phi = m\phi_0$  的情况,此时基态中两个复合玻色子的交换引起的位相因子如(7.4.6)式所示. 但若对基态上的两个准粒子元激发,因  $\Phi = \phi_0$ ,  $e \rightarrow q = \frac{e}{m}$ , 它们之间的交换引起的位相因子便等于  $\exp\left(\frac{i\pi}{m}\right)$ , 这就显示出分数统计的性质了.(FQHE 中分数电荷的准粒子必然服从分数统计,这一点最早是由 Halperin 指出的<sup>[19]</sup>.)

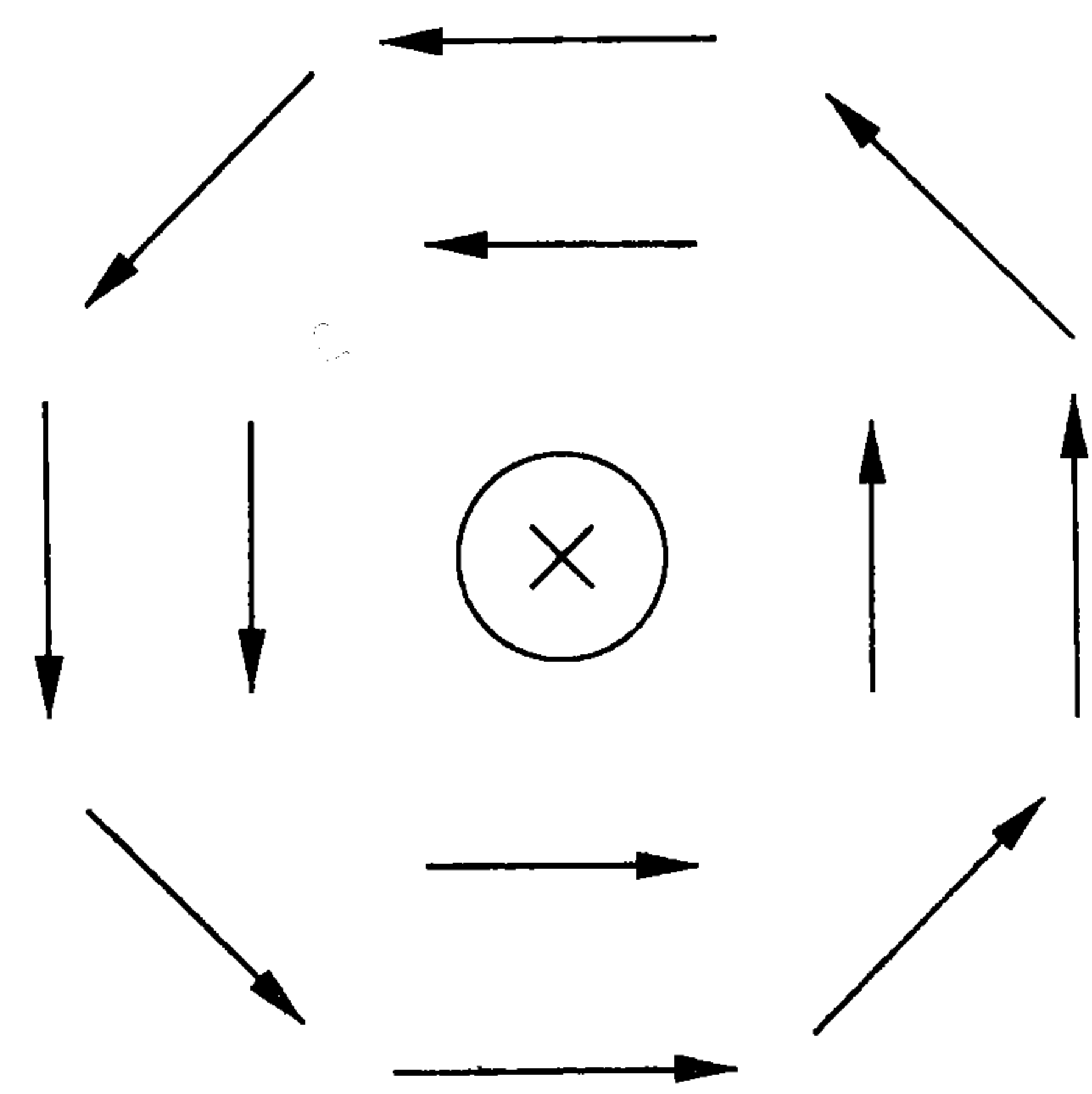


图 7.4.2 围绕一磁通量  $\Phi$  (电荷  $q$ ) 的 C-S 场涡旋,其相位(方向)转过  $2\pi$

还要进一步指出<sup>[20]</sup>: 在二维空间的分数电荷决不可能是一种点电荷(包括空间有限扩展的电荷如常规超导中的 Cooper 对),而是必须带有某种非定域信息,即由非单值(有奇性)波函数所描写的. 证明的根据是物理学一条基本原理——规范不变性.

如图 7.4.3 所示,二维平面上有磁通量  $\Phi$  穿过,则其周围的矢势可以写出为

$$\mathbf{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{\theta} \quad (7.4.21)$$

其中  $\hat{\theta}$  是沿  $\theta$  增加方向的单位矢量,上式是单值的(非奇的). 今作一个规范变换

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} - \nabla\Lambda, \text{ 取 } \Lambda = \frac{\Phi}{2\pi}\theta \quad (7.4.22)$$

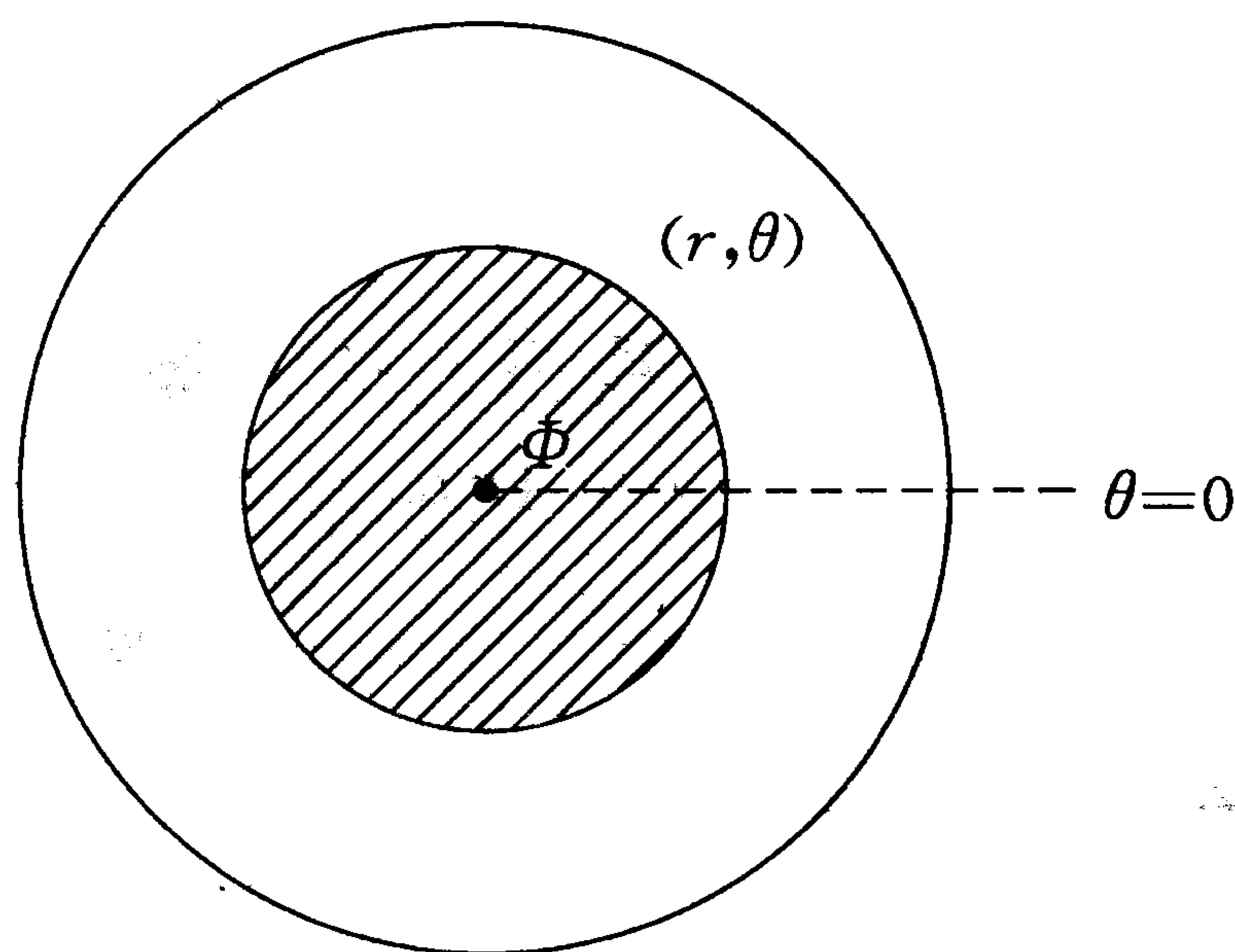


图 7.4.3 在二维平面上有磁通量  $\Phi$  穿过的环形区域内一个带有分数电荷的准粒子必然带有非定域信息. ( $\theta=0$  处有一条看不见的“弦”)

则变换后的矢势为

$$A' = \frac{\Phi}{2\pi r} \delta(\theta) \hat{\theta} \quad (7.4.23)$$

$A'$ 到处为零,但在 $\theta = 0$ 处有奇性,好比有一根看不见的弦(string),后者可以移动到别的 $\theta$ 值处,但总不可以去掉.

现在考虑一个带电 $q = \eta e$ 的准粒子,让它绕 $\Phi$ 转一圈,则其波函数 $\psi$ 将变为 $\psi'$ :

$$\psi \rightarrow \psi' = \psi \exp\left(i \frac{q}{\hbar c} \Phi\right) \quad (7.4.24)$$

这一附加的相位跃变是当准粒子穿过 $\theta = 0$ 处的弦时获得的. 因为规范变换是任意的,这个准粒子应该看不见这根弦,这就要求 $\frac{q}{\hbar c} \Phi = 2\pi \times (\text{整数})$ . 又因为基本电荷是 $e$ ,  $\Phi = n\phi_0$ ,  $n$ 为整数,设 $q = \eta e$ ,即见 $\frac{q}{\hbar c} \Phi = 2\pi n\eta$ ,当 $n = 1$ 时这就表示 $\eta = \text{整数}$ . 即准粒子不可能是分数荷. 例如Cooper对有 $\eta = 2$ ,可看成为“点电荷”,便符合上述讨论,满足规范不变性的要求.

反过来说,一个“点状”的分数电荷一定与规范不变性不相容. 惟一的出路是:一个分数电荷的准粒子一定带有某种非定域的信息,即运动时带有某一条“弦”,需要用一种“赝波函数” $\psi(r, \theta)$ 来描写,当它绕磁通量一圈回到原处时有多值性:

$$\psi(r, \theta + 2\pi) \neq \psi(r, \theta) \quad (7.4.25)$$

如果存在一个最小的整数 $p$ 能使 $p \left(\frac{q}{e}\right) = \text{整数}$ ,则

$$\psi(r, \theta + 2p\pi) = \psi(r, \theta) \quad (7.4.26)$$

这表示一个准粒子转 $p$ 圈可使波函数还原,或者, $p$ 个准粒子一起转一圈,也可使它们的波函数还原.

结合前面的讨论可见,FQHE基态上的元激发,既是分数电荷,又服从分数统计,它们在运动时正带有(与其他准粒子位置有关的)非定域的信息,或者说,它们可以用非单值(有奇性)的波函数来描写,它们确实不是点粒子,这样才不会违反规范不变性原理.

二维空间的直观图像较难想象,在一维空间便可以有比较直观的图像. 那里的非定域准粒子是一种有拓扑性的畴壁(Domain wall)或称“扭结”(kink)的元激发,记为 $S$ 或 $\bar{S}$ (图7.4.4). 显然它们是非定域的准粒子,(称

为“孤子”),而不是点粒子.  $S$ (或  $\bar{S}$ )联结  $A$  相和  $B$  相(或相反),实验上和理论上都已证明,在 kink(antikink)范围非定域地分布着的电荷是  $e$  的一半:  $q = \pm \frac{e}{2}$ , 即也是一种特定的分数荷\*. 但是注意,在一维空间没有分数统计.

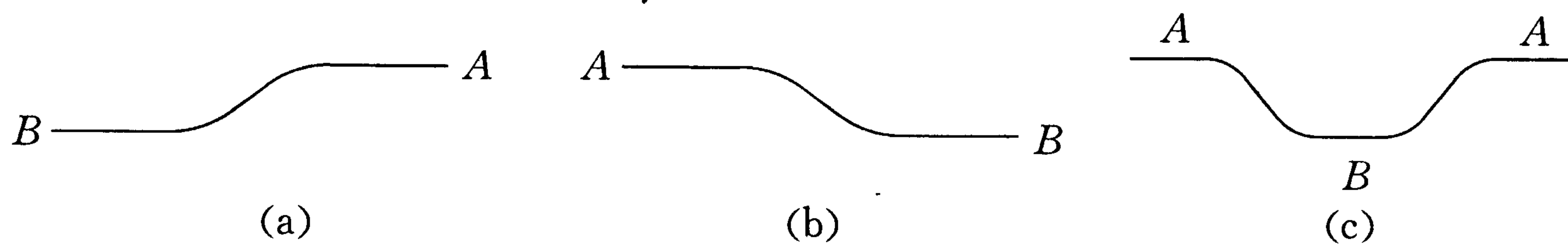


图 7.4.4 一维空间某些高分子链上的拓扑性元激发

(a) 扭结(kink) $S$ ; (b) 反扭结(antikink) $\bar{S}$ ; (c) 正反 kink 形成的对  $S\bar{S}$ (pair) 仍可视为一普通的粒子(称为极化子, polaron)

### 7.4C FQHE 的复合费米子理论

Jain<sup>[21]</sup>根据 FQHE 基态上准空穴的构造方法,把描写 FQHE 的 Laughlin 波函数  $\psi_m$  写成如下形式:

$$\psi_m(z_1, \dots, z_N) = \prod_{1 \leq i < j \leq N} (z_i - z_j)^{m-1} \psi_1(z_1, \dots, z_N) \quad (7.4.27)$$

其中

$$\psi_1(z_1, \dots, z_N) = \prod_{i < j} (z_i - z_j) \exp\left(-\sum_{i=1}^N |z_i|^2\right) \quad (7.4.28)$$

是表示  $N$  个电子刚好填满最低 Landau 能级 ( $K = 0$ ) 的 IQHE 波函数, (7.4.27) 式中  $\psi_1$  前面的因子表示在每个电子 ( $z_i$ ) 上都附着有  $(m-1)\phi_0$  的磁通量, 成为一个“复合粒子”, 因  $(m-1)$  是偶数, 复合粒子还是费米子, 但是它们只“看到”较弱的等效磁场, 因而  $N$  个复合费米子刚好填满了最低 Landau 能级, 产生 IQHE, 所以原来电子的 FQHE 便等价于复合费米子的 IQHE. 注意(7.4.28)式还可写成 Slater 行列式的形式:

$$\psi_1(z_1, \dots, z_N) = \begin{vmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ z_1 & \cdots & z_N \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ z_1^{N-1} & \cdots & z_N^{N-1} \end{vmatrix} \exp\left[-\sum_{i=1}^N |z_i|^2\right] \quad (7.4.29)$$

(这个行列式称为 Vandermonde 行列式), 恰好表示了  $N$  个费米子近似独立地填满最低 Landau 能级  $N$  个态的全反对称波函数.

\* 实验上还观察到更复杂的“电荷与自旋分离”的现象, 参见孙鑫《高聚物中的孤子和极化子》, 四川教育出版社, 1987

也可换一说法. 在  $\psi_m$  中原来每个电子平均看到  $m\phi_0$  的外磁通, 但它们间长程关联的动力学效应相当于局域地产生 C-S 场的虚拟磁通, 方向与外场相反, 因而对外场起了屏蔽作用, 先假想有  $(m-1)\phi_0$  的虚拟磁通, 恰好使原来强磁场 ( $B$ ) 下电子填满  $\nu = \frac{1}{m}$  个 Landau 能级的 FQHE, 等价于复合费米子在较弱的等效磁场 ( $B_{\text{eff}} = \frac{1}{m}B$ ) 下填满整个 Landau 能级的 IQHE. 若进一步考虑  $m\phi_0$  的虚拟磁通与电子形成的复合体, 它是一个玻色子, 而且玻色子完全看不到磁场了. 这就是本节开始时讲的 CSLG 理论.

实验上发现  $\nu = \frac{2}{5}, \frac{3}{7}$  等的 FQHE, 可一般地写成:

$$\nu = \frac{n}{2pn \pm 1} \quad (7.4.30)$$

其中  $n$  和  $p$  都是正整数 ( $1, 2, \dots$ ). 理论上, 可假设一个有效的磁场强度等于 (记  $\rho$  为电子的数密度)

$$B^* = B - 2p\rho\phi_0 \quad (7.4.31)$$

它可以取正值或负值. 相应地定义复合费米子的填充因子为

$$\nu^* = \frac{\rho\phi_0}{|B^*|} \quad (7.4.32)$$

则  $\nu$  与  $\nu^*$  的关系是

$$\nu = \frac{\nu^*}{2p\nu^* \pm 1} \quad (7.4.33)$$

其中负号适用于  $B^*$  为负的情况. 于是复合费米子的 IQHE 条件

$$\nu^* = n \quad (7.4.34)$$

立刻给出 (7.4.30) 式. 进一步关于  $\nu = 1/2$  情况的讨论, 请见参考文献 [22].

## § 7.5 FQHE 中分数电荷的实验发现

FQHE 中由 Laughlin 波函数描写的基态是一种不可压缩的流体, 在它上面产生的元激发是分数荷, 与基态间存在着不等于零的能隙 ( $\Delta \neq 0$ ). 假定这些带有分数电荷  $q = \eta e = \frac{e}{m} = \nu e$  而彼此不相作用的准



粒子是实验上测得的 FQHE 的载流子,则可以仿照 § 7. 2D 中对 IQHE 的解释,只须把载流子从电子(电荷  $e$ )改为这里的准粒子(电荷  $\nu e$ ),便可从(7. 2. 21)式的 IQHE 中的 Hall 电导率推导出(7. 2. 28)式对 FQHE 的 Hall 电导率公式来. 这种导出方式隐含的假设与 § 7. 2D 中相似,但其中一条假设是:将一个准粒子(电荷  $q$ )从图 7. 2. 2 上圆柱环的一侧移到另一侧,即经过 Hall 电压  $V$  所需之能量等于  $\delta E = qV$ . 如果  $q$  是点电荷(如 IQHE 中的电子)的话,这一假设的正确性是不言而喻的,但因在 FQHE 中的准粒子不是点电荷,它带有一条看不见的“弦”,上述假定是相当微妙的<sup>[20]</sup>,实际上是不可信的.

从 Halperin 开始<sup>[23]</sup>, FQHE 中“边缘态”的重要性逐渐被认识. 如前所说,由于 Laughlin 态的不可压缩性(基态之上存在能隙),在量子 Hall 液体内部的激发很不容易,事实上体内(bulk)密度的扰动立即转移到边缘上去了,在那里激发起来的态是没有能隙的(好比一个不可压缩的液滴表面激起的波). 文小刚<sup>[24]</sup>仔细地研究了 FQHE 的边缘态问题,证明那里的体系可看为许多一维的相互作用电子,它们激起的波在二维平面的边缘沿一个方向运动,形成所谓“Chiral Luttinger 液体”模型,而元激发也带有分数电荷  $q = \nu e$ . 例如  $\nu = \frac{1}{3}$ , 它们是体内 Laughlin 元激发在边缘上的推广. 因此实验上测得的 FQHE 一定是以它们作为载流子的.

1995 年最早有测到 FQHE 中分数电荷  $q = \frac{e}{3}$  的报道<sup>[25]</sup>,但其解释受到怀疑. 为了直接测到载流子的电荷,崔琦曾在 1987 年建议,可通过 FQHE 中量子噪声的测量,于是结合文小刚的理论后,1997 年几乎同时报告了两个实验结果<sup>[26][27]</sup>,根据量子噪声功率  $S_I$  与两个 Hall 样品间的隧道电流(又称背散射电流)  $I_B$  之间关系的 Schottky 公式

$$S_I = 2qI_B \quad (7. 5. 1)$$

测量到载流子电荷  $q = \frac{e}{3}$ . 这是令人信服的.

1985 年,发现 IQHE 的 Klitzing 获诺贝尔物理学奖. 1998 年, FQHE 的实验发现者崔琦和 Störmer 以及理论家 Laughlin 合获诺贝尔物理学奖. 经过长达 20 多年的实验和理论研究,大家已确信 FQHE 揭示了一种新的量子液体态,在强关联的不可压缩的电子态上产生的元激发居然是带有分数电荷和分数统计性质的非定域的准粒子,这是过去无法想像的. 在 高能(粒子)物理中讨论有分数电荷的夸克已经有 30 多年了,至今尚未

在实验中直接观察到,想不到在低能的凝聚态物理中先看到了分数电荷. C-S 规范场在理论上也讨论了许多年,想不到在这里的复合玻色子理论中竟会有如此成功的应用. 人们不禁要问:这种 C-S 规范场是“真”的吗<sup>[28]</sup>? 毫无疑问的是:对 FQHE 以及高  $T_c$  超导的研究已经并将继续揭开量子物理学崭新的篇章.

## 习 题

7.1 若在  $D$  维空间静电学中的 Green 函数由下式定义:

$$\nabla^2 G = (x | x') = -\delta^D(x - x')$$

其中  $\delta^D(x - x')$  是在  $D$  维空间的  $\delta$  函数,试证明

$$G(x | x') = \frac{1}{4\pi |x - x'|}, (D = 3)$$

$$G(x | x') = \frac{1}{2\pi} \ln\left(\frac{1}{|x - x'|}\right), (D = 2)$$

$$G(x | x') = -\frac{1}{2} |x - x'|, (D = 1)$$

7.2 请从(7.3.47)式出发验证方程(7.3.51)式.

7.3 定义“运动学轨道角动量”为  $L' = r \times \pi$ , 其中  $\pi = p - \frac{q}{c} \mathbf{A}$  是一荷电粒子的运动学动量.

(1) 试在对称规范下用第一 Landau 能级的波函数(7.1.30)式计算一个电子的  $L'_z$  之平均值.

(2) 类似地对 Landau 规范下  $K = 0$  的电子波函数(7.1.4)和(7.1.8)式,计算其  $L'_z$  的平均值.

## 参 考 文 献

- [1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory*. Pergamon Press, 1977
- [2] Kerson Huang. *Statistical Mechanics* (2nd Ed.). Wiley, New York, 1981; *Lecture at Fudan University, May 27, 1985. CTP # 1265, MIT*
- [3] K. V. Klitzing, G. Dorda and M. Pepper. *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 494 (1980)
- [4] D. C. Tsui, H. L. Störmer and A. C. Gossard. *Phys. Rev. Lett.*, **48**, 1559 (1982)
- [5] R. B. Laughlin. *Phys. Rev.*, **B 23**, 5632 (1981)
- [6] R. B. Laughlin. *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 1395 (1983)
- [7a] 倪光炯, 陈苏卿. 莱文森定理, 反常和真空相变. 上海: 上海科学技术出版社, 1995

- [7b] Yi-xin Chen, G-j Ni, *Commun Theor Phys.* **16**, 17(1991)
- [8] J. M. Leinaas, J. Myrheim. *Nuovo Cimento*, **B 37**(1), 1 (1977)
- [9] F. Wilczek. *Phys. Rev. Lett.*, **48**, 1144 (1982)
- [10] Y. S. Wu. *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 2103 (1984)
- [11] L. E. Reichl. *A Modern Course in Statistical Physics*. Austin: Univ. of Texas Press, 1980
- [12] D. P. Arovas, R. Schrieffer, F. Wilczek and A. Zee. *Nucl. Phys.*, **B 251**, 117 (1985)
- [13] A. Comtet, Y. Geogelin, S. Ourry. *J. Phys.*, **A 22**(18), 3917 (1989)
- [14] 陈苏卿. 复旦学报, **33** (2), 235 (1994)
- [15] A. M. Polyakov. *Mod. Phys. Lett.*, **A3**, 325 (1988)
- [16] Chen Y-x, Ni G-j. *Chin. Phys. Lett.*, **7** (10), 433 (1990)
- [17] S. C. Zhang. *Int. Jour. Mod. Phys.*, **B 6**, 25 (1992); S. M. Girvin, A. H. MacDonald. *Phys. Rev. Lett.*, **58**, 1252(1987)
- [18] E. Fradkin. *Field Theories of Condensed Matter Systems*. Addison-Wesley Publishing Company, 1991
- [19] B. I. Halperin. *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 1583 (1984)
- [20] S. Kivelson and M. Roček. *Phys. Lett.*, **156B**, 85 (1985)
- [21] J. Jain. *Phys. Rev.*, **B 40**, 8079 (1989); *Phys. Today*, April, 2000, 39
- [22] 谢希德, 陆栋. 固体能带理论. 上海: 复旦大学出版社, 1998
- [23] B. I. Halperin. *Phys. Rev.*, **B 25**, 2185 (1985)
- [24] X. G. Wen. *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 2206 (1990); *Phys. Rev.*, **B 41**, 12838 (1990); Lecture "Quantum (Field) Theory for Many-body Systems", July 18, 2000
- [25] V. J. Goldman and B. Su. *Science*, **267**, 1010 (1995)
- [26] R. de Picciotto, M. Reznikov, M. Helblum, V. Umansky, G. Bunin & D. Mahalu, *Nature*, **389**, 162 (1997)
- [27] L. Saminadayar and D. C. Glatli. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 2526 (1997)
- [28] R. B. Laughlin. *Int. Jour. Mod. Phys.*, **B 5**, 1507 (1991)
- [29] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik. *Table of Integrals, Series, and Products*. Academic Press, 1980
- [30] 《数学手册》编写组. 数学手册. 北京: 高等教育出版社, 1979

## 第八章 量子多体问题方法及其应用

我们希望读者注意两点:(1)量子力学中能严格地解析求解的问题真如凤毛麟角,不过谐振子运动、库仑势场中单电子的运动或电子自旋在旋转磁场中的运动等只是屈指可数的几个而已,因此主要的困难在于寻找合理的近似计算方法,尤其对多体理论更是如此。(2)各种严格或近似的理论都涉及大量的数学推导,初学者常感其难.事实上,“熬”到初步入门之后才能体会到:数学推导固属不易,然而真正难的还是在于“理论联系实际”.本章介绍“二次量子化”的基本概念和以“正则变换”为主的多体理论方法(此法不难推广到相对论性的、真正有粒子的湮灭或产生的量子场论问题,)同时紧密联系玻色-爱因斯坦凝聚、超流和超导等实验现象.我们不但注意计算方法,还特别强调“提出问题、分析问题、解决问题”的思想方法.尤其是“提出问题”,“学问学问,最难是问”.而在这方面,超导的BCS理论无疑是一个杰出的典范.

### § 8.1 二次量子化方法

#### 8.1A 二次量子化,玻色子和费米子

量子理论的一个基本概念是:一切微观粒子,不论其静质量为零或不为零,都具有“波粒二重性”.静质量为零的光子,在历史上人们先认识它是具有波性的电磁波,然后认识其粒子性.这第二步认识在理论上叫做“电磁场的量子化”,已在第四章讨论过.对自由电磁场也很简单,先写出经典电磁场的矢势  $\mathbf{A}$  按平面波的展开式:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}, \alpha} c \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega}} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(\alpha)} \{ a_{\mathbf{k}, \alpha} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)] \\ + a_{\mathbf{k}, \alpha}^* \exp[-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)] \} \end{aligned} \quad (8.1.1)$$

前后两项互为复共轭,以保证  $\mathbf{A}$  为实数.“量子化”归结为将系数化为算符:

$$a_{\mathbf{k}, \alpha} \rightarrow \hat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}, \quad a_{\mathbf{k}, \alpha}^* \rightarrow \hat{a}_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger \quad (8.1.2)$$

并令它们满足如下的对易关系(见(4.2.17)式):

$$\begin{cases} [\hat{a}_{k,\alpha}, \hat{a}_{k',\alpha'}^\dagger] = \delta_{kk'}\delta_{\alpha\alpha'} \\ [\hat{a}_{k,\alpha}, \hat{a}_{k',\alpha'}] = [\hat{a}_{k,\alpha}^\dagger, \hat{a}_{k',\alpha'}^\dagger] = 0 \end{cases} \quad (8.1.3)$$

对于静质量不为零的粒子如电子,历史上人们先认识它是粒子,然后认识它也有波性,进一步在量子力学中用薛定谔方程和波函数描写了它的波性.然而至此,对电子“波粒二重性”的描述还是不完备的,电子的粒子性还表现在例如光子与正负电子对相互转化的过程中,电子会“产生”或者“湮灭”.如果我们也引入电子的湮灭算符为 $\hat{b}_i$ ,产生算符为 $\hat{b}_i^\dagger$ ,脚标 $i$ 标记某种确定的电子态(例如动量 $\mathbf{p}$ 和自旋取向 $s_z$ ,犹如在光子情形中 $i$ 代表一种电磁波模式 $(\mathbf{k}, \alpha)$ ),则 $\hat{b}_i$ 和 $\hat{b}_i^\dagger$ 之间满足的不是如(8.1.3)式那样的对易关系,而是如下的“反对易关系”:

$$\begin{cases} \{\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger\} \equiv [\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger]_+ \equiv \hat{b}_i \hat{b}_j^\dagger + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i = \delta_{ij} \\ \{\hat{b}_i, \hat{b}_j\} = \{\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger\} = 0 \end{cases} \quad (8.1.4)$$

(如前,“ $\equiv$ ”表示定义).在第四章已说明,对一定模式的光子数算符 $\hat{N}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ ,其本征值可取 $0, 1, 2, \dots$ 等一切正整数,现在来证明,电子数算符 $\hat{N}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ 只可能取 $0$ 和 $1$ 两个本征值.为此先构造“一粒子态” $|1_i\rangle$ ,它是 $\hat{b}_i^\dagger$ 作用到真空态 $|0\rangle$ 而得到的:

$$|1_i\rangle = \hat{b}_i^\dagger |0\rangle \quad (8.1.5)$$

易证 $\hat{N}_i |1_i\rangle = |1_i\rangle$ 而 $\hat{N}_i |0\rangle = 0$ , $\hat{b}_i |0\rangle = 0$ (对一切 $i$ ),这是真空态的定义.构造“二粒子态”时,先试看固定 $i$ 的情形:

$$\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i^\dagger |0\rangle = \frac{1}{2} \{\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_i^\dagger\} |0\rangle = 0 \quad (8.1.6)$$

其中用了(8.1.4)第二式,可见一个态( $i$ )不许容纳两个粒子,这正是“泡利不相容原理”.再看 $i \neq j$ 的情形:

$$\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j^\dagger |0\rangle = -\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i^\dagger |0\rangle \quad (8.1.7)$$

它不为零,表示这种( $i \neq j$ )的二粒子态存在,但对粒子的交换其波函数要改号(见下).所以我们证明了服从 Fermi-Dirac 统计的“费米子”(如电子),其产生、湮灭算符服从反对易关系(8.1.4)式,这明显地区别于服从 Bose-Einstein 统计的“玻色子”(如光子),后者的产生、湮灭算符服从对易关系如(8.1.3)式.

在电子真正被湮灭或产生出来的过程中,其能量变化必须超过电子的静能 $m_e c^2 = 0.511\text{MeV}$ ,远远超过非相对论量子力学中讨论的过程.

然而即使在低能量子力学中,尤其在讨论多体问题时,采用粒子的产生和湮灭算符的方法有时是十分简洁而方便的,习惯上称之为“二次量子化”方法.其实由上述可见,在非相对论量子力学中,所谓“二次量子化”并不包含新的基本原理,而只是一种非常优美的数学框架,但它被用得十分巧妙和成功,在物理学中揭示了许多新的认识.(参见文献[1]~[5])

### 8.1B 量子光学中的 Jaynes-Cummings 模型

先举一个涉及最简单的光和原子的体系为例.一个原子只包含两个相距为 $\hbar\omega_0$ 的能级,激发态和下面的基态分别用 $|e\rangle$ ,  $|g\rangle$ 表示,与原子耦合的电磁场,其光子能量是 $\hbar\omega$ ,对应于动量 $\mathbf{k}$ .根据(4.2.29)式,电磁场 $\mathbf{A}$ 与此原子耦合的哈密顿量等于(先设 $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$ )

$$H_{\text{int}} = \int \Psi_e^* \left( \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \right) \Psi_g \, d\mathbf{r} \quad (8.1.8)$$

为简单起见,这里只写出原子中一个电子( $q = -e < 0$ ),以后也略去算符 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{p}$ 上面的帽子.因为 $\Psi_e^*(\mathbf{r}, t) = \psi_e^*(\mathbf{r}) \exp(iE_e \frac{t}{\hbar})$ ,  $\Psi_g(\mathbf{r}, t) = \psi_g(\mathbf{r}) \exp(-iE_g \frac{t}{\hbar})$ ,以(8.1.1)式代入,对一种模式 $(\mathbf{k}, \alpha)$ , (8.1.8)分为两项,第一项是吸收一个光子的矩阵元( $\hbar\omega_0 = E_e - E_g$ ):

$$\exp[i(\omega_0 - \omega)t] \left( \frac{e}{m} \right) \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega V}} \int d\mathbf{r} \mathbf{U}_k \cdot \psi_e^* \mathbf{p} \psi_g \quad (8.1.9)$$

其中 $\mathbf{U}_k = \boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\omega)} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ ,因为原子半径约为0.1nm,而光的波长 $\lambda = \frac{2\pi}{k} \gtrsim 10^2 \text{ nm}$ ,故 $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \approx 1$ (这叫做“长波近似”),于是上式积分简化为

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} \psi_e^* \mathbf{p} \psi_g &= i \frac{m}{\hbar} \int \psi_e^* [H_0, \mathbf{r}] \psi_g \, d\mathbf{r} \\ &= i \frac{m}{\hbar} (E_e - E_g) \int \psi_e^* \mathbf{r} \psi_g \, d\mathbf{r} = im\omega_0 \mathbf{d}_{eg} \end{aligned} \quad (8.1.10)$$

其中已用了一个电子在原子中的哈密顿量为

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \quad (8.1.11)$$

记(8.1.10)式中 $\mathbf{d}_{eg} = \int \psi_e^* \mathbf{r} \psi_g \, d\mathbf{r}$ 为态 $|e\rangle$ 和 $|g\rangle$ 间跃迁的“电偶极矩阵

元”，它对应于原子的电磁跃迁中最典型的  $E1$  强跃迁(见 § 4.5A)，于是(8.1.9)式简化为

$$ie\omega_0\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega V}}\boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \cdot \mathbf{d}_{eg} \exp[i(\omega_0 - \omega)t] \quad (8.1.12)$$

当外来光子的频率  $\omega = \omega_0 = \frac{1}{\hbar}(E_e - E_g)$ ，发生“共振吸收”时，上式进一步简化为不含时间的

$$f_{eg} \equiv ie\sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{V}}\boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \cdot \mathbf{d}_{eg} \quad (8.1.13)$$

当我们把原子放在一个体积为  $V$  的空腔内，用一束频率为  $\omega$  的激光去照射它时，一方面  $\omega$  可以略为与  $\omega_0$  不等，另一方面，这种模式  $(\mathbf{k}, \alpha)$  的光子数一般地不是从 1 变为 0，而是从  $n_{\mathbf{k}, \alpha}$  变为  $n_{\mathbf{k}, \alpha} - 1$ 。整个吸收过程的初态是  $|g, n_{\mathbf{k}, \alpha}\rangle = |g\rangle |n_{\mathbf{k}, \alpha}\rangle$ ，而末态是  $|e, n_{\mathbf{k}, \alpha} - 1\rangle = |e\rangle |n_{\mathbf{k}, \alpha} - 1\rangle$ ，(8.1.1)式中的光子湮灭算符使光子态从  $|n_{\mathbf{k}, \alpha}\rangle$  跃迁为  $|n_{\mathbf{k}, \alpha} - 1\rangle$  (见(4.2.20)式)：

$$a_{\mathbf{k}, \alpha} |n_{\mathbf{k}, \alpha}\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}, \alpha}} |n_{\mathbf{k}, \alpha} - 1\rangle \quad (8.1.14)$$

而  $|g\rangle \rightarrow |e\rangle$  的跃迁在形式上也可以写为一个算符：

$$\sigma_+ \equiv |e\rangle\langle g| \quad (8.1.15)$$

这里用了泡利自旋矩阵算符  $\sigma_+ = \frac{1}{2}(\sigma_1 + i\sigma_2)$ ，是因为我们不妨记

$|e\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ， $|g\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ，则  $\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ 。类似地，下面马上会用到  $\sigma_- =$

$\frac{1}{2}(\sigma_1 - i\sigma_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = |g\rangle\langle e|$ ，它表示了从  $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$  的跃迁，泡利矩阵

的对易关系是  $(\sigma_i\sigma_j = i\epsilon_{ijk}\sigma_k)$ ：

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, [\sigma_+, \sigma_-] = \sigma_3, [\sigma_3, \sigma_{\pm}] = \pm 2\sigma_{\pm} \quad (8.1.16)$$

(8.1.1)式中第二项(与光子产生算符  $a_{\mathbf{k}, \alpha}^+$  乘在一起)在(8.1.8)式中贡献矩阵元为

$$ie\omega_0\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega V}}\boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \cdot \mathbf{d}_{eg} \exp[i(\omega_0 + \omega)t] \quad (8.1.17a)$$

它比(8.1.12)或(8.1.13)式多含有一个高频振荡的因子，对时间平均后为零，通常忽略这一项，这叫做“旋转波近似”。

· 如果将(8.1.8)式中原子的初、末态交换一下，即考虑从  $|e\rangle \rightarrow |g\rangle$  的

跃迁, 则在与上面同样的长波近似和旋转波近似下, 我们将得到一项:

$$-ie\omega_0 \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega V}} \boldsymbol{\varepsilon}_k^{(\alpha)} \cdot \mathbf{d}_{ge} \exp[-i(\omega_0 - \omega)t] \quad (8.1.17b)$$

它恰为(8.1.12)式的复共轭 ( $\mathbf{d}_{eg}^* = \mathbf{d}_{ge}$ ), 并与  $a_{k,\alpha}^\dagger$  及  $\sigma_- = |g\rangle\langle e|$  乘在一起.

通常当空腔内单模( $k, \alpha$ )辐射的频率  $\omega$  与  $\omega_0$  相差很小, 即离共振条件  $\omega = \omega_0$  稍有“失谐”时, 仍可近似地略去(8.1.12)和(8.1.17b)两式中的时间因子, 而写出辐射场与原子耦合的总哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2} \hbar\omega_0\sigma_3 + \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + fa\sigma_+ + f^* a^\dagger \sigma_- \quad (8.1.18)$$

其中已略去  $a$  和  $a^\dagger$  的脚标( $k, \alpha$ )和  $f$  的脚标( $eg$ ). 上式称为 Jaynes-Cummings 模型(JCM)<sup>[6]</sup>.

在所考虑的近似下, (8.1.18)式是不显含时间的, 原子与单模辐射场的耦合系统应有定态解. 为此把  $H$  分成两部分,  $H = H_0 + H_{\text{int}}$ , 而

$$H_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega_0\sigma_3 + \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (8.1.19)$$

让我们先看  $\omega = \omega_0$  即到达谐振的情况. 易见此时  $H_0$  有两个本征态  $|g, n+1\rangle$  和  $|e, n\rangle$  在能量上是简并的:

$$\begin{aligned} H_0 |g, n+1\rangle &= (n+1)\hbar\omega |g, n+1\rangle \\ H_0 |e, n\rangle &= (n+1)\hbar\omega |e, n\rangle \end{aligned} \quad (8.1.20)$$

记纯虚数  $f$  为  $f = i\hbar\Omega$ , 则有

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} |g, n+1\rangle &= i\hbar\Omega\sqrt{n+1} |e, n\rangle \\ H_{\text{int}} |e, n\rangle &= -i\hbar\Omega\sqrt{n+1} |g, n+1\rangle \end{aligned} \quad (8.1.21)$$

设  $H$  的定态解为  $|\Psi\rangle = C_1 |g, n+1\rangle + C_2 |e, n\rangle$ , 则由本征方程

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (8.1.22)$$

不难找到两个本征态

$$|\Psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|g, n+1\rangle \pm i |e, n\rangle) \quad (8.1.23)$$

分别具有本征能量为

$$E_\pm = (n+1)\hbar\omega \pm \hbar\Omega\sqrt{n+1} \quad (8.1.24)$$



这表示光子与原子耦合在一起,驱使后者在基态 $|g\rangle$ 和激发态 $|e\rangle$ 之间来回振荡,振荡的频率为 $\sqrt{n+1}\Omega$ ,这叫做 Rabi 振荡.

其次考虑 $\omega \approx \omega_0$ ,即略微有些失谐的情况.此时 $H_0$ 的上述两个本征态在能量上不再简并,记失谐量为 $\delta = \omega - \omega_0$ ,则此时 $H$ 的两个本征态为

$$\left( \text{记 } \tan 2\theta_n = \frac{2\Omega\sqrt{n+1}}{\delta} \right)$$

$$\begin{aligned} |\Psi_+\rangle &= \cos\theta_n |g, n+1\rangle + i\sin\theta_n |e, n\rangle \\ |\Psi_-\rangle &= \sin\theta_n |g, n+1\rangle - i\cos\theta_n |e, n\rangle \end{aligned} \quad (8.1.25)$$

分别有能量为( $n = 0, 1, 2, \dots$ )

$$E_{\pm} = (n+1)\hbar\omega \pm \hbar\sqrt{\Omega^2(n+1) + \frac{\delta^2}{4}} \quad (8.1.26)$$

(读者试自证之).值得注意的是有一个特例 $|g, 0\rangle$ 不属于上面讨论范围,但它也是 $H$ 的本征态,具有能量

$$E(|g, 0\rangle) = -\frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{\hbar}{2}\delta \quad (8.1.27)$$

把电磁场关在一圆柱形空腔内,形成驻波模式,则原子与场的耦合强度,即 $\Omega$ 的大小会随位置而改变,在腔壁上等于零,而在腔的中心达到最大值,这样 $E_{\pm}$ 便成为原子位置(沿圆柱中心轴的 $z$ 坐标)的函数,这是近年来发展很快的所谓“腔量子电动力学”的研究内容之一(参见文献[5]的介绍).

最后要指出,如果 $\delta = \omega - \omega_0 \neq 0$ 而在(8.1.18)式的后两项 $H_{\text{int}}$ 中保留 $e^{\pm i\delta t}$ 因子,哈密顿量显含有时间,求解便会复杂得多,我们从略了.

## § 8.2 二次量子化后的哈密顿量

### 8.2A 场算符,一粒子态和多粒子态

如我们限于讨论静质量不为零的粒子(如电子)而能量较低(远小于静能)的现象,仍可以用非相对论性的量子力学.这时并没有反粒子出现,也没有真正的粒子产生或湮灭(粒子数保持守恒),但是用产生、湮灭算符仍很方便.例如上节 J-C 模型中的 $\sigma_+$ 和 $\sigma_-$ 算符,也可以写成

$$\sigma_+ = \hat{b}_e^+ \hat{b}_g, \quad \sigma_- = \hat{b}_g^+ \hat{b}_e \quad (8.2.1)$$

其中 $\hat{b}_g$ ( $\hat{b}_e$ )和 $\hat{b}_g^+$ ( $\hat{b}_e^+$ )分别是基态 $|g\rangle$ (激发态 $|e\rangle$ )的湮灭和产生算符,即以 $|0\rangle$ 表示真空态时,

$$\hat{b}_g |0\rangle = 0, \hat{b}_g^+ |0\rangle = |g\rangle, \hat{b}_e |0\rangle = 0, \hat{b}_e^+ |0\rangle = |e\rangle \quad (8.2.2)$$

下面我们作一般的讨论. 用动量  $p_i$  来标记粒子在体积  $V$  内的状态,  $p_i$  的数值取分立谱, 则一粒子在位形空间(位置表象)中的波函数为

$$\langle r | p_i \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_i \cdot r\right) \equiv \phi_i(r) \quad (8.2.3)$$

其中  $|p_i\rangle$  表示一个粒子处在  $p_i$  态. 我们把真空态记成

$$|\Psi^{(0)}\rangle = |0, 0, \dots\rangle = |0\rangle \quad (8.2.4)$$

而

$$|p_i\rangle = \hat{b}_i^+ |\Psi^{(0)}\rangle = |0, \dots, 1, 0, \dots\rangle \quad (8.2.5)$$

其中惟一不为零的 1 处在第  $i$  个位置上,  $n_i = 1$ , 而  $n_j = 0$  ( $j \neq i$ ), 这种态的表示称为粒子数(或 Fock 空间)表象,  $\hat{b}_i^+$  就是在真空中产生一个  $p_i$  粒子的算符.

现在我们建立一个“场算符”, 记  $\frac{p_i}{\hbar} = k_i$ :

$$\hat{\psi}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_i \exp(ik_i \cdot r) \hat{b}_i \quad (8.2.6)$$

注意  $\hat{b}_i$  是动量为  $p_i$  粒子的湮灭算符, 所以  $\hat{\psi}(r)$  也是算符, 即是一个  $q$  数而不是  $C$  数, 它与作为  $C$  数的波函数(8.2.3)式有什么关系呢? 为此看

$$\langle 0 | \hat{\psi}(r) | p_i \rangle = \left\langle 0 \left| \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_j \exp(ik_j \cdot r) \hat{b}_j \hat{b}_i^+ \right| 0 \right\rangle = \phi_i(r) \quad (8.2.7)$$

由此可见, 单粒子波函数是场算符在真空态和一粒子态间的(非对角)矩阵元. 注意(8.2.7)式的正确性与算符  $\hat{b}_j$  和  $\hat{b}_i^+$  究竟满足对易关系(8.1.3)还是反对易关系(8.1.4)没有区别. 玻色子与费米子的区别只在粒子数多于一个时才会显示出来, 也就是说, 当考虑场算符之间的对易关系时才会显示出来. 假定算符  $\hat{b}_i$  满足对易关系或反对易关系:

$$\begin{cases} [\hat{b}_i, \hat{b}_j^+]_{\mp} = \delta_{ij} \\ [\hat{b}_i, \hat{b}_j]_{\mp} = [\hat{b}_i^+, \hat{b}_j^+]_{\mp} = 0 \end{cases} \quad (8.2.8)$$

( $[a, b]_{-} \equiv [a, b]$ ), 则易证场算符也相应地满足对易或反对易关系如下:

$$\begin{cases} [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')]_{\mp} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')]_{\mp} = [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')]_{\mp} = 0 \end{cases} \quad (8.2.9)$$

见习题 8.1, 证明中需利用从动量分立谱到连续谱求和的转换公式:

$$\frac{1}{V} \sum_i \longrightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \quad (8.2.10)$$

现在我们来考虑二粒子态:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= |\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_j\rangle = \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i^\dagger |0\rangle \\ &= |0, \dots, n_i = 1, 0, \dots; n_j = 1, 0, \dots\rangle \end{aligned} \quad (8.2.11)$$

注意, 这里只说明在  $i$  态和  $j$  态先后各产生一个粒子. 并没有具体指定第一个粒子(坐标  $\mathbf{r}_1$ )或第二个粒子(坐标  $\mathbf{r}_2$ )究竟是在  $i$  态还是  $j$  态. 如进一步假设粒子是玻色子或费米子, 则仿照(8.2.7)式可由下式定义此二粒子态在位形空间的波函数

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle 0 | \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}(\mathbf{r}_2) | \Psi \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_i(\mathbf{r}_1) \phi_j(\mathbf{r}_2) \pm \phi_j(\mathbf{r}_1) \phi_i(\mathbf{r}_2)] \end{aligned} \quad (8.2.12)$$

其中由算符对易(或反对易)而自动出现的十号(或一号), 对应于玻色子(或费米子)所要求的对粒子交换的对称(或反对称)性(以后称各多粒子态  $|n_1, n_2, \dots\rangle$  等为 Fock 态.)

下面是几点说明:

(1) 对费米子, 显然  $i = j$  是不可能的, 这就是泡利不相容原理. 但对玻色子, 可以有  $i = j$  的情况, 不过此时在(8.2.11)式的定义中需多一个因子  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ , 才能在最后给出正确的归一化波函数.

(2) 如果动量不是按分立谱  $\mathbf{p}_i$  分解, 而是按连续的  $\mathbf{k} \left[ = \frac{\mathbf{p}}{\hbar} \right]$  分解,

后者是不可数的, 因此一个 Fock 态用  $|n_1, n_2, \dots\rangle$  这种记号(即(8.2.11)式最右端的表示)是不可以了, 但用  $|\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots\rangle$  表示还是可以的, 相应的粒子产生、湮灭算符也用连续的  $\mathbf{k}$  标记, 满足

$$\begin{cases} [\hat{b}(\mathbf{k}), \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}')]_{\mp} = \delta^3(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \\ [\hat{b}(\mathbf{k}), \hat{b}(\mathbf{k}')]_{\mp} = [\hat{b}^\dagger(\mathbf{k}), \hat{b}^\dagger(\mathbf{k}')]_{\mp} = 0 \end{cases} \quad (8.2.13)$$

而波函数则在无界空间(而不是体积  $V$ )归一化.

(3) 标记态的指标  $i$  不一定是动量( $p_i$  或  $k$ ), 也可以是别的一族能明确标定状态的量子数. 对费米子而言, 一般应包括自旋投影( $\sigma_z$ ), 但有时多粒子体系处于自旋平行(即自旋对称)态, 例如上一章讨论 QHE 时那样, 自旋便可不明显地写出, 此时波函数对电子坐标  $r_i$  和  $r_j$  的交换为反对称的.

(4) 把(8.2.12)式从二粒子推广到  $N$  粒子情形, 波函数可表示为:

$$\phi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle 0 | \hat{\psi}(r_1) \hat{\psi}(r_2) \dots \hat{\psi}(r_N) | \Psi \rangle \quad (8.2.14)$$

其中  $|\Psi\rangle = \hat{b}_{k_N}^+ \dots \hat{b}_{k_2}^+ \hat{b}_{k_1}^+ |0\rangle$  是指  $N$  个粒子状态各不相同的情形. 如果对玻色子, 某个态( $k_j$ )中有  $m_j$  个粒子, 则在  $|\Psi\rangle$  的定义式中要多一个  $\frac{1}{\sqrt{m_j!}}$  因子, 但波函数中各项符号都是正的. 对费米子, 由(8.2.14)式写开

来的就是著名的 Slater 行列式:

$$\phi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1) & \phi_1(r_2) & \dots & \phi_1(r_N) \\ \phi_2(r_1) & \phi_2(r_2) & \dots & \phi_2(r_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(r_1) & \phi_N(r_2) & \dots & \phi_N(r_N) \end{vmatrix} \quad (8.2.15)$$

其中  $\phi_i$  的脚标  $i$  分辨不同的态  $k_i$ , 而  $r_j$  的脚标  $j$  指第  $j$  个粒子, 这是描写近独立子系组成的体系波函数, 对应的态  $|\Psi\rangle$  是一个一个产生算符先后独立地作用到真空态  $|0\rangle$  上去而形成的. 如果体系是各子系强关联形成的态, 如 FQHE 态, 波函数就不可能写成如(8.2.14)或(8.2.15)这种形式了.

## 8.2B 自由哈密顿和相互作用哈密顿

### 1. 费米子自由运动时的动能算符

为具体起见, 我们考虑一种费米子(如电子)自由运动时的动能, 在单体系量子力学中表示为  $\frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ , 则由  $N$  个粒子组成的体系的自由哈密顿量的算符在二次量子化后的粒子表象中写出为

$$\hat{H}_0 = \int d^3 r \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (8.2.16)$$

以场算符展开式(8.2.6)代入后即得

$$\hat{H}_0 = \sum_i \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \quad (8.2.17)$$

这里对  $i$  求和指对粒子一切可能的动量(波矢)  $k_i$  求和, 在一般的问题中它可以换为某种单粒子定态的标记(如原子中的量子态  $\{n, l, m\}$ ), 那时前面 C 数系数  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  可换为  $\epsilon_i$ , 表示此定态的能量, 因还未考虑粒子间的相互作用,  $H_0$  的下标指明它是自由哈密顿(算符).

## 2. 费米子与玻色子的相互作用顶角

现代物理学已弄清楚: 一切费米子间的相互作用都是通过交换玻色子来传递的. 例如, 电子间的库仑相互作用是通过“虚光子”交换而产生, 核子间的强相互作用是通过交换  $\pi$  介子而实现. 电子和核子是费米子, 而光子与  $\pi$  介子是玻色子. 如用  $\hat{b}$  和  $\hat{a}$  分别表示费米子和玻色子的湮灭算符, 则它们之间的基本相互作用顶角可以用图 8.2.1 来表示.

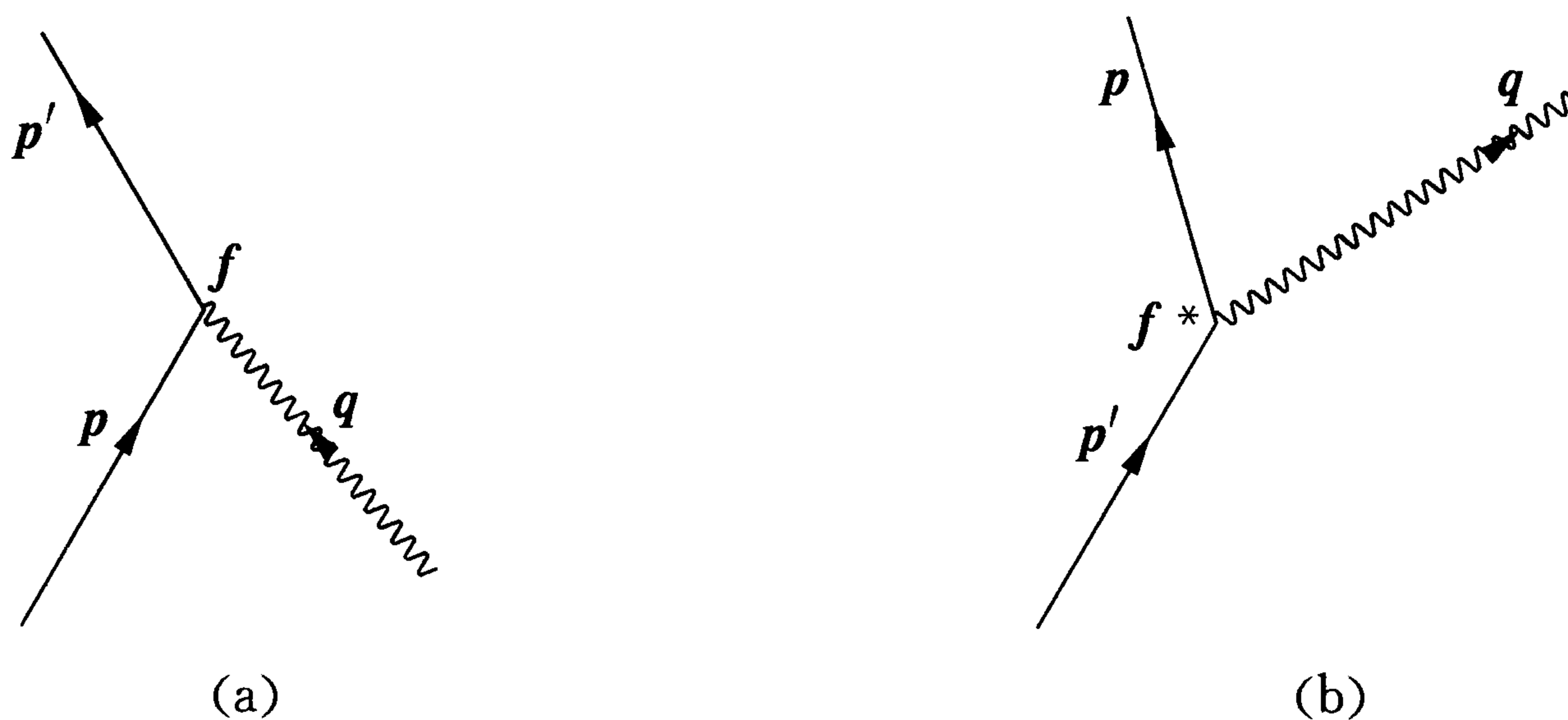


图 8.2.1

(a) 一个动量为  $p$  的费米子在顶角处吸收一动量为  $q$  的玻色子而跃迁到动量为  $p'$  的态; (b) 是(a)的逆过程(理解为时间轴取向向上)

图(a)中费米子在顶角处吸收一个玻色子(动量  $q$ )后其动量从  $p$  变为  $p'$ , 这张图在哈密顿算符中贡献一项, 可写为  $f \hat{b}_{p'}^\dagger \hat{b}_p \hat{a}_q \delta_{p+q-p'}$ , 其中  $\delta$  因子表示(三维)动量守恒, 它是 3 个平面波乘在一起而对空间积分的结果:

$$\frac{1}{V} \int \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}') \cdot \mathbf{r} \right\} d\mathbf{r} = \delta_{\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}'} \quad (8.2.18)$$

耦合强度  $f$  一般是  $p$  和  $q$  的函数. 当  $p$  和  $p'$  表示的动量本征态被别的定态例如 § 8.1B 中的基态  $|g\rangle$  和激发态  $|e\rangle$  所代替时, 上述表示动量守恒的  $\delta$  因子(或动量取连续谱时的  $\delta$  函数)便不存在.

图 8.2.1(b) 可以认为是(a)的时间反演态. 合起来后再计入各种动量的可能性, 则顶角的哈密顿算符为

$$\hat{H}_{\text{顶角}} = \sum_{p, q} [f \hat{b}_{p'}^{\dagger} \hat{b}_p \hat{a}_q \delta_{p+q-p'} + f^* \hat{b}_p^{\dagger} \hat{b}_{p'} \hat{a}_q^{\dagger} \delta_{p'-p-q}] \quad (8.2.19)$$

括号中后项为前项的厄密共轭.

### 3. 两个费米子之间的相互作用哈密顿算符

(8.2.19) 式的目的仅仅是为了强调: 在本质上, 费米子与玻色子的作用才是直接的(定域的), 而费米子与费米子之间的相互作用则是间接的. 不过在非相对论性量子力学中, 为了方便, 常不明显地考虑被交换的玻色子, 而把费米子之间的相互作用惟象地用非定域的瞬时相互作用势能  $U(r)$  来表示,  $r$  是两个费米子间的距离. 这时在二次量子化后, 费米子体系的相互作用哈密顿算符定义为

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \hat{\psi}(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) \quad (8.2.20)$$

让我们以场算符的平面波展式代入, 记

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_1\right) \hat{b}_p$$

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_2\right) \hat{b}_q$$

$$\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}_1) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{p'} \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}_1\right) \hat{b}_{p'}^{\dagger}$$

$$\hat{\psi}^{\dagger}(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{q'} \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}_2\right) \hat{b}_{q'}^{\dagger}$$

再引入(1, 2)二粒子的质心坐标  $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$  和相对坐标  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ ,

则  $\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = \int d\mathbf{R} d\mathbf{r}$ , 因为

$$\int d\mathbf{R} \exp\left[\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}' - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{R}\right] = V \delta_{\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{p}' - \mathbf{q}'}$$

剩下对  $\mathbf{r}$  的积分可以表达为

$$U_Q \equiv \int d\mathbf{r} U(r) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}\right) \quad (8.2.21)$$

其中  $\mathbf{Q} = \mathbf{p} - \mathbf{p}' = \mathbf{q}' - \mathbf{q}$ . 为进一步具体计算, 设

$$U(r) = \frac{g}{r} \exp(-\mu r) \quad (8.2.22)$$

则

$$U_Q = \frac{4\pi g}{\mu^2 + \mathbf{Q}^2 / \hbar^2} \quad (8.2.23)$$

于是得到

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{Q}} U_Q \hat{b}_{\mathbf{p}-\mathbf{Q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}}^+ \hat{b}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \quad (8.2.24)$$

我们把(8.2.20)式和(8.2.24)式分别用图 8.2.2a 和 b 表示出来.

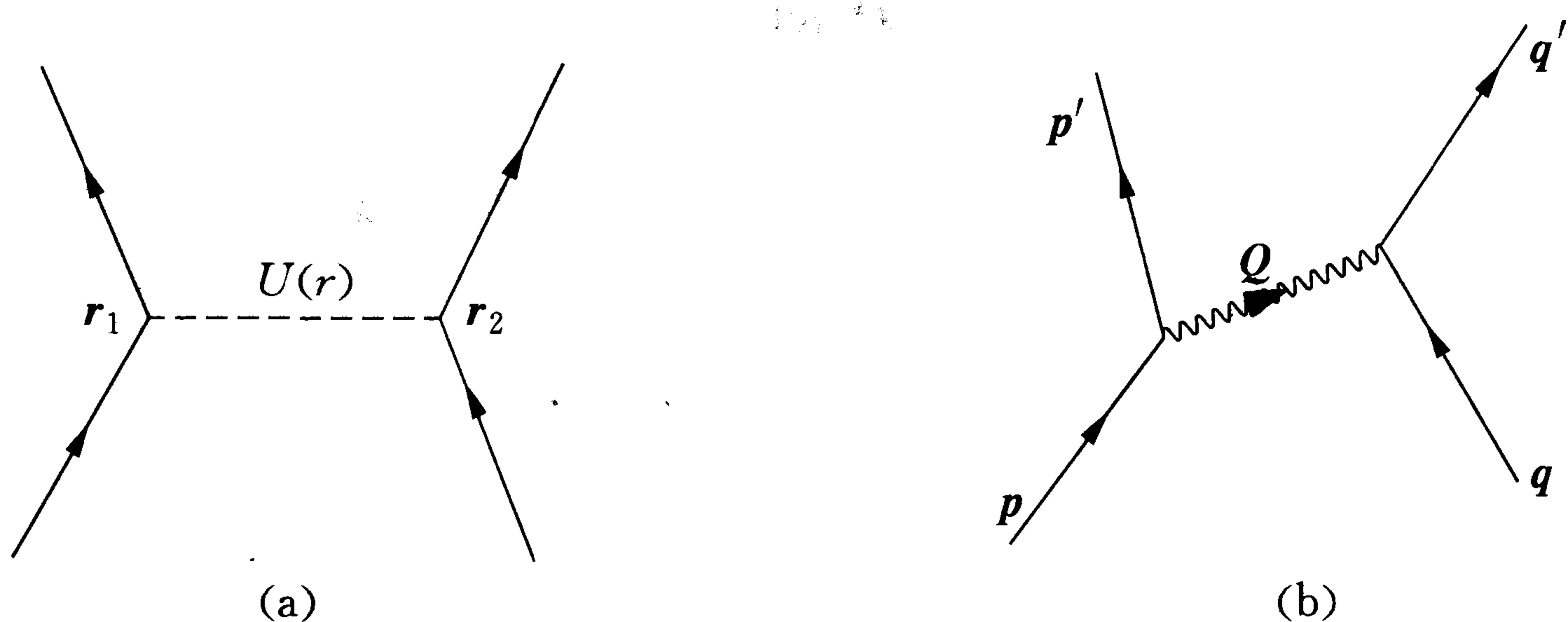


图 8.2.2 两个费米子通过瞬时势  $U(r)$  相互作用

(a) 用坐标的示意图; (b) 用动量的示意图

注意, 我们不要把图 8.2.2b 过分认真地看成是两个动量为  $p$  和  $q$  的粒子经过散射后变为动量  $p'$  和  $q'$ , 因为在(8.2.24)式中  $p$ ,  $q$  和  $Q$  [称为(三维的)动量转移] 都是要求求和的,  $H_{\text{int}}$  只表示了一切潜在的相互作用可能性. 让我们考察一个确定的包含两个动量为  $p_r$  和  $p_s$  的粒子初态  $|\Psi\rangle = |p_r, p_s\rangle = \hat{b}_{p_s}^+ \hat{b}_{p_r}^+ |0\rangle$  在  $H_{\text{int}}$  作用后的结果. 因为  $\hat{b}_q \hat{b}_p |\Psi\rangle$  中 4 个算符经反对易关系换位后, (使湮灭算符移到最右面作用到真空态  $|0\rangle$  上为零), 可得

$$\hat{b}_q \hat{b}_p |\Psi\rangle = (\delta_{pp_s} \delta_{qp_r} - \delta_{qp_s} \delta_{pp_r}) |0\rangle$$

于是

$$\hat{H}_{\text{int}} |\Psi\rangle = \frac{1}{2V} \sum_{\mathbf{Q}} U_Q (\hat{b}_{p_s-\mathbf{Q}}^+ \hat{b}_{p_r+\mathbf{Q}}^+ - \hat{b}_{p_r-\mathbf{Q}}^+ \hat{b}_{p_s+\mathbf{Q}}^+) |0\rangle \quad (8.2.25)$$

所代表的物理过程可用图 8.2.3 示意说明.

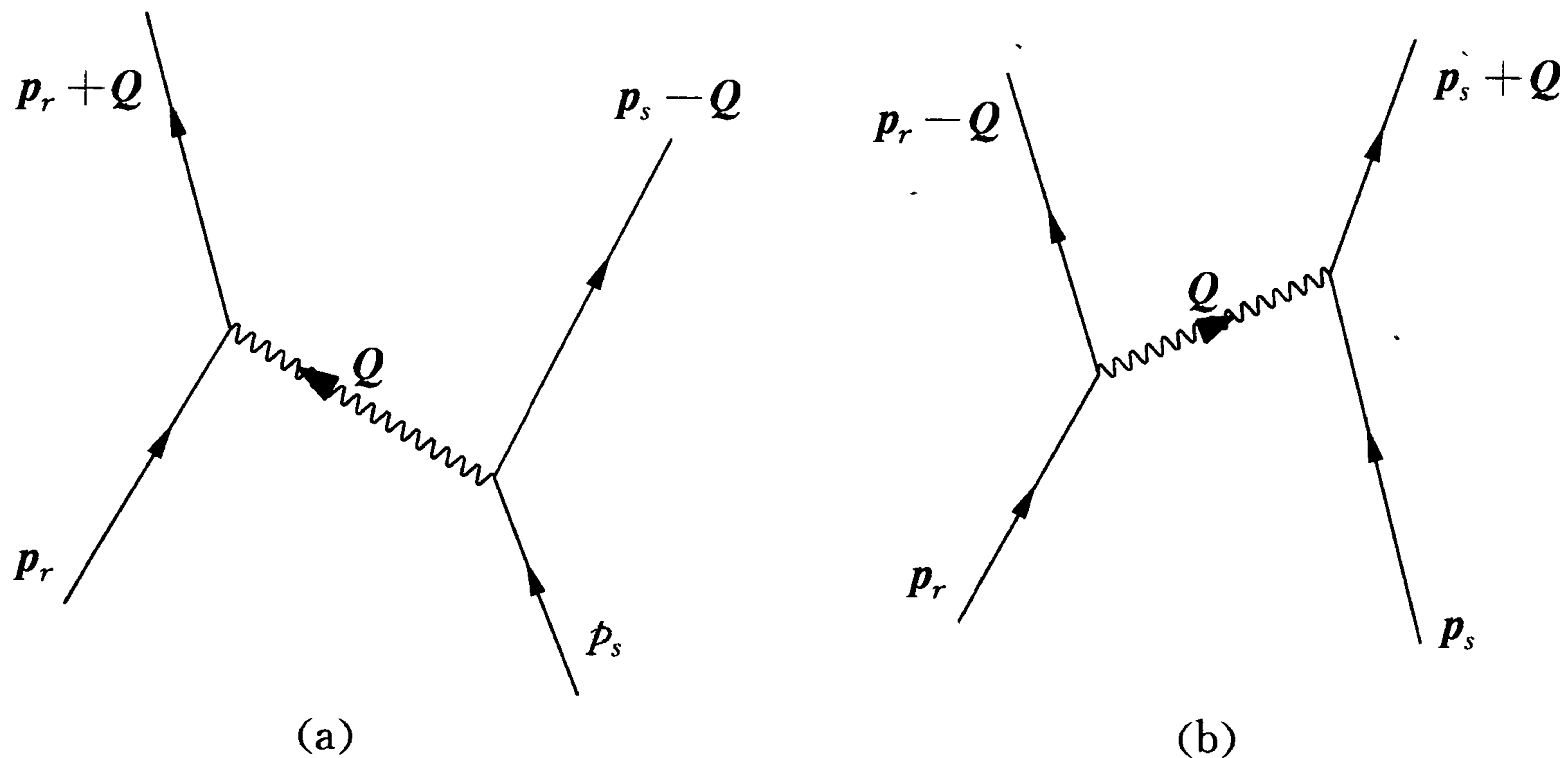


图 8.2.3  $\hat{H}_{\text{int}}$  对确定的二粒子初态  $|p_r, p_s\rangle$  的作用示意图

(a)、(b) 对确定的  $Q$  值画出时, 振幅差一个负号

但是要注意, (8.2.25) 式中对  $Q$  求和时, 图(a)中吸收一个  $(-Q)$  动量相当于图(b)中放出一个  $(+Q)$  动量, 单从图看, (a), (b) 并没有什么本质上的区别.

进一步, 让我们来计算  $H_{\text{int}}$  在上述的二粒子态  $|\Psi\rangle$  中的平均值  $\langle p_r, p_s | \hat{H}_{\text{int}} | p_r, p_s \rangle$ , 以(8.2.20)式代入, 注意  $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$  是一个 C 数函数, 而由于(8.2.12)式

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \langle 0 | \hat{\psi}(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1) | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{p_r}(\mathbf{r}_1) \phi_{p_s}(\mathbf{r}_2) - \phi_{p_s}(\mathbf{r}_1) \phi_{p_r}(\mathbf{r}_2)]$$

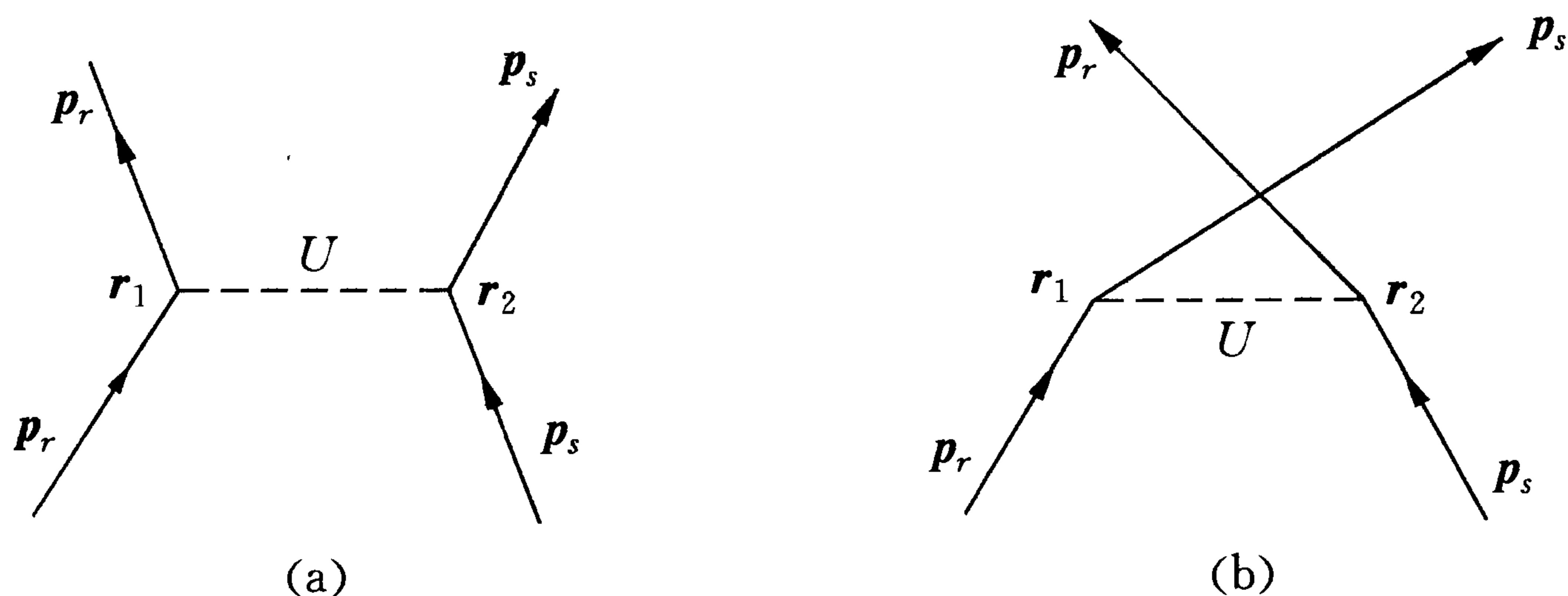
也是一个 C 数波函数, 故可在  $U$  的两方插入  $|0\rangle\langle 0|$  后得到

$$\begin{aligned} \langle p_r, p_s | \hat{H}_{\text{int}} | p_r, p_s \rangle = & \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 [\phi_{p_r}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{p_s}^*(\mathbf{r}_2) U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \phi_{p_r}(\mathbf{r}_1) \phi_{p_s}(\mathbf{r}_2) \\ & - \phi_{p_s}^*(\mathbf{r}_1) \phi_{p_r}^*(\mathbf{r}_2) U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \phi_{p_r}(\mathbf{r}_1) \phi_{p_s}(\mathbf{r}_2)] \end{aligned} \quad (8.2.26)$$

括号中两项在位形空间的示意图如图 8.2.4 所示

(8.2.26) 式括号中第二项常称为交换相互作用能量, 因为末态中两个粒子的坐标相对于初态的发生了一个交换. (或者, 对确定的粒子而言, 经过  $U$  的作用, 它们的末态动量交换了一下). 不过我们应当记住全同粒子的不可分辨性以及最后对  $\mathbf{r}_1$  和  $\mathbf{r}_2$  都要积分的事实, 有些说法似乎不必过分认真. 重要的是, “交换相互作用”确实贡献一项符号与“直接相互作用”相反的能量, 这在量子力学应用于化学键理论、铁磁性理论以及多体的 Hartree-Fock 近似方法等各方面有十分独特的物理结果, 限于篇幅, 就从略了.



图 8.2.4  $\langle p_r, p_s | \hat{H}_{\text{int}} | p_r, p_s \rangle$  中相互作用示意图

(a) 直接相互作用; (b) 交换相互作用, 注意对  $r_1$  和  $r_2$  积分后两者贡献的能量相差一个负号

### 8.2C Fock 空间算符随时间的演化和运动方程

细心的读者会奇怪, 本节内容至此似乎还没有看到时间坐标  $t$ . 在量子力学中  $t$  的引入有 3 种图景 (picture), 分别是薛定谔图景, 海森堡图景和相互作用图景. 让我们采用海森堡图景. 于是在二次量子化后引入的那些算符  $\hat{b}_i$  和  $\hat{b}_i^\dagger$  等都成为随时间变化的动力学量而体系的态却不变 (例如可取定为  $t=0$  时的初态), 一切可观察的物理量 (如能量、跃迁几率等) 的变化都由  $\hat{b}_i$  等算符的变化表示出来, 所以前面的各  $\hat{b}_i$  等都理解为隐含着时间  $t$ , 而记为  $\hat{b}_i(t)$  等. 重要的是: 首先, 这些湮灭、产生算符连同场算符所满足的“等时”对易 (或反对易) 关系形式上不变, 仍如 (8.2.8) 和 (8.2.9) 式所示, 即

$$\begin{cases} [\hat{b}_i(t), \hat{b}_j^\dagger(t)]_{\mp} = \delta_{ij} \\ [\hat{b}_i(t), \hat{b}_j(t)]_{\mp} = [\hat{b}_i^\dagger(t), \hat{b}_j^\dagger(t)]_{\mp} = 0 \end{cases} \quad (8.2.27)$$

$$\begin{cases} [\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)]_{\mp} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ [\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{\psi}(\mathbf{r}', t)]_{\mp} = [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t)]_{\mp} = 0 \end{cases} \quad (8.2.28)$$

类似于 (1.3.35) 式, 现在  $\hat{b}_j(t)$  也满足运动方程, 称为 Fock 方程:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{b}_j(t) = [\hat{b}_j(t), \hat{H}] \quad (8.2.29)$$

把前面讨论的哈密顿量略微推广一些, 可以写成:

$$\hat{H} = \sum_{k, l} \hat{b}_k^\dagger \langle k | \hat{H}_0 | l \rangle \hat{b}_l + \frac{1}{2} \sum_{q, r, s, t} \hat{b}_q^\dagger \hat{b}_r^\dagger \langle qr | \hat{H}_{\text{int}} | ts \rangle \hat{b}_s \hat{b}_t \quad (8.2.30)$$

其中  $\hat{H}_0$  是单粒子算符, 它可以是动能加上在外场中的势能, 而  $H_{\text{int}}$  则表示两粒子间的相互作用. [(8. 2. 24) 式是上式的一个特例]. 为计算  $\hat{b}_j$  和  $\hat{H}$  的对易关系, 可利用下面公式:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B = A[B, C]_+ - [A, C]_+ B \quad (8. 2. 31)$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] = [A, B]_+ C - B[A, C]_+ \quad (8. 2. 32)$$

于是(8. 2. 29)式右端与  $\hat{H}_{\text{int}}$  的对易关系给出

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \sum_{r, s, t} \hat{b}_r^+ \hat{b}_s \hat{b}_t \langle jr | \hat{H}_{\text{int}} | ts \rangle + \frac{1}{2} \sum_{q, s, t} \hat{b}_q^+ \hat{b}_t \hat{b}_s \langle qj | \hat{H}_{\text{int}} | ts \rangle \\ &= \frac{1}{2} \sum_{r, s, t} \hat{b}_r^+ \hat{b}_s \hat{b}_t (\langle jr | \hat{H}_{\text{int}} | ts \rangle + \langle rj | \hat{H}_{\text{int}} | ts \rangle) \\ &= \sum_{r, s, t} \hat{b}_r^+ \hat{b}_s \hat{b}_t \langle jr | \hat{H}_{\text{int}} | ts \rangle \end{aligned}$$

其中利用了  $\langle jr | H_{\text{int}} | ts \rangle = \langle rj | H_{\text{int}} | st \rangle$  的对称性, 因为两者都表示了  $s \rightarrow r, t \rightarrow j$  的同一种跃迁. 于是方程(8. 2. 29)简化为

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d \hat{b}_j(t)}{dt} &= \sum_l \langle j | \hat{H}_0 | l \rangle \hat{b}_l(t) \\ &+ \sum_{r, s, t} \hat{b}_r^+(t) \hat{b}_s(t) \hat{b}_t(t) \langle jr | \hat{H}_{\text{int}} | ts \rangle \quad (8. 2. 33) \end{aligned}$$

这是关于算符  $\hat{b}_j(t)$  的许多个耦合的(联立的)非线性微分方程, 一般无法求出严格解析解. 仅当最简单的特例:  $\hat{H}_{\text{int}} = 0$  而  $\langle j | \hat{H}_0 | l \rangle = \epsilon_j \delta_{jl}$  时, 我们才有解析结果:

$$\hat{b}_j(t) = \hat{b}_j(0) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon_j t\right) \quad (8. 2. 34)$$

只有这种情况, 我们才能始终把  $\hat{b}_j(t)$  解释成为在  $j$  单粒子态上湮灭一个粒子的算符, 因为这时  $j$  态是  $\hat{H}_0$  因而也是  $\hat{H}$  的本征态. 而当  $\hat{H}_{\text{int}} \neq 0$  时, 我们只能在一个时刻(如  $t = 0$ ) 把  $\hat{b}_j(0)$  作这样解释, 以后时刻的  $\hat{b}_j(t)$  演化如方程(8. 2. 33)所示, 它不再可以简单地解释为单粒子  $j$  态的湮灭算符了. 事实上,  $j$  态已不再是  $\hat{H}$  的本征态, 原来在  $j$  态的一个粒子不但自己运动状态马上变掉, 同时还立刻激起其他粒子的跃迁(可参看(8. 2. 25))

式和图 8.2.3). 以上说明目的是强调量子多体理论的复杂性, 所以下面各节能做的, 是设法近似地去找不显含时间的  $\hat{H}$  的本征态, 即基态和在它上面的“元激发”(准粒子), 设后者的激发能量为  $E_i$  而其湮灭和产生算符记为  $\hat{\alpha}_i$  和  $\hat{\alpha}_i^\dagger$ , 则我们的任务是努力把体系的总哈密顿量(算符)化成如下形式:

$$\hat{H} \approx U_g + \sum_i E_i \hat{\alpha}_i^\dagger \hat{\alpha}_i \quad (8.2.35)$$

其中常数项  $U_g$  是新的基态(或新真空态, 即一个准粒子也没有的态)能量(相对于原来的基态而言), 而第二项只包含两个算符, 形如  $\hat{\alpha}_i^\dagger \hat{\alpha}_i$ . 则在  $\hat{\alpha}_i$  的矩阵表示中这样的  $\hat{H}$  将只有对角元素, 所以二次量子化的多体问题的求解便归结为哈密顿算符的(近似)“对角化”问题.

## § 8.3 玻色-爱因斯坦凝结

### 8.3A 玻色-爱因斯坦凝结(BEC)的条件

我们已在(5.4.40)式写出在温度为  $T$  时的玻色-爱因斯坦统计分布, 改记在能级  $\epsilon_i$  上的粒子数为

$$N_i \equiv \langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon_i - \mu}{k_B T}\right) - 1} \quad (8.3.1)$$

$N_i \geq 0$  的条件要求

$$\epsilon_i - \mu \geq 0 \quad (8.3.2)$$

对理想玻色气体,  $\epsilon_i = \frac{p_i^2}{2m}$ , 如  $\epsilon_0 \rightarrow 0$ , 便有

$$\mu \leq 0 \quad (\text{对 Bose 气体}) \quad (8.3.3)$$

对 Bose 气体, 化学势  $\mu$  不能取正值, 这与(经典性质的) Boltzman 气体或 Fermi 气体不同. 在第五章已说明,  $\mu$  是作为不定乘子而引入的, 它的数值应由体系总粒子数等于  $N$  的条件来决定. 例如对经典气体, 其化学势  $\mu_c$

应由条件  $\left(\beta = \frac{1}{k_B T}\right)$

$$\sum_i \exp[-\beta(\epsilon_i - \mu_c)] = N \quad (8.3.4)$$

来决定, 将求和改成积分, 可算得<sup>[7, 8]</sup>

$$\sum_i \exp(-\beta \epsilon_i) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty d^3 p \exp\left(-\frac{p^2}{2mk_B T}\right) = V \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

故 
$$\frac{\mu_c}{k_B T} = \ln\left[\left(\frac{N}{V}\right)\lambda_T^3\right] \quad (8.3.5)$$

其中

$$\lambda_T = \left(\frac{h^2}{2\pi mk_B T}\right)^{\frac{1}{2}} \quad (8.3.6)$$

称为热波长(见(5.4.53), (7.3.41)式), 它可以理解为是粒子能量  $\frac{p^2}{2m} = \pi k_B T$  时之德布罗意波长, 参见习题 8.3. (8.3.5)式括号中的量是粒

子密度  $n = \frac{N}{V}$  与“量子密度”  $\lambda_T^3 = n_Q$  之比,  $n_Q$  等于体积  $\lambda_T^3$  中有一个粒子时的密度. 当  $\frac{n}{n_Q} \rightarrow 0$ , 3种统计没有区别; 而当  $\frac{n}{n_Q} \rightarrow 1$  时量子性开始变得显著.

从(8.3.5)式可见, 对一定的密度  $\frac{N}{V}$ ,  $\left(\frac{\mu_c}{k_B T}\right)$  由高温时为负经过零增大到低温时为正, 在  $T \rightarrow 0$  时对数地趋于  $\infty$ . 对 Fermi 气的计算给出的  $\left(\frac{\mu_{\text{Fermi}}}{k_B T}\right) > \left(\frac{\mu_c}{k_B T}\right)$ , 但定性行为相似, 惟独 Bose 气不然. 由于(8.3.3)式的限制, 对一定的  $\frac{N}{V}$ ,  $\mu_{\text{Bose}} = \mu_B$  从温度很高时(那里  $\mu_B \sim \mu_F \sim \mu_c$ )为负开始增大, 随着温度下降到  $T_0$  时  $\mu_B = 0$ , 这时有关系(见图 8.3.1):

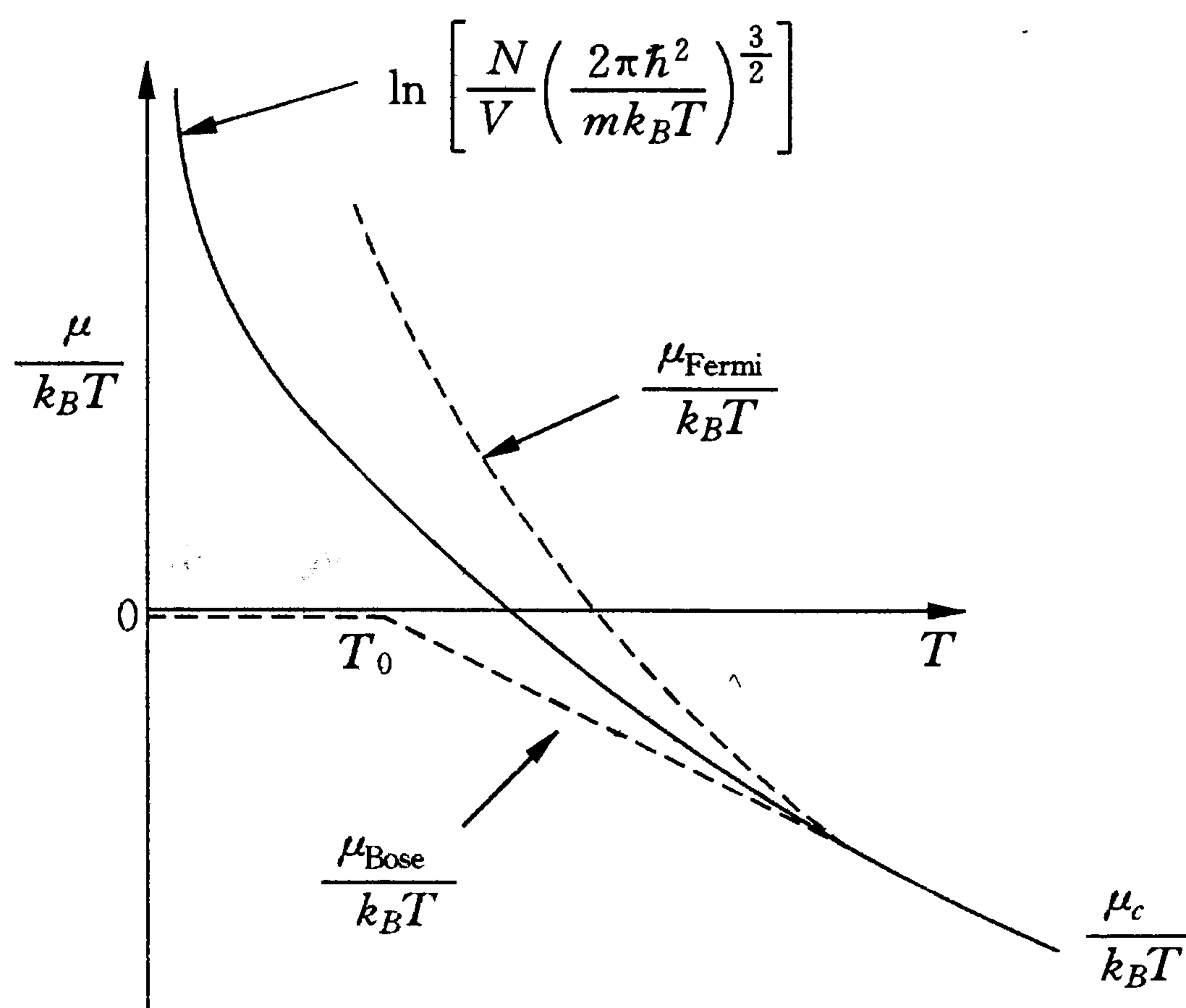


图 8.3.1 在固定粒子数  $N$  和体积  $V$  下, 理想的经典、费米和玻色气体的化学势  $\mu$  与  $k_B T$  之比随温度  $T$  而变化的行为<sup>[7]</sup>

$$\begin{aligned} \frac{N}{V} &= \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{\frac{1}{2}}}{\exp\left(\frac{\varepsilon}{k_B T_0}\right) - 1} = \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{2mk_B T_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{dx x^{\frac{1}{2}}}{e^x - 1} \\ &= \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{2mk_B T_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \end{aligned} \quad (8.3.7)$$

其中已用了(4.6.11)式. 由上式解出:

$$T_0 = 3.31 \frac{\hbar^2}{mk_B} \left( \frac{N}{V} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (8.3.8)$$

$\left[ \zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612, \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \right]$ . 而当  $T \leq T_0$ ,  $\mu_B = 0^-$ . 在这个  $(0^+, T_0)$  温度区间内, 形式上由公式(8.3.1)  $|_{\mu=0}$  给出的  $N_i$  当  $\varepsilon_i > 0$  仍为有限而  $N_0$  却因  $\varepsilon_0 = 0$  而趋于无限, 实际上应认为类似于(8.3.7)的积分当  $T < T_0$  只是给出分布在  $\varepsilon > 0$  能级上的全部粒子  $N_{\varepsilon>0} (< N)$ :

$$\frac{N_{\varepsilon>0}}{V} = \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{d\varepsilon \varepsilon^{\frac{1}{2}}}{\exp\left(\frac{\varepsilon}{k_B T}\right) - 1} = \frac{N}{V} \left( \frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (8.3.9)$$

而余下的粒子则都跑到最低的能量态 ( $\varepsilon = 0$ ) 上去了:

$$\frac{N_{\varepsilon=0}}{V} = \frac{N_0}{V} = \frac{N}{V} \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_0} \right)^{\frac{3}{2}} \right] \quad (8.3.10)$$

这种现象便叫做玻色-爱因斯坦凝结(简记为 BEC). 由上述讨论可见,  $T_0$  就是发生 BEC 的临界温度, 对于液氦  $^4\text{He}$ , 其质量密度测得为

$$\rho = \left( \frac{mN}{V} \right) = 1.45 \times 10^2 \text{ kg/m}^3$$

相当于数密度

$$\frac{N}{V} = 2.18 \times 10^{28} / \text{m}^3 = 2.18 \times 10^{22} / \text{cm}^3$$

代入(8.3.8)式可算得

$$T_0 = 3.14\text{K} \quad (8.3.11)$$

这与实验测得之  $^4\text{He}$  超流的相变临界温度  $T_c = 2.19\text{K}$  相差不远, 液氦的定容比热  $c_v$  在这点上呈现对数奇性,  $c_v - T$  曲线在  $T_c$  点的行为有点像字母  $\lambda$ , 故  $T_c$  常被称为  $^4\text{He}$  的  $\lambda$  点. 实验上也已发现, 当  $T < T_c$ , 液氦像是两种液体的混合, 一种处于“正常相”, 叫 HeI, 另一种处于“超流相”, 叫 HeII. 后者的比例随温度下降而增大, 到  $T \rightarrow 0$  时便全部是超流相了. 与前面的计算

比较,似乎 HeI和 HeII可以分别与  $N_{\epsilon>0}$  和  $N_0$  两类粒子去联系,因此理想玻色气的 BEC 似乎可以定性地解释<sup>4</sup>He 的超流现象. 但应该注意,在定量的许多细节上是对应不起来的. 例如理想玻色气在  $T_0$  的 BEC 相变是一级相变,有相变潜热,但实际<sup>4</sup>He 在  $\lambda$  点的相变并无潜热. 又如下一节就会讨论到,理想的无相互作用的玻色粒子,即使全部凝聚到  $\epsilon=0$  的态,也没有超流性. 后者只有在计入粒子间的相互作用(斥力)后才能得到解释.

### 8.3B 气态 BEC 的实验发现

虽然过去的量子力学教科书中说:由偶(奇)数个费米子组成的复合粒子如原子服从 B-E(F-D)统计,这件事在宏观的气体物质中却从未在实验中清楚地显示过.<sup>4</sup>He 的超流,如前所说,虽然也是 B-E 统计性的表现,但原子间的相互作用还是太强. 如果能直接观察气体原子的 BEC 就好了.

从(8.3.6)式后的讨论可见,零动量凝结即 BEC 发生的条件是粒子密度  $\frac{N}{V} = n$  足够大,使  $n > n_Q = \lambda_T^{-3}$ , 这时在  $\lambda_T^3$  体积内有多于 1 个的粒子,它们的德布罗意波互相重叠在一起,所以 BEC 作为一种理想气体量子统计的基本现象,它的判据由(8.3.7)式的分析应是<sup>[9]</sup>

$$n\lambda_T^3 > 2.612 \quad (8.3.12)$$

由于气态密度  $n$  小,这就要求有极低的温度.

1975 年汉斯(T. W. Hänsch)和肖洛(A. C. Schawlow)首先提出用二束激光相对地照射中性原子而使其冷却的思想. 设一速度为  $v$  的原子沿  $x$  轴运动,用一束频率为  $\nu$  的激光沿负  $x$  轴方向照射此原子. 由于 Doppler 效应,原子接收到光子时后者的频率升高为  $\nu' = \nu \sqrt{\frac{c+v}{c-v}} \approx \nu \left(1 + \frac{v}{c}\right)$  (因  $v \ll c$ ), 设  $\nu'$  恰等于原子的本征频率  $\nu_0$ , 这个光子就可能被共振吸收,而  $\nu = \nu_0 \left(1 - \frac{v}{c}\right)$  略低于  $\nu_0$ , ( $\nu_0 - \nu = \nu_0 \frac{v}{c}$  落在谱线  $\nu_0$  的自然宽度内即可). 原子在  $10^{-8}$  秒时间内可吸收一个光子而获得沿  $x$  轴方向的动量增量  $\Delta p_x = -\frac{h\nu}{c} < 0$ , 即它受到阻尼力而使其速度降低一些. 此原子在短时间内可吸收成千上万个光子,而相继两次吸收之间的自发辐射光子在方向上却是混乱的,因此原子获得的反冲动量是无规的,于是在激光照射下,原子速度将很快降到 1m/s 以下. 1985 年华裔科学家朱棣文<sup>[10]</sup>用 6 束激光从 3 个相互垂直的方向照射 Na 原子团,使激光交汇处

的原子处于不断地吸收和发射光子并交换动量的胶着状态,称为光学粘团(optical molasses),后者可冷却到  $240\mu\text{K}$  ( $1\mu\text{K} = 10^{-6}\text{K}$ ) 的低温. 朱棣文因在激光 Doppler 冷却原子方面的杰出贡献获 1997 年诺贝尔物理学奖.

在磁场的陷阱内对原子在 3 个相互垂直的方向上加 6 束激光,便可以有效地把原子从室温冷下来. 以  $m = 87\text{u}$  的  $^{87}_{37}\text{Rb}_{50}$  原子为例,在室温  $T = 300\text{K}$  时,  $v \approx 2.93 \times 10^2 \text{m/s}$ ,如冷到  $T = 10^{-6}\text{K}$  时,速度减小到  $v \approx 1.7 \times 10^{-2} \text{m/s}$ . 但这种方法当原子密度较高时便不大有效了.

微开( $\mu\text{K}$ )级温度对 BEC 还不够低,离(8.3.12)式判据还远,于是又发展了用磁阱俘获中性原子和进一步冷却的技术. 由于磁阱深度很浅,1985 年 Migdall 等\* 才首次成功地把用激光冷却法冷却下来的  $^2\text{Na}$  原子在一个“四极磁阱”中央囚禁起来,衰变时间常数  $\tau$  达到 0.83(7)秒.  $\tau$  的数值是被本底气体原子碰撞所限制的,气体密度越高, $\tau$  便越短.

Na 原子处于基态  $3S_{1/2}$ , 实验上利用它的超精细结构 ( $hfs$ , 见 § 9.6A) 磁量子数  $m_F = 2$  的态,(由于 Zeeman 效应而获得的势能  $\sim \mu B$ , 其中原子磁矩  $\mu \sim \mu_B$ , 磁场  $B \sim 2\text{T}$ ) 而实现囚禁,这时阱深约 1.3K,能够俘获速度  $v < 30\text{m/s}$  的原子,相当于温度  $T < 17\text{mK}$ ,这与激光冷却法的极限相当.

1995 年 Petrich 等\*\* 分析了上述“四极磁阱”中  $\tau$  不能很长的主要原因是:当原子接近磁阱中心时,由于那里磁场  $B$  越来越小,Zeeman 能级分裂间距  $\Delta E = (\Delta m)\mu B \sim \mu_B B$  也越来越小,原子便可能发生非绝热的自旋反转 (spin flip),从囚禁的磁量子态(如  $m_F = +1$ ) 跃迁到非囚禁的态(如  $m_F = -1$ ),于是原子便逃出磁阱去了.

为克服此困难,他们在垂直于四极磁阱对称轴( $\hat{z}$  方向)的  $x$ - $y$  平面上,加上一个频率为  $\omega_b$  ( $\sim 7\text{MHz}$ ) 的小的均匀旋转磁场. 因为  $\omega_b$  远小于 Larmor 频率  $\omega_L$  ( $\omega_L = \mu B/\hbar$ ) 而又远大于原子间的碰撞频率  $\omega_t$  ( $\sim 100\text{Hz}$ ),原子感到的场是瞬时场的时间平均,故称此磁阱内的势为 TOP (time-averaged orbiting potential) (对应于谐振子势). 于是原子在不断旋转变化的 TOP 中来不及掉到中央磁场最弱的区域,从而抑制了向退囚禁态(对应于倒谐振子势)的跃迁,延长了囚禁寿命(达到 100s). 实验上用  $3 \times 10^6$  个  $^{87}\text{Rb}$  原子(基态  $^2S_{1/2}$ , ( $F=1$ )),结果比普通磁阱的相空间密度提高了 3 个数量级(密度峰值达到  $6.2 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$ ),温度降到 200nK.

\* A. L. Migdall, J. V. Prodan, W. D. Phillips. *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 2596 (1985).

\*\* W. Petrich et al. *Phys. Rev. Lett.*, **74**, 3352 (1995).

为进一步冷却,科学家又发展了“蒸发冷却”的新技术.考虑到在TOP外缘的原子其速度比内部原子的速度快,同时它们的能级间距 $\Delta E$ 也较大,现在加上一个射频(rf)信号,其频率 $\nu_{\text{evap}}$ 刚可使这些原子产生向退囚禁态的跃进( $\nu_{\text{evap}} \sim \frac{\Delta E}{h} \sim 10\text{MHz}$ ),于是它们便很快地逃掉了.由此可见,这种“蒸发冷却”的原理与一杯热水的冷却差不多:被约束在磁阱中的一团原子,让其高能分布的尾巴,即原子中最热的那一部分不断地跑掉,这件事现在由频率为 $\nu_{\text{evap}}$ 的射频(rf)信号来做,像一把“解剖刀”(scalpel)那样,不断地将扩散到磁阱边缘的高速原子“切掉”,从而使留下来的低速原子靠相互弹性碰撞重新“热化”,又被一片片地切断,最后可在磁阱中央留下冷却的密度较高的原子云团.在这过程中 $\nu_{\text{evap}}$ 缓慢地降下来,相当于温度不断地降下来.在1995年美国科学家的实验中<sup>[11]</sup>,成功地把<sup>87</sup>Rb原子冷却到170nK,观察到原子密度在此时(相当于 $\nu_{\text{evap}} = 4.23\text{MHz}$ )有一个尖锐的峰,约有2000个原子处在(零动量的)单个量子态上,原子的数密度约为 $2.6 \times 10^{12}\text{cm}^{-3}$ ,即表示发生了BEC相变.原子云被磁场约束了长达15秒钟之久.进一步冷却到 $\nu_{\text{evap}} = 4.1\text{MHz}$ ,相当于 $T = 20\text{nK}$ ,原子密度下降到 $1 \times 10^{11}\text{cm}^{-3}$ .那时“解剖刀”切掉的便是零动量凝聚态本身了.

这个实验分析了3个BEC的特征信号,结果是令人信服的,W. Ketterler实现了<sup>23</sup>Na的BEC.科学家正在此基础上继续研究BEC的特性及其应用,如制成“原子激光”等\*.

## § 8.4 液氦的超流理论

### 8.4A Bogoliubov的正则变换

卡皮查于1938年在实验上首先发现超流现象——液氦在2.19 K温度下变成没有粘滞性的流体.朗道(Landau)在1941年作出理论解释,1947年玻戈留波夫(Bogoliubov)进一步用“正则变换方法”处理了这一问题,下面介绍他的方法(参见文献[2]~[4], [8]).

把<sup>4</sup>He原子看成为彼此间有微弱斥力相互作用的全同玻色子,则可写出体系的总哈密顿量为(记 $k$ 及 $p$ 为动量)( $\hbar = 1$ ):

$$\hat{H} = \sum_k \frac{1}{2m} k^2 \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + H_{\text{int}} \quad (8.4.1)$$

\* Cornell, Wieman 与 Ketterler 合获 2001 年诺贝尔物理学奖.



$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{1}{2V} \sum_{k, p, k', p'} \delta_{k+p, k'+p'} U_{|p-p'|} \hat{a}_{p'}^+ \hat{a}_{k'}^+ \hat{a}_k \hat{a}_p \quad (8.4.2)$$

[比较(8.2.20~24)各式]. 考虑原子间的力是短程力, 最简单的模型是

$$U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = g\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (8.4.3)$$

则

$$U_{|p-p'|} = g \quad (8.4.4)$$

现在考虑到上节讨论的低温下 BEC 现象, 在零动量 ( $k=0$ ) 态凝结的粒子数  $N_0$  是一个大量, 于是可将算符  $\hat{a}_0$  和  $\hat{a}_0^+$  分别都用一个 C 数  $\sqrt{N_0}$  来代替. 这句话的意思实际上是说: 我们讨论的基态  $|0'\rangle$  并不是原来玻色子的“真空态”  $|0\rangle$  而是零动量粒子凝聚的“相干态”:

$$\hat{a}_0 |0'\rangle = \sqrt{N_0} |0'\rangle, \quad \langle 0' | \hat{a}_0^+ = \langle 0' | \sqrt{N_0} \quad (8.4.5)$$

所以在(8.4.2)式中以(8.4.4)和  $\hat{a}_0 = \hat{a}_0^+ = \sqrt{N_0}$  代入后, 只保留到正比于  $N_0$  级的项(略去  $\sqrt{N_0}$  以下的小项), 可以简化成:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{int}} &\approx \frac{g}{2V} \hat{a}_0^+ \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \frac{g}{4V} \sum_k' (\hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_0 \hat{a}_0 + \hat{a}_k^+ \hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_0 \hat{a}_0 \\ &\quad + \hat{a}_0^+ \hat{a}_0^+ \hat{a}_k \hat{a}_{-k} + \hat{a}_0^+ \hat{a}_0^+ \hat{a}_{-k} \hat{a}_k + \hat{a}_0^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \hat{a}_0 \\ &\quad + \hat{a}_k^+ \hat{a}_0^+ \hat{a}_k \hat{a}_0 + \hat{a}_k^+ \hat{a}_0^+ \hat{a}_0 \hat{a}_k + \hat{a}_0^+ \hat{a}_k^+ \hat{a}_0 \hat{a}_k) \\ &= \frac{g}{2V} N_0^2 + \frac{g}{2V} N_0 \sum_k' (\hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k \hat{a}_{-k} + 2 \hat{a}_k^+ \hat{a}_k) \end{aligned} \quad (8.4.6)$$

其中  $\sum_k'$  表示求和时不包括  $k=0$  项. (注意前面引入系数  $\frac{1}{2}$  以避免重复计数.) 合并(8.4.6)与(8.4.1)式:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{g}{2V} N_0^2 + \sum_k' \left( \frac{1}{2m} k^2 + \frac{g}{V} N_0 \right) \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \\ &\quad + \sum_k' \frac{g}{2V} N_0 (\hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k \hat{a}_{-k}) \end{aligned} \quad (8.4.7)$$

我们看到, 在所取的近似下,  $\hat{H}$  只包含两个算符的乘积项, 只须消去  $\hat{a} \hat{a}$  和  $\hat{a}^+ \hat{a}^+$  的项, 便可达到“对角化”的目的, 为此我们来作算符的变换, 定义(动量为  $k$  的)准粒子湮灭和产生算符分别为:

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_k &= u_k \hat{a}_k + v_k \hat{a}_{-k}^\dagger \\ \hat{\alpha}_k^\dagger &= u_k \hat{a}_k^\dagger + v_k \hat{a}_{-k}\end{aligned}\quad (8.4.8)$$

其中  $u_k$  和  $v_k$  是待定的实系数, 假定只与  $k$  的大小有关, 为确定它们, 计算对易关系:

$$\begin{aligned}[\hat{\alpha}_k, \hat{\alpha}_{k'}] &= [u_k \hat{a}_k + v_k \hat{a}_{-k}^\dagger, u_{k'} \hat{a}_{k'} + v_{k'} \hat{a}_{-k'}^\dagger] \\ &= u_k v_{k'} [\hat{a}_k, \hat{a}_{-k'}^\dagger] + v_k u_{k'} [\hat{a}_{-k}^\dagger, \hat{a}_{k'}] \\ &= u_k v_{k'} \delta_{k, -k'} - v_k u_{k'} \delta_{-k, k'} = 0\end{aligned}\quad (8.4.9)$$

(已假定  $u_k$  和  $v_k$  与  $k$  的方向无关), 同理

$$[\hat{\alpha}_k^\dagger, \hat{\alpha}_{k'}^\dagger] = 0 \quad (8.4.10)$$

$$[\hat{\alpha}_k, \hat{\alpha}_{k'}^\dagger] = (u_k^2 - v_k^2) \delta_{k, k'} \quad (8.4.11)$$

可见只要我们选择

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \quad (8.4.12)$$

则(8.4.9)~(8.4.11)三式与原来  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^\dagger$  满足的对易关系形式上一样, 以后把能够保持对易关系的变换叫做“正则变换”. 利用(8.4.12)式将变换(8.4.8)反演, 易得

$$\begin{cases} \hat{a}_k = u_k \hat{\alpha}_k - v_k \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \\ \hat{a}_k^\dagger = u_k \hat{\alpha}_k^\dagger - v_k \hat{\alpha}_{-k}\end{cases} \quad (8.4.13)$$

以此式代入(8.4.7)式, 按  $\alpha$  算符的正规乘积( $\alpha^\dagger$  在  $\alpha$  之左)次序排列后便得到 (记  $\epsilon_k = \frac{1}{2m} k^2$ ):

$$\hat{H} = E_0 + H_1 + H_2 \quad (8.4.14)$$

$$E_0 = \frac{g}{2V} N_0^2 + \sum_k' \left[ \left( \epsilon_k + \frac{g}{V} N_0 \right) v_k^2 - \frac{g N_0}{V} u_k v_k \right] \quad (8.4.15)$$

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2} \sum_k' \left[ \left( \epsilon_k + \frac{g}{V} N_0 \right) (u_k^2 + v_k^2) - \frac{g N_0}{V} 2u_k v_k \right] (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\alpha}_{-k}^\dagger \hat{\alpha}_{-k}) \quad (8.4.16)$$

$$\hat{H}_2 = \sum_k' \left[ \left( \epsilon_k + \frac{g}{V} N_0 \right) (-u_k v_k) + \frac{g N_0}{2V} (u_k^2 + v_k^2) \right] \times (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_{-k}^\dagger + \hat{\alpha}_{-k} \hat{\alpha}_k) \quad (8.4.17)$$

$E_0$  是常数项, 它的意义是新真空  $|\tilde{0}\rangle$  (定义为  $\hat{\alpha}_k |\tilde{0}\rangle = 0$ , 即是准粒子的真空态) 相对于原来真空  $|0'\rangle$  的能量,  $\hat{H}_1$  已对准粒子“对角化”, 但  $\hat{H}_2$  却是一种“危险项”, 它的存在意味着在新真空中会自动产生(或湮灭)一对准粒子, 为消除这一新真空的不稳定性, 我们令  $\hat{H}_2 = 0$ , 给出条件

$$\left(\epsilon_k + \frac{g}{V}N_0\right)u_kv_k = \frac{gN_0}{2V}(u_k^2 + v_k^2) \quad (8.4.18)$$

只要注意约束条件(8.4.12)式给出  $\frac{\partial u_k}{\partial v_k} = \frac{v_k}{u_k}$ , 则从(8.4.15)式对  $v_k$  的变分而得到

$$\frac{\partial E_0}{\partial v_k} = 0 \quad (8.4.19)$$

的方程与(8.4.18)式一致. 这表示新真空确实是能量取极小的态.

常取参数化形式使条件(8.4.12)和(8.4.18)式简化为

$$u_k = \cosh\varphi_k, \quad v_k = \sinh\varphi_k, \quad (8.4.20)$$

$$\tanh 2\varphi_k = \frac{2u_kv_k}{u_k^2 + v_k^2} = \frac{\frac{gN_0}{V}}{\epsilon_k + \frac{g}{V}N_0} \quad (8.4.21)$$

则

$$u_k^2 + v_k^2 = \cosh 2\varphi_k = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2 2\varphi_k}} = \frac{\epsilon_k + \frac{gN_0}{V}}{E_k} \quad (8.4.22)$$

其中

$$E_k = \sqrt{\epsilon_k \left(\epsilon_k + \frac{2gN_0}{V}\right)} \quad (8.4.23)$$

因  $2u_kv_k = \sinh 2\varphi_k = \sqrt{\cosh^2 2\varphi_k - 1} = \frac{\frac{gN_0}{V}}{E_k}$ , 最后

$$\begin{cases} u_k^2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{\epsilon_k + \frac{gN_0}{V}}{E_k} + 1 \right] \\ v_k^2 = \frac{1}{2} \left[ \frac{\epsilon_k + \frac{gN_0}{V}}{E_k} - 1 \right] \end{cases} \quad (8.4.24)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left[ \frac{gN_0^2}{V} + \sum_k' \left( E_k - \epsilon_k - \frac{gN_0}{V} \right) \right] + \sum_k' E_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \quad (8.4.25)$$

可见  $E_k$  正是准粒子(元激发)的能量,哈密顿对角化的任务已经完成了.  $\hat{H}$  的常数项部分  $E_0$  表示准粒子真空  $|\tilde{0}\rangle$  比原来真空  $|0'\rangle$  高出的能量,它实际上为负. 现在问:  $|\tilde{0}\rangle$  与  $|0'\rangle$  是什么关系? 为此注意正则变换(8.4.8)可改写为:

$$\begin{cases} \hat{\alpha}_k = \exp(-i\hat{G}) \hat{a}_k \exp(i\hat{G}) \\ \hat{\alpha}_k^\dagger = \exp(-i\hat{G}) \hat{a}_k^\dagger \exp(i\hat{G}) \end{cases} \quad (8.4.26)$$

$$\hat{G} = \frac{i}{2} \sum_k \varphi_k (\hat{a}_k \hat{a}_{-k} - \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_k^\dagger) \quad (8.4.27)$$

其中  $\varphi_k$  由(8.4.20)式定义. [证明(8.4.26)式即(8.4.8)式,可利用公式(1.A.1).] 以  $\exp(-i\hat{G})$  右乘(8.4.26)的第一式,由  $\hat{a}_k |0'\rangle = 0$  得

$$\hat{\alpha}_k \exp(-i\hat{G}) |0'\rangle = 0, \quad (\text{对一切 } k \neq 0) \quad (8.4.28)$$

与新真空  $|\tilde{0}\rangle$  的定义式 ( $\hat{\alpha}_k |\tilde{0}\rangle = 0$ ) 比较,即见

$$\begin{aligned} |\tilde{0}\rangle &= \exp(-i\hat{G}) |0'\rangle \\ &= \prod_k \exp \left\{ \frac{1}{2} \varphi_k (\hat{a}_k \hat{a}_{-k} - \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_k^\dagger) \right\} |0'\rangle \end{aligned} \quad (8.4.29)$$

这意味着:准粒子真空从原来真空的立场看,存在一对一对的  $a$  玻色子,不断地被产生着或湮灭着.  $|\tilde{0}\rangle$  中的  $a$  粒子是不守恒的,这一点从正则变换的定义式(8.4.8)看也是预期的,后者虽然保持动量守恒,但却破坏  $a$  粒子数守恒. 考虑到  $|0'\rangle$  真空原来就是粒子数不固定的零动量  $a$  粒子的相干态(BEC 态),它对  $k \neq 0$  的  $a$  粒子而言是一个大的粒子库,像(8.4.8)式那样的变换既十分方便,又符合实际情况,并没有必要设法把它弄成为保持  $a$  粒子数守恒的变换.

### 8.4B Landau 超流理论

(8.4.23)式给出了在低温下有微弱斥力相互作用 ( $g > 0$ ) 的全同玻色子体系中准粒子(元激发)的能量  $E_k$  随动量  $k$  ( $|\mathbf{k}| = k$ ) 而变化的关系,即所谓“色散关系”. 回忆(8.4.1)~(8.4.4)式,我们把  $g$  换为  $U_k$  以计入对不同的动量转移  $k$  有不同的斥力的情形,则 ( $\epsilon_k = \frac{1}{2m} k^2$ ):

$$E_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + \frac{2N_0}{V}U_k\epsilon_k} = \begin{cases} \left(\frac{N_0}{mV}U_k\right)^{\frac{1}{2}}k, & (k \rightarrow 0) \\ \frac{1}{2m}k^2 + \frac{N_0}{V}U_k, & (k \rightarrow \infty) \end{cases} \quad (8.4.30)$$

注意当  $k \rightarrow 0$  时,元激发的能量与动量一次方成正比,(这与无相互作用情况下  $E_k \sim k^2$  不同),这时元激发叫做“声子”,它的传播速度即群速度等于

$$v_g = \left(\frac{\partial E_k}{\partial k}\right)_{k \rightarrow 0} = \left(\frac{N_0}{mV}U_k\right)_{k \rightarrow 0}^{\frac{1}{2}} \quad (8.4.31)$$

当  $U_{k \rightarrow 0} > 0$  它是实数,表示两体作用为斥力时超流体系中存在稳定的“声波”,实验上在 1.1K 温度测得 He II 的声速  $v_g \approx 239$  米 / 秒。(见图 8.4.1)

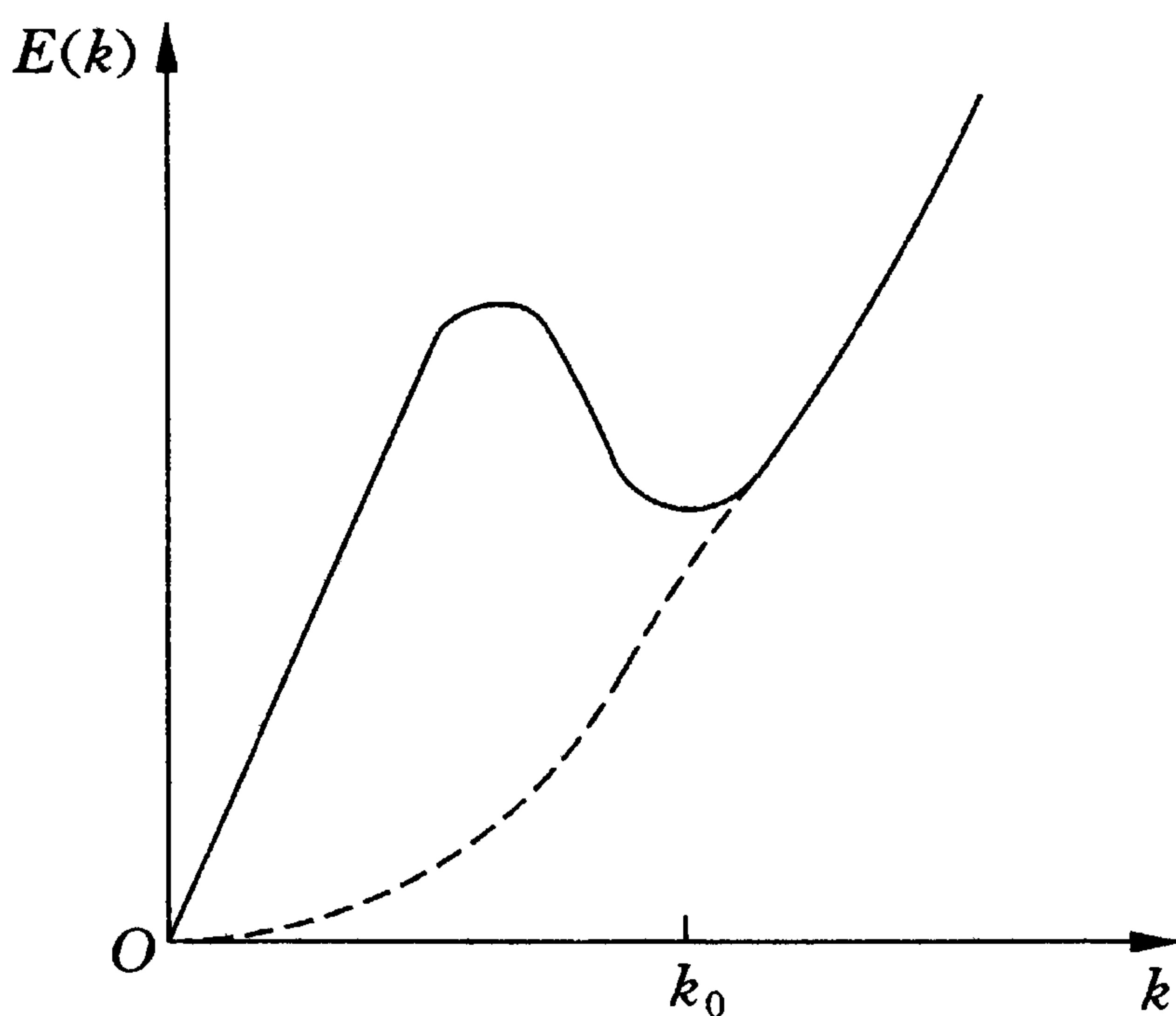


图 8.4.1 超流体系中元激发能量

$E$  作为动量  $k$  的函数即色散关系,虚线是自由粒子的情形

有趣的是当  $k$  增大若  $U_k$  减小,则曲线先达到一极大值,再到  $k_0$  时达到一极小值. 实验上果然用长波长中子束流的散射测到了这条色散曲线,在  $k_0$  点附近可表示为(见文献[8]和 § 7.5):

$$E(k) = \Delta + \frac{1}{2\mu}(k - k_0)^2 \quad (8.4.32)$$

其中“能隙”用温度标出为:

$$\frac{\Delta}{k_B} \approx 8.65\text{K}$$

$k_0$  用波长标出:  $\frac{k_0}{\hbar} \approx 19.2(\text{nm})^{-1}$ . 而质量

$$\mu \approx 0.16m_{\text{He}}$$

(Landau 把这部分元激发叫做“Roton”，曾以为是某种流体的转动激发，现在知道不然，此命名只有历史意义了。)

Landau 超流性理论的大意如下：考虑  $N$  个玻色子构成的流体，在实验室参考系 ( $L$  系) 中以速度  $\mathbf{V}$  流动。则每个原子的动量由原来的  $\mathbf{p}_j$  变为  $\mathbf{p}_j + m\mathbf{V}$ ，再计入原子间的相互作用势能  $U_{ij}$  后，流体在  $L$  系的总能量为

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_L &= \sum_j \frac{1}{2m} (\mathbf{p}_j + m\mathbf{V})^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} \\ &= \sum_j \frac{1}{2m} \mathbf{p}_j^2 + \frac{1}{2} NmV^2 + \mathbf{V} \cdot \sum_j \mathbf{p}_j + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} U_{ij} \end{aligned} \quad (8.4.33)$$

另一方面，我们可以取一个运动参考系 ( $M$  系)，与流体一起运动，则  $\mathcal{E}_L$  中除中间明显含  $\mathbf{V}$  的两项外，首尾两项都变到  $M$  系中的能量  $\mathcal{E}_M$ ，后者又经正则变换变为 (8.4.25) 式表示的准粒子真空能量  $E_0$  和各种准粒子激发能之和：

$$\mathcal{E}_M = \langle \tilde{0} | \hat{H} | \tilde{0} \rangle = E_0 + \sum_k' n_k E_k \quad (8.4.34)$$

( $n_k = \langle \hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k \rangle$ )，同理在  $M$  系中流体的总动量也来自准粒子：

$$\mathcal{P}_M = \sum_k' n_k \mathbf{k} = \sum_j' \mathbf{p}_j \quad (8.4.35)$$

(最后一个等式又用原来原子的动量之和来表示) 所以

$$\mathcal{E}_L = \frac{1}{2} NmV^2 + \mathbf{V} \cdot \mathcal{P}_M + \mathcal{E}_M \quad (8.4.36)$$

以 (8.4.34) 式代入后

$$\mathcal{E}_L = E_0 + \frac{1}{2} NmV^2 + \sum_k' n_k (E_k + \mathbf{k} \cdot \mathbf{V}) \quad (8.4.37)$$

在  $L$  系中的流体沿管道流动时，如果有粘滞性阻力，就意味着体系中至少产生一个阻尼性的元激发，它的动量  $\mathbf{k}$  与  $\mathbf{V}$  的方向相反，这时体系能量有一增量 ( $\Delta n_k = 1$ )

$$\Delta \mathcal{E}_L = E_k - kV \quad (8.4.38)$$

当  $\Delta \mathcal{E}_L < 0$ ，即  $V > \frac{E_k}{k}$  (至少对某个  $k$ ) 时，元激发产生后使体系能量降低，这便表现出粘滞性。

相反的情形，定义一个“临界速度”为

$$V_c \equiv \min\left(\frac{E_k}{k}\right) \quad (8.4.39)$$

而倘若

$$V < V_c \quad (8.4.40)$$

时, 则因  $\Delta\mathcal{E}_L > 0$  (对任意一个  $k$ ), 产生一个元激发对体系在能量上是不利的, 实际上是不可能的. 于是流动时不表现出粘滞性. 由此可见, (8.4.40)和(8.4.39)两式即是“超流”的 Landau 判据: 当流体速度  $V < V_c$  时显示超流性;  $V > V_c$  时超流性便破坏了. 可是需要注意: 图8.4.1对液氦给出  $\frac{E_k}{k}$  的最小值在声子段已知为声速  $v_s \approx 239$  米/秒, 在 Roton 段约为 63 米/秒, 都远大于实验测得的  $V_c$  值, 后者与管道毛细管直径  $D$  密切相关, 如表 8.4.1 所示<sup>[8]</sup>.

表 8.4.1

|       |                         |                         |                         |
|-------|-------------------------|-------------------------|-------------------------|
| $D$   | $1.2 \times 10^{-5}$ cm | $7.9 \times 10^{-5}$ cm | $3.9 \times 10^{-4}$ cm |
| $V_c$ | 13cm/s                  | 8cm/s                   | 4cm/s                   |

理论上为解释这种小的  $V_c$  值, 必须考虑流体中出现另一种“量子化涡旋”的元激发, 这里只指出, 在上一小节的微观理论中, 我们在写出(8.4.6)式时已略去了  $\sqrt{N_0}$  级以及更小的项, 相应地在正则变换后准粒子间没有了相互作用, 在这种近似下是不可能讨论比声子或 Roton 更复杂的元激发的, 所以不往下讨论了. 本节的介绍(这是一种“非微扰”方法)至少明确了超流性的 3 个必要条件: (1) 零动量粒子的 BEC ( $\frac{N_0}{V} \neq 0$ ); (2) 玻色子之间存在微弱的斥力, ( $U_k > 0$ ), (自由玻色子不可能有超流性); (3) 流体速度  $V < V_c$  (临界速度).

## § 8.5 超导的 BCS 理论

### 8.5A 电子-声子相互作用和 Cooper 对的概念

1911 年昂纳斯(H. K. Onnes)发现了汞(Hg)的超导现象: 在临界温度  $T_c = 4.153$ K 时电阻突降为零. 1933 年, 迈斯纳(W. Meissner)进一步发现: 置于外磁场中的导体进入超导态时, 会突然把磁场排斥到体外. 这一“Meissner 效应”不能够用上述零电阻效应来说明.

第三个实验事实是: 超导态可以被逐渐增强的外磁场所破坏, 当外磁场  $H$  小于某一临界值  $H_c$  时, 超导态可以保持, 而当  $H > H_c$  时, 磁场突

然穿入, 超导态被破坏而转变为正常态.  $H_c$  与温度  $T$  的依赖关系是

$$H_c(T) = H_c(0) \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^2 \right] \quad (8.5.1)$$

$H_c(0)$  是  $T \rightarrow 0^+$  K 的临界磁场.

第四, 同一种元素而不同同位素的超导临界温度  $T_c$  与同位素质量  $M$  的关系是(1950 年发现):

$$T_c M^{1/2} = \text{常数} \quad (8.5.2)$$

能够解释以上全部实验事实的理论到 1957 年才获得成功, 让我们回顾一下这个研究历程中提出了哪些新的概念.

### 1. 有多少电子参与超导?

导体从正常态转变为超导态是一种相变, 有点类似于液氦从正常态转变为超流态. 但玻色子可能凝聚, 而电子作为费米子不会凝聚. 假定两个电子作为一个载流子的单位(见下)而真的发生了某种凝聚, 它们约占导体中自由电子总数的多少呢?

从能量上考虑, 超导凝聚能  $\Delta F$  (正常态与超导态的自由能之差) 是很小的, 仅有  $10^{-8}$  eV/原子或每个电子仅约有  $10^{-4} k_B T_c$  的数量级. 这个  $10^{-4}$  因子从另一考虑也可得出: 在 1935 年超导的唯象理论中, 用二流体模型来描述超导体时, 超流分量的伦敦(London)方程给出电磁场矢势  $\mathbf{A}$  与电流密度  $\mathbf{J}$  直接成正比的关系:  $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = -\frac{e^2 n}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r})$ . 1953 年 Pippard 发现这个关系不是定域的, 而须在非定域公式\* 中引入一个相干长度  $\xi_c \sim 10^{-4}$  cm 和一个电子的关联长度  $r_0$  [12]:

$$\frac{1}{r_0} = \frac{1}{\xi_c} + \frac{1}{l} \quad (8.5.3)$$

$l$  是导体中电子的平均自由程. 这意味着超流分量的载流子在空间有一扩展线度  $\Delta x \sim r_0 \sim 10^{-4}$  cm, 由此可以估计, 载流子波函数中包含的动量增量  $\Delta p \sim \frac{\hbar}{\Delta x} \sim 10^{-4} p_F$ ,  $p_F$  是导体中自由电子(在零温下)填充到最高能级的费米动量\*\*. 这便告诉我们: 只有约  $10^{-4}$  的自由电子构成载流子, 参与超导凝聚.

\*  $\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \int \Gamma(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \mathbf{A}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'$ ,  $\Gamma(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \sim \exp\left[-\frac{1}{r_0} |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\right]$ .

\*\* 标准金属的电子密度  $6 \times 10^{22}/\text{cm}^3$ ,  $E_F = 5.56 \text{ eV}$ ,  $k_F = 1.21 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$ .



## 2. 电子与声子的相互作用

超导临界温度  $T_c$  的同位素效应(8.5.2)式启示我们:晶格原子的振动在超导机制中起了关键的作用. 为什么  $T_c$  与原子质量  $M$  的开方成反比? 首先想到的是:晶格振动量子化后便对应于“声子”,它与光子类似,也是玻色子,因此电子运动时与晶格间的耦合便表现为电子与声子间的相互作用,其基本顶角即如图 8.2.1 和公式(8.2.19)所示,这里改变记号写为

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{k, q, \sigma} G_q \hat{a}_{k+q, \sigma}^+ \hat{a}_{k, \sigma} \hat{b}_q + h. c. \quad (8.5.4)$$

其中动量为  $k$  的电子( $a$  算符)吸收动量为  $q$  的声子( $b$  算符)后变为动量为  $k+q$  的电子. 因为声子没有自旋角动量,电子的自旋方向  $\sigma$  在吸收声子后不会改变.

从电子-声子相互作用(一级效应)可以推出电子与电子间的相互作用(二级效应), (参见(8.2.24)式和图 8.2.2), 称为 Fröhlich 相互作用<sup>[13]</sup>, 结果是

$$\hat{H}_{\text{int}} = \sum_{\substack{k, k', q \\ \sigma, \sigma'}} \frac{|G_q|^2 \hbar \omega_q}{(\epsilon_{k+q} - \epsilon_k)^2 - (\hbar \omega_q)^2} \hat{a}_{k+q, \sigma}^+ \hat{a}_{k'-q, \sigma'}^+ \hat{a}_{k', \sigma'} \hat{a}_{k, \sigma} \quad (8.5.5)$$

其中  $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ ,  $m^*$  是电子在晶格间运动的“有效质量”, 而  $\hbar \omega_q$  是动量为  $q$  的声子能量.

## 3. Cooper 对的模型

Cooper 考虑到只有费米面附近的电子才参与超导, (8.5.5)式中只有  $k' = -k$  的那些项才是重要的, 同时  $\sigma' = -\sigma$ . 这就是说, 一对动量相反、自旋也相反的电子, ( $k \uparrow$ ) 和 ( $-k \downarrow$ ), 通过交换(虚)声子( $q$ )与另一对电子 ( $k+q \uparrow$ ) 和 ( $-k-q \downarrow$ ) 相互作用, 当电子的能量差 ( $\epsilon_{k+q} - \epsilon_k$ ) 小于声子能量  $\hbar \omega_q$  时, 相互作用能是负的, 即是吸引性的. 这样一对电子就称为“Cooper 对”<sup>[14]</sup>, 于是可把(8.5.5)式简写为(略去实际上有二重简并的自旋记号)

$$\hat{H}_{\text{Pairing}} = - \sum_{k, q} U_q \hat{a}_{k+q}^+ \hat{a}_{-k-q}^+ \hat{a}_{-k} \hat{a}_k \quad (8.5.6)$$

( $U_q > 0$ , 以后  $k$  求和限于半球面, 记为  $k > 0$ ). 引入 Cooper 对的算符

$$\hat{b}_k^+ = \hat{a}_k^+ \hat{a}_{-k}^+, \quad \hat{b}_k = \hat{a}_{-k} \hat{a}_k \quad (8.5.7)$$

从电子算符  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^+$  间的反对易关系, 可以导出  $\hat{b}$  算符间的对易关系是

$$\begin{aligned} [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^+] &= (1 - \hat{n}_k) \delta_{kk'} \\ [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] &= 0 \end{aligned} \quad (8.5.8)$$

(其中  $\hat{n}_k = \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{k\uparrow} + \hat{a}_{-k\downarrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}$ ) 而反对易关系是

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^+]_+ = 2 \hat{b}_k \hat{b}_{k'}^+ (1 - \delta_{kk'}) \quad (8.5.9)$$

由(8.5.8)式可见,  $\hat{b}$  算符还不能算真正的玻色子算符, 仅当  $\hat{n}_k = 0$ , 即当  $k$  能级空着的时候, 产生一对 Cooper 对 ( $\hat{b}_k^+$ ), 才可以认为是“玻色子”, 但又不可以产生两对, 在(8.5.9)式中当  $k = k'$  时为零, 可见 Pauli 原理还在起作用\*.

现在建立一个简单的模型哈密顿量

$$\hat{H} = \sum_k 2\epsilon_k \hat{b}_k^+ \hat{b}_k - \sum_{k, q} U_q \hat{b}_{k+q}^+ \hat{b}_k \quad (8.5.10)$$

只考虑费米面附近的  $N$  个“单 Cooper 对”状态:

$$|\psi\rangle = \sum_k C_k \hat{b}_k^+ |0\rangle \quad (8.5.11)$$

并忽略各状态的  $\epsilon_k$  差别和  $U_q$  对  $q$  的依赖性, 即设

$$\epsilon_k = \epsilon, \quad U_q = v \quad (8.5.12)$$

则  $\hat{H}$  在(8.5.11)式限定的态矢子空间内可表成为一个  $N \times N$  的矩阵:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 2\epsilon' & -v & -v & -v & \cdots \\ -v & 2\epsilon' & -v & -v & \cdots \\ -v & -v & 2\epsilon' & -v & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \quad (8.5.13)$$

其中  $2\epsilon' = 2\epsilon - v$ , 求解本征方程

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (8.5.14)$$

便归结为求解行列式

$$\begin{vmatrix} 2\epsilon' - E & -v & -v & -v & \cdots \\ -v & 2\epsilon' - E & -v & -v & \cdots \\ -v & -v & 2\epsilon' - E & -v & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{vmatrix} = 0 \quad (8.5.15)$$

\* 一个 Cooper 对是“准玻色子”或“复合玻色子”, 它的内部可有各种不同的“内禀动量” $k$ , 但其质心速度永远为零, 故许多在 BCS 基态的 Cooper 对可以产生 BEC. (见习题 8.5)

先将第一(横)行乘以(-1)分别加到第二,第三等行上去,再将第二,第三等(纵)列都加到第一列上去,则方程(8.5.15)便简化为

$$[2\varepsilon' - E - (N-1)v](2\varepsilon' - E + v)^{N-1} = 0$$

于是求得本征值谱为

$$\begin{cases} E = 2\varepsilon' + v, & ((N-1) \text{度简并}) \\ E = 2\varepsilon' - (N-1)v, & (\text{非简并的基态}) \end{cases} \quad (8.5.16)$$

由此可见,因为 Cooper 对之间的吸引力相互作用,费米面变得不稳定,在它附近会出现一个能量更低的基态,它是不简并的. Cooper 通过上述简化模型分析达到这一认识,对进一步严格的求解是十分关键的.

需要强调的是:Cooper 对是两个电子的动量和自旋的配对,并非在空间上拉在一起. 前面已指出只有  $10^{-4}$  的自由电子参与超导凝聚,故估计每立方厘米约  $10^{19}$  个 Cooper 对,平均每两对的质心距离为  $10^{-6}$  cm,而前面又估计过每一束缚对的平均线度约为  $10^{-4}$  cm,每一 Cooper 对所占据的体积中平均有  $\left(\frac{10^{-4}}{10^{-6}}\right)^3 \sim 10^6$  对,由此可见,电子在位形空间是高度重叠的. 因此认识到电子的配对和凝聚是在动量空间(而非位形空间)中,这是一年后 BCS 理论<sup>[15]</sup>成功的前奏.

### 8.5B 费米子的正则变换

回到电子算符,我们的目的是要将下述哈密顿量

$$\hat{H} = \sum_k (\varepsilon_k - \mu) (\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k}) - \sum_{k, k'} U_{k, k'} \hat{a}_{k'}^\dagger \hat{a}_{-k'}^\dagger \hat{a}_{-k} \hat{a}_k \quad (8.5.17)$$

对角化. 其中  $\varepsilon_k = \frac{1}{2m^*} k^2$ ,  $\mu$  为化学势,为简单起见,取

$$U_{k, -k} = G\Theta(\hbar\omega_D - |\varepsilon_k - \mu|) \quad (8.5.18)$$

$G$  为常数,而  $\omega_D$  是固体的 Debye 频率,即晶格振动频率的上限,(8.5.18) 式中阶跃函数  $\Theta$  的意思是:配对电子间的相互作用仅限于费米面的附近 ( $\hbar\omega_D > (\varepsilon_k - \mu) > -\hbar\omega_D$ ),且取能量为负的常数值 ( $G > 0$ ). 记住这一限制后,下面就简记  $U_{k, -k}$  为  $G$ .

对角化的办法类似于(8.4.13)式的(玻色子)正则变换,定义

$$\begin{aligned}\hat{a}_k &= u_k \hat{\alpha}_k + v_k \hat{\beta}_{-k}^\dagger \\ \hat{a}_{-k} &= u_k \hat{\beta}_{-k} - v_k \hat{\alpha}_k^\dagger\end{aligned}\quad (8.5.19)$$

注意：(1) 这里把  $\hat{a}_k \equiv \hat{a}_{k\uparrow}$  与  $\hat{a}_{-k} \equiv \hat{a}_{-k\downarrow}$  看成为两类独立的费米子算符，与此相应的准粒子算符也有两类： $\hat{\alpha}_k \equiv \hat{\alpha}_{k\uparrow}$  与  $\hat{\beta}_{-k} \equiv \hat{\beta}_{-k\downarrow}$  ( $k > 0$ )。 (2) 为了使正则变换能保持费米子的反对易关系，这里要求(8.5.19)式中的实系数满足约束条件

$$u_k^2 + v_k^2 = 1 \quad (8.5.20)$$

[注意与(8.4.12)式不同]. 于是从(8.5.19)式反演可得

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_k &= u_k \hat{a}_k - v_k \hat{a}_{-k}^\dagger \\ \hat{\beta}_{-k} &= u_k \hat{a}_{-k} + v_k \hat{a}_k^\dagger\end{aligned}\quad (8.5.21)$$

(8.5.19)和(8.5.21)式又称为 Valatin-Bogoliubov 变换. 将前者代入(8.5.17)式, 动能项分开写为

$$\begin{aligned}\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-k} &= 2v_k^2 + (u_k^2 - v_k^2)(\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) \\ &\quad + 2u_k v_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger + \hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k)\end{aligned}\quad (8.5.22)$$

由于变换只保持动量守恒而不保持粒子数守恒, 所以(8.5.22)后面两项明显破坏准粒子守恒. 与此相应, 我们已在(8.5.17)的  $\hat{H}$  中引入化学势  $\mu$  (见 § 5.4,  $\mu$  作为不定乘子引入). 相互作用  $a$  的四算符项也按  $\alpha$ 、 $\beta$  的正规顺序排列, 则在近似地略去准粒子的四算符项后, 得到

$$\hat{H} \approx E_0 + \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

$$E_0 = 2 \sum_{k>0} (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - G \sum_{k>0} v_k^4 - G \sum_{k, k'} u_k v_k u_{k'} v_{k'} \quad (8.5.23)$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_1 &= \sum_{k>0} [(\epsilon_k - Gv_k^2 - \mu)(u_k^2 - v_k^2) \\ &\quad + 2Gu_k v_k (\sum_{k'>0} u_{k'} v_{k'})] (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k})\end{aligned}\quad (8.5.24)$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_2 &= \sum_{k>0} [(\epsilon_k - Gv_k^2 - \mu)2u_k v_k \\ &\quad - G(u_k^2 - v_k^2) (\sum_{k'>0} u_{k'} v_{k'})] (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\beta}_{-k}^\dagger + \hat{\beta}_{-k} \hat{\alpha}_k)\end{aligned}\quad (8.5.25)$$

像(8.4.18、19)式那样, 现在由  $\hat{H}_2 = 0$  或  $\frac{\partial}{\partial v_k} E_0 = 0$ , 都得到方程

$$(\tilde{\epsilon}_k - \mu)2u_kv_k - \Delta(u_k^2 - v_k^2) = 0 \quad (8.5.26)$$

其中已用了约束条件(8.5.20)并定义

$$\tilde{\epsilon}_k = \epsilon_k - Gv_k^2 \quad (8.5.27)$$

$$\Delta = G \sum_{k>0} u_kv_k \quad (8.5.28)$$

也与(8.4.20)式类似,现在不妨作如下的参数化表示:

$$u_k = \cos\theta_k, \quad v_k = \sin\theta_k \quad (8.5.29)$$

则(8.5.26)式可形式地解出为

$$\tan 2\theta_k = \frac{\Delta}{(\tilde{\epsilon}_k - \mu)} \quad (8.5.30)$$

而

$$2u_kv_k = \sin 2\theta_k = \frac{\tan 2\theta_k}{(1 + \tan^2 2\theta_k)^{\frac{1}{2}}}$$

$$u_k^2 - v_k^2 = \cos 2\theta_k = (1 + \tan^2 2\theta_k)^{-\frac{1}{2}}$$

或

$$\begin{cases} u_k^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\tilde{\epsilon}_k - \mu}{E_k} \right] \\ v_k^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\tilde{\epsilon}_k - \mu}{E_k} \right] \end{cases} \quad (8.5.31)$$

其中

$$E_k = \sqrt{(\tilde{\epsilon}_k - \mu)^2 + \Delta^2} \quad (8.5.32)$$

实际上,将(8.5.28)式写开来

$$\Delta = \frac{G}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \quad (8.5.33a)$$

以后,问题在于除  $\Delta = 0$  这一平凡解外究竟有没有  $\Delta \neq 0$  (称为“能隙”)的解(见下)? 于是将上述解代回(8.5.22)式,我们得到对角化的

$$\begin{aligned} \hat{H} = & 2 \sum_{k>0} (\tilde{\epsilon}_k - \mu) v_k^2 - G \sum_{k>0} v_k^4 - \frac{\Delta^2}{G} \\ & + \sum_{k>0} E_k (\hat{\alpha}_k^\dagger \hat{\alpha}_k + \hat{\beta}_{-k}^\dagger \hat{\beta}_{-k}) \end{aligned} \quad (8.5.34)$$

显然,(8.5.32)式表示的  $E_k$  是准粒子的能量.

上述的变换不难推广为相对论性的(即有真正的粒子产生或湮没的)正则变换并应用于量子场论<sup>[16]</sup>,参见习题 8.8.

### 8.5C 超导基态,能隙和超导临界温度

#### 1. 能隙方程的解

注意(8.5.18)式,我们把能隙方程(8.5.33a)式除以  $\Delta$  后写成

$$1 = \frac{G}{2} \sum_k \frac{1}{\sqrt{(\epsilon_k - \mu)^2 + \Delta^2}} \Theta(\hbar\omega_D - |\epsilon_k - \mu|) \quad (8.5.33b)$$

(已略去  $\tilde{\epsilon}_k$  与  $\epsilon_k$  的差别)因在费米面附近能级很密,可将求和化为积分:

$$\sum_k \longrightarrow \int \rho(\epsilon_k) d\epsilon_k$$

其中  $\rho(\epsilon_k)$  为“态密度”,作变量代换  $\epsilon_k - \mu = \epsilon$  后,

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{G}{2} \int d\epsilon \frac{\rho(\epsilon + \mu)}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \Theta(\hbar\omega_D - |\epsilon|) \\ &\approx G\rho(\mu) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} = G\rho(\mu) \operatorname{arcsinh}\left(\frac{\hbar\omega_D}{\Delta}\right) \end{aligned} \quad (8.5.35)$$

已考虑到积分区域仅限于费米面附近,态密度近似为常数:  $\rho(\mu + \epsilon) \approx \rho(\mu)$ . 于是我们找到了能隙方程的一个非平凡解:

$$\Delta = \hbar\omega_D / \sinh\left(\frac{1}{G\rho(\mu)}\right) \approx 2\hbar\omega_D \exp\left[\frac{-1}{G\rho(\mu)}\right] \quad (8.5.36)$$

因  $G$  与体积  $V$  成反比,而  $\rho(\mu)$  与  $V$  成正比,故  $G\rho$  与  $V$  (或粒子数  $N$ ) 无关,  $G\rho(\mu) \sim 0.2$ ,  $\hbar\omega_D \sim 0.03\text{eV}$ , 则  $\Delta \sim 4 \times 10^{-4}\text{eV}$ . 或相当于温度  $4.7\text{K}$ . 注意,当  $G \rightarrow 0^+$  时,虽然  $\Delta \rightarrow 0$ ,但(8.5.36)式并不是一个微扰解,  $G=0$  是此式的一个本性奇点,只有  $G > 0$ , 即(8.5.17)式中电子间为吸引势时才存在这个不平凡的非微扰解.

#### 2. BCS 基态

像(8.4.29)式一样,现在基态  $|\tilde{0}\rangle$  由方程

$$\hat{\alpha}_k |\tilde{0}\rangle = \hat{\beta}_{-k} |\tilde{0}\rangle = 0 \quad (8.5.37)$$

所定义. 用直接代入法不难证明

$$|\tilde{0}\rangle = \prod_{k>0} (u_k + v_k \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+) |0\rangle \quad (8.5.38)$$

其中  $|0\rangle$  表示什么粒子也没有的真空态. 由此可见,BCS 基态是由各种  $k$

值的 Cooper 对凝聚而成的“费米子相干态”，在图 8.5.1 上画出了在化学势  $\mu$  (在零温下即  $G=0$  时的费米面) 附近能级上 Cooper 对的“占位概率”  $v_k^2$  ( $u_k^2 = 1 - v_k^2$  是“空位概率”)，它在宽度为  $\Delta$  的范围从 1 渐降为零\*。

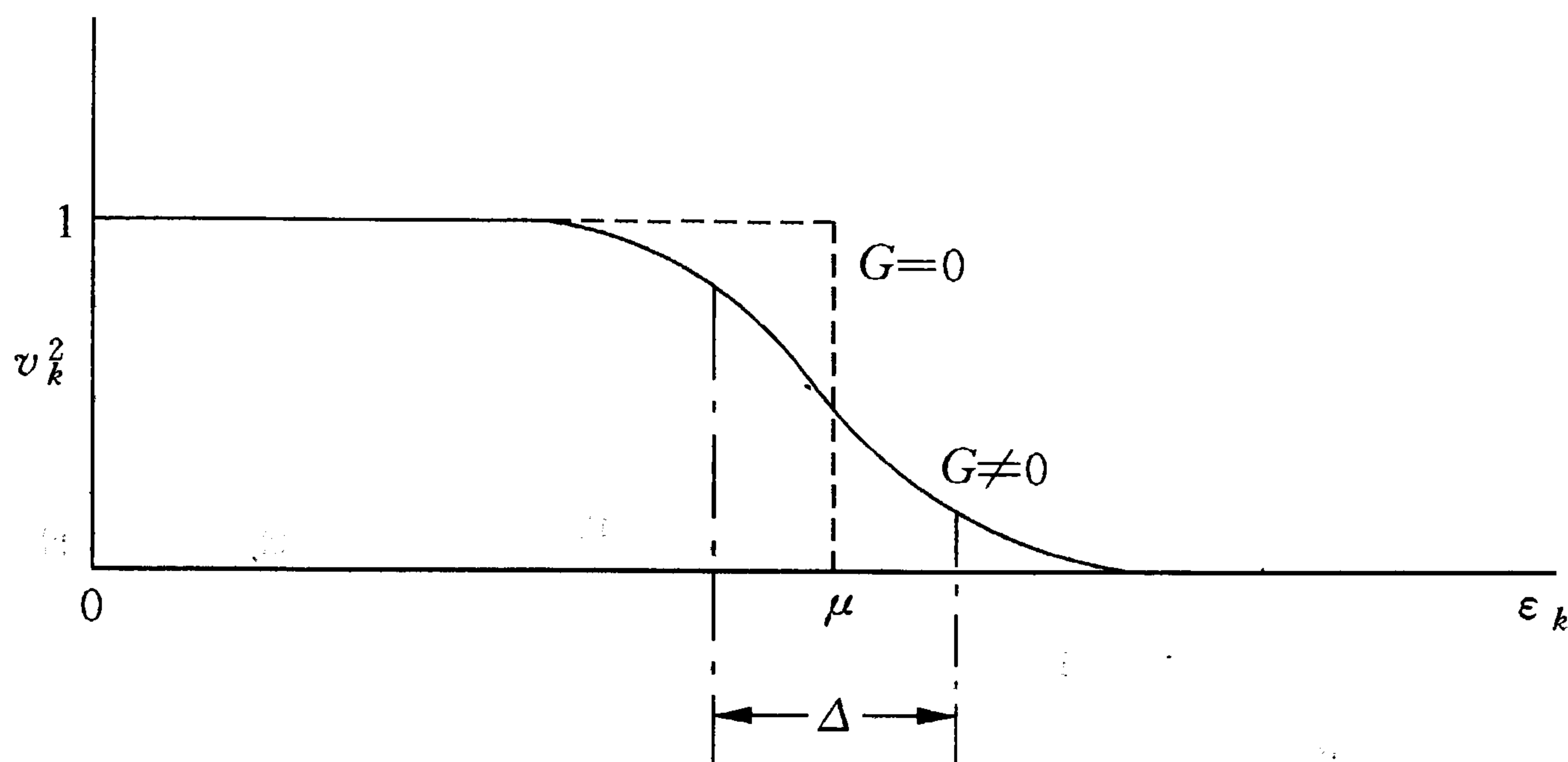


图 8.5.1 超导态和正常态的  $v_k^2$  随  $\epsilon_k$  变化的函数曲线

图上虚线表示  $G=0$  时之正常态电子分布，(8.5.23) 式已给出超导态 ( $G \neq 0, \Delta \neq 0$ ) 的能量，记为

$$E_0(\text{BCS}) = 2 \sum_{k>0} (\epsilon_k - \mu) v_k^2 - G \sum_{k>0} v_k^4 - \frac{\Delta^2}{G} \quad (8.5.39)$$

而正常态能量则是除去后两项并在第一项中以  $v_k^2|_{G=0} = \Theta(\mu - \epsilon_k)$  去代，两者的能量差等于

$$\begin{aligned} \delta E_0 &= E_0(\text{BCS}) - E_0(\text{正常态}) \\ &= 2 \sum_{\epsilon_k > \mu} (\epsilon_k - \mu) v_k^2 + 2 \sum_{\epsilon_k < \mu} (\mu - \epsilon_k) u_k^2 - \frac{\Delta^2}{G} + o(G) \end{aligned}$$

以(8.5.31)式代入，把求和换为积分并略去  $o(G)$  的小项，得到

$$\begin{aligned} \delta E_0 &= 2\rho(\mu) \int_0^{\hbar\omega_D} \epsilon \left( 1 - \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \right) d\epsilon - \frac{\Delta^2}{G} \\ &= 2\rho(\mu) \left\{ \frac{1}{2} (\hbar\omega_D)^2 - \frac{\hbar\omega_D}{2} \sqrt{(\hbar\omega_D)^2 + \Delta^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\Delta^2}{2} \operatorname{arcsinh} \left( \frac{\hbar\omega_D}{\Delta} \right) + \frac{\Delta^2}{G\rho} \right\} - \frac{\Delta^2}{G} \end{aligned}$$

因  $\frac{\Delta}{\hbar\omega_D} \ll 1$ ，括号中第二项可以展开(只留两项)，第三项用(8.5.35)式后

\* 参见习题 8.4~8.6

加上第四项恰与括号外最后一项消去,于是

$$\delta E_0 \approx -\frac{1}{2}\rho(\mu)\Delta^2 \quad (8.5.40)$$

其中费米面上的自由电子态密度  $\rho(\mu)$  折算到一个粒子估计约为  $0.2\text{eV}^{-1}/\text{粒子}$ , 能隙估计为  $\Delta \sim k_B T_c \sim 4 \times 10^{-4}\text{eV}$ , 因此  $\delta E_0 \sim -(1.6 \times 10^{-8})\text{eV}/\text{粒子}$ , 这是一个很小的能量. 注意  $\delta E_0 < 0$ , 可近似地认为  $\Delta$  是一对 Cooper 对的结合能, 则从  $\delta E_0$  估计参与凝聚的 Cooper 对数  $\left(\frac{1}{2}\rho(\mu)\Delta\right)$  只占费米面以下全部电子总数的  $10^{-4}$ . 这就是说, 由于电子-声子相互作用诱导出电子间微弱的吸引使图 8.5.1 上原来尖锐的费米球面不稳定而呈弥散分布的结果, 出现一个能量更低的超导(BCS)基态, 在这基态上的元激发存在一个能隙  $\Delta$ , 如(8.5.32)式所示:  $E_k|_{\min} = \Delta$ .

如果把超导性看作是荷电 Cooper 对的超流性, 上节的超流判据要求临界速度

$$V_c = \min\left(\frac{E_k}{k}\right) = \frac{\Delta}{k_F} > 0 \quad (8.5.41)$$

其中  $k_F$  是费米动量  $\left(\mu = \frac{k_F^2}{2m}\right)$ . 所以只要超导态形成后电子气的整体速度  $V$  不超过  $\frac{\Delta}{k_F} \sim 10^{-4}v_F$ , ( $v_F = 1.4 \times 10^8\text{cm/s}$ ), 超导电流便可以维持.

### 3. 超导能隙随温度而变化

上面的讨论限于零温情形, 为推广到非零温情形, 我们略去推导而直接写出结果, 能隙方程(8.5.33)式要改为:

$$\Delta(T) = \frac{G}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta(T)}{E_k} \left[ 1 - \frac{2}{\exp\left(\frac{E_k}{k_B T}\right) + 1} \right] \quad (8.5.42)$$

这里已明显指出能隙  $\Delta(T)$  是温度  $T$  的函数. 括号内第二项出现准粒子的 F-D 统计分布因子, 可以理解为热激发使电子态空位的概率  $u_k^2$  从 1 减小. 如前转到积分:

$$\frac{1}{\rho(\mu)G} = \int_0^{\hbar\omega_D} [\epsilon^2 + \Delta^2(T)]^{-1/2} \tanh\left(\frac{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2(T)}}{2k_B T}\right) d\epsilon \quad (8.5.43)$$

在超导临界温度  $T_c$  时  $\Delta(T_c) = 0$ , 上式简化为



$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho(\mu)G} &= \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}} \frac{\tanh x}{x} dx \\ &= \ln\left(\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}\right) \tanh\left(\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}\right) - \int_0^{\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c}} \ln x \cdot \operatorname{sech}^2 x dx \end{aligned}$$

因为  $\frac{\hbar\omega_D}{2k_B T_c} \gg 1$ , 上式中积分上限可以用  $\infty$  来代, 则定积分等于<sup>[7]</sup>:

$$- \int_0^{\infty} \ln x \cdot \operatorname{sech}^2 x dx = \gamma + \ln\left(\frac{4}{\pi}\right) = 0.8188$$

(其中  $\gamma = 0.5772$  是 Euler 常数),  $\tanh$  函数也可用 1 来代, 于是

$$k_B T_c = 1.13 \hbar \omega_D \exp\left(\frac{-1}{\rho(\mu)G}\right) \quad (8.5.44)$$

将此式与零温下的能隙表达式(8.5.36)比较, 即见

$$\Delta(0) = 1.76 k_B T_c \quad (8.5.45)$$

这个关系应对弱耦合的常规超导材料如 Al 等成立.

温度  $T \neq 0$  时之能隙由(8.5.43)决定, 当  $T \rightarrow T_c$  时近似地有<sup>[7]</sup>:

$$\Delta(T) \approx 3.06 k_B T_c \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad ((T_c - T) \ll T_c) \quad (8.5.46)$$

$T$  很小时则近似地有

$$\Delta(T) \approx \Delta(0) - [2\pi\Delta(0)k_B T]^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-\Delta(0)}{k_B T}\right), \quad (T \ll T_c) \quad (8.5.47)$$

这两个式子与实验的符合甚佳.

最后说明超导的同位素效应(8.5.2)式:(8.5.45)式表示  $T_c$  与  $\Delta(0)$  成正比,(8.5.36)式表示  $\Delta(0)$  与  $\hbar\omega_D$  成正比, 但 Debye 频率  $\omega_D$  又反比于原子同位素质量  $M$  的平方根, 所以  $T_c \sim M^{-1/2}$ . 1986 年以后发现的高温( $T_c$ )超导性, 尚无可靠理论, 本书不再介绍.

## 附录 8A 实时 Green 函数方法

实时 Green 函数方法是一种处理多粒子体系相变问题简单而有效的

方法. 为具体起见, 我们重新研究超导的 BCS 哈密顿量(8.5.17)式:

$$\hat{H} = \sum_{p>0} \tilde{\epsilon}_p (\hat{a}_p^\dagger \hat{a}_p + \hat{a}_{-p}^\dagger \hat{a}_{-p}) - g \sum_{p, p'} \hat{a}_{p'}^\dagger \hat{a}_{-p'}^\dagger \hat{a}_{-p} \hat{a}_p \quad (8A.1)$$

其中  $\tilde{\epsilon}_p = \epsilon_p - \mu$ , 自旋指标(对每个  $p$ ,  $\lambda = 1, 2$ )已略去不写.

现在对 Fock 空间的两个算符  $\hat{A}(t)$  和  $\hat{B}(t')$ , 定义实时(或双时) Green 函数如下<sup>[7, 16]</sup>:

$$G_{AB}(t, t') = -i \langle \hat{T} \hat{A}(t) \hat{B}(t') \rangle \quad (8A.2)$$

其中

$$\hat{T} \hat{A}(t) \hat{B}(t') = \theta(t-t') \hat{A}(t) \hat{B}(t') + \eta \theta(t'-t) \hat{B}(t') \hat{A}(t) \quad (8A.3)$$

若  $\hat{A}$  与  $\hat{B}$  为玻色算符, 则  $\eta = 1$ ; 而当它们是费米算符时, 则  $\eta = (-1)^P$ , 其中  $P$  是把算符乘积从  $\hat{A}\hat{B}$  调换到  $\hat{B}\hat{A}$  所需的置换数.

(8A.2)式中记号  $\langle \rangle$  在零温时表示对基态的平均值; 而一般当温度  $T \neq 0$  时则表示系综平均. 我们将限于讨论  $T = 0$  时的平衡态问题.

Green 函数  $G_{AB}$  的运动方程很容易从  $\hat{A}(t)$  和  $\hat{B}(t')$  的运动方程(8.2.29)式推得为 ( $\hbar = 1$ )

$$i \frac{d}{dt} G_{AB}(t-t') = \delta(t-t') \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(t')]_{\pm} \rangle - i \langle \hat{T} [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] \hat{B}(t') \rangle \quad (8A.4)$$

右端第一项中对易子的下标“+”或“-”分别指费米或玻色算符. 第二项中  $\hat{A}(t)$  与哈密顿  $\hat{H}(t)$  之间的对易子连同  $\hat{B}(t')$  会形成新的(一般是高阶的)Green 函数. 因此在具体计算中, 需作一种截断近似. 对(8A.1)的例子, 我们先定义两种 Green 函数如下:

$$\begin{aligned} G_1(t, t') &= -i \langle \hat{T} \hat{a}_k(t) \hat{a}_k^\dagger(t') \rangle \\ G_2(t, t') &= -i \langle \hat{T} \hat{a}_{-k}^\dagger(t) \hat{a}_k^\dagger(t') \rangle \end{aligned} \quad (8A.5)$$

则易证其运动方程是

$$i \frac{d}{dt} G_1 = \delta(t-t') + \tilde{\epsilon}_k G_1 + ig \langle \hat{T} (\sum_{p>0} \hat{a}_{-k}^\dagger \hat{a}_{-p} \hat{a}_p) \hat{a}_k^\dagger \rangle$$

显然后一项中出现了我们在(8A.5)中未曾定义过的新的高阶 Green 函数. 为了简化计算, 我们在四算符的乘积项中取出一切可能的缩并如下:

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} \hat{a}_{-k}^+ a_{-p} \hat{a}_p \hat{a}_k^+ \rangle &\rightarrow \delta_{kp} \langle \hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_{-p} \rangle \langle \hat{T} \hat{a}_k \hat{a}_k^+ \rangle \\ &+ \langle \hat{a}_{-p} \hat{a}_p \rangle \langle \hat{T} \hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_k^+ \rangle \end{aligned} \quad (8A.6)$$

在第一(二)项中,算符  $\hat{a}_{\pm k}^+ \hat{a}_{-k}$  ( $\hat{a}_{-p} \hat{a}_p$ ) 从 Green 函数内被取出并用它的系综平均值来代替,即从一个  $q$ -数变为一个  $C$ -数. 注意它们中的动量脚标已被配对并记为

$$\langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle = \langle \hat{a}_{-k}^+ \hat{a}_{-k} \rangle = n(\mathbf{k}) \quad (8A.7)$$

及 
$$\langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_{-k}^+ \rangle = \langle \hat{a}_{-k} \hat{a}_k \rangle = \nu(\mathbf{k}) \quad (8A.8)$$

分别称之为“正常配对”和“反常配对”. 下面马上会看到,后者是更有趣的,正是它表示了相变的“Cooper 对凝聚”.

于是(8A.6)式中剩下的因子正是已在(8A.5)式中定义过的两种 Green 函数. 由此可见,在作了“配对截断近似”后,  $G_1$  和  $G_2$  的运动方程被大大地简化:

$$\begin{cases} i \frac{dG_1}{dt} = \delta(t-t') + \tilde{\varepsilon}'_k G_1 - \Delta G_2 \\ i \frac{dG_2}{dt} = -\Delta G_1 - \tilde{\varepsilon}'_k G_2 \end{cases} \quad (8A.9)$$

其中

$$\tilde{\varepsilon}'_k = \tilde{\varepsilon}_k - gn(\mathbf{k}), \quad \Delta = g \sum_{p>0} \nu(\mathbf{p}) \quad (8A.10)$$

第二步,我们引入 Green 函数的 Fourier 变换如下:

$$\tilde{G}_i(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp[i(t-t')E] G_i(t, t'), \quad (i=1, 2) \quad (8A.11)$$

引入  $\tilde{G}_i(E)$  的好处可以从下面两个公式看出:

$$n(\mathbf{k}) = \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle = \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}_1(E) dE + \frac{1}{2} \quad (8A.12)$$

$$\nu(\mathbf{k}) = \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_{-k}^+ \rangle = \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}_2(E) dE \quad (8A.13)$$

为证明它们只需注意  $\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}_i(E) dE = G_i(t, t)$  及  $\lim_{t' \rightarrow t} \theta(t-t') = \frac{1}{2}$ , 下面将看到,只有  $\tilde{G}_i(E)$  的虚部才会对可观察量有贡献.

易见  $i \frac{dG_i}{dt}$  的 Fourier 变换等于  $E \tilde{G}_i$ , 于是微分方程(8A.9)退化为代数方程:

$$\begin{cases} E \bar{G}_1 = \frac{1}{2\pi} + \tilde{\epsilon}'_k \bar{G}_1 - \Delta \bar{G}_2 \\ E \bar{G}_2 = -\Delta \bar{G}_1 - \tilde{\epsilon}'_k \bar{G}_2 \end{cases} \quad (8A.14)$$

方程(8A.14)容易求解,我们有

$$\begin{aligned} \bar{G}_1(E) &= \frac{1}{2\pi} \frac{E + \tilde{\epsilon}'_k}{E^2 - E_k^2}, \quad (E_k^2 = \tilde{\epsilon}'_k{}^2 + \Delta^2) \\ \bar{G}_2(E) &= -\frac{1}{2\pi} \frac{\Delta}{E^2 - E_k^2} \end{aligned} \quad (8A.15)$$

第三步最为关键,能量表象中 Green 函数的极点正代表了相变后元激发(准粒子)的能量. 这一点我们早在(1.7.28)式中见过,那里对每个  $E_n$  加上一微小的虚数  $-i\epsilon$ . 现在则必须把(8A.15)式作如下的修改:

$$\bar{G}_1(E) = \frac{1}{2\pi} \left[ \frac{A}{E - E_k + i\eta} + \frac{B}{E + E_k - i\eta} \right], \quad (\eta \rightarrow 0^+) \quad (8A.16)$$

其中  $A + B = 1$ ,  $A - B = \frac{\tilde{\epsilon}'_k}{E_k}$ ,

$$E_k = \sqrt{\tilde{\epsilon}'_k{}^2 + \Delta^2} > 0 \quad (8A.17)$$

同理  $\bar{G}_2(E) = -\frac{1}{2\pi} \left[ \frac{C}{E - E_k + i\eta} + \frac{D}{E + E_k - i\eta} \right] \quad (8A.18)$

$$C + D = 0, \quad C - D = \frac{\Delta}{E_k}$$

使用数学公式(2.4.24)后,我们便得到

$$n(k) = \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{G}_1(E) dE + \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\tilde{\epsilon}'_k}{E_k} \right] \quad (8A.19)$$

$$\nu(k) = \text{Im} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{G}_2(E) dE = \frac{\Delta}{2E_k} \quad (8A.20)$$

它们分别正是在(8.5.31)式中找到过的  $u_k^2$  和  $u_k \nu_k$ , 而

$$\Delta = g \sum_{k>0} \langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_{-k}^+ \rangle = g \sum_{k>0} \nu(k) = \frac{g}{2} \sum_{k>0} \frac{\Delta}{\sqrt{\tilde{\epsilon}'_k{}^2 + \Delta^2}} \quad (8A.21)$$

恰好是(8.5.33)式(改式中的符号  $G \rightarrow g$ ).

显然,若限于作“配对截断近似”,上述方法是十分简单的. 它也不难推广到相对论性的模型,这是因为  $\bar{G}_i(E)$  ( $i=1, 2$ ) 对于  $E_k$  和  $-E_k$  对称

的缘故. 无论对非相对论的或相对论性的模型, “能隙” $\Delta$  总扮演了“序参量”的重要角色,  $\Delta \neq 0$  意味着由于 Cooper 对(或正反费米子对)在基态(或真空)中的凝聚而引起了相变.

## 附录 8B Josephson 效应

超导性是一种宏观量子现象, 它不妨看作是因 Cooper 对在费米面附近凝结(见习题 8.5)而引起的某种超流性. 我们可以把 Cooper 对看成为玻色子, 而将它们的集体行为用一个波函数(即复的“序参量”)来描写:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)| \exp[i\theta(\mathbf{r}, t)] \quad (8B.1)$$

其中  $\mathbf{r}$  是一个 Cooper 对的质心坐标. 因为许多 Cooper 对在运动时保持相干性, 它们的密度便可以用  $|\Psi(\mathbf{r}, t)| = \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)}$  来表示, 于是连续性方程  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = 0$  给出流密度等于(见习题 8.10)

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar}{M} \rho \left( 2\nabla\theta - \frac{2e}{\hbar c} \mathbf{A} \right) \quad (8B.2)$$

其中  $M$  和  $(-2e)$  是一个 Cooper 对的质量和电荷,  $\mathbf{A}$  是与之耦合的外电磁场矢势.

倘若(8B.1)式中的相位  $\theta$  被锁定为一常数, 则(8B.2)式表示电流密度  $(-2e)\mathbf{J}$  将正比于  $\mathbf{A}$  (因此  $\mathbf{A}$  不再有任何规范变换的自由度了, 如 Anderson 强调指出的那样, 超导体内的规范对称性是破缺了的.) 这正是 London 方程(见 § 8.5A, 习题 5.4), 它能够解释 Meissner 效应. 假如有一个电流沿着超导环流动,  $\theta$  便不复均匀, 但仍应是一个单值函数, 如 § 6.2B 中所述, 这引导到磁通量子化.

在 1962 年, 一位年仅 22 岁的研究生 Josephson 思考这样的问题: “能够产生磁通量子化的相位是足够真实的, 那么我能不能使它在实验中变得更加明显呢?”<sup>[18]</sup> 他考虑两块超导体中间夹一个薄薄的 (2~3nm) 绝缘层(图 8B.1 所示), 并且坚信电子间的高度关联性能够在整个系统中保持, 即(8B.1)所示的波函数不仅在此结(junction)的两侧而且在隧道穿透的势垒内部都维持着量子相干性. 令人惊异地, Josephson 通过仔细分析发

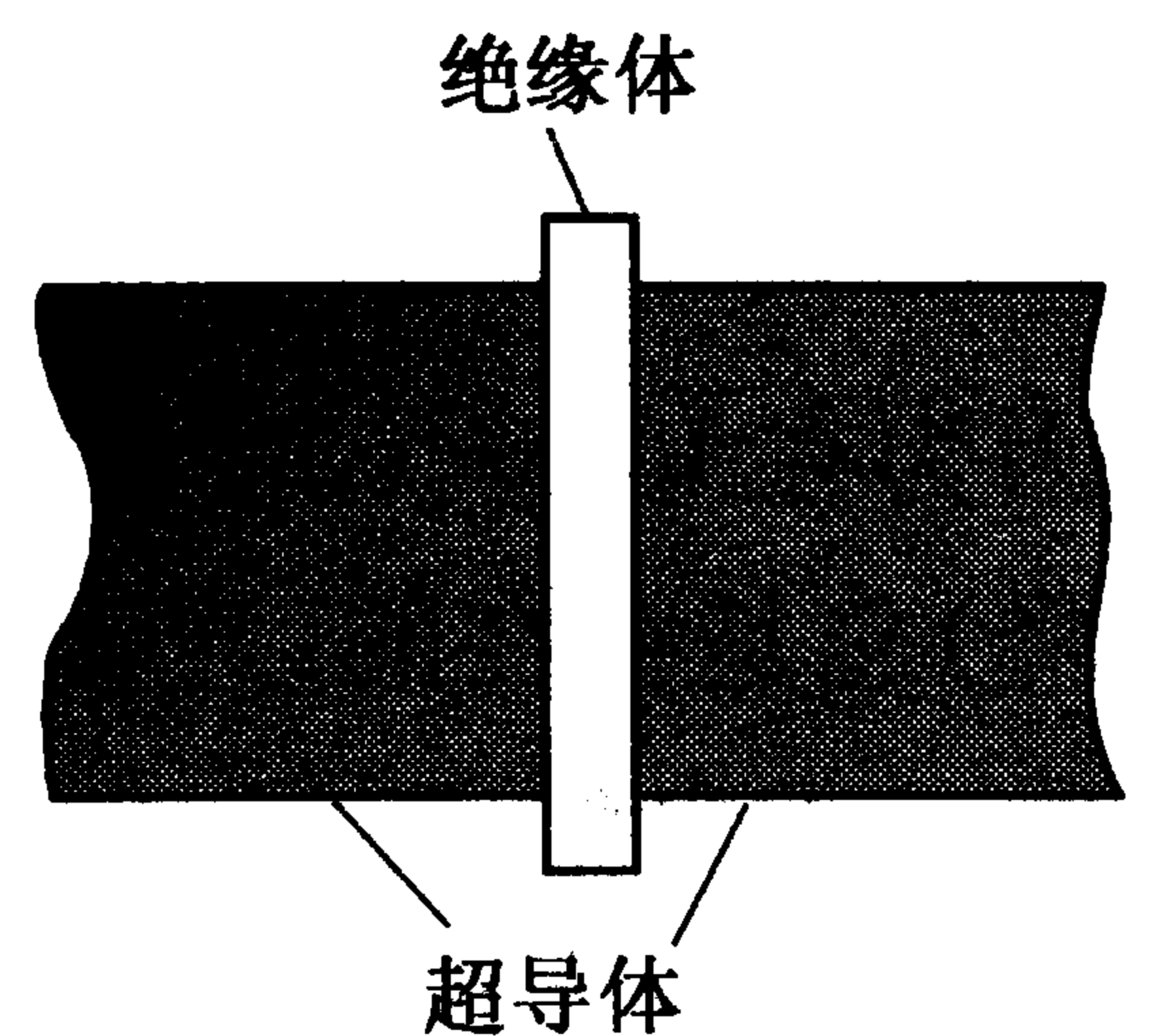


图 8B.1 Josephson 结

现:结两侧的相位( $\theta_1$  和  $\theta_2$ )会被锁定,且相位差  $\Delta\theta = \theta_1 - \theta_2$  将能维持一穿透势垒的超电流如下:

$$I = I_c \sin\Delta\theta \quad (8B.3)$$

注意,此时外电压  $V = 0$ , 超电流最大振幅  $I_c$  (临界电流)与结的具体性质有关.(8B.3)式的预言称为“直流 Josephson 效应”. Josephson 进一步考虑  $\Delta\theta$  随时间变化,这使它与外加电压  $V$  联系起来:

$$\hbar \frac{d}{dt} \Delta\theta = 2eV \quad (8B.4)$$

这个“Josephson 方程”可视为与光电效应中的 Einstein 方程相对应.合并(8B.3)与(8B.4)两式,Josephson 预言隧穿的超电流变为交变电流如下:

$$I = I_c \sin\left(\frac{2eVt}{\hbar} + \theta_0\right) \quad (8B.5)$$

其中  $V$  和  $\theta_0$  都是常数.这叫做“交流 Josephson 效应”.

倘若在结上除恒定电压  $V_0$  外,再加上一个交变电压  $V_1 \cos\omega t$ ,或者用(角)频率为  $\omega$  的微波去照射这个结,则相位差变为

$$\Delta\theta = \frac{2eV_0 t}{\hbar} + \frac{2e}{\hbar\omega} V_1 \sin\omega t + \theta_0 \quad (8B.6)$$

把(8B.6)式代入(8B.3)式,即(见习题 8.11):

$$I = I_c \sum_n (-1)^n \sin[(\omega_J - n\omega)t + \theta_0] J_n\left(\frac{2eV_1}{\hbar\omega}\right) \quad (8B.7)$$

其中  $\omega_J = \frac{2eV_0}{\hbar}$ , 而  $J_n$  是  $n$  (整数)阶 Bessel 函数.

在(8B.5)或(8B.7)式中的高频交变超电流是很难测量的,但逐渐改变  $V_0$  的过程中,每当  $\omega_J = n\omega$  时,就会有一个直流分量的超电流出现:

$$\bar{I} = I_c (-1)^n \sin\theta_0 J_n\left(\frac{2eV_1}{\hbar\omega}\right) \quad (8B.8)$$

因为在  $V_0 \neq 0$  时正常电流(以准粒子为载流子,所以导体内有电阻有压降)总是存在的,直流超电流(8B.8)将在正常电流的  $I-V$  特性曲线上表现为一个个恒电压电流台阶.

所有上述直流或交流的 Josephson 效应以及(8B.8)式的预言都很快地在实验上由 Anderson、Rowell 和 Shapiro 等人证实.

(8B.5)式中交流频率  $\nu_J$  与外加电压  $V$  的正比关系是

$$\nu_J = K_J V = \frac{2e}{h} V = [483.6 \text{ MHz}/\mu\text{V}] V \quad (8B.9)$$

其中常数  $K_J = \frac{2e}{h}$  提供了测量  $\frac{e}{h}$  标准值的一种极其精密的方法。

在 Josephson 效应的多方面应用中, 超导量子干涉器 (superconducting quantum interference device, 简记为 SQUID) 占有重要地位. 它是由两个 Josephson 结插到一个超导环路中做成的 (图 8B. 2(a)), 当外磁通量  $\Phi$  垂直地加于环面时, 总的直流超电流将等于 (见文献 [19]~[21]):

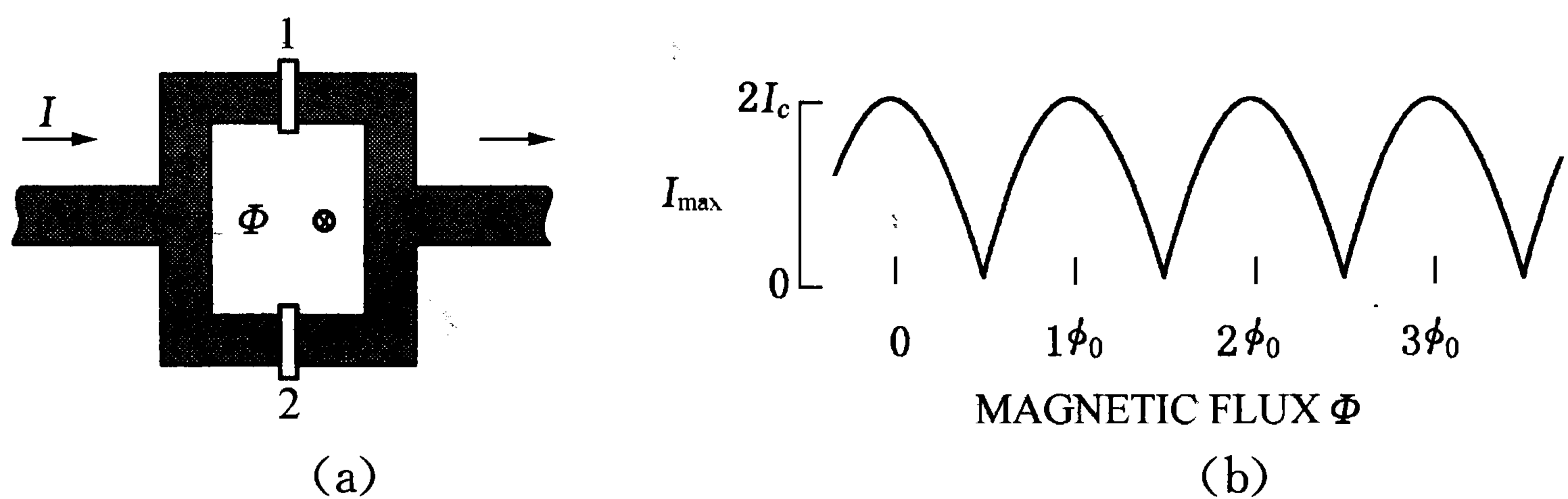


图 8B.2

(a) dc SQUID; (b) SQUID 能通过的最大电流  $I_{\max}$  随  $\Phi$  周期变化

$$\begin{aligned} I_T &= I_1 + I_2 = I_c \left[ \sin\left(\theta_0 + 2\pi \frac{\Phi}{\phi_0}\right) + \sin\left(\theta_0 - 2\pi \frac{\Phi}{\phi_0}\right) \right] \\ &= 2I_c \sin\theta_0 \cos\left(\frac{2\pi\Phi}{\phi_0}\right) \end{aligned} \quad (8B.10)$$

( $\phi_0 = \frac{hc}{2e}$ ). 这意味着最大临界电流 (超过它便出现电压降)

$$I_{\max} = 2I_c \cos\left|\frac{\pi\Phi}{\phi_0}\right| \quad (8B.11)$$

是外磁通量  $\Phi$  的周期函数 (图 8B. 2(b) 所示). SQUID 能够测到的磁场强度可以小到  $10^{-9}$  高斯 (参见附录 10B).

## 习 题

8.1 请从 (8.2.27) 式导出 (8.2.28) 式, 计算

$$G_0(\mathbf{x}', t' | \mathbf{x}, t) \equiv \langle 0 | \hat{\psi}(\mathbf{x}', t') \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}, t) | 0 \rangle \theta(t' - t)$$

并与方程 (1.7.25) 式进行比较.

8.2 非线性光学中, 在一具有二阶非线性介电常数  $\chi^{(2)}$  的介质内, 一频率为  $2\omega$  的光子可能会分裂为两个频率各为  $\omega$  的光子, 这叫做“参数下转换过程”. 所谓参数放

大器的简单模型可由下述哈密顿量给出:

$$H = \hbar\omega \hat{a}^\dagger \hat{a} - \frac{1}{2} i \hbar \chi [\hat{a}^2 \exp(2i\omega t) - \hat{a}^{\dagger 2} \exp(-2i\omega t)]$$

其中频率为  $\omega$  的单模由量子算符  $\hat{a}$  来描写, 而频率为  $2\omega$  的“泵浦(pump 模)”则作经典场处理,  $\chi$  是一常数正比于  $\chi^{(2)}$  与 pump 模振幅之乘积. 试求解此模型.

8.3 试将(8.3.6)式表示的热波长  $\lambda_T$  定性地解释为一“相干长度”  $l_{\text{coh}} \approx \frac{\lambda^2}{\Delta\lambda}$ , 其中  $\lambda$  是粒子的德布罗意波长而  $\Delta\lambda$  是其不确定性. 考虑相干长度是粒子在温度为  $T$  的环境中不停地(理想地)吸放光子而形成的波包展布宽度.

8.4 试证明由(8.5.38)式表示的 BCS 基态  $|\tilde{0}\rangle$  是归一化的, 而粒子的分布几率是  $\langle n_k \rangle = \langle \tilde{0} | \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger a_{k\uparrow} | \tilde{0} \rangle = v_k^2$ .

8.5 试计算在 BCS 基态内由算符  $\hat{b}_k^\dagger = \hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger$  表示的 Cooper 对的几率幅.

8.6 试将一准粒子的激发态  $\alpha_{k\uparrow}^\dagger |\tilde{0}\rangle$  在原始真空  $|0\rangle$  基础上表达出来.

8.7 设一体系的哈密顿量如下:

$$\hat{H} = a \hat{A}^\dagger \hat{A} + b \hat{B}^\dagger \hat{B} + c(\hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger + \hat{A} \hat{B})$$

其中  $\hat{A}$  与  $\hat{B}$  是相互独立的两种玻色算符, 而  $a, b$  与  $c$  是 3 个常数. 试求此体系的基态和激发态能量.

\* 8.8 考虑一简单的真空相变的相对论性模型哈密顿量:

$$\hat{H} = \sum_{p, \lambda} \epsilon_p (\hat{a}_{p\lambda}^\dagger \hat{a}_{p\lambda} + \hat{b}_{p\lambda}^\dagger \hat{b}_{p\lambda}) - G \sum_{p, q, \lambda, \lambda'} (\hat{a}_{p\lambda}^\dagger \hat{b}_{-p-\lambda}^\dagger \hat{b}_{-q-\lambda'} \hat{a}_{q\lambda'})$$

它与 BCS 哈密顿量(8.5.17)式很相似, 但有 5 点区别:

(a) 这里  $\hat{a}$  与  $\hat{b}$  是无质量(能量  $\epsilon_p = cp$ )费米子与其反粒子的湮灭算符;

(b) 原始基态是没有任何粒子的所谓 naive 真空, 故这里化学势  $\mu = 0$ ;

(c) 与(8.5.17)式中动量  $k$  被限制在半球内 ( $k > 0$ ) 不同, 这里  $p$  和  $q$  都展布于整个球上;

(d) 与(8.5.17)相似, 对每个  $p$  有两个自旋取向, 指标记为  $\lambda = \frac{1}{2}$  或  $-\frac{1}{2}$ . 通常把  $\lambda$  取为算符  $\frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}$  ( $\hat{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}$ ) 的本征值, 称为“螺旋度”(helicity).  $\lambda = \frac{1}{2}$  的粒子称为右旋, 而  $\lambda = -\frac{1}{2}$  的则称为左旋. 对于无质量粒子, 其螺旋度有不变的意义;

(e) 像在(8.5.17)中的 Cooper 对  $\hat{a}_{k\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-k\downarrow}^\dagger$  一样, 这里的对  $\hat{a}_{p\lambda}^\dagger \hat{b}_{-p-\lambda}^\dagger$  也有零的总动量和总角动量, 不同的是, 现在正反粒子对的总费米数也等于零.

试用类似于处理 BCS 哈密顿的方法去讨论真空相变及准粒子质量产生等有趣的现象.

8.9 试为 Josephson 结导出方程(8B.3)~(8B.5)式. 办法是假设在两侧的 Cooper 对波函数  $\psi_1$  与  $\psi_2$  服从如下的耦合薛定谔方程(见图 8B.1):



$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = 2\mu_1 \psi_1 + K\psi_2 \\ i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = 2\mu_2 \psi_2 + K\psi_1 \end{cases}$$

其中  $\mu_1$  和  $\mu_2$  是两侧超导体内的费米能量,  $2(\mu_2 - \mu_1) = 2eV$ , 而  $V$  是外加的电压.

8.10 试检验方程(8B.2)式.

8.11 试检验方程(8B.7)式.

## 参 考 文 献

- [1] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics* (3rd Ed.). John Wiley & Sons Inc., 1998
- [2] A. S. Davydov. *Quantum Mechanics* (2nd Ed.). Pergamon Press, 1976
- [3] 徐在新. 高等量子力学. 上海: 华东师范大学出版社, 1994
- [4] 罗辽复. 量子场论. 南京: 江苏科学技术出版社, 1990
- [5] 张礼, 葛墨林. 量子力学中的前沿问题. 北京: 清华大学出版社, 待出版
- [6] E. T. Jaynes and F. W. Cummings. *Proc. IEEE*, **51**, 89 (1963)
- [7] A. L. Fetter, J. D. Walecka. *Quantum Theory of Many-particle Systems*. McGRAW-HILL Book Company, 1971
- [8] R. K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Pergamon Press, 1972
- [9] Kerson Huang. *Statistical Mechanics* (2nd Ed.). John Wiley & Sons Inc., 1987
- [10] S. Chu. *Science*, **253**, 861 (1991)
- [11] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, E. A. Cornell. *Science*, **269**, 198 (1995)
- [12] 蔡圣善, 朱耘. 经典电动力学. 上海: 复旦大学出版社, 1985; A. Q. E. Animalu. *Intermediate Quantum Theory of Crystalline Solids*. Prentice-Hall, Inc., 1977
- [13] H. Fröhlich. *Phys. Rev.*, **79**, 845 (1950)
- [14] L. N. Cooper. *Phys. Rev.*, **104**, 1189 (1956)
- [15] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer. *Phys. Rev.*, **108**, 1175 (1957)
- [16] G-j Ni, J-f Yang, D-h Xu, S-q Chen. *Commun. Theor. Phys.*, **21**, 73(1994); 倪光炯, 陈苏卿. 莱文森定理, 反常和真空相变. 上海: 上海科学技术出版社, 1995
- [17] D. F. Walls and G. J. Milburn. *Quantum Optics*. Springer-Verlag, 1994
- [18] D. G. MacDonald. *Phys. Today*, July 2001, 46
- [19] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands. *The Feynman Lectures on Physics*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1965. (费曼物理学讲义(第三卷), 上海: 上海科学技术出版社, 1989)

## 第九章 相对论性量子力学

量子力学(QM)建立后不久就开始与狭义相对论(SR)结合起来,产生了 Klein-Gordon (K-G)方程和 Dirac 方程,它们构成了所谓相对论性量子力学(RQM)的主要内容,也是任何一本“高量”书所必须讨论的重点内容之一.本章前三节还是按传统的方式介绍 K-G 方程和 Dirac 方程以及它们在有外电磁场情况下的解,但是从 § 9.4B 讨论 Klein 佯谬起,开始有所变化,我们讨论的是 K-G 方程而不是像通常那样去讨论 Dirac 方程.这直接引导到关于“QM 与 SR 在本质上是否有一致性(同一性)?”或“SR 的微观本质究竟何在?”等问题. § 9.5 反映了作者多年来研究的观点,希望引起读者的兴趣和进一步共同研究.氢原子能级的兰姆移位(Lamb Shift)需电磁场量子化并计入真空极化才能作出定量解释,它开始超出“高量”范围,而属于量子电动力学(QED)的研究对象,我们只在最后一节 § 9.6 及附录 9A 中作了定性和半定量的讨论.爱因斯坦说得好:“在科学上没有一个是已经完全解决了的问题,也没有一个永远不变的问题.”(引自董光壁,“问题是科学研究的真正灵魂,”《科学》,51(3),57(1999).)附录 9B 和附录 9C 也是这样两个问题.

### § 9.1 相对论性波动方程

#### 9.1A Klein-Gordon 方程

量子力学与经典力学的关系可以从最简单的无自旋的点粒子自由运动的例子看出.在经典力学中一个自由粒子的动能  $E$  与动量  $p$  的关系是

$$E = \frac{1}{2m} p^2 \quad (9.1.1)$$

到了 QM,  $E$  和  $p$  这些力学中的可观察量便要化为算符:

$$E \rightarrow \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \nabla \quad (9.1.2)$$

然后向右作用到一个波函数  $\psi(\mathbf{x}, t)$  上面去,得到

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) \quad (9.1.3)$$

这就是对自由粒子的含时间的薛定谔方程(Time Dependent Schrödinger Equation, TDSE). 它有平面波解:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right] \quad (9.1.4)$$

把算符(9.1.2)作用到这个波函数上便能将相位上的两个 C 数( $E$  和  $\mathbf{p}$ )取出来成为实验的可观察量并满足(9.1.1)式.

显然(9.1.1)式是非相对论的,按照狭义相对论(SR),如仍记  $m$  为粒子的静质量,则应讨论粒子的总能量  $E$ ,它的平方等于

$$E^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4 \quad (9.1.5)$$

代以算符(9.1.2)式后,再向右作用到一个波函数  $\phi(\mathbf{x}, t)$  上去,得到

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \phi = \nabla^2 \phi - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi \quad (9.1.6)$$

称为 Klein-Gordon (K-G) 方程<sup>[7]</sup>. 它也有平面波解

$$\phi(\mathbf{x}, t) = A \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right] \quad (9.1.7)$$

不过其中的  $\mathbf{p}$  和  $E$  满足(9.1.5)式而不是(9.1.1)式. 但是马上产生两个问题:

(1) (9.1.5)式开方后可以取正、负号(记  $|\mathbf{p}| = p$ ):

$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} \quad (9.1.8)$$

其中正能量在非相对论极限下趋于(9.1.1)式加静能  $mc^2$ , 那么负能量应如何理解呢?

(2) 从 K-G 方程(9.1.6)不难导出如下的连续性方程(只须以  $\phi^*$  右乘(9.1.6)减去  $\phi$  右乘(9.1.6)\*):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (9.1.9)$$

其中几率密度和几率流密度分别是

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left( \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} - \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial t} \right) \quad (9.1.10)$$

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi) \quad (9.1.11)$$

虽然  $\mathbf{j}$  与非相对论情形下薛定谔方程(SE)的  $\mathbf{j}$  形式上一致(只差  $\psi \rightarrow \phi$ ),

但现在  $\rho$  的表式与 SE 中  $\rho = \psi^* \psi$  相差太大了. 后者是正定(非负)的, 可以解释为单粒子的几率密度, 而(9.1.10)式不然, 它不是正定的(原因是不但出现  $\phi$  和  $\phi^*$ , 而且出现  $\dot{\phi}$  和  $\dot{\phi}^*$ , 它们在对时间为二级微商的 K-G 方程的初条件中都是可以取任意数值的), 因此不可能被解释为单粒子的几率密度(几率必须正定).

后来大家逐渐认识到, 为解决上述两个困难, 应把 K-G 方程视作为一个场方程并对它作二次量子化处理, 即像第八章中讨论的那样, 把  $\phi(x, t)$  化为一个作用在粒子数占有空间中的场算符:

$$\phi(x, t) \rightarrow \hat{\phi}(x, t) = \sum_k \frac{1}{\sqrt{2V\omega_k}} [\hat{a}_k(t)e^{ik \cdot x} + \hat{b}_k^\dagger(t)e^{-ik \cdot x}] \quad (9.1.12)$$

其中  $k = \frac{p}{\hbar}$  是粒子的波矢,  $\hbar\omega_k = \sqrt{m^2c^4 + c^2\hbar^2k^2}$ ,  $V$  是体积. 原来波的 Fourier 展开式的振幅已化为算符,  $\hat{a}_k$  和  $\hat{b}_k^\dagger$  分别是正粒子的湮灭算符和反粒子的产生算符. 在自由场的情形,  $a, b$  对时间的依赖关系分别是

$$\hat{a}_k(t) \sim \hat{a}_k(0)\exp(-i\omega_k t), \quad \hat{b}_k^\dagger(t) \sim \hat{b}_k^\dagger(0)\exp(i\omega_k t), \quad (9.1.13)$$

$\omega_k$  中的  $m$  就是粒子的质量. 而当粒子处于相互作用体系中时, 严格求解  $a, b$  对  $t$  的关系一般是做不到的, 我们只能近似地求解, 那时如上一章可见, 最后出现的准自由的准粒子(元激发)质量一般不是出现于原来展式(9.1.12)中的  $m$ .

不过无论如何, 原来单粒子 K-G 方程的负几率困难不复存在, 我们可以将多体量子体系例如  $\pi$  介子体系中的  $\rho$  乘以  $(-e)$  ( $e > 0$ ) 后解释为  $\pi$  介子的电荷密度. 空间某一点  $\pi^-$  介子(算作正粒子)多了,  $(-e)\rho < 0$ , 反之若  $\pi^+$  介子多了,  $(-e)\rho > 0$ , 没有什么困难.

历史上, 对相对论性波方程的负能量困难是在 Dirac 方程(见下)情形更尖锐地提出来, 其实这个困难在 K-G 方程中同样尖锐地存在. 不过从 Pauli 和 Weisskopf 的论文\* 以后, 大家似乎也已接受了一种看法, 即正能解描写正粒子(如  $\pi^-$  介子)而负能解描写其反粒子(如  $\pi^+$  介子), 我们将在第四节强调这一看法.

### 9.1B Dirac 方程及其平面波解

大家认为 K-G 方程的负几率困难源于它对时间是二级微商, 而薛定

\* W. Pauli and V. Weisskopf, *Phys. Acta.*, 7, 709(1934).

谓方程(9.1.3)式则只含对时间的一级微商. 因此 Dirac 认为不应从(9.1.5)式出发, 而应从下式

$$E = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} \quad (9.1.14)$$

出发, 再用(9.1.2)式将它算符化为波方程. 可是上式含有开根这一非线性运算, 而我们还是希望得到一个线性方程. Dirac 的天才和深厚的数学造诣表现在他先形式地完成开方, 写下

$$\hat{E} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} + \beta mc^2 \quad (9.1.15)$$

这一线性形式的算符关系, 然后指出其中  $\boldsymbol{\alpha}$  和  $\beta$  不可能是普通的常数. 为此求上式的平方, 得到

$$\begin{aligned} \hat{E}^2 &= (c\alpha_i \hat{p}_i + \beta mc^2)(c\alpha_j \hat{p}_j + \beta mc^2) \\ &= c^2 \frac{1}{2} (\alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i) \hat{p}_i \hat{p}_j + mc^3 (\alpha_i \beta + \beta \alpha_i) \hat{p}_i + \beta^2 m^2 c^4 \end{aligned}$$

与(9.1.5)式比较即见

$$\begin{cases} \alpha_i \alpha_j + \alpha_j \alpha_i = 2\delta_{ij} \\ \alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0, \quad (i = 1, 2, 3) \\ \beta^2 = 1 \end{cases} \quad (9.1.16)$$

Dirac 指出: 能够满足彼此间这种反对易性质的  $\alpha_i$  和  $\beta$  只可能用矩阵来实现, 而且  $2 \times 2$  的矩阵还不够, 至少是  $4 \times 4$  的厄密矩阵, 一种常用的 Dirac 表象(也称为标准表象)是

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (9.1.17)$$

其中  $\sigma_i$  是  $2 \times 2$  的 Pauli 矩阵,  $I$  为  $2 \times 2$  的单位矩阵.  $\sigma_i$  除对易关系(8.1.16)外, 确有反对易关系

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} \equiv [\sigma_i, \sigma_j]_+ = 2\delta_{ij} \quad (9.1.18)$$

我们知道, 在 QM 中, 算符常常用矩阵来表示, 但  $\alpha_i$  和  $\beta$  这 4 个矩阵算符不像  $\hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$  那样作用在普通的位形空间, 而是作用在另一个自旋空间, 这一点以后会看清楚. 现在马上写下方程, 即将(9.1.15)式向右作用到一个波函数  $\psi(\boldsymbol{x}, t)$  上:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi = [-i\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2]\psi \quad (9.1.19)$$

注意现在这个 Dirac 方程是一个对  $\mathbf{x}$  和  $t$  都是一阶导数的线性方程. 为推导连续性方程, 先取上式的厄密共轭, 得

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^\dagger = i\hbar c \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x^i} \alpha_i^\dagger + mc^2 \psi^\dagger \beta^\dagger \quad (9.1.20)$$

把  $\psi^\dagger$  左乘 (9.1.19) 式, 再减去以  $\psi$  右乘 (9.1.20) 式, 并注意  $\alpha_i^\dagger = \alpha_i$ ,  $\beta^\dagger = \beta$ , 即得:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger \psi) = -i\hbar c \frac{\partial}{\partial x^i}(\psi^\dagger \alpha_i \psi)$$

与连续性方程 (9.1.9) 式比较, 便看到现在

$$\rho = \psi^\dagger \psi, \quad j_i = c\psi^\dagger \alpha_i \psi \quad (9.1.21)$$

显然  $\rho$  是正定的, 把  $\rho(j)$  解释为几率密度(几率流密度)没有困难.

现在我们来求自由粒子的平面波解, 令

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \quad (9.1.22)$$

代入 (9.1.19) 式即得定态的 Dirac 方程为

$$(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \beta mc^2)\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}) \quad (9.1.23)$$

$\boldsymbol{\alpha}$  和  $\beta$  是  $4 \times 4$  的矩阵,  $\psi(\mathbf{x})$  相应地是有 4 个分量的一列矩阵:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (9.1.24)$$

设  $\varphi$  和  $\chi$  都是二分量的平面波解:

$$\varphi = \varphi_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right), \quad \chi = \chi_0 \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}\right) \quad (9.1.25)$$

代入 (9.1.23) 式并注意 (9.1.17) 式, 即得代数方程

$$\begin{cases} (E - mc^2)\varphi_0 - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\chi_0 = 0 \\ -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\varphi_0 + (E + mc^2)\chi_0 = 0 \end{cases} \quad (9.1.26)$$

此方程有非零解的条件是其系数行列式等于零:

$$\begin{vmatrix} E - mc^2 & -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & E + mc^2 \end{vmatrix} = 0 \quad (9.1.27)$$

利用公式

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \quad (9.1.28)$$

后便解出(9.1.27)式有两个能量本征值 ( $|\mathbf{p}| = p$ ):

$$E = \pm \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} = \lambda \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} = \lambda E_p, \quad (\lambda = \pm 1) \quad (9.1.29)$$

以(9.1.29)式代回(9.1.26)式,解出

$$\chi_0 = \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E + mc^2} \varphi_0 = \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\lambda \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} + mc^2} \varphi_0 \quad (9.1.30)$$

并由条件  $\varphi_0^\dagger \varphi_0 = 1$  确定  $\varphi_0 = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$  中的两个常数,最后自由粒子 Dirac 方程的平面波解为

$$\psi_{p\lambda}(\mathbf{x}, t) = N_\lambda \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \varphi_0}{mc^2 + \lambda \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}} \end{pmatrix} \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - \lambda E_p t)\right] \quad (9.1.31)$$

其中  $N_\lambda$  是归一化常数,它由归一化条件

$$\int \psi_{p\lambda}^\dagger(\mathbf{x}, t) \psi_{p'\lambda'}(\mathbf{x}, t) d^3x = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (9.1.32)$$

确定,结果是

$$N_\lambda = \sqrt{\frac{mc^2 + \lambda E_p}{2\lambda E_p}} \quad (9.1.33)$$

注意这里采用了连续动量谱的归一化,而能量谱  $E = \lambda E_p \equiv E_{p\lambda}$  却不是连续的,除正能连续谱  $E_{p,1} = +\sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$  外,尚有一支对称的负能连续谱  $E_{p,-1} = -\sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}$ ,在正、负能谱之间存在着一个宽度为  $2mc^2$  的能隙,在下一节将看到,如果有外场存在,能隙中便可能出现分立的束缚态能级。

Dirac 方程必定有负能量解出现,这一性质在历史上曾引起高度重视,并被解释如下:在真空中这些负能态都被粒子(如电子)填满了,仅当一个外来光子(其能量  $h\nu$  超过  $2mc^2$ )从负能电子海中击出一个电子到正能量状态,剩下海中的一个空穴便表现为一个电荷相反的反粒子——正

电子,这就是实验上观测到一个高能光子在重核旁产生正负电子对过程的早期理论解释,它对 1932 年正电子的发现和物理学的发展起了重要的推动作用,我们以后将再对这个观点作进一步讨论.

### 9.1C Dirac 粒子的自旋

一个粒子的轨道角动量算符  $L = r \times \hat{p}$  与非相对论情形下的动能算符  $\frac{1}{2m} \hat{p}^2$  是对易的,但是与 Dirac 方程的自由粒子哈密顿量

$$\hat{H}_D = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}} + \beta m c^2 \quad (9.1.34)$$

却并不对易,证明如下:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{H}_D] &= c \epsilon_{ijk} [x_j \hat{p}_k, \alpha_l \hat{p}_l + \beta m c^2] \\ &= c \epsilon_{ijk} \alpha_l [x_j, \hat{p}_l] \hat{p}_k = i \hbar c \epsilon_{ijk} \alpha_j \hat{p}_k = i \hbar c (\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\boldsymbol{p}})_i \neq 0 \end{aligned} \quad (9.1.35)$$

这表示轨道角动量在运动中不是一个守恒量,然而算符

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\Sigma}, \quad \left( \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \right) \quad (9.1.36)$$

却与  $\hat{H}_D$  是对易的,这是因为对易子

$$\begin{aligned} \left[ \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\Sigma}_i, \hat{H}_D \right] &= \frac{\hbar}{2} \left[ \begin{pmatrix} \sigma_i & 0 \\ 0 & \sigma_i \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} mc^2 & \alpha_j \hat{p}_j \\ \alpha_j \hat{p}_j & -mc^2 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{\hbar c}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i \\ \sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \hat{p}_j = i \hbar c \epsilon_{ijk} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \hat{p}_j \\ &= i \hbar c \epsilon_{ijk} \alpha_k \hat{p}_j = i \hbar c (\hat{\boldsymbol{p}} \times \boldsymbol{\alpha})_i \end{aligned}$$

恰好与(9.1.35)相消,因此我们证明了

$$[\hat{\boldsymbol{J}}, \hat{H}_D] = 0 \quad (9.1.37)$$

由此可见,Dirac 理论的又一伟大历史功绩是自动预告了电子自旋角动量

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma} \quad (9.1.38)$$

的存在,它与  $\hat{\boldsymbol{L}}$  耦合起来,组成粒子的总角动量  $\boldsymbol{J}$ ,后者才是运动中的守恒量.  $\boldsymbol{S}$  或  $\boldsymbol{L}$  的分量一般都不是守恒的好量子数. 不过自旋沿动量方向



$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}$  的投影

$$S_p = \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n} \quad (9.1.39)$$

与  $\hat{H}_D$  对易, 所以是守恒量. 常把它的本征值 (略去  $\hbar$ )  $\sigma = \pm \frac{1}{2}$  称为粒子的螺旋度 (helicity),  $\sigma = +\frac{1}{2}$  或  $-\frac{1}{2}$  分别对应于右旋或左旋的纵向极化状态.

至此, 我们便理解了为什么 Dirac 方程的波函数  $\psi$  是一个四分量的旋量 (K-G 方程的波函数  $\phi$  只是一分量), 原来 Pauli 旋量算符  $\boldsymbol{\sigma}$  是  $2 \times 2$  矩阵, 就需要二分量的旋量波函数, 如 (9.1.24) 式中的  $\varphi$  或  $\chi$  所示, 在  $S_p$  表象中两种本征态分别是

$$\varphi_{\frac{1}{2}} \sim \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_{-\frac{1}{2}} \sim \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (9.1.40)$$

再加上  $\varphi$  与  $\chi$  耦合所反映的正负能量状态的自由度 (亦即对应正反粒子的自由度), 所以在每一时空点上的  $\psi$  必须有 4 个分量.

## § 9.2 K-G 方程与电磁场的耦合

一个自旋为零的粒子如果带有电荷  $q$ , 处在由标势  $\Phi$  和矢势  $\mathbf{A}$  描写的电磁场中, 则原来的 K-G 方程便要按最小电磁相互作用原理 (即规范原理, 见第四章) 作如下替代:

$$-i\hbar \nabla \equiv \hat{\mathbf{p}} \longrightarrow \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A}, \quad \hat{E} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \longrightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi \quad (9.2.1)$$

于是方程变为

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - q\Phi \right)^2 \psi = \left[ c^2 \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right)^2 + m^2 c^4 \right] \psi \quad (9.2.2)$$

其中波函数已记为  $\psi$  以避免与标势  $\Phi$  混淆.

现在我们来讨论一个  $\pi$  介子原子, 即一个  $\pi^-$  介子与电荷数为  $Z$  的重原子核结合的束缚态体系, 此时

$$-e\Phi \equiv V(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad \mathbf{A} = 0 \quad (9.2.3)$$

对于定态体系,总可使波函数因式化为

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) \exp\left(-iE \frac{t}{\hbar}\right) \quad (9.2.4)$$

$E$  为能量. 进一步, 因为  $V(r)$  是中心势, 轨道角动量  $l$  是好量子数, 也总可写出定态波函数为

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{r} u_l(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (9.2.5)$$

其中  $Y_{lm}$  为球谐函数,  $u_l(r)$  为径向波函数, 满足方程 (以下记  $\hbar = c = 1$ )

$$\frac{d^2 u_l}{dr^2} + \left[ E^2 - m^2 - V_{\text{eff}}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l = 0 \quad (9.2.6)$$

其中

$$V_{\text{eff}}(r) = -V^2(r) + 2EV(r) \quad (9.2.7)$$

称为有效势. 我们看到, 与非相对论性的薛定谔方程不同, 现在相对论性的 K-G 方程中, 除离心势  $\frac{l(l+1)}{r^2}$  外 (注意差因子  $2m$ ), 原来的中心势  $V(r)$  变为有效势 (它还与能量  $E$  有关), 而原来非相对论能量变为  $(E^2 - m^2)$ . 因我们只对  $E < m$  的束缚态感兴趣, 可引入参量

$$\beta^2 = 4(m^2 - E^2) > 0 \quad (9.2.8)$$

并记无量纲变量  $\rho = \beta r$ , 则方程 (9.2.6) 化为

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{\lambda}{\rho} - \frac{l(l+1) - Z^2 \alpha^2}{\rho^2} - \frac{1}{4} \right] u_l = 0 \quad (9.2.9)$$

其中无量纲参数

$$\lambda = \frac{2Z\alpha E}{\beta} > 0 \quad (9.2.10)$$

求解时先要考察方程的渐近行为: 当  $\rho \rightarrow \infty$  时, 可略去 (9.2.9) 式的中间两项而求得渐近解为  $u_l \sim e^{-\frac{\rho}{2}}$ ; 再看  $\rho \rightarrow 0$  时可只保留第一和第三项, 记为

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{s(s+1)}{\rho^2} \right] u_l = 0$$

$$s(s+1) = l(l+1) - Z^2 \alpha^2 \quad (9.2.11)$$

易见渐近解为  $u_l \sim \rho^{s+1}$ , 于是我们应设 (9.2.9) 式之解为

$$u_l(\rho) = \rho^{s+1} e^{-\frac{\rho}{2}} w(\rho) \quad (9.2.12)$$

代入(9.2.9)式解得  $w$  的方程为

$$\rho w''(\rho) + (2s + 2 - \rho)w'(\rho) + (\lambda - s - 1)w = 0 \quad (9.2.13)$$

把它与数学中一个标准方程——合流超比方程——去比较:

$$\rho w''(\rho) + (c - \rho)w'(\rho) - aw = 0 \quad (9.2.14)$$

后者的通解可表示如下:

$$w(\rho) = CF(a, c; \rho) + D\rho^{1-c}F(a - c + 1, 2 - c; \rho) \quad (9.2.15)$$

其中“合流超比级数”(也称为 Kummer 函数)可展开为

$$F(a, c; \rho) = 1 + \frac{a}{c}\rho + \frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{\rho^2}{2!} + \dots \quad (9.2.16)$$

它在无限远的渐近行为是

$$F(a, c; \rho) \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)}\rho^{a-c}e^\rho \quad (9.2.17)$$

$$(\rho \gg a, \rho \gg c, c \neq -n, n = 0, 1, 2, \dots)$$

比较后可见现在  $c = 2s + 2$ ,  $a = s + 1 - \lambda$ , 故(9.2.9)式之通解为

$$u_l(\rho) = C\rho^{s+1}e^{-\frac{\rho}{2}}F(s+1-\lambda, 2s+2; \rho) \\ + D\rho^{-s}e^{-\frac{\rho}{2}}F(-s-\lambda, -2s; \rho) \quad (9.2.18)$$

因为如  $s > 0$ , 后一项解将因  $\rho^{-s}$  在  $\rho \rightarrow 0$  有奇性而必须弃去, 故只讨论常数  $D = 0$  而  $C \neq 0$  的情况. 此时再看  $\rho \rightarrow \infty$  的行为, 因如(9.2.17)所示, 在  $\rho \rightarrow \infty$  时,  $F \sim e^\rho$ , 结果  $u_l \sim e^{\frac{\rho}{2}}$  仍将发散, 不符合束缚态波函数的条件, 惟一的出路是要求无穷级数(9.2.16)能截断为一个多项式, 即要求参数  $a$  等于一个负整数  $-n_r$  ( $n_r = 0, 1, 2, \dots$ ), 亦即

$$\lambda = n_r + s + 1, (n_r = 0, 1, 2, \dots) \quad (9.2.19)$$

回到(9.2.10)式可见, (9.2.19)式即能量量子化条件.

从(9.2.11)式解出  $s$ , 只取能保证  $\lambda > 0$  的根, 给出

$$s = -\frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2\alpha^2} \quad (9.2.20)$$

代回(9.2.19)式并注意(9.2.8)和(9.2.10)式, 即得束缚态能级

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{\lambda^2}}} \quad (9.2.21)$$

其中

$$\lambda = n_r + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(l + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2 \alpha^2}, \quad (n_r, l = 0, 1, 2, \dots) \quad (9.2.22)$$

[在(9.2.21)式中又恢复因子  $c$  使能量  $E$  有通常的量纲].  $E$  表示了一个(相对论性的)K-G 粒子被束缚在(质量无限大的)电荷为  $Ze$  的核库仑场中的分立能级. 当  $Z\alpha \ll 1$ , 即  $Z \ll \frac{1}{\alpha} = 137$  时, (9.2.21)式可展开为  $Z\alpha$  的级数:

$$E_n = mc^2 \left[ 1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} - \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^4} \left( \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) - \dots \right] \quad (9.2.23)$$

其中已定义了主量子数

$$n = n_r + l + 1 \quad (9.2.24)$$

基态对应于  $n_r = 0, l = 0, n = 1$ , 称为  $1s$  态, 其能量等于

$$E_{1s} = mc^2 \left[ \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - Z^2 \alpha^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (9.2.25)$$

下面是对定态能量及波函数的一些讨论:

(1) (9.2.23)式的第一项是粒子(如  $\pi^-$  介子)的静能, 第二项是熟知的定态薛定谔方程给出的(非相对性)能量.

(2) 从第三项开始是相对论修正, 它是负的, 表示相对论效应使 K-G 粒子被核场束缚得更紧(结合能增大).

(3) 与薛定谔方程不同, 现在能量  $E$  不但与主量子数  $n$  有关, 也与轨道角动量量子数  $l$  有关. 换言之, 相对论效应消除了能量对  $l$  的简并.

(4) 我们曾在(9.2.18)式中, 选择物理解时根据原点波函数无奇性的要求摒弃了有奇性的解 ( $D = 0$ ), 但实际上  $S$  态波函数在原点附近的

行为是  $\left( s = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - Z^2 \alpha^2} \right)$ :

$$\psi_{1s} \xrightarrow{r \rightarrow 0} \frac{1}{r} (\rho^{s+1}) \sim r^{-\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - Z^2 \alpha^2}} \quad (9.2.26)$$

它在  $r \rightarrow 0$  时仍有微弱的奇性. 由此可见, 通常量子力学教科书中讲的波函数必须满足连续、单值、有限的条件未免苛刻了一些. 后两个条件都可以放宽. 如这里 K-G 粒子  $s$  态波函数在原点的微弱奇性看来是可以容许的, 物理的要求不应是波函数有限, 而是束缚态波函数的几率可以归一化. 在薛定谔方程情形这就是波函数平方可积的条件, 而在 K-G 方程情形, 则是从方程(9.1.10)和(9.2.6)式推出的如下条件:

$$\left(\frac{1}{2mc^2}\right) \int_0^\infty u_{n'l'}(E_{n'l'} + E_{nl} - 2V)u_{nl} dr = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \quad (9.2.27)$$

(这里已取  $u$  为实数, 参见文献[6]和(1.6.7)式). 顺便再提醒一下, 波函数也不一定单值, 这在第七章 § 7.3 已讨论过了.

### § 9.3 电磁场中的电子

现在把电子的自由运动 Dirac 方程(9.1.19)式与电磁场耦合起来, 与 K-G 方程(9.2.2)式类似, 现在可以写出(记电子电荷  $q = -e < 0$ )

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + e\Phi \right] \psi = \left[ c\boldsymbol{\alpha} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) + \beta mc^2 \right] \psi \quad (9.3.1)$$

其中  $(\Phi, \mathbf{A})$  是电磁场的标势和矢势.

#### 9.3A Pauli 方程和电子的自旋磁矩

在定态条件下设  $\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) \exp(-iEt/\hbar)$ , 再记  $\psi(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{x}) \\ \chi(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$ , 则(9.3.1)式化为两分量的  $\varphi(\mathbf{x})$  和  $\chi(\mathbf{x})$  之间的耦合方程 ( $\hat{\mathbf{p}} \equiv \mathbf{p}$ ):

$$\begin{cases} (E + e\Phi - mc^2)\varphi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \chi \\ (E + e\Phi + mc^2)\chi = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \varphi \end{cases} \quad (9.3.2)$$

考虑非相对论近似, 记

$$E = E' + mc^2 \quad (9.3.3)$$

$E'$  为将电子静能扣除后的能量, 并设

$$|E' + e\Phi| \ll mc^2 \quad (9.3.4)$$

则从(9.3.2)第二式可近似地解出小分量  $\chi$  用大分量  $\varphi$  表示:

$$\chi = \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)}{E' + 2mc^2 + e\Phi}\varphi \approx \frac{1}{2mc}\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\varphi \quad (9.3.5a)$$

以上式代入(9.3.2)第一式,即得  $\varphi$  的方程为

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left[ \boldsymbol{\sigma} \cdot \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right]^2 - e\Phi \right\} \varphi = E' \varphi \quad (9.3.6)$$

因为

$$\left[ \boldsymbol{\sigma} \cdot \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right]^2 = \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{c} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \mathbf{A})$$

而  $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$  是外磁场的磁感应强度,于是

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - e\Phi + \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right\} \varphi(\mathbf{x}) = E' \varphi(\mathbf{x}) \quad (9.3.7)$$

第一项是无自旋粒子在矢势  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  中的动能,第二项  $-e\Phi$  是电子在静电势  $\Phi(\mathbf{x})$  场中的静电能量,而第三项则表示电子有一个内禀自旋磁矩  $\boldsymbol{\mu}$ ,因而在磁场  $\mathbf{B}$  中有势能  $(-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B})$ :

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma} = -\mu_B\boldsymbol{\sigma} = -\frac{g_e e}{2mc}\mathbf{s} \quad (9.3.8)$$

其中  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$  是 Bohr 磁子(单位),而  $\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$  为电子的自旋角动量,这里  $g_e = 2$  为电子的回转磁比率. 方程(9.3.7)式是 1927 年 Pauli 首先提出的,当时这第三项是人为加入的,为与实验符合,假设  $g_e = 2$ . 现在我们看到,这两点在 Dirac 方程中都自然地导出了,  $g_e$  在实验上测得之值比 2 稍大(第一章(1.1.4)式),即有所谓反常磁矩,以后是考虑电磁场量子化能够解释的.

(9.3.7)式很像是原来薛定谔方程中加入一项自旋与磁场的耦合项,  $\varphi(\mathbf{x})$  似乎就对应于薛定谔理论中的波函数  $\varphi_{sch}(\mathbf{x})$ . 然而有一点要注意<sup>[2][4]</sup>, 由于在  $\left(\frac{1}{c}\right)$  级近似下之(9.3.5)式及相应之

$$\chi^\dagger = -\frac{1}{2mc} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \varphi^\dagger \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (9.3.5b)$$

原来 Dirac 波函数的几率密度在  $\left(\frac{1}{c^2}\right)$  级近似下略去  $\mathbf{A}$  项后应为

$$\rho = \psi^\dagger \psi = \varphi^\dagger \varphi + \chi^\dagger \chi = |\varphi|^2 + |\chi|^2 \approx |\varphi|^2 - \frac{1}{4m^2c^2} (\mathbf{p}\varphi^\dagger) \cdot (\mathbf{p}\varphi)$$

$$= |\varphi|^2 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} |\nabla\varphi|^2 \quad (9.3.9a)$$

由此可见,原来归一化的  $\psi^\dagger \psi$  在  $\frac{1}{c^2}$  级近似下不能保证  $|\varphi|^2$  的归一化,而  $\varphi_{sch}$  却必须是归一化的,即

$$\int \varphi_{sch}^\dagger \varphi_{sch} d\mathbf{x} = \int \psi^\dagger \psi d\mathbf{x} = 1 \quad (9.3.9b)$$

以(9.3.9a)式代入(9.3.9b)式,作分部积分可得

$$\int d\mathbf{x} [\nabla\varphi^\dagger \nabla\varphi] = - \int d\mathbf{x} [\varphi^\dagger \nabla^2\varphi] = - \int d\mathbf{x} [(\nabla^2\varphi^\dagger)\varphi]$$

故在  $\frac{1}{c^2}$  级近似下

$$\int \varphi_{sch}^\dagger \varphi_{sch} d\mathbf{x} = \int d\mathbf{x} \left\{ \varphi^\dagger \varphi - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} [\varphi^\dagger \nabla^2\varphi + (\nabla^2\varphi^\dagger)\varphi] \right\}$$

由此可见  $\varphi_{sch}$  与现在 Dirac 方程大分量  $\varphi$  之间的关系是

$$\varphi_{sch} = \left( 1 - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 \right) \varphi = \left( 1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2} \right) \varphi \quad (9.3.10a)$$

或其逆变换关系为

$$\varphi = \left( 1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2} \right) \varphi_{sch} \quad (9.3.10b)$$

故在  $\frac{1}{c^2}$  级近似计算中,必须用上述公式将  $\varphi$  换为  $\varphi_{sch}$  以保证理论的正确归一化,下面就将这样做.

### 9.3B 自旋-轨道耦合与类氢原子能级的精细结构

现在我们讨论一个电子在类氢原子的核库仑场中运动,则  $\mathbf{A} = 0$ , 而

$\Phi(r) = \frac{Ze}{r}$ , 引入势能

$$V(r) = -e\Phi(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (9.3.11)$$

则从(9.3.2)第二式在  $\frac{1}{c^2}$  级近似下解出

$$\chi \approx \frac{1}{2mc} \left( 1 - \frac{E' - V}{2mc^2} \right) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \varphi \quad (9.3.12)$$

代入(9.3.2)第一式后得

$$E'\varphi = \left[ V + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{E'\mathbf{p}^2}{4m^2c^2} + \frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})V(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \right] \varphi \quad (9.3.13)$$

如上小节所说,我们应把  $\varphi$  换为  $\varphi_{sch}$ ,为此将上式左乘算符  $\left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2}\right)$  并把最右端的  $\varphi$  按(9.3.10)'式换为  $\varphi_{sch}$ ,于是得到

$$E'\varphi_{sch} = \left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2}\right) \left[ V + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{E'\mathbf{p}^2}{4m^2c^2} + \frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})V(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \right] \left(1 - \frac{\mathbf{p}^2}{8m^2c^2}\right) \varphi_{sch}$$

当保留至  $\frac{1}{c^2}$  的项时,上式可以化为

$$E'\varphi_{sch} = \left[ V + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{E'\mathbf{p}^2}{4m^2c^2} + \frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})V(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + \frac{1}{8m^2c^2}(\mathbf{p}^2V - V\mathbf{p}^2) \right] \varphi_{sch}$$

将右端第三项移到左面,再左乘  $\left(1 - \frac{\mathbf{p}^2}{4m^2c^2}\right)$ ,在  $\frac{1}{c^2}$  近似下,  
 $\left(1 + \frac{\mathbf{p}^2}{4m^2c^2}\right) \times \left(1 - \frac{\mathbf{p}^2}{4m^2c^2}\right) \approx 1$ ,于是得到类似薛定谔方程的形式:

$$H\varphi_{sch} = E'\varphi_{sch} \quad (9.3.14)$$

其中哈密顿量

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{1}{4m^2c^2} \left[ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})V(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) - \frac{1}{2}(\mathbf{p}^2V + V\mathbf{p}^2) \right]$$

注意  $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ ,并记  $\mathbf{E} = -\nabla\Phi$  为原子中的电场强度,

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})V(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) &= V(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}V)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \\ &= V\mathbf{p}^2 - ie\hbar(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \\ &= V\mathbf{p}^2 - ie\hbar\mathbf{E} \cdot \mathbf{p} + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) \\ \mathbf{p}^2V + V\mathbf{p}^2 &= \mathbf{p} \cdot [(\mathbf{p}V) + V\mathbf{p}] + V\mathbf{p}^2 \\ &= (\mathbf{p}^2V) + 2(\mathbf{p}V) \cdot \mathbf{p} + 2V\mathbf{p}^2 \end{aligned} \quad (9.3.15)$$

(括号中的  $\mathbf{p}$  不再对外面右方作微分运算),于是



$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \nabla^2 V \quad (9.3.16)$$

各项的物理意义如下:

- (1) 第一和第二项是薛定谔方程原有的动能和势能;
- (2) 第三项来自动能的相对论性修正:

$$E_k = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} - mc^2 \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} \quad (9.3.17)$$

- (3) 第五项称为 Darwin 项, 因为  $V(r)$  由 (9.3.11) 式所示, 故

$$\nabla^2 V(r) = 4\pi Ze^2 \delta(\mathbf{r}) \quad (9.3.18)$$

这一项只在核所在的场源处才不为零, 因此只对 S 态的电子才有贡献.

- (4) 第四项(有时称为 Thomas 项)可改写如下: 因  $V(r)$  是中心力场,

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi(r) = -\frac{\mathbf{r}}{r} \frac{d}{dr}\Phi(r) \quad (9.3.19)$$

故第四项表示自旋  $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$  与轨道角动量  $\mathbf{L}$  的耦合:

$$H_{SL} \equiv \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{p}) = \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \xi(r) \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (9.3.20)$$

现在我们来讨论方程 (9.3.14) 式对类氢原子能谱有什么修正. 首先回忆 (9.3.16) 式前二项 ( $H_0 \equiv \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V$ ) 给出熟悉的  $E'_n$ , 记为

$$\epsilon_n = -\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2} mc^2 \quad (9.3.21)$$

其中  $\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} = (137.0359895)^{-1}$  称为精细结构常数(命名的理由下面马上会清楚了).  $n = 1, 2, \dots$  是主量子数, 相应的定态  $|Znlm\rangle$  ( $l, m$  是轨道角动量及其投影量子数)的波函数也已知道了. 下面用一级微扰论来计算 (9.3.16) 式后面 3 项的修正.

- (1) 相对论性修正:  $H_{rel} = -\frac{1}{8m^3c^2} \mathbf{p}^4$ .

要计算平均值  $\langle Znlm | \mathbf{p}^4 | Znlm \rangle$ , 可用技巧  $\left( V(r) = -\frac{Z\alpha}{r} \right) \mathbf{p}^4 = 4m^2 (H_0 - V)(H_0 - V)$  及  $H_0 | Znlm \rangle = \epsilon_n | Znlm \rangle$ , 可见

$$\langle \mathbf{p}^4 \rangle = 4m^2 (\epsilon_n^2 - 2\epsilon_n \langle V(r) \rangle + \langle V^2(r) \rangle) \quad (9.3.22)$$

再用公式

$$\left\langle Znlm \left| \frac{1}{r} \right| Znlm \right\rangle = \frac{Z}{n^2 a_0} \quad (9.3.23)$$

$$\left\langle Znlm \left| \frac{1}{r^2} \right| Znlm \right\rangle = \frac{2Z^2}{n^3 (2l+1) a_0^2} \quad (9.3.24)$$

其中  $a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.0529$  (纳米), 是玻尔半径, 即得

$$\langle Znlm | \mathbf{p}^4 | Znlm \rangle = \left[ \frac{8n}{(2l+1)} - 3 \right] \frac{Z^4 \hbar^4}{n^4 a_0^4} \quad (9.3.25)$$

所以能级的相对论性修正为

$$\Delta E_{rel} = \langle Znlm | H_{rel} | Znlm \rangle = \epsilon_n \frac{(Z\alpha)^2}{4n^2} \left[ \frac{8n}{(2l+1)} - 3 \right] \quad (9.3.26)$$

它是负的(使能级下降), 其大小与  $\epsilon_n$  绝对值之比约

$$\left| \frac{\Delta E_{rel}}{\epsilon_n} \right| \sim (Z\alpha)^2 \sim \alpha^2 \sim 1 \times 10^{-4} \quad (9.3.27)$$

(2) 自旋-轨道耦合  $H_{LS} = \xi(r) \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$  所引起的能量修正 ( $\xi(r) = \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{Ze^2}{r^3}$ ).

由于  $H_{LS}$  的存在, 总哈密顿算符  $H$  与  $\mathbf{L}$  或  $\mathbf{S}$  分别都不对易, 即  $\mathbf{L}$  或  $\mathbf{S}$  的分量分别都不是好量子数了. 但是电子的总角动量  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  却可与  $H$  对易, 因此电子状态的标记量子数不再是  $(n, l, m)$  而是  $(n, j, m_j)$ , 其中  $j$  和  $m_j$  是  $\mathbf{J}^2$  和  $J_z$  的量子数. 利用算符等式

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \quad (9.3.28)$$

可算得  $H_{LS}$  引起的能级修正为

$$\begin{aligned} \Delta E_{SL} &= \left\langle Znljm_j \left| \frac{1}{2} \xi(r) (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2) \right| Znljm_j \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 \langle \xi(r) \rangle \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \end{aligned} \quad (9.3.29)$$

再利用公式

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{2Z^3}{n^3(2l+1)(l+1)la_0^3} \quad (9.3.30)$$

即得

$$\Delta E_{SL} = -\varepsilon_n \frac{(Z\alpha)^2}{nl(2l+1)(l+1)} \times \begin{cases} l, & (j = l + \frac{1}{2}) \\ -(l+1), & (j = l - \frac{1}{2}) \end{cases} \quad (9.3.31)$$

注意, 自旋与轨道角动量平行时 ( $j = l + \frac{1}{2}$ ), 能级上移, 反平行时 ( $j = l - \frac{1}{2}$ ), 能级下降, 同一个  $l$  值的两个  $j$  能级劈裂了, 例如  $p_{\frac{3}{2}}$  能级比  $p_{\frac{1}{2}}$  能级高一些. 我们看到, 它是自旋-轨道耦合引起的, 大小只有  $\varepsilon_n$  的  $\alpha^2$  级, 所以叫做原子能级的精细结构. 还要注意, 对  $s$  态电子 ( $l = 0$ ),  $L \cdot S$  耦合不起作用.

(3) Darwin 项引起的修正:

$$H_{\text{Darwin}} = \frac{\pi Ze^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \delta(\mathbf{r}) \quad (9.3.32)$$

引起  $s$  态 ( $l = 0$ ) 电子能级上移

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{Darwin}} &= \langle H_D \rangle = \frac{\pi Ze^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \langle Znl | \delta(\mathbf{r}) | Znl \rangle \\ &= \frac{\pi Ze^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} |\psi_{n0}(0)|^2 \end{aligned} \quad (9.3.33)$$

已知  $s$  态波函数在原点(核)处的值为

$$\psi_{n0}(0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{na_0} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (9.3.34)$$

故

$$\Delta E_{\text{Darwin}} = -\varepsilon_n \frac{(Z\alpha)^2}{n} \delta_{l,0} \quad (9.3.35)$$

现在把(9.3.26), (9.3.31)和(9.3.35)3个式子加起来, 很有趣的是, 对任意的  $l (= j \pm \frac{1}{2})$ , 能级修正都可以用统一的式子用  $(n, j)$  两个量子数表示 ( $l$  不出现)

$$\Delta E_{nj} = \epsilon_n \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left[ \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] \quad (9.3.36)$$

于是类氢原子的能级精确到  $(Z\alpha)^2 \epsilon_n$  的近似程度可表示为

$$E_{nj}' = \epsilon_n \left[ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left[ \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] \right] \quad (9.3.37)$$

但是要注意,这个修正从 Dirac 方程来的,所以  $\epsilon_n$  中的  $m$  是电子质量而不是约化质量.

### 9.3C 库仑场中 Dirac 方程的严格解

上一小节对 Dirac 方程作了近似,现在不作近似来求解,为此先要弄清楚方程中的守恒量子数. (9.3.28) 式前后说  $L^2$  在  $H_{LS}$  作用下仍然守恒,这句话还是近似的. 实际上,从严格的 Dirac 哈密顿量

$$H = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 + V(r) \quad (9.3.38)$$

出发,  $L^2$  也不守恒了,因为

$$\begin{aligned} [L^2, H] &= c[L^2, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] \\ &= c\{\mathbf{L} \cdot [\mathbf{L}, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] + [\mathbf{L}, \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}] \cdot \mathbf{L}\} \\ &= i\hbar c[\mathbf{L} \cdot (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) + (\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{L}] \neq 0 \end{aligned} \quad (9.3.39)$$

总角动量  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}$ ,  $\left(\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}\right)$ , 当然是守恒的,但是从

$$\mathbf{J}^2 = \left(\mathbf{L} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}\right)^2 = \mathbf{L}^2 + \hbar\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} + \frac{3}{4}\hbar^2 \quad (9.3.40)$$

可见,  $\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L}$  也不守恒了. 下面只指出,新的守恒量是

$$K \equiv \hbar\kappa = \beta(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{L} + \hbar) \quad (9.3.41)$$

即

$$[K, H] = 0 \quad (9.3.42)$$

证明从略(可参看文献[5]),类似地可证明

$$K^2 = \mathbf{J}^2 + \frac{1}{4}\hbar^2 \quad (9.3.43a)$$

其本征值等于

$$\hbar^2 \kappa^2 = j(j+1) \hbar^2 + \frac{1}{4} \hbar^2 = \left(j + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2 \quad (9.3.43b)$$

故对给定的总角动量量子数  $j$ ,  $\kappa$  有两个可能值:

$$\kappa = \pm \left(j + \frac{1}{2}\right) = \pm 1, \pm 2, \dots \quad (9.3.44)$$

于是  $\kappa$  代替了非相对论情形下的轨道角动量量子数  $l$ , 与  $j$  和  $j_z$  一起标定了—个四分量的旋量波函数  $\psi = \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \chi_B \end{pmatrix}$ . 其中二分量的  $\varphi_A$  或  $\chi_B$  各有自己的轨道角动量  $l_A$  或  $l_B$ , 可以证明:

$$\begin{cases} \kappa = j + \frac{1}{2} \text{ 时, } l_A = j + \frac{1}{2}, l_B = j - \frac{1}{2} \\ \kappa = -\left(j + \frac{1}{2}\right) \text{ 时, } l_A = j - \frac{1}{2}, l_B = j + \frac{1}{2} \end{cases} \quad (9.3.45)$$

对—定的  $j$ ,  $l_A$  与  $l_B$  相差 1, 由于  $\varphi_A$  是大分量, 在非相对论极限下,  $l_A$  与过去的  $l$  对应, 例如  $j = \frac{1}{2}$ ,  $l_A$  可以取 1 或 0 (相应的  $l_B$  等于 0 或 1), 对应于  $P_{\frac{1}{2}}$  态或  $S_{\frac{1}{2}}$  态.

因此, 定态 Dirac 方程

$$H\psi = E\psi \quad (9.3.46)$$

的解应该写成如下的径向波函数与角度部分分离的形式:

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi_A \\ \chi_B \end{pmatrix} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} u(r) & y_{j l_A}^m \\ i v(r) & y_{j l_B}^m \end{pmatrix} \quad (9.3.47)$$

其中二分量的  $y_{j l}^m$  是球谐函数与自旋本征态  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  或  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  耦合起来的  $(j, m_j)$  的本征函数,

$$\begin{aligned} y_{j l}^m &= \sqrt{\frac{l + m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}}^m \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &+ \sqrt{\frac{l - m_j + \frac{1}{2}}{2l + 1}} Y_{l, m_j + \frac{1}{2}}^m \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \left(j = l + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \quad (9.3.48)$$

$$y_{jl}^m = -\sqrt{\frac{l-m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, j-\frac{1}{2}}^{m, -\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \sqrt{\frac{l+m_j+\frac{1}{2}}{2l+1}} Y_{l, j+\frac{1}{2}}^{m, +\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \left(j = l - \frac{1}{2}\right) \quad (9.3.49)$$

而(9.3.47)式中的径向波函数  $u, v$  则满足方程

$$\begin{cases} \frac{du}{dr} = -\frac{\kappa}{r}u + \frac{1}{\hbar c}(E - V + mc^2)v \\ \frac{dv}{dr} = \frac{\kappa}{r}v - \frac{1}{\hbar c}(E - V - mc^2)u \end{cases} \quad (9.3.50)$$

类似于 § 9.2 中对 K-G 方程在库仑场中求解那样, 现在也可引进无量纲参数

$$\epsilon = \frac{E}{mc^2}, \quad \rho = \frac{mc}{\hbar} \sqrt{1-\epsilon^2} r \quad (9.3.51)$$

寻找方程(9.3.50)的级数解

$$\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \sim e^{-\rho} \rho^s \sum_{n=0}^{\infty} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} \rho^n \quad (9.3.52)$$

代入方程后求得指标方程的根等于

$$s = \pm \sqrt{\kappa^2 - Z^2 \alpha^2} \quad (9.3.53)$$

再由束缚态波函数的边界条件

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} u(r) \\ v(r) \end{pmatrix} = 0 \quad (9.3.54)$$

必须把无穷级数截断为多项式, 从而给出径向量子数

$$n_r = \frac{\alpha Z \epsilon}{\sqrt{1-\epsilon^2}} - s = 0, 1, 2, \dots \quad (9.3.55)$$

由此得到量子化的束缚态能级 ( $n$  为主量子数)

$$E_n = \frac{mc^2}{\left[1 + \frac{Z^2 \alpha^2}{\left(n_r + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - Z^2 \alpha^2}\right)^2}\right]^{\frac{1}{2}}} \quad (9.3.56)$$

$$n = n_r + |\kappa| = n_r + \left(j + \frac{1}{2}\right) \quad (9.3.57)$$

作为特例,基态  $1S_{\frac{1}{2}}$  ( $j = \frac{1}{2}, \kappa = -1, n_r = 0$ ) 的能量等于

$$E_{1S_{\frac{1}{2}}} = mc^2 \sqrt{1 - Z^2 \alpha^2} \quad (9.3.58)$$

(9.3.56)式可以展开表示为(比较(9.2.23)式):

$$E_{nj} = mc^2 \left\{ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^4} \left[ \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] - \dots \right\} \quad (9.3.59)$$

前3项正是(9.3.37)式的结果,可见那里的近似做得正确.我们再次强调:计入相对论效应的 Dirac 方程消除了薛定谔理论中类氢原子能级对  $l$  量子数的简并,但仍保持对  $j$  量子数的简并(例如仍预告  $2p_{\frac{1}{2}}$  态与  $2s_{\frac{1}{2}}$  态能级一样高,实际上  $2s_{\frac{1}{2}}$  态比  $2p_{\frac{1}{2}}$  态要高一些,见 § 9.6).另外,类似于(9.2.26)式,  $j = 1/2$  的 Dirac 波函数在原点也有微弱的奇性,但  $\int \psi^\dagger \psi dx$  仍可归一化.

## § 9.4 Klein 佯谬和反粒子

### 9.4A 势阱为何关不住粒子?

在粒子物理中讨论重夸克偶素  $Q\bar{Q}$ (例如  $c\bar{c}, b\bar{b}$  等)时,常常在非相对论性的薛定谔方程中惟象地引入一个势场  $V(r)$ ,它在大距离随  $r$  线性增长,在小距离则有库仑势的形式(渐近自由):

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} + \sigma r \quad (9.4.1)$$

然后得到夸克禁闭的性质.

现在我们问:把这个  $V(r)$  引入 Dirac 方程,会得到什么结果? 在方程(9.3.1)中考虑  $\mathbf{A} = 0$  而且为定态 ( $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow E$ ) 的情形(记  $\hbar = c = 1$ ):

$$[E - V(r)]\psi = \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}\psi + \beta[m + U_s(r)]\psi \quad (9.4.2)$$

其中又加上了一项  $U_s(r)$ ,以显示它在四维洛伦兹变换下的性质和静质量  $m$  一样,是一个标量势( $s$  标志 Scalar, 标量),而  $V(r)$  的变换性质与能量  $E$  一样,故是一个四维矢量势的第四分量.类似地,我们可设:

$$U_s(r) = -\frac{\alpha'}{r} + \sigma' r \quad (9.4.3)$$

参见[8], 则经过如(9.3.47)~(9.3.50)步骤后, 得到径向波函数方程为

$$\begin{cases} \frac{du}{dr} = -\frac{\kappa}{r}u + \left[ E + m + \frac{(\alpha - \alpha')}{r} + (\sigma' - \sigma)r \right]v \\ \frac{dv}{dr} = \frac{\kappa}{r}v - \left[ E - m + \frac{(\alpha + \alpha')}{r} - (\sigma + \sigma')r \right]u \end{cases} \quad (9.4.4)$$

当  $r \rightarrow \infty$  时可以简化为

$$\begin{cases} \frac{du}{dr} = (\sigma' - \sigma)ru(r) \\ \frac{dv}{dr} = (\sigma' + \sigma)ru(r) \end{cases}, \quad (r \rightarrow \infty) \quad (9.4.5)$$

消去  $v(r)$  得  $u(r)$  的二阶方程为

$$\frac{d^2u}{dr^2} - (\sigma'^2 - \sigma^2)r^2u(r) = 0, \quad (r \rightarrow \infty) \quad (9.4.6)$$

可见  $u(r)$  在无限远的渐近行为是

$$u(r) \longrightarrow \exp\left[-\sqrt{\sigma'^2 - \sigma^2} \frac{r^2}{2}\right], \quad (r \rightarrow \infty) \quad (9.4.7)$$

这表示: 当  $\sigma' > \sigma$ , 即以标量势  $U_s$  为主时, 我们有指数衰减型的解, 夸克禁闭是可能的; 而当  $\sigma > \sigma'$ , 即以矢量势  $V$  为主时, 解在无限远呈现振荡, 表示夸克穿透势垒而逃逸. 我们从(9.4.1)式那样在无限远处线性增长的势出发, 居然还关不住夸克, 岂非十分奇怪?!

1929年, Klein 最早在对 Dirac 方程的研究中发现了这一理论上的佯谬(见文献[9], 亦可参见文献[1]、[2]、[5]), 为简单和更明确起见, 我们在下面对一维的 K-G 方程说明这一佯谬. 考虑(9.2.2)式中  $\mathbf{A} = 0$  且  $U_s = 0$  的情形 ( $V = q\Phi$ ):

$$\left(i \frac{\partial}{\partial t} - V(x)\right)^2 \psi = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + m^2 \psi \quad (9.4.8)$$

设

$$V(x) = \begin{cases} 0, & (x < 0) \\ V_0, & (x > 0) \end{cases} \quad (9.4.9)$$

是一个阶跃势, 在左方粒子是自由的, 在  $x = 0$  处存在一高为  $V_0$  的势垒.



设粒子以能量  $E$  自左方入射, 入射波函数为

$$\psi_i = a \exp[i(px - Et)], \quad (x < 0) \quad (9.4.10)$$

其中  $p > 0$ ,  $E = \sqrt{p^2 + m^2} > 0$ , 如果  $E < V_0$ , 我们预期粒子波将在  $x = 0$  处被反射, 反射波记为  $\psi_r$ , 另外在  $x > 0$  处有透射波  $\psi_t$ , 不妨先假设

$$\psi_r = b \exp[i(-px - Et)], \quad (x < 0) \quad (9.4.11)$$

$$\psi_t = b' \exp[i(p'x - Et)], \quad (x > 0) \quad (9.4.12)$$

其中  $(E - V_0)^2 = p'^2 + m^2$ .

入射波、反射波和透射波三者振幅  $a$ ,  $b$  和  $b'$  之间的关系应该由  $x = 0$  处波函数及其导数分别连续的条件决定. 它们给出两个方程

$$\begin{cases} a + b = b' \\ (a - b)p = b'p' \end{cases} \quad (9.4.13)$$

由此解出

$$\begin{cases} \frac{b}{a} = \frac{p - p'}{p + p'}, \\ \frac{b'}{a} = \frac{2p}{p + p'} \end{cases} \quad (9.4.14)$$

现在讨论  $V_0 > E$  的两种情形:

(1)  $E + m > V_0 > E$

此时,  $p' = \sqrt{(V_0 - E)^2 - m^2} = iq$  变为纯虚数

$$\psi_t = b' \exp(-qx - iEt), \quad (x > 0) \quad (9.4.15)$$

表示透射波指数式衰减, 同时入射波的反射率

$$R = \left| \frac{b}{a} \right|^2 = \left| \frac{p - iq}{p + iq} \right|^2 = 1 \quad (9.4.16)$$

(2)  $V_0 > E + m$

此时,  $p' = \pm \sqrt{(V_0 - E)^2 - m^2}$  仍为实数, 表示(9.4.12)式确实描写了一个振荡的透射波, 同时入射波的反射率

$$R = \left| \frac{b}{a} \right|^2 = \left| \frac{p - p'}{p + p'} \right|^2, \quad \begin{cases} R < 1, & (\text{如 } p' > 0) \\ R > 1, & (\text{如 } p' < 0) \end{cases} \quad (9.4.17)$$

我们看到(9.4.15)和(9.4.16)两式是预期的结果, 一个比粒子能量

$E$  高的势垒  $V_0$  把粒子波全部反射回去了, 这与薛定谔理论没有什么不同. 奇怪的是一个更高的势垒 ( $V_0 > E + m$ ) 却挡不住粒子了, 有一部分波竟能透射过去, 这时反射率  $R$  不等于 1. 同时我们还需要弄清楚:  $p'$  究竟应取正值还是负值, 这影响到(9.4.17)式的  $R$  究竟小于 1 还是大于 1, 下一小节将进一步讨论这个问题.

### 9.4B K-G 方程的分解形式, Klein 佯谬的解释

K-G 方程(9.4.8)与薛定谔方程最大的不同点在于: 后者只含对时间  $t$  的一阶偏微商而前者却有对  $t$  的二阶偏微商. 1958 年 Feshbach 和 Villars<sup>[10]</sup> 走出了很重要的一步, 把 K-G 方程分解成两个对  $t$  是一阶偏微分方程的耦合形式, 为此他们定义(恢复  $\hbar$  和  $c$ ):

$$\begin{cases} \varphi = \frac{1}{2} \left[ \left( 1 - \frac{V}{mc^2} \right) \psi + i \frac{\hbar}{mc^2} \dot{\psi} \right] \\ \chi = \frac{1}{2} \left[ \left( 1 + \frac{V}{mc^2} \right) \psi - i \frac{\hbar}{mc^2} \dot{\psi} \right] \end{cases} \quad (9.4.18)$$

于是(9.4.8)式在三维情形下, 便化为两个耦合的薛定谔方程:

$$\begin{cases} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V \right) \varphi = mc^2 \varphi - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 (\varphi + \chi) \\ \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - V \right) \chi = -mc^2 \chi + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 (\chi + \varphi) \end{cases} \quad (9.4.19)$$

相应地, (9.1.9)式连续性方程中的  $\rho$  和  $j$  便有如下的表达形式<sup>[11]</sup>:

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi}^* \psi) - \frac{V}{mc^2} \psi^* \psi = \varphi^* \varphi - \chi^* \chi \quad (9.4.20)$$

$$\begin{aligned} j &= \frac{i\hbar}{2m} [\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi] \\ &= \frac{i\hbar}{2m} [(\varphi \nabla \varphi^* - \varphi^* \nabla \varphi) + (\chi \nabla \chi^* - \chi^* \nabla \chi) \\ &\quad + (\varphi \nabla \chi^* - \chi^* \nabla \varphi) + (\chi \nabla \varphi^* - \varphi^* \nabla \chi)] \end{aligned} \quad (9.4.21)$$

由此可见, 过去  $\rho$  用  $\psi$  表示, 似乎与薛定谔方程有很大不同, 一旦用  $\varphi$  和  $\chi$  表示, 却原来是两个熟悉的(正定的)几率密度  $|\varphi|^2$  与  $|\chi|^2$  之差. 所以  $\rho$  在空间各点不是正定的, 但对全空间归一化时应等于(+1)或(-1), 取决于整体上这个态是描写一个粒子还是一个反粒子. 见(9.2.27)式. 相应地

$j$  中第一和第二项正是  $\varphi$  和  $\chi$  各自贡献的几率流密度, 微妙的是还出现了它们彼此干涉的第三和第四项.

让我们用  $\varphi$  和  $\chi$  分解的观点来计算上一小节 Klein 佯谬例子中的几率流密度. 先看入射波  $\psi_i$ , 由(9.4.18)式易得 ( $c = 1$ ):

$$\begin{cases} \varphi_i = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{E}{m}\right) \psi_i \\ \chi_i = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{E}{m}\right) \psi_i \end{cases}, \quad (x < 0) \quad (9.4.22)$$

则几率密度

$$\rho_i = |\varphi_i|^2 - |\chi_i|^2 = \frac{E}{m} |a|^2 > 0 \quad (9.4.23)$$

这表示入射流虽然以  $\varphi_i$  为主, 是由正粒子组成,  $|\varphi_i| > |\chi_i|$ , 但我们不妨把  $\chi_i$  看成为“隐藏的反粒子场”. 再计算入射的几率流密度  $j_i$  (以向右的  $x$  轴方向为正), 由(9.4.21)式可见, 它由四部分组成, 依次等于:

$$j_i^{(1)} = \frac{p}{4m} |a|^2 \left(1 + \frac{E}{m}\right)^2 > 0, \quad (\text{大分量})$$

$$j_i^{(2)} = \frac{p}{4m} |a|^2 \left(1 - \frac{E}{m}\right)^2 > 0, \quad (\text{小分量})$$

$$j_i^{(3)} = \frac{p}{4m} |a|^2 \left(1 - \frac{E^2}{m^2}\right) < 0$$

$$j_i^{(4)} = \frac{p}{4m} |a|^2 \left(1 - \frac{E^2}{m^2}\right) < 0$$

注意后两项是负的, 加起来得到

$$j_i = \frac{p}{m} |a|^2 > 0 \quad (9.4.24)$$

与直接由  $\psi$  计算的当然一致. 类似地对反射波有

$$\rho_r = \frac{E}{m} |b|^2 > 0 \quad (9.4.25)$$

$$j_r = -\frac{p}{m} |b|^2 < 0$$

后者为负也如所预期. 再看  $x > 0$  的透射波  $\psi_t$ , 注意那里  $V = V_0 > 0$ ,  $V_0 - E > m$ , 我们有

$$\varphi_t = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{(E - V_0)}{m} \right] \psi_t, \quad (x > 0) \quad (9.4.26)$$

$$\chi_t = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{(E - V_0)}{m} \right] \psi_t$$

$$\rho_t = |\varphi_t|^2 - |\chi_t|^2 = \frac{(E - V_0)}{m} |b'|^2 < 0 \quad (9.4.27)$$

$$j_t = \frac{p'}{m} |b'|^2 \quad (9.4.28)$$

连续性方程要求成立等式

$$j_i + j_r = j_t \quad (9.4.29)$$

这可从(9.4.14)和(9.4.24、25、28)各式证明之. 问题是: 若  $p' > 0$ ,  $j_t > 0$ ,  $|j_r| < j_i$ ; 若  $p' < 0$ ,  $j_t < 0$ ,  $|j_r| > j_i$ . [这也与(9.4.17)式一致], 两种情形各有困难. 前一种情形在物理上不合理: 能量  $E$  低于壁垒  $V_0$  的粒子流怎么能部分透射、部分反射呢? 后一种情形非常吸引人, 但需要一种解释: 为什么在  $x > 0$  区域的  $j_t < 0$  而  $p' < 0$ 、同时增强了  $x < 0$  区域的粒子反射流呢? 还有, 为什么  $\rho_t$  是负的呢?

回答是: 这一 Klein 佯谬的解释不仅要求承认 K-G 方程的解中必须有反粒子存在, 并且对反粒子的波函数写法提出了明确的规定. 我们认为: “透入”壁垒后到达  $x > 0$  区域的粒子在那里的观察者看来实际上是反粒子, 记原来的能量  $E = V_0 + E'$ , 但作为能量基准的  $V_0$  在  $x > 0$  的局域参考系应该从  $E$  中“移去”, 即重新定义一个  $\tilde{\psi}_t$ :

$$\psi_t \longrightarrow \tilde{\psi}_t = b' \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (p'x - E't) \right], \quad (x > 0) \quad (9.4.30a)$$

其中

$$E' = E - V_0 < 0 \quad (9.4.31)$$

是一个“负能量”, 与此相应

$$\tilde{\varphi}_t = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{E'}{m} \right) \tilde{\psi}_t$$

$$\tilde{\chi}_t = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{E'}{m} \right) \tilde{\psi}_t$$

$$\rho_t = |\tilde{\varphi}_t|^2 - |\tilde{\chi}_t|^2 = \frac{E'}{m} |b'|^2 < 0 \quad (9.4.32a)$$

现在  $|\tilde{\chi}_t| (>|\tilde{\varphi}_t|)$  成为主要的场, 它标志了“反粒子”的性质, 一个“负能量粒子”在实验上的行为犹如一个“反粒子”. 同时要求波函数 (9.4.30a) 写为

$$\tilde{\psi}_t = b' \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(|p'|x - |E'|t)\right] \quad (9.4.30b)$$

其中记  $p' = -|p'| < 0$ ,  $E' = -|E'| < 0$ , 而  $|p'| > 0$  和  $|E'| > 0$  正是反粒子的动量和能量, 让我们再看几率流密度的组成:

$$j_t^{(1)} = \frac{p'}{4m} |b'|^2 \left(1 + \frac{E'}{m}\right)^2 < 0, \text{ (小分量)}$$

$$j_t^{(2)} = \frac{p'}{4m} |b'|^2 \left(1 - \frac{E'}{m}\right)^2 < 0, \text{ (大分量)}$$

$$j_t^{(3)} = \frac{p'}{4m} |b'|^2 \left(1 - \frac{E'^2}{m^2}\right) > 0$$

$$j_t^{(4)} = \frac{p'}{4m} |b'|^2 \left(1 - \frac{E'^2}{m^2}\right) > 0$$

$$j_t = \frac{p'}{m} |b'|^2 < 0 \quad (9.4.32b)$$

现在  $\rho_t$  和  $j_t$  都是负的, 可理解为它们分别是反粒子的几率密度和几率流密度, 而反粒子的实际动量  $|p'|$  和能量  $|E'|$  却都是正的, 它向右运动. 同时  $j_t$  延续到  $x < 0$  区域, 表现为向左的反射粒子流的增强, 使反射率  $R > 1$ , 理论上是自洽的.

上述关于 Klein 佯谬的合理解释决非空谈, 它已有实验的证明. 一束正粒子流向右打到以  $V(x) = q\Phi(x)$  表示的强势垒上时 (以下为行文方便起见, 设正粒子电荷为  $q > 0$ ), 若  $V(x)$  在  $x = 0$  附近由零急剧地增大为  $V_0$  ( $V_0 \gg E$ ), 则在此  $x \approx 0$  的强场区域可能发生正反粒子对的产生过程, 在强场驱使下, 反粒子向右运动形成透射流, 而新产生的正粒子向左运动, 从而加强了粒子的反射流.

本节的分析表明: K-G 方程即使在单粒子水平上也是自洽的, 不过必须明确它不但描写正粒子, 而且描写反粒子. 事实上, K-G 波函数  $\psi$  应看成为两种场的相干叠加, 见 (9.4.18) 式:

$$\psi = \varphi + \chi \quad (9.4.33)$$

当  $|\varphi| > |\chi|$  时,  $\psi$  描写正粒子, 其自由运动的波函数为

$$\psi \sim \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right] \quad (9.4.34)$$

其中  $E > mc^2 > 0$  是粒子能量, 而  $\mathbf{p}$  是其动量.

当  $|\chi| > |\varphi|$  时, 则  $\psi$  描写反粒子, 我们加上脚标  $c$  而写出

$$\psi_c \sim \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}_c \cdot \mathbf{x} - E_c t)\right] \quad (9.4.35)$$

其中  $\mathbf{p}_c$  和  $E_c (> mc^2)$  是反粒子的动量和能量. 这就是说, 我们把正粒子的“负能量”波函数直接看成为反粒子的(正能量)波函数, 即定义反粒子的能量和动量算符分别为

$$\hat{E}_c = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{\mathbf{p}}_c = i\hbar \nabla \quad (9.4.36)$$

我们认为: 对 Klein 佯谬的合理解释提供了这一看法, 使理论在单粒子水平上对正、反粒子也是完全对称(平等)的, 历史上, 对 Dirac 方程的 Klein 佯谬解释常常利用空穴的观念, 而这对 K-G 方程又无能为力. 在我们看来, “负能电子海”和“空穴”理论的历史使命已经完成了, (参见 S. Weinberg 与 Dirac 关于此问题的讨论<sup>[49]</sup>).

## § 9.5 关于狭义相对论的本质

### 9.5A Einstein-Podolsky-Rosen 佯谬和反粒子

1935 年, Einstein-Podolsky-Rosen (EPR) 写了一篇题为“能够认为量子力学对物理实在的描述是完备的吗?”的文章<sup>[12]</sup>, 对量子力学的完备性提出质疑. 他们讨论由两个无自旋粒子组成的量子体系, 这是一个非常奇怪的例子(<sup>[13]</sup>见下), 于是很自然地, 后来的物理学家(从 Bohm<sup>[14]</sup>开始)都逐渐把问题转到讨论两个有自旋的电子或者两个光子, 用实验研究两粒子间奇异的纠缠现象, 我们将在最后第十章介绍. 这里要强调的是: 关洪在<sup>[13]</sup>中明确指出, EPR 佯谬的原始问题实际如下:

现在考虑一个二粒子体系, 粒子在一维空间的动量算符

$$\hat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad (j = 1, 2) \quad (9.5.1)$$

与其位置  $x_i$  间有对易关系:

$$[x_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (9.5.2)$$

则算符  $(x_1 - x_2)$  与  $(\hat{p}_1 + \hat{p}_2)$  将对易:

$$[x_1 - x_2, \hat{p}_1 + \hat{p}_2] = 0 \quad (9.5.3)$$

于是量子力学原理告诉我们, 它们有共同本征态, 而本征值可分别为

$$x_1 - x_2 = a = \text{const} \quad (9.5.4)$$

$$p_1 + p_2 = 0, \quad p_2 = -p_1 \quad (9.5.5)$$

问题马上尖锐化了: 这是多么奇怪的态, 两个以相反动量方向运动的粒子居然可以保持它们之间的距离不变! 简直不可思议. 正如[13]中所说, “谁也想不出怎样实现这种……运动, 难怪好多人把 Einstein 同 Bohr 之间的争论只当做是一场不会有结果的空谈.”

我们<sup>[11]</sup>认为: EPR 提出的问题十分尖锐, 也十分重要, 它实际上强烈地暗示我们: 在量子力学中引入反粒子态是必要的, 而且后者的波函数也是毫不含糊地被确定了.

设粒子 1 是正粒子, 其波函数是熟知的:

$$\psi(x_1, t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_1 x_1 - E_1 t)\right\} \quad (9.5.6)$$

设其中动量  $p_1 > 0$ , 能量  $E_1 > 0$ , 则我们认为 EPR 态中第二个粒子只可能是一个反粒子, 其波函数应为

$$\psi_c(x_2, t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p_2 x_2 - E_2 t)\right\} = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(p_1 x_2 - E_1 t)\right\} \quad (9.5.7)$$

其中  $p_2 = -p_1 < 0$ ,  $E_2 = -E_1 < 0$ , 所以如上节(9.4.35)和(9.4.36)两式的表示, (9.5.7)式描写的反粒子具有实际动量为  $p_1$ , 能量为  $E_1$ , 恰与粒子 1 相同. 因此 EPR 二粒子态  $\Psi = \psi\psi_c$  是一对正反粒子组成的体系, 它们具有相同的平行动量  $p_1$  和不变的距离  $(x_1 - x_2)$ , 一切都很合理了. 进一步的实验证据见 § 10.2C.

### 9.5B CPT 定理实际上已变为一个基本假设

我们在第三章最后, 已介绍过 1956 年李政道、杨振宁<sup>[16]</sup>和吴健雄等<sup>[17]</sup>关于宇称( $P$ )不守恒的历史性发现后, 物理学中对空间反演( $P$ )、时间反演( $T$ )和正反粒子共轭变换(电荷共轭变换或  $C$  反演)的研究不断深入. 弱相互作用过程中  $P$  不守恒即意味着  $C$  也不守恒<sup>[18]</sup>, 但 1964 年在中性  $K$  介子衰变中发现  $CP$  又不守恒了. 根据当时已在量子场论中(利用相

对论原理)和实验中证明的一条  $CPT$  定理——理论在  $CPT$  联合反演下一定是不变的——便可判定,  $CP$  不守恒亦即  $T$  反演不守恒. 从那时以来的实验直到最近的报道<sup>[19]</sup>,  $T$  反演不守恒而  $CPT$  守恒已可肯定下来了.  $T$  不守恒的程度很小, 仅约  $6.6 \times 10^{-3}$ , 这对一个分立反演是很奇怪的, 也是很不好解释的.

我们在第三章最后对  $T$  反演定义有一些评论, 强调它指的是两个量子态之间的等价关系:

$$\psi(\mathbf{x}, t) \sim \psi^*(\mathbf{x}, -t) \quad (9.5.8)$$

( $\sim$ 表示等价), 时间反演除 ( $t \rightarrow -t$ ) 外还要加上一个复共轭运算, 这是薛定谔方程不变性的要求, 也是令人怀疑的.

很有趣的是: 所谓正反粒子共轭变换 ( $C$ ) 也包含一个复共轭运算. 这一点可以从 K-G 方程(9.2.2)看出, 如果定义  $C$  变换为使电荷  $q$  改号的变换, 则取(9.2.2)式的复共轭可以做到, 这意味着  $C$  变换后的波函数从  $\psi(\mathbf{x}, t)$  变为

$$\psi(\mathbf{x}, t) \longrightarrow \psi_c(\mathbf{x}, t) = \psi^*(\mathbf{x}, t) \quad (9.5.9)$$

对 Dirac 方程也是类似的, 不过前面多一个矩阵:

$$\psi^{\text{Dirac}}(\mathbf{x}, t) \longrightarrow \psi_c^{\text{Dirac}}(\mathbf{x}, t) = i\beta\alpha_2\psi^*(\mathbf{x}, t) \quad (9.5.10)$$

让我们从一个(K-G 或 Dirac)波函数  $\psi(\mathbf{x}, t)$  出发, 对它作  $CPT$  联合反演变换, 于是  $T$  和  $C$  反演中两次复共轭彼此消去了, 结果波函数与出发时比较, 除前面可能有一些无关紧要的矩阵或相位外, 实质上只是  $\mathbf{x}$  和  $t$  改了号:

$$\psi(\mathbf{x}, t) \longrightarrow \psi_{CPT}(\mathbf{x}, t) \sim \psi(-\mathbf{x}, -t) \quad (9.5.11)$$

(参看[1]中的 Chapt. 5). 然而要注意, 按  $CPT$  变换的定义, 右端的波函数应认为是描写一个反粒子的. 这句话正是我们在前面(9.4.35)式直到(9.5.7)式反复希望强调的事情. 实际上从历史看, Schwinger<sup>[20]</sup>, Konopinshi 和 Mahmaud<sup>[21]</sup> 或更早的 Stüeckelberg<sup>[22]</sup> 和 Feynman<sup>[23]</sup> 等都曾以不同形式在不同程度上指出过这一点.

在我们看来,  $C$ 、 $P$ 、 $T$  各自的定义在数学上尽管是明确的, 在物理上却大成问题了. 一个物理量的可观察性总是直接或间接地同它的某种对称性或守恒定律相联系的, 一旦失去了这种联系, 它便不再是一个可观察量了. 对于一个物理的变换也是如此.

还需要指出: 认为一个电子变为其反粒子(正电子)的变换是电荷  $-e$  ( $< 0$ ) 变为  $(+e)$ , 即所谓  $C$  变换, 是基于电荷是某种有守恒性质的



“流体”观念,在我们看来,也早已过时了.高能物理研究早就弄清楚:所谓精细结构常数  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$  在低能 ( $E \sim m_e c^2 = 0.511\text{MeV}$ ) 时约为  $(137)^{-1}$ , 而在高能 ( $E \sim m_W c^2 \sim 80\text{GeV}$ ) 时要增大为  $(128)^{-1}$ . 因为  $c$  和  $\hbar$  是不变的普适常数,由此可见  $e^2$  要增大 7%. 这不是一个可忽略的小数. 电荷早就不守恒了<sup>[24]</sup>, 而我们在过去常常在讨论实际上观察不到的东西时却已经默认为它是可观察的.

在经典物理学中,一个电子在外场中的运动方程是

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e \left[ \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right] \quad (9.5.12)$$

把  $e$  改成  $(-e)$ , 我们便得到正电子的运动方程. 刚才说这一变换在量子理论中已证明为不守恒, 很妙的是在 (9.5.12) 式中有一个可以代替  $e \rightarrow (-e)$  的变换, 就是  $m \rightarrow (-m)$  的变换, 它在经典理论中似乎无意义, 但在量子理论中却很有意义, 因为  $E = mc^2$ ,  $m$  改号后, 正能量的粒子波函数变为它的负能量波函数, 按我们现在的理解, 恰好是正能量的反粒子波函数 (参见附录 9C).

最后一句话的正确性还可以从对 Dirac 方程的 Levinson 定理推广而看出<sup>[25]</sup> (亦可见 [6] 中的第一章), 一个 Dirac 粒子在吸力势场中的散射相移是正的, 但它的负能量散射态的相移却是负的, 相当于受到势场的排斥, 原因是它正是一个反粒子, 用过去的话说, 它带有与原来粒子相反的电荷 (因此 Dirac 方程的负能解没有束缚态). 所以电荷 ( $q$ ) 守恒定律已让位于电荷数 ( $Q = q/e$ ) 守恒定律,  $Q = \pm 1$  (对应于轻子数  $L$  或重子数  $B$ ) 正落实到波函数相位上  $\pm i$  的差别上<sup>[30, 24]</sup>.

一个正粒子  $|a\rangle$  与它的反粒子  $|\bar{a}\rangle$  的关系在 1956 年前被假定为

$$|\bar{a}\rangle = C |a\rangle \quad (9.5.13a)$$

1956 年后知道它错了, 现在已公认<sup>[26]</sup>

$$|\bar{a}\rangle = CPT |a\rangle \quad (9.5.13b)$$

这就是 (9.4.34) 和 (9.4.35) 的关系.

可是, 在我们看来, 倘若承认了这一点,  $CPT$  定理实际上就变为一个基本假设了, 我们认为, 在物理上, 空间—时间反演应简单地定义为  $(\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}, t \rightarrow -t)$  (不附加诸如复共轭之类的操作), 然后假设: 粒子在空间—时间反演下变为它相应的反粒子<sup>[27]</sup>.

这里需要说明一个“定理”和一个“定律”(或“假设”)的区别. 定理中

各个量在事先都必须分别明确地定义好,而定理证明的结论实际上早已蕴含在前提之中,例如  $CPT$  定理中  $C$ 、 $P$ 、 $T$  各自都已明确地定义好,而定理的正确性是由前提——相对论和量子场论——来保证的. 而假设则不然,有时(但不总是)它可以包含一个量的定义,后者并非事先定义好,而是靠实验证实了假设的正确性时才定义好的. 例如(9.5.12)式中的  $\mathbf{E}$  或  $\mathbf{B}$ . 又如牛顿定律  $F = ma$  中惯性质量  $m$  的定义就包含在这个规律之内(实测  $F$  对  $a$  的斜率),而不是另外独立地定义的(我们不能把  $F = ma$  看成是从拉格朗日变分原理或哈密顿原理导出的一条“定理”). 现在也类似,物理的正反粒子间的变换  $\mathcal{C}$  不是可以独立地定义的,它是空间—时间反演  $\mathcal{PT}(x \rightarrow -x, t \rightarrow -t)$  的直接结果:

$$\mathcal{PT} = \mathcal{C} \quad (9.5.14)$$

### 9.5C 狭义相对论效应即隐藏反粒子场的效应

在参考文献[27—31]中我们详细地讨论了为什么应当承认狭义相对论(SR)与量子力学(QM)有共同的基础或本质,为什么应先在一个惯性系内建立 SR 的动力学关系

$$E^2 = m^2 c^4 + p^2 c^2 \quad (9.5.15)$$

然后再讨论 SR 运动学,即建立洛伦兹变换关系. 后者在 1905 年时实际上不过是两个惯性系坐标之间的相互定义式,而当时必须先靠“光速不变原理”(A)这个“相对论性原理”给出这种定义关系,然后再靠第二个“相对论性原理”即“相对性原理”(B)建立各种物理理论,并把“光速不变”作为麦克斯韦理论的推论而达到自洽. 提出  $B$  好比是“画龙”,提出  $A$  才是爱因斯坦的“点睛”之笔.

现在我们的目的是在 QM 基础加上一个(不是两个)“相对论性原理”以建立 SR. 这个原理早已呼之欲出了,那就是把(9.4.19)式的观点倒过来看,不是把它看成是已知的 K-G 方程的分解形式,而是把它看成为把某种“对称性”加到薛定谔方程上去以建立 K-G 方程的办法. 这一“对称性”可以陈述如下:一个粒子内部必定具有两种场,分别用  $\varphi(x, t)$  和  $\chi(x, t)$  来表示,它们互相耦合起来,在空间—时间反演 ( $x \rightarrow -x, t \rightarrow -t$ ) 下有变换关系

$$\varphi(-x, -t) \rightarrow \chi(x, t), \quad \chi(-x, -t) \rightarrow \varphi(x, t) \quad (9.5.16)$$

加上外势场的变换性质

$$V(-\mathbf{x}, -t) \rightarrow -V(\mathbf{x}, t) \quad (9.5.17)$$

则理论必须在上述变换下保持不变.

倘若承认上述对称性,则(9.4.19)式便是它对于一个无自旋粒子的特殊表现,由它推出 K-G 方程,并立即得到(9.5.15)式.对于自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子,相应的耦合方程是(9.3.2)式(注意  $E, \mathbf{p}$  换为各自的算符),只要假定外场的矢势  $\mathbf{A}$  也具有类似于(9.5.17)式那样的反演性质,便可见(9.3.2)式也满足我们新定义的“空一时反演不变性”.

无自旋或有自旋,是不同的特殊性,表现在例如前者的“动能”写为 $\frac{p^2}{2m}$ ,而后者写为  $c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}$ ;前者的  $\varphi$  和  $\chi$  存在于同一个“四维空时”[如(9.4.18)式所示  $\psi = \varphi + \chi$ ],而后者的  $\varphi$  和  $\chi$  则似乎有各自的“自由度”(在“自旋空间”表示为,  $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$ ).但不论有无自旋,(9.5.16)这个一般的对称性都成立,Dirac 方程同样导致(9.5.15)式.

有趣的是:当我们得到 K-G 方程或 Dirac 方程后,它的某一个具体解  $\psi(\mathbf{x}, t)$  中的  $\varphi$  和  $\chi$ ,并不显示(9.5.16)式那样的对称性.例如一粒子的平面波

$$\begin{cases} \psi(\mathbf{x}, t) \sim \varphi(\mathbf{x}, t) \sim \chi(\mathbf{x}, t) \sim \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right] \\ |\varphi| > |\chi| \end{cases} \quad (9.5.18)$$

$\varphi, \chi$  有同样的空时演化相位,如(9.4.18)式所示.这并不奇怪,因为  $\varphi$  的振幅大于  $\chi$ ,表示前者是 master,后者是 slave,前者支配了后者.然而注入方程(9.4.19)式的对称性(9.5.16)式是不会消失的,它会在另一个解——反粒子波函数,即负能量的正粒子解——中显示出来:

$$\begin{cases} \psi_c(\mathbf{x}, t) \sim \varphi_c(\mathbf{x}, t) \sim \chi_c(\mathbf{x}, t) \sim \exp\left[\frac{-i}{\hbar}(\mathbf{p}_c \cdot \mathbf{x} - E_c t)\right] \\ |\varphi_c| < |\chi_c| \end{cases} \quad (9.5.19)$$

( $E_c > 0$ )  $\chi_c$  成为 master,它决定了波函数的相位演化规律.在空间一时间反演下,  $\varphi(-\mathbf{x}, -t) \rightarrow \chi_c(\mathbf{x}, t)$ ,使  $\psi \rightarrow \psi_c$ ,即正粒子变为反粒子,理论在整体上保持空时反演的不变性.

现在我们可容易地导出两个惯性系之间的坐标变换规律.记实验室系

为  $S$  系, 有一自由粒子的波函数如(9.5.18)式所示, 再取与粒子相对静止的运动参考系  $S'$ , 则在  $S'$  系中的粒子动量  $\mathbf{p}' = 0$ , 而能量  $E' = E_0 = mc^2$  即粒子的静能, 于是  $S'$  系中平面波函数变为

$$\exp\left[i \frac{(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}' - E't')}{\hbar}\right] = \exp\left(\frac{-iE_0 t'}{\hbar}\right) \quad (9.5.20)$$

这里已引入了  $S'$  系的空间和时间坐标  $(\mathbf{x}', t')$ , 它们是靠波函数的相位来定义的, 根据在于“相位是坐标变换下的不变量”. 这一点被德布罗意称为相位和谐定律, 他甚至认为这是他一生中最基本的贡献\*. 比较(9.5.18)式和(9.5.20)式, 对粒子在同一“四维空时”点有同一相位:

$$(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et) = (-E_0 t') \quad (9.5.21)$$

取  $\mathbf{p}$  沿  $x$  轴方向后以  $p$ 、 $E$  及  $E_0$  的动力学关系代入, 即得

$$t' = \frac{t - \frac{vx}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (9.5.22)$$

这正是洛伦兹变换中最核心的一个式子. 我们不是用“光速不变”, 而是靠“相位”来定义空时坐标, 关键是在量子力学基础上引入“空-时反演不变性”这惟一的“相对论性原理”, 从相对论动力学推导出相对论运动学.

现在不难说明: 过去令人感到奇怪的 SR 效应实际上都是隐藏的反粒子场的效应. 注意(9.4.18)式, 先看  $V = 0$  的情形, 当粒子从静止开始有速度  $v = 0$  时,  $\chi = 0$ ,  $\psi$  内部是 100% 的  $\varphi$ , 一旦  $v$  从零增加,  $\chi$  也随之增大, 直到能量  $E \rightarrow \infty$ ,  $\chi$  的振幅才逼近  $\varphi$  的. 易证粒子的速度  $v$  即德布罗意波的群速度  $v_g$ :

$$\begin{aligned} v_g &= \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dE}{dp} \\ &= \frac{d}{dp} \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = \frac{pc^2}{E} = v \xrightarrow{E \rightarrow \infty} c \end{aligned} \quad (9.5.23)$$

而

$$\lim_{v \rightarrow c} |\chi| = |\varphi| \quad (9.5.24)$$

\* G. Lochak, *The Wave-Particle Dualism* (S. Diner et al., eds, D. Reidel Publishing Company, 1984).

由此可见,粒子速度之所以不能超过一极限值  $c$  是由于内部隐藏的反粒子场的成分  $\chi$  受到限制(不能大到超过正粒子场的成分  $\varphi$  的程度).

让我们考虑一个 K-G 粒子的波包(沿  $x$  轴运动)<sup>[15]</sup>:

$$\psi(x, t) = (4\sigma\pi^3)^{-1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{k^2}{2\sigma}\right) \exp[i(kx - \omega t)] dk \quad (9.5.25)$$

设  $\sqrt{\sigma} \ll \frac{mc}{\hbar}$ , 则近似地有

$$\psi(x, t) \approx \frac{\left(\frac{\sigma}{\pi}\right)^{1/4}}{\left(1 + \frac{i\sigma\hbar t}{m}\right)^{1/2}} \exp\left\{-\frac{\alpha x^2}{2\left(1 + \frac{i\sigma\hbar t}{m}\right)^{1/2}} - \frac{imc^2 t}{\hbar}\right\} \quad (9.5.26)$$

再限制  $\frac{\sigma\hbar t}{m} \ll 1$  以忽略波包在低速 ( $v \ll c$ ) 下的扩散, 然后作一个“升压”变换, 把波包推到高速 ( $v \rightarrow c$ ) 情形, 结果可看到(见图 9.5.1):

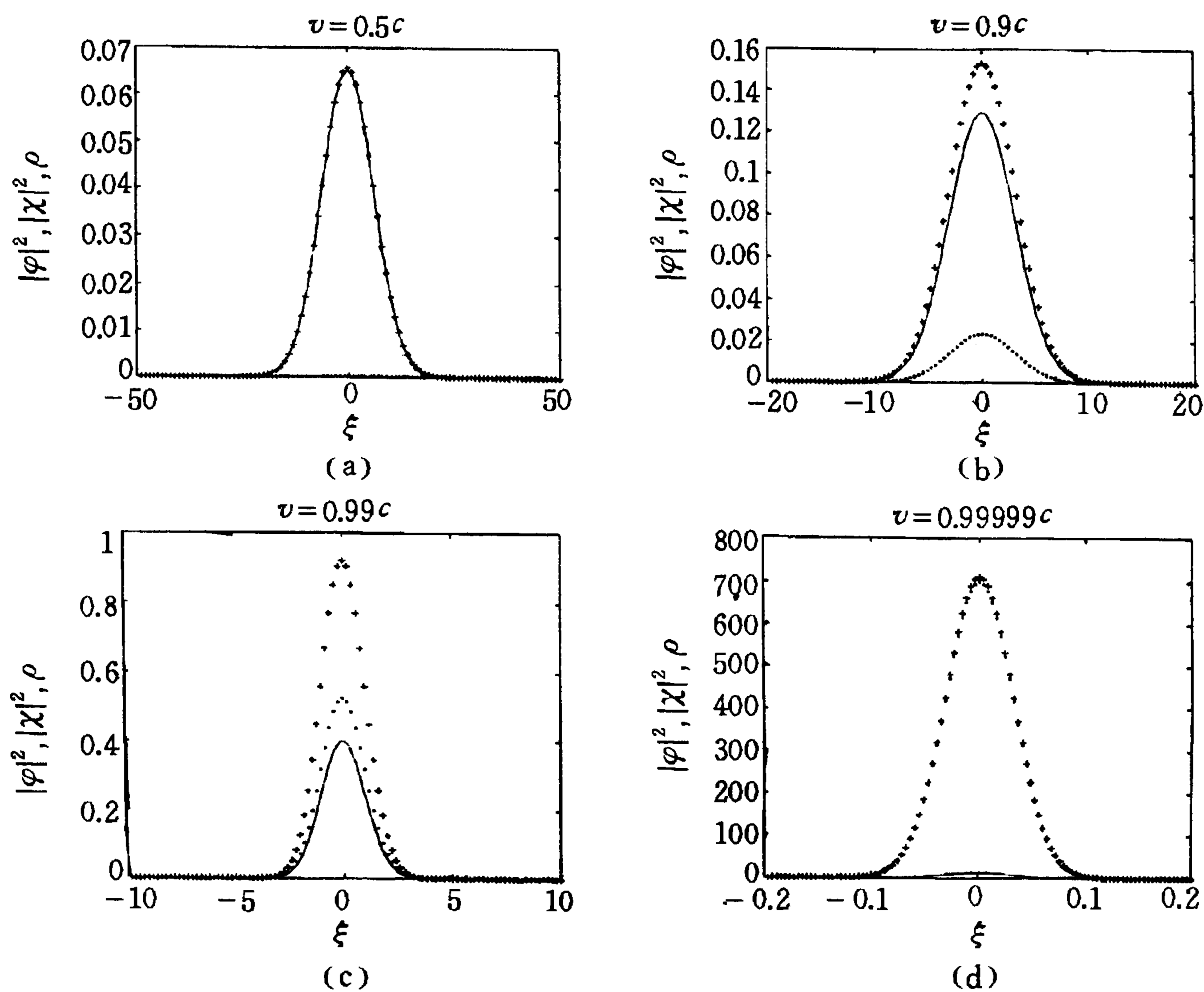


图 9.5.1 K-G 粒子(例如  $\pi$  介子)以 4 种速度  $v$  运动时的波包形状 (取  $\frac{\sigma\hbar^2}{m^2 c^2} = \frac{1}{100}$ )

(a)  $v = 0.5c$ ; (b)  $v = 0.9c$ ; (c)  $v = 0.99c$ ; (d)  $v = 0.99999c$ .

注意用++++线表示的  $|\varphi|^2$  和用……线表示的  $|\chi|^2$  都随  $v$  之增大而增大, 它们两者甚至可以超过由实线——表示的  $\rho = |\varphi|^2 - |\chi|^2$  数值. 横坐标  $\xi = \frac{mc(x - vt)}{\hbar}$  是一个无量纲数. 由此可

见, 随粒子速度而增长的隐藏的反粒子场( $\chi$ )与正粒子场( $\varphi$ )之间的耦合, 才是一个高速粒子波包不但不会扩散, 而且还会产生洛伦兹收缩和升压效应的(在动力学上的)本质原因.

(1) 波包的宽度随  $v$  之增而变窄, 这就是洛仑兹缩短.

(2) K-G 波函数的几率密度  $\rho = |\varphi|^2 - |\chi|^2$  (见(9.4.20)式) 的峰值振幅随  $v$  之增而增, 此即所谓“升压效应”(boost effect).

(3) 然而  $|\varphi|^2$  与  $|\chi|^2$  各自的振幅增加得比  $\rho$  还厉害, 并始终保持  $|\varphi| > |\chi|$  的关系同时保持  $|\psi| = |\varphi + \chi|$  为一不变量.

我们定义一个隐藏的  $\chi$  场对  $\varphi$  场振幅之比为  $R$ , 则“成分”之比如下:

$$[R_{\text{free}}^{\text{K-G}}]^2 = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} |\chi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\varphi|^2 dx} = \left[ \frac{1 - \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}{1 + \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \right]^2 \quad (9.5.27)$$

它从零 ( $v = 0$ ) 一直增大到以 1 ( $v \rightarrow c$ ) 为极限.

另一方面, 考虑 K-G 粒子被束缚在库仑势场  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$  内的  $1s$  态, 其能级如(9.2.25)式所示, 当核电荷数增大到  $Z \rightarrow \frac{1}{2\alpha} \approx \frac{137}{2}$ , 能级以  $\frac{1}{\sqrt{2}} mc^2$  为下限, 而比值

$$[R_{1s}^{\text{K-G}}]^2 = \frac{\int |\chi|^2 dx}{\int |\varphi|^2 dx} = 1 - 4 \left[ 2 + \left(y + \frac{1}{2}\right)^{\frac{1}{2}} + \frac{1}{2y} \left(y + \frac{1}{2}\right)^{\frac{3}{2}} \right]^{-1} \quad (9.5.28)$$

$\left(y = \left(\frac{1}{4} - Z^2 \alpha^2\right)^{\frac{1}{2}}\right)$  却从零单调地增加到极限 1, 见图 9.5.2.

对于自旋  $\frac{1}{2}$  的 Dirac 粒子, 四分量波函数

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (9.5.29)$$

中上面两个分量  $\varphi$  是“正粒子场”, 而下面两个分量  $\chi$  是隐藏的“反粒子场”. Dirac 波函数  $\psi$  的几率密度是

$$\rho_{\text{Dirac}} = \psi^\dagger \psi = \varphi^\dagger \varphi + \chi^\dagger \chi \quad (9.5.30)$$

注意中间符号与 K-G 方程的不同, 结果一自由运动的电子波包中  $\varphi^\dagger \varphi$  与  $\chi^\dagger \chi$  之和被限制在  $\rho_{\text{Dirac}}$  之内, 而在 boost 变换中保持不变的量是

$$\bar{\psi} \psi = \varphi^\dagger \varphi - \chi^\dagger \chi > 0 \quad (9.5.31)$$

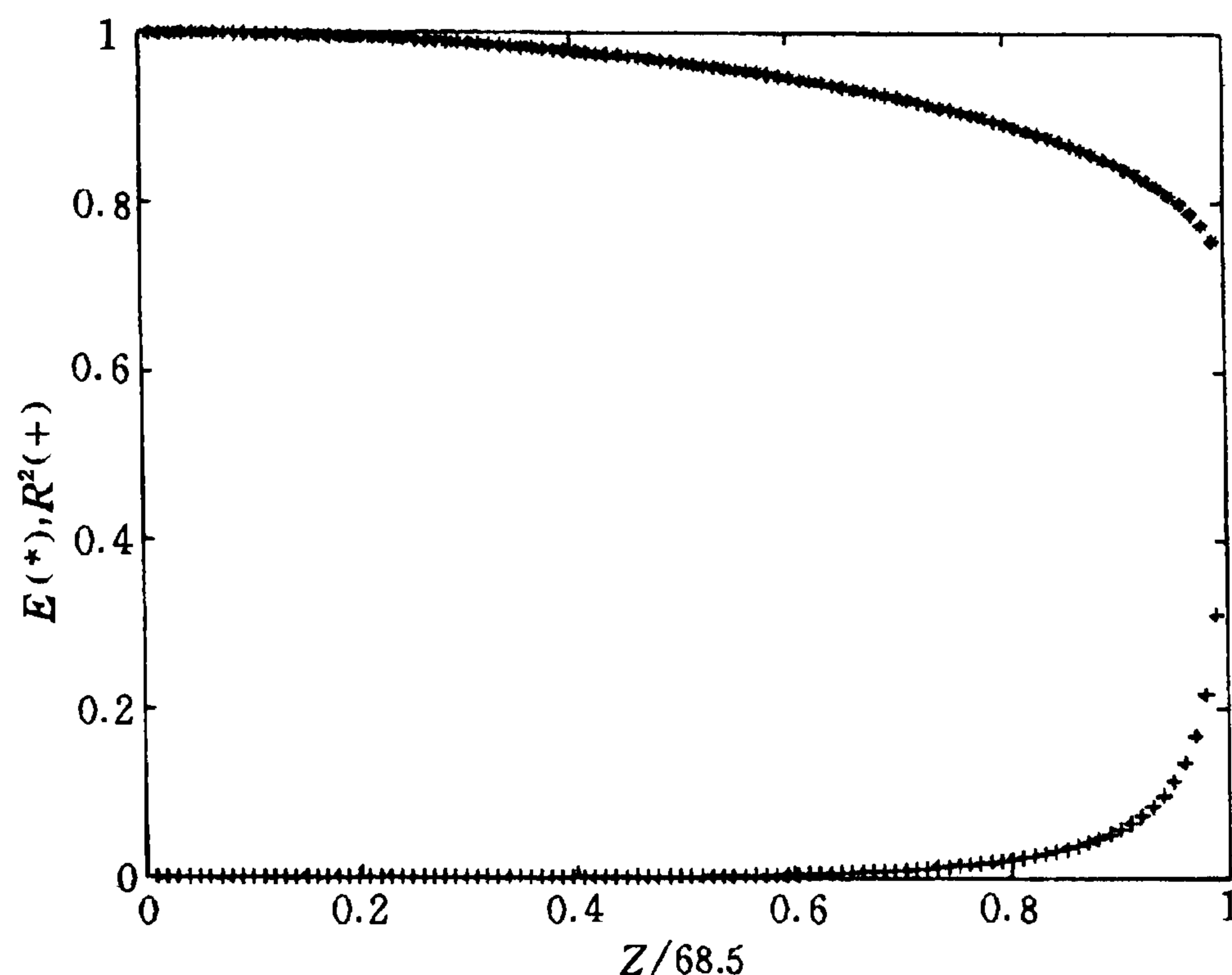


图 9.5.2

K-G 粒子(如  $\pi^-$  粒子)在库仑势场  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$  中的  $1s$  态能量  $E$ (以  $m_0c^2$  为单位,用 \*\*\* 线表示)及相应之  $R^2$  值(隐藏的反粒子与正粒子“成分”之比)随核电荷数  $Z$  而变化的关系

当  $Z$  从 0 增大到  $Z_c = \frac{1}{2\alpha} = 68.5$  时,  $\frac{E}{m_0c^2}$  从 1 降到  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  而  $R$  则从 0

上升到 1

这个不等式保证电子始终是电子,尽管当  $v \rightarrow c$  时  $\chi$  已十分逼近于  $\varphi$  了,两者成分之比是(见图 9.5.3)

$$[R_{\text{free}}^{\text{Dirac}}]^2 = \frac{1 - \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}{1 + \sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \quad (9.5.32)$$

另一方面,在类氢原子中  $1s$  态能级如(9.3.58)式所示,当  $Z \rightarrow \frac{1}{\alpha} \approx 137$  时  $E_{1s} \rightarrow 0$ ,但此时隐藏的反粒子成分却单调上升,比例为

$$[R_{1s}^{\text{Dirac}}]^2 = \frac{1 - \sqrt{1 - Z^2\alpha^2}}{1 + \sqrt{1 - Z^2\alpha^2}} \quad (9.5.33)$$

如图 9.5.4 所示.

总之,在非相对论性量子力学中,因为考虑粒子时不计它内部隐藏的反粒子场,它的速度没有上限,在吸引性的势场中其能量也没有下限,同时它的质量  $m$  是个不变量,与其能量  $E$  没有什么关系.在相对论性量子力学中情况便完全不同了,当计入一个粒子内部有隐藏的反粒子场时,它的速度便以光速为上限,在外势场中能量也有一个下限,  $E_{\min} \geq 0$ ,这两端的限制

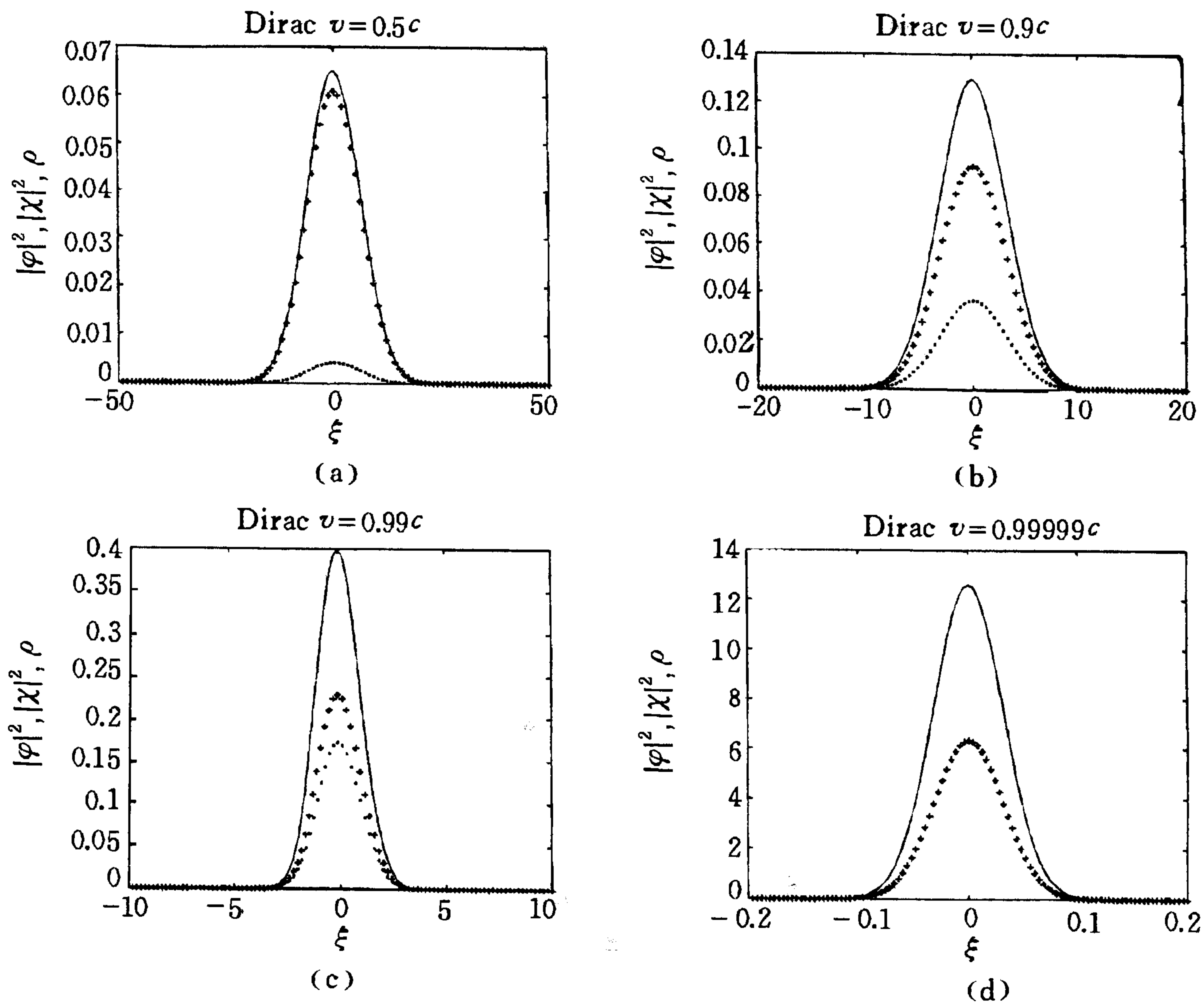


图 9.5.3 Dirac 粒子(例如电子)以 4 种速度  $v$  运动时的波包形状

(a)  $v = 0.5c$ ; (b)  $v = 0.9c$ ; (c)  $v = 0.99c$ ; (d)  $v = 0.99999c$ .

注意用“++++”线表示的  $\phi^+ \phi = |\phi|^2$  和用“……”线表示的  $\chi^+ \chi = |\chi|^2$  都随  $v$  之增大而增大,但它们始终保持在由实线——表示的  $\rho = |\phi|^2 + |\chi|^2$  数值之下,当  $v \rightarrow c$  时,  $|\phi|^2 \gtrsim |\chi|^2 \rightarrow \frac{1}{2}\rho$ . 横坐标与图 9.5.1 中相同.

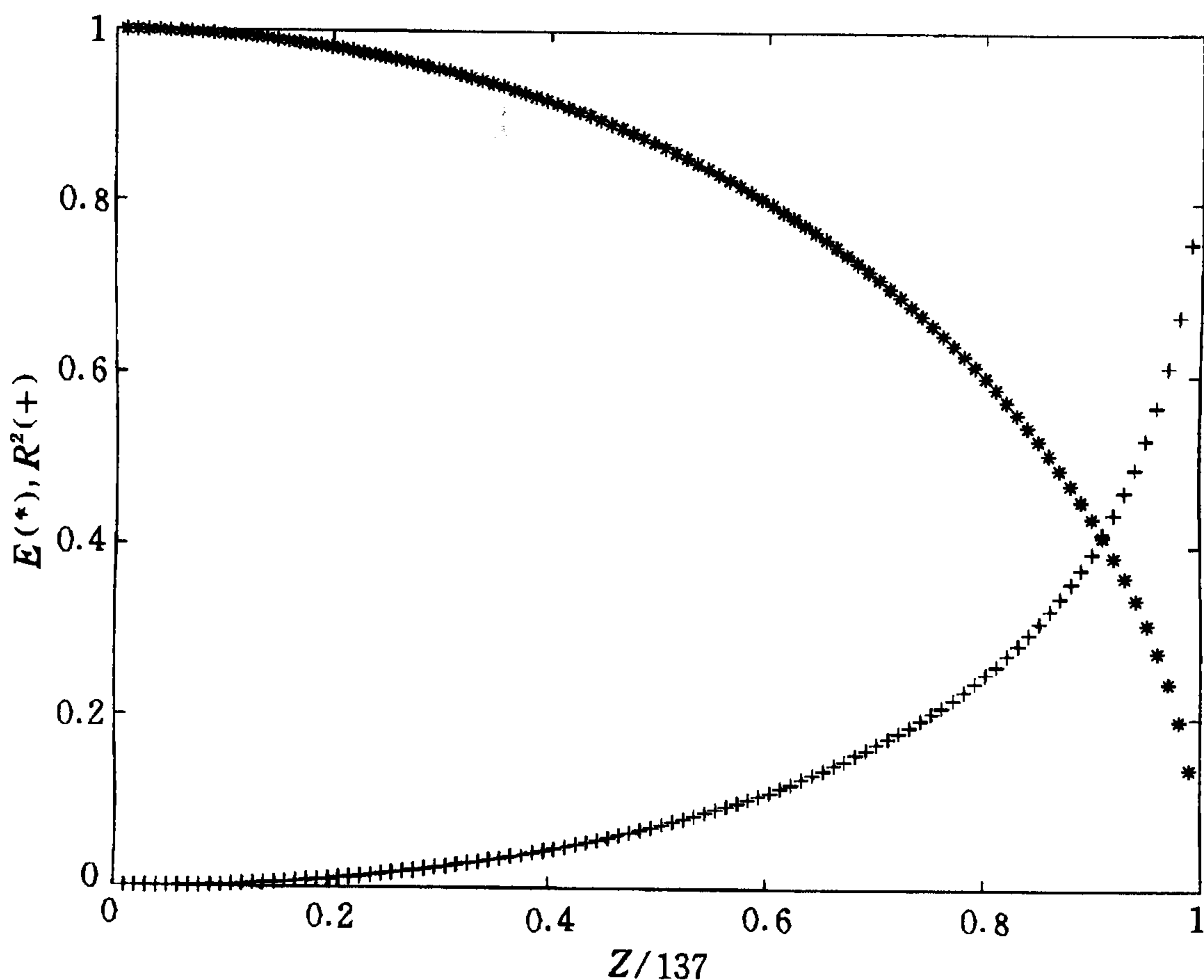


图 9.5.4 Dirac 粒子(如电子)在库仑势场  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$  中的 1s 态能量  $E$ (以  $m_0c^2$  为单位,用 \* \* \* 线表示)及相应之  $R^2$  值(隐藏的“正电子成分”与“电子成分”之比)随核电荷数  $Z$  而变化的关系

当  $Z$  从 0 增大到  $Z_\alpha = \frac{1}{\alpha} = 137$  时,  $\frac{E}{m_0c^2}$  从 1 降到 0 而  $R$  则从 0 上升到 1



都是隐藏反粒子场与正粒子场之比值  $R \rightarrow 1$ , 同时粒子质量  $m$  成为可变的量, 且与其能量  $E$  成正比:  $E = mc^2$ . 所以质量起源的本质就是 SR 的本质, 也就是“正、反粒子的对等存在及(9.5.16)式所表示的对称性”.

最后我们对 SR 中的运动钟变慢效应作一直观的理解: 按(9.5.18)和(9.5.19)式, 一个正粒子(或反粒子)的“内部钟”好比是按“顺(或反)时针”方向来读时间的. 现在一个正粒子以高速度运动时, 它虽仍以  $\varphi$  为主, 因而“钟”还是顺时针记数, 但随着  $\chi$  的振幅增加而越走越慢了.(处于从属地位的  $\chi$  场的表现, 不是相反的电荷, 而是奇异的 SR 效应.)

### 9.5D 相对论性多粒子体系定态薛定谔方程, 重夸克偶素

上面引进了一个新的基本假设, 解释了 SR 和相对论性的单粒子方程(K-G 方程和 Dirac 方程)的本质, 但这还是不够的. 一个新假定必须带来某些新结果, 下面就尝试来讨论为什么已有 70 多年历史的(多粒子体系的)定态薛定谔方程有时是相当准确的? 它还可以进一步作相对论性修正吗<sup>[32]</sup>?

#### 一、二体定态相对论性的薛定谔方程

为简单起见, 先考虑由二粒子( $m_1$  和  $m_2$ )组成的体系. 则代替单体情况下 K-G 方程的分解形式(9.4.19), 我们写出

$$\left\{ \begin{array}{l} i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = (m_1 + m_2)c^2 \varphi + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)(\varphi + \chi) \\ \quad - \left( \frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_{\mathbf{r}_1}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_{\mathbf{r}_2}^2 \right) (\varphi + \chi) \\ i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = - (m_1 + m_2)c^2 \chi - V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)(\varphi + \chi) \\ \quad + \left( \frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_{\mathbf{r}_1}^2 + \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_{\mathbf{r}_2}^2 \right) (\varphi + \chi) \end{array} \right. \quad (9.5.34)$$

其中  $\varphi = \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$  和  $\chi = \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$  分别表示体系的“二粒子态的场”和相应的(隐藏)“二个反粒子态的场”, 耦合方程(9.5.34)式在空一时反演 ( $\mathbf{r}_1 \rightarrow -\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rightarrow -\mathbf{r}_2, t \rightarrow -t$ ) 下因对称性

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi(-\mathbf{r}_1, -\mathbf{r}_2, -t) \rightarrow \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \\ \chi(-\mathbf{r}_1, -\mathbf{r}_2, -t) \rightarrow \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \end{array} \right. \quad (9.5.35)$$

$$V(-\mathbf{r}_1, -\mathbf{r}_2, -t) \rightarrow V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \quad (9.5.36)$$

而保持不变. 但是注意: (9.5.36) 与单粒子方程时  $V(-\mathbf{r}, -t) \rightarrow -V(\mathbf{r}, t)$  不同, 这是因为(以类氢原子为例): 那时  $V(\mathbf{r}, t)$  作为外势场, 即原子核被视为一个无动力学内涵的(质量为无限大的)惰性核, 在空一时反演下不变, 于是单电子的势能要改号, 而这里在空一时反演下假设两个粒子都变为反粒子, 它们之间的势能便保持不变, 如(9.5.36)式所示. 当然, 方程(9.5.34)还包括了  $V$  与  $\varphi$  及  $\chi$  都乘在一起这个假定, 也与(9.4.19)式不同, 究竟是否正确要看最后结果及与实验的比较.

引入质心坐标  $\mathbf{R} = \frac{1}{M}(m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2)$ , ( $M = m_1 + m_2$ ) 和相对坐标  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ , 在(9.5.34)两式中令

$$\varphi = \Phi + i \frac{\hbar}{Mc^2} \dot{\Phi}, \quad \chi = \Phi - i \frac{\hbar}{Mc^2} \dot{\Phi} \quad (9.5.37)$$

可见  $\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t)$  满足方程

$$\ddot{\Phi} - c^2 \nabla_{\mathbf{R}}^2 \Phi - c^2 \frac{M}{\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \Phi + \frac{1}{\hbar^2} (M^2 c^4 + 2VMc^2) \Phi = 0 \quad (9.5.38)$$

其中  $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$  是约化质量, 因为设  $V$  仅是  $|\mathbf{r}| = r$  的函数,  $\Phi$  可因式化为

$$\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\mathbf{P} \cdot \mathbf{R} - Et) \right\} \quad (9.5.39)$$

其中  $E$  是体系的总能量而  $\mathbf{P}$  是质心动量, 于是得到

$$\begin{cases} \left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = \epsilon \psi(\mathbf{r}) \\ \epsilon = \frac{1}{2Mc^2} (E^2 - M^2 c^4 - P^2 c^2) \end{cases} \quad (9.5.40)$$

以后令  $\mathbf{P} = 0$ , 记体系的结合能  $B = Mc^2 - E$ , 则可见

$$B = Mc^2 \left[ 1 - \left( 1 + \frac{2\epsilon}{Mc^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (9.5.41)$$

令人惊异的是: 当计入反粒子效应之后, 定态薛定谔方程的形状居然没有变化, 只不过在束缚态情形下, 右端的本征值  $\epsilon$  不应直接等同于  $(-B)$ , 而应由(9.5.41)式从  $\epsilon$  算出  $B$  来. 注意  $\epsilon$  有一下界  $-\frac{1}{2}Mc^2$ , 即  $E_{\min} = 0$ .

## 二、应用举例:重夸克偶素

在粒子物理中,重夸克偶素如  $c\bar{c}$ ,  $b\bar{b}$  统记为  $Q\bar{Q}$ , 常用薛定谔方程和势模型来分析. 最简单的势被假设为线性势

$$V(r) = \sigma r \quad (9.5.42)$$

$r$  是  $Q$  与  $\bar{Q}$  间的距离,  $\sigma$  称为“弦张力常数”. 对于  $s$  态, 定态薛定谔方程解析地给出

$$\epsilon_n = \lambda_n \left( \frac{\sigma^2}{2\mu} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (9.5.43)$$

其中  $\lambda_n$  是 Airy 函数的零点<sup>[33]</sup>,  $\mu$  是夸克的约化质量, 则从(9.5.40)式给出  $Q\bar{Q}$  体系的总能量等于

$$E_n = 4\mu \left[ 1 + \frac{\lambda_n}{2} \left( \frac{\sigma^2}{2\mu^4} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (9.5.44)$$

其中  $\mu = \frac{m}{2} = \frac{M}{4}$ ,  $m$  是夸克质量. 作为比较, 如果过去将本征值  $\epsilon$  直接作为结合能的负值, 即

$$\epsilon = E' - Mc^2 \quad (9.5.45)$$

则过去代替(9.5.44), 给出  $Q\bar{Q}$  能量为

$$E'_n = 4\mu' + \lambda_n \left( \frac{\sigma'^2}{2\mu'} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (9.5.46)$$

表 9.5.1 是对 Upsilon  $b\bar{b}$  的 6 个  $s$  态实测能量  $E_n^{\text{exp}}$  与由公式(9.5.44)或(9.5.46)拟合值的比较. 公式中两个参数  $\sigma$  和  $\mu$  是由  $n = 1$  和 2 两个实验值来定的, 从(9.5.44)式拟合得出  $b$  夸克的质量与张力常数分别为

$$\begin{cases} m_b = 2\mu = 4.326 \text{ GeV} \\ \sigma = 0.4530 \text{ GeV}^2 \end{cases} \quad (9.5.47)$$

而从(9.5.46)式拟合则得到

$$\begin{cases} m'_b = 2\mu' = 4.354 \text{ GeV} \\ \sigma' = 0.3804 \text{ GeV}^2 \end{cases} \quad (9.5.48)$$

对 Charmonium  $J/\psi = c\bar{c}$   $s$  态的类似拟合, (9.5.44)式给出

$$\begin{cases} m_c = 1.031 \text{ GeV} \\ \sigma = 0.4183 \text{ GeV}^2 \end{cases} \quad (9.5.49)$$

表 9.5.1 Upsilon  $b\bar{b}$  的  $s$  态能级

| $n$                      | 1        | 2      | 3      | 4      | 5      | 6      |
|--------------------------|----------|--------|--------|--------|--------|--------|
| $E_n^{\text{exp}}$ (GeV) | 9.460 37 | 10.023 | 10.355 | 10.580 | 10.865 | 11.019 |
| $E_n$ (GeV)              | 9.460 37 | 10.023 | 10.461 | 10.834 | 11.163 | 11.462 |
| $E_n'$ (GeV)             | 9.460 37 | 10.023 | 10.483 | 10.890 | 11.262 | 11.609 |
| $\lambda_n$              | 2.338    | 4.088  | 5.521  | 6.787  | 7.944  | 9.023  |

注:从表 9.5.1 看,当  $n$  增大时,  $E_n'$  似乎增大过快而  $E_n$  稍好一些.

而(9.5.46)式则给出

$$\begin{cases} m_c' = 1.155 \text{ GeV} \\ \sigma' = 0.2099 \text{ GeV}^2 \end{cases} \quad (9.5.50)$$

可见(9.5.48)与(9.5.50)中  $\sigma'$  值相差太大,而(9.5.47)与(9.5.49)中的  $\sigma$  比较接近.

倘若我们忽略势  $V(r) = \sigma r$  中  $\sigma$  对夸克质量的依赖性,便可以讨论对同样量子数能级的  $Q\bar{Q}$  质量  $E$  对夸克质量  $\mu$  的依赖关系. 理论的出发点是 Feynman-Hellmann 定理<sup>[34]</sup>:

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial \mu} = -\frac{1}{\mu} (\epsilon - \langle V \rangle) < 0 \quad (9.5.51)$$

由(9.5.40)式即得

$$\frac{\partial E}{\partial \mu} = -\frac{4}{E} (\epsilon - \langle V \rangle) + \frac{8\mu}{E} + \frac{E}{2\mu} \quad (9.5.52)$$

右端后两项是正的,将上式与 Virial 定理(见习题 1.3)

$$\epsilon - \langle V \rangle \equiv \langle T \rangle = \left\langle \frac{1}{2} r \frac{dV}{dr} \right\rangle \quad (9.5.53)$$

联系后,再用  $V(r) = \sigma r$  计算,便得到

$$\frac{\partial E}{\partial \mu} = \frac{1}{3} \frac{E}{\mu} + \frac{32}{3} \frac{\mu}{E} \quad (9.5.54)$$

另一方面,如用过去的  $E' = \epsilon + 4\mu'$ , 则有一阶线性微分方程

$$\frac{\partial E'}{\partial \mu'} = \frac{16}{3} - \frac{1}{3} \frac{E'}{\mu'} \quad (9.5.55)$$

记常数为  $C'$ , 此式积分易得其解为

$$E'(\mu') = 4\mu' + C'\mu'^{-\frac{1}{3}} \quad (9.5.56)$$

而(9.5.54)式也可用代换  $E = \sqrt{y}$  而线性化,再积分得到解为:

$$E(\mu) = (16\mu^2 + C\mu^{\frac{2}{3}})^{\frac{1}{2}} \quad (9.5.57)$$

为检验这两个式子,我们取  $(c\bar{c})$  的基态能级  $E_1 = 3.097 \text{ GeV}$  而去定(9.5.56)中的  $C'$  或(9.5.57)中的  $C$ , (同时用(9.5.48)或(9.5.47)中给出的  $\mu'$  或  $\mu$  值),则可估计  $(b\bar{b})$  的基态能级为

$$E'_1(b\bar{b}) = 9.214 \text{ GeV} \quad (9.5.58)$$

$$E_1(b\bar{b}) = 9.420 \text{ GeV} \quad (9.5.59)$$

而实验值为

$$E_1^{\text{exp}}(b\bar{b}) = 9.460 \text{ GeV} \quad (9.5.60)$$

类似地对  $c\bar{c}$  的 2S 能级(3.686 GeV)定出  $C'$  或  $C$  后可估计

$$E'_2(b\bar{b}) = 9.5922 \text{ GeV}$$

$$E_2(b\bar{b}) = 9.9562 \text{ GeV} \quad (9.5.61)$$

而实验值为

$$E_2^{\text{exp}}(b\bar{b}) = 10.023 \text{ GeV}$$

看来经过相对论性修正的薛定谔方程比过去确有所改进.至此我们理解了两点:

(1) 为什么对  $Q\bar{Q}$  体系用薛定谔方程会比较成功? 原因是其中的  $V(r)$  实际上是一种“四维标量势”,满足(9.5.36)式而不是满足(9.5.17)式的“矢量势”.

(2) 我们还可以进一步作(9.5.41)的修正.(但是看来当两个粒子质量相差悬殊时,还是用 Dirac 方程来作相对论性修正较好,见附录 9A.)

### 三、推广到多粒子 ( $n \geq 3$ ) 体系的情形

不难将方程(9.5.40)式推广到多粒子 ( $n \geq 3$ ) 体系.为此将第  $i$  个粒子(静质量  $m_i$ ) 在实验室(L系)和质心(CM)系的坐标分别记为  $r_i'$  和  $r_i$ ,质心

$$\text{坐标 } \mathbf{R} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{M} m_i \mathbf{r}_i' \quad (M = \sum_{i=1}^n m_i), \text{ 而 } \mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i' - \mathbf{R} \text{ 满足约束关系:}$$

$$\sum_{i=1}^n m_i \mathbf{r}_i = 0 \quad (9.5.62)$$

直接计算不难证明

$$\sum_{i=1}^n \frac{1}{m_i} \nabla_{r_i'}^2 = \frac{1}{M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + \sum_{i=1}^n \frac{1}{m_i} \nabla_{r_i}^2 - \frac{1}{M} \left( \sum_{i=1}^n \nabla_{r_i} \right) \cdot \left( \sum_{j=1}^n \nabla_{r_j} \right)$$

右端第三项可以弃去(因定态在质心系中的总动量等于零). 于是可类似于从(9.5.37)到(9.5.40)式的推导过程, 得到体系波函数为

$$\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}_i, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{P} \cdot \mathbf{R} - Et)\right] \quad (9.5.63)$$

而

$$\begin{cases} \left[ -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^n \frac{1}{m_i} \nabla_{\mathbf{r}_i}^2 + \sum_{i<j}^n V_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) \right] \psi = \varepsilon \psi \\ \varepsilon = \frac{1}{2Mc^2} (E^2 - M^2 c^4 - P^2 c^2) \end{cases} \quad (9.5.64)$$

注意因约束(9.5.62)式,  $n$  个  $\mathbf{r}_i$  中仅有  $(n-1)$  个是独立的.

## § 9.6 氢原子基态附近能级的研究

### 9.6A 氢原子基态附近能级概况, 超精细结构

作为本章的结束, 让我们再来研究氢原子基态附近的能级, 见图 9.6.1. 玻尔理论或薛定谔方程给出基态是  $n=1$  的  $s$  ( $l=0$ ) 态, 第一激发态  $n=2$  对  $s$  和  $p$  ( $l=1$ ) 态是简并的, 实际上因电子有自旋, 自旋-轨道耦合引起能级的精细结构(fs)分裂,  $p$  态分裂为  $p_{\frac{1}{2}}$  和  $p_{\frac{3}{2}}$ , 电子总角动量  $j = \frac{3}{2}$  的位于  $\frac{1}{2}$  之上, 这是由 Dirac 方程能够预言的(见 9.3B 节).

但按 Dirac 理论,  $2s_{\frac{1}{2}}$  能级与  $2p_{\frac{1}{2}}$  能级保持简并, 见(9.3.59)式, 然而实际上, 前者比后者高一些, 这是 1947 年 Lamb-Retherford 首先精密测出的, 称为 Lamb shift(莱姆移位), 目前的实验值为

$$E(2s_{\frac{1}{2}}) - E(2p_{\frac{1}{2}}) = 1\,057.845 \text{ MHz} \quad (9.6.1)$$

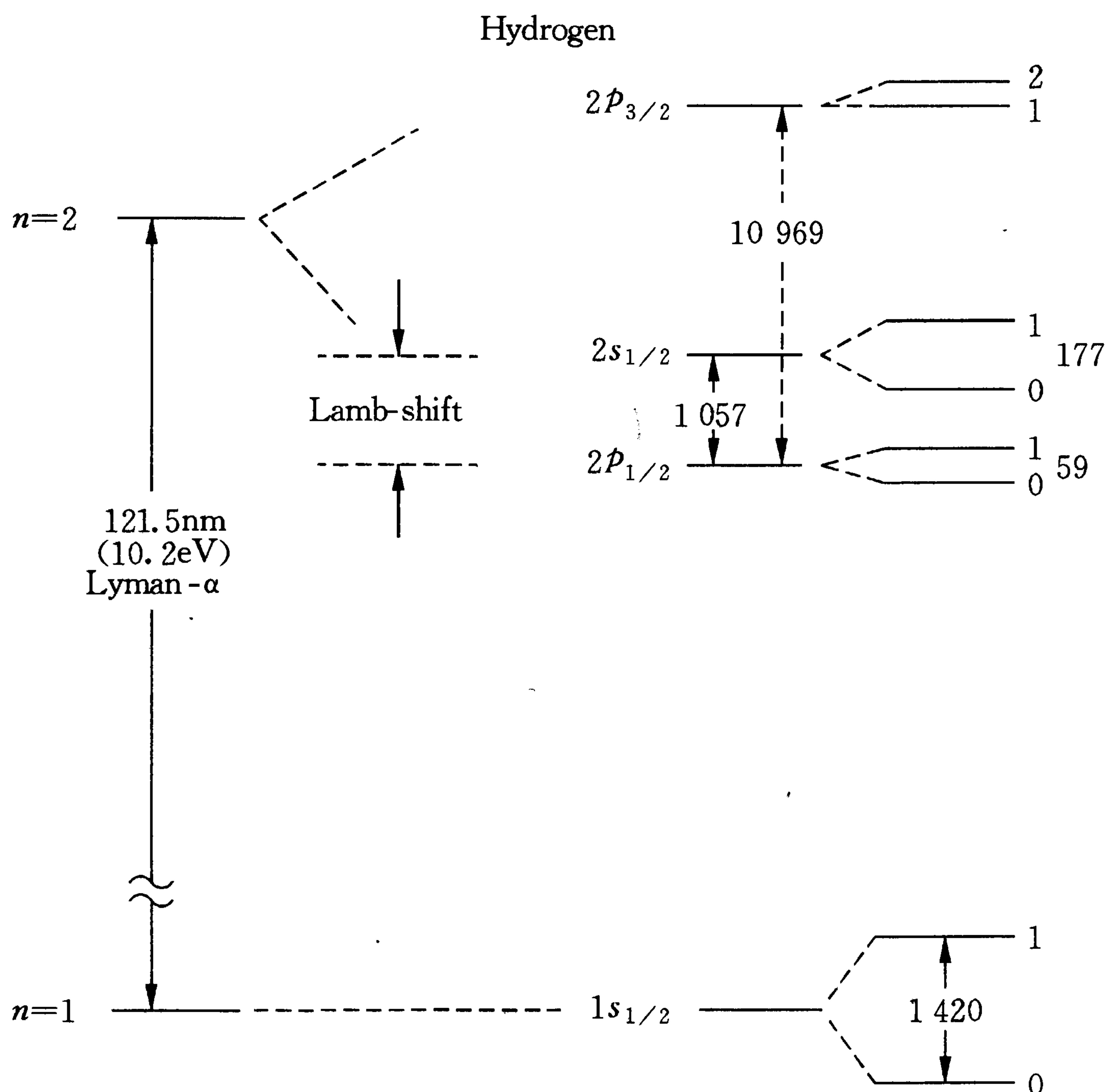
(9.6.1)式表示的能量很小, 必须用微波共振技术才能测准, 作为对比, 氢原子的 Rydberg 能量等于

$$R_y = R_H = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu_H = 3.288\,051\,28 \times 10^9 \text{ MHz} \quad (9.6.2)$$

Lamb shift(LS)仅为  $R_y$  的  $10^{-6}$  即  $o(\alpha^3)R_y$  量级, 其中精细结构常数

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = (137.035\,986\,5)^{-1} \quad (9.6.3)$$

我们将在下一小节和附录 9A 对 LS 作出理论上的解释.

图 9.6.1 氢原子基态 ( $n = 1$ ) 附近的能级

右半部表示出它的超精细结构, 各能级的能量分裂都用 MHz 表示,  
 $1\text{MHz} \approx 4.13 \times 10^{-9} \text{eV}$

实际上, 每个 fs 能级又都分裂为两个很靠近的能级, 称为超精细结构(hfs), 这是由于原子核有磁矩  $\mu_I$  与电子的自旋磁矩  $\mu_s$  相互作用的缘故<sup>[35]</sup>. 已知

$$\mu_s = -g_s \mu_B \mathbf{S} \quad (9.6.4)$$

$$\mu_I = g_I \mu_N \mathbf{I}$$

$\mathbf{s}$  和  $\mathbf{I}$  为电子和核的自旋角动量(已分出  $\hbar$ ),  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 5.78838263 \times$

$10^{-5} \text{eV} \cdot \text{T}^{-1}$  和  $\mu_N = \frac{e\hbar}{2m_p c} = 3.15245166 \times 10^{-8} \text{eV} \cdot \text{T}^{-1}$  分别是玻尔

磁子和核磁子(单位),  $g_s$  和  $g_I$  分别为电子和核的回转磁比率  $g$  因子. 对电子, Dirac 理论预告  $g_s = 2$ , 而实验值已达高精度为

$$g_s = 2 \times 1.00115965219 \quad (9.6.5)$$

对质子, 实测  $g_p = 5.58569$  与 Dirac 理论值 2 相差就更大了.

由于  $\mu_s$  与  $\mu_I$  像两个小磁针那样相互作用, 用量子力学计算可得 hfs

的能级移动为

$$\Delta E = \frac{1}{2} a_j \{F(F+1) - j(j+1) - I(I+1)\} \quad (9.6.6)$$

其中  $F$  是原子总角动量  $F = I + j = I + l + s$  的量子数, 对类氢原子, 式中  $a_j$  表达式为

$$a_j = \left( g_s \mu_B \frac{\mu_I}{I} \right) \left( \frac{Z}{a_n} \right)^3 \frac{1}{\left( l + \frac{1}{2} \right) j(j+1)} \quad (9.6.7)$$

其中  $a = \frac{\hbar}{\alpha m_e c} = 0.052\,917\,724\,9\text{nm}$ , 是玻尔半径.

对氢原子基态  $s_{\frac{1}{2}}$ ,  $l = 0$ ,  $j = \frac{1}{2}$ ,  $I = \frac{1}{2}$ , 将分裂成  $F = 0$  及  $F = 1$  两个 hfs 能级, 其劈裂的间距等于

$$\Delta E(F = 1) - \Delta E(F = 0) = a_{\frac{1}{2}} \equiv h\Delta\nu \quad (9.6.8)$$

其中  $a_{\frac{1}{2}}$  由(9.6.7)式中  $j = \frac{1}{2}$  及已知常数代入后可得理论值

$$\Delta\nu_{\text{理}} = 1.420\,403\,4(13)\text{GHz} \quad (9.6.9)$$

它与微波共振实验测得的

$$\Delta\nu_{\text{实}} = 1.420\,405\,751\,766\,7(10)\text{GHz} \quad (9.6.10)$$

相差仅有  $0.002\,3(13)\text{MHz}$ . (9.6.10)式表示实验精度达到  $0.7 \times 10^{-12}$ , 因此 1983 年国际度量衡委员会已规定时间单位“秒”的定义为“铯同位素  $^{133}\text{Cs}$  原子两超精细能级间跃迁产生的辐射周期  $T$  的  $9\,192\,631\,770$  倍”(辐射波长约  $3.26\text{cm}$ . 与氢原子(9.6.10)式对应的波长为  $21\text{cm}$ . 天文上观测到来自银河系和河外星系的  $21\text{cm}$  的微波, 证明了中性原子氢是宇宙中丰度最高(占  $\frac{3}{4}$ )的元素). 而长度单位“米”定义为“光在真空中经时间间隔  $(299\,792\,458)^{-1}$  秒所传播的路程长度”. 由此可见, 真空光速  $c$  被提升为基本常数后, “米”不再是一个基本的计量单位了.

### 9.6B 莱姆移位的定性解释——辐射修正

现在我们讨论图 9.6.1 上的  $2s_{\frac{1}{2}}$  能级略高于  $2p_{\frac{1}{2}}$  能级即所谓莱姆移位(LS)的问题. 既然薛定谔方程或 Dirac 方程都不能解释这一点, 可见它超出普通量子力学范畴而应该考虑电磁场量子化的效应. LS 的理论最早



由 H. A. Bethe 给出. 这里先介绍 Welton 对 LS 的定性解释(见文献 [36], 亦可见文献[1]).

在第四章已说明: 经量子化后, 每种模式的电磁场对应于一个谐振子, 它具有零点能量  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ . 这就是说, 即使在真空中也存在着电磁场的起伏, 虽然电场强度的平均值  $\langle E \rangle = 0$ , 它的平方平均值却不为零,  $\langle E^2 \rangle \neq 0$ . 起伏着的真空电场使原子中的电子位置因振动而弥散, 设这种无规振动位移为  $\delta r$ , 则电子“看”到的核库仑场也有一个弥散的范围, 平均的势能修正为

$$\begin{aligned} \langle \delta V \rangle &= \langle V(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) \rangle - \langle V(\mathbf{r}) \rangle \\ &= \left\langle \delta \mathbf{r} \cdot \nabla V + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \delta r_i \delta r_j \frac{\partial^2 V}{\partial r_i \partial r_j} \right\rangle \\ &\approx \frac{1}{6} (\delta r)^2 \nabla^2 V \end{aligned} \quad (9.6.11)$$

在点核库仑场中,  $\nabla^2 V(r) = 4\pi Ze^2 \delta(\mathbf{r})$  (见(9.3.18)式), 只有  $s$  态在原点的波函数不为零, (9.6.11)式才有贡献. 事实上, 对 Dirac 方程作合理近似后, 在(9.3.32~35)式中我们曾得到过这种能量修正, 称为 Darwin

项. 不过那里  $(\delta r)^2 = \frac{3}{4} \lambda_e^2$ ,  $\lambda_e = \frac{\hbar}{mc}$  是电子的 Compton 波长, 现在则必须

另外估计因电磁场量子化而引起的  $(\delta r)^2$ . 考虑电子在真空电场驱动下振

动的方程为  $\delta \ddot{\mathbf{r}} = -\frac{e}{m} \mathbf{E}$ , 作 Fourier 分解  $E(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int E_\omega \exp(-i\omega t) d\omega$ ,

$\delta \mathbf{r}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \delta r_\omega \exp(-i\omega t) d\omega$ , 则

$$\delta r_\omega = \frac{e E_\omega}{m \omega^2} \quad (9.6.12)$$

其平方的平均值等于\*:

$$\langle (\delta r_\omega)^2 \rangle = \frac{e^2}{m^2 \omega^4} \langle (E_\omega)^2 \rangle \quad (9.6.13)$$

$$\langle (\delta r)^2 \rangle = \frac{e^2}{m^2} \int \frac{d\omega}{\omega^4} \langle (E_\omega)^2 \rangle$$

为计算真空场强的平方平均值, 我们来看总的真空能量:

\*  $\langle (\delta r)^2 \rangle = \frac{1}{T} \int (\delta r)^2 dt = \frac{1}{T} \int (\delta r_\omega)^2 d\omega \equiv \int \langle (\delta r_\omega)^2 \rangle d\omega$ ,  $T$  是一足够长的时间.

$$\frac{1}{8\pi} \int d^3x (E^2 + B^2) = \sum_{\lambda=1}^2 \sum_k \frac{1}{2} \hbar \omega \quad (9.6.14)$$

将求和换为积分:  $\sum_k \rightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3k$ , ( $\hbar = c = 1$ ), 因  $\int d^3x E^2 = \int d^3x B^2$ , 便得到真空电磁场的平均能量密度等于 ( $\omega = |k|$ )

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{L^3} \int d^3x E^2 = \frac{2(4\pi)}{(2\pi)^3} \int d^3k \frac{\omega}{2} = \frac{2}{\pi} \int d\omega \omega^3 = \int d\omega \langle E_\omega^2 \rangle \quad (9.6.15)$$

(最右边的等式用了与上页脚注中相同的做法), 与(9.6.13)式比较后得到

$$\langle (\delta r)^2 \rangle = \frac{2e^2}{\pi m^2} \int \frac{d\omega}{\omega} \quad (9.6.16)$$

如果频率积分的上下限取为 0 到  $\infty$ , 我们便遇到对数发散. 这是量子理论超越量子力学而进入量子场论后的一种普遍现象. 这里仅从物理的考虑简单地将积分上、下限截断: 因为电子被束缚在类氢原子内, 不妨认为波长超过半径  $a = (Z\alpha m)^{-1}$  的电磁场对于强迫电子振动是无效的, 于是(9.6.16)式中频率  $\omega$  应有一下限  $\omega_{\min} \sim mZ\alpha$ ; 另一方面,  $\omega$  也应有一上限  $\omega_{\max} \sim m$ , 这是因为  $\omega > \omega_{\max}$  的贡献已作为电子的相对论性的本性而计入 Dirac 方程的 Darwin 项之内了. 于是近似地有  $\int \frac{d\omega}{\omega} \sim \ln\left(\frac{1}{Z\alpha}\right)$ , 而

$$\langle (\delta r)^2 \rangle = \left( \frac{2\alpha}{\pi} \ln \frac{1}{Z\alpha} \right) \left( \frac{1}{m} \right)^2 \quad (9.6.17)$$

于是由(9.6.11)式求得类氢原子  $nS$  态的能级移动等于

$$\begin{aligned} \Delta E_n &= \frac{4Z\alpha^2}{3} \left( \frac{1}{m} \right)^2 \left( \ln \frac{1}{Z\alpha} \right) |\psi_n(0)|^2 \\ &= \left[ \frac{8}{3\pi} \frac{Z^4 \alpha^3}{n^3} \left( \ln \frac{1}{Z\alpha} \right) \right] \left( \frac{1}{2} \alpha^2 m \right) \delta_{l0} \\ &\approx 668 \text{ MHz}, \quad (\text{当 } Z = 1, n = 2, l = 0) \end{aligned} \quad (9.6.18)$$

$p$  态 ( $l = 1$ ) 电子在原点的波函数为零, 在上述定性讨论中不受真空电磁场的影响, 所以(9.6.18)式就是类氢原子中 LS 非协变形式的定性解释: LS 是原子中束缚态( $s$  态)电子受真空中起伏着的电磁场作用, 即吸放“虚光子”而引起能级(向上)移动的结果, 这种量子场论中的修正叫做辐射修正.

然而由于  $2p_{\frac{1}{2}}$  能级到基态  $1s_{\frac{1}{2}}$  能级之间有很强的单光子  $E1$  跃迁(波

长 121.5nm), 寿命  $\tau \sim 10^{-9}$  秒, 对应  $2p_{\frac{1}{2}}$  态的能级宽度达 100MHz, 所以实验上很难进一步提高(9.6.1)式表示的测量精度. 近年来随着实验技术的进步, 物理学家注意力集中到  $1s-2s$ ,  $2s-4s$  和  $2s-4d$  等双光子跃迁上来, 它们各自的谱线自然宽度只有 1.3Hz, 0.704MHz 和 4.36MHz. 利用激光的分频、倍频和测量“拍频”(beat frequency)等新技术, 已成功地测出氢原子如下的组合能级差(取超精细结构的“质心”)[37]

$$\begin{aligned}\Delta &= (E_{4s} - E_{2s}) - \frac{1}{4}(E_{2s} - E_{1s}) \\ &= 4\,797.338(10) \text{ MHz}\end{aligned}\quad (9.6.19)$$

理论上, 在 Dirac 方程基础上, 对应于 Bohr 能级的最主要的贡献在这样组合下都消去了, 进一步讨论请见附录 9A.

1997 年的一个实验[38]直接测量  $1s \sim 2s$  跃迁的频率为

$$f_{1s \sim 2s} = 2\,466\,061\,413\,187.34(84) \text{ kHz}\quad (9.6.20)$$

精度达到  $3.4 \times 10^{-13}$ , 这在物理学史上是空前的, 并认为今后还可能测量到 1Hz 以下的精度(见文献[39]). 从(9.6.20)结合其他精密测量数据, 如  $\alpha^{-1} = 137.035\,999\,44(57)$  与  $\frac{m_p}{m_e} = 1\,836.152\,666\,5(40)$  等可导出 Rydberg 常数

$$R_\infty = 10\,973\,731.568\,639(91) \text{ m}^{-1}\quad (9.6.21)$$

## 附录 9A 莱姆移位的一种半定量计算方法

1990 年后, 随着激光研究中倍频、分频等变频技术的进步, 除对 H 或氘(D)原子的莱姆移位(LS)测量精度提高到[37][40]:

$$L_{2s-2p}^{(H)} \equiv E_H(2s_{\frac{1}{2}}) - E_H(2p_{\frac{1}{2}}) = 1\,057.845 \text{ MHz}\quad (9A.1)$$

$$L_{2s-2p}^{(D)} \equiv E_D(2s_{\frac{1}{2}}) - E_D(2p_{\frac{1}{2}}) = 1\,059.230 \text{ MHz}\quad (9A.2)$$

外, 还测量了如下的能级差:

$$\begin{aligned}\Delta &\equiv E_H(4s) - E_H(2s) - \frac{1}{4}[E_H(2s) - E_H(1s)] \\ &= 4\,797.338(10) \text{ MHz}\end{aligned}\quad (9A.3)$$

$$\begin{aligned}\Delta' &\equiv E_{\text{H}}(4d_{\frac{5}{2}}) - E_{\text{H}}(2s) - \frac{1}{4}[E_{\text{H}}(2s) - E_{\text{H}}(1s)] \\ &= 6\,490.144(24) \text{ MHz}\end{aligned}\quad (9A.4)$$

(对氦分别为 4 801.693(20)MHz 和 6 494.841(41)MHz)

上式中的组合使最重要的 Bohr 能级项彼此消去,再分出由 Dirac 方程导出的相对论性修正  $\Delta_{\text{DC}}$  和核的有限质量(约化质量)修正  $\Delta_{\text{RM}}$  后,记

$$\Delta = \Delta_{\text{DC}} + \Delta_{\text{RM}} + \frac{1}{4}L_{1s} - \frac{5}{4}L_{2s} + L_{4s}\quad (9A.5)$$

有时称后 3 项之和为超 LS(Hyper LS, 记为 HLS),再由此推导出 1s 态的(绝对)LS,即  $L_{1s}$  项,文献[37]给出:

$$L_{1s}^{(\text{H})} = 8\,172.874(60) \text{ MHz}\quad (9A.6)$$

$$L_{1s}^{(\text{D})} = 8\,183.807(78) \text{ MHz}\quad (9A.7)$$

理论上认为:对一个能级的 LS 作出贡献的辐射修正中,一个电子放、吸一个虚光子所引起的电子自能修正是最主要的;其次是真空极化修正,即一个光子与虚的正负电子对相互转变所引起的对电荷的修正.电子自能的计算已经 50 多年,仍感复杂,问题不少,见[39].

文[41]试图对电子自能修正探讨一种简单的半定量计算方法,目的是将计算值与实验值(9A.1)、(9A.2)及由(9A.3)、(9A.4)式导出的实验值:

$$\Delta E_{4d-4s}^{(\text{H})} \equiv E_{\text{H}}(4d_{\frac{5}{2}}) - E_{\text{H}}(4s_{\frac{1}{2}}) = 1\,692.806 \text{ MHz}\quad (9A.8)$$

$$\Delta E_{4d-4s}^{(\text{D})} \equiv E_{\text{D}}(4d_{\frac{5}{2}}) - E_{\text{D}}(4s_{\frac{1}{2}}) = 1\,693.148 \text{ MHz}\quad (9A.9)$$

相比较,我们的结果表明,计算误差对(9A.1)、(9A.2)小于 0.2%,而对(9A.8)式则达 1.6%,再如与(9A.3)式或(9A.6)式进行比较,误差将更大些,最后将讨论其原因.

### 一、电子自能修正的非协变计算

我们采用非协变形式的理论来研究类氢原子,则零级近似下的定态薛定谔方程为:

$$H_0 \Psi_n = \epsilon_n \Psi_n\quad (9A.10)$$

$$H_0 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}\quad (9A.11)$$

$$\epsilon_n = -\frac{Z^2 \alpha^2 \mu}{2n^2} = -\frac{Z^2}{n^2} R_y \quad (9A.12)$$

对氢 ( $Z = 1$ ) 的 Rydberg 常数

$$R_y = R_H = \frac{1}{2} \alpha^2 \mu = 3.288\,051\,28 \times 10^9 \text{ MHz} \quad (9A.13)$$

通过规则  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$  (电子电荷  $-e$ ) 引入与电磁场的耦合, 则在  $H_0$  基础上, 增加一项相互作用哈密顿量 (取库仑规范条件  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ )

$$H^{(1)} = \frac{e}{\mu c} \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \quad (9A.14)$$

再考虑电子有自旋磁矩, 又与电磁场有相互作用

$$H^{(2)} = \frac{ge\hbar}{4\mu c} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \hat{\mathbf{A}} \quad (9A.15)$$

其中  $g$  为电子的回转磁比率

$$g = 2 \times 1.001\,159\,652\,193 \quad (9A.16)$$

而  $\hat{\mathbf{A}}$  为量子化的电磁场矢势 (见 (4.2.23) 式)

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\frac{2\pi}{V}} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{\omega_{\mathbf{k}}}} \sum_{\lambda=1,2} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k},\lambda} (\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}(t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) \quad (9A.17)$$

其中  $\mathbf{k}$  为光子的波矢,  $\omega_{\mathbf{k}} = |\mathbf{k}| = k$  是其能量, ( $\hbar = c = 1$ ),  $\lambda$  表示两种横向极化态, 而  $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$  和  $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$  则是光子的湮没和产生算符.

现在考虑在质心系中一个动量为  $\mathbf{p}$  的自由电子, 它通过放、吸一个虚光子而使其能量在  $\epsilon_p = \frac{1}{2\mu} p^2$  基础上获得增量

$$\Delta E_p^{(j)} = \sum_i \frac{|\langle i | H^{(j)} | \mathbf{p} \rangle|^2}{\epsilon_p - \epsilon_i}, \quad (j = 1, 2) \quad (9A.18)$$

其中初态在体积  $V$  中是归一化的,  $|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})$ , 而  $|i\rangle$  表示中间态, 是一个

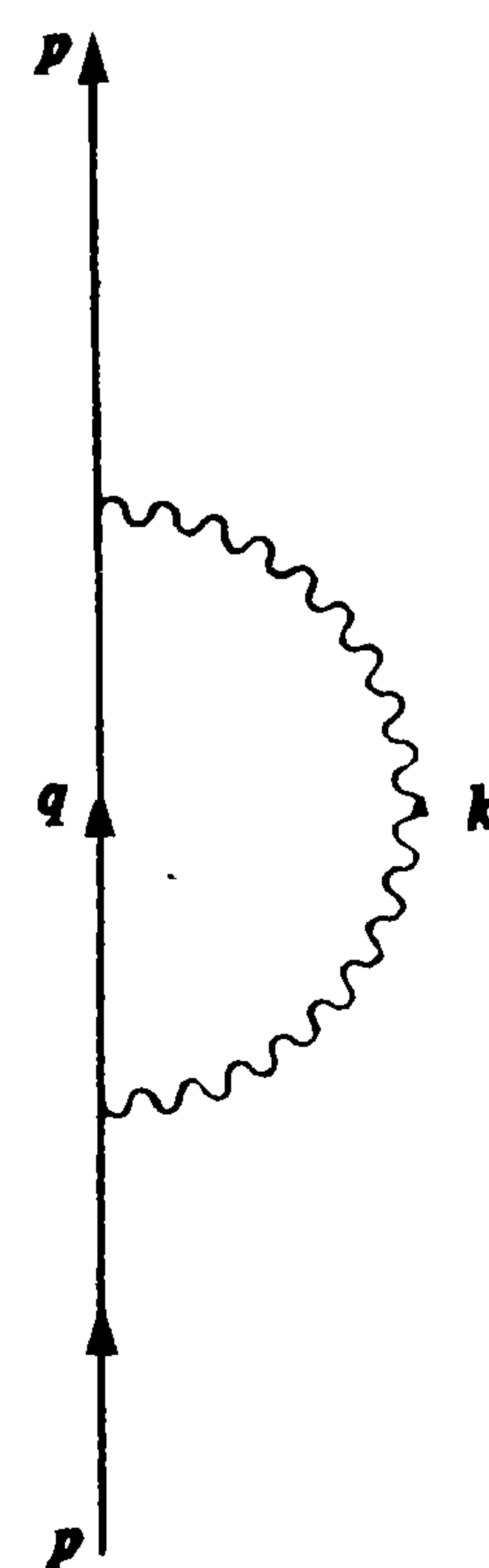


图 9A.1 在非协变形式 QED 中计算电子自能辐射修正的一圈图, 在两个顶角上用  $H^{(1)}$  或  $H^{(2)}$ , 它们之间没有干涉项, 因电子平面波态无极化

动量为  $\mathbf{q}$  的虚电子和一个动量为  $\mathbf{k}$  的虚光子,如图 9A.1 所示,中间态能量等于

$$\varepsilon_i = \varepsilon_q + \omega_k = \frac{1}{2\mu}q^2 + k \quad (9A.19)$$

若  $\mathbf{q}$  和  $\mathbf{k}$  都改取连续谱,则对  $H^{(1)}$  的矩阵元作空间积分后,可将一个  $\delta$  函数  $\delta(\mathbf{p} - \mathbf{q} - \mathbf{k})$  用  $\frac{V}{(2\pi)^3}$  代替,完成对  $\mathbf{q}$  的积分,易得

$$\Delta E_p^{(1)} = -\frac{\alpha p^2}{\pi\mu} \int_{-1}^1 d\eta (1 - \eta^2) I \quad (9A.20)$$

$$I = \int_0^\infty \frac{dk}{k + \xi} \quad (9A.21)$$

其中  $\eta = \cos\theta$ ,  $\theta$  是  $\mathbf{k}$  与  $\mathbf{p}$  的夹角,  $\xi = 2(\mu - p\eta)$ .

## 二、质量“重正化”是“重新确认质量”的步骤

像对 QED 作协变计算时那样,这里也遇到发散积分(9A.21),我们依照文献[42~48]中的精神,在下面采取一种十分简单而有效的正规化——重正化方法.将(9A.21)式对  $\xi$ (具有质量量纲)求偏导一次:

$$\frac{\partial I}{\partial \xi} = -\int_0^\infty \frac{dk}{(k + \xi)^2} = -\frac{1}{\xi} \quad (9A.22)$$

它现在收敛了,再将它对  $\xi$  积分回到  $I$ :

$$I = -\ln\xi + C_1 \quad (9A.23)$$

其中出现一个任意常数  $C_1$ .将(9A.23)式代回(9A.20)式得到

$$\begin{aligned} \Delta E_p^{(1)} &= \frac{\alpha\mu}{\pi} \left\{ \left[ \frac{2}{3} \left( \frac{p}{\mu} \right)^2 + \frac{p}{\mu} - \frac{\mu}{3p} \right] \ln \left( 1 + \frac{p}{\mu} \right) \right. \\ &\quad + \left[ \frac{2}{3} \left( \frac{p}{\mu} \right)^2 - \frac{p}{\mu} + \frac{\mu}{3p} \right] \ln \left( \left| 1 - \frac{p}{\mu} \right| \right) \\ &\quad \left. - \frac{16}{9} \left( \frac{p}{\mu} \right)^2 + \frac{2}{3} + \left( \frac{4}{3} \ln 2 + \frac{4}{3} \ln \mu - \frac{4}{3} C_1 \right) \left( \frac{p}{\mu} \right)^2 \right\} \\ &= b_1^{(1)} p^2 + b_2^{(1)} p^4 + \dots \end{aligned} \quad (9A.24)$$

$$b_1^{(1)} = \frac{\alpha}{\pi\mu} \left( \frac{4}{3} \ln 2 + \frac{4}{3} \ln \mu - \frac{4}{3} C_1 \right) \quad (9A.25)$$

$$b_2^{(1)} = \frac{\alpha}{\pi\mu^3} \left( -\frac{2}{15} \right) \quad (9A.26)$$

注意： $b_1^{(1)} p^2$  这一项将与(9A. 11)式中无自旋粒子的动能项合并，它们是不可分辨的，任意常数  $C_1$  的出现恰好反映了下述事实：我们不能通过微扰论计算  $\Delta E_p^{(1)}$  来得到电子的约化质量。所以选择  $b_1^{(1)} = 0$  来确认  $\mu$  的数值(但  $\mu$  还不是最后可观察的质量，见下)。总之， $\mu$  是由实验确定的而不是理论计算的。

类似地讨论  $H^{(2)}$ ，它会引起状态  $\left| \mathbf{p}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle$  与  $\left| \mathbf{q}, \pm \frac{1}{2} \right\rangle$  之间的自旋 flip 过程，于是

$$\Delta E_p^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{i, S_z = \pm \frac{1}{2}} \frac{|\langle i | H^{(2)} | \mathbf{p}, S_z \rangle|^2}{\epsilon_p - \epsilon_i} = -\frac{\alpha g^2}{8\pi\mu} \int_{-1}^1 d\eta J \quad (9A. 27)$$

$$J = \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{k + \xi} \quad (9A. 28)$$

这个发散积分需要对  $\xi$  求 3 次偏导：

$$\frac{\partial^3 J}{\partial \xi^3} = -\frac{2}{\xi}$$

$$J = -\xi^2 \ln \xi + C_2 \xi^2 + C_3 \xi + C_4 \quad (9A. 29)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_p^{(2)} &= \frac{g^2 \alpha \mu}{4\pi} \left\{ \frac{2\mu}{3p} \left[ \left(1 + \frac{p}{\mu}\right)^3 \ln\left(1 + \frac{p}{\mu}\right) - \left(1 - \frac{p}{\mu}\right)^3 \ln\left(\left|1 - \frac{p}{\mu}\right|\right) \right] \right. \\ &\quad \left. - \frac{22}{9} \left(\frac{p}{\mu}\right)^2 - \frac{4}{3} + 4(\ln 2 + \ln \mu) - 4C_2 - \frac{2C_3}{\mu} - \frac{C_4}{\mu^2} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{4}{3} \ln 2 + 2 + \frac{4}{3} \ln \mu - \frac{4}{3} C_2\right) \left(\frac{p}{\mu}\right)^2 \right\} \\ &= b_0^{(2)} + b_1^{(2)} p^2 + b_2^{(2)} p^4 + \dots \quad (9A. 30) \end{aligned}$$

$$b_0^{(2)} = \frac{g^2}{4} \frac{\alpha \mu}{\pi} \left[ 4(\ln 2 + \ln \mu) - 4C_2 - \frac{2C_3}{\mu} - \frac{C_4}{\mu^2} \right] \quad (9A. 31)$$

$$b_1^{(2)} = \frac{g^2}{4} \frac{\alpha}{\pi \mu} \left( \frac{4}{3} \ln 2 + 2 + \frac{4}{3} \ln \mu - \frac{4}{3} C_2 \right) \quad (9A. 32)$$

$$b_2^{(2)} = \frac{g^2}{4} \frac{\alpha}{\pi \mu^3} \left( -\frac{1}{15} \right) \quad (9A. 33)$$

现在我们来确定 3 个任意常数  $C_2$ ,  $C_3$  和  $C_4$ ，首先， $b_1^{(2)} p^2$  项应与  $\frac{p^2}{2\mu}$  项合并，但  $\mu$  既已确定，由于电子自旋而引起的进一步对  $\mu$  的修正便应是

有限而确定的,故  $C_2$  的惟一可能选择是消去  $b_1^{(2)}$  中的不确定项:  $C_2 = \ln\mu$ . 于是

$$b_1^{(2)} = \frac{\beta}{2\mu}, \quad \beta = \frac{g^2\alpha}{2\pi} \left( \frac{4}{3} \ln 2 + 2 \right) \quad (9A.34)$$

另外,必须选择常数  $C_3$  和  $C_4$  使得  $b_0^{(2)} = 0$ , 这表示我们理论的出发点是没有静能项的方程(9A.10), 而电子和原子核的质量都确定了.

由此可见,  $b_1^{(2)} p^2$  使  $\mu$  经过确定而有限的修正后变为可观察的

$$\mu_{obs} = \frac{\mu}{1 + \beta} \quad (9A.35)$$

然而,我们要考虑电子的相对论性能量(在质心系):

$$\sqrt{\mu^2 + p^2} = \mu + \frac{p^2}{2\mu} - \frac{p^4}{8\mu^3} + \dots \quad (9A.36)$$

第三项  $\left(-\frac{p^4}{8\mu^3}\right)$  在(9A.11)中虽未明显出现,但(9A.35)所表示的对  $\mu$  的修正也引起相应的改变  $-\frac{1}{8} \left(\frac{1}{\mu_{obs}^3} - \frac{1}{\mu^3}\right) p^4$ , 它应作为看不见的“本底”从可观察的辐射修正引起的  $p^4$  项中减去,(相对论性修正是另外做的,见下). 所以,合并  $H^{(1)}$  和  $H^{(2)}$  的贡献,我们有

$$b_1 = b_1^{(1)} + b_1^{(2)} = b_1^{(2)} \quad (9A.37)$$

而“重正化”后的

$$\begin{aligned} b_2^R &= b_2^{(1)} + b_2^{(2)} + \frac{1}{8\mu^3} (3\beta + 3\beta^2 + \beta^3) \\ &\approx \frac{\alpha}{\pi\mu_{obs}^3} (1.998082) \end{aligned} \quad (9A.38)$$

最后一步中根据微扰论的精神,略去  $O(\alpha^2)$  的项并取  $\mu \approx \mu_{obs}$ , 以后简记  $\mu_{obs}$  为  $\mu$ ,  $b_2^R$  为  $b_2$ .

### 三、相对于玻尔能级移位的半定量计算

1. 电子自能修正  $\Delta E_{Znl}^{Rad}$ . 在导出(9A.38)式后,我们不难计算在(9A.10)式定态  $|Znl\rangle$  中  $b_2 p^4$  项引起的自能修正,用(9.3.25)式后即得

$$\Delta E_{Znl}^{Rad} = \left[ \frac{8n}{(2l+1)} - 3 \right] \frac{b_2 Z^4}{n^4 a^4} \quad (9A.39)$$

其中  $a = \frac{1}{\alpha\mu}$  是玻尔半径.



2. 相对论性修正由 Dirac 方程定态能量中  $m$  改成  $\mu$  而给出(见(9.3.59)式):

$$\Delta E_{Znj}^{Rel} = -R_y \frac{Z^4 \alpha^2}{n^4} \left( \frac{n}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) \quad (9A.40)$$

3. 真空极化修正, 仍用协变形式 QED 中一圈图诱导 Uehling 势的结果<sup>[1, 2]</sup>, 它只对  $s$  态有(负的)贡献:

$$\Delta E^{VP} = -\frac{8\alpha^3 Z^4}{15\pi n^3} \left( \frac{\mu}{m} \right)^2 R_y \delta_{l0} \quad (9A.41)$$

4. 原子核有半径  $r_N$  而引起对  $s$  态电子的能量修正:

$$\Delta E^{Nu} = \frac{4}{5} \frac{Z^4}{n^3} \left( \frac{r_N}{a} \right)^2 R_y \delta_{l0} \quad (9A.42)$$

这 4 项贡献中, 1 和 2 是最主要的, 3 次之, 4 最小.

5. 对氢原子,  $Z = 1$ ,  $m_p = 1836.1527m_e$ ,  $r_p = 0.862\text{fm}$ ,

$$\frac{b_2}{a^4} = 1625.2796\text{MHz} \quad (9A.43)$$

$$\Delta E_{2s\frac{1}{2}-2p\frac{1}{2}}^{Rad} = \frac{2}{3} \frac{b_2}{a^4} = 1083.5197\text{MHz}$$

$$\Delta E_{2s\frac{1}{2}}^{VP} = -27.0845\text{MHz}$$

$$\Delta E_{2s\frac{1}{2}}^{Nu} = 0.0865\text{MHz}$$

故  $2s\frac{1}{2} - 2p\frac{1}{2}$  态  $LS$  的理论值为

$$L_{2s-2p}^{(H)th} = 1056.522\text{MHz} \quad (9A.44)$$

这比实测值(9A.1)式约小 0.13%.

6. 对氘原子,  $m_d = 3670.4831m_e$ ,  $r_d = 2.115\text{fm}$ , 可得

$$L_{2s-2p}^{(D)th} = 1057.229\text{MHz} \quad (9A.45)$$

这比实验值(9A.2)式约小 0.19%.

7. 对氢原子  $4d\frac{5}{2} - 4s\frac{1}{2}$  的能级差((9A.8)式), 相对论性修正是最大的一项:

$$\Delta E_{4d-4s}^{Rel} = 1823.8875\text{MHz}$$

而电子自能修正退居第二位, 且为负值:

$$\Delta E_{4d-4s}^{Rad} = -\frac{1}{10} \frac{b_2}{a^4} = -162.528\text{MHz}$$

再加上较小的  $\Delta E_{4d-4s}^{VP} = 3.3856\text{MHz}$  及更小的  $\Delta E_{4d-4s}^{Nu} = -0.0108\text{MHz}$ , 最后得到

$$\Delta E_{4d-4s}^{(H)th} = 1664.734\text{MHz} \quad (9A.46)$$

这比实验值(9A.8)式小 1.66%。

8. 如果直接与实测的(9A.3)式比较(简记为 HLS), 则

$$\Delta E^{Rel}(\text{HLS}) = 3932.7576\text{MHz}$$

$$\Delta E^{Rad}(\text{HLS}) = 565.0386\text{MHz}$$

$$\Delta E^{VP}(\text{HLS}) = -23.6989\text{MHz}$$

$$\Delta E^{Nu}(\text{HLS}) = 0.0757\text{MHz}$$

加起来得理论值

$$\Delta^{th} = E_{4s} - \frac{5}{4}E_{2s} + \frac{1}{4}E_{1s} = 4474.173\text{MHz} \quad (9A.47)$$

这比实验值(9A.3)式小了 6.7%。

9. 如果从理论上直接算氢原子 1s 态的 LS, 则

$$\Delta E_{1s}^{Rad} = 5 \frac{b_2}{a^4} = 8126.398\text{MHz}$$

此时按文献[37]定义, 不计相对论性修正, 但加上  $\Delta E_{1s}^{VP}$  和  $\Delta E_{1s}^{Nu}$ , 得

$$L_{1s}^{(H)th} = 7910.414\text{MHz} \quad (9A.48)$$

这比文献[37]所给之(9A.6)式约小 3.2%。

#### 四、总结与讨论

1. 类氢原子能级与玻尔能级偏离值的半定量计算是(9A.39)、(9A.40)、(9A.41)和(9A.42)四式之和, 其中(9A.39)式是新导出的对电子自能的修正。

2. 关键点(observation)在于: 电子自能的辐射修正诱导出一项  $b_2 p^4$ , 而系数  $b_2$  可以在非协变的 QED 微扰论计算中得出。

3. 计算中对发散的处理清楚地表明: 所谓质量重正化乃是对质量的重新确认过程. 电子质量是我们所不能计算的, 我们只能算它的修正, 事实上, LS 可视为电子在不同束缚状态下的质量修正. 注意, 我们必须在“确认”之后, 才能作“修正”, 不能跳过第一步, 也不能“两步并一步走”。

4. (9A. 46)、(9A. 47)、(9A. 48)等式的计算结果系统地偏小,原因可能是:(1)我们用了非相对性的电子波函数计算自能修正,这对  $s$  态引起的误差可能较大;(2)用 Dirac 方程计算相对论性修正(用  $m$  换成  $\mu$  计入核的有限质量)也值得怀疑. 在我们看来,电子被核束缚时,电子内部隐藏的反粒子场成分随结合能增大而增大,但在 Dirac 方程中核被当成一个不变的势场中心. 而实际上核也应该有一些变化(也有一些反粒子场成分). (3)其他高阶 QED 修正等等.

5. 这里用非协变 QED 微扰论计算的公式连同图 9A. 1. 1,并没有出现明显的反粒子虚态. 事实上, QED 不允许在一个顶角上湮没一个电子而产生一个正电子;同时湮没或产生一对正负电子虽然是允许的,却又会在所谓“时间反向”的费曼图中出现同一时间内存在两个同样动量( $p$ )的电子,而这是 Pauli 不相容原理所禁戒的.

所以,在我们看来,只要  $q \neq 0$ , 这个虚态电子内部也就隐藏有反粒子(正电子)场的相干激发,理论虽然还是近似的,但本质上已是相对论性的了. 所以这里的计算在实际上已经给“狭义相对论本质在于正粒子中隐藏有反粒子场”这一观点以新的支持.

6. 用量子场论(QFT)的术语来说,在这里非协变形式的微扰论中,虚态粒子是“在质壳上”的,即它们自由运动时的能量、动量( $q$ )和质量( $m$ 或 $\mu$ )满足 SR 中的四维协变关系,但虚态能量可以不守恒(这里  $\epsilon_i \neq \epsilon_p$ ),而在相互作用顶角上,三维动量守恒. 另一方面,在协变的 QFT 中,虚态粒子“不在质壳上”,即它们四维动量的各个分量完全独立地变化,但在顶角上四维动量都守恒. 协变或非协变,只是形式上的差别,本质上都应该是相对论性的. 当然,做近似计算时结果可能不同.

## 附录 9B 中微子是超光速粒子吗?

### 一、引言——中微子有静质量与宇称不守恒是矛盾的

1970 年后,氚的  $\beta$  衰变等实验逐渐表明中微子可能具有非零的质量,问题立刻变得尖锐起来:假如中微子是亚光速的 Dirac 粒子,它决不可能是永久纵向极化(即二分量)的(见 § 3. 8C). 换言之,一旦中微子有静止质量  $m_\nu$ ,不论多么小,必定与宇称不守恒的实验事实相矛盾<sup>[50]</sup>. 质量  $m_\nu$  是根据相对论公式

$$E^2 = p^2 c^2 + m_\nu^2 c^4 \quad (9B. 1)$$

来定义的,由于实验极为困难,精度(置信度)一直不高,2000 年的全球平

均值是<sup>[51]</sup>:

$$m^2(\nu_e) = -2.5 \pm 3.3 \text{ eV}^2 \quad (9B.2)$$

$$m^2(\nu_\mu) = -0.016 \pm 0.023 \text{ MeV}^2 \quad (9B.3)$$

在物理学界,绝大多数人并不重视这个负号,只有极少数人如 Chodos 等<sup>[52]</sup>和张操<sup>[53]</sup>,把  $m_\nu^2$  改记为  $-m_s^2$ ,称正实数  $m_s$  为“固有质量”或“快子质量”,则很容易推出:

$$E = \frac{m_s c^2}{\sqrt{\frac{u^2}{c^2} - 1}}, \quad p = \frac{m_s u}{\sqrt{\frac{u^2}{c^2} - 1}} \quad (9B.4)$$

$$E^2 = p^2 c^2 - m_s^2 c^4 \quad (9B.5)$$

可见快子(超光速粒子)的速度  $u > c^*$ . 为了从量子理论导出(9B.5)式这个运动学关系,张操仿照 Dirac 的做法(§ 9.1B),找到了一个 Dirac 型的方程<sup>[57]</sup>. 下面我们将 Dirac 方程与这个方程的分解形式进行比较<sup>[58, 59]</sup>.

## 二、Dirac 方程与超光速方程之比较

| Dirac 方程  | 超光速方程  |
|---|--|
| $\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_D = ic\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \chi_D + m_0 c^2 \varphi_D \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi_D = ic\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi_D - m_0 c^2 \chi_D \end{cases}$ | $\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi = ic\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \chi + m_s c^2 \varphi \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi = ic\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi - m_s c^2 \chi \end{cases} \quad (9B.6)$ |
| $\xi_D = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_D + \chi_D), \quad \eta_D = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_D - \chi_D)$   | $\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi + \chi), \quad \eta = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi - \chi) \quad (9B.7)$   |
| $\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \xi_D = ic\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \xi_D + m_0 c^2 \eta_D \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \eta_D = -ic\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \eta_D + m_0 c^2 \xi_D \end{cases}$            | $\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \xi = ic\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \xi - m_s c^2 \eta \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \eta = -ic\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \eta + m_s c^2 \xi \end{cases} \quad (9B.8)$            |
| $\frac{\partial \rho_D}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_D = 0$  | $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (9B.9)$  |
| $\rho_D = \varphi_D^\dagger \varphi_D + \chi_D^\dagger \chi_D = \xi_D^\dagger \xi_D + \eta_D^\dagger \eta_D$  | $\rho = \varphi^\dagger \chi + \chi^\dagger \varphi = \xi^\dagger \xi - \eta^\dagger \eta \quad (9B.10)$   |
| $\begin{aligned} \mathbf{j}_D &= -c(\varphi_D^\dagger \boldsymbol{\sigma} \chi_D + \chi_D^\dagger \boldsymbol{\sigma} \varphi_D) \\ &= -c(\xi_D^\dagger \boldsymbol{\sigma} \xi - \eta_D^\dagger \boldsymbol{\sigma} \eta) \end{aligned}$                         | $\begin{aligned} \mathbf{j} &= -c(\varphi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \chi + \chi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \varphi) \\ &= -c(\xi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \xi + \eta^\dagger \boldsymbol{\sigma} \eta) \end{aligned} \quad (9B.11)$                          |

\* 在2000年,有两个实验<sup>[54, 55]</sup>分别测出微波或激光脉冲的运动是超光速的,其讨论见文献<sup>[56]</sup>. 本附录进一步提出超光速问题,也希望引起物理学界的注意和讨论.

以平面波试解代入方程(9B. 6)或(9B. 8):

$$\varphi \sim \chi \sim \xi \sim \eta \sim \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right] \quad (9B. 12)$$

立刻得到(9B. 5)式以及

$$\chi = \frac{cp - m_s c^2}{E} \varphi, \quad \left(\left|\frac{\varphi}{\chi}\right| > 1, E > 0\right) \quad (9B. 13)$$

$$\eta = \frac{m_s c^2}{cp + E} \xi, \quad \left(\left|\frac{\xi}{\eta}\right| > 1, E > 0\right) \quad (9B. 14)$$

可见当  $E > 0$  时, 式(9B. 12)只能描写左旋粒子 ( $|\xi| > |\eta|, \rho > 0$ ), 而当  $E < 0$  时该式则只能描写右旋反粒子 ( $|\eta| > |\xi|, \rho < 0$ ). 把这个方程用到中微子, 恰好反映了  $\nu_L, \bar{\nu}_R$  存在而  $\nu_R, \bar{\nu}_L$  被禁戒的实验事实. 这一奇异性质的来源是由于在空间反演变换下,

$$\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}, \quad \xi(-\mathbf{x}, t) \rightarrow \eta(\mathbf{x}, t), \quad \eta(-\mathbf{x}, t) \rightarrow \xi(\mathbf{x}, t) \quad (9B. 15)$$

方程(9B. 8)不能保持不变, 而且因其第一项(质量项)的系数为  $-1$ , 与 Dirac 方程相比, 可见宇称破坏已达到极大. 这是必然的, 因为方程(9B. 6)与 Dirac 方程一样, 同时要满足更为基本的空-时反演 ( $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}, t \rightarrow -t$ ) 不变性:

$$\varphi(-\mathbf{x}, -t) \rightarrow \chi(\mathbf{x}, t), \quad \chi(-\mathbf{x}, -t) \rightarrow \varphi(\mathbf{x}, t) \quad (9B. 16)$$

我们把方程分解为二分量波函数的耦合, 好处在于可以同时看清楚(9B. 15)与(9B. 16)这两种变换下的性质. 如果写成四分量形式, (9B. 6)或(9B. 8)两式便分别是 Dirac 表象或 Weyl 表象下的超光速方程, 其  $\beta$  矩阵分别是

$$\beta_s^{(D)} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta_s^{(W)} = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ I & 0 \end{pmatrix} \quad (9B. 17)$$

我们看到, 这两个矩阵都是非厄密(反厄密)的! 一般地说, 哈密顿量的厄密性破坏会导致么正性的破坏(见参考文献[59]及习题 9. 9), 但这里它是由于宇称破坏而引起, 竟获得一种奇特的实现方式: 对一个动量  $\mathbf{p}$ , 在原有 4 个可能不稳定的解中, 两个 ( $\nu_R$  与  $\bar{\nu}_L$ ) 被完全排除掉, 另外两个 ( $\nu_L$  与  $\bar{\nu}_R$ ) 却稳定下来了.

### 三、决定粒子运动学特性的两个参数

为理解亚光速和超光速粒子的奇异特性, 我们引入两个参数<sup>[58]</sup>, 一个已在 § 9. 5C 中为亚光速粒子讨论过, 现在推广到超光速, 定义为:

$$R = \left[ \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \right]^{1/2}, \quad (u < c)$$

$$R \equiv \sqrt{\frac{\chi^\dagger \chi}{\varphi^\dagger \varphi}} = \left[ \frac{\frac{u}{c} - \sqrt{\frac{u^2}{c^2} - 1}}{\frac{u}{c} + \sqrt{\frac{u^2}{c^2} - 1}} \right]^{1/2}, \quad (u > c) \quad (9B.18)$$

$R$  可解释为在一粒子态中“隐藏的反粒子场振幅与粒子场振幅之比”，它是一个粒子“不纯性”的量度。类似地，我们再定义一个“Weyl 参数” $W$ ，它是在一螺旋度为 $(-1)$ 的粒子态中“隐藏的右旋手征态振幅与左旋手征态振幅之比”，可以看作是粒子“螺旋度内禀不稳定性”的量度：

$$W = \sqrt{\frac{c-u}{c+u}}, \quad (u < c); \quad W \equiv \sqrt{\frac{\eta^\dagger \eta}{\xi^\dagger \xi}} = \sqrt{\frac{u-c}{u+c}}, \quad (u > c) \quad (9B.19)$$

$R$  与  $W$  作为 $\left(\frac{u}{c}\right)$ 的函数，它们的数值在对数坐标中对 $\frac{u}{c} = 1$ 都是对称的，这启示我们引入推广的“快度” $\zeta$ ，它可以在整个速度区间 $(0 < u < \infty)$ 定义为\*：

$$\zeta = \ln \sqrt{\left| \frac{c+u}{c-u} \right|} \quad (9B.20)$$

令人高兴的是， $R$  与  $W$  如今都可统一地表示为：

$$R = \tanh\left(\frac{\zeta}{2}\right), \quad W = e^{-\zeta} \quad (9B.21)$$

它们又可统一地表示成反关联的形式：

$$R = \frac{1-W}{1+W}, \quad W = \frac{1-R}{1+R} \quad (9B.22)$$

我们已在 § 9.5C 讨论过  $R$  在狭义相对论(SR)中的重要含义： $R$  越大，粒子越“不纯”，它的质量(能量)越大，越显得不稳定。这句话对  $u > c$  的超光速粒子也成立。 $R \rightarrow 1$  时  $W \rightarrow 0$ ，这时粒子速度趋于光速  $c$  的两侧，它的螺旋性反向趋于稳定了，这对应于高速电子自旋纵向极化的事实。另一极端情形是  $R \rightarrow 0$ ，而  $W \rightarrow 1$ ，表示一低速电子或  $u \rightarrow \infty$  的低能中微子，虽然其内部隐

\*  $\tanh \zeta = \frac{u}{c}$ ,  $(u < c)$ ,  $\tanh \zeta = \frac{c}{u}$ ,  $(u > c)$  (见习题 9.9).

藏的反粒子场微乎其微,粒子很“纯”,但其螺旋度却极不稳定.例如对一个静止电子,就根本说不清它是左旋还是右旋的了(见习题 9.1).

这里有一个 QM 基本概念,很容易引起混淆.例如有一个螺旋度  $\lambda = -\frac{1}{2}$  的左手中微子  $\nu_L$ ,它的  $W = \frac{1}{3}$ .按(9B.19)式,能否说它内部有 75%(或 90%)的左旋态和 25%(或 10%)的右旋态呢?不能!因为  $\nu_L$  明明是 100%的左旋极化态.既然  $\left| \frac{\xi}{\eta} \right| > 1$ ,  $\eta$  处于从属的地位,它虽是隐藏的“右旋场”,却只能表现为“左旋场”的一部分.仅当在空一时反演 ( $x \rightarrow -x, t \rightarrow -t$ )下,  $\xi(-x, -t) \rightarrow \eta_c(x, t)$ ,  $\eta(-x, -t) \rightarrow \xi_c(x, t)$ , 因为  $\left| \frac{\eta_c}{\xi_c} \right| > 1$ ,  $\xi_c$  于是跟着  $\eta_c$  一道,共同表现为 100%“右旋态”的  $\bar{\nu}_R$  了.

上述讨论与一个高速电子内部隐藏的反粒子场决不表现为相反的(正)电荷、而只表现为电子惯性的增长等 SR 效应一样,在我们看来,也是一种(微观的)“薛定谔猫态”的极好例子,正好被用来说明 QM 基本解释的精妙之处(见附录 10B).

#### 四、超光速佯谬与中微子<sup>[60]</sup>

考虑两个惯性系,  $\Sigma'$  系以速度  $v$  沿  $x$  轴相对于  $\Sigma$  系运动,则熟知的 Lorentz 变换(LT)是

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad t' = \frac{t - v \frac{x}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (9B.23)$$

其中  $(x, t)$  与  $(x', t')$  是同一个粒子  $P$  在  $\Sigma$  与  $\Sigma'$  系中的坐标.

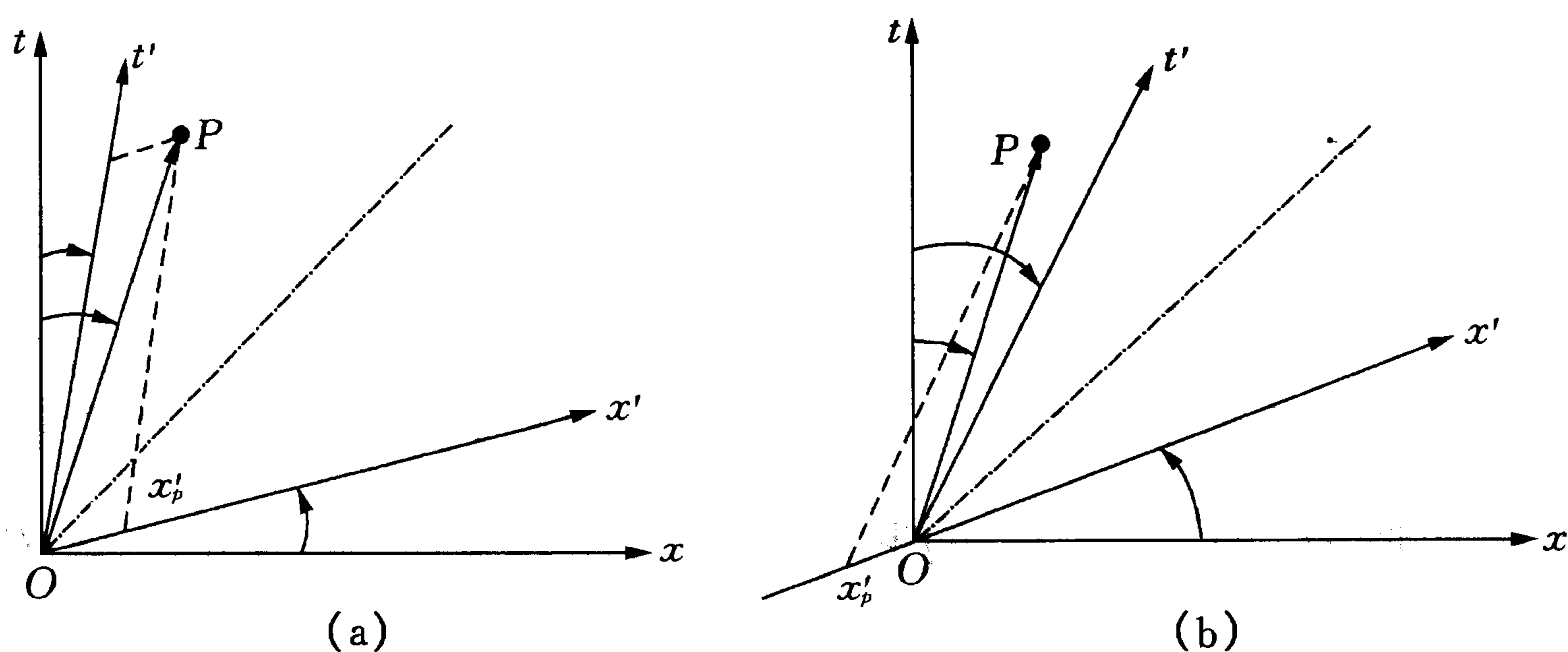


图 9B.1 一个亚光速粒子  $P$  沿  $x$  轴以速度  $u < c$  运动

(a)  $v < u$ ; (b)  $v > u$ . ( $v$  是  $\Sigma'$  系相对于  $\Sigma$  系的速度)

图 9B.1 是  $\Sigma$  与  $\Sigma'$  系的二维空-时图, 一亚光速粒子  $P$  以匀速  $u < c$  在图上的轨迹(世界线)是一直线  $OP$ . 当  $v > u$  时, 图 9B.1(b) 上的  $t'$  轴顺时针地向地跨过  $OP$  线, 使  $x' < 0$  而  $u' = \frac{dx'}{dt'} < 0$ , 但仍有  $t' > 0$ .

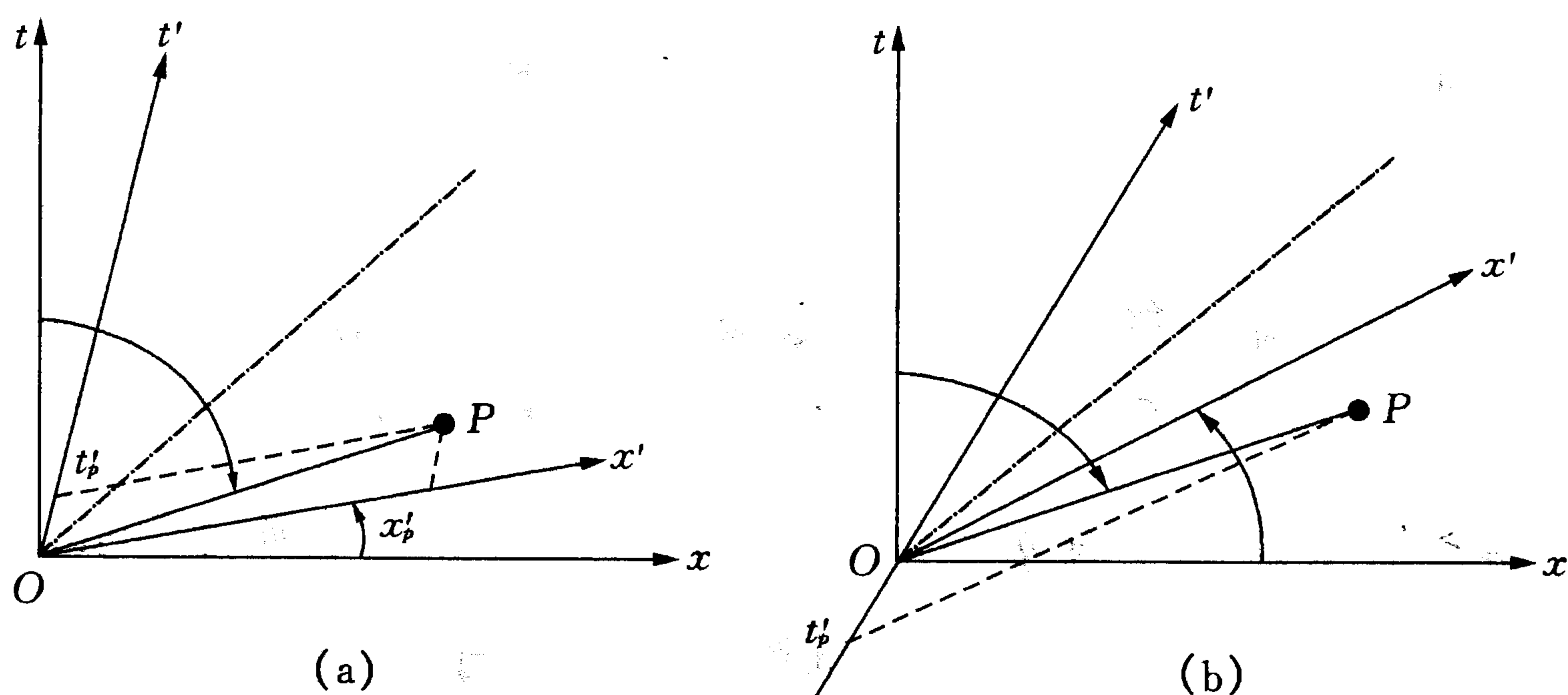


图 9B.2 一个超光速粒子  $P$  沿  $x$  轴以速度  $u > c$  运动

$$(a) v < \frac{c^2}{u}, t'_p > 0; (b) v > \frac{c^2}{u}, t'_p < 0$$

可是, 假设  $P$  是一超光速粒子,  $u > c$ , 马上会出现奇怪的现象, 见图 9B.2(a) 与 9B.2(b). 当  $v > \frac{c^2}{u}$ ,  $x'$  轴反钟向地跨过  $OP$  线时, 使  $t'_p$  突然变负:

$$t'_p < 0, \left( u > c, v > \frac{c^2}{u} \right) \quad (9B.24)$$

这常被说成是“快子反着时间方向运动”或“因果性被破坏了(‘果’先于‘因’而发生)”等, 在历史上一直被视为一个“谜”, 许多人因此对“超光速”、“快子”等的讨论不屑一顾或敬而远之(参见文献[63]).

在我们看来, 先换一种说法会更好些. 为此研究 LT 中的速度相加定律  $\left( u = \frac{dx}{dt}, u' = \frac{dx'}{dt'} \right)$ :

$$u' = \frac{u - v}{1 - u \frac{v}{c^2}} \quad (9B.25)$$

并画出图 9B.3. 注意: 当  $|v| < c$  且  $u < c$  时, (9B.25) 式是 3 个变量  $u$ ,  $u'$  和  $v$  的解析函数, 但当  $u > c$  时它有一个奇点在  $v = \frac{c^2}{u}$  或  $u = \frac{c^2}{v}$  处. 在图 9B.3(b) 中, 当  $u$  固定,  $v$  增大而跨过奇点  $\frac{c^2}{u}$  时, 超光速粒子在  $\Sigma'$  系的速度  $u'$  会突然从  $+\infty$  跳至  $-\infty$ , 即



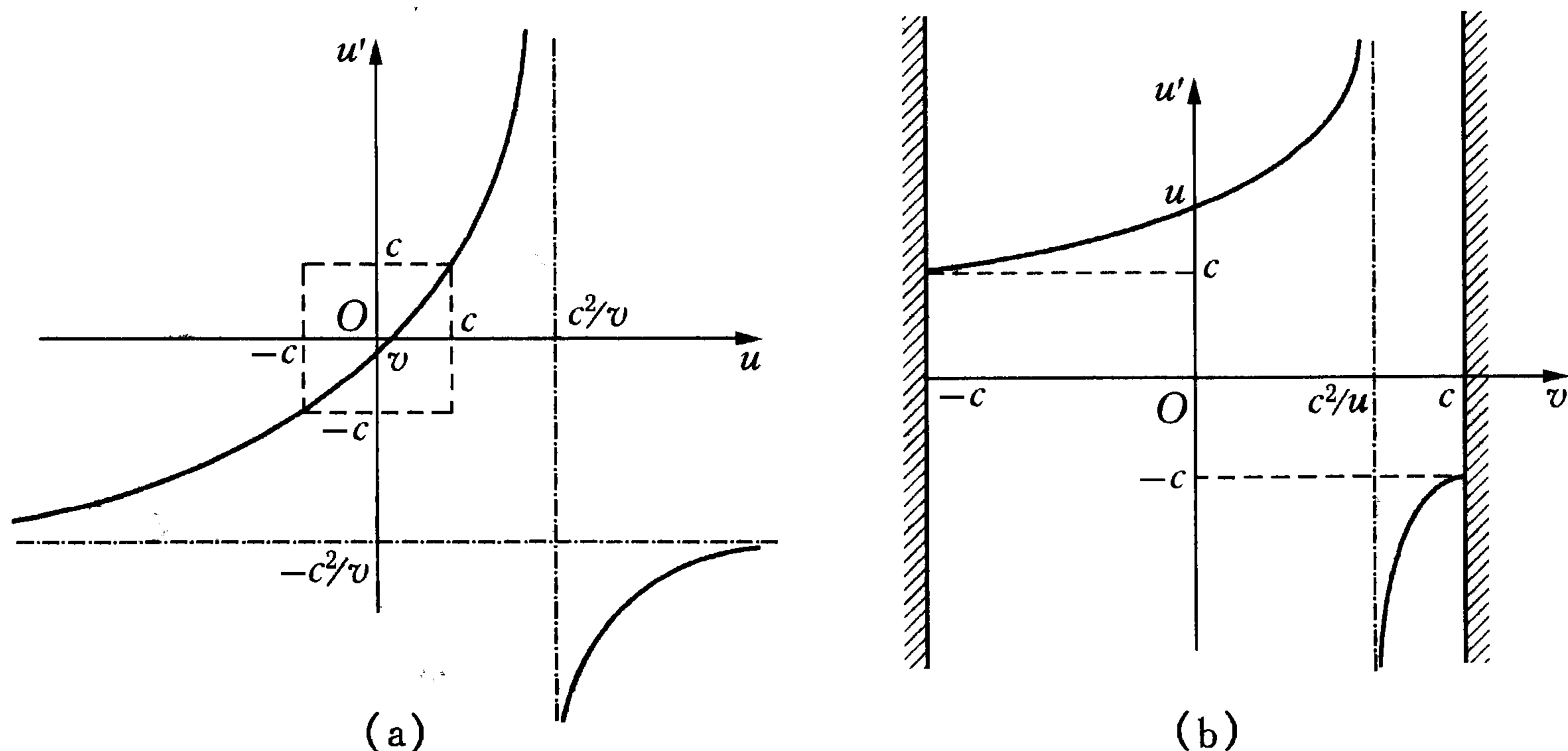


图 9B.3 Lorentz 变换中的速度相加定律

(a) 固定  $v$  时,  $u'$  随  $u$  而变; (b) 固定  $u (> c)$  时,  $u'$  随  $v$  而变

$$u' < (-c), \quad \left( u > \frac{c^2}{v}, \text{ 或 } v > \frac{c^2}{u} \right) \quad (9B.26)$$

$u'$  突变现象的前半部分可以从图 9B.2(a) 中看出, 但我们认为图 9B.2(b) 是无意义的,  $x'$  轴是不允许跨过  $OP$  线的, 我们宁可接受 (9B.26) 式而不承认 (9B.24) 式.

然而 (9B.26) 式还是使人不懂. 因为从 LT 导出的动量和能量在  $\Sigma$  与  $\Sigma'$  系的变换关系是

$$p' = \frac{p - v \frac{E}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad E' = \frac{E - vp}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (9B.27)$$

其中  $p > 0$ ,  $E > 0$  已在 (9B.4) 式给出, 代入上式后即见:

$$p' = \frac{m_s(u - v)}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \sqrt{\frac{u^2}{c^2} - 1}} > m_s c > 0 \quad (9B.28)$$

$$E' = \frac{m_s(c^2 - uv)}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \sqrt{\frac{u^2}{c^2} - 1}} < 0, \quad \left( u > \frac{c^2}{v} \text{ 或 } v > \frac{c^2}{u} \right) \quad (9B.29)$$

人们会问: 怎么一个粒子的  $u' < 0$  ( $u > \frac{c^2}{v}$ ) 而  $p' > 0$ ? 还要问: 怎么它的能量在  $\Sigma'$  系中变为负值  $E' < 0$ ? (注意:  $p'$  和  $E'$  在  $uv = c^2$  点附近都是光滑变化的), 而经典理论中的能量应该是正定的. 我们不妨把 (9B.24)、

(9B. 26)、(9B. 28)与(9B. 29)等式合称为“超光速佯谬”. 我们相信它的出现并不意味着 LT 不能适用于超光速运动, 而是由于经典观念的局限性.

假设一个中微子  $\nu_L$  在  $\Sigma$  系以速度  $u > \frac{c^2}{v}$  运动, 则在  $\Sigma'$  系的观察者将认为它是一个反中微子  $\bar{\nu}_R$  (因为  $E' < 0$ ), 它的能量  $E'_c = -E' > 0$ , 同时它的动量  $p'_c = -p' < 0$ , 这正与  $u' < 0$  一致. [用反粒子算符 (9. 4. 36) 式], 至于 (9B. 24) 式的时间反向之谜则不过是反粒子波函数中相位改号 [见 (9. 4. 35) 式] 的一种假象而已, 相位改号当然是无法在图 9B. 2(b) 中适当地反映出来的. 于是我们看到, 所谓“超光速佯谬”在合适的量子理论中迎刃而解.

### 五、中微子振荡和最小三味模型

美国科学家 R. Davis Jr 从 1970 年起对来自太阳的中微子  $\nu_e$  进行探测, 发现计数率约  $2.56 \pm 0.16(\text{stat}) \pm 0.16(\text{syst})$  SNU (SNU, 太阳中微子单位,  $1\text{SNU} = 10^{-36}$  吸收/每秒每个靶原子), 不到按标准太阳模型计算的理论期望值  $(8.6 \pm 1.2)$  SNU 的一半. 对这一“太阳中微子失踪案”的可能解释是:  $\nu_e$  产生后在从太阳内部运动到地球的过程中会自动变为另两种味的中微子  $\nu_\mu$  和  $\nu_\tau$  (后两者是当时不能探测的). 这种“中微子振荡”只有当它们(静)质量不为零才有可能. 从 1980 年起, 在日本科学家小柴昌进 (M. Koshiba) 领导下的 Kamiokande 实验组进行了仔细研究, 于 1998 年肯定了中微子振荡的存在<sup>[64]</sup>. 2002 年, 加拿大的 SNO 实验组对太阳中微子的流强作了进一步探测, 区分出电子中微子部分为<sup>[65]</sup>

$$\phi_e = 1.76 \pm_{0.05}^{0.05}(\text{stat}) \pm_{0.09}^{0.09}(\text{syst}) \quad (9B. 30)$$

(单位是  $10^6 \text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ ), 而非电子中微子部分为

$$\phi_{\mu\tau} = 3.41 \pm_{0.45}^{0.45}(\text{stat}) \pm_{0.45}^{0.48}(\text{syst}) \quad (9B. 31)$$

同时又能通过中性流 (NC) 反应测到总流强等于

$$\phi_{\text{NC}} = 5.09 \pm_{0.43}^{0.44}(\text{stat}) \pm_{0.43}^{0.46}(\text{syst}) \quad (9B. 32)$$

这与从标准太阳模型 (SSM) 算出的期望值

$$\phi_{\text{SSM}} = 5.05 \pm_{0.81}^{1.01}(\text{stat}) \quad (9B. 33)$$

符合甚佳. 20 多年来的太阳中微子失踪案被认为最后侦破了, 这是实验科学在历史上最伟大的成就之一.

为了从理论上定量地解释实验数据,我们提出一个“最小三味模型”,即写出方程如下 ( $\hbar = c = 1$ )<sup>[66]</sup>:

$$\begin{cases} i \dot{\xi}_e = i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \xi_e - \delta\eta_\mu - \varepsilon\eta_\tau \\ i \dot{\eta}_e = -i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \eta_e + \delta\xi_\mu + \varepsilon\xi_\tau \\ i \dot{\xi}_\mu = i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \xi_\mu - \lambda\eta_\tau - \delta\eta_e \\ i \dot{\eta}_\mu = -i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \eta_\mu + \lambda\xi_\tau + \delta\xi_e \\ i \dot{\xi}_\tau = i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \xi_\tau - \varepsilon\eta_e - \lambda\eta_\mu \\ i \dot{\eta}_\tau = -i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \eta_\tau + \varepsilon\xi_e + \lambda\xi_\mu \end{cases} \quad (9B.34)$$

其中脚标分别指  $\nu_e, \nu_\mu, \nu_\tau$  3 种不同的味. 与(9B.8)式比较可见(9B.34)式描写了超光速中微子,但它没有质量( $m_s$ )项,只有不同味之间的耦合常数,并且被假设为仅有一个:

$$\delta = \varepsilon = \lambda \quad (9B.35)$$

(所以称之为“最小模型”). 由(9B.34)式可求出 3 个“质量本征态”,其能量平方  $E^2$  的本征值等于:

$$\begin{aligned} E_i^2 &= p^2 - m_i^2, \quad (i = 1, 2, 3) \\ m_1^2 &= 4\delta^2, \quad m_2^2 = m_3^2 = \delta^2 \end{aligned} \quad (9B.36)$$

从味本征态到质量本征态的正交变换是

$$\begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_e \\ \nu_\mu \\ \nu_\tau \end{pmatrix} \quad (9B.37)$$

反解出“味”振幅随时间而演化的规律是

$$\begin{pmatrix} C_e(t) \\ C_\mu(t) \\ C_\tau(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{-2}{\sqrt{6}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1(0)e^{-iE_1 t} \\ C_2(0)e^{-iE_2 t} \\ C_3(0)e^{-iE_3 t} \end{pmatrix} \quad (9B.38)$$

设初始条件是  $t = 0$  时,在太阳内部产生一个  $\nu_e$ ,即

$$C_e(0) = 1, C_\mu(0) = C_\tau(0) = 0 \quad (9B.39)$$

这样经过时间  $t$  的振荡, 表现为 3 种味的几率各等于:

$$\begin{aligned} |C_e(t)|^2 &= 1 - \frac{8}{9} \sin^2 \left[ \frac{1}{2} (E_2 - E_1) t \right] \\ |C_\mu(t)|^2 &= |C_\tau(t)|^2 = \frac{4}{9} \sin^2 \left[ \frac{1}{2} (E_2 - E_1) t \right] \end{aligned} \quad (9B.40)$$

然而, 由于从方程(9B.36)推出的群速度  $u_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}$  与相速度

$u_p = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}$  存在一个约束关系

$$u_g u_p = c^2 \quad (9B.41)$$

现在  $u_g > c$ , 于是  $u_p < c$ . 这意味着: 中微子 3 种味相干叠加态的形成速度( $u_p$ )赶不上在媒质中波包分离的速度( $u_g$ ), 因此(9B.40)所表示的周期性相干振荡被大大地压抑下来, 振荡实际上变成不相干的导致 3 种味达到细致平衡的一种机制, 最后 3 种味的出现几率应该彼此相等:

$$|C_e|^2 \sim |C_\mu|^2 \sim |C_\tau|^2 \sim \frac{1}{3} \quad (9B.42)$$

我们认为这一理论上的预言似乎刚好解释了实验数据(9B.30)~(9B.33).

还要注意: 既然中微子飞行时处于不止一个质量本征态而探测到的却是一个确定的味本征态, 因此  $m^2$  的测量值便必然在平均值  $\langle m^2 \rangle$  基础上有显著的标准偏差(记为  $\sigma = [\langle m^4 \rangle - \langle m^2 \rangle^2]^{1/2}$ ). 例如由(9B.36)~(9B.40)式, 我们可预言刚产生的中微子(如  $\nu_e$ )应有质量平方为

$$m^2 = \langle m^2 \rangle \pm \sigma = -\frac{8}{5} \delta^2 \pm \frac{6}{5} \delta^2 \quad (9B.43)$$

而对由振荡产生的中微子(如  $\nu_\mu$  或  $\nu_\tau$ ) 在飞行中测量, 则可预期其

$$\tilde{m}^2 = \langle \tilde{m}^2 \rangle \pm \tilde{\sigma} = -\frac{5}{2} \delta^2 \pm \frac{3}{2} \delta^2 \quad (9B.44)$$

实际上, 在上述模型中这两个期望值与中微子的味无关. 由此可见, 实测值(9B.2)和(9B.3)看起来有很大“误差”, 实际上首先是由于振荡中有两个质量本征态所引起的.

方程(9B.34)将在今后实验中进一步得到检验. 事实上, SNO 实验连同日本的 Kamiokande 实验已排除了第四种味(或所谓“不育的”(sterile))中微子存在的可能性. 日本的 K2K 实验<sup>[67, 68]</sup> 以及正在建造(或计

划)中的其他“中微子工厂”已可能在地球上对长距离飞行的中微子进行探测,并将能够测量它们的振荡和速度.1999年6月K2K实验组初步测到中微子飞行250km的速度约为 $v = 3.0120481 \times 10^8 \text{ m/s}$ <sup>[68]</sup>.看来,中微子物理快要进入一个黄金时代了.

作为理论上的小结,可以列表如表9B.1.

表 9B.1 两类自旋为 $\frac{1}{2}$ 的费米子

|                      | Dirac 粒子                                   | 中微子                         |
|----------------------|--|-----------------------------|
| 在空间—时间反演(9B.16)下的对称性 | 对称(不变性)                                    | 对称(不变性)                     |
| 在空间反演(9B.15)下的对称性    | 对称(宇称守恒)                                   | 最大宇称破坏(反对称, antisymmetric)  |
| 粒子速度(群速度)            | 亚光速 ( $u < c$ )                            | 超光速 ( $u > c$ )             |
| 相速度                  | 超光速 ( $u_p > c$ )                          | 亚光速 ( $u_p < c$ )           |
| 在各种味本征态之间的振荡         | 不可能(严格禁戒)                                  | 完全可能(不相干振荡导致等概率分布)          |
| 粒子运动方程               | 每种味(如 $e, \mu, \tau$ )有各自的 Dirac 方程及相应之静质量 | 3 种味共享一个方程如(9B.34),仅含一个耦合常数 |

## 附录 9C 反引力和宇宙学

### 一、引力论中的负质量佯谬

众所周知,牛顿万有引力定律

$$F(r) = -G \frac{m_1 m_2}{r^2} \quad (9C.1)$$

中两个粒子(物体)的引力质量  $m_1$  和  $m_2$  都是正的,因而它们相互吸引的势能总是负的:

$$U(r) = -G \frac{m_1 m_2}{r} \quad (9C.2)$$

另一方面,狭义相对论(SR)中爱因斯坦方程

$$E = mc^2 \quad (9C.3)$$

给出粒子能量  $E$  与其惯性质量  $m$  的严格正比关系,此惯性质量  $m$  的定义由另一个牛顿动力学定律

$$F = ma \quad (9C.4)$$

给出. 其中  $a$  是粒子的加速度.

考虑一个物体由许多粒子组成, 它们之间的引力势能将使物体的总质量下降. 问题是: 此物体质量会变负吗? 历史上, Bondi<sup>[69]</sup>、Schiff<sup>[70]</sup> 和 Will<sup>[71]</sup> 等先后讨论了这个有趣的问题: 假设一质量为负 ( $m_1 < 0$ ) 的物体向另一正常物体(质量  $m_2 > 0$ ) 靠近, 则由方程(9C. 1)和(9C. 4), 正质量物体 ( $m_2$ ) 将吸引负质量物体 ( $m_1$ ), 而负质量物体 ( $m_1$ ) 将排斥正质量物体 ( $m_2$ ), 这一对物体(可说是一个“引力偶极子”)将自动加速. 岂非咄咄怪事!

妙极了, 我们建议称上述怪事为“负质量佯谬”. 像物理学中其他佯谬一样, 它昭示我们: 在基本概念中一定有什么地方搞错了, 或者缺少了什么重要的物理认识.

为了摆脱这个“佯谬”, 从 1960 年起, 在广义相对论(GR)中提出并证明了一个“正能量定理”——在 GR 中任何一个孤立物体的总质量必定是非负的. 此定理显然与方程(9C. 3)一致, 因为在 SR 中, 物体的能量和(惯性)质量也总是非负的.

## 二、牛顿万有引力定律的推广

在我们看来, 正能量定理不过暂时回避了“佯谬”而并没有解决它. 因为在相对论性量子力学(RQM)中, 如本章所讨论的那样, 负能量是不可避免的, 而它的出现正反映了反粒子的存在. 所以我们立刻可以猜测: “负质量佯谬”的完全解决必定要求(9C. 1)式推广为如下的形式<sup>[72]</sup>

$$F(r) = \pm G \frac{m_1 m_2}{r^2} \quad (9C. 5)$$

其中负号适用于  $m_1$  与  $m_2$  (均为正) 都是物质或都是反物质的情形, 而正号则适用于其中之一是反物质的情形. 这就是说, 正反物质之间是斥力而非引力.

为了论证这一猜测, 让我们仔细观察 RQM 中的各个方程. 已知它们都有一共同的对称性——空间-时间反演不变性, 如(9. 5. 16)或(9B. 16)式所示. 现在指出, 与之等价的还有一个“质量反演对称性”, 即在

$$m \rightarrow -m, \varphi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \chi(\mathbf{x}, t), \chi(\mathbf{x}, t) \rightarrow \varphi(\mathbf{x}, t) \quad (9C. 6)$$

变换下, 方程保持不变. 无论 KG 方程(9. 4. 18), Dirac 方程(9. 3. 2)或超光速方程(9B. 6), 都有此性质. 因此, 我们可以用一句话建立一个规则(working rule):

一个能反映正、反粒子对等存在的(量子或经典)理论在质量反演

( $m \rightarrow -m$ )下是保持不变的。

实际上,我们已对电子的洛仑兹运动方程(9.5.12)用上述规则导出了正电子的运动方程.现在把这规则用到(9C.1),便立刻导出(9C.5)式.与在RQM中不同的是:我们需补充新的方程才能使经典理论具有 $m \rightarrow -m$ 的不变性来反映正、反物质的对等存在.

同时我们强调:这一质量反演变换丝毫不意味着有负质量存在, $m$ 与( $-m$ )的差别不过是相对的,而非绝对的,过去“负质量佯谬”的出现,根本原因是把这一差别看成为绝对的缘故.只要想通这一点后,什么佯谬也就没有了.

### 三、广义相对论中爱因斯坦场方程的修正

让我们考虑一个“正负电子偶素”和一个普通物质原子之间的引力相互作用.如果(9C.5)式是正确的话,它们之间便没有引力!换言之,“电子偶素”的引力质量  $m_{\text{grav}}$  应等于零.但它的能量或惯性质量  $m_{\text{inert}}$  (见(9C.3)式)肯定不是零.由此可见,在正反物质共存的情况下,GR中的所谓“等效原理”

$$m_{\text{grav}} = m_{\text{inert}} \quad (9C.7)$$

一定不能成立.大家知道,这个原理是建立GR的重要出发点,它在有反物质时不再成立,这表明GR是只讨论纯粹物质的经典引力场论.这一论断只要看爱因斯坦场方程<sup>[73]</sup>

$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R = -8\pi GT_{\mu\nu} \quad (9C.8)$$

就可以明白了:方程左端的Ricci张量  $R_{\mu\nu}$ ,度规张量  $g_{\mu\nu}$ 和曲率标量  $R$ 都是坐标  $x_\mu$  的函数,右端的  $T_{\mu\nu}$ 是在  $x_\mu$  点处的物质能量-动量张量,它与粒子的质量  $m$  成正比.故当我们作一质量反演变换  $m \rightarrow -m$  时,方程右端变号而左端不变.这一“非不变性”证明了我们的论断.

为了使方程(9C.8)能够明显地和平等地处理正反物质共存的问题,我们只需把右端的  $T_{\mu\nu}$  作如下修改:

$$T_{\mu\nu} \longrightarrow T_{\mu\nu}^{\text{eff}} = T_{\mu\nu} - T_{\mu\nu}^c \quad (9C.9)$$

后项的上标“ $c$ ”表示它是描写反物质的能量-动量张量.我们再次强调:正反物质的能量-动量张量形式完全一致,因此在  $m \rightarrow -m$  变换下,  $T_{\mu\nu} \rightarrow -T_{\mu\nu}^c$ , 而  $T_{\mu\nu}^c \rightarrow -T_{\mu\nu}$ .

在弱场近似下<sup>[73]</sup>,从方程(9C.8)加(9C.9)容易推出方程(9C.5),只

要注意当  $m_1$  与  $m_2$  之中有一个是反物质时,在它们的能量-动量张量乘积前面会出现一个额外的负号,这正表示正反物质之间的力是排斥性的。

#### 四、反引力与宇宙加速膨胀及其他

显然,想在地球上用实验检验(9C. 5)式是没有希望的. 我们只能等待天体物理学研究的新进展<sup>[74]</sup>. 幸运的是,从 1998 年起,对若干红移量达  $z = 0.39 \sim 0.9$  的(遥远的) I a 型超新星爆发的仔细观测表明:宇宙的膨胀正在加速,而不是(像几年前大家想像的那样)在减速. 为解释这一观测事实而构造的所谓“暗能量”理论,实际上没有人懂. 正如 Davis 所说<sup>[75]</sup>:“如果我们希望保持(过去的宇宙)暴胀并说明今天的加速膨胀,这就需要一种理论,它应能解释为什么反引力曾一度极强,然后很快跌下来并徘徊在比零略大的强度. ……一种可能性是(斥)力随时间而衰减,另一种则是它随空间变化——在远超出望远镜极限处斥力可能非常强. ……我们所需要的理论应能把反引力的强度作为自然界所有的力之统一描述中的一部分而推导出来.”下面是我们的一些猜测性讨论<sup>[72]</sup>:

(1) 在宇宙大爆炸后有一极短的暴胀阶段,我们认为是那时刚产生出来的正反粒子间相互排斥而触发的. 通常认为目前宇宙中正、反物质之比高达  $10^8$  (或  $10^9$ ): 1,可能起源于微小的 CP 不守恒. 我们不相信这种说法,因为 CP 反演即 T 反演,实际上只是“运动反转对称性”(见 § 3.9),它与真正的时间反演( $t \rightarrow -t$ )对称性或正反粒子对称性毫无关系. 我们宁可相信在整个宇宙的正粒子数目等于反粒子数目,不过反粒子在暴胀中抢先一步,以更快的速度飞向远处,粒子则落后一步,在它们中间逐渐演化出包括我们银河系在内的近处各星系来. 远处的天体如类星体(quasar)是否由反粒子演化出来? 这需要研究. 我们猜想那些被看到加速离开的超新星爆发是由反粒子构成的,它们正受到内部大量物质星系的排斥力.

(2) 在上述图像下求解方程(9C. 8)加(9C. 9)时(参见文献[73]中的 Friedmann 模型),因在宇宙很大一部分区域中的物质密度接近于反物质密度,那里宇宙膨胀的加速度便接近于零,这样我们便懂得目前宇宙在整体上的平坦性(由最近对宇宙微波背景辐射的起伏作精密测量而证明)是由于两个因素:一是由正反粒子间斥力触发的暴胀,二是暴胀后宇宙的一大部分范围内正反物质的密度近于相等.

(3) 宇宙大爆炸后产生的有质量的超光速中微子,它们的数目可能是重子数的  $10^8$  倍,并且近于各向同性地充满了宇宙空间,然而因为正中



微子对物质的引力抵消了反中微子对物质的斥力,它们在整体上不显示引力质量,因此在所谓“暗物质”的分析中应该没有贡献<sup>[74]</sup>.

(4) 在宇宙的中间区域,正反物质有重叠,它们之间应有一定的几率发生碰撞而湮灭.不过斥力使碰撞成为掠射式的,而湮灭只发生在近距离处.这一猜测可能同 30 多年来天文上发现的约 3 000 多个  $\gamma$  暴(Gamma-Ray-Burst, GRB)有联系. GRB 有一些奇怪的特征:它们各向同性地分布在宇宙学尺度距离( $z \sim 1$ )上,在短时间(几秒~几十秒)内的爆发能量近于一个常数.我们认为 Schaefer<sup>[76]</sup>所做的 GRB-Hubble 图研究非常重要,因为 GRB 的空间分布可能正反映了宇宙中物质与反物质的分布.

(5) 星系(和恒星)的形成被认为是物质中密度波引起的涨落所诱导的过程.因此我们预期:纯物质和正反物质混合的两种宇宙物质性质很不一样,后者有点像“(引力)等离子体”,它有一个“屏蔽长度”,任何在尺度上超过此屏蔽长度的涨落将被大大地压抑下来,从而不利于星系的形成.最近天文学家已发现:在远距离红移从  $z \sim 2$  到  $z \geq 6$  处的“恒星形成速率”正在逐渐增长(见文献[76]),在我们看来,这可能正是在那里的反物质越远越多的一种反映.或许恒星形成速率与 GRB 空间分布之间的某种“反关联”将成为我们上述猜测是否正确的判据.

## 习 题

9.1 从 Dirac 方程(9.1.19)式出发,如下的么正变换

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \rightarrow \psi^{(W)} = U\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_R \\ \phi_L \end{pmatrix}$$

将把它从 Dirac 表象(标准表象)变到 Weyl 表象(手征表象):

- (1) 试求出 Weyl 表象下的  $\alpha$  和  $\beta$  矩阵;
- (2) 证明 Dirac 方程在空间反演下是不变的;
- (3) 当  $m \rightarrow 0$ , Dirac 方程将退耦为两个分别对  $\phi_R$  和  $\phi_L$  的 Weyl 方程,试解释各自的物理意义;
- (4) 如  $m \neq 0$ , 请问  $\phi_R$  与  $\phi_L$  仍有它们在 Weyl 方程中的同样意义吗?

9.2 (1) 试证明(自由)Dirac 方程可以写成如下的协变形式:

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi = 0, \quad (\mu = 1, 2, 3, 4, \partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}, c = \hbar = 1)$$

而其连续性方程可以简化为:

$$\partial_\mu j_\mu = 0, j_\mu = i \bar{\psi} \gamma_\mu \psi$$

其中  $\gamma_\mu = (\boldsymbol{\gamma}, \gamma_4)$ ,  $\boldsymbol{\gamma} = -i\beta\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & -i\boldsymbol{\sigma} \\ i\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\gamma_4 = \beta$ ,  $\gamma_\mu^\dagger = \gamma_\mu$

$$\{\gamma_\mu, \gamma_\nu\} = [\gamma_\mu, \gamma_\nu]_+ = 2\delta_{\mu\nu}, \bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_4$$

(2) 试证明 Dirac 方程在空间-时间反演 ( $x_\mu \rightarrow -x_\mu$ ) 下的不变性本质上等价于在变换  $m \rightarrow -m$  下的不变性或在变换

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \rightarrow \gamma_5 \psi = \psi_c = \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix}$$

下的不变性, 其中  $\gamma_5 \equiv \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\gamma_5^\dagger = \gamma_5$ ,  $\gamma_5^2 = 1$

而  $[\gamma_5, \gamma_\mu]_+ = 0$

(3) 问两个算符  $P_R = \frac{1}{2}(1 - \gamma_5)$  与  $P_L = \frac{1}{2}(1 + \gamma_5)$  的意义是什么?

9.3 假设对反粒子的能量-动量算符是

$$\hat{E}_c = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \hat{\mathbf{p}}_c = i\hbar \nabla$$

(1) 试证明当 Dirac 方程描写反粒子时, 其角动量算符应为  $\hat{\mathbf{S}}_c = -\frac{1}{2}\hbar \boldsymbol{\Sigma} = -\frac{1}{2}\hbar \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}$ ;

(2) 如一电子态由下述波函数来描写:

$$\psi_e(\mathbf{x}, t) \sim \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ b \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p_z z - Et)\right], (p_z > 0, E > 0)$$

请问两个常数  $a, b$  中哪一个大? 此电子态的螺旋度  $\lambda$  是什么? 对此态作空间-时间反演 ( $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}, t \rightarrow -t$ ) 后, 它将变为什么态?

(3) 请重新考虑习题 9.1 中的 Weyl 方程在空间-时间反演下的性质.

9.4 与方程(9.1.12)或(10.2.42)相似, Dirac 粒子(如电子)的场算符被定义为

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}, t) = \sum_{\mathbf{p}, \lambda} \left\{ \hat{b}_{\mathbf{p}\lambda} \cdot u^{(\lambda)}(\mathbf{p}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right] + \hat{d}_{\mathbf{p}\lambda}^\dagger v^{(\lambda)}(\mathbf{p}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right] \right\}$$

其中  $u^{(\lambda)}(\mathbf{p})$  是在分立动量谱中归一化(比较(9.1.31)式), 而  $v^{(\lambda)}(\mathbf{p}) = (-\gamma_5)u^{(\lambda)}(\mathbf{p})$ ,  $\hat{b}_{\mathbf{p}\lambda}$  ( $\hat{d}_{\mathbf{p}\lambda}^+$ ) 是电子(正电子)的湮灭(产生)算符. 试证明  $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$  在空间-时间反演( $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$ ,  $t \rightarrow -t$ )下在本质上是 不变的, 为此只需补充一个变换关系式:

$$\hat{b}_{\mathbf{p}\lambda} \rightleftharpoons \hat{d}_{\mathbf{p}-\lambda}^+, (\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}, t \rightarrow -t).$$

9.5 定义电子的 Feynman 传播  $S_F(x-x')$  为 Dirac 方程的 Green 函数:

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + m)S_F(x-x') = \delta^{(4)}(x-x') \equiv -i\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(t-t')$$

(1) 试证明  $S_F(x-x')$  可以展开为

$$S_F(x-x') = \sum_{\mathbf{p}\lambda} \{u^{(\lambda)}(\mathbf{p}) \bar{u}^{(\lambda)}(\mathbf{p}) \exp[ip \cdot (x-x')] \theta(t-t') - v^{(\lambda)}(\mathbf{p}) \bar{v}^{(\lambda)}(\mathbf{p}) \exp[-ip \cdot (x-x')] \theta(t'-t)\}$$

其中  $\bar{u} = u^\dagger \gamma_4 = u^\dagger \beta$ ,  $p \cdot x = p_\mu x_\mu = \mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et$ ;

(2) 试证  $4 \times 4$  矩阵  $S_F(x-x')$  可以由场算符  $\hat{\psi}(x)$  生成如下:

$$S_F(x-x') = \langle 0 | T \hat{\psi}(x) \bar{\hat{\psi}}(x') | 0 \rangle, \text{ 即其矩阵元}$$

$$[S_F(x-x')]_{ab} = \langle 0 | \hat{\psi}_a(x) \bar{\hat{\psi}}_b(x') | 0 \rangle \theta(t-t') - \langle 0 | \bar{\hat{\psi}}_b(x') \hat{\psi}_a(x) | 0 \rangle \theta(t'-t)$$

其中  $\hat{\psi}(x) \equiv \hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$  已在习题 9.4 中定义;

(3) 试证明  $S_F(x-x')$  在空间-时间反演( $x_\mu \rightarrow -x_\mu$ )下本质上不变.

9.6 (1) 如将外矢势  $\mathbf{A}$  引入一荷电粒子的 K-G 方程(为简单起见, 设  $V=0$ ), 试仿照(9.4.20)与(9.4.21)式用  $\varphi$  和  $\chi$  来表示它的连续性方程;

(2) 如将  $\mathbf{A}$  与  $V$  都引入 Dirac 方程, 问它的连续性方程改变吗?

9.7 方程(9.4.19)可以改写成“薛定谔型”的方程如下:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$

$$\text{其中 } \Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \hat{H} = \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + mc^2 \right) \tau_3 + i \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tau_2$$

而  $\tau_i$  ( $i=1, 2, 3$ ) 是  $2 \times 2$  的“Pauli 型”矩阵:

(1) 问  $\hat{H}$  是厄密的吗?

(2) 试导出 K-G 方程的“速度算符” $\hat{v}$ , 它是个可观察量吗?

9.8 (1) 试证明自由 Dirac 方程的“速度算符” $\hat{v}$  等于  $c\boldsymbol{\alpha}$ , 并导出它的运动方程;

(2) 将上述方程积分后试求出一 Dirac 粒子(沿  $\boldsymbol{v}$  方向)的“位置” $x$ , 它是个可观察量吗?

(3) 用习题 9.3(2)中的波函数计算一个 Dirac 粒子的速度.

\* 9.9 (1) 对 Weyl 表象下的 Dirac 方程( $\boldsymbol{\alpha} \rightarrow -\boldsymbol{\alpha}$ )(9B.8)<sub>D</sub> 式, 试证明作一变换  $\psi_D = \begin{pmatrix} \xi_D \\ \eta_D \end{pmatrix} \rightarrow U_s \psi_D = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_D \\ \eta_D \end{pmatrix} = \psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}$  后, 就会变到 (9B.8) 式, 它可能描写超光速的中微子, 具有实的固有质量(快子质量)  $m_s = -im_0$ ;

(2) 为什么我们不能够在 Dirac 方程中直接令  $m_0 = im_s$  与  $\psi_D \rightarrow \psi^{(i)}$  去得出一个描写稳定的超光速粒子方程?

(3) 对方程(9B.8)之解作类似于习题 9.8(3)的计算, 试证明  $\langle v_z \rangle = \frac{c^2 p}{E} > c$ .

\* 9.10 (1) 试证明(9B.20)式定义之快度  $\zeta$  可以用来表示 Lorentz 变换, 只要令  $\tanh \zeta = \beta \equiv \frac{v}{c}$ ,  $\cosh \zeta = \gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ ;

(2) 试证明狭义相对论中的速度相加定律可以用快度  $\zeta$  十分简单地表示出来;

(3) 试证明当  $u < c$ ,  $\tanh \zeta = \frac{u}{c}$ , 但若  $u > c$ , 则  $\tanh \zeta = \frac{c}{u}$ ; 请问当  $u > c$  时, 速度相加定律仍可用  $\zeta$  来表示吗?

9.11 (1) 用变分法从下面的拉氏量密度导出 Dirac 方程 ( $c = 1$ ):

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi$$

(2)  $\mathcal{L}$  在 Lorentz 变换下是一个四维标量不变量, 请问它在变换  $\psi \rightarrow e^{i\omega_s} \psi$  下又如何呢? ( $\alpha$  是常数)

\* 9.12 考虑 1+1 维空间-时间的 Dirac 方程  $(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi = 0$ , 为实现  $\gamma_\mu$  ( $\mu = 1, 4$ ) 的反对易关系,  $2 \times 2$  的 Pauli 型矩阵就足够了. 例如不妨取  $\gamma_1 = \tau_2$ ,  $\gamma_4 = \beta = \tau_3$  (即  $\alpha = \tau_1$ ,  $\gamma_5 = \gamma_1$ ,  $\gamma_4 = i\tau_1$ ):

(1) 试求自由粒子的平面波解, 问对正能量粒子, 在  $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$  的二分量中, 哪一个是大分量?

(2) 问  $\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi + \chi)$  与  $\eta = \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi - \chi)$  也描写某种自旋运动吗? 现在  $\frac{\xi}{\eta} > 1$  与  $\frac{\xi}{\eta} < 1$  分别有什么意义?

(3) 假若作变换  $\begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} i & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi_s \\ \eta_s \end{pmatrix}$  并令  $m_0 = im_s$ , 会发生什么?

### 参 考 文 献

- [1] J. D. Bjorken, S. D. Drell. *Relativistic Quantum Mechanics*. McGraw-Hill Book Company, 1964
- [2] J. J. Sakurai. *Advanced Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, 1967
- [3] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics* (3rd Ed.). John Wiley & Sons Inc., 1998
- [4] 徐在新. 高等量子力学. 上海: 华东师范大学出版社, 1994
- [5] 苏汝铿. 量子力学. 上海: 复旦大学出版社, 1997
- [6] 倪光炯, 陈苏卿. 莱文森定理, 反常和真空相变. 上海: 上海科学技术出版社, 1995
- [7] E. Schrödinger. *Ann. Physik*, **81**, 109(1926); W. Gordon. *Z. Physik*, **40**, 117(1926); O. Klein. *Z. Physik*, **41**, 407(1927)
- [8] 倪光炯, 苏汝铿. 复旦学报(自然科学版), **19**(1), 1~10(1980)
- [9] O. Klein. *Z. Physik*, **53**, 157(1929)
- [10] H. Feshbach and F. Villars. *Rev. Mod. Phys.*, **30**, 24(1958)
- [11] G-j Ni, Hong Guan, Weimin Zhou and Jun Yan. *Chinese Phys. Lett.*, **17**, 393 (2000)
- [12] A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen. *Phys. Rev.*, **47**, 777~780(1935)(许良英、范岱年编译.《爱因斯坦文集》第一卷.北京:商务印书馆,1976)
- [13] 关洪. 量子力学的基本概念. 北京: 高等教育出版社, 1990
- [14] D. Bohm. *Quantum Theory*. Prentice Hall, 1951
- [15] G-j Ni, W-m Zhou, J. Yan. *Proceeding of International Workshop*. "Lorentz Group, CPT and Neutrinos", Zacatecas, Mexico, 68~81, 1999 (World Scientific, 2000)
- [16] T. D. Lee and C. N. Yang. *Phys. Rev.*, **104**, 254(1956)
- [17] C. S. Wu, E. Ambler, R. W. Hayward, D. D. Hoppes, R. P. Hudson. *Phys. Rev.*, **105**, 1413(1957)
- [18] T. D. Lee, R. Oehme and C. N. Yang. *Phys. Rev.*, **106**, 340(1957)

- [19] CPLEAR Collaboration, A. Angelopoulos *et al.* *Phys. Lett.*, **B 444**, 43, 52 (1998)
- [20] J. Schwinger. *Proc. Nat. Acad. Sc.*, *US* **44**, 223(1958)
- [21] E. J. Konopinski and H. M. Mahmaud. *Phys. Rev.*, **92**, 1045(1953)
- [22] E. C. G. Stüeckelberg. *Helv. Phys. Acta.*, **14**, 32L, 588(1941)
- [23] R. P. Feynman. *Phys. Rev.*, **76**, 749, 769(1949)
- [24] 倪光炯. *物理*, **27**(8), 508(1998)
- [25] Z-Q Ma and G-j Ni. *Phys. Rev.*, **D31**, 1482(1985)
- [26] T. D. Lee and C. S. Wu. *Annual Rev. Nucl. Scien.*, **15**, 381(1965)
- [27] 倪光炯. *复旦学报(自然科学版)*, No. 3~4, 125(1974)
- [28] 倪光炯, 陈苏卿. *复旦学报(自然科学版)*, **35**(3), 325(1996)
- [29] G. j Ni and S-q Chen. in *Photon and Poincare Group*. NOVA Science Publishers, Inc., 1999
- [30] 倪光炯. *科学*, **50**(1), 29(1998); in *Photon: Old Problems in Light of New Ideas*. NOVA Science Publishers, Inc., 2000
- [31] 倪光炯. *物理*, **28**(7), 437(1999)
- [32] 倪光炯, 陈苏卿. *复旦学报(自然科学版)*, **36**(3), 247~252(1997); *Proceeding of International Workshop. "Lorentz Group, CPT and Neutrinos"*, Zacatecas, Mexico, 450~457, 1999 (World Scientific, 2000)
- [33] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. The Benjamin/Cummings Publishing Company, 1985; S. Flügge. *Practical Quantum Mechanics*. Springer-Verlag, 1970
- [34] C. Quigg and J. L. Rosner. *Phys. Rep.*, **56**, 167(1979)
- [35] 杨福家. *原子物理学(第二版)*. 北京: 高等教育出版社, 1990
- [36] T. A. Welton. *Phys. Rev.*, **74**, 1157(1948)
- [37] M. Weitz *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **68** (8), 1120(1992); *ibid*, **72** (3), 328 (1994); *Phys. Rev.*, **A 52**(4), 2664(1995)
- [38] Th. Udem *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **79** (14), 2646(1997)
- [39] U. D. Jentschura, P. J. Mohr, G. Soff. *ibid*, **82** (1), 53(1999)
- [40] B. De Beauvoir *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **78** (3), 440(1997)
- [41] 倪光炯, 王海滨, 严军, 李海龙. *高能物理与核物理*, **24**, 400(2000)
- [42] 杨继锋. 复旦大学博士论文, 1994; *Preprint*, *hep-th/9708104*, *hep-th/9801005*, *hep-th/9807037*; Yang Ji-feng and Ni G. j. *Acta Physica Sinica (Overseas Edition)*. **4**, 88~98(1995)
- [43] Ni G. j and Chen S-q. *Acta Physica Sinica (Overseas Edition)*. **7**(6), 401~413(1998)
- [44] Ni G-j, Lou S-y, Lu W-f, Yang J-f. *Science in China (Series A)*. **41**(11), 1206~1215(1998)

- [45] 倪光炯. 科学, **50**(3), 36~40(1998); in “*Photon: Old Problems in Light of New Ideas*”. NOVA Science Publishers, Inc., 2000
- [46] G-j Ni and Haibin Wang. in *Physics since Parity Symmetry Breaking, in Memory of Professor C. S. Wu*. World Scientific, 1998; 复旦学报(自然科学版), **37**(3), 304(1998)
- [47] G-j Ni, Guo-hong Yang, Rong-tang Fu and Haibin Wang. *I. J. M. P.*, **A 16**, 2873(2001)
- [48] Sze-Shiang Feng, G-j Ni. *Int. Jour. Mod. Phys.*, **A 14**, No. 27, 4259(1999)
- [49] S. Weinberg. *The Quantum Theory of Fields, Vol I*. Cambridge University Press, 1995
- [50] 倪光炯. 物理, **31**(4), 255(2002)
- [51] Review of Particle Physics. *Phys. Rev.*, **D54**, 280~384(1996); *Euro. Phys. Jour.*, **C15**, 350~353(2000)
- [52a] A Chodos *et al.* *Phys. Lett.*, **B 150**, 431(1985)
- [52b] J. Ciborowski, J. Rembielinski. *Europ Phys. J.*, **C8**, 157(1999)
- [53] T. Chang. *J. Phys.*, **A 12**, L203(1979); in “*Proceedings of the Sir A. Eddington Centenary Symposium, Gravitational Radiation and Relativity*” Vol 3 (1986); “*Beyond Relativity*”, Preprint, 2000
- [54] D. Mugnai, A. Ranfagni, R. Ruggeri. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 4830(2000)
- [55] L. J. Wang, A. Kuzmich, A. Dogariu. *Nature*, **406**, 20 July, 277(2000)
- [56] A. M. Steinberg. *Phys. World*, Sept. 21 2000
- [57] T. Chang, G-j Ni. *Fizika B (Zagreb)*, **11**(1), 49 (2002), hep-ph/0009291
- [58] G-j Ni, T. Chang. *Journal of Shaanxi Normal University (Natural Science Edit.)* **30**(3), 32(2002), hep-ph/0103051
- [59] G-j Ni. *ibid*, **29**(3), 1(2001), hep-th/0201077
- [60] G-j Ni. *ibid*, **30**(4), 1(2002), hep-ph/0203060
- [61] G-j Ni. Preprint, hep-ph/0206296, Submitted to *J. M. P. A.*
- [62] G-j Ni. *Proceedings of the 23rd workshop on the High Energy Physics and Field Theory*, Protvino, Russia, June 21~23, 2000, hep-ph/0206250
- [63] O. M. P. Bilaniuk *et al.* *Am. J. Phys.*, **30**, 718(1962)
- [64] Y. Fukuda *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 1562(1998)
- [65] Q. R. Ahmad *et al.* *ibid*, **89**(1), 011301-1-6(2002)
- [66] G-j Ni. *Relativity, Gravitation, Cosmology*, hep-ph/0306028
- [67] H. Murayama. *Phys. World*, May 2002, 35
- [68] 黄志洵. 中国工程科学, **4**(10), 90(2002)
- [69] H. Bondi. *Rev. Mod. Phys.*, **29**, 423(1957)
- [70] L. Schiff. *Phys. Rev. Lett.*, **1**, 254(1958)
- [71] C. Will. *The New Physics*. Edited by Davies P., Cambridge Univ. Press, 1989

- [72] G-j Ni. *Relativity, Gravitation, Cosmology*, physics/0308038
- [73] S. Weinberg. *Gravitation and Cosmology*. John Wiley, 1972 (引力论和宇宙论. 邹振隆, 张历宁等译. 北京: 科学出版社, 1980)
- [74] 倪光炯, 王炎森. 物理与文化. 北京: 高等教育出版社, 2004 年即将出版
- [75] P. Davies. *New Scientist*, 21 Sept. 28(2002)
- [76] B. E. Schaefer. *The Astrophysical Journal*, 583, L67(2003)



## 第十章 从实验看量子力学基本解释

量子力学(QM)建立于1925年,经70多年的迅猛发展,一路上凯歌高奏,所向披靡,其成就是无比辉煌的;可是在1964年,费曼在康乃尔大学演讲时说:“曾经有一个时期报纸上说只有12个人懂相对论.我不相信真有那样的时候……但另一方面,我想我可以挺有把握地说,没有人懂量子力学……假如可能避开它的话,你千万不要不停地对自己说:‘事情怎么会变成这样?’因为这样一来,你将会‘掉到阴沟里去’而进入一个死胡同,从那里还没有一个人能够逃出来过.没有人知道事情怎么会变成这样的。”\* 费曼的意见在过去是对的,不过现在的情况已经极大地改观了.最近几年,时值世纪之交,一系列非常重要的物理实验相继发表,它们做得如此精巧和漂亮,结果是如此地令人惊奇或出人意料,从而把关于QM基本解释的各种矛盾或微妙之处,以十分尖锐的形式推到了全体物理学工作者以及广大爱好科学的公众面前.我们不妨把这些实验分为6类:

- (1) 整数和分数的量子 Hall 效应及与之联系的分数电荷的发现(已在第七章作了初步介绍).
- (2) 关于  $CP$  不守恒即时间反演( $T$ )不守恒的实验.(第九章引文[19])
- (3) 直接验证“波粒二重性”的实验.
- (4) Einstein-Podolsky-Rosen (EPR)实验.
- (5) 薛定谔猫态及其消相干的实验研究.
- (6) 超光速实验,见附录 9B.

本章将重点对(3)、(4)、(5)3类实验作介绍和讨论.爱因斯坦说得好:“科学的全部都不过是对日常思维的一种精炼”\*\*.

### § 10.1 波粒二重性,互补原理和测不准关系

QM所讨论的客体(微观粒子)具有“波粒二重性”,这在哥本哈根学派看来,就是所谓互补原理(Complementarity)的同义语(参见文献[1a]).玻尔

\* R. Feynman, *The Character of Physical Law*. The M. I. T. Press, 1965,亦可见文献[1b].

\*\* 摘自欧洲联合核子研究中心信使报(CERN Courier).

认为：一个粒子有位置( $x$ )，这是粒子性的具体表现；它又有动量

$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$ ，这是波性的表现；而测不准关系(uncertainty relation, 一译“不确定关系”)

$$\delta x \delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (10.1.1)$$

表示：同时测量  $x$  和  $p_x$  是有排斥性的，我们只能在互补的意义下尽可能准确地获得关于客体的知识。还可一般地表述互补原理：对每个动力学自由度，存在一对互补的可观察量。

例如( $x, p_x$ )在经典力学中的每一瞬时都可取准确值，而在 QM 中它们便只是一对互补的可观察量，因此在 QM 中确定一个定态所需的量子数的数目为相应的经典力学中可观察量数目的一半。

不少物理学家一直关注测不准关系(10.1.1)式的本质，甚至对它的正确性(或普遍性)也产生怀疑，下面介绍 3 个典型的实验及其分析。

### 10.1A 光的双缝干涉实验

1802 年 T. Young 发明的光的双缝干涉实验是大家熟悉的，但 Dirac 在 1930 年他的名著《量子力学原理》一书中提出：“每一个光子都部分地进入两分束中的每一束”，“每一个光子只同它自己发生干涉”，“决不会发生不同的两个光子之间的干涉”等(见文献[2]和[3]的 95、260 页)。他的话继承了爱因斯坦把光束看成是光子流的概念。图 10.1.1 是基于此观念而设计的一个理想实验，看能不能判断光子究竟走那一个缝？

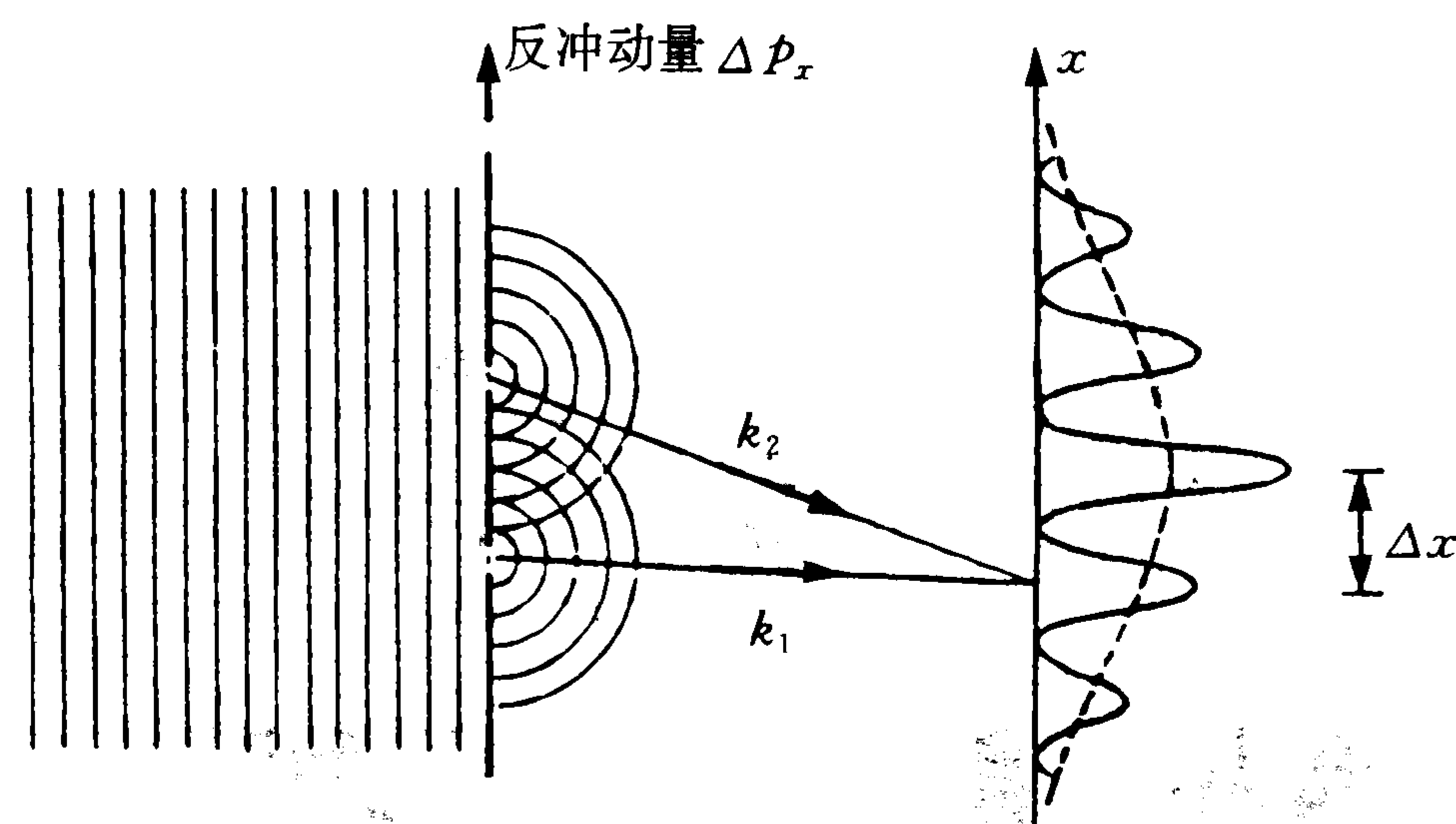


图 10.1.1 光的双缝干涉实验

(我们能够靠刻有双缝的板受到光子的反冲测量来确定光子究竟走那一个缝吗?)

设有两个光子分别穿过不同的缝，到达右方屏幕上离中央极大位置为  $\Delta x$  的第一极大处，则它们动量  $\hbar k_1$  和  $\hbar k_2$  之差沿  $x$  方向的分量  $\Delta k_x$  可近似地表示为

$$\Delta k_x \approx \frac{2\pi}{\Delta x} \quad (10.1.2)$$

根据动量守恒可知,支持双缝的板会受到反冲力,其动量  $p_x$  因此至少必须确定到  $\Delta p_x \sim \hbar \Delta k_x$ ,才能了解光子是从那一个缝穿出来的;可是另一方面,板本身按(10.1.1)式有一个动量的不确定性

$$\delta p_x \sim \frac{\hbar}{\delta x} \quad (10.1.3)$$

其中  $\delta x$  是板上缝的位置不确定性,于是我们希望  $\Delta p_x > \delta p_x$ , 即

$$\Delta k_x > \frac{1}{\delta x} \quad (10.1.4)$$

与(10.1.2)比较后看到这意味着

$$\delta x \geq \Delta x \quad (10.1.5)$$

这表示缝的位置不确定性  $\delta x$  (也就是干涉条纹的位置不确定性)要超过条纹的间距  $\Delta x$ . 换言之,干涉图样被完全“洗掉”了.

这个“双缝干涉而光子反冲”的理想实验说明:只要测不准关系(10.1.1)式成立,我们便无法判定光子究竟走那一条缝. 1930年在第六届索尔维(Solvay)会议上玻尔就是用这种精神来反驳爱因斯坦对 QM 测不准关系  $\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$  的批评的.

### 10.1B 费曼“追踪电子”的双缝干涉实验

费曼在他的 QM 一书<sup>[4]</sup>中讨论电子的双缝实验,见图 10.1.2. 倘若向着屏幕的一方紧靠双缝的地方放上一个电子的探测器,例如用一个很强的光源,当电子经过时,从电子散射光的闪烁,便可能判定电子究竟是从那一个缝穿出来的. 我们假如能做到这一点,便可知道电子的轨道,从双缝的一条缝到屏上一个确定的点.

费曼预言这个实验的结果如下:

- (1) 当关掉光源时,屏上出现与光类似的电子干涉条纹\*;
- (2) 加上光源时,我们看到闪光,从而判定电子总是从两个缝中之一出来,它从未同时穿过两个缝,但与此同时,屏上的干涉条纹消失;
- (3) 再熄灭光源,干涉条纹重新恢复. 简言之,电子是抗拒“追踪监

\* 最早做这种实验的是 C. Jönsson, *Zeit. für Phys.* **161**, 454(1961).

视”的,仅当它未被看到时才会发生干涉现象.

这个理想实验的解释如下:波长小于双缝间距  $d$  的光子照到电子上时必然传递给后者一个动量  $\delta p$ ,于是改变了电子动量  $p$  的方向,使电子在距离  $l$  远处的屏上产生位移  $\delta x$ ,超过干涉条纹的间距  $\Delta x = lh/pd$ .

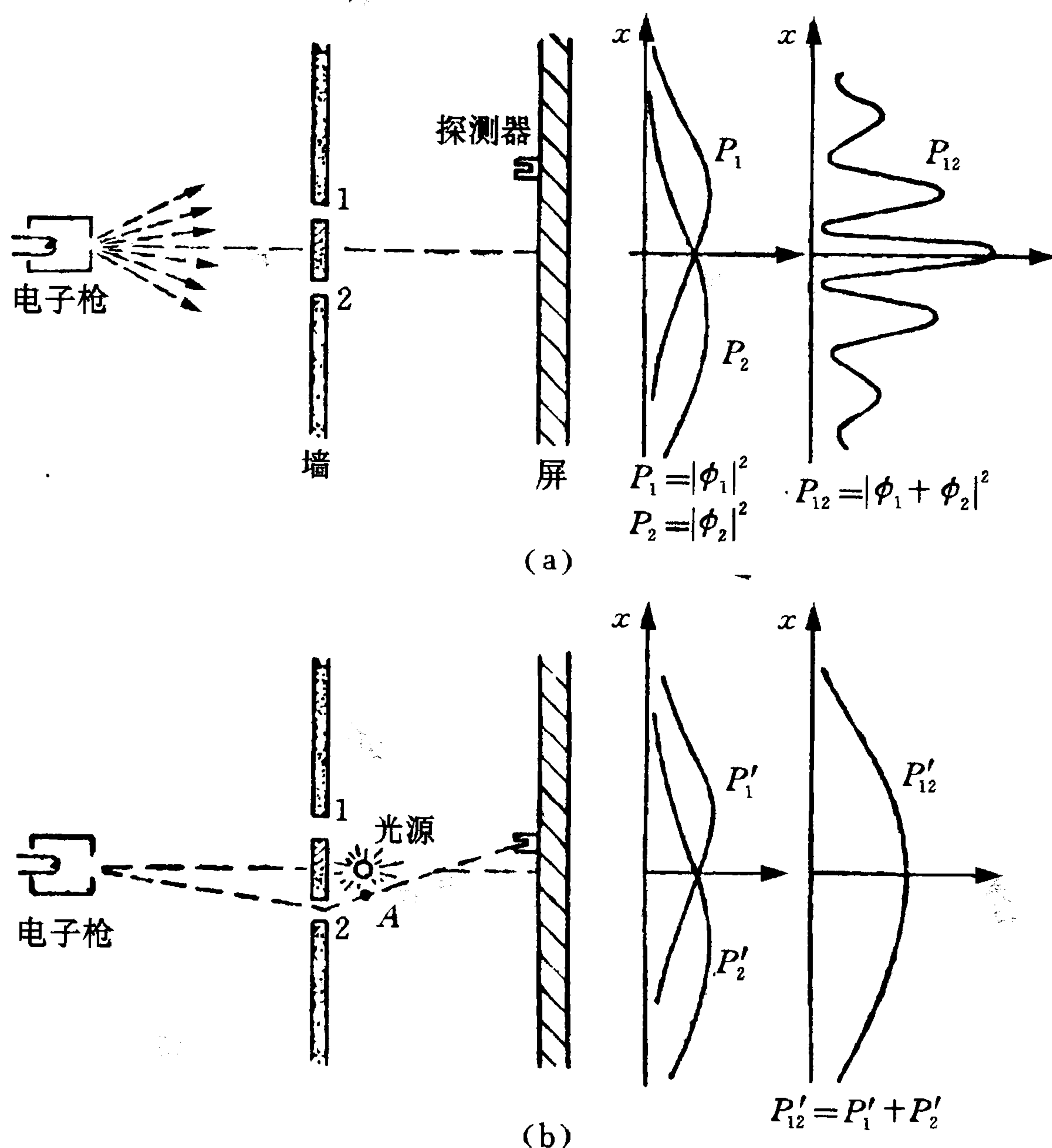


图 10.1.2 费曼“追踪电子”的双缝干涉实验

(a) 正常情况下产生干涉;(b) 加上光源后干涉条纹消失

费曼引用海森堡的话:“要设计一种仪器来确定电子经过那一个小孔,同时又不使电子受到足以破坏掉其干涉图样的扰动是不可能的。”他还指出“QM 的全部理论都取决于测不准原理的正确性”,“测不准关系保护了量子力学。”

### 10.1C 原子干涉仪中的“Which Way”实验

上面两个理想实验用光子或电子,实际上困难很大. Scully 等指出<sup>[1a]</sup>:如果用低温下的冷原子做实验,因为它们的德布罗意波长可以很长,干涉图样将比较容易观察到.困难是用什么方法来判定原子经过双缝时究竟“走那一条路”(Which Way, WW)? 经过长期努力,1998 年德国 Konstanz 大学的 Dürr, Nonn 和 Rempe(DNR)成功地做出了一个 WW 实验,其大体布置如下<sup>[5]</sup>:

为了得到相干的原子束,先要让它经过“单缝”,再投射到“双缝”,而现

在的“单缝”或“双缝”，都是用激光的驻波来代替的，如图 10.1.3 所示。

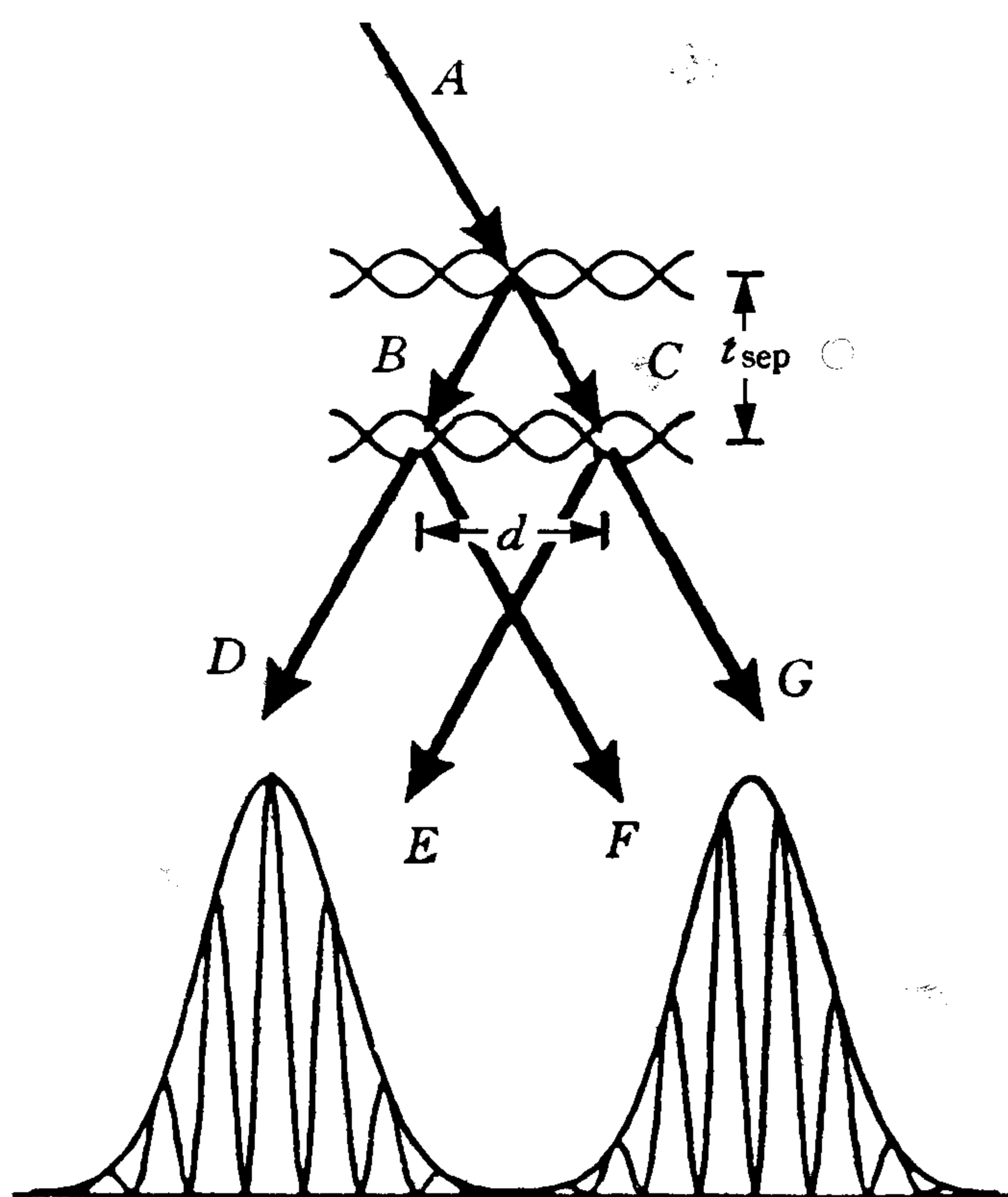


图 10.1.3 文献[5]原子干涉仪的 WW 实验示意图

激光形成的驻波有光强分布  $I(z) = I_0 \cos^2(k_{\text{light}} z)$ ,  $k_{\text{light}}$  是光的波矢(与原子能级的关系见下),对入射原子束提供一个周期性势场(犹如晶格对 X 射线可以起“光栅”的作用那样),入射束 A 便分解为两束 B 和 C, C 是透射束, B 是第一级 Bragg 反射束, B 和 C 束间的夹角相当于动量转移  $2\hbar k_{\text{light}}$ , 改变光强  $I_0$ , 可以改变反射原子的比例, 实验中调节得使反射率约为 50%。

加上第一个激光驻波, 让 B 和 C 原子束在时间  $t_{\text{sep}}$  内自由运动, B 束在图上水平方向运动到左面  $\frac{d}{2}$  距离, 而 C 束则移到右面  $\frac{d}{2}$  的距离. 这时加上第二个激光驻波, 它也使原子束作 50% 的分解, 于是 D 和 E 束向左运动, F 和 G 束向右运动, 在远场处产生图 10.1.3 下方的干涉图样, 中间干涉条纹的间距对应于双缝间隔为  $d$  而波长为原子的德布罗意波长. 条纹的包络形状则反映了原始射束 A 的准直性质. 实验中用原子  $^{85}\text{Rb}$ , 冷却后自由跌落到仪器时的速度仅有 2m/s, 束宽  $450\mu\text{m}$ . 图 10.1.4 是实测的干涉图样, (a)、(b) 分别对应于不同的  $t_{\text{sep}}$  和  $d$  值.

$^{85}\text{Rb}$  原子的能级如图 10.1.5 所示, 激发态  $|e\rangle$  是  $5^2 p_{3/2}$  态, 而基态  $5^2 s_{1/2}$  有超精细结构(hfs), 分裂为  $F = 2$  和 3 两个态, 分别记为  $|2\rangle$  和  $|3\rangle$ , 用频率约 3GHz 的微波可以引起它们之间的感应跃迁(Rabi 振荡).

形成驻波的激光频率  $\omega_{\text{light}}$  刚好位于  $|2\rangle \rightarrow |e\rangle$  和  $|3\rangle \rightarrow |e\rangle$  能级差的中间, 因此与共振频率  $\omega_{\text{atom}}$  的“失频值”  $\Delta = \omega_{\text{light}} - \omega_{\text{atom}}$  对  $\Delta_{2e}$  和  $\Delta_{3e}$  有同样绝对值但符号相反. ( $\Delta$  还是足够大, 故自发辐射可以忽略不计.)

注意: 当原子的(质心)波函数从激光束反射或透射时的相位改变取决于原子的内部状态. 我们不妨回忆光学, 那时光束从光密媒质上反射

时会有相位  $\pi$  的突变, 而在光疏媒质上反射或向任意媒质透射时则没有附加的相位改变. 现在处于  $|2\rangle$  态的原子 ( $\Delta_{2e} < 0$ ) 在透射时波函数相位有  $\pi$  的突变, 而反射时(或  $|3\rangle$  态的原子在透射或反射时)则不改变.

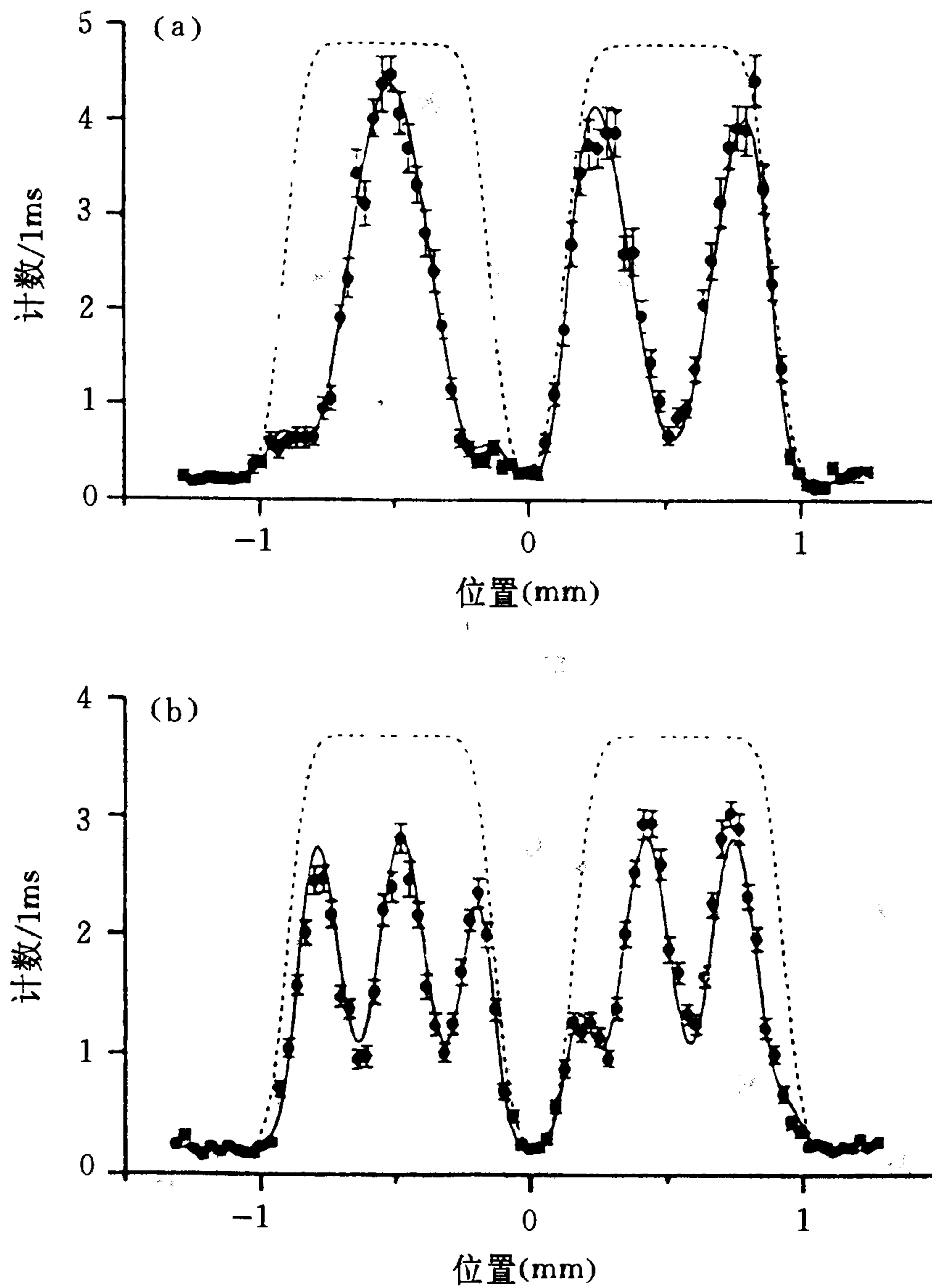


图 10.1.4 在干涉仪远场处看到的干涉图样

(a) 数据取自  $t_{\text{sep}} = 105\mu\text{s}$ ,  $d = 1.3\mu\text{m}$  的实验条件;

(b)  $t_{\text{sep}} = 255\mu\text{s}$ ,  $d = 3.1\mu\text{m}$ . 图上虚线表示单独测量的原子束包络轮廓, 它有两个宽阔的峰. 右边的实线勾勒出实验点的干涉图样是由  $F$  和  $G$  束产生, 而左边的由  $D$  和  $E$  束产生, 它们是互补的, 即左边的干涉极大(小)对应于右边的干涉极小(大).

这一相移的不同可以转换成超精细能级间居布数的差异, 为此目的在激光束两侧加上微波 ( $\frac{\pi}{2}$ ) 脉冲, 它与 hfs 跃迁在能量上共振, 如图 10.1.5(b)所示. 原子束先在  $|2\rangle$  态中制备好, 经第一个微波脉冲作用后变为  $\frac{(|2\rangle + |3\rangle)}{\sqrt{2}}$  的相干叠加态. 然后被激光驻波分裂为反射束  $B$  和透射束  $C$ , 其中  $B$  的内部态不变而  $C$  的内部态变为  $\frac{(|3\rangle - |2\rangle)}{\sqrt{2}}$ , 于是整个体系的态矢变为

$$|\psi\rangle \propto |\psi_B\rangle \otimes (|3\rangle + |2\rangle) + |\psi_C\rangle \otimes (|3\rangle - |2\rangle) \quad (10.1.6)$$

其中 $|\psi_B\rangle$ 和 $|\psi_C\rangle$ 分别描写反射(B)束和透射(C)束的质心运动. 我们看到原子的内部态与它的质心运动自由度之间产生了一种纠缠(entanglement), 这对本实验中信息存贮是关键的性质. 然后第二个微波脉冲再对这两束作用, 使 B 束内部态转变为 $|3\rangle$ 而 C 束的转变 $(-|2\rangle)$ , 即整个态矢变为

$$|\psi\rangle \propto |\psi_B\rangle \otimes |3\rangle - |\psi_C\rangle \otimes |2\rangle \quad (10.1.7)$$

由此式可见, 原子走那一条路与它的内部态关联在一起.

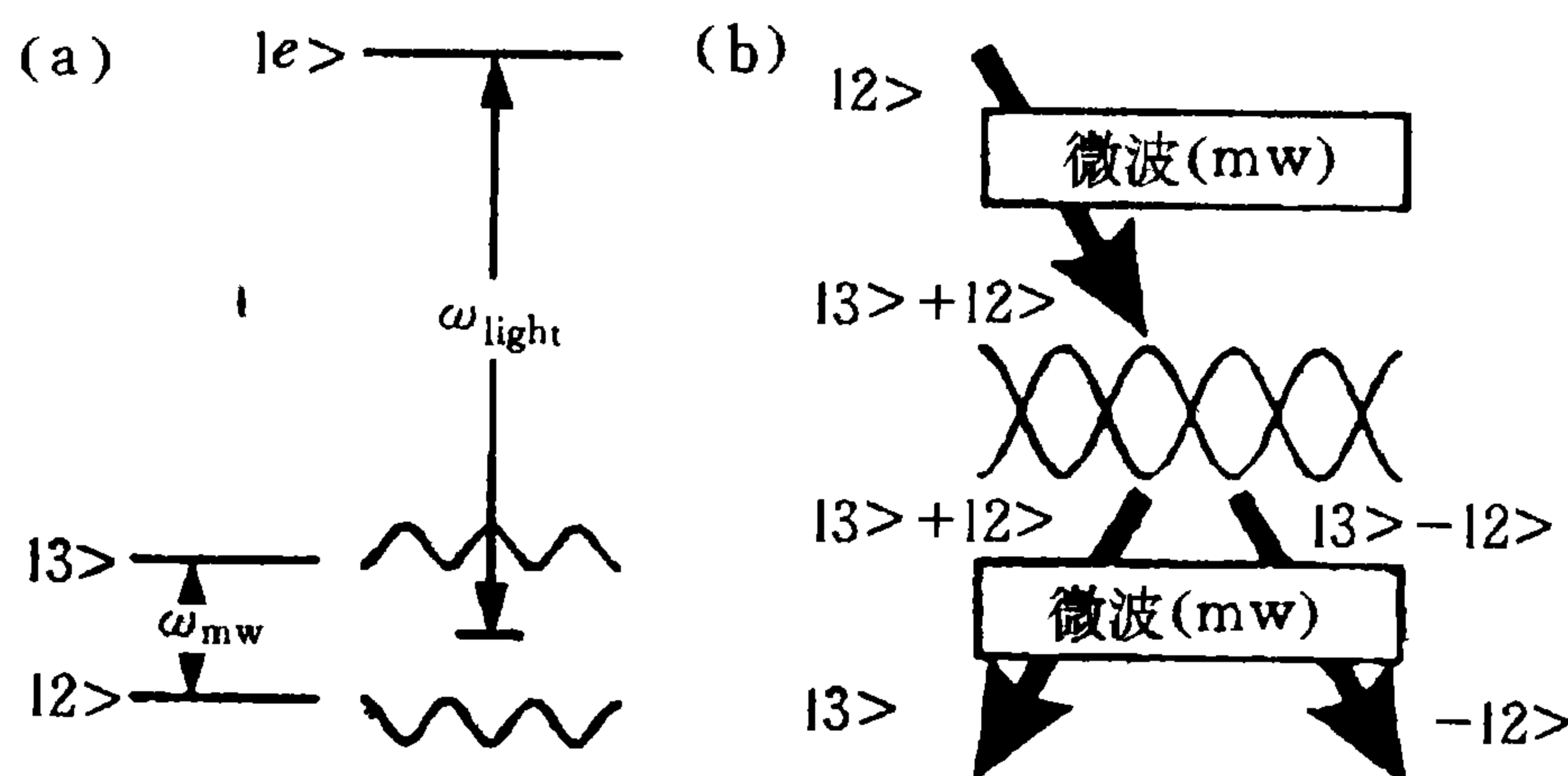


图 10.1.5 WW 实验中的信息存贮

(a)  $^{85}\text{Rb}$  的原子能级图; (b) 激光驻波使原子束分裂并产生随内部态和质心运动态而不同的相移. 两个微波  $\frac{\pi}{2}$  脉冲则把相移的不同转换成居布数的差异.

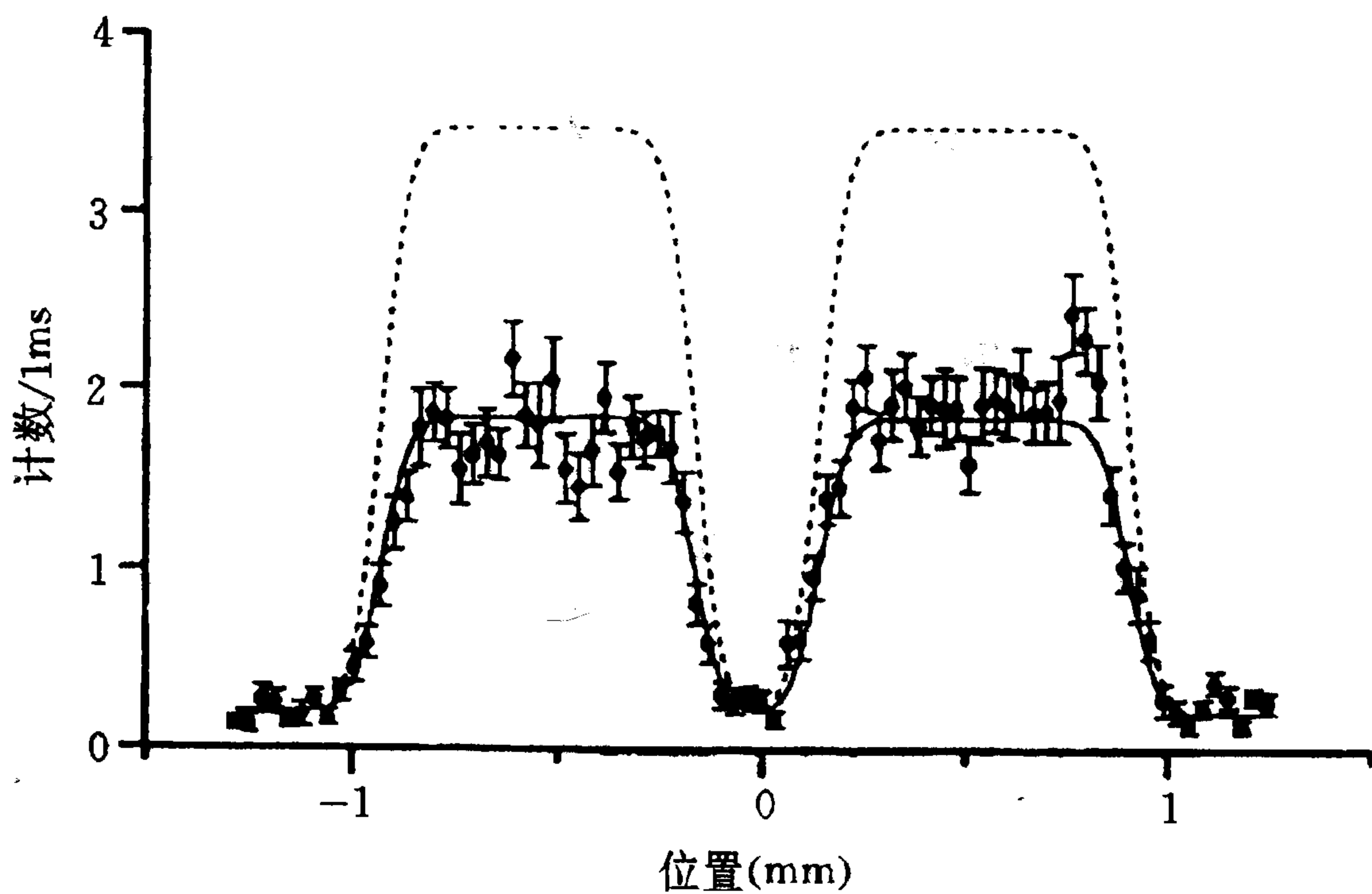


图 10.1.6

实验条件与图 10.1.4a 相同, 不过当用了原子的内部态作为 WW 信息而存贮后, 干涉条纹消失了

然后看图 10.1.3 的下方. B, C 束经第二个激光驻波分解为 D、E、F、G 四束, 内部态不再变化.

这时在远场处的干涉图样如图 10.1.6 所示, 干涉条纹不见了, 虽然实验条件与图 10.1.4a 相同, 不过现在加上了两个微波脉冲以贮存“走那一条路(WW)”的信息而已. 注意, 最后记录时并不区分 $|2\rangle$ 或 $|3\rangle$ 态原子, 即并不去读出贮存在探测器中的“WW”信息, 后者被贮存在探测器中并可能被读出的这一事实就已经把干涉图样破坏了. 实验也证明了: 当“WW”探测器认真地被读出时, 即只探测 $|2\rangle$ (或 $|3\rangle$ )状态的原子时, 也没

有干涉条纹. 当然这时信号的绝对大小(包络)降为不读出时的一半.

干涉条纹的消失原因则可以从图 10.1.3 下方 4 条原子束表示看出:

$$|\psi\rangle \propto |\psi_D\rangle \otimes |3\rangle - |\psi_E\rangle \otimes |2\rangle + |\psi_F\rangle \otimes |3\rangle + |\psi_G\rangle \otimes |2\rangle \quad (10.1.8)$$

在远场处  $D$  和  $E$  两束形成左方的干涉图形, 其原子强度分布为

$$P(z) \propto |\psi_D(z)|^2 + |\psi_E(z)|^2 - \psi_D^*(z)\psi_E(z)\langle 3|2\rangle - \psi_E^*(z)\psi_D(z)\langle 2|3\rangle \quad (10.1.9)$$

(在左方  $\psi_F(z)$  和  $\psi_G(z)$  的波函数为零), 前两项给出包络线下的平均强度, 后两项是干涉项, 但它们因  $\langle 2|3\rangle = 0$  而消失. 由此可见, 正是 WW 探测器与原子运动之间的关联破坏了干涉图样.

上面最后一句话其实对前面两个理想实验也是成立的, 不过那时用双缝的反冲或光被粒子的反冲来记录 WW 信息, 因而用测不准关系 (10.1.1) 式来解释干涉图样的消失, 现在则用原子的内部态来存贮 WW 信息. 注意实验中束宽达到  $450\mu\text{m}$ , 而  $B, C$  两束间的相互位移仅有  $d \sim \mu\text{m}$ , 所以现在的 WW 信息并不包含任何横向位置的信息.

$B, C$  两束在空间上重叠在一起, 但在动量空间中横向的相对移动是  $2\hbar k_{\text{light}}$ , 这是光场传递给第一 Bragg 反射束的动量, 所以贮存 WW 信息相当于贮存横向动量信息, 其准确度为  $\Delta p_z \approx \hbar k_{\text{light}}$ , 测不准关系 (10.1.1) 式意味着存贮过程对横向(近场)位置的反作用约  $\Delta z \approx \lambda_{\text{light}}$ , 但这一反作用远不足以破坏远场处的干涉图样, (后者条纹间距达到 mm 量级, 虽然是粒子位置分布, 实际上是反映了动量空间的分布.) 另一方面, 微波波长为 10cm, 它完全不能确定原子位置, 同时它传给原子的动量仅能影响干涉条纹移动  $\pm 10\text{nm}$ . 因此实验的作者[5]认为: “互补原理不一定是靠测不准关系 (10.1.1) 来实施的”.

## § 10.2 Einstein-Podolsky-Rosen 佯谬及其实验检验

### 10.2A EPR 佯谬与非定域纠缠态

我们已经在 9.5A 节讨论了 Einstein-Podolsky-Rosen (EPR) 在他们 1935 年的文章中提出的佯谬, 隐含了一个量子力学中无自旋的反粒子问题, 但实际上 EPR 论文经过 Bohm 分析后很快地被转到对含自旋的粒子或光子问题的讨论上去. 现在我们通过费曼书<sup>[4]</sup>中 § 18-3 的例子来说明 EPR 论文提出了一个何等尖锐的问题.



由正负电子  $e^+$  和  $e^-$  组成的束缚态体系叫做“电子偶素”，它的基态有角动量  $J=0$ ，以平均寿命  $\tau \sim 10^{-10}$  秒衰变为两个光子  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$ 。由于动量守恒，在质心系中两个光子必定以相反的动量飞出。由于角动量守恒，若  $\gamma_1$  光子为右旋偏振态（记为  $|R_1\rangle$ ），则  $\gamma_2$  亦必为右旋  $|R_2\rangle$ ；若  $\gamma_1$  为左旋  $|L_1\rangle$ ， $\gamma_2$  亦必为左旋  $|L_2\rangle$ 。因正反粒子内禀宇称相反，衰变末态是总宇称为  $(-1)$  的本征态

$$|F\rangle = |R_1R_2\rangle - |L_1L_2\rangle \quad (10.2.1)$$

设甲 (Alice, A) 在左方探测  $\gamma_1$ ，乙 (Bob, B) 在右方探测  $\gamma_2$ ，则无论甲或乙都各有 50% 的几率测到一个右旋光子或一个左旋光子，而如果他们使用线性偏振的探测器，则也必各有 50% 的几率测到水平的  $x$  偏振态  $|x\rangle$  或垂直的  $y$  偏振态  $|y\rangle$ 。QM 计算预告：甲测到  $x$  偏振而同时乙测到  $y$  偏振的几率幅，亦即 (10.2.1) 式表示的末态到  $|x_1y_2\rangle$  态的投影等于\*

$$\langle x_1y_2 | F \rangle = i \neq 0 \quad (10.2.2)$$

这也许并不令人惊奇，妙的是 QM 又预告

$$\langle x_1x_2 | F \rangle = \langle y_1y_2 | F \rangle = 0 \quad (10.2.3)$$

这个结果从“经典”观点看就不可思议了：当  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$  已飞离很远时，它们中任何一个若非左旋，必为右旋，也总有 50% 的机会处于  $x$  偏振或  $y$  偏振态，为什么在甲测到  $x$  偏振的  $\gamma_1$  时，乙就不能测到  $x$  偏振的  $\gamma_2$  呢？为什么甲一旦测到  $|x_1\rangle$ （或  $|y_1\rangle$ ）时便可以预言乙必测到  $|y_2\rangle$ （或  $|x_2\rangle$ ）呢？

QM 的奥妙在于用 (10.2.1) 式表示的衰变末态并不是两个光子态因式化的乘积如  $|R_1R_2\rangle$  或  $|L_1L_2\rangle$ ，而是它们两者的线性叠加态，现在通称为纠缠态 (entangled state)。纠缠态是二粒子的非定域量子关联态，是经典观念无法理解的。EPR 论文之所以在 60 多年来强烈地吸引了人们的兴趣，按许多物理学家的理解，就在于他们文章中提出了一个命题：“当曾经相互作用过的子系  $S_1$  与  $S_2$  在空间分开很远后，对其中之一的测量应该独立于对另一个的测量”，( $S_1$  与  $S_2$  在本节例子中就是  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$ )。这个命题常被称为“Einstein 定域性原理”，作为一种信念，它是建筑在相对论中任何信号速度都不可能超过光速这一论断之上的，而 QM 的预告却不服从它，所以被称为 EPR 佯谬。

\*  $|R\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i|y\rangle)$ ,  $|L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i|y\rangle)$

### 10.2B Bell 不等式及其实验检验

从 QM 建立之日起,不少物理学家就对它的统计解释有怀疑,认为统计性可能是一种由更深层次的“隐变量”决定的表观现象,因而 QM 并不是最后的完备的理论. EPR 提出的问题使这一争论更尖锐化了,但是 1964 年 Bell 的一篇题为“论 EPR 佯谬”的论文才使问题真正置于实验可检验的位置上(见文献[3]、[6]、[7]、[8]).

Bell 讨论由两个自旋为  $\frac{1}{2}$  (以  $\hbar$  为单位) 的粒子所组成的总自旋为零的单态体系,考虑它们在不同方向上自旋分量的关联,导出了一个可供实验检验的不等式来判断 QM 的正确性或“隐变量”的可能存在性.

设  $\mathbf{a}$  和  $\mathbf{b}$  为沿空间两任意方向的单位矢量,粒子 1 沿  $\mathbf{a}$  方向的自旋分量  $\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{a}$  的测量值是  $A(\mathbf{a})$ ,粒子 2 沿  $\mathbf{b}$  方向  $\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{b}$  的测量值是  $B(\mathbf{b})$ ,  $A(\mathbf{a})$  和  $B(\mathbf{b})$  都只能取 1 或 -1 的值.(光子也只有两个独立的偏振分量,所以下面的讨论对光子也适用.)

假设有某种隐变量理论,认为  $A(\mathbf{a})$  和  $B(\mathbf{b})$  都是由某个“定域隐变量”(Local Hidden Variable, LHV)  $\lambda$  按一定的函数关系决定的,亦即

$$A(\mathbf{a}, \lambda) = \pm 1, \quad B(\mathbf{b}, \lambda) = \pm 1 \quad (10.2.4)$$

此式的意思是: $\lambda$  取某些值时测量值为 +1,  $\lambda$  取另外一些值时测量值为 -1. 所谓“定域”的意思是指:粒子 1 的取值  $A$  与  $\mathbf{b}$  的方向无关,同时粒子 2 的取值  $B$  也与  $\mathbf{a}$  的方向无关.

设  $\rho(\lambda)$  是  $\lambda$  的(归一化的)几率分布函数,则按 LHV 理论预期:粒子 1 在  $\mathbf{a}$  方向自旋分量取值为  $A(\mathbf{a}, \lambda)$  而粒子 2 在  $\mathbf{b}$  方向自旋取值为  $B(\mathbf{b}, \lambda)$  的关联函数期待值应为

$$E(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \int d\lambda \rho(\lambda) A(\mathbf{a}, \lambda) B(\mathbf{b}, \lambda) \quad (10.2.5)$$

考虑  $\mathbf{a}'$  和  $\mathbf{b}'$  为对粒子 1 和 2 分别测自旋分量的另外两个方向,则仿照(10.2.5)式可以写出

$$\begin{aligned} E(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - E(\mathbf{a}, \mathbf{b}') &= \int d\lambda \rho(\lambda) [A(\mathbf{a}, \lambda) B(\mathbf{b}, \lambda) - A(\mathbf{a}, \lambda) B(\mathbf{b}', \lambda)] \\ &= \int d\lambda \rho(\lambda) A(\mathbf{a}, \lambda) B(\mathbf{b}, \lambda) [1 \pm A(\mathbf{a}', \lambda) B(\mathbf{b}', \lambda)] \\ &\quad - \int d\lambda \rho(\lambda) A(\mathbf{a}, \lambda) B(\mathbf{b}', \lambda) [1 \pm A(\mathbf{a}', \lambda) B(\mathbf{b}, \lambda)] \end{aligned} \quad (10.2.6)$$

由于(10.2.4)式保证如下的不等式成立:

$$A(\mathbf{a}, \lambda)B(\mathbf{b}, \lambda) \leq 1, \quad A(\mathbf{a}, \lambda)B(\mathbf{b}', \lambda) \geq -1 \quad (10.2.7)$$

因此(10.2.6)式的绝对值必定满足如下的不等式:

$$\begin{aligned} |E(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - E(\mathbf{a}, \mathbf{b}')| &\leq \int d\lambda \rho(\lambda) [1 \pm A(\mathbf{a}', \lambda)B(\mathbf{b}', \lambda)] \\ &\quad + \int d\lambda \rho(\lambda) [1 \pm A(\mathbf{a}', \lambda)B(\mathbf{b}, \lambda)] \end{aligned}$$

再用(10.2.5)式及  $\rho(\lambda)$  的归一化条件, 便得到

$$|E(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - E(\mathbf{a}, \mathbf{b}')| \leq 2 \pm [E(\mathbf{a}', \mathbf{b}') + E(\mathbf{a}', \mathbf{b})] \quad (10.2.8)$$

这就是一般形式的 Bell 不等式, 证毕.

倘若限于讨论粒子 1 和 2 组成的单态, 则它们沿着同一方向  $\mathbf{a}$  的自旋分量总是相反的, 即

$$A(\mathbf{a}, \lambda) = -B(\mathbf{a}, \lambda) \quad (10.2.9)$$

以此代入(10.2.5)式可见

$$E(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = -1 \quad (10.2.10)$$

这表示处于单态的两个粒子的自旋分量总是负关联的. 在这种限制下, 可在(10.2.8)式中取  $\mathbf{a}' = \mathbf{b}'$ , 利用(10.2.10)式后可得

$$|E(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - E(\mathbf{a}, \mathbf{b}')| \leq 1 + E(\mathbf{b}, \mathbf{b}') \quad (10.2.11)$$

这就是仅对单态适用的、原始形式的 Bell 不等式.

任何 LHV 理论的预告必须满足不等式(10.2.8)或(10.2.11), 那么 QM 计算的结果又如何呢? 用 QM 中熟悉的单态自旋波函数, 不难算出两个粒子的自旋关联函数等于

$$E(\mathbf{a}, \mathbf{b}) |_{\text{QM}} = \langle (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \mathbf{b}) \rangle_{\text{单态}} = -\cos(\mathbf{a}, \mathbf{b}) \quad (10.2.12)$$

(注意(10.2.10)式为(10.2.12)式的特例), 以(10.2.12)式代入(10.2.11)式, 得到

$$|\cos(\mathbf{a}, \mathbf{b}) - \cos(\mathbf{a}, \mathbf{b}')| \leq 1 - \cos(\mathbf{b}, \mathbf{b}') \quad (10.2.13)$$

不难看出, 此式一般并不成立. 例如取  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{b}'$  为 3 个共平面的单位矢量, 且其间相互夹角依次为  $\frac{\pi}{3}$ , 则

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{b}' = \cos \frac{\pi}{3} = \frac{1}{2}, \quad \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}' = \cos \frac{2\pi}{3} = -\frac{1}{2}$$

代入(10.2.13)式左方得到 1, 而右方为  $\frac{1}{2}$ , 明显错误! 这就是说, QM 的预告是违反 Bell 不等式的. 而这便与任何基于二粒子的“定域性”或“可分离性”的 LHV 理论(它们满足 Bell 不等式)在实验上可以泾渭分明地区别开来了.

我们不再讨论 Bell 不等式后来在理论上的推广或证明方法的改进, 而直接看它在 EPR 实验上受到检验的情况. 从 70 年代开始, 各国物理学家先后做了 10 多项 EPR 实验以进一步检验 Bell 不等式, 由于实验条件的限制, 做光子关联实验最多, 也最成功. 下面举几个重要的代表性实验(参见文献[3]、[7]):

### 1. 静态 EPR 实验

例如 10.2A 节中讨论的电子偶素湮灭为两个光子的偏振关联实验已由吴健雄等科学家在 1975 年实现, 证明 QM 预言是正确的.

### 2. 偏振分析器随时间改变的实验

Bell 在他的文章中曾指出静态 EPR 实验的不足: 因实验装置既早就安排好, 就不能排除有一种低于或等于光速的信号(即使对其本性我们还不清楚)从一个观察者(甲)传到另一观察者(乙)从而造成实验观察到的关联的可能性. 假如存在这种相互作用, 则作为证明 Bell 不等式前提的“Einstein 定域性条件”便不再成立, 而 Bell 不等式也就不能作为 QM 或 LHV 理论究竟谁对谁错的严格判据了. 因此 Bell 希望实验装置在粒子飞行过程中随时间改变, 这样一来, 定域性条件便变成“Einstein 因果性”(任何信号都不能超光速)的直接结果了. 1982 年法国物理学家 Aspect 等人的实验<sup>[9]</sup>就是第一个这样的实验, 他们利用钙原子发出的两个级联光子. (我们略去实验装置的描述, 可参见文献[3]. 测量的 Bell 参数  $S$ (参见(10.2.17)式)按广义的 Bell 不等式应受限制

$$-1 \leq S \leq 0 \quad (10.2.14)$$

而实测结果是

$$S^{\text{exp}} = 0.101 \pm 0.020 \quad (10.2.15)$$

它明显地违反(10.2.14)式(偏离 5 个标准偏差), 而与 QM 计算预告值

$$S^{\text{QM}} = 0.112 \quad (10.2.16)$$

很好地符合.

Aspect 实验中两个光子线性偏振分析器是用两个不同频率  $\nu$ (约

50MHz)的声-光开关来作准周期性调制的,周期  $T = \frac{1}{\nu} \sim 2 \times 10^{-8}$  秒短于光子在左右两方探测器(距离  $L = 12$  米)间飞行所需的时间  $\frac{L}{c} \sim 4 \times 10^{-8}$  秒. 实验很成功地支持了 QM 的正确性.

### 3. Einstein 定域性条件的严格检验

1998 年奥地利 Innsbruck 大学的 Weihs 实验<sup>[10]</sup> 是 Aspect 实验的直接继续. 他们用现代激光技术产生波长为 702nm 的双光子纠缠态. 为了尽可能严格地保证 Einstein 定域性条件,他们用两个办法确保甲乙两方的观察者处于类空间隔的位置上:

(1) 甲乙两观察点的空间距离远达 400 米,光子沿光纤传输需时间  $1.3\mu\text{s}$ .

(2) 采用足够快速而且混乱(random)的分析器装置以及完全独立的数据记录. 这样保证两次读数的时间间隔小于 100ns,它远短于  $1.3\mu\text{s}$ ,从而排除了任何等于或低于光速的信号使左右方读数发生关联的可能性.

实验目的是检查如下的推广形式的 Bell 不等式(称为 CHSH 不等式<sup>[11]</sup>),即 Bell 参数

$$S(\alpha, \alpha', \beta, \beta') = |E(\alpha, \beta) - E(\alpha', \beta)| + |E(\alpha, \beta') + E(\alpha', \beta')| \leq 2 \quad (10.2.17)$$

其中  $E(\alpha, \beta)$  是甲的偏振器方向为  $\alpha$  而乙的为  $\beta$  时光子偏振关联的期待值(比较(10.2.8)式,两者完全类似),而 QM 预告

$$E^{\text{QM}}(\alpha, \beta) = -\cos[2(\beta - \alpha)] \quad (10.2.18)$$

分析可见当甲取  $\alpha = 0^\circ$ ,  $\alpha' = 45^\circ$ ,乙取  $\beta = 22.5^\circ$ ,  $\beta' = 67.5^\circ$  时,QM 对不等式(10.2.17)的违反达到极大,即

$$S_{\text{max}}^{\text{QM}} = S^{\text{QM}}(0^\circ, 45^\circ, 22.5^\circ, 67.5^\circ) = 2\sqrt{2} = 2.82 > 2 \quad (10.2.19a)$$

实验在 10 秒时间内记录到 14 700 个符合事件,给出

$$S^{\text{exp}} = 2.73 \pm 0.02 \quad (10.2.19b)$$

在 10 个标准偏差的精度上违反不等式(10.2.17)而支持了 QM.

## 10.2C 双光子的非经典干涉效应与 Franson 型实验中的长程关联

### 1. 单光子干涉实验

按照 Dirac 所指出：一个光子是自己与自己干涉的(见 § 10.1A)，1988 年 Franson 和 Potocki 做了一个很成功的单光子干涉实验<sup>[12]</sup>，他们用氙气的单个原子被电子激发作为光源，产生波长为 585.2nm 的光子，在长度  $L = 45\text{m}$  的干涉仪中先分开沿两条路径传播再合并产生干涉，干涉图样由光子计数率  $R$  作为两路径光程差产生的光的位相差  $\Delta\phi$  的函数，可表示为

$$R(\Delta\phi) = a + b\cos^2\left(\frac{\Delta\phi}{2}\right) \quad (10.2.20)$$

干涉图样的“清晰度”(Visibility)定义为：

$$V \equiv \frac{R_{\max} - R_{\min}}{R_{\max} + R_{\min}} \quad (10.2.21)$$

在实验结果中达到 0.6，与高强度光源所产生的  $V$  在  $\pm 5\%$  精度内一致。但是注意：本实验中因  $L \gg c\tau$  ( $\tau = 14.5\text{ns}$  是原子处于激发态的寿命) 而  $R$  可低到只有  $0.08\text{s}^{-1}$ ，相继两个光子是确实没有关联的。

### 2. 双光子“四阶干涉”的非经典效应

如图 10.2.1，两个(次级)光源  $A$  和  $B$  产生的光场  $E_A(x_1) = a_A e^{i(k_A \cdot r_{A1} + \phi_A)}$  和  $E_B(x_1) = a_B e^{i(k_B \cdot r_{B1} + \phi_B)}$  在屏上一点( $x_1$ )叠加起来： $E(x_1) = E_A(x_1) + E_B(x_1)$ 。其中  $a_A, a_B$  在经典电磁波理论中是各自的振幅，而  $\phi_A, \phi_B$  为各自的初相位，则经典理论预告：当  $\phi_A - \phi_B$  随时间无规变化，通常的“二阶干涉”不发生，即在空间一点光强  $I$  的平均值不变：

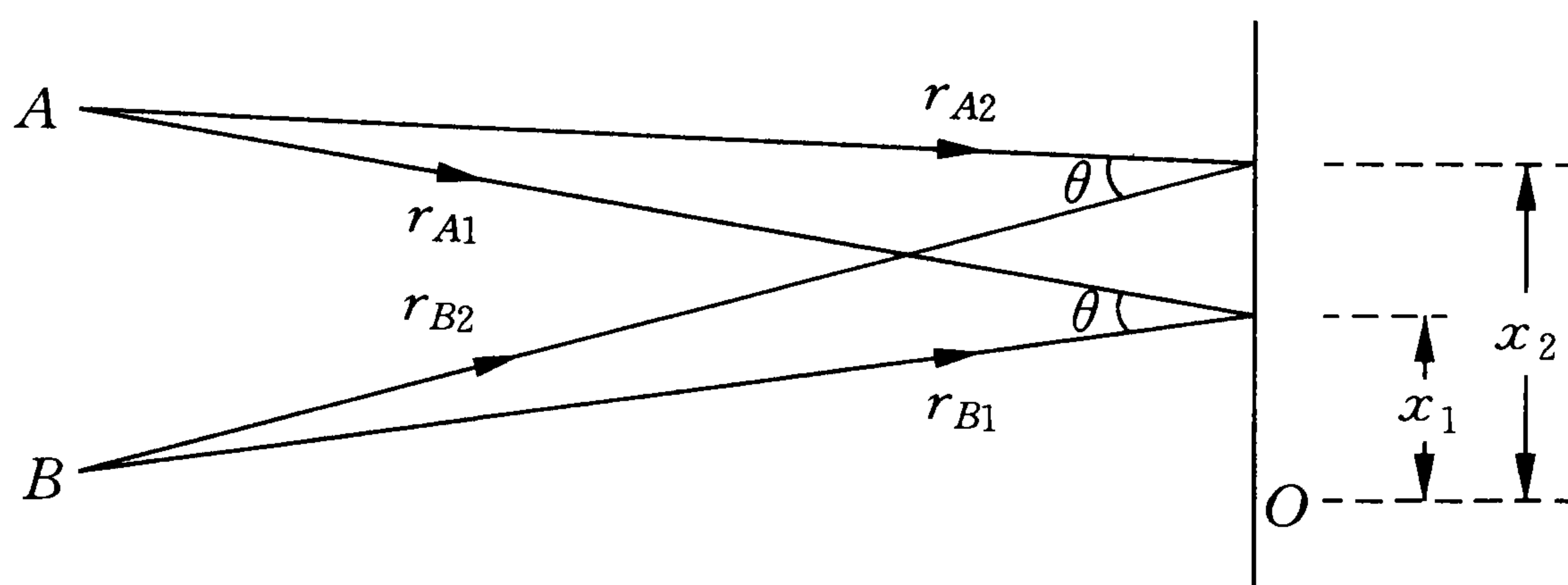


图 10.2.1 双光源  $A$  和  $B$  在屏上两点  $x_1$  和  $x_2$  产生干涉

$$\langle I(x_1, t) \rangle \sim \langle E^*(x_1, t)E(x_1, t) \rangle = \text{常数}, \quad [(\phi_A - \phi_B) \text{ 混乱}] \quad (10.2.22)$$

然而即使  $(\phi_A - \phi_B)$  无规变化，同时测量空间两点( $x_1$  和  $x_2$ )的光强关联却不等于零，称为“四阶干涉效应”：

$$\langle I(x_1, t)I(x_2, t) \rangle \sim \left[ 1 + V \cos\left(\frac{2\pi(x_1 - x_2)}{L}\right) \right] \quad (10.2.23)$$

其中  $L = \frac{\lambda}{\theta}$  是经典干涉条纹在屏上的间距(见图 10.2.1), 而常数系数  $V$  即干涉“清晰度”, 在经典理论中最大不超过  $1/2$ :

$$V_{\text{经典}} = \frac{2\langle |a_A|^2 |a_B|^2 \rangle}{\langle (|a_A|^2 + |a_B|^2)^2 \rangle} \leq \frac{1}{2} \quad (10.2.24)$$

基于光子观念的量子理论给出不同的预告. 此时经典理论中的  $a_A$  及  $a_A^*$  变为光子算符  $\hat{a}_A$  及  $\hat{a}_A^\dagger$  (由  $C$  数变为  $q$  数, 取  $\phi_A = \phi_B = 0$ ).  $A$  和  $B$  独立地发光子, 又设屏上的光子探测器的有限宽度为  $\Delta x$ , 则  $x_1$  和  $x_2$  两处的符合计数率将反映如下的“联合探测几率”(与(10.2.23)式对应):

$$P_{12}(x_1, x_2) \propto \left[ 1 + V_{\text{量子}} \cos\left(\frac{2\pi(x_1 - x_2)}{L}\right) \right] \quad (10.2.25)$$

$$V_{\text{量子}} = \left[ \frac{\sin \frac{\pi \Delta x}{L}}{\frac{\pi \Delta x}{L}} \right]^2 \xrightarrow{\Delta x \rightarrow 0} 1 \quad (10.2.26)$$

由对比可见, 我们可把  $V \leq \frac{1}{2}$  视为“光的四阶干涉”中的“Bell 不等式”,

而  $V > \frac{1}{2}$  作为光的量子本性的判据.

在 Ghosh 和 Mandel 的实验中<sup>[13]</sup>, 用波长为 351.1nm 的激光照到非线性晶体  $\text{LiIO}_3$  上, 产生两个半频率的光子, 分别以  $\pm 3.3^\circ$  的角度射出, 再在 1.1m 远的板上汇合, 干涉图样被放大到  $L \approx 0.34\text{mm}$ , 在  $x_1$  和  $x_2$  点收集光子的玻板厚  $\Delta x \approx 0.14\text{mm}$ , 用光电倍增管记录时单独的计数率分别为  $\frac{1003}{\text{s}}$  和  $\frac{1000}{\text{s}}$ , 而符合计数率 (减去偶然符合的计数率  $\frac{(18.2 \pm 0.3)}{\text{h}}$  后) 反映  $P_{12}(x_1, x_2)$  有最大值  $\frac{(9.0 \pm 1.4)}{\text{h}}$ , 最小值  $\frac{(1.6 \pm 1.5)}{\text{h}}$ , 即  $V_{\text{实验}} \approx 0.68$ , 与量子理论符合而明显地超过经典理论的预告值  $V_{\text{经}} \approx 0.275$ . 双光子量子“四阶干涉”效应在概念上的尖锐性在于: 原则上, 在一点 ( $x_1$ ) 探测到一个光子便可以排除在另外一些点 ( $x_2$  等) 上同时探测到另一光子的可能性.

### 3. Franson 型的干涉实验显示了双光子的长程关联

1989 年 Franson 建议了一个新实验<sup>[14]</sup>, 目的是直接检验 QM 中关于光子位置或发射时间的不确定性, 即希望进一步判断“波粒二重性”与 LHV 理论究竟谁对? 同时希望光程差远远大于通常的(一阶)相干长度.

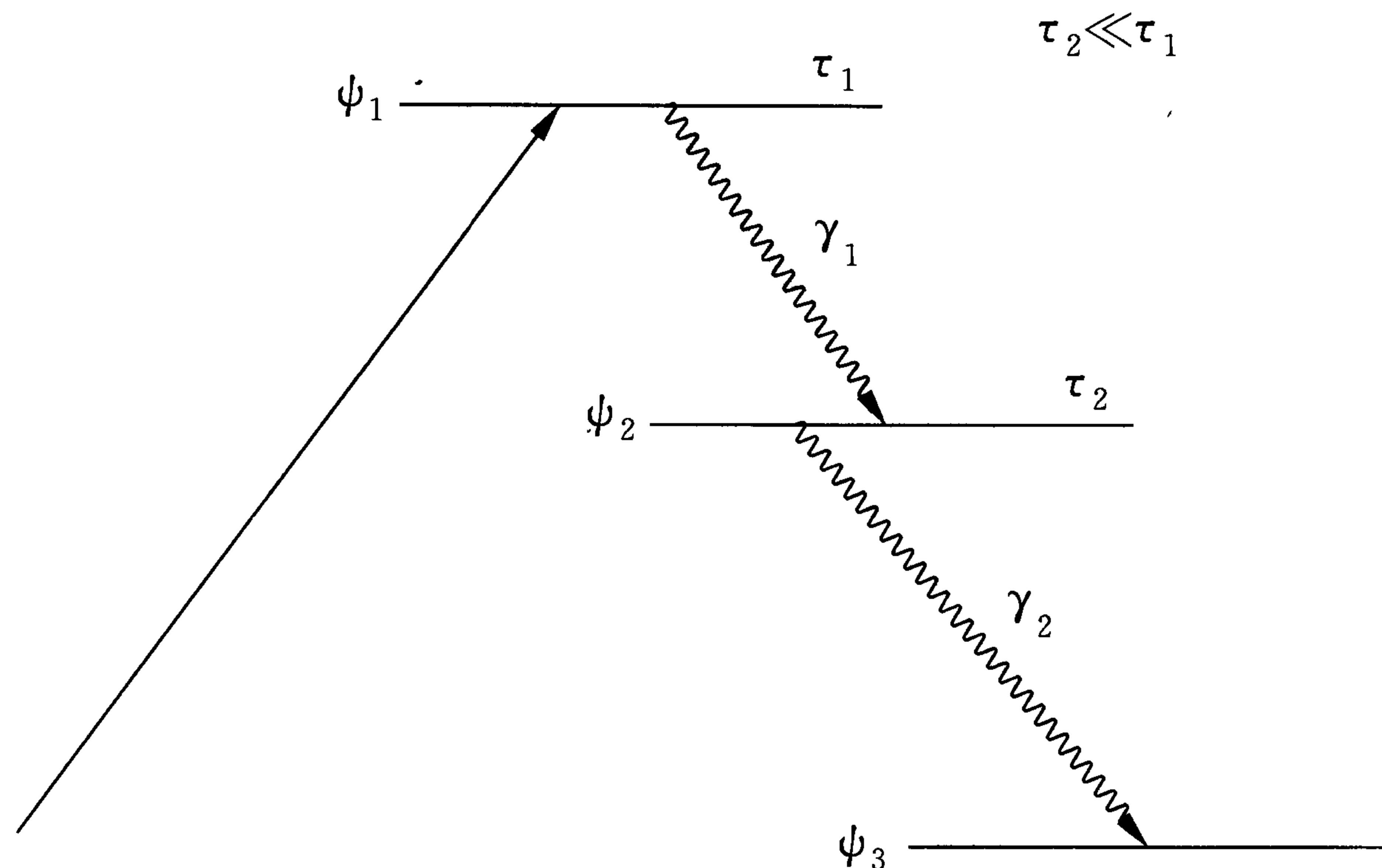


图 10.2.2 三能级的原子系统

激发态的寿命  $\tau_1$  远远超过中间态的寿命  $\tau_2$  ( $\tau_2 \ll \tau_1$ )

在图 10.2.2 所示的三能级原子系统中, 设  $t = 0$  时一原子激发到  $\psi_1$  态, 它经长寿命  $\tau_1$  后发出光子  $\gamma_1$  (波长  $\lambda_1$ ), 落到中间态  $\psi_2$  (其寿命  $\tau_2 \ll \tau_1$ ), 再放出第二个光子  $\gamma_2$  (波长  $\lambda_2$ ), 末态  $\psi_3$  可以是长寿命态或基态. 实验装置如图 10.2.3 所示.

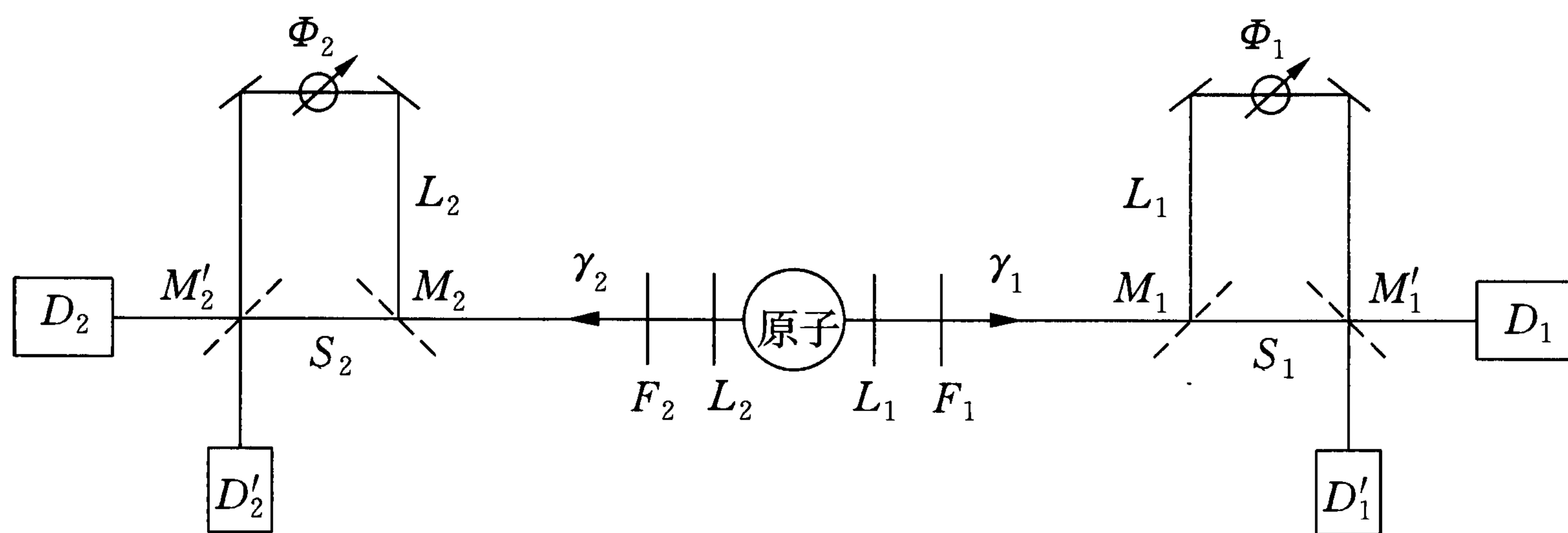


图 10.2.3 Franson 建议的双光子符合测量装置

$S_1$  和  $S_2$  是干涉仪中的短路径而  $L_1$  和  $L_2$  是长路径

光子  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$  经透镜  $L_1$  和  $L_2$  聚集, 再经过滤光片  $F_1$  和  $F_2$  (只允许通过波长为  $\lambda_1$  和  $\lambda_2$  的光), 传到远处的探测器  $D_1$  和  $D_2$ . 先考虑半镀银镜  $M_1, M_1', M_2, M_2'$  等不存在时的情况, 这时对  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$  在短时间 ( $\sim \tau_2$ ) 内作符合计数测量有尖锐的峰. 我们要注意: QM 的描述是高度非定域的, 因为初始发射时间的不定性 ( $\sim \tau_1$ ) 很大, 而两个光子如视为“波包”的话,



其发射时间和位置都是相对地不确定的. 但是一旦探测到其中一个光子如  $\gamma_1$ , 则可立即将另一个光子的发射时间及其位置确定在一个小得多的不定范围内. 这种关联必定会反映在描述另一个光子的波函数的非定域改变上, 而这一波包“塌缩”过程类似于 § 10. 2B 中讨论的光子偏振态纠缠的情况, 不过这里讨论的是发射时间和位置上的纠缠罢了.

现在插入  $M_1$  和  $M_2$  使每个光束分成两支, 一支经短路程  $S_1$  (或  $S_2$ ) 进入探测器, 另一支则经过长路程  $L_1$  (或  $L_2$ ), 通过它们之间的光程差产生时间差  $\Delta T$  (设对两束光是一样的), 并满足条件  $\tau_2 \ll \Delta T \ll \tau_1$ . 另外的相移板  $\Phi_1$  和  $\Phi_2$  产生可变的相移  $\phi_1$  和  $\phi_2$ . 再用  $M'_1$  和  $M'_2$  把两光束合并后送入  $D_1$  和  $D_2$ , 设探测效率为 1 (在  $D_1$  或  $D_2$  中未探测到的光子将在  $D'_1$  或  $D'_2$  中被测到).

用量子理论计算得到  $D_1$  和  $D_2$  间的符合计数率等于:

$$\begin{aligned} R_c &= \frac{1}{8} R_0 \left[ 1 + \cos \left( \phi_1 + \phi_2 + \frac{\Delta E \Delta T}{\hbar} \right) \right] \\ &= \frac{1}{4} R_0 \cos^2 (\phi'_1 - \phi'_2) \end{aligned} \quad (10. 2. 27)$$

$$\phi'_1 = \phi_1/2, \quad \phi'_2 = -\frac{\left( \phi_2 + \frac{\Delta E \Delta T}{\hbar} \right)}{2}$$

其中  $\Delta E = E_1 - E_3$  是  $\psi_1$  和  $\psi_3$  两个定态的能量之差.

式中  $\phi'_1$  和  $\phi'_2$  相当于 § 10. 2B 中远处检偏振器的取向角, 而那里 QM 违反 Bell 不等式相当于这里  $\cos$  项的系数  $V = 1$  而不是  $\frac{1}{2}$ , 或一般地说

$$V_{\text{QM}} > \frac{1}{2}.$$

1998 年瑞士日内瓦大学 Tittel 等的实验<sup>[15]</sup> 实现了 Franson 的构想, 他们用“参数下转换”方法将波长为 655. 7nm 的激光聚焦到 KNbO<sub>3</sub> 晶体, 产生两个波长  $\lambda$  为 1 310nm 的光子, 分别引入两个不等长的干涉仪. 利用当地条件, 两个探测站的空间距离达到 10. 9km, 光子用光纤来传输. 二方干涉仪中的光程差  $\Delta L$  比单光子的相干长度  $L_c$  大 5 个数量级, 可是由于双光子态的纠缠, 产生量子的“四阶干涉”, 即双光子在各自干涉仪中的相位差  $\delta_1$  和  $\delta_2$  改变时会引起符合计数率  $P$  的改变. 实验中采用快符合技术, 只探测两个光子都走长路 ( $L_1$  和  $L_2$ ) 或短路 ( $S_1$  和  $S_2$ ) 时之符合几率为

$$P = \frac{1}{4} \left\{ 1 + V \exp \left[ - \left( \frac{\lambda(\delta_1 - \delta_2)}{2\pi L_c} \right)^2 \right] \cos(\delta_1 + \delta_2) \right\} \quad (10.2.28)$$

其中系数  $V$  (清晰度) 在量子理论上达到 1 (而相应的 Bell 不等式给出  $V_{\text{Bell}} = \frac{1}{\sqrt{2}} = 0.707$ ), 实验取  $\delta_1 - \delta_2 \neq 0$ , 从而增大了区分长路和短路的可能性, 但同时也降低了清晰度, 故  $P$  的包络线可显示出  $L_c$  的大小. 实验中单独计数率分别达到 164kHz 和 167kHz, 而 20 秒内的符合计数如图 10.2.4 所示, 拟合数据点得  $V_{\text{实}} = 81.6\% \pm 1.1\%$ , 与 1 的差异可能归

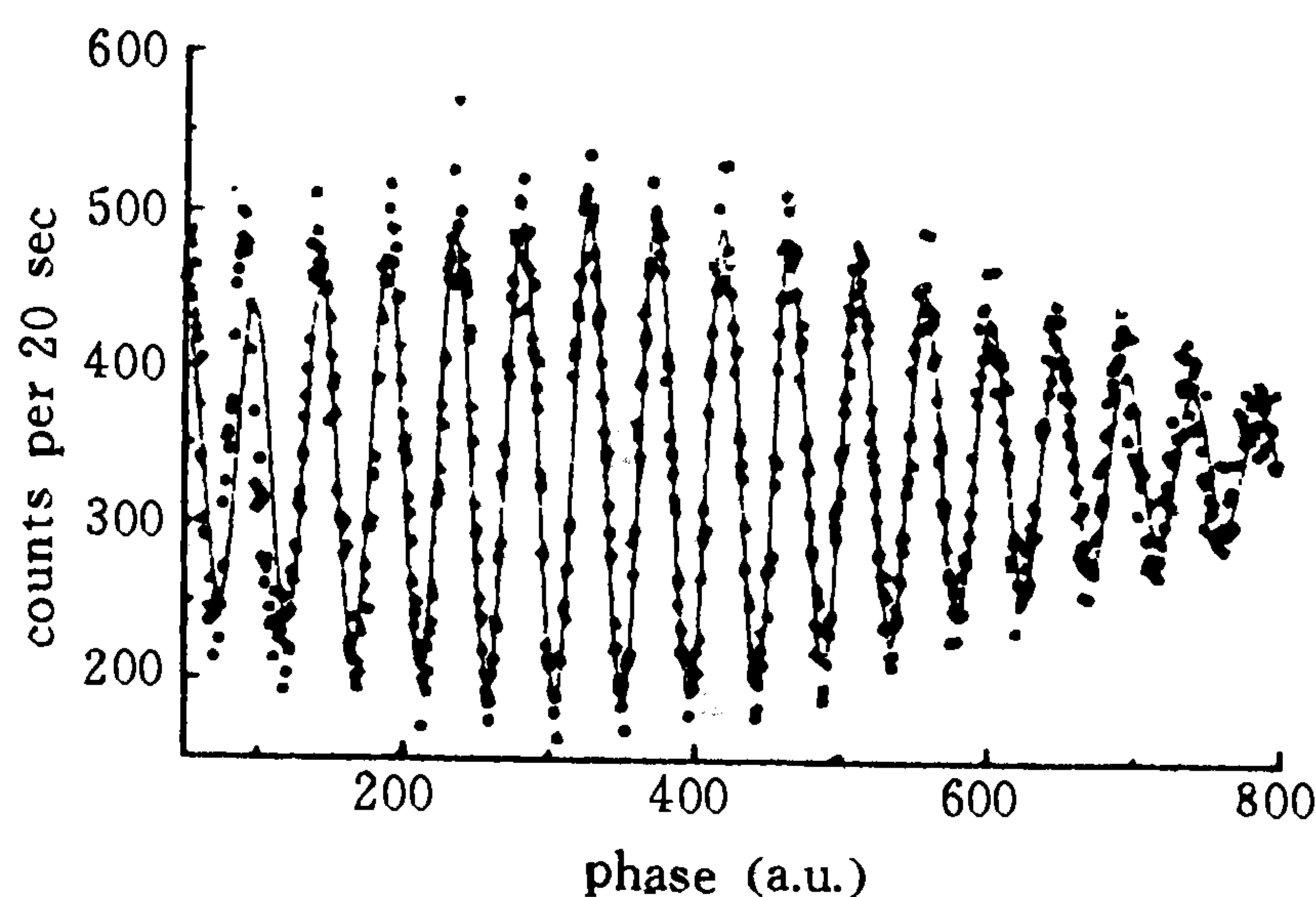


图 10.2.4 20 秒内的符合计数作为干涉仪中光程差引起的相位差 (角度单位) 的函数, 对实验点作拟合给出清晰度  $(81.6 \pm 1.1)\%$ . 从干涉条纹的包络线可算出单光子相干长度为  $L_c \approx 10.2 \mu\text{m}$ .

之于激光源有微小的波长起伏以及仪器上的缺点, 同时由包络线算出  $L_c \approx 10.2 \mu\text{m}$ , 这与光子谱线的“半高宽”(FWHM) 为 90nm 是定性上一致的. 最后本实验结论是: (1) 减去偶然符合后, 双光子干涉的清晰度  $V_{\text{实}} = 0.955 > \frac{1}{\sqrt{2}} = 0.707$ , 即违反 Bell 不等式而支持 QM, 并且表明双光子的纠缠态可以维持到 10km 的距离 (远远超过单光子相干长度  $L_c \approx 10 \mu\text{m}$ ). (2) 检验到一个光子时另一光子处的波包立即塌缩, 这种非定域相互作用被爱因斯坦称为“超距的幽灵般的作用”(spooky action at a distance), 尚需进一步研究. (3) 双光子纠缠态存在“很强的量子关联”, 表明在“量子通信”中有强的抗干扰(防窃听)能力, 今后可能有潜在的应用价值(参见附录 10A).

### 10.2D 对 $K^0 \bar{K}^0$ 体系做的 EPR 实验

1998 年内还有一个非常出色的 EPR 实验是一个很大的高能物理实

验组(CPLEAR 组)完成的<sup>[16]</sup>,他们凭借长期积累的对中性  $K$  介子的研究经验,除进一步证实“时间反演”(T)不守恒(见 § 9.5)外,还检验了  $K^0 \bar{K}^0$  波函数的纠缠性(即不可分离性, non-separability).

自旋  $J = 0$  宇称  $P = -1$  的  $K^0$  介子和它的反粒子  $\bar{K}^0$  在强相互作用中被产生出来,例如在本实验中通过在 CERN 的正反质子对撞产生反应  $\bar{p}p \rightarrow K^0 \bar{K}^0$ ,后者(中性  $K$  介子对)主要地处于  $J^{PC} = 1^{--}$  的反对称态,在(原时)  $t_a = t_b = 0$  时其波函数可表示为:

$$|\Psi(0, 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|K^0(0)\rangle_a |\bar{K}^0(0)\rangle_b - |\bar{K}^0(0)\rangle_a |K^0(0)\rangle_b] \quad (10.2.29)$$

这里  $a$  和  $b$  表示向左和向右运动的中性  $K$  介子.但是由于  $K^0$  与  $\bar{K}^0$  间的相互转化 ( $K^0 \leftrightarrow \bar{K}^0$ ),中性  $K$  介子马上会组成两种本征态,记为

$$|K_S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|K^0\rangle - |\bar{K}^0\rangle], |K_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|K^0\rangle + |\bar{K}^0\rangle] \quad (10.2.30)$$

(参见文献[17]),这里已忽略  $CP$  不守恒的效应,因它与本节的讨论无关.故(10.2.29)式也可写成:

$$|\Psi(0, 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|K_S(0)\rangle_a |K_L(0)\rangle_b - |K_L(0)\rangle_a |K_S(0)\rangle_b] \quad (10.2.31)$$

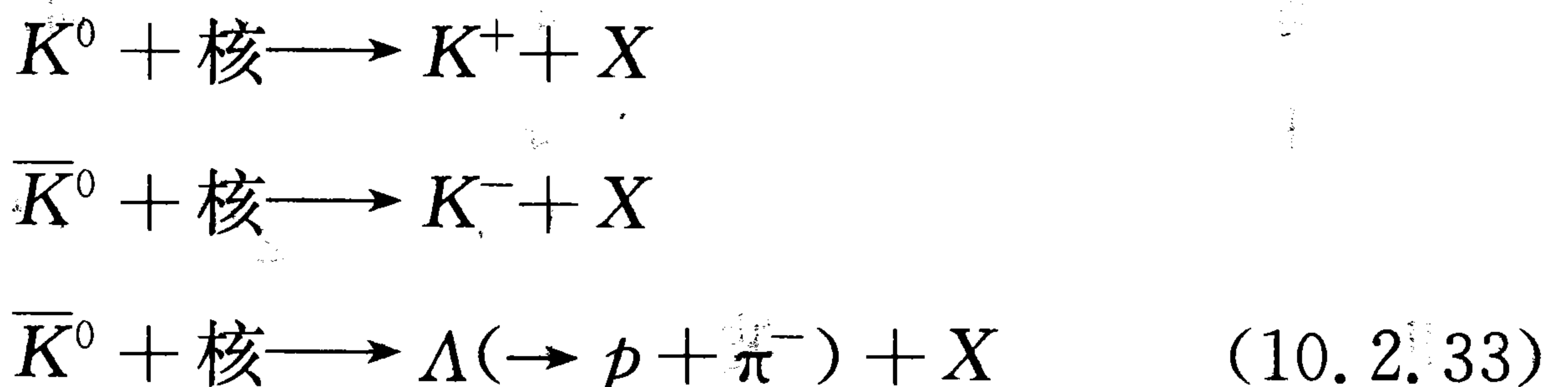
两个中性  $K$  介子在质心系中沿相反方向飞经  $t_a$  和  $t_b$  时间后,体系的波函数变为<sup>[16]</sup>:

$$|\Psi(t_a, t_b)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|K_S(0)\rangle_a |K_L(0)\rangle_b e^{-i(\alpha_S t_a + \alpha_L t_b)} - |K_L(0)\rangle_a |K_S(0)\rangle_b e^{-i(\alpha_L t_a + \alpha_S t_b)}] \quad (10.2.32)$$

其中  $\alpha_{S,L} = m_{S,L} - \left(\frac{1}{2}\right)i\gamma_{S,L}$ ,  $m_{S,L}$  和  $\gamma_{S,L}$  分别是  $K_{S,L}$  的质量和衰变宽度,实验上测得的  $\Delta m = m_L - m_S = 3.522 \times 10^{-12} \text{MeV}$ , 而  $K_S$  的平均寿命  $\tau_S = \frac{1}{\gamma_S} = 0.8922 \times 10^{-10} \text{s}$  或  $c\tau_S = 2.675 \text{cm}$ ,  $\tau_L = 5.17 \times 10^{-8} \text{s}$ ,  $c\tau_L = 15.5 \text{m}$ .

从(10.2.32)式计算得到左、右方在  $(t_a, t_b)$  时刻可能出现  $K^0 K^0$  或

$\bar{K}^0 \bar{K}^0$  (称为 like-strangeness 事件, 因  $K^0$  与  $\bar{K}^0$  的奇异数都是 1, 而  $\bar{K}^0$  与  $K^0$  都是 -1), 也可能出现  $K^0 \bar{K}^0$  或  $\bar{K}^0 K^0$  (称为 unlike-strangeness 事件), 在探测器中通过与原子核的强作用过程, 如



来区别  $K^0$  或  $\bar{K}^0$ . 例如两个中性  $K$  介子末态测到是  $K^+ \Lambda$ , 则属于“unlike”事件, 如测到  $K^- \Lambda$  或  $\Lambda \Lambda$ , 则属于“like”事件. QM 计算预告的测量事件强度分别等于 ( $\gamma = (\gamma_S + \gamma_L)/2$ ):

$$\begin{aligned} I_{\text{like}}(t_a, t_b) &= \frac{1}{8} \{ \exp[-(\gamma_L t_a + \gamma_S t_b)] + \exp[-(\gamma_S t_a + \gamma_L t_b)] \\ &\quad - 2 \exp[-\gamma(t_a + t_b)] \cos[\Delta m(t_a - t_b)] \} \end{aligned} \quad (10.2.34)$$

$$\begin{aligned} I_{\text{unlike}}(t_a, t_b) &= \frac{1}{8} \{ \exp[-(\gamma_L t_a + \gamma_S t_b)] + \exp[-(\gamma_S t_a + \gamma_L t_b)] \\ &\quad + 2 \exp[-\gamma(t_a + t_b)] \cos[\Delta m(t_a - t_b)] \} \end{aligned} \quad (10.2.35)$$

可见两者的差别在于第三项(干涉项)的符号. 特例如  $t_a = t_b$ ,  $I_{\text{like}}(t_a = t_b) = 0$ . 现在中性  $K$  介子的奇异数扮演了上节双光子体系中线偏振态的角色, 而  $|K_S\rangle$  和  $|K_L\rangle$  类似于那里的  $|\gamma_R\rangle$  和  $|\gamma_L\rangle$ , 当  $t_a = t_b$  时我们可以从测到一方的  $K$  介子奇异数立刻推知另一方  $K$  介子的奇异数(一定相反).

从(10.2.34)和(10.2.35)式定义如下的“不对称度” $A$ :

$$\begin{aligned} A(t_a, t_b) &= \frac{I_{\text{unlike}}(t_a, t_b) - I_{\text{like}}(t_a, t_b)}{I_{\text{unlike}}(t_a, t_b) + I_{\text{like}}(t_a, t_b)} \\ &= \frac{2 \exp[-\gamma(t_a + t_b)] \cos[\Delta m(t_a - t_b)]}{\exp[-(\gamma_L t_a + \gamma_S t_b)] + \exp[-(\gamma_S t_a + \gamma_L t_b)]} \end{aligned} \quad (10.2.36)$$

作为  $\Delta t = |t_a - t_b|$  的函数, 是奇异数关联的一种量度, 这是 QM 纠缠态(10.2.32)式的预告. 而另一种可分离性的波函数“因式化”假设即(10.2.32)式只保留前一项或后一项, 将得出  $A = 0$  的结果.

实际测量中比较  $t_a = t_b$  的  $A(0)$  和左右两方飞行路程差  $\Delta l = 5\text{cm}$  或相当于  $|t_a - t_b| \approx 1.2\tau_S$  时的  $A(5)$ , 结果是:

$$\begin{aligned} A^{\text{exp}}(0) &= 0.81 \pm 0.17 \\ A^{\text{exp}}(5) &= 0.48 \pm 0.12 \end{aligned} \quad (10.2.37)$$

与 QM 预告值  $A^{\text{QM}}(0) = 0.93$  和  $A^{\text{QM}}(5) = 0.56$  符合, 从而以超过 99.99% 的置信度 ( $CL > 99.99\%$ ) 排除了波函数因式化的假设 (即后者满足的可能性不到  $10^{-4}$ ).

现在我们补充讨论一个与 § 9.5A 联系的问题, 即上述实验恰好是 1935 年 EPR 文章中提出来希望研究清楚的两个无自旋粒子的非定域关联实验. 仍以  $a$  和  $b$  区分向左和向右的粒子, 若算符  $\hat{p}_a = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_a}$ ,

$\hat{p}_b = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_b}$ , 则因对易关系

$$[x_a + x_b, \hat{p}_a - \hat{p}_b] = 0 \quad (10.2.38)$$

试问能否找到本征值为  $x_a + x_b = 0$ ,  $p_a - p_b = 0$  的本征态? 乍看起来,  $x_a = -x_b$  而  $p_a = p_b$  的态是不可思议的, 但若  $a, b$  中有一个是反粒子, 像这里实验中测量  $t_a - t_b = 0$  时的  $K^0 \bar{K}^0$  或  $\bar{K}^0 K^0$  对, 其中一个反粒子的动量算符应为

$$\hat{p}^c = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (10.2.39)$$

例如  $b$  是反粒子  $\bar{K}^0$ , 则它的实际动量  $p_b^c = -p_b = -p_a$ , 便刚好解释了实验事实. 与 (10.2.38) 式对应的另一个对易关系

$$[t_a - t_b, \hat{E}_a + \hat{E}_b] = 0 \quad (10.2.40)$$

( $\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ ) 在同一本征态中给出  $E_a + E_b = 0$  的本征值, 也可解释成其中一个 (如  $b$ ) 反粒子的能量算符应为

$$\hat{E}^c = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (10.2.41)$$

因而  $E_b^c = -E_b = E_a > 0$  才是观察到的  $\bar{K}^0$  能量.

在我们看来, 通常对  $K^0 \bar{K}^0$  体系分析中写出如 (10.2.32) 式时  $a, b$  两个粒子都平等地处理成正能量 ( $\sim \exp(-iEt/\hbar)$ ,  $E > 0$ ), 其理由如下: 当  $K^0 \bar{K}^0$  在  $p \bar{p}$  碰撞中产生或在探测中被湮灭时都需要用量子场论, 那时中性  $K$  介子的自由场算符及其厄密共轭是 (见 (9.1.12) 式):

$$\begin{cases} \hat{\psi} = \sum_p \frac{1}{\sqrt{2V\omega_p}} \left\{ \hat{a}_p \exp\left[\frac{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \cdot Et)}{\hbar}\right] + \hat{b}_p^\dagger \exp\left[-\frac{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)}{\hbar}\right] \right\} \\ \hat{\psi}^\dagger = \sum_p \frac{1}{\sqrt{2V\omega_p}} \left\{ \hat{a}_p^\dagger \exp\left[-\frac{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} \cdot Et)}{\hbar}\right] + \hat{b}_p \exp\left[\frac{i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)}{\hbar}\right] \right\} \end{cases} \quad (10.2.42)$$

其中  $\hat{a}_p$  ( $\hat{b}_p$ ) 和  $\hat{a}_p^\dagger$  ( $\hat{b}_p^\dagger$ ) 是正(反)粒子的湮灭和产生算符。

场算符(10.2.42)式,在我们看来,具有 § 9.5 中新定义的空间-时间反演 ( $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$ ,  $t \rightarrow -t$ ) 不变性,只要补充算符在此反演下的变换性质:

$$\hat{a}_p \leftrightarrow \hat{b}_p^\dagger, \quad \hat{a}_p^\dagger \leftrightarrow \hat{b}_p, \quad (\text{当 } \mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}, t \rightarrow -t) \quad (10.2.43)$$

这个式子就是 § 9.5 中基本假设的数学表述:在空-时反演下,一个正粒子的湮灭过程变为其反粒子产生出来的过程,这在物理上是相当直观的。

从(10.2.42)式可见,与  $\hat{a}_p$  或  $\hat{b}_p$  乘在一起的波函数具有同样的形式 ( $E > 0$ )。所以像(10.2.32)式那样写出来的  $K^0 \bar{K}^0$  体系波函数实际上是基于量子场论的量子力学波函数,在本质上是相对论性的,因而是正确的和方便的。

总之,在我们看来,1998年这个  $K^0 \bar{K}^0$  的 EPR 实验具有极大的重要性。一方面,它消除了 1935 年 EPR 原始论文中的一个佯谬,证明了量子力学中必须考虑反粒子,而且反粒子的动量和能量算符应该定义如(10.2.39)和(10.2.41)式所示。另一方面,这个实验连同 20 多年来其他 EPR 实验一起,把当代自然科学中最奇妙的问题之一,即如何理解量子力学中的纠缠态——二(或多)粒子的非定域(长程)量子关联态——尖锐地推到了人们的面前。

## § 10.3 量子理论和物理实在

### 10.3A Einstein-Pauli-Yukawa 佯谬

让我们讨论 QM 教科书中一个常见的基本问题。一个质量为  $m$  的粒子被关在如下的一维无限深方势阱内:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & (-a < x < a) \\ \infty, & (|x| \geq a) \end{cases} \quad (10.3.1)$$

大家熟知其定态的能量本征值为:

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}, \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (10.3.2)$$

而基态 ( $n = 1$ ) 的定态波函数是

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \cos \frac{\pi x}{2a}, \quad (|x| < a) \quad (10.3.3)$$

如果我们希望讨论此定态的动量表象波函数,通常教科书如[18]给出

$$\varphi_1(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1(x) \exp\left(\frac{-ipx}{\hbar}\right) dx \quad (10.3.4)$$

则基态动量分布几率是

$$P_1(p) = |\varphi_1(p)|^2 = \frac{\pi\hbar^3}{2a^3} \cos^2\left(\frac{pa}{\hbar}\right) \left[p^2 - \left(\frac{\pi\hbar}{2a}\right)^2\right]^{-2} \quad (10.3.5)$$

可是,正如陶宗英指出的那样<sup>[19]</sup>,在文献中存在着另外的观点,爱因斯坦<sup>[20]</sup>、泡利<sup>[21]</sup>和汤川秀树<sup>[22]</sup>虽然都知道从(10.3.3)到(10.3.5)式的计算,却分别独立地考虑如下:在基态(10.3.3)中只存在两个分立的动量:  $p' = \pm \frac{\pi\hbar}{2a}$ , 它们的几率各等于  $\frac{1}{2}$ :

$$P_1'(p' = \frac{\pi\hbar}{2a}) = P_1'(p' = -\frac{\pi\hbar}{2a}) = \frac{1}{2} \quad (10.3.6)$$

显然(10.3.6)式与(10.3.5)式相差很远,究竟那一个对呢?

许多学者如[23]认为(10.3.5)式正确而(10.3.6)式不对,而另一些学者如[24]、[25]相反地认为(10.3.6)式才是正确的.文献[19]则认为两者都对又都不对,而其间的矛盾实际上反映了目前量子理论框架在逻辑上的不自洽性.这里我们介绍自己的观点<sup>[26]</sup>.

如果把(10.3.5)式用图画出来,则  $P_1(p)$  曲线就与光学中单缝衍射在屏幕上的光强分布  $I(x)$  很类似.这就是说,我们可假想一个实验,把关在势阱(10.3.1)中的粒子沿着  $z$  方向引出来,则在远处的屏幕上可看到粒子分布  $I(x)$  反映了原来的  $P_1(p)$ . (参见 10.1A 的实验分析).这意味着在(10.3.4)和(10.3.5)式中的  $p$  是定义在无界的  $x$  空间的,  $\psi_1(x)$  与  $\varphi_1(p)$  之间的关系是一个 Fourier 变换,作为算符

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (-\infty < x < \infty) \quad (10.3.7)$$

的本征值,  $p$  具有连续谱.

另一方面,(10.3.6)式是把(10.3.3)式看成为

$$\psi_1(x) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{a}} \left[ \exp\left(i \frac{\pi x}{2a}\right) + \exp\left(-i \frac{\pi x}{2a}\right) \right], \quad (|x| < a) \quad (10.3.8)$$

并利用算符

$$\hat{p}' = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (-a < x < a) \quad (10.3.9)$$

的直接结果. 注意, 一个算符的定义与边界条件有关. 事实上, 需要周期为  $4a$  的周期性边界条件才能把  $\hat{p}'$  定义好并得出相应的分立本征值谱:

$$p'_n = \frac{n\pi\hbar}{2a}, \quad (n = \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (10.3.10)$$

在这情况下,  $\psi_1(x)$  与  $\varphi'_1(p')$  ( $P'_1(p') = |\varphi'_1(p')|^2$ ) 的关系是由 Fourier 级数表达的.

在 QM 中知道, 这时算符  $\hat{p}'$  也可以用无限维的矩阵表示, 矩阵元就如(10.3.10)式所示, 但算符  $\hat{p}$  就不然. 与  $p$  联系的有一个动量守恒定律, 相应地还有一个测不准关系:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (10.3.11)$$

而与之对比的  $p'$  却只有分立形式的守恒律, 它还可能与“晶格”有动量交换(固体物理中称为 Umkrapp 过程),  $p'$  也没有像(10.3.11)式那样的测不准关系. 仅当量子数很大 ( $n \gg 1$ ) 时,  $\varphi'_n(p')$  才趋于  $\varphi_n(p)$ .

如上述, 在一个理想实验中, 倘若粒子可沿  $z$  方向解放出来, 便可能测到沿  $x$  方向的  $p$  动量谱. 另一方面, 假想观察者和仪器也都被关在势阱(10.3.1)的内部, 则他也可能“局域地”测到  $p'$  谱如(10.3.10)式所示. 1998 年 Resta 的一篇文章<sup>[27]</sup> 讨论了周期性的边界条件会如何影响位置算符.

所以在我们看来, (10.3.5)和(10.3.6)式都是正确的, 因为它们讨论的是两种不同的动量.

现在让我们坚持地追问: “在人们作测量之前, 究竟  $p$  或  $p'$  中的哪一个才是真正的粒子动量呢?” 于是我们立刻面对两难的局面: 从逻辑上说, 既然这两个式子不同, 它们决不可能都是正确的.

我们称上述问题为“Einstein-Pauli-Yukawa (EPY) 佯谬”. 像物理上其他佯谬一样, 它反映着我们在基本观念上必定忽视了或者弄错了一点什么.

在我们看来, 摆脱 EPY 佯谬的惟一出路是: 不要把这个问题的看得太认真. 因为一旦认真地去看, 那就应当说, 在测量之前, 无论  $p$  或者  $p'$  都是不存在的.

### 10.3B 测量的本质

让我们再次研究 § 10.1C 中介绍的原子干涉仪的 WW 实验, 那里为获知原子“走那一条路”(WW)的信息而作的“测量”似乎是尽可能地“轻



微”了,仅仅是存贮一下原子内部态的信息而已,但它已足够抹掉原来的干涉图样.由此我们可引出如下的命题<sup>[26]</sup>.

**命题一** 测量必然要改变客体的状态.

**命题二** 测量在本质上也是量子的.测量时仪器与客体的量子关联(有时也被称为纠缠 entanglement)必然会破坏原来存在于客体的量子关联态(或量子相干性).

**命题三** 在测量之前,并不存在任何信息(即各种实验数据).

为了说明这3个命题,我们希望强调:测量不是一种“反映”过程,而是一种“变革”过程,而这个道理并不自QM始,它在经典物理中早就存在,不过大家不大注意罢了<sup>[28]</sup>.

在经典物理中任何一个可观察量总是用“微商”、即两个变量的微分之比来表示,例如一种物质的“定容比热”定义为

$$C_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V \quad (10.3.12)$$

而“定压比热”定义为

$$C_p = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_p \quad (10.3.13)$$

其中内能  $U$ 、温度  $T$  和熵  $S$  的微分都趋于零而不能等于零,这是同微观本质上普朗克常数  $\hbar \neq 0$  联系在一起的,所以  $C_V$  或  $C_p$  是“偏微商”而不是  $\frac{0}{0}$ .

在测量之前无论  $C_V$  或  $C_p$  都不存在,它们的定义和数值是测量时操作过程所赋予的,但测量结果却具有惟一性和“客观性”.有趣的是,同时测量  $C_V$  和  $C_p$  必然相互干扰,导致“测不准”的结果.其原因如图 10.3.1 所示.

一种测量必定联系于一种特定的操作手段(记为  $A$ )去变革客体的状

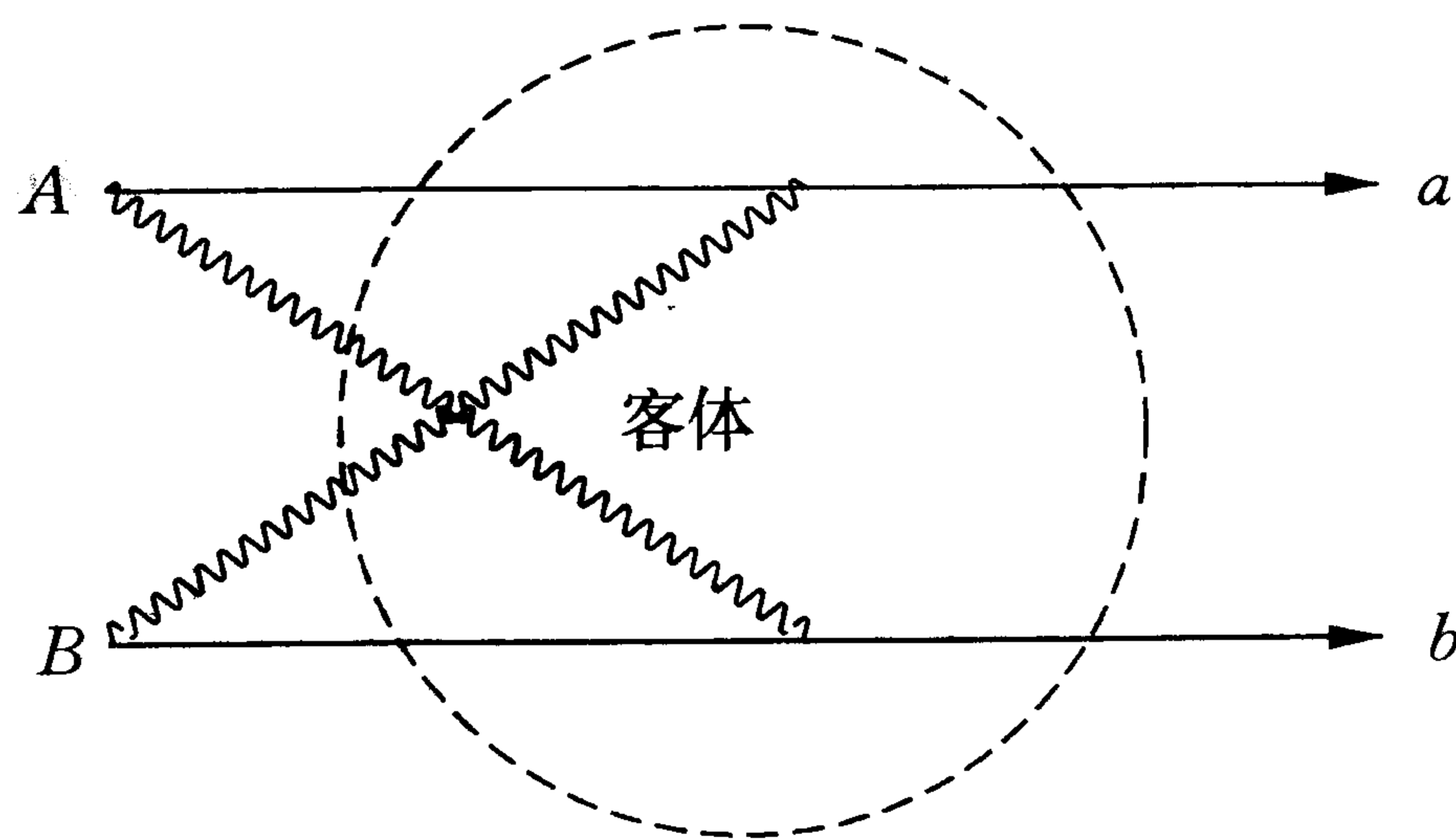


图 10.3.1 测量  $A(B)$  作为一种操作手段(用实线  $\rightarrow$  表示)施变革于客体(后者用虚线圆表示),产生出数据  $a(b)$ ,但若  $A$  与  $B$  不一致而同时加于客体,则  $A$  对  $b$ ( $B$  对  $a$ )便成为一种干扰(用波纹线  $\rightsquigarrow$  表示).

态,从而取出相应的数据(记为  $a$ ),  $A \rightarrow a$ ; 同理,对同一客体的另一种测量手段(记为  $B$ ),也可得到数据  $b$ ,  $B \rightarrow b$ . 但当  $A$  和  $B$  不一致而又同时加到客体上去的时候,  $A$  对  $b$  便成为干扰,  $B$  对  $a$  也成为干扰,因此“变革”与“干扰”不能混为一谈,但它们又确实在一定条件下可以相互转化.

QM 的伟大历史功绩在于:它把认识论的道理在最基本的层次上揭示出来了. 例如一个自由运动粒子的平面波函数

$$\psi(x, t) \sim \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right\} \quad (10.3.14)$$

中的那个  $p$ ,并不是可观察的或在测量前已经存在的粒子动量. 仅当我们对波函数作一个“空间平移操作”时:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = -i\hbar \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\psi(x + \Delta x, t) - \psi(x, t)}{\Delta x} = p\psi \quad (10.3.15)$$

才能取出右端这个可观察的动量  $p$ ,它是左端算符

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad (10.3.16)$$

作用到波函数的结果. 由此可见,一个经典物理中的力学量(如  $p$ )到了 QM 中要化为“算符”(如  $\hat{p}_x$ ),原因不是别的,正是“测量乃是对客体的变革”这一认识论原理的数学表述. 正因为动量  $p_x$  的测量要求  $x$  变动,而位置测量则要求  $x$  定下来,两者的要求是矛盾的,所以同时测量  $x$  和  $p_x$  便表现出排斥性,这导致测不准关系(10.3.11)式.

为了解释“测不准关系”,玻尔认为:仪器应分为两类,一类测位置  $x$ ,一类测动量  $p_x$ ,我们只有将两类仪器测得的数据互相补充,才能获得对微观粒子比较全面的知识(有时称此叙述为“互补原理”). 我们愿意补充说明的是:正因为  $x$  与  $p_x$  不同,即有差异,它们才有互补的意义,它们又都联系于对空间的测量,本质上有一致性(同一性),但差异所蕴含的矛盾的排斥性(斗争性),也就不可避免地会在一定条件下会表现出来. 所以在我们看来,与位置及动量相联系的测不准关系和互补原理也是同一本质的两个侧面,并不存在谁比谁更基本的问题.

即使原子干涉仪的 WW 实验,也可以用图 10.3.1 来解释:操作  $A$  是两个微波脉冲不加上去的实验安排,  $a$  表示最后出现了干涉条纹;  $B$  代表微波脉冲加上以测量 WW 信息的操作,  $b$  表示干涉条纹不见了. 测量的本质是共同的,即都要改变客体(命题一), WW 实验新颖之点在于改变

的是内部量子态,可以说测量把内部态的量子相干性破坏了,但并不破坏原子质心运动波函数的相干性.换言之,原子在运动过程中(到达探测器之前),它的横向位置( $x$ )或相应之动量( $p_x$ )并未受到测量,实际上可说是不存在的.因此这个 WW 实验与测不准关系(10.1.1)式无关,而有它自己的“测不准关系”,即作为 WW 信息量度的路径可区分性(Distinguishability) $D$ 与干涉条纹清晰度 $V$ 满足不等式 $D^2 + V^2 \leq 1$ <sup>[5]</sup>.

中国战国时代的哲学家公孙龙(325BC — 250BC)曾提出“离坚白”的命题.他对着一块石头议论说:“视不得其所坚,而得其所白者,无坚也;拊不得其白,而得其所坚,得其坚也,无白也.得其白,得其坚,见与不见离,不见离,一一不相盈,故离”.我们试解释如下:“视”是一种测量操作( $A$ ),“白”是测量结果,即信息( $a$ );“拊”即抚摸,是另一种测量操作( $B$ ),而“坚”则是从它得到的信息( $b$ ). $a$ 与 $b$ 在测量前都是不存在的,在测量后也都是分离的,它们分别是客体性质的反映,虽然有互补性,但并不能完全反映我们对客体的认识(原文“盈”似可作“渗透”或“充满”解释).

### 10.3C 量子态和波函数

下面我们试图回答 EPY 佯谬.仍以无限深方阱中一个粒子的基态为例,用 Dirac 的记号,它可记为 $|\psi_1\rangle^H$ ,上标 $H$ 表示这个抽象的量子“态矢”是在 Heisenberg 图景中写出的,也可以在 Schrödinger 图景中记为 $|\psi_1(t)\rangle^S$ .不论哪一种“图景”,都不含 $x$ 或 $p$ 等“表象”(representation)的描述.然后当我们取一个“坐标基矢” $|x\rangle^S = |x\rangle$ 或 $|x, t\rangle^H$ ,再取“态矢”与“基矢”的缩并(即投影),才得到如(10.3.3)式(补充 $\exp\left(\frac{-iE_1 t}{\hbar}\right)$ 因子)所表示的“位形空间( $x$ 表象)的波函数”:

$$\psi_1(x, t) = {}^S\langle x | \psi_1(t) \rangle^S = {}^H\langle x, t | \psi_1 \rangle^H \quad (10.3.17)$$

注意,在波函数中图景的区别不见了,但是有“表象”的区别,例如我们也可取“ $p$ 表象”,即选择“动量( $p$ )基矢” $|p\rangle^S = |p\rangle$ (或 $|p, t\rangle^H$ )得到“动量空间( $p$ 表象)的波函数”(10.3.4)式乘 $\exp\left(\frac{-iE_1 t}{\hbar}\right)$ :

$$\varphi_1(p, t) = {}^S\langle p | \psi_1(t) \rangle^S = {}^H\langle p, t | \psi_1 \rangle^H \quad (10.3.18)$$

也可以选取“ $p'$ 基矢” $|p'\rangle^S = |p'\rangle$ (或 $|p', t\rangle^H$ )而得到

$$\varphi'_1(p', t) = {}^S\langle p' | \psi_1(t) \rangle^S = {}^H\langle p', t | \psi_1 \rangle^H \quad (10.3.19)$$

它只在 $p' = \pm \frac{\pi \hbar}{2a}$ 处不为零,见(10.3.6)式.

现在的问题是：(1) 如何理解态矢的表象无关性和波函数的图景无关性？(2) 为什么同一个量子态的波函数有各种表象的描述？甚至“动量”也可以有  $p$  或  $p'$  的选择任意性 (EPY 佯谬)？

让我们先重温一下 § 1.3B 和 § 7.3C 中的类比，然后进一步明确：QM 中的态矢  $|\psi_1\rangle^H$  应被看作是抽象意义下的一个粒子，它在势阱中存在着，但是还没有任何描述，即不包含任何信息：在海森堡图景中，连时间  $t$  都不含，更不用说  $x$  或  $p$  了。进一步，当我们准备测量这个粒子的坐标  $x$  时，便写出波函数  $\psi_1(x, t)$  如 (10.3.17) 式所示，其中  $|x, t\rangle^H$  表示我们选择的即将用来测量  $x$  的“仪器”，然而这种测量在尚未真做之前，只是虚拟的 (fictitious)，所以波函数或所谓“几率幅”  $\psi_1(x, t)$  包含了一个虚数  $i = \sqrt{-1}$ ，以表示它是不可观察的量，可观察的量是  $|\psi_1(x, t)|^2$ ，它表示测量时将能在  $x$  点找到粒子的几率密度。这是我们对 Born 统计解释的理解\*。

我们希望强调，波函数中的  $x$  或  $p$  是测量时才能发现的粒子位置或动量，而不是测量前粒子的位置或动量。事实上，默认粒子在被测量之前是一个“点粒子”，因而在瞬时有一位置坐标  $x$ ，在我们看来是没有根据的。一个粒子存在的状态依赖于它的环境，比如说一个电子在类氢原子的核势场  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$  中，当  $Z = 1$ ， $1s$  态波函数在空间展布为一半径约  $a = \frac{\hbar}{amc} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$  的球形区域。当  $Z$  增大时，半径便缩小到  $\frac{a}{Z}$ 。而当电子处于高能碰撞的条件下，直到极短线度，例如  $10^{-18} \text{ m}$ ，还没有发现它有结构，因此电子常被认为近似于一个点粒子。我们不禁要问：为什么不应该把电子看作是一个“大小由之”的东西，在类氢原子中它显示约有  $\frac{a}{Z}$  的半径，而在高能碰撞中被压缩时才近似于一个点粒子呢<sup>[29]</sup>？（参见附录 10B 关于薛定谔猫态的讨论）。

### 10.3D 个体与环境的对立统一

一个不稳定粒子的存在状态依赖于它所处的环境，这一点在衰变寿命 ( $\tau$ ) 的变化中表现得难道还不明显吗？例如看  $\beta^-$  衰变，地球上一个自由中子的  $\tau = 14.8$  分钟，而核素  ${}_{3}^{11}\text{Li}_8$  的  $\tau$  短到只有  $8.5 \mu\text{s}$ ，另一方面  ${}_{52}^{128}\text{Te}$  的  $\tau$  竟长达  $2.1 \times 10^{24}$  年，还有许多核素，包括天体物理研究中发现

\* 有趣的是：Born 的正确解释是在他一篇短文 (Zeit. für Phys. 37(1926)863) 的一个页注中给出的。

的脉冲星即中子星内的中子,对 $\beta^-$ 衰变是稳定的,即 $\tau = \infty$ . 这表示中子的稳定性(或寿命)强烈地受(核)环境的影响. 事实上,它几乎完全没有内在的稳定性了,这一点也可以从熟悉的衰变规律

$$N(t) = N_0 \exp(-t/\tau), \quad -\frac{dN}{dt} / N(t) = \frac{1}{\tau} = \lambda = \text{常数} \quad (10.3.20)$$

看出:一个中子,在任何时刻,只要尚未衰变,它在那时的衰变几率就是确定的,与它已存在的时间无关. 用中国古代哲学家庄子(369BC—286BC)的话来说,正是“方生方死,方死方生”<sup>[28]</sup>.

QM的发展尤其是20多年来EPR实验研究揭示的事实告诉我们,两个或两个以上的稳定粒子间,可能存在着强的量子关联. 例如两个自旋平行的电子处于 $a$ 态和 $b$ 态,即使当忽略它们之间的库仑相互作用时它们的波函数也必须用Slater行列式来表示:

$$\psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_a(x_1) & \psi_a(x_2) \\ \psi_b(x_1) & \psi_b(x_2) \end{vmatrix} \quad (10.3.21)$$

对(10.3.21)式用语言来解释时,我们只能说:当测量到电子1在 $a$ 态(或 $b$ 态)时,才能确定地预告电子2在 $b$ 态(或 $a$ 态). 注意,(10.3.21)式与双光子态(10.2.1)式在本质上是一样的(向右运动的右旋态搬到向左运动的光子上即成为左旋态),也与 $K^0 \bar{K}^0$ 体系的(10.2.32)式一致. 因此EPR实验结果违反Bell不等式而支持QM这个事实,使我们进一步相信对例如(10.2.1)式的正确说法应该是:在双光子纠缠态中,向左(或向右)运动的光子既非左旋,也非右旋,既无所谓 $x$ 偏振,也无所谓 $y$ 偏振,实际上无论自旋或其投影,在测量之前并不存在. 在未测量之前的二粒子态本来是不可分的,在§10.2D中甲测到 $K^0$ (或 $\bar{K}^0$ )与乙同时测到 $\bar{K}^0$ (或 $K^0$ )这些信息都是在测量中才被制造出来的\*.

对于多粒子体系,例如第七章中讨论电子在磁场中的运动,当 $N$ 个电子刚填满第一Landau能级时,它们的波函数既可用(7.1.8)式来描写,也可以用(7.1.28)式来描写,还可以用 $x$ - $y$ 平面上格点式排列的波函数(见(7.1.33~36)式)来表示. 初看起来,3种描写方式的微观运动图像差别很大,实际上都是等价的. 我们最多可以说,(7.1.8)式最适宜于反映量子Hall效应(QHE). 当磁场增强后,这 $N$ 个电子刚能填满例如 $\nu = \frac{1}{3}$ 的

\* 简言之,关联的具体形式本身是测量的直接结果.

第一 Landau 能级时,产生分数 QHE(FQHE),这时电子间存在着强关联, $N$ 个电子的状态用 Laughlin 波函数(7.2.23)式来描写,单个电子已丧失了它的独立性,这既表现在 FQHE 体系的不可压缩性,也表现在实验上证明 FQHE 中导电的元激发带有分数电荷  $\frac{e}{3}$ . 注意,这是在 FQHE 量子相干态没有被破坏(仅在样品边缘上变为 Luttinger 液体状态)而参与导电的“元激发状态”,假如我们硬要破坏体系的量子相干性而把“它”从样品中取出来,无疑仍将看到电荷为  $-e$  的电子.

所以,FQHE 中分数电荷的实验发现,有助于我们理解粒子物理中存在多年的所谓“夸克禁闭性”之谜.例如当一个质子处于基态附近的态时,它的各种性质(如电荷分布、磁矩等)可以相当满意地用 3 个价夸克 ( $uud$ ) 的结构来说明.但是实验上至今不能分离出电荷为  $\frac{2e}{3}$  的  $u$  夸克或 ( $-\frac{e}{3}$ ) 的  $d$  夸克来,这是由于夸克间存在着极强的量子关联,后者是如此之强,以至于夸克再也不能被看作是通常意义下的粒子了(即不是“Building block”了,参见 § 7.4B). 我们知道,通常由“结构粒子” $a$  和  $b$  组成一个“复合粒子” $C$  时的结合能  $B$  远小于  $a$  和  $b$  的静能之和 ( $B \ll (m_a + m_b)c^2$ ),  $a$  或  $b$  的自由态与束缚态的差别是不大的,(例如中子与质子结合成氘核,结合能  $B = 2.226\text{MeV} \ll (m_p + m_n)c^2 \sim 2\text{GeV}$ ). 而现在核子内的夸克在“取出”的过程中大变而特变,最后我们看到的只能是整数电荷的  $\pi$  介子等强子.

当质子处在高能过程中,例如被高能电子碰撞时,它的行为想只用 3 个价夸克来解释就困难了.这时最好采用相对于入射电子为静止的参考系来看,质子具有接近于光速的速度,根据 § 9.5 的讨论,这时质子内部的反物质(即反夸克)的成分大量地被激发出来,也就是说,除 3 个价夸克外,出现了大量的“海夸克对”( $u\bar{u}$ ,  $d\bar{d}$ ,  $s\bar{s}$  等)以及胶子.同时,在这种表示(映像)下,这些组分(ingredients)之间的耦合变得很弱,计算中比强耦合情况容易处理了.(不妨比较 FQHE 体系的两种描述:强耦合的多电子 Laughlin 波函数和弱耦合的复合玻色子模型),这就是部分子(parton)模型成功的道理所在.同一个质子,在不同过程中有不同的表现,在理解它时需要考虑不同的组分和不同的动力学,一个质子在本质上是一个无限的客体.

总之,在我们看来,无论个体或环境,在本质上都是无限的,又都是相互联系的.我们倾向于同意这种观点:环境在破坏体系的量子相干性而完

成测量的过程中起了关键的作用(参见文献[30]、[31])\*。仪器也可看成为环境的一部分,而它的作用是以它与待测客体的(新的)量子关联(纠缠)态来代替(即破坏)原来存在于体系中的量子关联(纠缠)态.例如原子干涉仪的 WW 实验中微波测量就起了这种作用,而测量的最后完成则是在屏幕或探测器上实现的,粒子波包在那里编缩,屏幕或探测器也是环境的一部分(参见附录 10. A).

本书以上的全部讨论,始终离不开认识论的一条“相对性原理”,这是爱因斯坦教我们的<sup>[28]</sup>:我们不要去讨论绝对运动、绝对空间或绝对时间,而应该去讨论相对运动、相对空间或相对时间.一般地说来,任何事物只有在相对于其他事物的运动和变化中才能被认识,离开了它的对立物,就势必成为神秘而不可理解的东西.正因为如此,为了认识一个抽象的量子态(矢),我们需要引入虚拟的测量“基矢”以得到波函数的描述;为了理解个别的客体,我们需要考察它所处的环境,等等.中国古典名著《红楼梦》第 22 回中贾宝玉悟出的“禅机”:

无我原非你,从她不解伊.

(You won't be you if I wasn't born, One can't understand her from her alone.)

也正是这个道理.

### 10.3E 自在之物和为我之物

我们快结束本书的讨论了,在本章中我们一直试图在回答爱因斯坦提出的两个问题:

(1) “Why God plays dice (骰子)?”<sup>[32]</sup> (QM 的解释为什么是统计性的?)

(2) “Is the moon there when nobody looks?”<sup>[33]</sup> (什么是物理实在?)

关于第一个问题,需要说明,爱因斯坦是完全支持玻恩对 QM 的统计解释的<sup>[34]</sup>,只是觉得不够满意,于是从 1935 年以后转到第二个问题,这才是终他一生不停地在思考的问题<sup>[35]</sup>.

前面已指出:测量必然要改变客体的状态,破坏原来存在于体系中的量子相干性.让我们进一步问:这种改变在本质上是改变什么东西呢?

在我们看来,狭义相对论(SR)、量子力学(QM)和粒子物理(高能物理)的进展已能允许我们画出图 10.3.2(引自文献[29]).

\* 参见附录 10B 中介绍的薛定谔猫态在与环境耦合下的消相干研究文献[54].

在北京正负电子对撞机(BEPC)中,两个高速的电子( $e^-$ )和正电子( $e^+$ )迎头相撞,变为一个静止的  $J/\psi$  粒子,后者的静质量为  $e^-$  (或  $e^+$ ) 静质量的 6 000 多倍,能够说  $J/\psi$  原来就存在于  $e^-$  (或  $e^+$ ) 的内部吗? 显然不能. 我们宁可说  $J/\psi$  (它被认为是重夸克对  $c\bar{c}$  的束缚态), 或  $e^-$  或  $e^+$  等粒子都是从真空(也不妨称为“以太”或者“元气”)中激发出来的. 什么东西在激发呢? 我们认为用“矛盾”这个名词还是适当的. 因为当矛盾不激发时是看不见的,没有质量的. 仅当矛盾被激发起来,它的双方处于排斥、吸引和相互转化的过程时才显出有质量,才能被观察到. 这一点,在我们看来,已经被 20 世纪 30 年代正电子发现直到 1994 年  $t$  夸克发现的历史所证明了.

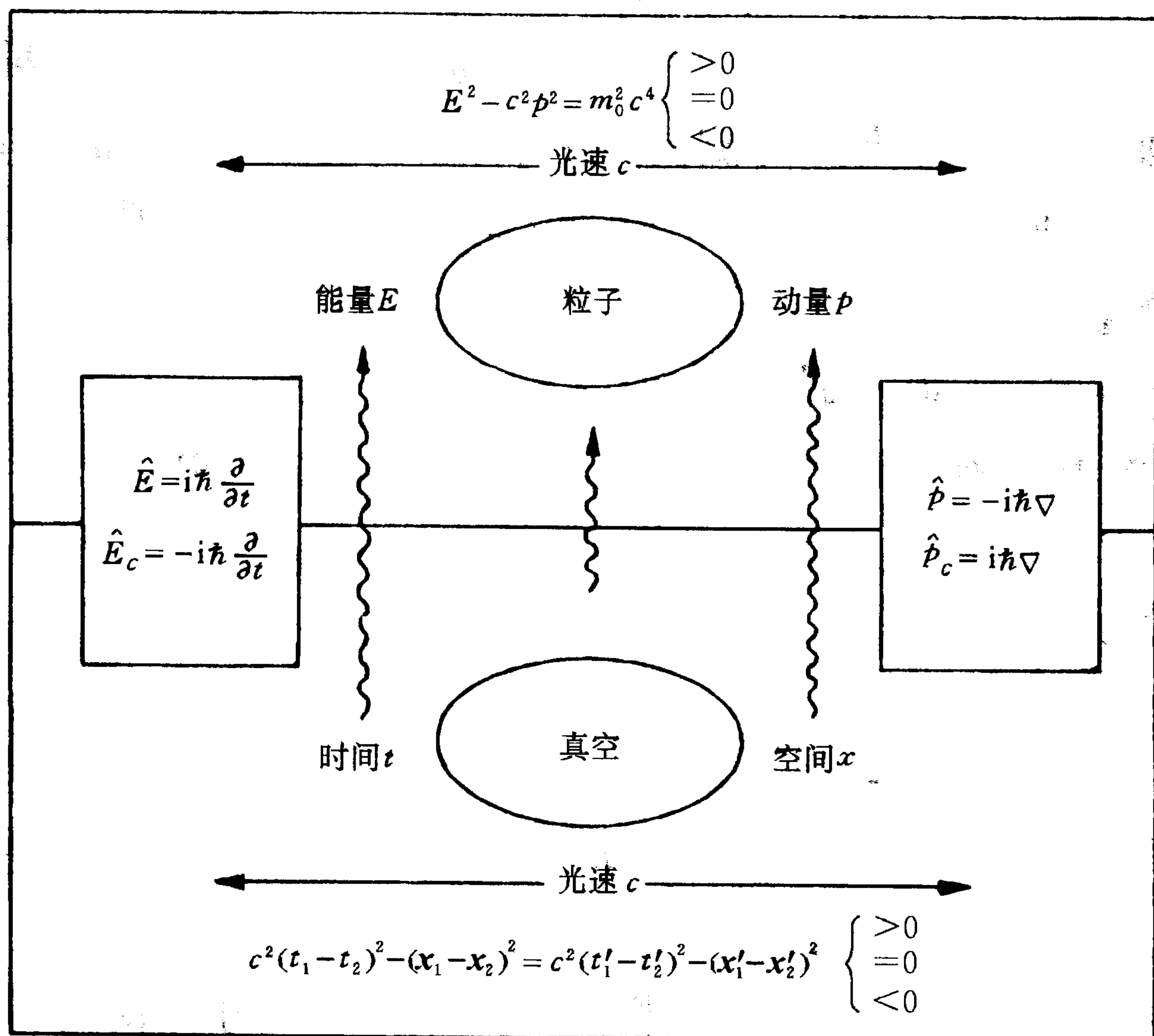


图 10.3.2 粒子是真空的激发态,真空也就是“元气”或者“以太”. 图的下半部本来是不可直接观察的,但当真空中激发出粒子后,我们可以说动量和能量是粒子存在的形式. 靠相对的东西有条件地赋予绝对的东西以某种定义时,我们也可说空间和时间是真空存在的形式. 图上光速  $c$  是横向联系的纽带,下面公式表示“四维空时间隔”对洛伦兹变换是不变量,上面公式表示相对论中能量、动量和静质量之间的关系. ( $m_0 < 0$  为超光速粒子,见附录 9B)而纵向联系则表示了量子算符关系,其中普朗克常数  $\hbar$  表现为纵向联系的纽带. 注意图中的量子算符关系中,两个是量子力学早就明确了,而另两个加脚标  $c$  的表示是属于反粒子的算符,按我们的观点,这是狭义相对论隐含地提供的. 这 4 个算符关系正是量子力学与狭义相对论结合后产生量子场论和粒子物理学时所“遗传”下去的 DNA.



20 世纪初,最有眼光的物理学家如玻尔和海森堡等看到头等重要的问题是“物质稳定性”之谜(电子为什么不会掉进原子核内去?),他们的成功,即 QM 的成功表明:绝大多数人是大大地低估了矛盾的排斥性(斗争性)了.今天“夸克禁闭性”之谜(夸克何以不能从强子中跑出来?)是否正在强烈地暗示我们:大家又大大地低估了矛盾双方的不可分离性或相互转化性(即所谓“同一性”)了呢?

那么,看不见的矛盾如何表示呢?在我们看来,这个问题在 QM 中早就解决了.那就是把通过对一个量子态作虚拟测量而得到的“几率幅”表示为复的波函数.例如一个自由运动的电子波函数是

$$\psi_{e^-} \sim \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right\} \quad (10.3.22)$$

虚数  $i = \sqrt{-1}$  的不可观察性恰好反映了波函数是不可直接观察的量,而  $(+i)$  可换成  $(-i)$  的对称性又恰好反映了  $e^-$  与  $e^+$  的对等存在,见 § 9.5,那里还说明正负电子内“你中有我,我中有你”的关系,因此一个高速运动电子的波包是不会扩散的.  $\psi_{e^-}$  或  $\psi_{e^+}$  可以认为是自然界一种(反映电子的)基本矛盾的两种相位相反的激发态表示.

然而,在非相对论性的 QM 中,我们常常把(10.3.22)式中的能量  $E$  仅表示动能:  $E = \frac{p^2}{2m}$ , 而让平面波描写粒子质心的运动,但波包因色散而会不断地扩散,这种性质使 Born 统计解释也颇感困难.我们觉得这种困难在新的观点下并不存在,因为  $\psi(\mathbf{x}, t)$  应解释为粒子与环境相互作用“矛盾场”的抽象表示,而  $\mathbf{x}$  是描写场的空间流动坐标.既然假设空间没有势场,即  $V(\mathbf{x}) = 0$ , 同时又设初始时刻  $\psi$  用一个波包表示,这就不符合实际情况,它就只能扩散并在最后趋于零.波包的不稳定性是合理的,这时我们不应把波包直接对应于一个粒子.

又如在原子干涉仪的 WW 实验中,原子的质心运动是用平面波描写的,波函数对原子运动起了“导引场”的作用.当原子一个个地穿过间距  $d = 1.3\mu\text{m}$  的“双缝”时,当然不能说“原子是半径不到  $1\text{nm}$  的小球”(否定这句话正是 WW 实验设计的主要构思之一),我们宁可近似地把这时的原子看作是线度超过  $1.3\mu\text{m}$  的波包,我们这时只应该讨论波,讨论波的干涉,原子的粒子性只是当它最后在屏幕上被探测到时才显示出来.同理,§ 10.2C 中讨论的双光子纠缠态,其关联长度超过  $10\text{km}$ ,在尚未探测到其中一个光子之前,谈论一个在哪里另一个又在哪里也是没有意义的(因为一个单光子的相干长度只有  $L_c \approx 10.2\mu\text{m}$ ).再看 § 10.2D 中讨论

的  $K^{\circ}K^{\circ}$  体系, 实验昭示它们的纠缠态在空间扩展的线度达 10cm, 这当然远远超过单独一个  $K$  介子的半径或 Compton 波长.

因此在我们看来, 所谓“Wave particle duality”(波粒二重性), 应理解为: 一个微观粒子在运动时, 当它的量子相干性尚未被破坏之前, 在理论上应当作“波”来处理, 用薛定谔方程等去讨论它, 而当它一旦被探测到时, 才显示出“粒子性”, 这是在两个层次上的“二重性格”问题, 并不是在同一层次上“既像粒子, 又像波”的问题(参见杜孟利和 Delos 关于磁场中原子运动的研究<sup>[36]</sup>).

在我们看来, 在测量中出现的无限可能性是同客体与环境相互作用中无限自由度有联系的, 也就是与矛盾转化的无限可能性相联系的, “矛盾场”的强度即  $|\psi|^2$  越大, 转化的几率便越大, 因此 QM 的统计解释, 正如爱因斯坦所指出, “是绝对必要的”(见文献[34])\* . 当然, 测量的理论十分复杂, 涉及“量子与经典的边界在哪里?”<sup>[30]</sup> 测量有没有经典与量子之分? 如果是量子的话, 其量子动力学是否需要修改或扩充为非线性或非齐次的薛定谔方程? (参见文献[37]、[38]) 客体与主体的界线在哪里? 等等.

最后我们试图对爱因斯坦提出的第二个问题提出如下的看法. 所谓“Physical Reality”(物理实在)或事物需分两个层次来定义. 一个事物, 当它独立于人们的意识之外, 未被测量之前, 不妨称为“自在之物”(thing in itself). 在 QM 中它是用一个近似地与环境分开的量子态  $|\psi\rangle$  来表示的, 在某种(决非 100%地)意义上, 它是一种绝对的东西, 不包含任何信息. 然后, 当它被我们测量之后, 便转化为“为我之物”(thing for us), 或通常所谓的“现象”, 反映出的一系列数据, 这才是相对的被我们认识的东西. 而 QM 中的波函数则是通过虚拟的测量, 把这两个层次的“物”沟通了起来. QM 的力量在于: 只要我们知道粒子与环境相互作用的知识(哈密顿量), 便可能统计性地预告实际测量时将会出现什么现象, 见图 10.3.3.

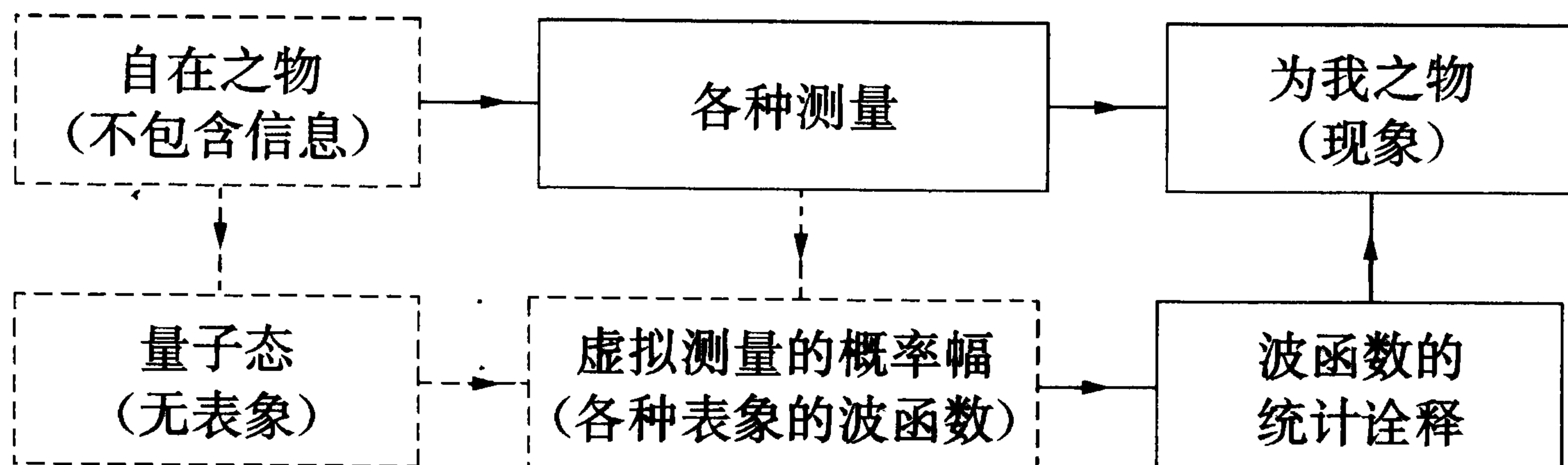


图 10.3.3 所谓“实在”(reality), 需要在两个层次上定义, 它们通过测量联系起来, 而量子力学则正好与之平行地工作(虚线表示看不见的东西).

\* real probability =  $|\psi(x, t)|^2 = |\text{potential possibility}|^2$ , 见文献[57]及 N. Herbert. *Quantum Reality*. Anchor Books, Inc., 1985, p. 96.

J. A. Wheeler 说得很好: “No phenomenon is phenomenon until it is an observed phenomenon”. (现象非到被观察到之时, 决非现象). 现在不妨补充一句: “我们想看什么, 我们才能够看到什么”. (We can only see what we intend to see.) 在自然科学发展中逐渐揭示出来的事实面前, 我们不禁想起了中国古代哲学中一句充满智慧的话:

“天人合一” (Oneness of heaven and man).

## 附录 10A 量子态隐形传输

### 一、量子态传输的困难何在?

设甲 (Alice) 希望将一个粒子的量子态  $|\psi\rangle$  传送给远方的乙 (Bob), 当然可以直接把这个粒子送过去, 但可能通信的渠道不畅或者太花时间. 那么有什么新的办法呢?

甲也许可以想: 把对  $|\psi\rangle$  的测量结果告诉乙, 让他重建这个态. 但这不可能是完全的, 因为测量不可能决定一个量子态, 测量必定迫使量子态“投影”到它可能的基矢状态之一 (这是 von Neumann 1932 年提出的“投影假设”). 例如一个光子有两种可能的 (水平与垂直) 偏振态:  $|\leftrightarrow\rangle$  与  $|\updownarrow\rangle$ , 一般态  $|\psi\rangle$  是它们的线性叠加:

$$|\psi\rangle = \alpha |\leftrightarrow\rangle + \beta |\updownarrow\rangle, \quad (|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1) \quad (10A.1)$$

一个处于  $|\psi\rangle$  态的光子经过一偏振的“束分离器” (Polarizing Beam Splitter, PBS), 设它反射 (透射) 水平 (垂直) 的偏振光子, 几率各为  $|\alpha|^2$  或  $|\beta|^2$ , 这就是将  $|\psi\rangle$  态投影到  $|\leftrightarrow\rangle$  或  $|\updownarrow\rangle$  基矢态的测量过程. 显然, 一次测量远不能得到关于  $|\psi\rangle$  的一切信息来重建这个态.

### 二、量子态隐形传输的基本概念

1993 年 Bennett 等<sup>[39]</sup> 指出: 正是“投影假设”才使得  $|\psi\rangle$  态的传输成为可能. 基本想法是在传输过程中甲破坏量子态而乙收到这个态, 但两人 (更不用说外人) 都不知道  $|\psi\rangle$  所包含的信息是什么. Bennett 的建议于 1997 年由 Innsbruck 大学 Bouwmeester 和潘建伟等的实验首先实现<sup>[40]</sup> (随后是文献[41]报道), 称为量子态隐形传输 (Quantum teleportation).

设甲手中待传输其量子态的粒子 1 处于初态:

$$|\psi\rangle_1 = \alpha |\leftrightarrow\rangle_1 + \beta |\updownarrow\rangle_1 \quad (10A.2)$$

实验的关键是: 甲乙两人要共同利用一对 EPR 光子, 即纠缠着的

(entangled)一对光子 2 与 3 作为“辅助对”(ancillary pair),记为

$$|\psi^-\rangle_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftrightarrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_3 - |\uparrow\rangle_2 |\leftrightarrow\rangle_3) \quad (10A.3)$$

注意:纠缠态并不包含关于个别粒子的信息,它只表示两个粒子的偏振状态总是正交的,测到其中一个处在 $|\leftrightarrow\rangle$ 态,则另一个必在 $|\uparrow\rangle$ 态(或者相反).

于是甲手中有两个粒子,1 与 2,而乙手中有粒子 3,但 2 与 3 处于纠缠态(10A.3).现在甲对粒子 1 与 2 作一个特殊的测量,使它们投影到纠缠态如下(详见文献[53]):

$$|\phi^\pm\rangle_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftrightarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \pm |\uparrow\rangle_1 |\leftrightarrow\rangle_2) \quad (10A.4)$$

这种测量叫做 Bell-state 测量(BSM),另外两种 Bell 态是

$$|\phi^\pm\rangle_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftrightarrow\rangle_1 |\leftrightarrow\rangle_2 \pm |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2) \quad (10A.5)$$

而一旦粒子 1 与 2 投影到 $|\phi^-\rangle_{12}$ 态上,粒子 3 便立刻投影到粒子 1 的初态:

证 因 1 与 2 处于态 $|\phi^-\rangle_{12}$ ,不论 1 是什么态,2 总是在与 1 正交的态,而开始时 2 与 3 处于 $|\psi^-\rangle_{23}$ 态,这意味着 2 的态与 3 的正交,因此 3 的末态(在测量后不再与 2 纠缠)必定与粒子 1 的初态一样:

$$|\psi\rangle_3 = \alpha |\leftrightarrow\rangle_3 + \beta |\uparrow\rangle_3 \quad (10A.6)$$

可见粒子 1 的初态转移到 3 的末态上去了,同时粒子 1 与粒子 2 处于新的纠缠态 $|\phi^-\rangle_{12}$ .即原来甲方粒子 1 的初态被测量破坏掉,同时在乙方的粒子 3 上重建了起来.

### 三、实验装置及测量步骤<sup>[40]</sup>

图 10A.1 是实验装置图.图中 EPR 源是这样做的:入射紫外(UV)光脉冲(持续时间 200fs,重复周期  $0.13 \times 10^{-7}$ s 即频率 76MHz)打到一块非线性晶体上,透射光会自动衰变为两个光子(2 和 3)(这在激光研究中称为“参数下转换方法”).光子波长 788nm,谱线宽度 4nm,它们处于偏振的纠缠态如(10A.3)所示的 $|\psi^-\rangle_{23}$ <sup>[42]</sup>.

另外紫外脉冲在晶体上的反射光也形成光子 1 和 4 的纠缠态,光子 1 作为待传输信息的载体,让它与光子 2 在偏振束分离器(PBS)中叠加,以达到不可区分性而形成新的纠缠态 $|\phi^-\rangle_{12}$ ,如(10A.4)式所示.此 BSM

完成后 PBS 的输出在两个探测器  $f1$  和  $f2$  中记录, 产生符合计数, 作为经典信息通过经典渠道传输给乙. 与光子 1 同时产生的光子 4 也将被另外探测以作为光子 1 已经发出(作为“初态”)的指示.

为证明 teleportation 对完备基都有效, 实验中采用线偏振  $+45^\circ$  或  $-45^\circ$  (即  $\beta = \pm\alpha$ ). 设光子 1 沿  $45^\circ$  偏振, 则 1 与 2 光子处于  $|\psi^-\rangle_{12}$  态的几率为 0.25, 同时光子 3 也应是  $45^\circ$  偏振. 若乙方探测器  $d2$  测  $+45^\circ$  偏振而  $d1$  测  $-45^\circ$  偏振, 则测量三重符合计数时,  $d2f1f2(+45^\circ$  分析) 几率应为 0.25, 而  $d1f1f2(-45^\circ$  分析) 的几率应为 0.

图 10A.1 中用一个反射镜平移以改变光子 2 到达甲方 PBS 的时间, 这一时间延迟值用镜的位移 ( $\mu\text{m}$  值) 在图 10A.2 的横坐标上显示. 在图中两条竖线内是 teleportation region, 在此区域之外, 光子 1 与 2 没有关联, 彼此独立地进入  $f1$  或  $f2$ , 于是(记录正交偏振态的)  $f1$  与  $f2$  的符合几率为 0.5. 而在 teleportation 区域内时, 因为光子 1 与 2 形成纠缠态  $|\psi^-\rangle_{12}$  (它只占全部 4 个 BSM 态总几率的  $1/4$ ), 故此时  $f1$  与  $f2$  的二重符合计数几率降为 0.25.

另一方面, 光子 3 没有确定的偏振, 因为它本是纠缠态的一部分, 探测器  $d1$  或  $d2$  各有 50% 的几率接收光子 3. 所以在 teleportation 区域之外, 无论  $+45^\circ$  分析 ( $d2f1f2$  三重符合), 或  $-45^\circ$  分析 ( $d1f1f2$  三重符合), 对任何延迟都给出几率 0.25 ( $= 0.5 \times 0.5$ ).

总之, 理论上预告是: 当改变时间延迟值,  $+45^\circ$  偏振态的成功输运将以  $-45^\circ$  分析曲线有一个降为 0 的深谷 (dip) 来表征, 同时  $+45^\circ$  分析曲线则应为一常数 0.25.

#### 四、实验结果<sup>[40]</sup>

实验上测量 2000 秒时间内的三重符合计数. 因为光子 1, 2, 3 来自同一个 EPR 源, 即使实验上把光子 1 的路径切断, 也会有三重符合计数, 这种虚假的 (spurious) 符合计数率占  $68\% \pm 1\%$ , 故须从实验数据中作为本底减去.

为排除虚假的三重符合, 另外有一个办法是利用光子 4. 只要探测器  $D_4$  测到光子 4 便立即把光子 1 投影到初态 (单光子态), 于是测量四重符合便不需要减除本底.

如果定义实验数据中 teleportation 的清晰度 (visibility) 为

$$V = \frac{N_{\max} - N_{\min}}{N_{\max} + N_{\min}} \quad (10A.7)$$

则三重符合情况下对各种偏振态(+45°, -45°, 0°, 90°或圆偏振)运输的  $V$  值约 0.6 左右,而对四重符合情况的  $V$  达到  $70\% \pm 3\%$ .

以上实验证明:一个光子的(任意)量子态被成功地从粒子 1 输运到了粒子 3.

### 五、几点讨论:

(a) 这种传输是“隐形”的. 甲方 BSM 测量后的符合计数通过经典渠道送给乙,在未与乙手中的粒子 3(它带有从“量子渠道”传过来的即 EPR 纠缠态留下来的性质)结合之前,并不包含关于粒子 1 的信息.

(b) 甲送过去的是一个粒子 1 的态,但甲却必须利用(与乙共享的)两个粒子(2 与 3)的 EPR 纠缠态. 原因是对一个粒子的测量必然要破坏它的量子相干性. 而现在甲的测量是使 2 与 3 的纠缠态  $|\psi^-\rangle_{23}$  转变成 1 与 2 的纠缠态  $|\psi^-\rangle_{12}$ , 粒子 1 在 teleportation 过程中确实改变了原来的状态,最后粒子 3 并不是粒子 1 的 clone 而是 teleportation 的结果.

根据 QM 的“线性”可以证明一条“quantum no-cloning 定理”:“一个单独的量子态是不可能被 clone 的”<sup>[43]</sup>. 所谓 clone 指的是在保留原型的同时,再复制出新的 copy(即把原有的量子态“放大”). 但现在“量子态隐形传输”性质不同,故不受此定理的限制\*.

(c) 实际上,EPR 源不但产生透射光子 2 和 3 处于纠缠态(10A. 3),同一 UV 脉冲反射后再经过晶体产生的反射光子 1 和 4 也处于纠缠态,而甲方 BSM 在使光子 1 和 2 处于新的纠缠态的同时,也立即把光子 3 和 4 投影进入同样的纠缠态. 潘建伟等进一步的实验<sup>[40]</sup>证明了这确是一种纠缠性的交换(swapping)现象,并分析如下:开始时四光子态可写为:

$$|\Psi\rangle_{1234} = |\psi^-\rangle_{23} |\psi^-\rangle_{14} \quad (10A. 8)$$

它又可写成如下形式(记号见(10A. 4)和(10A. 5)):

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle_{1234} = \frac{1}{2} (& |\psi^+\rangle_{12} |\psi^+\rangle_{34} + |\psi^-\rangle_{12} |\psi^-\rangle_{34} \\ & - |\psi^+\rangle_{12} |\psi^-\rangle_{34} + |\psi^-\rangle_{12} |\psi^+\rangle_{34}) \end{aligned} \quad (10A. 9)$$

所以对 1 和 2 的 BSM 在选择  $|\psi^-\rangle_{12}$  态的同时立即把 3 和 4 投入  $|\psi^-\rangle_{34}$  态,尽管光子 3 和 4 在产生时是独立的,在分开后也没有相互作用. 由此可见,纠缠性是 QM 中十分普遍、非常基本而奇妙的非定域性质,它是一

\* 段路明和郭光灿证明:在一定条件下,线性无关的非正交态集合能以非零几率被精确地克隆. [L. M. Duan and G. C. Guo, *Phys. Lett A* **243**, 261 (1998); *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4999(1998)]

切 EPR 实验的核心问题. 文献[40]的作者认为它可以由哥本哈根观点来理解:“关于量子体系的信息是比体系可能具有的任何”实在(real)“性质更加基本的一种特性”.

### 六、应用之一——量子密码术

由于量子态隐形传输中的东西既非物质,也非经典信息,对一切与通

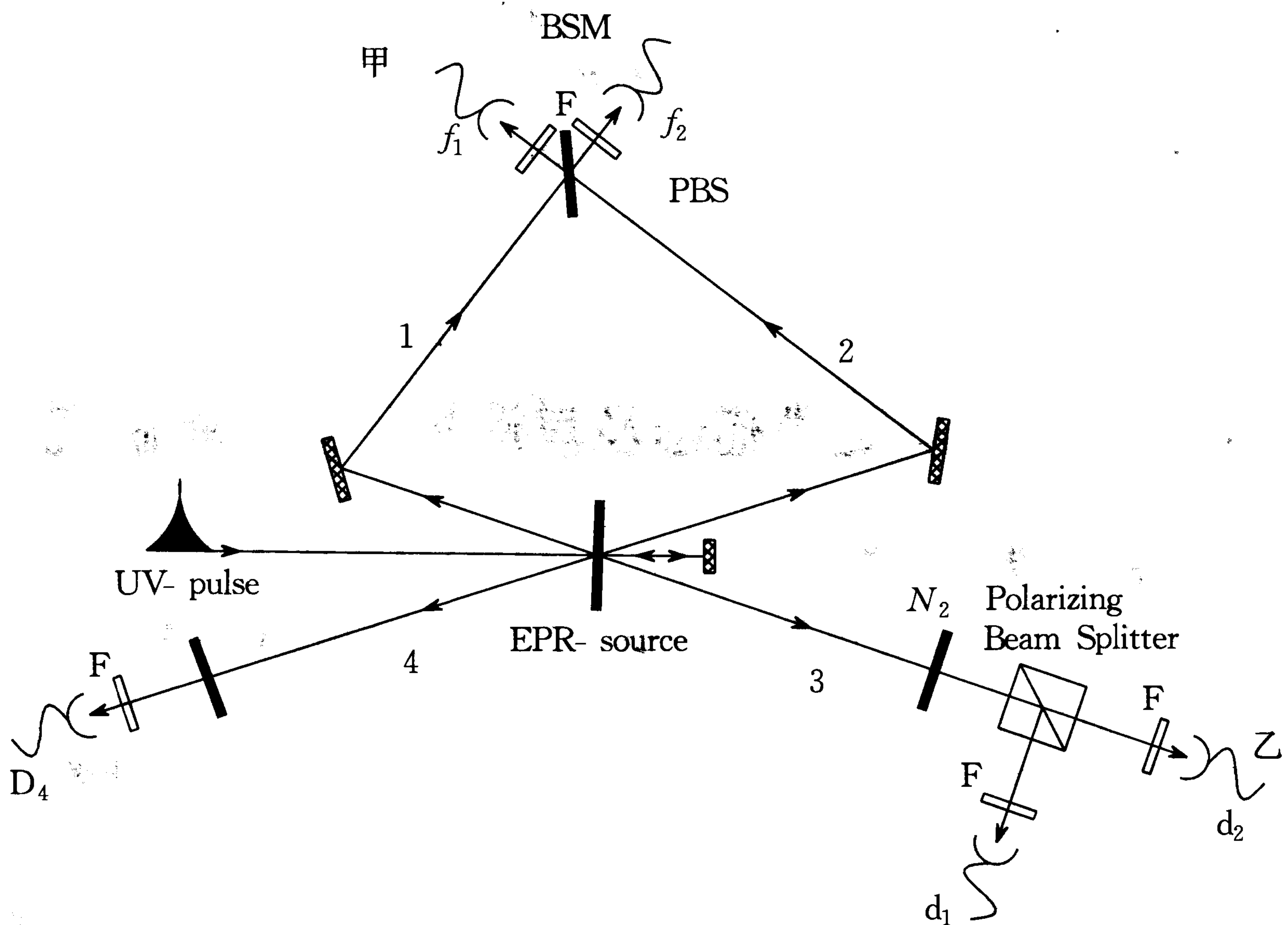


图 10A.1 量子态隐形传输的实验装置示意图

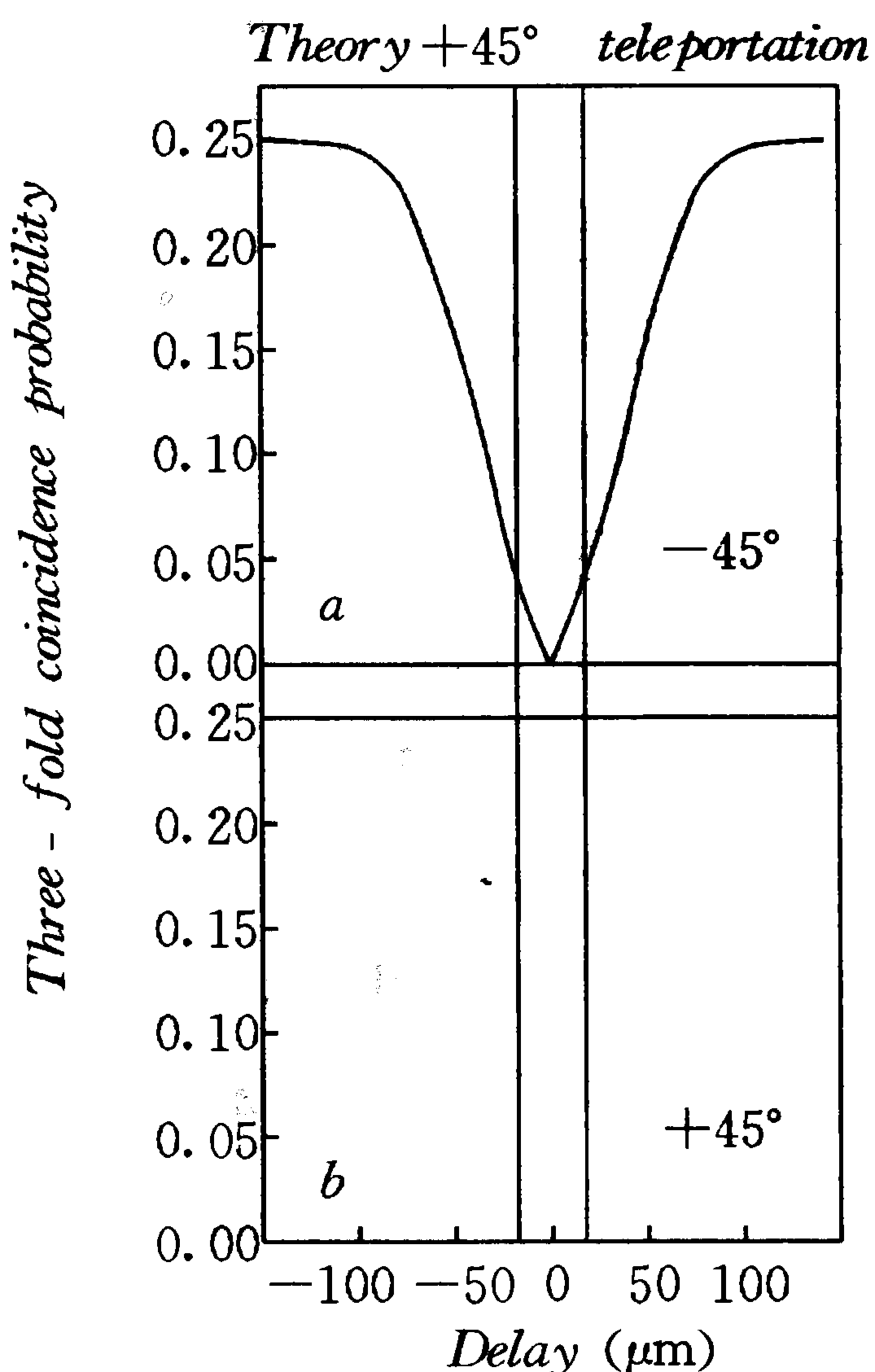


图 10A.2 +45°偏振态传输的三重符合几率,横坐标是反射镜位移(μm)引起的延迟值. a 是-45°分析(d1f1f2 三重符合), b 是+45°分析(d2f1f2 三重符合).

信无关的人员都处于严格的“保密状态”，因此可望发展出一种“量子密码术”(quantum cryptography)，它可能具有理想的防窃听能力。

## 七、应用之二——量子计算机

量子二态体系  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ，作为两个相互正交的基本态  $|0\rangle$  与  $|1\rangle$  的线性叠加，可以视为储存“几率幅”的最小单位，称为一个 quantum bit，简记为“qubit”(量子位)。这一名称显然是与储存经典信息的由“0”与“1”两个数码组成的二进制单位“bit”相对应。近几年来，科学家正在从理论上和实验上努力发展一种对 qubit 进行运算的计算机——量子计算机，它将发展出独特的编码和并行计算技术，并且可能具有很强的抗干扰和纠错能力(参见文献[44]、[45])。

## 附录 10B 薛定谔猫态及其消相干的实验研究

### 一、薛定谔猫——佯谬的提出

薛定谔于 1935 年提出了“猫佯谬”<sup>[46]</sup>(参见文献[3]中的 214~218 页)：

设想将一只猫关在一只密封的箱子里，另有一个 Geiger 计数管，其中有一小块放射性物质，平均每小时内只发生一次原子衰变。而一旦发生衰变时，计数管被触发放电，并通过继电器操纵一把小锤子，使其击碎一装着氢氰酸的小瓶，逸出的毒物剂量足够毒死那只猫。

薛定谔说：如将整个系统搁置一小时，在这段时间内，假若没有原子衰变，那只猫仍将活着；而假若有一个原子衰变，猫便会被毒死。整个系统的波函数  $\psi$  就由“活猫”和“死猫”这两部分以相等比例的叠加来描写。

传统的 QM 解释认为： $\psi$  是能够描写个别系统的。因此过了一小时后，猫便处于死活几率各占一半的状态中，当我们打开箱子观察时， $\psi$  就突然发生“投影”或所谓波包的“编缩”过程，以相等的可能性分别落到猫活着或者死了的状态。

许多学者如爱因斯坦，为了摆脱这个听起来十分荒谬的例子，主张对 QM 的统计解释理解为描写“系综”而不是描写个别“系统”的。(这与 QM 的完备性及对“物理实在”的理解也联系在一起，参见文献[34]的 462 页)。随着时间的推移，物理学家日益怀疑把猫这样的生物体也用波函数来描写的合理性，而决心弄清楚这个佯谬，为此先要在实验上制造出“薛定谔猫”来。



## 二、在实验上制备介观尺度的薛定谔猫态

1986年以后,依靠激光及非线性光学、微波激射器以及分子、原子或离子阱等实验技术的进步,所谓“薛定谔猫态”被制造出来了.在§1.6我们已讨论过谐振子(光场)的相干态,现在改记为 $|\alpha(t)\rangle$ ,考虑

$$|\psi(t)\rangle = N[|\alpha(t)\rangle + \exp(i\phi)|-\alpha(t)\rangle] \quad (10B.1)$$

其中

$$|\alpha(t)\rangle = \exp(-|\alpha|^2/2) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha(0)|^n}{\sqrt{n!}} \exp[-i(n+1/2)\omega t] |n\rangle \quad (10B.2)$$

而 $N$ 是归一化系数. $|\psi(t)\rangle$ 这个态描写两个具有最小不定性的波包,位于抛物线势场的相对两端来回振荡着.这里有二个相位, $\alpha(0)$ 的相位决定 $t=0$ 时刻两个波包的位置,而另一相位 $\phi$ 则决定它们之间的相位差.当 $\phi=0$ 时,(10B.1)式称为“偶相干态”, $\phi=\pi$ 时称为“奇相干态”,而 $\phi=\frac{\pi}{2}$ 时称为 Yurke-Stoler 相干态<sup>[47]</sup>.在某种意义上, $|\psi(t)\rangle$ 中 $|\alpha(t)\rangle$ 或 $|-\alpha(t)\rangle$ 的成分不妨分别对应于“活猫”或“死猫”的状态,它们之间的距离 $2|\alpha(0)|$ 可达到 $\mu\text{m}$ 级,即使不算宏观,至少也是“介观”的尺度,所以 $|\psi(t)\rangle$ 这个“薛定谔猫态”指的是两个宏观(或介观)上可分辨的态的量子叠加态.不过相干态是“准经典”的量子态而非经典态,加上相对相位 $\phi$ 的存在, $|\psi(t)\rangle$ 在运动中显示了一系列量子特性,如数本征态(Fock态) $|n\rangle$ 的振荡,压缩性(squeezing)以及干涉性等,与真的“猫”实在差得太远了(见下).

1989年后开始研究在原子中能否制造出类似于(10B.1)那样的相干态.因为不确定关系的限制,原子中一个电子的定态 $|n\rangle$ (称为 Rydberg 态)当主量子数 $n$ 很小时是不定域的,考虑到电子运动的平均半径 $\langle r \rangle \sim n^2$ ,仅当 $n$ 很大且有若干个 $|n\rangle$ 态相干地叠加在一起的时候,才可能以相对定域的波包形式在经典的 Kepler 轨道上作准经典的绕核旋转运动,在短时间内像行星绕日运动那样.但与谐振子相干态不同,现在波包在旋转中有色散即变形、崩溃或再重建等现象.1996年 Noel 和 Stroud 进一步在实验上制成了类似于(10B.1)的“猫态”<sup>[48]</sup>,用时间上相差 $1/2$ Kepler周期的、相位差也严格控制的两个激光脉冲,照射处于基态的钾原子,把一个电子激发到 $n$ 平均值为 $\bar{n}=66$ 且约包含5个 $n$ 态的 Kepler 轨道上,一个电子被分成空间上分开的两部分,以径向是壳层状的两个波包形式在轨道的“近日点”和“远日点”之间振荡着.实验的仔细测量表明:这两个波包之间的量子干涉性始终存在.他们<sup>[48]</sup>指出:过去人们常认为宏观与微观

之间的区别在于自由度数的多少,这是不确切的;对何谓“经典极限”也讲不清楚.现在看来,量子相干性以及体系与环境之间存在消相干(decoherence)才是最关键的问题.

### 三、体系与环境的耦合导致量子态的消相干

1996年,实验上也做出了在陷阱内一个离子的“猫态”<sup>[49]</sup>,在此基础上,2000年初 Myatt 等做了一个非常出色的实验<sup>[50]</sup>,弄清楚了“薛定谔猫是怎么死的”?

由于薛定谔方程是齐次线性方程,态的叠加原理或量子态的相干性成为 QM 最重要的基本性质之一. QM 中常常讨论有限的封闭体系,使之与环境分开,但实际上任何体系都处于一定的外界环境中,而后者是大量处于混乱运动状态的原子集合,它们与体系之间的耦合必然使体系内部的量子相干性逐渐被破坏掉,这一过程叫做“消相干”.当量子体系变大且与环境耦合增强时,体系的消相干实际上很快发生,这就是宏观上“薛定谔猫态”不可能实现的根本原因.

在理论上,环境常被叫做热库(reservoir),它包含着大量处于热平衡状态的、相位混乱的量子振子,通过它们与体系的耦合导致后者的消相干(或称为“阻尼”)(例如文献[30]、[31]及[51]等).假如两个相干态 $|\alpha_1\rangle$ 和 $|\alpha_2\rangle$ 先被相干叠加地产生出来形成如(10B.1)那样的猫态,则在与热库耦合经过时间 $t$ 后,再撤去耦合,则两个波包间还留下的相干性由 QM 预期应为<sup>[52]</sup>:

$$C(t) = \exp[-|\alpha_1 - \alpha_2|^2 \xi t] \quad (10B.3)$$

$\xi$ 代表体系与热库的耦合常数.

实验的作者们用特制的“离子阱”,把单个 ${}^9\text{Be}^+$ 离子约束在谐振子势内,它沿 $z$ 轴方向的振动频率为 $\omega/2\pi = 11.3\text{MHz}$ ,于是离子质心运动处于状态 $|n\rangle$ ,而能量为 $(n+1/2)\hbar\omega$ .另一方面, ${}^9\text{Be}^+$ 基态 ${}^2S_{1/2}$ 有二重态的超精细结构,取特别的两个内部态为 $|\downarrow\rangle \equiv |F=2, m_F=-2\rangle$ 和 $|\uparrow\rangle \equiv |F=1, m_F=-1\rangle$ ,后者比前者能量上高 $\hbar\omega_0$ ,而 $\omega_0/2\pi \approx 1.25\text{GHz}$ .用激光冷却法可使所有实验都从 $|\downarrow\rangle|0\rangle$ 这个基态出发.

先用一种特殊的激光 Raman 跃迁脉冲技术产生离子内部自旋反转(质心运动不变),使 $|\downarrow\rangle|0\rangle \rightarrow (|\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle)|0\rangle/\sqrt{2}$ .第二步用另一种激光 Raman 跃迁技术不改变内部态而使质心态从 $|0\rangle$ 平移到相干态 $|\alpha\rangle$ [这就是理论上(1.6.13)式的平移算符在实验上的实现: $D(\alpha)|0\rangle = |\alpha\rangle$ ],但 $\alpha$ 的数值却与内部态有关.这样便做出了如下的猫态:

$$|\psi_c\rangle = (|\downarrow\rangle|\alpha_\downarrow\rangle + |\uparrow\rangle|\alpha_\uparrow\rangle)/\sqrt{2} \quad (10B.4)$$

其中  $\alpha_{\uparrow} = -\alpha_{\downarrow}/2$ . 第三步, 再加一个沿  $z$  轴的均匀电场, 其频率与  $\omega$  一致, 持续  $3\mu\text{s}$ , 这样使  $|\downarrow\rangle$  与  $|\uparrow\rangle$  态都受到同样的平移算符  $D(\beta)$  作用, 从而使(10B. 4)式变为:

$$|\psi_c\rangle \rightarrow |\psi'_c\rangle = (|\downarrow\rangle|\beta + \alpha_{\downarrow}\rangle + e^{i\phi}|\uparrow\rangle|\beta + \alpha_{\uparrow}\rangle)/\sqrt{2} \quad (10B. 5)$$

其中  $\phi = \text{Im}\beta\Delta\alpha^*$ , ( $\Delta\alpha = \alpha_{\downarrow} - \alpha_{\uparrow}$ ).

让这个猫态在作  $\beta$  移动过程中与高温热库耦合. 后者用沿  $z$  轴的一个陷阱电极上加上无规的均匀电场  $E$  来模拟, 电压的振荡频率展布在  $\omega$  附近的一个范围, 则离子势能  $U = -qx \cdot E$ , ( $x$  是离子离开平衡点的位移,  $q$  是它的电荷.) 这一耦合与离子的内部态无关, 热库的温度  $T$  正比于所加电压  $V$  的平方平均值:  $T \propto \langle V^2 \rangle$ , 经过耦合  $t$  时间后, 为了检测分开的两部分波包还留下多少相干性, 需把上面制造猫态  $|\psi'_c\rangle$  的步骤颠倒过来, 先回到

$$|\psi'_c\rangle \rightarrow |\psi''\rangle = (|\downarrow\rangle + \exp(2i\phi)|\uparrow\rangle)|\beta\rangle/\sqrt{2} \quad (10B. 6)$$

再用第二个脉冲(与第一次脉冲有相位差  $\delta$ )使内部自旋都转为  $|\downarrow\rangle$  态, 于是这两个波包便会发生干涉. 在对高斯型无规分布的  $\beta$  变量取平均后, 发现离子处于  $|\downarrow\rangle$  态的几率应为

$$P_{\downarrow} = \frac{1}{2}[1 - \exp(-2|\Delta\alpha|^2\sigma^2)\cos\delta] \quad (10B. 7)$$

实验上改变  $\delta$  之值记录  $P_{\downarrow}$  便产生干涉条纹. 式中  $\sigma^2$  正比于  $\langle V^2 \rangle$  亦即正比于热库的温度  $T$ . 实验结果证明理论公式(10B. 3)是正确的. 这表示体系与热库的耦合越强(即  $\xi \sim \sigma^2 \sim \langle V^2 \rangle \sim T$  越大), 或体系越大(即  $|\Delta\alpha|$  越大), 消相干的速率越快. 此外也观察了撤去外加无规电压噪声后, 让猫态在周围环境下天然消相干的指数规律. 还有其他实验, 更复杂些, 今从略. 总之, 文献[50]是首次如此精细地制造了环境(控制了热库的参数), 研究了离子猫态的消相干过程, 从而理解了 QM 中体系与环境相互关系的重要性以及宏观的薛定谔猫态为什么不能存在的原因. 这一研究课题对量子计算机等新技术领域也将有深远的影响.

#### 四、SQUID 中的宏观薛定谔猫态

2000 年, Friedman 等在 SQUID(见附录 8B)上做了一个非常精美的实验<sup>[54]</sup>, 被解释为“薛定谔猫变胖了”<sup>[55]</sup>, 引起了科学界和公众的极大兴趣, 这需要认真的分析<sup>[56]</sup>.

用 $|\psi\rangle$ 来记处于宏观超导状态的 SQUID,它是两个基本状态 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的叠加态:

$$|\psi\rangle = C_0 |0\rangle + C_1 |1\rangle \quad (10B.8)$$

( $|C_0|^2 + |C_1|^2 = 1$ ) 文献[54]的作者说 $|0\rangle$ 与 $|1\rangle$ 分别带有顺钟向与反钟向的电流(强度达 $2\sim 3\mu\text{A}$ ),相当于 $10^9$ 个 Cooper 对的相反方向运动,对应的磁通量 $\Phi$ 的差别,达到 $\frac{1}{4}\phi_0$  ( $\phi_0 = \frac{hc}{e}$ ), SQUID 的磁矩也达到 $10^{10}\mu_B$ . 在能量 $E$ 对 $\Phi$ (横坐标)的图中<sup>[54]</sup>, $|0\rangle$ 与 $|1\rangle$ 似乎是分得很开的“宏观态”,中间还有高为 $\Delta U_0$ 的势垒隔开,它们一左一右,靠量子隧道效应才能耦合起来.

实验中先制备体系使处于左面势阱中能量最低态 $|i\rangle$ ,然后用微波辐射(光子能量 $h\nu = 96\text{GHz} = 4.61\text{K}$ )把体系激发到(10B.8)式所示的一个 $|\psi\rangle$ 态( $E_\psi = E_i + h\nu$ ).接着, $|\psi\rangle$ 态自动衰变为右面势阱中的一个末态.由于跃迁发生在两个势阱之间,这导致磁通量 $\Phi$ 的变化,它可以用一个磁通计测出.对固定的 $\Delta U_0$ ,测得的跃迁几率 $P$ 应正比于 $|C_0|^2$ .而 $P$ 的数据作为外加磁通量 $\Phi_x$ 的函数,确实显示有双峰结构,它证实了两个态

$$\left[ \text{特例如 } \Delta U_0 = 8.956\text{K} \text{ 时, } |\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle), |\psi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \right]$$

之间的能级交叉效应.

在[54]、[55]等文献中把 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$ 分别比拟做“死猫”或“活猫”状态,于是说“死猫”与“活猫”的线性叠加态被测到了,而且这个猫变“胖”了.

在我们看来,这个实验引起公众惊异的一个原因是上面有些话讲得不够精确而引起误解.让我们像文献[55]中那样,把磁通量 $\Phi$ 简记为 $x$ ,使问题与 QM 基本解释挂起钩来.那应首先明确:一个量子态 $|\psi(t)\rangle$ 中不含 $x$ ,即本来不包含任何描述.但现在实验中打算测 $x$ ,准备用一个磁通计,于是理论上用一个基矢 $|x\rangle$ 代表它而写出态的波函数如下<sup>[56, 57]</sup>:

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle = C_0 \psi_0(x, t) + C_1 \psi_1(x, t) \quad (10B.9)$$

波函数是复数,它表示的是“虚拟测量的概率幅”,还是不可观察的.再取它的模平方后,实数

$$|\psi(x, t)|^2 = |C_0|^2 |\psi_0(x, t)|^2 + |C_1|^2 |\psi_1(x, t)|^2 + 2\text{Re}[C_0^* C_1 \psi_0^*(x, t) \psi_1(x, t)] \quad (10B.10)$$

才能预告“测量时”在 $x$ 点找到粒子(体系)的几率.这就是 Born 对波函数的统计解释.我们要注意几点:

(a) 把(10B. 10) 式说成是“测量前粒子在  $x$  点出现的几率”是不对的；

(b) 第三项叫干涉项，它在本实验中虽然很小(左、右两方的波函数重叠很少)，一般情形下却十分重要，它的存在使 Born 统计解释对单独的  $|\psi_0(x, t)|^2$  或  $|\psi_1(x, t)|^2$  不复有效，(比较(10. 1. 9) 式)；

(c) 仅当把(10B. 10) 式对  $x$  积分后才有(利用正交性)：

$$\int |\psi(x, t)|^2 dx = |C_0|^2 + |C_1|^2 \quad (10B. 11)$$

才能说在实验中可以测到这个量  $|C_0|^2$ ，并与跃迁几率  $P$  联系起来后，说它代表了体系中顺钟向流动的超导电流强度。倘若在未测之前就认真地这样说，是不恰当的。

(d) 一旦在测量中上述跃迁真的发生时， $|\psi\rangle$  态整体(而不仅是其中的  $|0\rangle$  态) 都变掉了，这就是波包的编缩过程。

(e) 例如前述  $|\psi_+\rangle$  态中  $C_0 = C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ ，代表一个定态，既无电流也无

磁通，说它内部有两个方向相反而强度相等的电流在流动，未免太认真了\*。再如当  $C_0 > C_1$ ，表观上只有顺钟向电流，说此时  $|\psi_+\rangle$  仍代表反钟向电流态，更是太实体化的错误说法。这一点从附录 9B 中关于电子或中微子的讨论可以看得更加清楚。

(f) 我们在强调量子态不包含任何信息的同时，还要注意(10B. 8) 式中态  $|\psi\rangle$  按基矢  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  的分解本身，就已经隐含了下一步实验的要求。另一类实验可能要求另一种分解形式。例如附录 9B 中，一个电子(或中微子) 态  $|\psi\rangle$  可能有两种分解形式：

$$|\psi\rangle = |\varphi\rangle + |\chi\rangle \quad \text{或} \quad |\psi\rangle = |\xi\rangle + |\eta\rangle \quad (10B. 12)$$

前一种适合于讨论(测量) 隐藏的正(反) 粒子场成分，而后一种则适合于讨论(测量) 隐藏的左(右) 旋手征场成分。

总之，所谓“薛定谔猫佯谬”，经过 60 多年的研究(尤其是靠了文献 [50] 和 [54] 中的实验)，在我们看来，已经基本上过去了。

## 五、总结和讨论

迄今为止的一切物理实验比以往任何时候都更强烈地支持 QM 的正确性。然而 QM 的正确解释还需要某种抽象性、严格性和灵活性。在我们看

\* § 10. 3A 中讨论的 EPY 佯谬，不妨也可看成是微观“薛定谔猫佯谬”的一个例子。

来,物理学在今天更离不开哲学了.本书先后讨论了6个佯谬——Klein 佯谬、EPR 佯谬、EPY 佯谬、超光速佯谬、负质量佯谬和薛定谔猫佯谬,它们在基本上都过去了.对它们的研究集中到两点基本概念:

(1) 任何粒子都毫无例外地是不纯的,在它的内部总隐藏着两个对立的场  $\varphi$  和  $\chi$ ,具有(9.5.16)式的空间-时间反演对称性,它反映了粒子与反粒子的对称性,第三种等价的说法是质量反演对称性(见(9C.6)式).如果不考虑这一(三种之一)对称性,我们便不能认为 QM 是完备的,更不能理解 QM 与 SR 在本质上的一致性(见图 10.3.2).

(2) 在抽象的意义上,一个量子态本来不包含任何信息,后者是主体(通过仪器)与客体共同创造出来的.但是靠引入波函数作为“虚拟测量的几率幅”,我们能够预告实验上将测到什么样的可观察量及其相应的几率,这是历史上原本分开的分析归纳法与演绎法在更高水平上的融合和发展.它使得人在认识客观世界中的主观能动性充分地发挥出来了(参见图 10.3.3 和文献[57]).

作为这两点概念的两个新应用,超光速中微子方程(9B.34)和关于反引力的预言(附录 9C),将由今后实验来检验,因为物理学归根结底是一门实验科学.不过从理论抽象或美学的角度看,(1)的对称性可归之于  $i$  与  $-i$  的对称性,而对(2)的理解也不妨归之于对“ $I$ ”(既可指信息 Information,也可代表作为认识主体的“我”)的认识.

## 习 题

10.1 考虑一束二态原子被空腔中经典光场驻波的衍射.光场频率  $\omega$  已调到与原子的共振频率  $\omega_0$  分开,故可忽略自发辐射.此时体系的哈密顿量可以写为:

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_3 + \frac{p^2}{2m} + \hbar \Omega [\sigma_+ \exp(-i\omega t) + \sigma_- \exp(i\omega t)] \cos kx$$

其中  $\sigma_3$  与  $\sigma_{\pm}$  是在(8.1.18)式中定义的膺自旋算符,  $\Omega = \mu \epsilon_0 / \hbar$  是 Rabi 频率( $\mu$  是原子偶极矩,  $\epsilon_0$  是外场的最大振幅,见习题 2.10.) 假设相互作用时间足够短以使被原子吸收的横向( $x$  方向)动能  $p^2/2m$  可以忽略.

试证明在相互作用图景中,取  $H_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \sigma_3$  后,哈密顿量可以改写成:

$$H^I = V(x) [\cos\theta(x) \sigma_3 + \sin\theta(x) \sigma_1]$$

它在很大的失谐极限 ( $\delta\omega = \omega_0 - \omega \gg 2\Omega \cos kx$ ) 下可以近似地对角化为:

$$H^I \approx \left[ \frac{1}{2} \hbar \delta\omega + \hbar \left( \frac{\Omega^2}{\delta\omega} \right) \cos^2 kx \right] \sigma_3$$

\* 10.2 试证在 § 10.3A 中讨论的无限深-维方势阱内,对易关系:

$[x, p]=i\hbar$ , ( $-a \leq x \leq a$ ) 仍然成立.

10.3 请检验(10A.9)式.

## 参 考 文 献

- [1a] M. O. Scully, B. G. Englert, H. Walther. *Nature*, **351**, 9 (1991)
- [1b] J. G. Cramer. *Rev. Mod. Phys.*, **58**(3), 647(1986)
- [2] P. A. M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford, 1930(陈咸亨译. 量子力学原理. 北京:科学出版社,1965)
- [3] 关洪. 量子力学的基本概念. 北京:高等教育出版社,1990
- [4] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands. *The Feynman Lectures on Physics. Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1965 (费曼物理学讲义(第三卷). 上海:上海科学技术出版社,1989)
- [5] S. Dürr, T. Nonn, G. Rempe. *Nature*. **395**, 3 (1998); *Phys. Rev. Lett.*, **81** (26), 5705 (1998)
- [6] J. S. Bell. *Physics* (Long Island City, N. Y.), **1**, 195 (1964)
- [7] 苏汝铿. 量子力学. 上海:复旦大学出版社,1997
- [8] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. The Benjamin/Cummings Pub. Com. Inc., 1985
- [9] A. Aspect, P. Grangier and G. Roger. *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 91 (1982); A. Aspect, J. Dalibard and G. Roger. *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 1804 (1982)
- [10] G. Weihs, T. Jennewein, C. Simon, H. Weinfurter, A. Zeilinger. *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 5039 (1998)
- [11] J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony, R. A. Holt. *Phys. Rev. Lett.*, **23**, 880 (1969)
- [12] J. D. Franson, K. A. Potocki. *Phys. Rev.*, **A 37**, 2511 (1988)
- [13] R. Ghosh, L. Mandel. *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 1903 (1987)
- [14] J. D. Franson. *Phys. Rev. Lett.*, **62**, 2205 (1989)
- [15] W. Tittel, J. Brendel, B. Gisin, T. Herzog, H. Zbinden, N. Gisin. *Phys. Rev.*, **A 57**, 3229 (1998); W. Tittel, J. Brendel, H. Zbinden and N. Gisin. *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 3563 (1998)
- [16] CPLEAR Collaboration. *Phys. Lett.*, **B 422**, 339 (1998)
- [17] T. D. Lee. *Particle Physics and Introduction to Field Theory*. Harwood Academic Publishers, 1981
- [18] L. D. Landau, E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory* (3rd Ed.). Oxford:Pergamon Press, 1977
- [19] 陶宗英. 光子学报,**26**(9), 769(1997);大学物理,**17**(7),18(1998)

- [20] A. Einstein. *Scientific Papers Presented to Max Born, on His Retirement from the Tait Chair of Natural Philosophy in the University of Edinburgh*. New York Hafner, 1953(许良英、范岱年编译.《爱因斯坦文集》第一卷.北京:商务印书馆,1976); Max Jammer. *The Philosophy of Quantum Mechanics, the Interpretation of Quantum Mechanics in Historical Perspective*. New York: Wiley, 1974
- [21] W. Pauli. *Pauli Lecture on Physics (Vol 5: Wave Mechanics)*. Cambridge: (Mass) MIT Press, 1973
- [22] H. Yukawa. *Quantum Mechanics (Vol I, 2nd Ed.)* (in Japanese). Tokyo Yan-Bo Bookshop, 1978
- [23] F. L. Marhley. *Amer. Jour. Phys.*, **40** (10), 1545 (1972)
- [24] J. M. Domingos, M. H. Caldeira. *Found. Phys.*, **14** (2), 147 (1984)
- [25] 关洪. 光子学报, **27**(4), 309 (1998)
- [26] Ni Guangjiong. 光子学报, **28** (2), 112 (1999); **29** (3), 282 (2000); **30** (2) 108 (2001)
- [27] R. Resta. *Phys. Rev. Lett.*, **80** (9), 1800 (1998)
- [28] 倪光炯, 王炎森, 钱景华, 方小敏. 改变世界的物理学. 上海: 复旦大学出版社, 1998, 1999
- [29] 倪光炯. 科学. **50** (2), 38 (1998); *Photon: Old Problems in Light of New Ideas* NOVA Science Publishers, Inc., 2000
- [30] W. H. Zurek. *Phys. Today*, **44**, **36**, Oct 1991. 对此文的评论及作者的回答见 *Phys. Today*, April 1993
- [31] 倪光炯, 陈苏卿, 周谷声. 物理学报. **31** (5), 585 (1982)
- [32] M. Buchanan. *New Scientist*, 22 August, 1998
- [33] N. D. Mermin. *Phys. Today*, April, 1985
- [34] 同[20]
- [35] A. Pais. *Rev. Mod. Phys.*, **51**, 863 (1979)
- [36] M. L. Du, J. B. Delos. *Phys. Rev.*, A **38**, 1896, 1913, 5609 (1988)
- [37] N. Gisin. *Phys. Rev. Lett.*, **52** (19), 1657 (1984)
- [38] Gu Yi-Ming. *Physics Essays*, **8** (4), 523~531 (1991)
- [39] C. H. Bennett *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 1895 (1993)
- [40] D. Bouwmeester, Jian-Wei Pan *et al.* *Nature*, **390**, 575 (1997); Jian-Wei Pan, D. Bouwmeester *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 3891 (1998)
- [41] D. Boschi *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 1121 (1998)
- [42] P. G. Kwiat *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 4337 (1995)
- [43] W. K. Wootters, W. H. Zurek. *Nature*, **299**, 802 (1982)
- [44] C. H. Bennett. *Phys. Today*, 24 (1995)
- [45] 尹鸿钧. 量子力学. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 1999; 赵凯华, 罗蔚茵. 量子



物理. 北京: 高等教育出版社, 2001

- [46] E. Schrödinger. *Naturwissenschaften*, **23**, 807, 823, 844 (1935)
- [47] B. Yurke, D. Stoler. *Phys. Rev. Lett.*, **57**, 13 (1986)
- [48] M. W. Noel, C. R. Stroud. Jr. *Phys. Rev. Lett.*, **77**, 1913 (1996)
- [49] C. Monroe, D. M. Meekhof, B. E. King, D. J. Wineland. *Science*, **272**, 1131 (1996)
- [50] C. J. Myatt *et al.* *Nature*, **403**, 20 Jan. (2000)
- [51] A. D. Caldeira, A. J. Leggett. *Phys. Rev. Lett.*, **46**, 211 (1981); *Physica*, **121A**, 587 (1983); *Phys. Rev.* **A31**, 1059 (1985); *Ann. Phys. (NY)* **149**, 374 (1983)
- [52] F. D. Walls, G. J. Milburn. *Quantum Optics*. Berlin: Springer, 1994
- [53] A. Zeilinger. *Scientific American*. April 2000, 50~59
- [54] J. R. Friedman *et al.* *Nature*, **406**, 6 July 2000, 43
- [55] G. Blatter. *Nature*, **406**, 6 July 2000, 25
- [56] G-j Ni. *quant-ph/0103064*, *Acta Photonica Sinica*, **31**, 257 (2002)
- [57] 倪光炯. *科学*, **54**(6), 34 (2002); **55**(1), 22 (2003)

## 附录 关于物理量单位制

本书统一记电子电荷  $q_e = -e < 0, e > 0$ , 并采用(未合理化的)高斯单位制. 这是因为大多数量子力学书和文献都用高斯单位制[GUS], 它对量子物理学显然有方便之处, 同时又在与实验数据联系时与国际单位制([IUS])混用, 例如能量以电子伏(eV)为单位, 磁感应强度  $\mathbf{B}$  以特(Tesla)为单位. 如下表 A. 1 所示:

表 A. 1 [GUS]与[IUS]的关系

|                            | 高斯单位制[GUS]  | 国际单位制[IUS]  |
|----------------------------|---|---|
| 光速 $c$                     | $2.997\,924\,58 \times 10^{10} \text{ cms}^{-1}$  | $299\,792\,458 \text{ ms}^{-1}$   |
| Planck 常数 $\hbar = h/2\pi$ | $1.054\,572\,66(63) \times 10^{-27} \text{ ergs}$ | $1.054\,572\,66(63) \times 10^{-34} \text{ Js}$<br>$= 6.582\,122\,0(20) \times 10^{-22} \text{ MeVs}$ |
| 电子电荷绝对值 $e$                | $4.803\,206\,8(15) \times 10^{-10} \text{ esu}$   | $1.602\,177\,33(49) \times 10^{-19} \text{ 库(C)}$   |
| 能量单位                       | erg   | $1\text{J} = 10^7 \text{ erg}$<br>$1\text{eV} = 1.602\,177\,33(49) \times 10^{-19} \text{ J}$         |
| 磁感应强度 $\mathbf{B}$ 的单位     | gauss(G)  | Tesla( $1\text{T} = 10^4\text{G}$ )   |

在[GUS]中, 真空中一个点电荷  $q(\text{esu})$  在距离  $r(\text{cm})$  远处产生的电势为

$$U(r) = \frac{q}{r} \quad (\text{A. 1})$$

相应地, 精细结构常数

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = (137.035\,989\,5)^{-1} \quad (\text{A. 2})$$

请注意: 虽然  $c$  和  $\hbar$  是不变的普适常数, 但(A. 2)式仅指低能(电荷间碰撞的动量转移  $Q \sim m_e c$ ,  $m_e c^2 \sim 0.5 \text{ MeV}$ )的数值, 当高能碰撞中  $Q \sim m_W c$  ( $m_W$  指  $W$  玻色子质量,  $m_W c^2 \sim 80 \text{ GeV}$ )时,  $\alpha$  之值会增大到约  $1/128$  (见第九章引文[24]、[47]).

各向同性介质中的电场  $\mathbf{E}$  能量密度和磁场能量密度分别表示为:

$$u_e = \frac{\epsilon}{8\pi} E^2, \quad u_m = \frac{1}{8\pi\mu} B^2 \quad (\text{A. 3})$$

注意在[GUS]中,介电常数  $\epsilon$  和磁导率  $\mu$  都是无量纲数,故对真空中的电磁场,  $\epsilon_0 = \mu_0 = 1$ , 我们有

$$u_e + u_m = \frac{1}{8\pi}(E^2 + B^2) \quad (\text{A. 4})$$

且电磁波中的  $B$  和  $E$  在数值上相等,见(4.1.14)式.

另一方面,在[IUS]中,真空中一个点电荷  $q(\text{C})$  在距离  $r(\text{m})$  远处产生的电势为

$$U(r) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (\text{A. 5})$$

其中  $\epsilon_0$  是有量纲的真空介电常数,

$$\epsilon_0 = 8.854\,187\,817 \times 10^{-12} \text{Fm}^{-1} \quad (\text{A. 6})$$

(F 是电容单位“法”),与此相应,精细结构常数

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} = (137.035\,989\,5)^{-1} \quad (\text{A. 7})$$

注意它的表式与(A.2)式不同但数值相同.

在[IUS]中,各向同性介质内电场和磁场的能量密度分别表示为

$$u_e = \frac{1}{2}\epsilon E^2, \quad u_m = \frac{1}{2\mu} B^2 \quad (\text{A. 8})$$

乍看起来,(A.8)与(A.3)两式只差系数  $1/4\pi$ ,实际不然,这里  $\epsilon$  与  $\mu$  都是有量纲数,例如在真空中,  $\epsilon = \epsilon_0$ , 如(A.6)式所示,而真空磁导率  $\mu_0$  在[IUS]中等于

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{NA}^{-2} = 4\pi \times 10^{-7} \text{Hm}^{-1} \quad (\text{A. 9})$$

[N(牛顿),A(安培),H(亨利),分别是力、电流、电感单位].

在[IUS]中最妙的是  $\epsilon_0$  与  $\mu_0$  的乘积等于光速  $c$  平方的倒数:

$$\epsilon_0 \mu_0 = 1/c^2 \quad (\text{A. 10})$$

现在光速  $c$  已被提升为基本常数,作为计量单位,因而米(m)已成为导出单位了(见 § 9.6A 最后).

注意[IUS]中  $\mu_0$  的数值含  $(4\pi)$  因子以及(A.10)式,而(A.7)式比[GUS]中对应的(A.2)式分母中多一个  $4\pi\epsilon_0$  因子,因此我们可以理解:对同一个物理规律或物理量的表达式,凡[GUS]中出现电荷  $q$  与光速  $c$  之比的,相应的[IUS]表式中便只出现简单的  $q$ . 如下面表 A.2 所示.

表 A.2 若干物理公式在[GUS]与[IUS]间之比较

|                  | 高斯单位制[GUS]  | 国际单位制[IUS]   |
|------------------|---|--|
| 点电荷 $q$ 产生的电势    | $q/r$   | $q/4\pi\epsilon_0 r$   |
| 精细结构常数 $\alpha$  | $e^2/\hbar c \approx 1/137$   | $e^2/4\pi\epsilon_0 \hbar c \approx 1/137$                                   |
| 真空电(磁)场能量密度      | $\frac{1}{8\pi} E^2 \left( \frac{1}{8\pi} B^2 \right)$                                | $\frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 \left( \frac{1}{2\mu_0} B^2 \right)$             |
| 磁通量子化单位 $\phi_0$ | $hc/e = 4.135\ 67 \times 10^{-7} \text{Gcm}^2$  | $h/e = 4.135\ 67 \times 10^{-15} \text{Tm}^2$                                |
| 玻尔磁子 $\mu_B$     | $\frac{e\hbar}{2m_e c} = 5.788\ 382\ 63$<br>$\times 10^{-11} \text{MeVT}^{-1}$        | $\frac{e\hbar}{2m_e} = 5.788\ 382\ 63$<br>$\times 10^{-11} \text{MeVT}^{-1}$ |
| 洛伦兹力公式           | $\mathbf{F} = q \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right)$ | $\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$                  |

下面我们再作几点讨论:

(a) 无量纲的物理量如精细结构常数  $\alpha$ , 当然不随单位制之改变而改变, 如表 A.2 所示, 但要注意它的表示式在两种单位制中是不同的.

(b) 由于上一点, 我们在实际推导时, 最好把公式中的物理量尽量合并成无量纲的  $\alpha$ , 这样可以减少出错的机会. 例如类氢原子内一个电子在核库仑场中的势能在[GUS]中表示为

$$V(r) = -Ze^2/r \quad (\text{A. 11})$$

( $Z$  是核电荷数); 而在[IUS]中则表示为:

$$V(r) = -Ze^2/4\pi\epsilon_0 r \quad (\text{A. 12})$$

注意到  $\alpha$  在两个单位制中的定义, (A. 11) 和 (A. 12) 可统一写成

$$V(r) = -\frac{Z\alpha}{r} \hbar c \quad (\text{A. 13})$$

由  $\hbar$  和  $c$  的量纲可见,  $V(r)$  具有能量量纲.

(c) (A. 13) 式启发人们引进自然单位制([NUS]), 即取  $\hbar = c = 1$ , 于是在[NUS]中只存在一个有量纲的单位——长度单位[L], 它也就是时间单位[T], 亦即质量单位[M]或能量单位[E]的倒数:  $[L] \sim [T] \sim [M]^{-1} \sim [E]^{-1}$ , 例如(A. 13)式在[NUS]中可简化为:

$$V(r) = -Z\alpha/r \quad (\text{A. 14})$$

在作理论公式推导时, 用[NUS]最简单, 出错机会最少. 我们在最后结果中按照量纲分析可以方便地恢复适当的  $\hbar$  和  $c$ , 再回到[GUS], 作进一步

的数值计算.

例如电子的康普顿波长  $\lambda_e = \frac{\hbar}{m_e c}$  在[NUS]中可简写为  $\lambda_e = 1/m_e$ , 而电子的经典半径在[GUS]中表示为  $r_e = e^2/m_e c^2 = \alpha \lambda_e$ , 在[NUS]中可简记为  $r_e = \alpha/m_e$ , 另一方面, 氢原子的玻尔半径 (核质量 =  $\infty$ ) 等于  $a_\infty = \lambda_e \alpha^{-1} = 1/\alpha m_e$ .

(d) 在有些量子力学书或文献中, 常常采用所谓“合理化的高斯单位制”([RGUS]), 它与[GUS]差别的起源为: 代替(A. 1)和(A. 11)式, 写出一个电荷  $q$  与另一电荷  $q'$  的静电势能为

$$V(r) = qq'/4\pi r \quad (\text{A. 15})$$

这意味着: 电荷  $q$  的单位比原来[GUS]单位(esu)缩小了 $\sqrt{4\pi}$ 倍, 相应地一个具体电荷如  $e$  的数值便要增大到原来(A. 11)式中的 $\sqrt{4\pi}$ 倍, 因此精细结构常数  $\alpha$  在[RGUS]中表示为

$$\alpha = e^2/4\pi \hbar c = (137.035\ 989\ 5)^{-1} \quad (\text{A. 16})$$

与此相应, 电场强度  $E$  或磁感应强度  $B$  的单位比原来[GUS]单位增大了 $\sqrt{4\pi}$ 倍, 具体数值上则比原来的缩小了 $\sqrt{4\pi}$ 倍. 因此真空中电(磁)场能量密度, 代替(A. 3)式, 变为

$$u_e = \frac{1}{2}E^2, \quad u_m = \frac{1}{2}B^2 \quad (\text{A. 17})$$

即比[GUS]公式少了一个因子( $1/4\pi$ ), 这是采用[RGUS]的优点之一, 它在形式上也更接近于[IUS][见(A. 8)式]. 不过根据我们的经验, 在目前文献中各种单位制并存且混合使用的情况下, 引进[RGUS]更容易引起混淆, 似乎利少弊多, 因此本书不采用[RGUS], 而始终采用[GUS].

## 参 考 文 献

- [1] 蔡圣善, 朱耘. 经典电动力学. 上海: 复旦大学出版社, 1985  
 [2] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics* (3rd Ed.). John Wiley & Sons Inc., 1999

## 习题答案、提示或附注

1.3  $\langle T \rangle \rightarrow \frac{1}{\lambda^2} \langle T \rangle$ ,  $\langle V \rangle \rightarrow \langle V(\lambda r) \rangle$ ,  $\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle H(\lambda) \rangle = 0$ ,  $\lambda = 1$ .

注: Virial 定理也可以由考虑  $\frac{d}{dt} \langle \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \rangle = 0$  而证明之.

1.5 (2)  $\langle (\Delta p_z)^2 \rangle \langle (\Delta z)^2 \rangle = \frac{1}{3} \hbar^2 > \frac{1}{4} \hbar^2$ .

1.6 (2) 群速度  $v_g$  永远等于粒子速度  $v$ , 而相速度  $v_p$  却分别为  $v/2$ ,  $v/2 + mc^2/p$  和  $c^2/v > c$ , 可见  $v_p$  不是一个直接可观察量.

1.7 (3)  $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta k)^2 \rangle = \frac{1}{4} \left[ 1 + \frac{\hbar^2 t^2 \sigma^2}{16m^2} (3 + \sqrt{\pi}) \right]$ .

1.8  $\psi_\alpha(x, t) = \langle x | \alpha(t) \rangle = \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2} |\alpha|^2\right) \exp\left(\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)$   
 $\times \exp\left\{-\frac{1}{2} \left[ |\alpha| \exp(-i\omega t) - \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \right]^2\right\}$   
 $|\psi_\alpha(x, t)|^2 = \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/2} \exp\left[-2 \left( |\alpha| \cos\omega t - \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x \right)^2\right]$

此波函数最早由薛定谔在 1926 年导出.

1.9  $\Delta E_0^{(1)} = \langle 0 | H' | 0 \rangle = 0$ ,  $\Delta E_0^{(2)} = \langle 0 | H'' | 0 \rangle = 3\gamma \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2$ ,

$\Delta E_0^{(2)} = \sum_{n>0}' \frac{|\langle n | H' | 0 \rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_n^{(0)}} = -\beta \left( \frac{11}{8} \right) \left( \frac{\hbar}{m\omega} \right)^3 \frac{1}{\hbar\omega}$ .

1.10 比较(1.6.20)式, 其差别明显可见, 并注意  $\hat{E}_\pm$  不是么正的但却是“单边么正”的. 然而相干态  $|\alpha\rangle$  [ $|\alpha|^2 = N$ , 记  $\alpha = N^{1/2} \exp(i\phi)$ ] 的相位特性相当复杂. 当  $N \gg 1$  时,  $\langle \hat{C} \rangle \sim \cos\phi$ ,  $\langle \hat{S} \rangle \sim \sin\phi$ ,  $\langle (\Delta \hat{C})^2 \rangle \sim \sin^2\phi/4N$ ,  $\langle (\Delta \hat{S})^2 \rangle \sim \cos^2\phi/4N$ , 不确定关系中的等号才成立. 反之, 在相干态的“量子极限” ( $N \ll 1$ ,  $|\alpha\rangle \approx |0\rangle$ ) 下, 因  $\langle \hat{C} \rangle \sim N^{1/2} \cos\phi$ ,  $\langle \hat{S} \rangle \sim N^{1/2} \sin\phi$ ,  $\langle \hat{C}^2 \rangle \sim 1/4$ ,  $\langle \hat{S}^2 \rangle \sim 1/4$ , 我们只能得到不等号 (参见文献[9a]).

2.1 (1)  $\sigma_{sc}(\theta) = \frac{m^2 \alpha^2 \pi^2}{4 \hbar^4 k^2 \sin^2 \theta/2}$ ; (2)  $\sigma_x(\theta) = \frac{\pi^2 m^2 V_0^2}{4 \hbar^4 b^3} \exp\left[-2k^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)/b\right]$ ;

(3)  $\sigma_{sc}(\theta) = \frac{16m^2 V_0^2}{\hbar^4} \frac{a^6}{[1 + 4k^2 a^2 \sin^2(\theta/2)]^2}$ .

2.2  $\sigma_x^{(l=0)} = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = 4\pi/k^2$  (见(2.3.33)式).

2.3  $\sigma_x(\theta, \phi) = \frac{m^2 V_0^2 a^6}{2\pi^2 \hbar^4} [1 + \cos(2ka \sin\theta \cos\phi)]$ .

2.4 (1), (2) 从条件  $u_l(kr) |_{r=R} = R[A_l j_l(kR) + B_l n_l(kR)] = 0$  来确定相移  $\delta_l(k)$ ;

(3) 在 高能极限下, 刚球模型与黑核模型有同样的  $\text{Im}f(0)$ .

2.6 (1) 相移  $\delta_0$  由下式决定:

$$k \cot(kb + \delta_0) = k \cot kb - \frac{2mV_0 b}{\hbar^2},$$

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{3mV_0 b} + \frac{2}{3}b, \quad \frac{1}{a} = -\frac{\hbar^2}{2mV_0 b^3} + \frac{1}{b};$$

(2) 结合能  $B = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$  由下式决定:

$$\coth Kb = \frac{2mV_0 b}{\hbar^2 K} - 1, \quad V_0^{\min} = \frac{\hbar^2}{2mb^2}.$$

(3)  $V_0 < V_0^{\min}$ ,  $a < 0$ ,  $\delta_0 = 0$ , 无束缚态;

$V_0 = V_0^{\min}$ ,  $a \rightarrow \infty$ ,  $\delta_0 = \pi/2$ , 有一半束缚态;

$V_0 > V_0^{\min}$ ,  $a > 0$ ,  $\delta_0 = \pi$ , 有一束缚态.

$$\delta_x = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} 4\pi a^2 = \frac{4\pi b^2}{\left(1 - \frac{\hbar^2}{2mV_0 b^2}\right)^2} \xrightarrow{V_0 \rightarrow \infty} 4\pi b^2.$$

2.7 (2)  $\cot \delta_0 = k/\lambda$ ,  $\sigma_x = \frac{4\pi}{k^2} \frac{\lambda^2}{\lambda^2 + k^2}$ ;

(3)  $a = \infty$ ,  $r_0 = 2/\lambda$ , 永远有一个  $E = 0$  的半束缚态.

2.8 这不是一个微扰问题, 请用在相互作用图景中的演化算符  $U_I(t, 0)$ , 才能得出如下结果:

$$|a_n|_{t \rightarrow \infty}^2 = |\langle n | U_I(\infty, 0) | 0 \rangle|^2 = \frac{1}{n!} e^{-\xi} \xi^n, \quad \xi = \frac{1}{2} \frac{e^2 \epsilon_0^2}{m\omega \hbar (\omega^2 + 1/\tau^2)}$$

2.9 (1)  $\omega_{\min} = \frac{1}{\hbar} \left( \frac{1}{2} \frac{e^2}{a} \right) = \frac{1}{\hbar} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^2 \left( \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \right) c^2 \right] = 3.288 \times 10^9 \text{ MHz};$

$$(2) \langle p | U_I(t, 0) | 1s \rangle = \langle \psi_p | z | \psi_{1s} \rangle \frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{1 - \exp[i(\tilde{\omega} - \omega)t]}{\tilde{\omega} - \omega} + \frac{1 - \exp[-i(\tilde{\omega} + \omega)t]}{\tilde{\omega} + \omega} \right\},$$

$$\tilde{\omega} = \frac{1}{\hbar} (E_p - E_{1s}), \quad \langle \psi_p | z | \psi_{1s} \rangle = -i \cos \theta \sqrt{\frac{4\pi}{V}} \left( \frac{1}{a} \right)^{3/2} \frac{12ka^5}{(1+k^2a^2)^3},$$

( $\theta$  是  $\mathbf{p}$  与  $\boldsymbol{\varepsilon}$  的夹角,  $V$  是  $|p\rangle$  态的归一化体积);

$$(3) \omega(1s \rightarrow p + d\mathbf{p}) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_p | z | \psi_{1s} \rangle|^2 \rho_f(E_{1s} + \hbar\omega),$$

$$\rho_f(E_p) = \frac{dN_p}{dE_p}, \quad dN_p = \frac{V p^2 2\pi \sin \theta d\theta dp}{(2\pi \hbar)^3},$$

$$\left[ \text{略去高频项并用数学公式 } \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \Omega t}{\pi t \Omega^2} = \delta(\Omega) \right].$$

2.10 这不是一个微扰问题, 请再用(2.6.38)式并注意:

$$\sum_{i=1}^2 |i\rangle \langle i| = 1, \quad \text{记 } \frac{1}{\hbar} \langle i | \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_0 | j \rangle = \Omega_{ij} (1 - \delta_{ij}), \quad (i, j = 1, 2),$$

$$|C_2(t)|^2 = |\langle 2 | U_I(t, 0) | 1 \rangle|^2$$

$$= \sin^2 \left[ \frac{2 |\Omega_{21}|}{(\omega_{21} - \omega)} \cdot \sin \left( \frac{\omega_{21} - \omega}{2} t \right) \right] \xrightarrow{\omega_{21} \rightarrow \omega} \sin^2 (|\Omega_{21}| t),$$

$$|C_1(t)|^2 = |\langle 1 | U_I(t, 0) | 1 \rangle|^2 = \cos^2 \left[ \frac{2 |\Omega_{21}|}{(\omega_{21} - \omega)} \sin \left( \frac{\omega_{21} - \omega}{2} t \right) \right]$$

$\xrightarrow{\omega_{21} \rightarrow \omega} \cos^2 (|\Omega_{21}| t)$ , 上述现象称为 Rabi 振荡,  $|\Omega_{21}| = \Omega$  叫做 Rabi 频率.

$$2.11 \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = \frac{2}{\hbar} (\text{Im} V) \rho < 0, \quad \text{Im} V < 0,$$

$$\rho = \psi^* \psi > 0, \quad \mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi).$$

3.4 虽然 Pauli 算符  $\boldsymbol{\sigma}$  (乘以  $\hbar/2$  后) 代表自旋 1/2 粒子的角动量,  $\boldsymbol{\sigma}$  本身在空间转动下却是个一阶 ( $\lambda=1$ ) 张量算符  $T_{\lambda\mu}$ . 实际上一个不可约张量算符  $T_{\lambda\mu}$  的阶数  $\lambda = 0, 1, 2, \dots$  都是整数.

3.6 质子与中子的相互作用既包含中心力成分, 也包含张量力成分:

$$V = V_c(r) + V_t(r) T_{pn}.$$

因此, 氘核的基态是  $s$  态与  $d$  态的混合. 实验上的证据是: 氘核总角动量  $I=1$ , 可是测得它有非零的内禀电四极矩, 如 (3.6.26) 式所示.

3.7 考虑通过共振的跃迁矩阵元并利用表 3.4.1 上的 CG 系数.

$$(1) \quad \sigma_a^{(3/2)} : \sigma_b^{(3/2)} : \sigma_c^{(3/2)} = 1 : 1/9 : 2/9;$$

$$(2) \quad \sigma_a^{(1/2)} : \sigma_b^{(1/2)} : \sigma_c^{(1/2)} = 0 : 4/9 : 2/9.$$

$$4.2 \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad \rho = \psi^* \psi, \quad \mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) - \frac{q}{mc} \rho \mathbf{A}.$$

4.3 考虑  $[[H, x], x]$  并利用  $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$ .

4.5 (1) 利用平面波表示和黄金规则;

(2) 对 3 种初态  $m = 0, \pm 1$  取平均后得寿命  $\tau = 1.595 \times 10^{-9}$  秒.

4.7 不要用长波近似  $e^{ik \cdot x} \sim 1$ .

4.8 (1) (4.5.14) 式给出一很小的  $\Gamma^{(1)} \approx 2 \times 10^{-9}$  / 秒;

(2)  $\Gamma^{(2)} \sim 3 \times 10^{-8}$  / 秒, 它仍然太小.

事实上, 从  $|2s\rangle \rightarrow |1s\rangle$  的二光子跃迁可以通过  $H^{(1)} = \frac{e}{mc} \cdot \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$  的二阶相互作用而实现, 如 (2.7.10) 式所示:

$$\Gamma^{(3)} = \omega_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_f \rho_f(E) |\langle 1s, \mathbf{k}, \mathbf{k}' | T | 2s \rangle|^2,$$

其中  $T = H^{(1)} + H^{(1)} \frac{1}{E - H_0} H^{(1)}$ , 第一项对二光子 ( $\mathbf{k}$  和  $\mathbf{k}'$ ) 发射没有贡献, 但第二项对  $\Gamma^{(3)}$  有非零贡献, 它比  $\Gamma^{(2)}$  大, 不过计算太复杂了, 这里只能从略, 最后  $2s$  态的寿命应如下地算出  $\tau = (\Gamma^{(1)} + \Gamma^{(2)} + \Gamma^{(3)})^{-1}$ , 才能与实验值  $\tau_{\text{exp}} \sim 1/8$  秒比较.

4.9 用黄金规则可得  $d\sigma_x = w_{fi} / (\rho / \nabla) = r_0^2 \sum_{\lambda} |\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'}|^2 d\Omega$ , 其中  $\boldsymbol{\varepsilon}$  与  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\lambda'}$  是入射光束与散射后光子的偏振矢量. Thomson 截面是光被电子弹性散射的非相对论极



限. 如电子被束缚在原子内部, 除  $H_{\text{int}}^{(2)}$  的一级贡献外, 还须考虑  $H_{\text{int}}^{(1)} = \frac{e}{mc} \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}$  的二级贡献, 这样才能得到 Rayleigh 散射截面  $\sigma \sim \omega^4$ . 在高能光子被自由电子散射的情形下, 光的波长会改变(变长), 叫做 Compton 散射, 它必须用相对论性的量子场论处理.

4.11 一条谱线的宽度正比于  $(\lambda_n + \lambda_m)$ , 它既依赖于初态, 也依赖于终态, 这是超出经典观念的. 量子力学的这一预言于 1930 年由 Weisskopf 和 Wigner 发现, 并被以后的一切实验所证实(参见文献[5]).

$$5.2 \quad (1) \quad Z = \frac{1}{2} \operatorname{csch}\left(\frac{\beta}{2} \hbar \omega\right), \quad U = \frac{1}{2} \hbar \omega \operatorname{coth}\left(\frac{\beta}{2} \hbar \omega\right), \quad C_V = k \left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right)^2 \operatorname{csch}^2\left(\frac{\beta}{2} \hbar \omega\right);$$

$$(2) \quad Z = \frac{1}{1 - \exp(-\beta \hbar \omega)}, \quad U = \frac{\hbar \omega}{\exp(\beta \hbar \omega) - 1}, \quad C_V = k \left(\frac{\beta \hbar \omega}{2}\right)^2 \operatorname{csch}^2\left(\frac{\beta}{2} \hbar \omega\right).$$

看来, Planck 黑体辐射理论的成功暗示我们用  $\tilde{H}$  比用  $H$  更好, 辐射的零点能一般是不可观察的(除特殊情况如(Casimir 效应外)). 此问题在量子统计中值得进一步研究.

$$5.3 \quad (1) \quad i\hbar \frac{\partial \rho^I}{\partial t} = [H_1^I(t), \rho^I(t)], \quad \rho^I(t) = \exp(iH_0 t / \hbar) \rho(t) \exp(-iH_0 t / \hbar),$$

$$H_1^I(t) = \exp(iH_0 t / \hbar) H_1 \exp(-iH_0 t / \hbar), \quad \rho^I(t) = \rho_0^I(t = -\infty) - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t [H_1^I(t'), \rho^I(t')] dt';$$

$$(2) \quad H_1^I(t) = \hbar \omega_0 [\sigma_x \cos(\omega - \omega_3)t + \sigma_y \sin(\omega - \omega_3)t].$$

$$5.4 \quad (1) \quad H = \frac{1}{2m} \sum_i \left( \mathbf{p}_i - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_i, t) \right)^2 + \sum_{i < j} U_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) + \sum_i q \Phi(\mathbf{r}_i, t);$$

$$(2) \quad \mathbf{v}_j = \dot{\mathbf{x}}_j = \frac{1}{m} \mathbf{p}_j - \frac{q}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}_j, t); \quad (3) \quad \mathbf{J} = \frac{1}{V} \sum_j q \dot{\mathbf{x}}_j.$$

5.5  $\langle \mathbf{J} \rangle_0 = \operatorname{Tr}(\rho_0 \mathbf{J}) = \frac{q}{mV} \langle \mathbf{P} \rangle_0 - \frac{q^2 N}{mcV} \langle \mathbf{A} \rangle_0$ , 如描写玻色子波函数  $\Psi(\mathbf{r}, t) = |\Psi| \exp[i\phi(\mathbf{r}, t)]$  在空间均匀, 即  $\nabla \phi = 0$ , 这意味着  $\langle \mathbf{P} \rangle_0 = 0$ , 于是有

$$\langle \mathbf{J} \rangle_0 = -\frac{q^2 n}{mc} \mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad \left( n = \frac{N}{V} \right)$$

这就是超导流体模型中的 London 方程 (§ 8.5A), 它表示超导电流可以靠磁场(而非电场)来维持.

$$5.6 \quad (2) \quad m(\ddot{\mathbf{x}}_j)_\mu = \frac{q}{m} \left( \mathbf{p}_j - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_j, t) \right)_\nu \frac{1}{c} B_{\lambda \epsilon \mu \nu} - q \nabla \Phi_\mu - \frac{q}{c} \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)_\mu.$$

$$5.7 \quad (1) \quad \ln \rho = -\ln 2 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} (P_z \sigma_z + P_+ \sigma_+ + P_- \sigma_-)^n;$$

$$(2) \quad \frac{dS}{dt} = -\frac{1}{2} k_B \ln \frac{1+P}{1-P} \left( \frac{dP}{dt} \right) > 0.$$

[参考文献: 倪光炯, 陈苏卿, 周谷声. 物理学报, 31, 585(1982)]

$$6.1 \quad \rho_i = \frac{1}{2} (1 + \mathbf{P}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}), \quad (i = 0, 1, 2)$$

$$\Phi_B(0, 1, 2) = \arctan\{\mathbf{P}_0 \cdot (\mathbf{P}_1 \times \mathbf{P}_2)[1 + \mathbf{P}_0 \cdot \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{P}_2 + \mathbf{P}_2 \cdot \mathbf{P}_0]^{-1}\}$$

$$\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{P}_j = \sin\theta_i \cdot \sin\theta_j \cos(\phi_i - \phi_j) + \cos\theta_i \cos\theta_j$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_0 \cdot (\mathbf{P}_1 \times \mathbf{P}_2) = & \cos\theta_0 \sin\theta_1 \sin\theta_2 \sin(\phi_2 - \phi_1) + \sin\theta_0 \cos\theta_1 \sin\theta_2 \sin(\phi_0 - \phi_2) \\ & + \sin\theta_0 \sin\theta_1 \cos\theta_2 \sin(\phi_1 - \phi_0) \end{aligned}$$

设  $\theta_0 = \phi_0 = 0$ ,  $\theta_1 = \theta$ ,  $\phi_1 = \phi$ ,  $\theta_2 = \theta + d\theta$ ,  $\phi_2 = \phi + d\phi$ ,

则  $\Phi_B(0, 1, 2) = \arctan\left(\sin^2\frac{\theta}{2}d\phi\right) \approx \frac{1}{2}(1 - \cos\theta)d\phi$ , (见文献[18]).

6.2 注意  $g_{\alpha\rho}g^{\rho\beta} = \delta_\alpha^\beta$

6.3 用(1.6.31)式并将  $|\psi(t)\rangle$  用相干态展开:

$$|\psi(t_0)\rangle = \frac{1}{\pi} \int d^2z |z(t_0)\rangle \langle z(t_0) | \psi(t_0)\rangle,$$

$$\langle \psi(t) | = \frac{1}{\pi} \int d^2z \langle \psi(t) | z(t)\rangle \langle z(t) |.$$

7.1 用  $\delta$  函数的积分表示:

$$\delta^D(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \frac{1}{(2\pi)^D} \int d^D\mathbf{k} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')], \text{ 并证明 } G \text{ 的 Fourier 变换 } \tilde{G} \text{ 永远等于}$$

$\frac{1}{k^2}$  而与维度  $D$  无关:

$$\tilde{G}(k) = \int G(\mathbf{x} | \mathbf{x}') \exp[-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')] d\mathbf{x}' = \frac{1}{k^2}$$

7.2 用数学公式(见文献[29]):

$$\int_0^{2\pi} \cos(z\cos\phi) d\phi = 2\pi J_0(z)$$

$$\int_0^\infty dk J_\nu(ak) \exp(-bk^2) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{b}} \exp\left(-\frac{a^2}{8b}\right) I_{\frac{\nu}{2}}\left(\frac{a^2}{8b}\right)$$

$$I_{\frac{1}{2}}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sinh z$$

7.3 (1)  $\hbar$ ,  $(-L\hbar)$ ; (2)  $\frac{1}{2}\hbar$ ,  $\left(-\frac{c p_x^2}{eB}\right)$ .

(括号中是相对应的  $\langle L_z \rangle$  值). 我们可进一步对  $\pi_x$ ,  $\pi_y$ ,  $\pi_x^2$ ,  $\pi_y^2$  和  $\frac{1}{2m}(\pi_x^2 + \pi_y^2)$  的平均值与正则动量  $\mathbf{p}$  相对应之量用两种规范的波函数进行比较, 所有这些结果将促进我们对量子力学解释的思考.

$$8.1 G_0(\mathbf{x}', t' | \mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_i \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[\mathbf{p}_i \cdot (\mathbf{x}' - \mathbf{x}) - E_i(t' - t)]\right\} \theta(t' - t)$$

这正是由(1.7.25)式定义的自由 Green 函数(传播子), 不过系数略有差别.

8.2 记  $H = H_0 + H_1$ , 而  $H_0 = \hbar\omega a^\dagger a$ , 则在相互作用图景下

$$H_1^I = -i\hbar\frac{\chi}{2} \cdot (a^2 - a^{\dagger 2}), \quad \frac{da}{dt} = \chi a^\dagger, \quad \frac{da^\dagger}{dt} = \chi a,$$

其解为  $a(t) = a(o)\cosh\chi t + a^\dagger(o)\sinh\chi t$

它具有(1.6.41)式所示之压缩变换生成元的形式,故可以期望由参数放大而产生的光是某种压缩态,进一步讨论请参看文献[17]. 如用 Heisenberg 图景,我们可得

$$a(t) = \exp(\chi t)\exp(-i\omega t), a^\dagger(t) = \exp(\chi t)\exp(i\omega t).$$

**8.3** 粒子由于吸(放)一能量为  $h\nu$  的光子,其动能将有起伏  $\Delta E \sim v\Delta p \sim \bar{v}\Delta p \sim h\nu \sim h\bar{v}$ , 其中  $\bar{v}$  可从(4.2.39)式估计(用公式(4.6.11),  $\zeta(5) \approx 1.037$ )而  $\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$ , 最后我们可得  $l_{\text{coh}} \approx \lambda_T$ .

**8.5**  $\langle \tilde{0} | a_{k\uparrow}^\dagger a_{k\downarrow}^\dagger | \tilde{0} \rangle = u_k v_k$ , 我们从图 8.5.1 可见 Cooper 对的凝聚确实发生在费米面的附近.

**8.6**  $\alpha_{k\uparrow}^\dagger | \tilde{0} \rangle = \prod_{p \neq k} (u_p + v_p a_{p\uparrow}^\dagger a_{-p\downarrow}^\dagger) a_{k\uparrow}^\dagger | 0 \rangle$ , 我们可以在图 8.5.1 上如下地理解一准粒子的激发:在能量为  $\epsilon_k$  处画出一不配对的完整直线,它嵌在原始粒子(被此直线切断了)配对凝聚的本底之中,由此可见,准粒子的质量在本质上是由于它与周围环境的相互作用而获得的.

**8.7** 经正则变换后,哈密顿量可以变为:

$$H = H_0 + H_1, H_0 = \frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{2}(a+b), \Delta = \sqrt{(a+b)^2 - 4c^2},$$

$$H_1 = E_\alpha \alpha^\dagger \alpha + E_\beta \beta^\dagger \beta, E_\alpha = \frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{2}(a-b), E_\beta = \frac{1}{2}\Delta + \frac{1}{2}(b-a).$$

**8.8** 我们不妨引入相对论性的正则变换如下:

$$a_p = u_p \alpha_p + v_p \beta_{-p}^\dagger, b_{-p} = u_p \beta_{-p} - v_p \alpha_p^\dagger$$

如在(8.5.19)式中那样,这里螺旋度的脚标已被略去.但请注意:现在变换是保持费米子数守恒的,这比(8.5.19)式的性质更好.其次,为防止出错,最好把动量  $p$  限制在半球内,  $p > 0$ , 并改写  $\sum_p \epsilon_p a_p^\dagger a_p = \sum_{p>0} \epsilon_p (a_p^\dagger a_p + a_{-p}^\dagger a_{-p})$

于是下面的计算几乎与 § 8.5B 中完全一样,不过那里的能隙  $\Delta$  现在表现为准粒子(在新真空  $|\tilde{0}\rangle$  中激发出来的有质量费米子)的静质量.(用附录 8A 的实时 Green 函数方法也得到同样结果).

在  $H$  中剩下  $\alpha^\dagger \beta^\dagger \beta \alpha$  等四算符项将会引起玻色型的激发,但上述模型过分简单,忽视了相位中一些微妙之处,不能得出正确的“介子”谱,特别是那个零质量的 Goldstone 玻色子(一个内禀宇称为负的  $0^-$  介子,它用赝标量场来描写),而它在一无质量模型中的真空相变后是应当出现的.一个基于量子场论的模型请见文献[16].

$$\mathbf{8.9} \quad \psi_1 = \sqrt{\rho_1} \exp(i\theta_1), \psi_2 = \sqrt{\rho_2} \exp(i\theta_2),$$

$$I \sim \dot{\rho}_2 \sim -\dot{\rho}_1 = \frac{2K}{\hbar} \sqrt{\rho_1 \rho_2} \sin(\theta_1 - \theta_2) \approx \frac{2K\rho_0}{\hbar} \sin(\theta_1 - \theta_2), (\dot{\theta}_1 - \dot{\theta}_2) = \frac{2}{\hbar} (\mu_2 - \mu_1) = \frac{2eV}{\hbar} \text{ (见文献[19])}.$$

**8.11** 用数学公式

$$\exp(iz\cos\phi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left[in\left(\phi + \frac{\pi}{2}\right)\right] J_n(z).$$

$$9.1 (1) \alpha^{(w)} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \beta^{(w)} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix};$$

(2)  $(\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}, t \rightarrow t)$ ,  $\phi_R(-\mathbf{x}, t) \rightarrow \phi_L(\mathbf{x}, t)$ ,  $\phi_L(-\mathbf{x}, t) \rightarrow \phi_R(\mathbf{x}, t)$ , 这是为 Dirac 型方程作出的空间反演的统一定义, 不管反演对称性是否能够保持, 见附录 9B.

$$(3) i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_R = c\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \phi_R, i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_L = -c\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \phi_L, (\mathbf{p} = -i\hbar \nabla)$$

$\phi_R$  的正(负)能解描写一右旋正粒子(左旋反粒子), 而  $\phi_L$  的正(负)能解描写左旋正粒子(右旋反粒子). 由此可见, 两个 Weyl 方程中的任何一个在空间反演下都不是不变的. 事实上, 对它们中任一个的宇称破坏都达到极大.

(4) 不. 例如, 一螺旋度  $\lambda = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} / |\mathbf{p}|) = \frac{1}{2}$  的粒子既有  $\phi_R$ , 也有  $\phi_L$ , 后者仍表现为一种“右旋”分量, 原因是  $\left| \frac{\phi_R}{\phi_L} \right| > 1$ . 特别地说, 当一个电子静止时, 你无法定义它的自旋究竟是左手的呢还是右手的? (参见 L. H. Ryder, *Quantum Field Theory*, Cambridge: Cambridge University Press, 1996) 因为此时  $\phi_R = \phi_L$  了.

9.2 (2) 方程  $(\gamma_\mu \partial_\mu - m)\psi_c(\mathbf{x}, t) = 0$  在本质上等价于 Dirac 方程(见文献[29]).

$$(3) P_R \psi = \frac{1}{2} (1 - \gamma_5) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \phi_R \\ \phi_R \end{pmatrix} = \psi_R,$$

$$P_L \psi = \frac{1}{2} (1 + \gamma_5) \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \phi_L \\ -\phi_L \end{pmatrix} = \psi_L,$$

$$\gamma_5 \psi_L = \psi_L, \gamma_5 \psi_R = -\psi_R, P_R + P_L = 1, P_R P_L = P_L P_R = 0,$$

$P_R^2 = P_R, P_L^2 = P_L$ , 故  $P_R$  与  $P_L$  是两个投影算符,  $P_R$  (或  $P_L$ ) 作用到  $\psi$  上将把  $\psi$  的右手(或左手)分量投影出来.

9.3 (1) 考虑总角动量守恒.

$$(2) a > b, \lambda = \frac{1}{2}, \psi_e(\mathbf{x}, t) \rightarrow \psi_e(-\mathbf{x}, -t) = \psi_e^+(\mathbf{x}, t) \sim$$

$$\begin{pmatrix} a \\ 0 \\ b \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(pz - Et)\right], \text{描写一个正电子, 其动量 } pz > 0, \text{能量 } E > 0, \text{但螺旋度}$$

$$\lambda = -\frac{1}{2}.$$

(3) 在空间-时间反演下, Weyl 方程  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_R = c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \phi_R$  变为  $\hat{E}_c \phi_R^c = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_R^c = -c\left(\frac{2}{\hbar}\right) \mathbf{S}_c \cdot \mathbf{p}_c \phi_R^c$ , 描写一个正能量的反粒子, 具有螺旋度  $\lambda = -\frac{1}{2}$ , 这是有意义的.

$$9.4 \hat{\psi}(\mathbf{x}, t) \rightarrow \hat{\psi}(-\mathbf{x}, -t) = \hat{\psi}_c(\mathbf{x}, t)$$

$$= \sum_{\mathbf{p}\lambda} \left\{ \hat{b}_{\mathbf{p}\lambda} v^{(\lambda)}(\mathbf{p}) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right] + \hat{d}_{\mathbf{p}\lambda}^{\dagger} u^{(\lambda)}(\mathbf{p}) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)\right] \right\}$$

它在本质上与  $\hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$  等价, 因两者只差一个表象变换:  $\hat{\psi}_c(\mathbf{x}, t) = (-\gamma_5) \hat{\psi}(\mathbf{x}, t)$ . 注意薛定谔场算符, 即(8.2.6)式, 在空间-时间反演下没有上述不变性.

9.5 (1) 利用完备性条件:

$$\sum_{\mathbf{p}\lambda} \{ u^{(\lambda)}(\mathbf{p}) u^{(\lambda)\dagger}(\mathbf{p}) \exp[i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')] + v^{(\lambda)}(\mathbf{p}) v^{(\lambda)\dagger}(\mathbf{p}) \exp[-i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}')] \} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}');$$

(2) 注意式中的负号, 并把  $S_F(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$  与(1.7.25)式及习题 8.1 比较;

(3)  $S_F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \rightarrow S_F(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) = (-\gamma_5) S_F(\mathbf{x} - \mathbf{x}') (-\gamma_5)$ .

$$9.6 (1) \rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\psi^* \dot{\psi} - \dot{\psi} \psi^*) = \varphi^* \varphi - \chi^* \chi$$

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{q}{mc} \mathbf{A} \psi^* \psi$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{2m} \left\{ \varphi^* \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \varphi - \varphi \left( \mathbf{p} + \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \varphi^* \right. \\ &\quad + \chi^* \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \chi - \chi \left( \mathbf{p} + \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \chi^* \\ &\quad + \chi^* \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \varphi - \varphi \left( \mathbf{p} + \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \chi^* \\ &\quad \left. + \varphi^* \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \chi - \chi \left( \mathbf{p} + \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \varphi^* \right\} \end{aligned}$$

(2) 不.

9.7 (1) 不.

(2)  $v_j = \dot{x}_j = \frac{1}{i\hbar} [x_j, \hat{H}] = \frac{1}{m} p_j (\tau_3 + i\tau_2)$  是非厄密的, 故不是一个可观察量.

$$9.8 (1) \dot{x}_i = \frac{1}{i\hbar} [x_i, \hat{H}] = c\alpha_i,$$

$$i\hbar \dot{\alpha}_i = [\alpha_i, \hat{H}] = 2\alpha_i \hat{H} - 2c \hat{p}_c;$$

(2) 在自由运动中,  $H$  与  $p$  都是常数, 故可对上述方程积分而得到  $\dot{x} = c^2 p H^{-1} + (\dot{x})_0 \exp(-2iHt/\hbar)$ , 再进一步

$$x = x_0 + c^2 p H^{-1} t + \frac{1}{2} i\hbar (\dot{x})_0 H^{-1} \exp(-2iHt/\hbar),$$

其中  $c^2 p H^{-1} = v$  是经典速度, 最后的复数项包含高频振荡, 振幅为  $\frac{1}{2} \hbar (\dot{x})_0 H^{-1} \sim$

$\frac{\hbar}{mc}$ , 文献中常称为“zitterbewegung(颤动)”, 它是不可观察的.

无论 K-G 方程或 Dirac 方程中  $\mathbf{x}$  的不可观察性意味着  $\mathbf{x}$  决不是一个点粒子的“位置坐标”. 假如希望测量一个相对论性粒子的“位置”, 我们就必须压缩它的波包, 结果它的“负能量成分”(即隐藏的反粒子场)便急剧地增大(见图 9.5.1 与图 9.5.3). 进一步的压缩甚至可以导致真实的正反粒子对产生. 实际上, 波函数中的  $\mathbf{x}$  与  $t$  都是

场的流动坐标. 因此, 量子场论(QFT)中发散的出现与 QM 中所谓“点粒子模型”毫无关系. 我们宁可说, QFT 中出现发散本质上乃是一种警告: 我们不可能通过微扰 QFT 去算出, 比如说, 一个粒子的质量(见附录 9A 与文献[47]).

9.9 (1) 一个么正且厄密的算符  $U$  能变换一个方程的表象(解释)(例如习题 9.1), 一个么正而非厄密的算符(如这里的  $U_S$ )却能改变方程的物理实质——从亚光速粒子的 Dirac 方程变为破坏宇称对称性的方程(9B.8).

$$(2) \text{ 方程 } i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^{(i)} = ic \hbar \boldsymbol{\alpha} \nabla \psi^{(i)} + \beta_s^{(i)} m_s \psi^{(i)}$$

$$\psi^{(i)} = \begin{pmatrix} \varphi^{(i)} \\ \chi^{(i)} \end{pmatrix}, \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \beta_s^{(i)} = \begin{pmatrix} iI & 0 \\ 0 & -iI \end{pmatrix}$$

将导致么正性的破坏, 这可从  $p \rightarrow 0$  的极限看出:

$\varphi^{(i)} \sim \exp(m_s t)$ ,  $\chi^{(i)} \sim \exp(-m_s t)$ , 这种解在方程(9B.6)中肯定被排除掉.

再说明两点:(a)方程(9B.8)妙在相对于  $\xi_D$  与  $\eta_D$  而言,  $\xi$  与  $\eta$  之间有额外的相位差  $(\frac{\pi}{2})$ . 我们再一次看到 QM 中的相位起了关键作用;(b)看来只要宇称破坏到极大, 费米子可能超光速(而玻色子则不能)(见文献[59]).

(3) 注意: 我们必须从连续性方程(9B.10)和(9B.11)出发,  $\rho$  和  $j$  的表示式与 Dirac 方程的很不一样, 一不小心便会出错(见文献[61]).

9.10 (1) 在某种意义上,  $\zeta$  可以看作是在  $x_1 - x_4 (= ict)$  平面上正交变换的“虚”转动角(因  $\sin(i\zeta) = i \sinh \zeta$ ,  $\cos(i\zeta) = \cosh \zeta$ ).

$$(2) \tanh(\zeta_1 \pm \zeta_2) = \frac{\tanh \zeta_1 \pm \tanh \zeta_2}{1 \pm \tanh \zeta_1 \tanh \zeta_2}$$

9.11 (1) 因与  $\psi$  共轭的正则动量定义为  $\Pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = -i\psi^\dagger$ ,  $\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma_4 = \psi^\dagger \beta$  应看

成与  $\psi$  独立, 故 Euler-Lagrange 方程  $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi} = 0$  立刻给出 Dirac 方程  $(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\psi = 0$ .

(2)  $\mathcal{L} \rightarrow \bar{\psi} \gamma_\mu \partial_\mu \psi + m \bar{\psi} e^{2i\alpha \gamma_5} \psi \neq \mathcal{L}$ , 由此可见质量项破坏了手征变换的不变性. 因为实际世界中夸克或核子都有质量, 看来(连续的)手征对称性一定是由于真空的某种相变而破缺了, 一个有关的征兆是存在量子数为  $0^-$  而质量很小的  $\pi$  介子, 它很像是连续对称性破缺后出现的 Goldstone 粒子(见习题 8.8).

$$9.12 (1) \psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \sim \exp\left[\frac{i}{\hbar}(px - Et)\right], \frac{\varphi}{\chi} = \sqrt{\frac{E+m}{E-m}} > 1, E > 0;$$

(2) 在(1+1)维 Dirac 方程中没有自旋自由度, 但  $\frac{\xi}{\eta} = \sqrt{\frac{E+p}{E-p}} > 1$ , 表示  $E > 0, p > 0$ , 而  $\frac{\xi}{\eta} < 1$  表示  $E > 0, p < 0$ . 由于上述性质, 对(1+1)维 Dirac 方程, 即使在一标量势场中(因而无 Klein 佯谬), 也很难找到有束缚态存在.

一个有趣的例子是 Hill\* 找到了在标量势  $g|x|$  中的束缚态,他用了表示  $\alpha = \tau_2$ ,  $\beta = \tau_1$ , 这可从我们的表示用变换  $\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \rightarrow \frac{-i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$  得到.

(3) 我们将得到一个超光速粒子的方程,其中空间反演对称性  $[x \rightarrow -x, \xi_s(-x, t) \rightarrow \eta_s(x, t), \eta_s(-x, t) \rightarrow \xi_s(x, t)]$  被破坏到极大. 因此方程描写的正反粒子都只沿正  $x$  轴运动而不能沿负  $x$  轴运动. 相反方向运动的情形会在另一个方程(含  $\alpha = -\tau_1$  代替  $\alpha = \tau_1$ )中出现.

$$10.1 \quad V(x) = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{(\delta\omega)^2 + (2\Omega \cos kx)^2}, \quad \cos\theta(x) = \frac{\delta\omega}{\sqrt{(\delta\omega)^2 + (2\Omega \cos kx)^2}},$$

$H^I$  意味着:对两个不同的内部态,原子的质心运动将感受到相反的势场且第二项有周期性,进一步讨论请见文献[53].

$$10.2 \quad \psi_{2m-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos[(2m-1)\pi x/2a], \quad (m = 1, 2, \dots) \\ (|x| \leq a) \\ \psi_{2n}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad (n = 1, 2, \dots)$$

计算矩阵元  $x_{mn} \equiv \langle \psi_{2m-1} | x | \psi_{2n} \rangle$ ,  $p_{mn} \equiv \langle \psi_{2m-1} | -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} | \psi_{2n} \rangle$  等后,利用第七章文献[29]第36页上(1.4.21)等公式,经冗长计算后可证明  $\langle 2n | [x, \hat{p}] | 2n' \rangle = i\hbar \delta_{m'}$ ,  $\langle 2m-1 | [x, \hat{p}] | 2m'-1 \rangle = i\hbar \delta_{m'}$ ,

[参见文献:倪光炯.光子学报,30(1),108(2001)].

\* *Am. J. Phys.*, **70**, 522(2002)

## 图书在版编目(CIP)数据

高等量子力学/倪光炯,陈苏卿著.—2版.—上海:复旦大学出版社,2004.1

ISBN 7-309-03836-3

I. 高… II. ①倪…②陈… III. 量子力学 IV. 0413.1

中国版本图书馆CIP数据核字(2003)第106027号

## 高等量子力学(第二版)

倪光炯 陈苏卿 著

---

出版发行 复旦大学出版社

上海市国权路579号 邮编200433

86-21-65118853(发行部) 86-21-65109143(邮购)

fupnet@fudanpress.com <http://www.fudanpress.com>

---

责任编辑 梁玲

装帧设计 马晓霞

总编辑 高若海

出品人 贺圣遂

---

印刷 上海肖华印务有限公司

开本 787×960 1/16

印张 31.75 插页 2

字数 535千

版次 2005年8月第二版第二次印刷

印数 3 101—5 200

---

书号 ISBN 7-309-03836-3/O·315

定价 42.00元

---

如有印装质量问题,请向复旦大学出版社发行部调换。

版权所有 侵权必究