arXiv:2304.04247v1 [quant-ph] 9 Apr 2023

量子力学课程讲义：选编章节

S. Levit 魏茨曼科学研究所凝聚态物理系，
以色列雷霍沃特
shimon.levit@weizmann.ac.il

2023年4月11日

摘要

这是我在魏茨曼科学研究所物理学课程中讲授的量子力学课程的扩展讲义，内容涵盖下文列出的主题。前四章已发布于此，具体内容详见下一页。其余章节计划在未来几个月内陆续添加。

1. 外电磁场中的运动。量子力学中的规范场。

2. 电磁场量子力学 3. 光子与物质的相互作用 4. Schr¨odinger 场的量子化（二次量子化）5. 开放系统。密度矩阵 6. 绝热理论。Berry 相位。
Born-Oppenheimer 近似 7. 多体系统的平均场方法——费米子与玻色子

目录

1 外电磁场中的运动。量子力学中的规范场 5

1.1 电磁势。哈密顿量.5 1.1.1 经典物理学中的电磁势.5 1.1.2 经典哈密顿量与运动方程.7 1.2 量子化.8 1.2.1 轨道部分.8 1.2.2 自旋磁矩.8 1.2.3 Schr¨odinger 方程.9 1.3 规范不变性.10 1.3.1 量子力学中的规范变换.10 1.3.2 规范对称性与规范不变性.11 1.3.3 规范原理——对称性决定相互作用.11 1.4 电流密度.13

1.4.1 轨道部分.13 1.4.2 自旋贡献.13 1.4.3 电流的对流部分、抗磁部分和自旋部分 15

1.5 均匀电场中的运动.15 1.5.1 静态规范.15 1.5.2 线性势——艾里函数.16 1.5.3 时间相关规范.181.5.4 均匀**E**场中的平移。规范场存在下的对称性.19 1.6 均匀磁场中的运动.20

1.6.1 经典运动。导引中心.20 1.6.2 朗道能级.21 1.6.3 朗道能级的简并与空间对称性.31

1.7 阿哈罗诺夫-玻姆效应.32

1.7.1 局域和非局域规范不变量.32 1.7.2 即使在轮廓 C 上及其附近 $\mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$ 不为零，量子力学也能“感知”到它 $\oint_C \mathbf{E} = \mathbf{B} = 0$.33 1.7.3 “规范消去”AB 磁通量。对其数值的周期性依赖 . . . 34 1.7.4 AB 磁通量示例.35

1.7.5 多连通区域。同伦.41 1.8 磁矩.42 1.8.1 g因子.42 1.8.2 磁场中的原子.43 1.8.3 塞曼效应.46 1.9 磁场中的时间反演。克拉默简并.47 1.10 外电磁场中的路径积分.49 1.11 狄拉克磁单极子.51 1.11.1 多值波函数。不可积相位.51 1.11.2 磁单极子.53 1.11.3 存在磁单极子时的角动量与旋转对称性.56 1.12 非阿贝尔规范场.57

2 量子 电磁场的量子力学 ield 64

2.1 简单系统第一部分——吉他弦的量子力学 . . . . . 64 2.1.1 经典弦.64 2.1.2 弦的量子描述.66 2.1.3 提示——振动正则模.69 2.1.4 作为一组解耦振子的弦.70 2.2 行波的量子化：闭弦.75 2.2.1 行波展开.76 2.2.2 行波的量子力学.80 2.3 电磁场的量子化.83 2.3.1 麦克斯韦方程的哈密顿形式.83 2.3.2 正则量子化.86 2.3.3 规范不变性.88

2.4 光子.92

2.4.1 场振子.92 2.4.2 光子动量.98 2.4.3 光的常见态.100 2.4.4 光子角动量和自旋.105 2.4.5 光子宇称和光子统计.107

2.5 附录.108

2.5.1 从驻波到行波变换的细节 108 2.5.2 相干态的细节.109 2.5.3 关于电磁场动量的更多内容.112 2.5.4 关于电磁场角动量的更多内容.113

3 光子-物质相互作用 116

3.1 相互作用哈密顿量.116 3.1.1 分离相互作用项.116 3.1.2 添加自旋和外场.1173.1.3 将辐射与物质自由度区分开来 118 3.1.4 所得洞见.119 3.2 光子的发射与吸收.122

3.2.1 辐射自发发射范式——离散物质能级与光子连续谱耦合.123 3.2.2 光子发射率.129 3.2.3 长波近似.133 3.2.4 电偶极发射.134 3.2.5 角动量和宇称选择定则.136 3.2.6 “禁戒”（高阶多极）跃迁.145 3.2.7 受激光子发射.155 3.2.8 光子吸收.156

3.3 附录.157
3.3.1 离散能级耦合到连续谱.157 ˆ 3.3.2 哈密顿量的 H_{I3} 部分和宇称变换 . 160

4 薛定谔场的量子化——二次量子化 162
4.1 引言.162 4.2 自由薛定谔场。量子化.163 4.2.1 分离实部和虚部.163 4.2.2 回到复值场.165 4.2.3 自由薛定谔场的哈密顿量.166 4.2.4 本征态。场量子是自由非相对论粒子.166 4.2.5 动量和角动量.169 4.3 加入外势.172 4.3.1 哈密顿量.172 4.3.2 本征态。场量子是外势中的粒子.173 4.3.3 使用场算符.177 4.4 波函数。算符。与一次量子化描述的比较179 4.4.1 二次量子化中的波函数.179 4.4.2 二次量子化中的算符.182 4.4.3 通过对易子进行二次量子化描述全同玻色子.186 4.4.4 自相互作用薛定谔场.187 4.5 费米子——二次量子化的另一种选择.190 4.5.1 通过反对易子进行量子化.190 4.5.2 外势中的费米子.191 4.5.3 与一次量子化的关系.197 4.5.4 相互作用费米子.199 4.6 福克空间.201 4.7 附录.202 4.7.1 玻色子——回顾 $\hat{a}$’s 和 $\hat{a}^{+}$’s 的性质.202 4.7.2 玻色子——波函数归一化.204 4.7.3 玻色子——计算 $K_{op}|\Phi\rangle$ .205 4.7.4 费米子——计算 $F_{op}|\Phi\rangle$ .206

第1章

外电磁场中的运动。量子力学中的规范场

电磁势 $\mathbf{A}(\mathbf{r}\ t)$ 和 $A_0(\mathbf{r}\ t)$ 在经典物理学中作为辅助量出现，引入它们是为了简化麦克斯韦方程的形式及其解，参见参考文献 [8] 第10章。它们并非唯一定义，而且可以通过一种名称奇特的“规范”变换加以改变，却不影响任何物理结果；这似乎更像是一种令人恼火的麻烦，而非自然界的基本对称性。

当尝试进行量子力学描述时，这种情况会发生剧烈变化。在存在电磁场的情况下，如果不实质性地使用电磁势，我们就不知道如何构建这种描述。此外，对规范变换的不变性成为我们世界的一种深刻对称性，它位于所有已知相互作用的原点。因此，承载这些相互作用的场被称为 规范场。

外电磁场中的量子力学运动问题，提供了最简单的情境，让我们得以遇见由规范场与量子力学共生所产生的一些奇妙而美丽的现象。

注：第1至8节中，我已将单位从 CGS制改为国际单位制。其余部分使用 CGS制。

1.1 电磁势与哈密顿量

1.1.1 经典物理中的电磁势

现在，让我们先简要回顾一下电磁势是如何引入的。经-典电磁场由两个矢量场 $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ 和 **磁场**$(\mathbf{r},t)$ 描述。在本章中，这些场将被视为外部场，即由源产生（电-

电荷和电流）在动力学上并不属于所考虑的物理系统的一部分，也不受其影响。这意味着系统对场源的反作用可以忽略。尽管在这种情况下，**E** 和**磁场** 应被视为由场源的电荷和电流分布 ρ**(r** t**)** 和 **j(r** t**)** 通过

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad , \quad \nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

它们不能被视为完全任意。事实上，无论ρ 和**j** 的构型如何，这些场都必须满足齐次麦克斯韦方程组

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad , \quad \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \tag{1.1}$$

在时空中的每一点。为了使这些方程自动得到满足，引入熟悉的矢量势和标势 **A(r,t)**和 A_0**(r,t)**[1]。这是通过注意到上面的第一个方程意味着**磁场** 必须是矢量场 **A(r** t**)** 的旋度来实现的。将此代入第二个方程得到

$$\nabla \times (\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}) = 0$$

将组合 $\mathbf{E} + \partial \mathbf{A}/\partial t$ 限定为标量场的梯度。因此，人们有

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla A_0 \, , \\ \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A} \end{aligned} \tag{1.2}$$

不同于场强**E** 和**磁场**，电磁势可以被视为不受限制，因此通过恰当地选择外部电荷和电流分布，可以实现任意的 **A(r** t**)** 和 A_0**(r** t**)**。

然而，电磁势的使用带来了另一个问题。它们并不唯一，因为规范变换

$$\begin{aligned} \mathbf{A}'(\mathbf{r},\mathrm{t}) &= \mathbf{A}(\mathbf{r},\mathrm{t}) + \nabla\chi(\mathbf{r},\mathrm{t}) \\ A_0'(\mathbf{r},\mathrm{t}) &= A_0(\mathbf{r},\mathrm{t}) - \frac{\partial \chi(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial t} \end{aligned} \tag{1.3}$$

加上任意函数 χ（**r,t**）后，**E** 和**B** 保持不变。如上文所述，这种不变性称为规范不变性，在量子力学系统中具有深远的影响，下面将对此进行详细讨论。目前我们只需注意到，由于这种不变性，四个函数**A** 和 A_0 中只有三个彼此独立。一般而言，可以通过适当选择规范变换消去这四个函数中的一个组合。例如，选择

$$\chi(\mathbf{r},\mathrm{t}) = \int_{t_0}^{t} A_0(\mathbf{r}, t')\, dt'$$

（借助任意的 t_0）消去 A_0 ，使 **A(r,t)** 成为电磁场唯一独立的自由度。

[1]尽管我们对 A_0 使用“相对论性”记号，但我们使用“非相对论性”术语，并称其为 a[s]标势

1.1.2 经典哈密顿量与运动方程

给定电磁场中，电荷为 q 、质量为 m 的粒子的经典非相对论运动方程，可通过在牛顿定律中使用洛伦兹力得到

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = q\mathbf{E} + q\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt}\times\mathbf{B}\right) . \tag{1.4}$$

为了获得量子力学描述，可以采用正则量子化或路径积分量子化的方法。我们将从前者开始。首先确定该问题的经典正则变量和经典哈密顿函数。

上面的方程是用坐标$\mathbf{r}(t)$和速度$\mathbf{v}(t) = d\mathbf{r}/dt$ 表示的，因此最方便的做法是先确定系统的拉格朗日量。它是

$$L(\mathbf{r},\mathbf{v},t) = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + q\mathbf{A}\cdot\mathbf{v} - qA_0(\mathbf{r}) . \tag{1.5}$$

事实上，有

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\frac{d\mathbf{v}}{dt} + q\frac{d\mathbf{A}}{dt} = m\frac{d\mathbf{v}}{dt} + q\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial r_j}\frac{dr_j}{dt} + q\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

and

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = q\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{v}) - q\frac{\partial A_0}{\partial \mathbf{r}}$$

用分量表示

$$m\frac{dv_i}{dt} + q\frac{\partial A_i}{\partial r_j}v_j + q\frac{\partial A_i}{\partial t} = q\frac{\partial A_j}{\partial r_i}v_j - q\frac{\partial A_0}{\partial r_i}$$

所以有

$$m\frac{dv_i}{dt} = q\left(-\frac{\partial A_i}{\partial t} - \frac{\partial A_0}{\partial r_i}\right) + q\left(\frac{\partial A_j}{\partial r_i} - \frac{\partial A_i}{\partial r_j}\right)v_j$$

这就是牛顿方程（1.4）。事实上，回顾式（1.2）可知，第一项为 $q\mathbf{E}$，而最后一项可以变形为

$$\epsilon_{ijk}v_jB_k = (\mathbf{v}\times\mathbf{B})_i$$

其中我们使用反对称符号 ϵ_{ijk}[1] 来表示向量积，例如

$$(\mathbf{C}\times\mathbf{D})_i = \epsilon_{ijk}C_jD_k \ , \ C_iD_j - C_jD_i = \epsilon_{ijk}(\mathbf{C}\times\mathbf{D})_k .$$

这两个等式通过一个有用的恒等式相关联

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ij'k'} = \delta_{jj'}\delta_{kk'} - \delta_{jk'}\delta_{j'k} .$$

上述计算表明，正则动量是

$$\mathbf{p} = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\frac{d\mathbf{r}}{dt} + q\mathbf{A}(\mathbf{r}) . \tag{1.6}$$

[1]列维-奇维塔符号 ϵ_{ijk} 定义为 $\epsilon_{123} = 1$，并具有任意指标互换时的反对称性，$\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik} = -\epsilon_{ikj}$，等等。$\epsilon_{ijk}$ 在循环置换 $\epsilon_{ijk} = \epsilon_{kij} = ...$下保持不变。.

这或许表达了电磁场中运动最不寻常的方面——即 $\mathbf{p} \neq m\mathbf{v}$这一事实。在文献中，人们常会遇到“动量”一词，指的是熟悉的 $m\mathbf{v}$。

将 $\mathbf{v(p,r)} = (\mathbf{p} - q\mathbf{A(r)})/m$ 表示为并使用

$$H = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L$$

利用上述 **v(p,r)**，我们得到哈密顿函数

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r},\mathrm{t})\right)^2 + qA_0(\mathbf{r},\mathrm{t}) \ , \tag{1.7}$$

不难（而且这并不令人意外）证明，对于这个 H**(p,r)**，运动方程 **(1.4)** 等价于两个哈密顿方程。

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \quad , \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}$$

1.2 量子化

1.2.1 轨道部分

在确定了 **H** 的形式之后，我们遵循正则量子化程序，考虑薛定谔方程及其哈密顿算符。该算符通过将 H 中的 **r** 和 **p** 替换为算符 $\mathbf{r}^{op} =\mathbf{r}$ 和 $\mathbf{p}_{op} = -i\hbar\nabla$ 得到，

$$H_{op} = \frac{1}{2m} \left[-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\right]^2 + qA_0(\mathbf{r}, t) \ . \tag{1.8}$$

1.2.2 自旋磁矩

实验结果表明，这个哈密顿量只能描述不带自旋的粒子。存在自旋自由度时，必须对其进行修正。这并不令人意外，因为即使在经典物理学中，自旋带电粒子的能量除了轨道运动的贡献外，还会多出一项。这一贡献源于它与磁场 $\mathbf{B}$ 的相互作用；该磁场由自旋电荷产生的局域电流分布 **j(r)** 所形成。对于“点状”粒子，也就是说，其尺寸远小于**B(r)** 发生变化的尺度的粒子，相应的能量为

$$E_{\text{spinning charge}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})$$

其中，$\boldsymbol{\mu}$ 是该电流的磁矩，参见参考文献 [8],第 5 章

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2} \int d^3r \ \mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r}) \ .$$

对于复合粒子，总电流是对各内部组分的求和

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \sum_a q_a \mathbf{v}_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)$$

每个组分都有自己的动力学，因此，通常来说，计算 $\boldsymbol{\mu}$ 并非易事。不过，如果所有组分的荷质比都相同 $q_1/m_1 = q_2/m_2 = ... = q/m$ ，则磁矩可以写成

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2}\sum_a q_a(\mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a) = \frac{q}{2m}\sum_a \mathbf{r}_a \times m_a\mathbf{v}_a = \frac{q}{2m}\mathbf{L}\ . \tag{1.9}$$

实验数据和理论考量（参见下文第1.8节）表明，对于电子等基本粒子， $\boldsymbol{\mu}$ 与系统角动量之间的这种经典线性关系，同样适用于磁矩$\boldsymbol{\mu}_{op}$ 与自旋$\mathbf{s}_{op}$所对应的量子力学算符。不过，比例系数通常并不等于经典值。为强调这一差异，通常（对于带电粒子）将算符$\boldsymbol{\mu}$ 与$\mathbf{s}$ 之间的关系写作

$$\boldsymbol{\mu}_{op} = g\ \frac{q}{2m}\ \mathbf{s}_{op} \tag{1.10}$$

其中， q 为粒子电荷， g 为称为旋磁因子（简称g因子）的无量纲系数。用于确定 g 的理论方法及其应用示例将在第1.8节中讨论。

1.2.3 薛定谔方程

将$-\boldsymbol{\mu}_{op}\cdot$**磁场** 项加入哈密顿算符（1.8），即可将外部电磁场中具有自旋的基本粒子的哈密顿量写作

$$H_{op} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}\right)^2 + qA_0 - g\frac{q}{2m}\ \ \mathbf{s}_{op}\cdot\mathbf{B}\ . \tag{1.11}$$

以及相应的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}\right)^2 + qA_0 - g\frac{q}{2m}\ \ \mathbf{s}_{op}\cdot\mathbf{B}\right]\psi \tag{1.12}$$

其中

$$\psi = \psi(\mathbf{r},\sigma;t)$$

是空间和自旋变量$\mathbf{r}$ 以及 σ 的函数。

在展开该方程中的平方时，不应忘记，算符$\mathbf{p}_{op} = -i\hbar\nabla$ 通常与作为坐标函数的矢量 $\mathbf{A}$ 不对易。由于$\mathbf{p}_{op}\cdot\mathbf{A} - \mathbf{A}\cdot\mathbf{p}_{op} = -i\hbar\nabla\cdot\mathbf{A}$，可以写成

$$\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{i\hbar q}{2m}(\nabla\cdot\mathbf{A} + 2\mathbf{A}\cdot\nabla) + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}^2\ .$$

算符$\mathbf{p}_{op}$ 和$\mathbf{A}$ 在 $\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$时对易。例如，对于$\mathbf{A} =$**(磁场** $\times\ \mathbf{r})/2$ ，这是在均匀磁场[2]的特定情况下$\mathbf{A}$ 的一种可能选择。

[2]正在验证

$$\begin{aligned}(\nabla\times\mathbf{A})_i &= \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}\nabla_j\epsilon_{klm}B_l x_m = \frac{1}{2}(\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl})\delta_{jm}B_l = \frac{1}{2}(3B_i - B_i) = B_i\\ \nabla\cdot\mathbf{A} &= \nabla_i A_i = \nabla_i\epsilon_{ijk}B_j x_k = \epsilon_{ijk}B_j\delta_{ik} = 0\end{aligned} \tag{1.13}$$

在以下各节中，我们将研究方程（1.12）的各种性质，并给出在电场和磁场取某些特定简单形式时的解。

1.3 规范不变性

1.3.1 量子力学中的规范变换

电磁场通过一组截然不同的变量进入经典和量子方程 (1.4) 与 (1.12)。经典方程取决于场的可测物理变量 $\mathbf{E}$ 和$\mathbf{B}$ ，而在薛¨定谔方程中，场通过未被唯一确定且看似辅助性的对象 $\mathbf{A}$ 和 A_0进入。这并非偶然。目前不存在一种不明确使用电磁势的量子力学表述。薛¨定谔图像和海森堡图像需要哈密顿量，而路径积分量子化使用拉格朗日量（参见下文第1.10节），并且这两个对象都无法在没有$\mathbf{A}$ 和 A_0的情况下写出。由于势并未被唯一确定，并且可以通过规范变换加以改变，因此必须处理这样一个问题：在这种情况下，如何获得明确无歧义的物理结果。

与经典力学中规范变换不改变运动方程不同，薛定谔方程 (1.12) 及其解 ψ(r,t) 都会发生非平凡变换[3]。不难找出 ψ(r,t) 的变换与势的变换之间的关系。为此，我们注意到 $\mathbf{A}$ 和 A_0 只以如下组合形式出现在方程中

$$(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}) \quad \text{and} \quad (i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - qA_0)\,.$$

因此，若 ψ(r,t) 是在特定的 $\mathbf{A}$ 和 A_0 选择下的一个解，那么

$$\psi(\mathbf{r},\mathrm{t}) = \exp\left[-i\frac{q}{\hbar}\chi(\mathbf{r},\mathrm{t})\right]\psi\,'(\mathbf{r},\mathrm{t}) \equiv S(\mathbf{r},\mathrm{t})\psi\,'(\mathbf{r},\mathrm{t}) \tag{1.14}$$

满足

$$\begin{aligned} -i\hbar\mathbf{D}\psi &\equiv (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A})\,\psi = S(\mathbf{r},\mathrm{t})\left(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}'\right)\psi' = -i\hbar S(\mathbf{r},\mathrm{t})\mathbf{D}'\psi'\,, \\ i\hbar D_0\psi &\equiv \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - qA_0\right)\psi = S(\mathbf{r},\mathrm{t})\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - qA_0'\right)\psi\,' = i\hbar S(\mathbf{r},\mathrm{t})D_0'\psi' \end{aligned} \tag{1.15}$$

因此，它满足薛定谔方程，其势为变换后的势 (1.3)（请注意，上述表达式右侧带撇号的 $\mathbf{D}'$ 和 D_0'）。

我们看到，经典的规范变换概念在量子力学中经历了一般化。现在，不仅描述电磁场的势，而且描述物质粒子的波函数也必须根据规则 (1.3) 和(1.14) 同时发生变化。这种变化是局部的，即它在空间和时间的不同点上有所不同。人们常常通过称其为

[3]在本节及后续许多章节中，ψ(**r** σ; t) 对自旋变量 σ 的依赖不会引起关注，为简洁起见将省略。

由方程(1.3)、(1.14) 给出的变换称为局域规范变换，以区别于全局变换，后者中波函数乘以一个恒定的相位因子。

可以看出，（1.15）中定义的组合 $\mathbf{D}\psi$ 和 $D_0\psi$ 在局域规范变换下以一种特别简单的方式变换——也就是说，其变换方式仿佛是全局变换。这些组合在含有规范场的理论中称为规范协变导数。在动力学方程中，通过将普通导数 $\partial/\partial t$ 和 $\partial/\partial\mathbf{r}$ 替换为规范协变组合D_0,$\mathbf{D}$ 来引入电磁场的方法，称为最小耦合。

1.3.2 规范对称性与规范不变性

现在我们可以提出这样一个问题：经典规范不变性在量子力学中是否也成立？也就是说，任何测量的结果是否在规范变换下保持不变，而这些规范变换现在还包括波函数的局域变换（1.14）。经验证据表明，答案是肯定的。此外，显然，这种不变性称为局域规范不变性 ，是存在规范场时量子力学描述的一种深刻的基本对称性。

需要注意的是，这种对称性并不意味着波函数必须保持不变。与其他基本对称性（例如相对于平移和旋转的不变性）一样，规范对称性意味着波函数按照式（1.14）所给出的特定方式变换，也就是说，它们构成相应变换群的一个表示。

然而，相似之处也仅止于此。与其他对称性不同，规范对称性要求可观测量不得受规范变换的影响，因此必须是“规范标量”，也就是说，它们依赖于 ψ,$\mathbf{A}$ 和 A_0 的规范不变组合。我们从未观测到“规范矢量”、“规范张量”等。只有在讨论电磁场的完整量子动力学及其与物质的耦合时，才能理解这种差异的根源。

我们以此结束本节：量子力学方程中显式出现电磁势，使规范不变性成为一种极为微妙的对称性。它的后果及推广是现代物理学的重要方面。本章将特别着重阐述一些相关的物理思想和结果。

1.3.3 规范原理——对称性决定相互作用

在上一节中，我们从已知的势的变换性质出发，然后根据它们在薛定谔方程中的特殊出现方式——即以$\mathbf{D}$ 和 D_0的组合形式出现——推导出波函数所需的变换性质，以保持薛定谔方程的形式不变。

I现在设想我们以如下方式反向推导。让我们从以下内容开始。

考虑自由薛定谔方程

$$i\hbar\partial_t\psi = -\hbar^2\nabla^2\psi/2m \ .$$

这个方程显然在全局规范变换下保持不变，也就是说，在变换式 (1.14) 中， χ 为与 (r,t) 无关的常数。这种全局规范不变性是薛定谔方程的一项基本特征。它的一个显著结果是积分 $\int d\mathbf{r}\ \psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$ 守恒。这个积分表示总概率；乘以 e 后，则表示总电荷。其守恒性与全局规范不变性之间的关系，直观上并不显然，但将诺特定理的论证应用于薛定谔场即可严格推导出来。

现在让我们看看，如果要求自然规律不仅在全局规范变换下，而且在局域规范变换下也保持不变，会发生什么；也就是说，在方程 (1.14) 中，相位 χ 依赖于 (r,t)。显然，自由薛定谔方程无法满足这一要求，因为它的导数会作用于局域相位，从而产生带有 $\nabla\chi$ 和 $\partial\chi/\partial t$ 的额外项。不过，结合上一节的认识，我们可以写出一个更一般的薛定谔方程，使其具有局域规范不变性。

为了抵消导数 $\nabla\chi$ 和 $\partial\chi/\partial t$ 并将它们从变换后的薛定谔方程中消去，我们必须

(a)“假设”存在一个由势**A** 和 A_0 描述的场，
(b)将方程中的普通导数 $\partial/\partial t$ 和 ∇ 替换为规范协变组合 D_0、**D**和

(c) 要求势同时按照式（1.3）变换，而 wi th t波函数的变换 (1.14)。

因此，对局域规范不变性的要求转化为一个强大的启发式原理——规范原理；如果我们事先不知道电磁场的存在，它将引导我们“发现”电磁场的存在，以及它必须在薛¨定谔方程中出现的方式。

当然，通过这种程序无法推导出式 (1.12) 中最后一个与自旋有关的项，因此应当单独加以论证。当考虑<style id='1'>基本粒子的完全相对论性理论时，关于自旋与电磁场相互作用的这一单独讨论便不再需要，参见参考文献 [2] 的第 8.1 节或参考文献 [3] 的第 3 章。此外可以证明，整个麦克斯韦电动力学与规范原理完全一致，只需补充时间—空间平移不变性和洛伦兹不变性的非常一般的要求。

事实证明，所有其他已知相互作用（即弱相互作用、强相互作用和引力相互作用）的场，也都以类似的方式符合规范原理。也就是说，对于每一种已知相互作用，都存在一个非相互作用理论的全局对称性；引入相互作用后，这种对称性便成为局部对称性。描述相互作用的势，是为满足这一要求而必须引入的补偿规范势，它们就是基本相互作用的场。因此，规范原理本质上意味着对称性决定相互作用。例如，广义相对论中的规范原理意味着，该理论在局部洛伦兹变换下保持不变。在下文第 1.12 节中，我们将举例说明，如何因要求薛定谔方程在局部非阿贝尔变换下保持不变，而出现所谓的非阿贝尔规范场。

1.4 电流密度。

1.4.1 轨道部分

下面推导带电粒子电流密度的量子力学表达式。我们先考察电荷密度 ρ(r,t) $= q\psi^*$(r,t)ψ(r,t)的连续性方程。将薛定谔方程 (1.12) 左乘 ψ^*，并将其复共轭方程左乘 ψ，再将两式相减，按标准方法可得$\partial\rho/\partial t + \nabla \cdot$ **电流** $= 0$，其中电流密度为

$$\mathbf{j}_{\text{orbital}}(\mathbf{r}) = \frac{q}{2m}\left[\psi(\mathbf{r})(i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))\psi^*(\mathbf{r}) + \psi^*(\mathbf{r})(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r})\right] . \tag{1.16}$$

该表达式是算符的期望值 $< \psi|\mathbf{j}^{op}$(r)$|\psi >$

$$\mathbf{j}_{op}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\left[q\mathbf{v}_{op}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{op}) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{op})\, q\mathbf{v}_{op}\right] \tag{1.17}$$

由速度为的轨道运动所产生的电流密度

$$\mathbf{v}_{op} = [\mathbf{p}_{op} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}_{op})]/m\ .$$

对于点粒子，该算符正是将经典表达式 ρ(r t)v(t) $= q\delta$(r $-$r(t))v(t) 中的经典量 r(t) 和 v(t) 替换为相应的算符 $\mathbf{r}^{op}$ 和 $\mathbf{p}^{op}$，并对最终表达式进行对称化以使其成为厄米算符后得到的结果。

1.4.2 自旋贡献

上述电流表达式中缺少的，是粒子自旋所产生的贡献。这就是我们为它加上指标 $orbital$ 的原因。正如我们已经讨论过的，旋转带电粒子会在其所在位置产生局部电流分布，因此，除了轨道运动的贡献之外，我们还应当在电流密度中找到一个相应的项。我们漏掉了这一项，因为正如我们马上将看到的，它的形式是一个矢量的旋度（所谓的无散项），因此在连续性方程中无法显现，而连续性方程只取决于电流的散度。

为了修正我们的结果，我们考虑一个由电荷 $\{q_a\}$ 组成的物理系统，这些电荷位于 $\{\mathbf{r}_a\}$ 处，并使其处于外电场 **E(r)** 的作用下。我们从经典情形出发，考虑一段时间间隔 dt，在此期间这些电荷移动了距离$d\mathbf{r}_a =\mathbf{v}_a dt$。因此，它们的总能量变化为

$$dW = \sum_a q_a\mathbf{E}(\mathbf{r}_a)\cdot d\mathbf{r}_a = dt\int d\mathbf{r}[\sum_a q_a\frac{d\mathbf{r}_a}{dt}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)]\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r})$$

The 此处方括号中的表达式是流经.....的总电流密度
syst因此,

$$\frac{dW}{dt} = \int d\mathbf{r}\ \mathbf{j}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r})\ . \tag{1.18}$$

我们假设这一关系式对量子力学期望值也成立。为简单起见，考虑一个粒子，并求哈密顿量（1.11）的期望值

$$\begin{aligned} W &= \int d\mathbf{r}\psi^* H\psi \\ &= \int d\mathbf{r}\psi^* \left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}\right)^2 + qA_0 - g\frac{q}{2m}\ \mathbf{s}_{op}\cdot\mathbf{B}\right]\psi\ . \end{aligned} \tag{1.19}$$

我们还有

$$\frac{dW}{dt} =< \psi|\frac{\partial H}{\partial t}|\psi > \ . \tag{1.20}$$

该关系式（有时称为费曼-海尔曼定理）之所以成立，是因为根据薛定谔方程，项 $< \partial\psi/\partial t|H|\psi > + < \psi|H|\partial\psi/\partial t >$ 会消失 $\ddot{}i\hbar\,\partial\psi/\partial t = H\psi$。

为了求出哈密顿量的时间导数，我们注意到它仅通过势的时间依赖性而依赖于时间 $\mathbf{A}$ A_0。这种时间依赖性的一部分并非物理的，而是与$\mathbf{A}$ 和 A_0的含时规范变换有关。为了避免这种虚假的时间依赖性，我们通过选择 $A_0 = 0$来固定规范。这个选择并不能完全确定势，但剩下的唯一自由度是时间无关的 规范变换，即具有时间无关 $\chi(\mathbf{r})$ 的式 (1.3)。在这一选择下，我们有

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \int d\mathbf{r}\ \frac{\delta H}{\delta\mathbf{A}(\mathbf{r},\mathrm{t})}\ \frac{\partial\mathbf{A}(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial t}\ . \tag{1.21}$$

利用 (1.2) 与 $A_0 = 0$ 以及公式 (1.18)，我们得到电流的一般关系式

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},\mathrm{t}) = - < \psi|\frac{\delta H}{\delta\mathbf{A}(\mathbf{r},\mathrm{t})}|\psi > \ . \tag{1.22}$$

对H 关于 $\mathbf{A}$ 进行变分，并利用 **磁场** $= \nabla\times\mathbf{A}$，我们得到

$$\begin{aligned} < \psi|\delta H|\psi > \ &= \int d\mathbf{r}\left\{\psi^*\left[\frac{iq\hbar}{2m}(\nabla\cdot\delta\mathbf{A} + \delta\mathbf{A}\cdot\nabla) + \frac{q^2}{m}\delta\mathbf{A}\cdot\mathbf{A}\right]\psi\right. \\ &\left. - g\frac{q}{2m}(\psi^*\mathbf{s}_{op}\psi)\cdot(\nabla\times\delta\mathbf{A})\right\} \end{aligned} \tag{1.23}$$

对第一项进行分部积分，利用恒等式

$$\mathbf{a}\cdot\nabla\times\mathbf{b} = -\nabla\cdot(\mathbf{a}\times\mathbf{b}) + \mathbf{b}\cdot(\nabla\times\mathbf{a})$$

对于该表达式中的最后一项，并假设表面项消失，我们得到电流的以下表达式

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{iq\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi) - \frac{q^2}{m}\mathbf{A}\psi\psi^* + g\frac{q}{2m}\nabla\times(\psi^*\mathbf{s}_{op}\psi) \tag{1.24}$$

前两项正是先前通过连续性方程得到的“轨道角动量”电流。最后的“螺线管”项是自旋贡献，其形式类似于电流与磁矩之间的经典关系式

$$\mathbf{j}_{spin}(\mathbf{r}) = \nabla\times(gq/2m)\mathbf{s} = \nabla\times\boldsymbol{\mu}\ .$$

1.4.3 电流的对流部分、抗磁部分和自旋部分

表达式 (1.24) 中关于电流**j** 的第一项称为对流电流，与不存在电磁场时电流密度的通常表达式一致。没有被称为抗磁电流的第二项时，它不是规范不变的。**j** 中的第三项，即自旋项，显然本身就是规范不变的。

在初等量子力学中，人们会形成一些关于与给定波函数相关的电流的直觉。特别是，人们已经习惯于这样一个事实：当波函数为实函数时，不会出现非零电流密度；电流与 ψ 的局部复相位有关，等等。这种直觉完全建立在公式（ 1.24 ）的第一项之上，而在存在电磁场时可能会产生误导。在这种情况下，例如，对于实波函数也可以得到非零的轨道电流密度

$$\mathbf{j}_{\mathrm{orbital}}(\mathbf{r},\mathrm{t}) = (q^2/m)\mathbf{A}\psi^2(\mathbf{r}) \ \ (\text{for} \ \ \psi - \text{real})$$

当然，局域规范变换（1.14）的自由度使得 ψ 的相位以及实波函数与复波函数之间的区别都变成依赖于规范选择、因而不具有物理意义的东西。

1.5 匀强电场中的运动

即使是带电粒子在恒定匀强电场 $\mathbf{E}$ 中的运动这样一个简单问题，也展现出量子力学中规范场的特殊性。在经典力学中，一切都很简单。粒子沿着场的方向以恒定加速度 $q \mid \mathbf{E} \mid /m$ 运动，并且在垂直于该方向的方向上具有一个由初始条件确定的恒定速度。在量子力学中，根据对 $\mathbf{A}$ 和 A_0 所作的众多（即连续无穷多个）可能选择中的哪一种，可能会得到形式不同的描述，而这些选择都导向同一个恒定的 $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{B} = 0$。当然，规范不变性会保证所有物理量都与规范选择无关，但在实际计算中，要看清其中的联系可能需要付出一些努力。

1.5.1 静态规范

我们将详细探讨两种规范选择，最简单且最熟悉的规范$\mathbf{A} = 0$, $A_0 = -\mathbf{E}\cdot\mathbf{r}$ 以及另一种随时间变化的规范$\mathbf{A} = -\mathbf{E}t$, $A_0 = 0$. 在前一种情况下，时间变量和坐标变量在薛定谔方程中是可分离的

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - q\mathbf{E}\cdot\mathbf{r}\right)\psi(\mathbf{r},t)\ , \tag{1.25}$$

此外，平行于**E**的坐标以及垂直于*E*的坐标也是可分离的。选择与$\mathbf{E}$ 平行的 x 轴，并用下标 $\perp$ 表示垂直于$\mathbf{E}$ 的向量，可以将定态解写成

$$\psi(\mathbf{r},t) = \phi_\varepsilon(x)\exp\left(i\mathbf{k}_\perp\cdot\mathbf{r}_\perp\right)\exp\left[-\frac{it}{\hbar}\left(\varepsilon + \frac{\hbar^2\mathbf{k}_\perp^2}{2m}\right)\right]\ , \tag{1.26}$$

其中， ε 和 $\phi_\varepsilon(x)$分别是沿 x 方向运动的本征能量和相应的本征函数。它们满足一维薛定谔方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}-Fx\right)\phi_\varepsilon=\varepsilon\phi_\varepsilon \tag{1.27}$$

其中我们将 $F=q$ | **能量** |记为。

在关于 $\phi_\varepsilon(x)$ 的方程中，势 $-Fx$ 在 x 取无穷大值时的行为是这样的：能级 ε 形成一个连续谱，其取值范围从 $-\infty$ 到 $+\infty$。它们应对应于在 $x=-\infty$ 方向受限、但在 $x\to+\infty$ 方向不受限的运动。波函数必须在 x 取较大负值的区域内趋于零，因此能级是非简并的。事实上，如果对于相同的 ε 存在两个解 $\phi_1(x)$ 和 $\phi_2(x)$，那么

$$\frac{1}{\phi_1}\frac{d^2\phi_1}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon+Fx)=\frac{1}{\phi_2}\frac{d^2\phi_2}{dx^2} \tag{1.28}$$

因此，朗斯基行列式 $w=\phi_1(d\phi_2/dx)-\phi_2(d\phi_1/dx)=const$。波函数在 $x=-\infty$ 处趋于零这一条件意味着 $w=0$，从而得到 $\phi_1=const\ \phi_2$，也就是说，这两个解实际上会重合。

1.5.2 线性势——艾里函数

求解 ϕ_ε 方程的最简单方法是考虑它在动量表象中的形式 e-sentation。代入展开式

$$\phi_\varepsilon(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,a_\varepsilon(p)\,e^{ipx/\hbar} \tag{1.29}$$

在 $\phi_\varepsilon(x)$ 的方程中，我们很容易得到

$$\left(\frac{p^2}{2m}-i\hbar F\frac{\partial}{\partial p}\right)a_\varepsilon(p)=\varepsilon a_\varepsilon(p)\ . \tag{1.30}$$

对这个一阶方程积分，我们得到

$$a_\varepsilon(p)=const\ \ \exp\left[\frac{i}{\hbar F}\left(\varepsilon p-\frac{p^3}{6m}\right)\right]\ . \tag{1.31}$$

这个表达式前的常数必须通过归一化来确定。例如，选择将 $a_\varepsilon(p)$ 归一化为关于 ε 的狄拉克δ函数。

$$\int_{-\infty}^{\infty}dp\ a^*_{\varepsilon'}(p)\ a_\varepsilon(p)=|C|^2\int_{-\infty}^{\infty}dp\ \exp\left[\frac{i}{\hbar F}(\varepsilon-\varepsilon')\,p\right]=\delta(\varepsilon-\varepsilon') \tag{1.32}$$

我们得到 $C=1/\sqrt{2\pi\hbar F}$。位置表象中的波函数是

$$\phi_\varepsilon(x)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar\sqrt{F}}\ \ \exp\frac{i}{\hbar}\left[px+\frac{1}{F}\left(\varepsilon p-\frac{p^3}{6m}\right)\right]=\frac{\alpha}{\pi\sqrt{F}}\ \ Ai\left[-\alpha(x+\varepsilon/F)\right]\ , \tag{1.33}$$

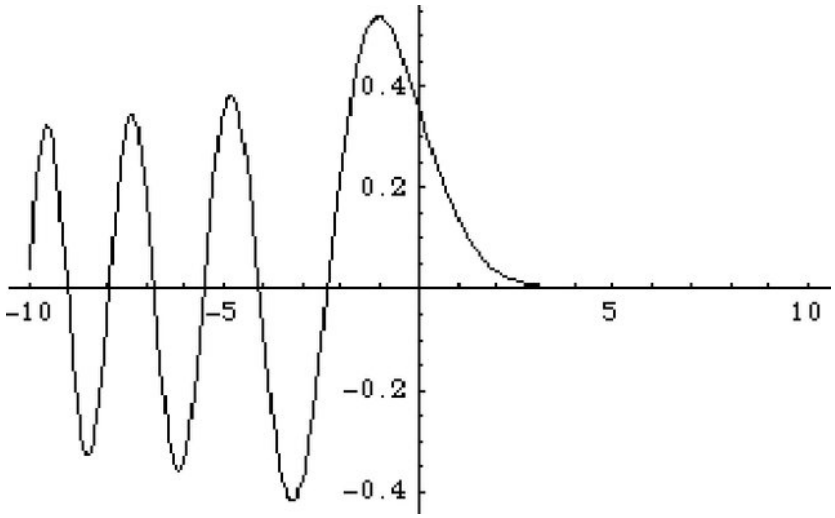


图 1.1：艾里函数 $Ai(x)$

其中我们记 $\alpha = (2mF/\hbar^2)^{1/3}$，并引入了记号

$$Ai(\xi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left[i \left(\frac{u^3}{3} + \xi u \right) \right] . \tag{1.34}$$

由该积分定义的函数 $Ai(\xi)$ 称为艾里函数。下面我们将探讨它的一些性质，另请参见参考文献 [10]。艾里函数的图像如图 1.1 所示。

方程 (1.33) 与 (1.26) 一起给出了薛定谔方程 (1.25) 的通解。

探究波函数 $\phi_\varepsilon(x)$ 在$x \to \pm\infty$时的渐近行为很有启发性。可以使用鞍点近似求得这一行为

另请参见：https://atmos.washington.edu/ breth/classes/AM568/lect/lect22.pdf

为了求出式 (1.33) 中的积分，对被积函数中的指数求导，可得 p 的驻值 p_0 必须满足

$$\varepsilon = \frac{p_0^2}{2m} - Fx . \tag{1.35}$$

这是势 $-Fx$ 中的经典能量—动量关系式。这是鞍点法典型“巧妙之处”的一个例子——当快速振荡积分的相位取决于外部物理参数（式（1.33）中的坐标 x）时，鞍点条件往往具有直观的物理意义。它与经典物理学的区别在于，p_0 不必为实数。只有当 $x > -\varepsilon/F$ 时，也就是说，在允许经典运动的区域内，p_0 才是实数；而在经典禁阻区域 $x < -\varepsilon/F$ 中，它是纯虚数。在这两种情况下，都有两个解分别对应.....

平方根中的两个符号

$$p_0(x) = \sqrt{2m(\varepsilon + Fx)}\,. \tag{1.36}$$

根据鞍点近似的规则，在实数情况下应保留两个鞍点解，而在虚数情况下只能取具有衰减指数函数的鞍点。因此，对于（1.33），我们得到

$$\begin{aligned} \phi_\varepsilon(x) &\approx \sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar p_0}}\cos\left(\frac{{p_0}^3(x)}{3\hbar Fm} - \frac{\pi}{4}\right)\ , \quad \text{for } x \to \infty \\ \phi_\varepsilon(x) &\approx \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar|p_0|}}\exp\left(-\frac{|p_0(x)|^3}{3\hbar Fm}\right)\ , \ \text{for } x \to -\infty\,. \end{aligned} \tag{1.37}$$

我们将在专门讨论半经典极限的章节中看到，这些表达式对应于波函数的半经典近似。正如所要求的，波函数在经典禁阻区域 $E < -Fx$ 中按指数函数衰减。在经典允许区域，对于定态量子力学态，振幅相等的正、负动量 p_0 共存，从而产生干涉余弦，其自变量可写成

$$\frac{p_0^3(x)}{3\hbar Fm} \equiv \frac{1}{\hbar}W(x) = \frac{1}{\hbar}\int_{-E/F}^{x} p_0(x')\,dx' \tag{1.38}$$

用经典作用量 W 表示。经典动量决定了局部波长 $\lambda = 2\pi\hbar(dW/dx)^{-1}$，它随 x 的增加而减小，这与沿场方向的均匀经典加速度以及德布罗意关系式一致。

1.5.3 时间依赖规范

现在让我们考察一下这个问题在另一种规范下的形式 $\mathbf{A} = -\mathbf{E}t$, $A_0 = 0$。我们使用规范变换 (1.14)，其中 $\chi = -\mathbf{E}\cdot\mathbf{r}t$，代入方程 (1.25)，得到

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r},\mathrm{t}) &= \exp(iq\mathbf{E}\cdot\mathbf{r}t/\hbar)\psi'(\mathbf{r},\mathrm{t})\,, \\ i\hbar\frac{\partial\psi'(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial t} &= \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla + q\mathbf{E}t)^2\psi'(\mathbf{r},\mathrm{t})\,, \end{aligned} \tag{1.39}$$

其中，我们将变换后的波函数记为 ψ'(r,t)。

这个方程的一个简单解是平面波，由此得到 ψ'(r,t)

$$\psi'_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},\mathrm{t}) = A_{\mathbf{k}}(t)\exp[i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}] \tag{1.40}$$

其时间依赖振幅 Ak(t) 满足

$$i\hbar\frac{dA_{\mathbf{k}}(t)}{dt} = \frac{1}{2m}(\hbar\mathbf{k} + q\mathbf{E}t)^2 A_{\mathbf{k}}(t)\,. \tag{1.41}$$

积分后得到

$$A_{\mathbf{k}}(t) = C_0\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[\frac{\hbar^2\mathbf{k}_\perp^2}{2m}\,t \;+\; \frac{1}{6mF}(p+Ft)^3\right]\right\}\,, \tag{1.42}$$

其中 C_0 是任意常数， $p = \hbar k_x$ 并且我们对 $\mathbf{k}_\perp$ 和 F 使用了与上一节相同的记号。

我们注意到，采用此解，在规范变换 (1.39) 之前的波函数是

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r},\mathrm{t}) = A_{\mathbf{k}}(t)\exp[i(\mathbf{k} + q\mathbf{E}t/\hbar)\cdot\mathbf{r}] \tag{1.43}$$

当然，这是静态规范下薛定谔方程（1.25）的一个解。具有不同$\mathbf{k}$的这些含时解的集合，就运动在$\mathbf{r}_\perp$ 而言，与平稳解集合（1.26）完全相同。然而，在磁场方向上，这两个集合看起来却大不相同。这里需要注意的是，在不同的规范下，同一个问题可能呈现出截然不同的形式。

当然，从数学上看，这两组解是等价的，而且很容易证明每一组都可以表示为另一组的线性组合。含时解更符合经典直觉，即物体在恒定力作用下做加速运动。

在这个简单问题中，比较两个解 $\psi\mathbf{k(r,t)}$（式 (1.43)）的电流计算结果，以及相应的变换后解 $\psi'\mathbf{k(r,t)}$（式 (1.40)）的计算结果，是很有启发性的。使用这两个解将得到不同的结果

$$q\frac{\hbar\mathbf{k} + q\mathbf{E}t}{m}|C_0|^2 \quad \text{and} \quad q\frac{\hbar\mathbf{k}}{m}|C_0|^2$$

对于由公式(1.24)的第一部分给出的电流的对流部分。但这一差异被电流表达式中不同的第二个抗磁项 $-(q^2/m)\mathbf{A}|\psi|^2$ “抵消”了。在静态规范下它为零，但却是

$$q^2\frac{\mathbf{E}t}{m}|C_0|^2$$

在含时规范中。最终结果当然是相同的表达式，因为它是规范不变量。

1.5.4 均匀电场中的平移。存在规范场时的对称性

处于恒定电场中的物理规律必须在坐标平移$\mathbf{r} \to \mathbf{r} + \mathbf{a}$ 下保持不变，其中 $\mathbf{a}$ 是一个常矢量。在薛定谔方程（1.25）中应用这一变换，首先会发现方程并不保持不变——哈密顿量中会多出一项 $-\mathbf{电场}\cdot\mathbf{a}$。然而，如果同时对波函数进行规范变换，就可以消去这一项。

$$\psi(\mathbf{r},\mathrm{t}) \to \exp\left(-iq\mathbf{E}\cdot\mathbf{a}t/\hbar\right)\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a},t) = \exp\left[i\mathbf{a}\cdot(-i\hbar\nabla - q\mathbf{E}t)/\hbar\right]\psi(\mathbf{r},\mathrm{t}) \tag{1.44}$$

薛定谔方程在这一组合变换下保持不变，因此在当前情况下必须将其采用为平移的定义。可以将其称为“电平移”，类比于均匀磁场中的修正“磁平移”，参见下文第 1.6.3 节。

通过额外的规范变换来修正标准对称变换，这一特征在含规范场的理论中相当典型。这解释了

改变坐标系也可能影响规范选择，因此必须注意恢复到原来的规范。显然，上述表达式中的无穷小平移生成元是

$$\mathbf{g}_{op} = \mathbf{p}_{op} - q\mathbf{E}t \ . \tag{1.45}$$

对称性意味着它必须守恒，事实上可以发现

$$d\mathbf{g}_{op}/dt = \partial \mathbf{g}_{op}/\partial t + (i/\hbar)[H \, , \, \mathbf{g}_{op}] = 0$$

其中 H 如式 (1.25) 右侧所示。

下面我们将看到规范场修正对称性的另外两个例子——均匀磁场中的平移不变性和旋转不变性（第 1.6.3 节），以及磁单极子场中的旋转不变性（第 1.11.3 节）。

1.6 匀强磁场中的运动

现在我们将考虑带电粒子在均匀外磁场**磁场** 中的量子力学运动，该外磁场在整个空间内的大小和方向均保持不变。为方便起见，我们将以电子为例进行讨论，即取电荷值

$$q = -e \ .$$

1.6.1 经典运动。导引中心

首先回顾这个问题的经典解很有启发意义。经典运动方程为

$$m \, d\mathbf{v}/dt = -e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \ .$$

令 z 轴的方向平行于**磁场**。那么沿 z 的运动是自由的 ，

$$m \, dv_z/dt = 0 \ \ , \ \ z = v_z t + z_0$$

其中 v_z 为常量， z_0 由初始条件决定。

x 和 y 分量的方程为

$$\begin{aligned} m\frac{dv_x}{dt} &= -eBv_y \ , \\ m\frac{dv_y}{dt} &= eBv_x \ . \end{aligned} \tag{1.46}$$

这里一个重要的观察是，这些描述垂直于**磁场** 的平面内运动速度的牛顿方程，在形式上与一维振子 的哈密顿方程相同，其中 v_x 和 v_y 在形式上分别与振子的坐标和动量成正比。这些方程的解是在“速度空间”中的“简谐运动”，其频率为

$$\omega_c = eB/m$$

称为回旋频率，并且

$$v_x = v\cos(\omega_c t + \alpha) \ , \ v_y = v\sin(\omega_c t + \alpha) \ , \tag{1.47}$$

因此，(x,y) 平面上的轨迹为

$$\begin{aligned} x &= \frac{v}{\omega_c}\sin(\omega_c t + \alpha) + x_0 = \frac{v_y}{\omega_c} + x_0 \ , \\ y &= -\frac{v}{\omega_c}\cos(\omega_c t + \alpha) + y_0 = -\frac{v_x}{\omega_c} + y_0 \end{aligned} \tag{1.48}$$

这里 v, α, x_0 和 y_0 是运动常数，其数值由初始条件 $x(t_0)$ $y(t_0)$ $v_x(t_0)$ $v_y(t_0)$在某个初始时刻 t_0确定。

这些常数的物理意义如下。上述解描述了一个半径为 v/ω_c 的圆。圆心的位置由坐标 x_0 和 y_0 给出，因此通常称为导引中心的坐标，参见下方的图 1.2。 v 的值还决定了运动的能量

$$m(v_x^2 + v_y^2)/2 = mv^2/2$$

在 (x, y) 平面[4]内的运动能量。该能量与轨道位于 x, y 平面上的位置无关，即与 x_0 和 y_0的值无关。

使用量子力学的术语，我们可以说上述圆周运动是简并的——所有半径为 v/ω_c 的圆具有相同的能量。这种简并通过导引中心坐标 x_0 和 y_0 的不同取值来表征，因此可以说经典运动是 ∞^2 简并的。正如我们将在下一节中看到的，在量子力学中，该运动是“仅仅” ∞ 简并的。需要注意的是，导引中心坐标的表达式由求解 (1.48) 得到

$$x_0 = x - \frac{v_y}{\omega_c} \ , \ y_0 = y + \frac{v_x}{\omega_c} \tag{1.49}$$

是运动的守恒量

$$\frac{dx_0}{dt} = \frac{dy_0}{dt} = 0$$

这一事实在经典力学中显而易见，却将在该问题的量子力学处理中发挥非常重要的作用。

1.6.2 朗道能级

这个问题的量子力学最初由朗道进行了研究，相应的解称为朗道能级。

[4]将方程 (1.46) 分别乘以 v_x 和 v_y 再相加，即可轻而易举地“发现”这一量守恒。

本征能量

这种情况下，无自旋粒子的量子哈密顿量为

$$H_{op} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla + eA(\mathbf{r})\right)^2 = \frac{m\mathbf{v}_{op}^2}{2} \tag{1.50}$$

其中，矢势必须选择为使 **磁场** $= \nabla \times$ **矢势** 为平行于 z 的常矢量。通过对 **矢势** 作简单选择，可以求得相应薛定谔方程的显式解，具体内容将在下文详细讨论。不过此刻，我们更倾向于采用更一般的方法，并说明基于简单的考量，便可以预见解的许多特征。遵循这些考量有助于更好地理解问题的物理本质。

我们首先考虑各分量之间的对易子

$$\hat{v}_i = (-i\hbar\nabla_i + eA_i)/m$$

这些速度算符出现在哈密顿量 **(1.50)** 中，很容易计算。 d,

$$[\hat{v}_j, \hat{v}_k] = -\frac{ie\hbar}{m^2}\left\{[\nabla_j, A_k] + [A_j, \nabla_k]\right\} = -\frac{ie\hbar}{m^2}\left\{\frac{\partial A_k}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_k}\right\} = -i\frac{e\hbar}{m^2}\epsilon_{jkl}B_l\ . \tag{1.51}$$

这些非零对易子表明，对于一般的磁场 **磁场(r)**，无法同时确定速度的全部三个分量。

在磁场沿 z 轴均匀恒定的特殊情形下，只有对易子 $[\hat{}v_x,\ \hat{}v_y]$不为零。这意味着$\hat{}v_z$ 与 H_{op}对易，见式（1.50）。此外，由于可以选择 $A_z = 0$ 、 A_x 和 A_y 使其仅为（x， y）的函数，因此

$$H_{op} = \frac{m}{2}\left(\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2\right) + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}\ \ ,\ \ \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

因此， H_{op} 中依赖于（x， y）的部分与依赖于 z 的部分可以分离。波函数中依赖于 z的部分必定是平面波 $\exp(ik_z z)$，其中 $k_z = mv_z/\hbar$ 描述量子自由运动，与经典情形一致。

H_{op} 中描述（x， y）平面内运动的部分，

$$h_{op} \equiv \frac{m}{2}\left(\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2\right) \tag{1.52}$$

与算符$\hat{}v_x$ 和$\hat{}v_y$ 的平方和成正比，且其对易子为常数

$$[\hat{v}_x\,,\,\hat{v}_y] = -i(e\hbar B/m^2)\,.$$

这启发我们定义重标度变量

$$\hat{p}_\xi = m\hat{v}_x\ \ ,\ \ \hat{\xi} = (m/eB)\hat{v}_y$$

与正则对易子

$$[\hat{p}_\xi\,,\,\hat{\xi}] = -i\hbar$$

算符 h_{op} 的形式为

$$h_{op} = \frac{\hat{p}_\xi^2}{2m} + \frac{(eB)^2}{2m}\hat{\xi}^2 = \frac{\hat{p}_\xi^2}{2m} + \frac{m\omega_c^2}{2}\hat{\xi}^2$$

质量为 m 、频率为 ω_c 的一维振子的哈密顿量，这与相应经典运动的性质相符。振子的谱是众所周知的，将其与$\hat{}p_z^2/2m$ 项的自由运动本征值相加，我们得到 H_{op} 的本征值:

$$E(n,k_z) = \hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\ ,\quad n=0,1,2,.... \tag{1.53}$$

我们无需求解薛¨定谔方程，仅依据对易关系就成功得到了哈密顿量（1.50）的本征值。然而，问题仍然存在。本征值仅取决于两个量子数 n 和 k_z，而在处理三个自由度时，必须找到三个量子数来表征 H_{op}的本征函数。

朗道能级的简并。量子导引中心

E（n，k_z）与第三个量子数无关，这意味着该问题的能级是简并的。接下来我们将确定这种简并的原因和性质。为此，考虑与导引中心坐标（式（1.49））相对应的量子力学算符:

$$\hat{x}_0 = x - \frac{\hat{v}_y}{\omega_c}\quad ,\quad \hat{y}_0 = y + \frac{\hat{v}_x}{\omega_c}\ . \tag{1.54}$$

我们很容易发现，它们二者都与速度算符的所有分量对易，

$$[\hat{x}_0,\hat{v}_i] = [\hat{y}_0,\hat{v}_i] = 0 \tag{1.55}$$

确实，例如。

$$[\hat{x}_0,\hat{v}_x] = [x,\hat{v}_x] - \frac{1}{\omega_c}[\hat{v}_y,\hat{v_x}] = \frac{1}{m}[x,\hat{p}_x] - i\frac{\hbar}{m} = 0\ ;\ \ [\hat{x}_0,\hat{v}_y] = [x,\hat{v}_y] = 0\ ,\ \text{etc}$$

因此，$\hat{}x_0$ 和 $\hat{}y_0$ 与 H_{op}对易，即如同在经典情形中一样是守恒的。在经典处理中，运动的能量与这些量无关。然而我们发现，它们的对易子不为零。事实上，利用 (1.55)

$$[\hat{x}_0,\hat{y}_0] = [\hat{x}_0,y] = -[\hat{v}_y,y]/\omega_c = -[\hat{p}_y,y]/m\omega_c = i(\hbar/m\omega_c) \tag{1.56}$$

这个关系式通常写作

$$[\hat{x}_0,\hat{y}_0] = i\ell^2 \tag{1.57}$$

其中常数

$$\ell = (\hbar/eB)^{1/2}$$

称为磁长。

$\hat{}x_0$ 与$\hat{}y_0$ 之间非零的对易子意味着它们不可能同时具有确定值，而且对易子的常数值表明，与上面的速度算符一样，它们的性质类似于一对正则坐标–动量对。只能指定二者中的一个，并且由于它是守恒的，其本征值应当提供我们正在寻找的缺失量子数，以便刻画属于相同本征能量$E(n, k_z)$的简并本征函数。事实上，这对非对易的守恒 算符的存在正是 $E(n, k_z)$简并的原因。如果我们选择系统的态为某个算符的本征函数，比如说$\hat{}x_0$ 算符，对其中一个态作用$\hat{}y_0$ 将产生一个具有相同能量的不同态。正如我们将在下文展示的那样，算符$\hat{}x_0$ 与$\hat{}y_0$ 的性质和系统的基本对称性——平移不变性——之间存在着深刻的关系。

本征函数

由对易关系式 (1.57) 可知，对于具有确定x_0 的本征态， y_0 的值完全不确定，因此，量子化回旋轨道中心的位置沿着具有给定 x_0的直线，在任意一点被找到的概率都相等。为了明确地说明这一点，下面转而讨论具有确定 x_0值的薛定谔方程的解。首先需要为矢势 **A** 选择规范。$\hat{}x_0$的显式形式、

$$\hat{x}_0 \equiv x - \frac{\hat{v}_y}{\omega_c} = x - (1/eB)\hat{p}_y - A_y/B$$

以及

$$m\hat{v}_x = \hat{p}_x + eA_x$$

表明以下选择较为方便

$$A_x = 0\ ,\ A_y = Bx\ ,\ A_z = 0 \quad \rightarrow \quad \mathbf{B} = (0, 0, B) \tag{1.58}$$

对于该选择

$$\hat{x}_0 = i\ell^2\partial/\partial y \quad , \quad m\hat{v}_x = -i\hbar\partial/\partial x$$

以及哈密顿量

$$H_{op} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2m}\left(\hat{p}_y + eBx\right)^2 + \frac{\hat{p}_z^2}{2m}\ . \tag{1.59}$$

[{"id": 0, "output": "$\hat{}x_0$ 和 $\hat{}p_z$ 的本征函数形式为"}]

$$\psi(\mathbf{r}) = const\ \phi(x)\ e^{-ix_0 y/\ell^2} e^{ik_z z} \quad , \quad const = \frac{1}{\sqrt{L_y}}\ \frac{1}{\sqrt{L_z}} \tag{1.60}$$

其中 $\phi(x)$ 尚未确定。为方便起见，我们假设沿y 和 z 方向的运动受到有限但较大的区间 L_y 和 L_z 的限制，并采用周期性边界条件。

将其代入薛定谔方程 $H_{op}\psi = E\psi$ 并分离变量后，我们得到

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega_c^2}{2}\left(x - x_0\right)^2\right]\phi(x) = \varepsilon\phi(x)\ , \tag{1.61}$$

其中我们将 $\varepsilon = E - (\hbar k_z)^2/2m$ 记为。这是一个以 x_0 的本征值为中心的谐振子方程。如预期，本征能量由 (1.53) 给出，并且与 x_0 无关。本征函数是

$$\phi_{n,x_0}(x) = \chi_n(x - x_0)\ , \tag{1.62}$$

其中 $\chi_n(x)$ 是谐振子的归一化本征函数。

$$\chi_n(x) = \left(\frac{1}{\pi\ell^2}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left[-x^2/\ell^2\ \right]\ H_n\left[x/\ell\ \right] \tag{1.63}$$

其中 $H_n(x) = (-1)^n\ e^{x^2}(d^n/dx^n)e^{-x^2}$ ——厄米多项式。前几个函数$\chi_n(x)$是

$$\begin{aligned} \chi_0(x) &= \left(\frac{1}{\pi\ell^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\ell^2}\right)\ ,\ \chi_1(x) = \left(\frac{1}{\pi\ell^2}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{\sqrt{2}x}{\ell} \exp\left(-\frac{x^2}{2\ell^2}\right)\ , \\ \chi_2(x) &= \left(\frac{1}{4\pi\ell^2}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{x^2}{\ell^2} - 1\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2\ell^2}\right)\ ,\ \text{etc}\ . \end{aligned} \tag{1.64}$$

施加沿 y 方向的周期性边界条件，我们发现，方程(1.60)中的 x_0 取离散值，相邻值之间的间距为 $\Delta x_0 = 2\pi\ell^2/L_y$。因此，在x-y 平面上，每个面积 $L_y\Delta x_0 = 2\pi\ell^2$ 对应一个态。波函数通过平面波相位对y的依赖意味着，找到粒子的概率与该坐标无关。这似乎还表明，就像在 z 方向一样，y 方向也存在自由运动。然而，这并不正确，因为这一结论基于不存在规范场的情形中的经验。在本例中，波函数相位依赖于规范，因此要评估它所描述的运动，必须构造规范不变量。下面我们将通过计算电流密度分量来完成这一点，并得到具有物理意义的结果。

在 x 方向上，该态以数值 x_0 为中心。其延展范围可通过振子的能量均分性质来确定，例如，这意味着平均势能是总能量的一半，$m\omega_c^2\langle(x - x_0)^2\rangle/2 = \hbar\omega_c(n + 1/2)/2$。由此得到 $\sqrt{\langle(x - x_0)^2\rangle} = \ell\sqrt{n + 1/2}$。因此，每个简并能级在图像上都可视为一个二维平面，其中充满了彼此重叠的（对于 $L_y \gg 2\pi\ell/\sqrt{n + 1/2}$）“条带”；各个量子态占据这些平行于 y 轴的条带，代表量子化的回旋轨道沿每条条带均匀“弥散”开来。对每个 n 和 k_z，这一图像都会重复出现，轨道半径（即条带厚度）则按 $\ell\sqrt{n + 1/2}$ 增大。轨道的弥散源自导引中心坐标 x_0 和 y_0 之间的类海森堡不确定性关系。

我们刚才描述的简并能级称为朗道能级。令 y_0 取确定值，也会得到相同的朗道能级图像，不过

此时条带与 x轴平行。有趣的是，如果令 x_0 和 y_0 的更复杂函数取确定值，会出现什么情况。假设我们固定$x_0^2 + y_0^2$。那么上图中的条带就会呈现以原点为中心的同心圆形状。固定 $x_0^2/a^2 + y_0^2/b^2$ 并取某些常数 a 和 b，会得到椭圆形条带；而固定函数 $(x_0y_0 + y_0x_0)/2$ （经对称化，使相应的算符成为厄米算符），则会使条带呈现双曲线形，等等。

在图1.2中，我们说明了其中一些情况。当然，只要简并保持不变，上述所有选择都是等价的；但是，如果在哈密顿量中加入一个消除这种简并的微扰，其中一些选择可能会被单独选出。

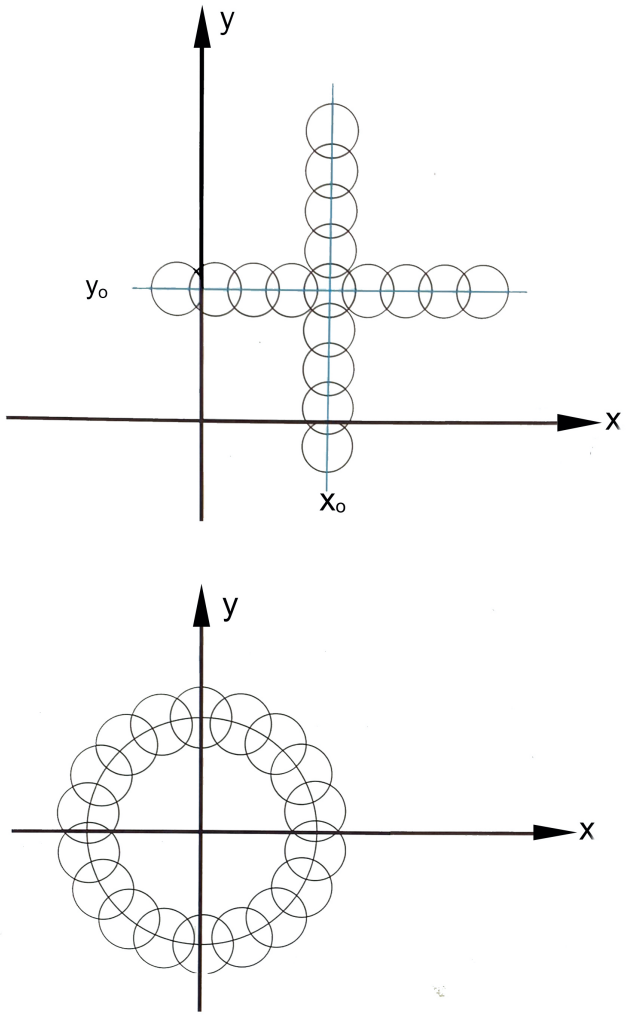


图1.2：单个经典回旋轨道的示意图，以及它在量子力学描述中如何变得“模糊”。上图展示了 x_0固定（轨道沿 y 方向变得模糊）或 y_0 固定（轨道沿x方向变得模糊）的情况。在下图中， $x_0^2+y_0^2$ 固定——轨道沿相应的圆周变得模糊

在选择算符 $\hat{}y_0$ 的本征值而非 $\hat{}x_0$ 的本征值来刻画简并波函数时，选择规范 $A_x = -By, A_y = A_z = 0$ 会更方便，在这种规范下，$\hat{}y_0$ 就是 $-i\ell^2\partial/\partial x$。对于组合 $\hat{}x_0^2 + \hat{}y_0^2$，对称选择 $A_x = -By/2, A_y = Bx/2, A_z = 0$ 最为合适。在文献中，有时看起来似乎是规范的选择决定了 $\hat{}x_0$ 和 $\hat{}y_0$ 的哪种组合会对角化。我们在此的说明旨在澄清正确的选择顺序。

出现在导引中心坐标对易子中的磁长平方 ℓ，对于这些变量起着“普朗克常数”的作用。因此，类似的测不准关系 $\Delta x_0 \Delta y_0 \geq \ell^2/2$ 必须成立。我们还记得，从统计物理学来看，在半经典图像中，量子态“占据”相空间体积 $\Delta p \Delta q = 2\pi\hbar$。在这里，我们可以预期类似的情况：简并朗道能级的单个态在平面 (x_0, y_0) 中“占据”的面积为 $2\pi\ell^2$。事实上，我们已经在解 (1.60) 的特例中看到了这一点。这个最小面积的物理意义简单而深刻——穿过该面积的磁通量是普适世界常数之比

$$B \cdot 2\pi\ell^2 = 2\pi B \frac{\hbar}{eB} = \frac{2\pi\hbar}{e} = \frac{h}{e}$$

这种磁通量有一个特殊的记号

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{e} = \frac{h}{e} \tag{1.65}$$

还有一个特殊名称——磁通量子。在这些讲义中，我们会多次遇到这个量（参见下文）。需要强调的是，这个名称并不意味着这类问题中的磁通量是量子化的。相反，正如我们在这里看到的、并将在下文看到的那样，某些物理特征会以 Φ_0 为周期重复出现。

如上文所述，简并朗道能级中单个态的密度是 $2\pi\ell^2$ 的倒数，它与 n 无关，也与我们选择何种方式对简并进行分类无关。“每一个磁通量子对应一个态”这一便于记忆的规则，在许多存在磁场的量子力学问题中都会遇到，因此很值得记住。

电流与边缘电流

朗道能级中的各个态都具有非零的电流密度。除了 z 方向自由运动带来的显而易见的贡献外，在 x-y 平面内也会出现电流分布。定性而言，我们预期，在这个平面内，量子力学展宽后的回旋轨道（其导引中心坐标固定）会组合起来，形成方向相反、平行于态所占据条带边缘且集中于边缘的电流，而条带中线处的电流为零。

利用电流的式（1.24），很容易得到式（1.60）中的各态

$$j_x = 0\ ,\ j_y(x) = e\omega_c(x_0 - x)\rho(x)\ ,\ j_z(x) = e(\hbar k_z/m)\rho(x) \tag{1.66}$$

其中我们将粒子密度记为

$$\rho(x) = \phi^2(x)/L_y\, L_z$$

长度 L_y 和 L_z 的出现与将波函数 (1.60) 归一化为一个粒子（采用标准归一化方式）有关。

由方程（1.62）的任意一个解给出的波函数 $\phi^2(x)$ 集中在 x_0 周围的对称条带中，这意味着电流密度 $j_y(x)$ 关于 $x = x_0$ 呈反对称分布。由于这种反对称性，总电流

$$I_y = \int j_y(x)\, dx \tag{1.67}$$

沿 y 方向流动，即沿着态 $\psi_{n,\ x_0}$ 在 x-y 平面内为零。

如果沿 x 轴施加一个恒定电场，仍然可以找到精确的波函数（参见作业题或辅导课）。这些波函数的电流密度分布将从反对称变为非对称，并且沿 y方向 的总电流 不会为零。

另一种有趣的、能够承载非零电流的朗道态出现在 x-y 平面的边缘。假设在方程（1.61）中加入一个额外的势 $V(x)$，其形状如图 1.3 所示

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega_c^2}{2}(x - x_0)^2 + V(x)\right]\phi(x) = \varepsilon\phi(x)\ , \tag{1.68}$$

这个势模拟样品在 x 方向上的边缘。

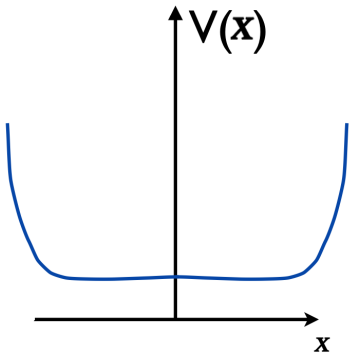


图1.3：模拟 x-y 平面中边缘的势

考察组合势如何.....是很有启发性的

$$U(x) = \frac{m\omega_c^2}{2}(x - x_0)^2 + V(x)$$

当导引中心坐标取不同值时，曲线会发生变化；这些值 x_0 相对于表示边缘的势垒的位置而言。随着 $U(x)$变得更加

狭窄，对于 x_0 靠近边缘及“位于”边缘内侧的值，这表明本征能量 ϵ_n 会以这样的方式解除朗道能级的简并，使其在这些 x_0值下成为递增函数$\epsilon_n(x_0)$。回想一下未扰动朗道能级所占据的宽度 $\ell\sqrt{n+1/2}$，对于较低的 n 值，且当势 $V(x)$在磁长 ℓ 的尺度上缓慢变化时，我们可以近似得到

$$\begin{aligned} V(x) &\approx V(x_0) \\ \epsilon_n(x_0) &\approx \hbar\omega_c(n+\frac{1}{2}) + V(x_0) \end{aligned} \tag{1.69}$$

在这种近似下，修正后的朗道能级与未受扰动的朗道能级类似，形成一个“等间距阶梯”，每一级的形状为 $V(x_0)$。

边缘附近 x_0 的组合 $U(x)$ 呈现不对称形状，这意味着所得的本征函数 $\phi_{n,\,x_0}(x)$ 不会像式 (1.62) 那样通过 $x-x_0$ 依赖于 x_0，也不会像未扰动朗道态那样围绕 x_0 具有谐振子对称性。这进而意味着，沿边缘的电流密度 $j_y(x)$ 相对于 $x=x_0$ 不会呈现反对称分布，因此这些边缘附近态在 x-y 平面内流动的总电流不会为零。这种电流称为“边缘电流”。它们对应于势垒附近的跳跃经典轨道，在相对的两侧边缘沿相反方向运动，并在解释量子霍尔效应方面发挥重要作用，参见文献 [13]。

让我们表示给定态的能量ϕ_{n,x_0}，使用

$$h_{op}(x_0)\phi_{n,x_0} = \epsilon_n(x_0)\phi_{n,x_0} \quad \rightarrow \quad \epsilon_n(x_0) = \langle\phi_{n,x_0}|h_{op}(x_0)|\phi_{n,x_0}\rangle$$

其中 $h_{op}(x_0)$ 表示式 (1.68) 左侧的哈密顿算符。利用费曼-赫尔曼定理[5] 可得

$$\begin{aligned} \frac{\partial\epsilon_n(x_0)}{\partial x_0} &= \langle\phi_{n,x_0}|\frac{\partial h_{op}}{\partial x_0}|\phi_{n,x_0}\rangle = \\ &= m\omega_c^2\langle\phi_{n,x_0}|(x-x_0)|\phi_{n,x_0}\rangle = m\omega_c^2\int dx(x-x_0)\,\phi_{n,x_0}^2(x) \end{aligned} \tag{1.70}$$

与公式 (1.66)中电流密度 $j_y(x)$的表达式进行比较，并为方便起见忽略 z 方向，我们得到关系式

$$\frac{\partial\epsilon_n(x_0)}{\partial x_0} = \frac{m\omega_c L_y}{e}\, I_y(n,x_0) \tag{1.71}$$

[5]该定理将本征能量相对于某个参数的导数与哈密顿量相对于该参数的导数的期望值联系起来。证明很直接

$$\begin{aligned} \frac{\partial\epsilon_n(x_0)}{\partial x_0} &= \frac{\partial}{\partial x_0}\langle\phi_{n,x_0}|h_{op}(x_0)|\phi_{n,x_0}\rangle = \\ &= \langle\frac{\partial\phi_{n,x_0}}{\partial x_0}|h_{op}(x_0)|\phi_{n,x_0}\rangle + \langle\phi_{n,x_0}|h_{op}(x_0)|\frac{\partial\phi_{n,x_0}}{\partial x_0}\rangle + \langle\phi_{n,x_0}|\frac{\partial h_{op}}{\partial x_0}|\phi_{n,x_0}\rangle = \\ &= \epsilon_n(x_0)\left[\langle\frac{\partial\phi_{n,x_0}}{\partial x_0}|\phi_{n,x_0}\rangle + \langle\phi_{n,x_0}|\frac{\partial\phi_{n,x_0}}{\partial x_0}\rangle\right] + \langle\phi_{n,x_0}|\frac{\partial h_{op}}{\partial x_0}|\phi_{n,x_0}\rangle = \langle\phi_{n,x_0}|\frac{\partial h_{op}}{\partial x_0}|\phi_{n,x_0}\rangle \end{aligned}$$

其中用到了

$$\frac{\partial}{\partial x_0}\langle\phi_{n,x_0}|\phi_{n,x_0}\rangle = 0 = \langle\frac{\partial\phi_{n,x_0}}{\partial x_0}|\phi_{n,x_0}\rangle + \langle\phi_{n,x_0}|\frac{\partial\phi_{n,x_0}}{\partial x_0}\rangle$$

其中 $I_y(n,x_0)$ 是单个粒子在 ψ_{n,x_0} 态中的总电流。参考方程 (1.69)，并结合图1.3 所示的 $V(x)$，可以清楚地看出边缘电流预计出现的位置、大小和方向。

1.6.3 朗道能级的简并与空间对称性

守恒定律总是对称性的结果，而守恒算符 $\hat{}x_0$、$\hat{}y_0$ 和 $\hat{}v_z$ 的存在也不例外。它们与均匀场中运动的基本对称性有关——平移不变性。然而，这种不变性并未在哈密顿量 (1.50) 中明确体现出来，因为将 $\mathbf{r}$ 平移为 $\mathbf{r}+\mathbf{a}$（其中 $\mathbf{a}$ 是任意常矢量）时，哈密顿量会发生变化。我们已经在更简单的均匀电场情形中遇到过类似现象。这里也是如此：若在进行适当平移的同时，施加一个恰当选取的规范变换，哈密顿量 (1.50) 便保持不变。这些守恒量应当是这些组合变换相应的生成元。

为了详细说明这一点，我们注意到，经过适当的平移后，哈密顿量为 (1.50) 的薛定谔方程形式保持不变，但矢势变为$\mathbf{A(r}+\mathbf{a)}$。然而，对于恒定的 **磁场**，差值$\mathbf{A(r}+\mathbf{a)}-\mathbf{A(r)}$ 是一次规范变换，即它是某个标量函数的梯度。只需对无穷小的$\mathbf{a}$ 证明这一点，此时有$\mathbf{A(r}+\mathbf{a)}\approx\mathbf{A(r)}+\mathbf{(a}\cdot\nabla\mathbf{)A(r)}$。最后一项是

$$a_i\partial_i A_j = a_i(\partial_i A_j - \partial_j A_i) + a_i\partial_j A_i = a_i(\epsilon_{ijk}B_k + \partial_j A_i)$$

对于恒定的 **磁场**，它确实是一个梯度

$$\partial_j\alpha \quad \text{with} \quad \alpha = a_i(\epsilon_{ijk}x_j B_k + A_i) = \mathbf{a}\cdot[\mathbf{r}\times\mathbf{B}+\mathbf{A}(\mathbf{r})] \tag{1.72}$$

除了适当的平移之外，还可以通过对波函数进行规范变换，将其从 H_{op} 中消除。因此，对称变换为

$$\psi(\mathbf{r}) \to \left\{1+\frac{ie}{\hbar}\mathbf{a}\cdot[\mathbf{r}\times\mathbf{B}+\mathbf{A}(\mathbf{r})]\right\}(1+i\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}_{op}/\hbar)\psi(\mathbf{r}) \quad (\text{infinitesimal} \quad \mathbf{a}) \,, \tag{1.73}$$

其中，我们使用了无穷小 $\mathbf{a}$ 下的适当平移算符 $\mathbf{exp}(i\mathbf{a}\cdot\mathbf{p}_{op}/\hbar)$，将 $\psi\mathbf{(r}+\mathbf{a)}$ 表示为 $\psi\mathbf{(r)}$ 的形式。

组合变换 (1.73) 才应被称为磁场存在时的平移（有时也使用“磁平移”这一术语）。该变换的生成元可以从将方程 (1.73) 中的括号相乘后得到的 $\mathbf{a}$ 的一次项中读出。它们是

$$\mathbf{p}_{op} + e[\mathbf{A}(\mathbf{r})+\mathbf{r}\times\mathbf{B}] = m\mathbf{v}_{op} + eB(\mathbf{r}\times\mathbf{e}_z) \,. \tag{1.74}$$

沿 z 轴的平移就是 mv_z；而对于沿 x 轴和 y 轴的平移，分别得到以导引中心坐标的算符表示的 $eB\,\hat{}y_0$ 和 $-eB\hat{}x_0$。

现在应该可以直观地理解为什么这些算符不对易了。我们预计，先沿 x 方向、再沿 y 方向平移波函数，所得结果应当不同于按相反顺序进行平移。两者之差应该

与阿哈罗诺夫–玻姆相位有关（其定义见下文第 1.7 节）；该相位由按这两种相反顺序平移过程中所围成的矩形内的磁场磁通量所产生。下面来看具体情况。依次通过无穷小的 Δx 、 Δy 、 $-\Delta x$ 和 $-\Delta y$ 平移波函数，保留平移量 Δx 和 Δy 的二阶项，可得

$$
\begin{aligned}
&(1 - i\Delta y K_y - \frac{1}{2}(\Delta y)^2 K_y^2)(1 - i\Delta x K_x - \frac{1}{2}(\Delta x)^2 K_x^2) \times \\
&\times (1 + i\Delta y K_y - \frac{1}{2}(\Delta y)^2 K_y^2)(1 + i\Delta x K_x - \frac{1}{2}(\Delta x)^2 K_x^2)\psi(\mathbf{r}) = \\
&= (1 + \Delta x \Delta y [K_x\,,\, K_y])\psi(\mathbf{r}) = [1 + 2\pi i(\Delta\Phi/\Phi_0)]\,\psi(\mathbf{r})
\end{aligned}
\tag{1.75}
$$

其中，我们用 $\hbar K_x$ 和 $\hbar K_y$ 表示平移算符（1.74）相应的矢量分量，而 $\Delta\Phi = B\Delta x\Delta y$ – 表示穿过该矩形的磁通量。由于上式中除单位项外第一个非零项是二次项，且与 $\Delta x\Delta y$ 成正比，因此有必要保留每个平移算符中的二次项。

关于变换及其生成元的推广，也可以针对问题的另一种对称性——绕磁场 **磁场** 方向的旋转对称性——进行类似讨论。这个问题留作作业或辅导课讨论。

1.7 阿哈罗诺夫–玻姆效应

1.7.1 局域与非局域规范不变量

我们在第 1.3.3 节强调过，在具有规范场的理论中，所有可观测量都是规范不变的。最简单的此类量或许是电场、磁场和粒子密度 ρ**(r,t)** $= |\psi$**(r** $t)|^2$。在上一节讨论的电流密度表达式中，我们还遇到了一组涉及 ψ 导数的量——组合 ψ^***(r,t)D**ψ**(r,t)**，此外还可以加入它们随时间变化的对应项 ψ^***(r,t)**$D_0\psi$**(r,t)**。由于规范协变导数（1.15）具有简单的变换性质，这些组合是规范不变的。

所有这些不变量的一个显著特征是，它们取决于 ψ,**A** 和 A_0 ，以及它们在同一时空点处的一阶导数，也就是说，它们是局域的。不过，考虑沿空间中某条闭合轮廓取的环流积分 $\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$ 。根据斯托克斯定理，该积分等于穿过此轮廓的**磁场**的磁通量，因此是规范不变的。这就是一个非局域规范不变量的例子。在接下来的章节中，我们将讨论这样的情形：对 $\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$ 的非平凡依赖会导致意想不到的量子力学效应，这些效应统称为阿哈罗诺夫–玻姆效应，参见 [6]。量子理论对非局域规范不变量的敏感性，根源在于量子力学描述本质上的非局域性——能量、角动量等各种物理量的本征值和期望值，取决于系统整个构型空间中波函数的变化情况。

本节最后，我们提到，除了矢量势的环流之外，在某些物理应用中还会出现另一类非局域规范不变量。

这些是以下类型的双点量

$$\psi^*(\mathbf{r}')\exp[i(e/\hbar)\int_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}'}\mathbf{A}(\mathbf{r}'')\cdot d\mathbf{r}'']\psi(\mathbf{r},t)\ .$$

在规范变换下，指数函数和波函数产生的相位因子会相互抵消。场论背景中经常会遇到这类量，近来在某些多体问题中也会遇到。

1.7.2 即使 E =磁场 $=0$ 在闭合轮廓 C 上及其附近为零，量子力学仍"感受到"非零的 $\oint_C\mathbf{A}\cdot d\mathbf{r}$

我们来考虑这样一个空间区域：其中局域不变量 **E** 和**磁场** 为零，但存在一些轮廓，使得 $\oint\mathbf{A}\cdot d\mathbf{r}$ 不为零。一个简单的例子是外部 区域：它位于一根细长管之外，管壁不可穿透，非零磁场集中在管内并沿管轴方向延伸，见图1.4。

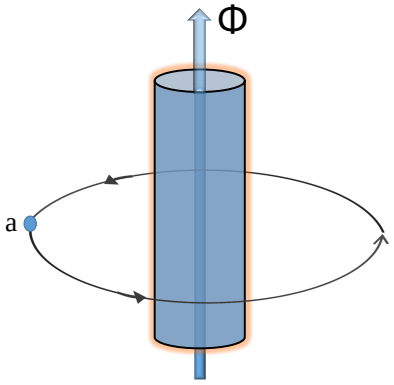


图1.4：阿哈罗诺夫–玻姆磁通 Φ 位于一根不可穿透的管内，以及在该管周围、**E** 和**磁场** 为零的区域中的一条闭合轮廓。沿此类轮廓的非零环流 $\oint_C\mathbf{A}\cdot d\mathbf{r}=\Phi$ 不会影响该区域中带电粒子运动（轨迹）的经典描述，却会在其量子力学（波函数）中产生可观测效应。

非零环流积分 $\oint\mathbf{A}\cdot d\mathbf{r}$ 可由围绕管道缠绕的积分轮廓得到。由于假设**磁场** $=\nabla\times\mathbf{A}=0$ 在管道外，特定轮廓的细节并不重要，重要的只有它围绕管道缠绕的次数以及缠绕的方向。将这个次数记为 n，可以写成

$$\oint_C\mathbf{A}\cdot d\mathbf{r}=n\Phi\ ,\quad n=0,\pm1,... \tag{1.76}$$

这里， Φ 表示管内磁场总磁通量的大小。管外的环流积分只取决于 Φ，而与磁场分布的细节无关。通常将这样的管称为螺线管，并将这种孤立的磁通量 Φ 称为阿哈罗诺夫–玻姆磁通量（简称 AB 磁通量）。

1.7.3 “规范消去”AB 磁通量。对其数值的周期性依赖

经典情况下，粒子在外部区域的自由运动 不受管内磁场存在的影响。乍看之下，在量子力学描述中也可能得出类似结论。事实上，要写出 Schr¨odinger 方程，首先需要确定电磁势。由于外部区域中**磁场** $= \nabla \times \mathbf{A} = 0$，因此$\mathbf{A}$ 必定是某个标量的梯度,

$$\mathbf{A} = \nabla \xi(\mathbf{r}) \tag{1.77}$$

有了这样的$\mathbf{A}$ （以及$\mathbf{E} = 0$），相应的 Schr¨odinger 方程中似乎 n

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla + e\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)^2 \psi$$

可以通过规范变换消去 $e\mathbf{A}$ 项

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi'(\mathbf{r}, t) \exp[-i\frac{e}{\hbar}\xi(\mathbf{r})]$$

with

$$\xi(\mathbf{r}) = \xi_0 + \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}' = \xi_0 + \int_{\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}} \nabla \xi(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'$$

以及 ξ_0 某个常数。

然而，从薛定谔方程中消去 **磁场矢势** 的问题在于，在存在 AB 磁通量 Φ 的情况下，方程 **(1.77)** 中的标量函数 ξ**(r)** 并非单值函数。它是一个多值函数，原因如下。为了得到所需的 AB 磁通量，沿正方向围绕螺线管的闭合曲线 C “连续移动（遍历）”时，函数 ξ**(r)** 必须改变 Φ

$$\Phi = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \oint_C \nabla \xi(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_f} \nabla \xi \cdot d\mathbf{r} = \xi(\mathbf{r}_f) - \xi(\mathbf{r}_i) \quad \text{with } \mathbf{r}_f = \mathbf{r}_i \,. \tag{1.78}$$

因此，在螺线管外部区域的每个$\mathbf{r}$ 处，函数 ξ**(r)** 都有许多（无穷多个）值，它们相差 $n\Phi$ 乘以（正或负）整数 n。

由此，变换后的 ψ'**(r** t**)**,

$$\psi'(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, t) \exp[i\frac{e}{\hbar}\xi(\mathbf{r})]$$

也将是多值的——其相位将改变

$$\Delta\xi = \frac{e}{\hbar}\Phi = 2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0} \tag{1.79}$$

当沿螺线管“连续取值”时。

为了理解对波函数这种特定多值性的要求会产生什么结果，让我们来看一个角动量的具体例子。假设 ˆ z 轴沿着螺线管，且其 z 分量为 L_z，我们得到它的本征函数。

$$\hat{L}_z\psi(\phi) = \hbar\nu\psi(\phi) \quad \rightarrow \quad \psi(\phi) = const\, e^{i\nu\phi}$$

通常情况下，即不存在 AB 磁通量时，我们施加条件 $\psi(\phi+2n\pi)$ $=$ ψ ψ (*ϕ*)，即 (*ϕ*) 的单值性条件，这会导出通常的整数型量子化

$$\nu = M \ , \ M = 0, \pm 1. \pm 2, ...$$

对于多值函数条件式（1.79），我们有

$$\begin{aligned} e^{i\nu(\phi+2n\pi)} =& e^{i\nu\phi}e^{i2\pi n\Phi/\Phi_0} \rightarrow 2n\pi(\nu - \Phi/\Phi_0) = 2n\pi M \rightarrow \\ \rightarrow\ & \nu = M + \Phi/\Phi_0 \end{aligned} \tag{1.80}$$

这表明，尽管我们将矢势$\mathbf{A} \ = \nabla\xi$ “规范化消去”，其规范不变内容，即式 (1.78)中的AB磁通量 Φ，只要不为零，就会通过由此产生的多值波函数条件（式 (1.79)）改变物理性质。我们将在下文看到，这种修改（并不令人意外）与采用这样的矢势直接求解所得的结果完全相同。

作为一项重要的补充观察，我们注意到，当 $\Phi = n\Phi_0$ 时，不会产生任何效应！变换后的 ψ' 仍然是单值的，因此这样的阿哈罗诺夫–玻姆磁通量从“外部”不可观测。这一观察或许是多值波函数表述的优势之一。这也意味着，阿哈罗诺夫–玻姆效应对阿哈罗诺夫–玻姆磁通量大小 Φ 的依赖具有周期性，周期为磁通量子 Φ_0。从本征值 ν 对 Φ的依赖关系（式 (1.80)）中可以看出这一点。它们以 Φ_0为周期，从整数变为非整数。我们还将在下一节讨论的例子中看到这种周期性，并在第 1.7.5 节提供一个更一般的视角。

另一个重要的观察如下。将阿哈罗诺夫–玻姆效应视为波函数绕螺线管一周时自身重复条件的改变，这强调了波函数必须延伸至螺线管周围的整个区域，才能“感受到”这种改变。否则，阿哈罗诺夫–玻姆磁通量将不会产生任何可观测的后果。下面我们将考虑这样一个例子：一个被阿哈罗诺夫–玻姆磁通量穿过的环，其中的粒子局限在环的一个有限扇区内。在这种情况下不存在阿哈罗诺夫–玻姆效应。

1.7.4 Example of the AB flux

假设带有AB磁通量 Φ 的螺线管沿 z轴放置。螺线管外部矢势的一种可能的简单选择是

$$\mathbf{A} = \nabla\xi(\mathbf{r}) \ , \ \text{with} \ \ \xi(\mathbf{r}) = \frac{\Phi}{2\pi}\arctan(y/x) \equiv \frac{\Phi}{2\pi}\phi \tag{1.81}$$

其中 ϕ 是方位角。回顾圆柱坐标中梯度的表达式 r, ϕ, z

$$\nabla = \mathbf{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{e}_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

可得

$$A_\phi = \frac{\Phi}{2\pi r} \;\; ; \;\; A_r = A_z = 0 \tag{1.82}$$

a因此在一沿圆形路径、位于螺线管外部的环流积分
垂直于螺线管的平

$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \int_0^{2\pi} A_\phi \, r d\phi = \Phi$$

由于 $\nabla \times$ **矢势** $=$ **磁场** $= 0$ 在螺线管外部为零，只要新路径具有“相同的拓扑”——即以相同方向环绕磁通量一次，就可以变形上述圆形路径，而不改变积分。还可以通过给 ξ 添加一个单值函数，来改变式 (1.81) 中特定的**矢势**，而不影响螺线管外部的**磁场** $= 0$ 或环流积分 $\oint$**矢势** $\cdot d\mathbf{r}$。我们注意到，外部矢势对磁场的依赖是通过磁通量 Φ 体现的，与螺线管内部**磁场**的具体径向分布无关。

为了方便地举例说明 AB 磁通量，可以考虑**磁场** $= B(r)\mathbf{e}_z$，其内部磁场 B 为常量，外部磁场为零。对于这个磁场，我们可以对所有 r 写出:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= (Br/2)\, \mathbf{e}_\phi \qquad \text{inside the solenoid}, \\ \mathbf{A} &= (Br_0^2)/2r\, \mathbf{e}_\phi = \frac{\Phi}{2\pi r} \mathbf{e}_\phi \quad \text{outside the solenoid}, \end{aligned} \tag{1.83}$$

其中 r_0 是螺线管的半径。由于 $\Phi = B(\pi r_0^2)$，外部区域的这个表达式与式 (1.81) 相同。

哈密顿量与谱

在 AB 磁通量外部，含有式 (1.82) 中矢势的哈密顿量在柱坐标中形式简单。利用$\mathbf{p} = p_r\mathbf{e}_r + p_\phi \mathbf{e}_\phi + p_z \mathbf{e}_z$ 和$\mathbf{A} = A_\phi \mathbf{e}^\phi$，可得:

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{1}{2m} \left(p_\phi + eA_\phi\right)^2 + \frac{p_z^2}{2m} + U(r) \, , \tag{1.84}$$

这里我们忽略了自旋自由度，并加入了 U(r)——用于描述螺线管不可穿透的壁的势。请注意，在这里的记号中，p_ϕ 是$\mathbf{p}$ 在$\mathbf{e}^\phi$ 上的投影，并且与角动量的 z 分量有关，关系如下:

$$(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z = r p_\phi = L_z$$

与不存在磁通量的情况相比，哈密顿量 (1.84) 由于离心项中势 A_ϕ 的存在而发生了修改，该离心项取决于以下组合

$$p_\phi + eA_\phi = \frac{1}{r}(L_z + eBr_0^2/2) = \frac{1}{r}(L_z + e\Phi/2\pi)$$

在经典力学中，可以将常数 $e\Phi/2\pi$ 吸收到 L_z 中，并从运动方程中完全消除 A_ϕ 。然而，在量子力学中，这种自由度并不存在，因为 L_z 会变成算符 $L_z = -i\hbar\,\partial/\partial\phi$ ，其具有离散本征值$\hbar M$ （M –整数）。本征值的选取遵循以下要求：波函数必须是单值的，这一要求施加了周期性边界条件

$$\psi(r,\phi,z) = \psi(r,\phi+2\pi,z).$$

$p_\phi + eA_\phi$表达式中角向部分的本征值 $L_z + e\Phi/2\pi$因此 re

$$\hbar(M + e\Phi/2\pi\hbar) \equiv \hbar(M + \Phi/\Phi_0) \ , \ \Phi_0 = h/e$$

这与我们在讨论 t 的影响时从公式 (1.80) 中得到的结果相同 he
规范变换消去矢势后得到的多值波函数条件 .

在 Schr¨odinger 方程 $H_{op}\psi = E\psi$ 中，可以分离出 z 部分并使用

$$\psi(r,\phi) = R(r)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{iM\phi}$$

将方程的径向部分写成

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2(M+\Phi/\Phi_0)^2}{2mr^2} + U(r)\right] R(r) = \varepsilon\, R(r)$$

以及 ε 总能量中相应的部分 E。

上述势能离心部分的谱的变化，正是本例中阿哈罗诺夫–玻姆效应的体现。经典上不可观测的、位于不可穿透螺线管内部的磁通量，在以量子力学处理该问题时，会在外部区域产生可观测的效应。其对磁通量大小 Φ 的依赖呈周期性，周期为磁通量子 Φ_0 。

细环解

我们来看看，在细环的一个简单模型中这种情况是如何发生的。为构造这个模型，我们在哈密顿量（1.84）中加入一个势能 $V(r,\ z)$，将 r 和z 方向上的运动限制在一个极窄的环形区域内。最简单的选择是令 $V(r,\ z)$在$|r-a| \le b$、 $|z| \le b$ 时为零，其他情况下为无穷大。这样就得到一个厚度为 b 、半径为 a的环，位于 $z=0$ 平面内。当 b 非常小时，（1.84）第二项中的径向坐标可取为固定半径 a ，而方位角方向上的运动则与 r解耦。这种运动的哈密顿量就是

$$H_\phi = \frac{1}{2ma^2}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{e\Phi}{2\pi}\right)^2 \tag{1.85}$$

与本征函数

$$\psi_M(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\ \exp(iM\phi) \ , \ M = 0, \pm1, \pm2, ...$$

以及相应的本征值

$$E_M = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\left(M + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 \ . \tag{1.86}$$

在此近似下，沿 r 和 z 方向的运动能量与 Φ 无关，我们将不对此加以讨论。

在图1.5中，我们绘出了能级随磁通量变化的关系，显示出阿哈罗诺夫–玻姆效应的 Φ_0 周期性。这里不再重复相关分析：如果作用在环上粒子的弱附加势为 $V(\phi)$，能级的变化将遵循图1.5中实线所示的模式，并保持相同的周期性，参见文献[12]。

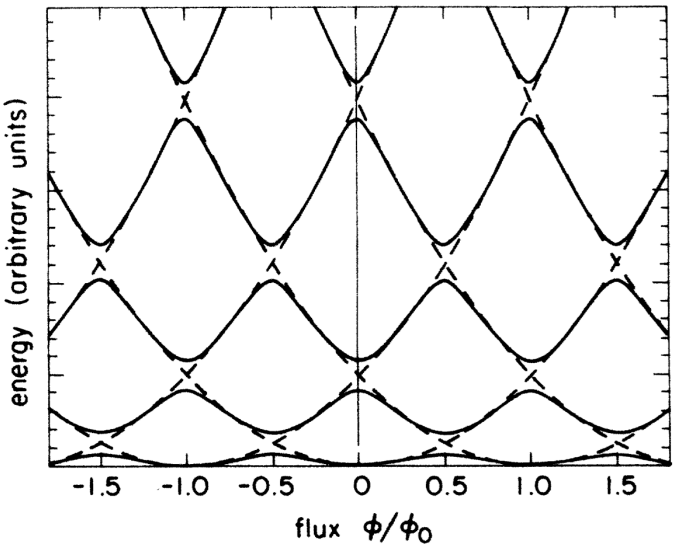


图1.5：一维环中电子能级随磁通量Φ/Φ_0 变化的示意图，该环环绕着磁通量，参见文献[12]。实线和虚线分别表示环上作用有弱附加势 $V(\phi)$的环，以及没有该弱附加势作用的环；该势作用于环上的粒子，参见文献[12]。

现在考虑势 $V(\phi)$ 很强的情形，强到粒子局限在环的一个有限区段内，而不像式 (1.85) 那样沿环的整个圆周自由运动。一个简单的这类势 $V(\phi)$ 是势“阱” $V(\phi) = 0$ ，在 $0 < \phi < \phi_0 < 2\pi$ 内成立，在该区间之外则为无穷大。这种情况下，本征函数除了势为零的区间外均为零；在该区间内，本征函数很容易求得：

$$\psi_n(\phi) = \sqrt{\frac{2}{\phi_0}} \exp\left[i\frac{\Phi}{\Phi_0}\,\phi\right] \sin\left(\frac{\pi n \phi}{\phi_0}\right) \quad , \quad n = 1, 2, 3, ... \tag{1.87}$$

磁通量的影响体现在这些函数的相位中，但相应的本征能量完全不依赖于它，

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2\phi_0^2}\,. \tag{1.88}$$

在图1.5中，它们将由水平直线表示，给出上述所提及的一般周期性依赖于 Φ 的一个平凡极限情形。在这里，我们有一个例子：本征函数在环的一部分上的局域化导致阿哈罗诺夫–玻姆效应的消-失（依赖于 Φ的相位对所有解都相同，因此在这种情况下是不可观测的）。正如我们已经强调的，为了对阿哈罗诺夫–玻姆磁通量具有敏感性，波函数必须有一条延伸至磁通量周围一整圈的“尾巴”。

AB磁通量引起的量子干涉与散射中的AB效应

这里我们将简要讨论 AB 效应的另外两种表现形式。

双缝与阿哈罗诺夫–玻姆磁通

认识到阿哈罗诺夫–玻姆磁通量会改变波函数的相位后，我们便可以直观地将阿哈罗诺夫–玻姆效应描述为：量子力学波在螺线管两侧传播时，其干涉发生了变化。让我们考虑图1.6所示的经典双缝实验。

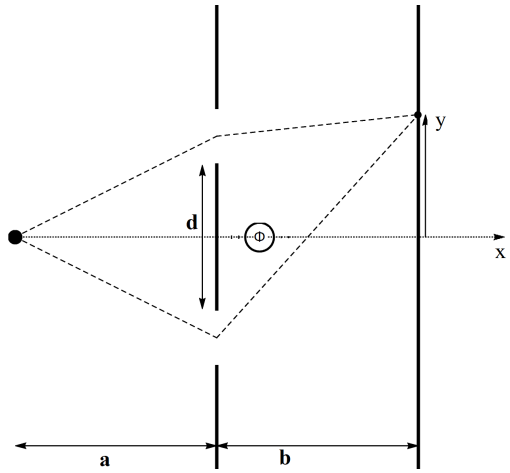


图1.6：阿哈罗诺夫–玻姆磁通存在时的双缝干涉 Φ

电子从点源穿过带有2条狭窄狭缝的墙，并落在其后方的屏幕上，参见文献 [8]。只要未探测到电子通过的是哪条狭缝，它们就会根据经由每条狭缝的路径之间的相位差产生干涉图样。

I如果阿哈罗诺夫–玻姆螺线管被放置在狭缝之间的墙后，这个相位

差将改变相应的量

$$\Delta\beta = \frac{e}{\hbar}\left(\int_1 \mathbf{A}\cdot d\mathbf{r} - \int_2 \mathbf{A}\cdot d\mathbf{r}\right) = \frac{e}{\hbar}\oint \mathbf{A}\cdot d\mathbf{r} = \frac{2\pi\Phi}{\Phi_0} \tag{1.89}$$

其中，与前面一样， Φ 是穿过螺线管的磁通量，下标 1 和 2 表示沿图1.6中两条轨迹的积分。对于屏幕上的位置 y （从屏幕中心量起），在没有螺线管时，来自两个狭缝的波之间的相位差为 $\beta = k\Delta L$ 其中 $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ 是波数， ΔL 是波从狭缝传播到屏幕所经过路径的差值。

对于狭缝到屏幕的距离 b ，以及对于 $y, d << b$ ，可以近似为$\Delta L = (y/b)d$ ，其中d是狭缝之间的距离。因此，在 $y = (\beta/kd)b$处将得到给定的相位差β 。由阿哈罗诺夫–玻姆磁通量引起的额外相位差 $\Delta\beta$ 将导致干涉图样发生偏移，偏移量为

$$\Delta y = \frac{\Delta\beta}{kd}b = \frac{2\pi b}{kd}\frac{\Phi}{\Phi_0} \tag{1.90}$$

AB 磁通量散射

另一种理解从螺线管两侧通过的波之间相位差的方法，是考虑平面波从螺线管上的散射。阿哈罗诺夫和玻姆的原始论文（文献 [6]）中讨论了这一问题。对于磁通量为零的情况，可以得到这样一个标准图像：从螺线管散射出的柱面波与初始平面波叠加，其振幅按 r^{-1} 衰减。对于非零的 Φ ，在螺线管“下游”区域以及远离螺线管处，波前形成两个彼此错开的平直波前；这种错开沿着从螺线管向初始平面波传播方向延伸的直线，呈现出突然而几乎不连续的变化。错开的大小由相位差$2\pi\Phi/\Phi_0$ 除以波数 k给出。有关这一讨论的细节，请参阅文献 [6] 。

1.7.5 多连通区域。同伦

上面示例中所得结果的某些特征具有相当普遍的性质。在任何 $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{B}$ 均为零的区域内，方程 (1.2) 表明，矢势必须是某个（与时间无关的）函数的梯度，$\mathbf{A(r)} = \nabla\xi\mathbf{(r)}$，并且 $A_0 = const$。积分 $\int \mathbf{A}\cdot d\mathbf{r} = \int \nabla\xi\cdot d\mathbf{r}$ 等于积分轮廓的起点和终点处 ξ 的值之差，因此对于闭合轮廓，积分必定为零，除非 (a) 函数 ξ 是多值的，并且 (b) 轮廓使 ξ 从它的一个分支转到另一个分支。这在单连通区域中不可能发生，也就是说，在这种区域中，所有闭合轮廓都可以收缩到一个点。由于对积分 $\oint \nabla\xi\cdot d\mathbf{r}$ 中的轮廓进行连续形变不会改变其值，因此所有可收缩轮廓对应的此类积分都为零。换言之，像 $\xi\mathbf{(r)}$ 这样的正则函数在单连通区域中必定是单值的。

然而，我们来考虑多连通区域。这类区域中存在一些闭合轮廓，若不穿越边界，就无法将它们收缩为一点。上文讨论过的不可穿透螺线管和环就是这类区域的例子。围绕螺线管“管体”或环“孔洞”的轮廓无法收缩为零。对于这类轮廓，预期其环流积分 $\int \mathbf{A}\cdot d\mathbf{r}$ 不为零；实际上，当排除区域中存在磁通量时，确实会出现这种情况。顺便指出，并非所有形状的排除区域都会导致不可收缩轮廓的存在。例如，球形的排除空腔就不会。它的存在会产生不可收缩的闭合曲面，但不会产生曲线，这与诸如散度为零的矢量场具有非零曲面积分等问题有关。

在多重连通区域中，所有可能的闭曲线都可以划分为若干类，每一类中的曲线都可以彼此连续收缩。这些类别称为曲线的同伦类，参见 [8]。在所有同伦类中，可以定义一组完备的基本曲线类 C_k ，其他所有非基本类都可以通过多次沿基本类中的曲线遍历而得到。对于螺线管，有一个基本曲线类是沿顺时针方向环绕螺线管一周，另一个则是沿逆时针方向环绕一周。显然， ξ沿每个基本类中的闭曲线所产生的变化必须相同，因为这些曲线可以彼此连续变形。然而，对于不同的基本类，变化通常会有所不同，这反映了穿过不同排除区域的阿哈罗诺夫–玻姆磁通量可能不同，也可能符号相反。

通常会有所不同，这反映了穿过不同排除区域的阿哈罗诺夫–玻姆磁通量可能取不同值，或符号相反。

让我们将这些考虑应用于多重连通无场区域中的带电粒子一般系统，参见文献 [9]。其薛定谔方程为

$$H[\mathbf{p}_a - q_a\mathbf{A}(\mathbf{r}_a),\ \mathbf{r}_a]\psi(\{\mathbf{r}_a\}) = E\psi(\{\mathbf{r}_a\}) \tag{1.91}$$

其中我们假设一般的哈密顿量取决于带电荷 $q_a,\ a = 1, 2, ..., N$ 的粒子的动量 $\mathbf{p}_a = -i\hbar\nabla_a$ 和坐标 $\mathbf{r}_a$。由于在无场区域，矢势 $\mathbf{A}$ 是“纯规范”，$\mathbf{A} = \nabla\xi$，我们可以进行一次规范变换。

$$\psi(\{\mathbf{r}_a\}) = \exp[i\sum_{a=1}^{N} q_a\xi(\mathbf{r}_a)/\hbar]\psi'(\{\mathbf{r}_a\}) \tag{1.92}$$

并发现 ψ' 满足

$$H[\mathbf{p}_a, \mathbf{r}_a]\psi'(\{\mathbf{r}_a\}) = E\psi'(\{\mathbf{r}_a\}) \tag{1.93}$$

其中势$\mathbf{A}$ 已被“规范变换消去”。由于 ψ 是单值的，并且绕任意一条基本不可缩的闭合曲线 C_k 一周会使ξ 增加相应的阿哈罗诺夫–玻姆磁通量 $\Phi_k = \oint_{C_k}\mathbf{A}\cdot d\mathbf{r}$，因此我们必须要求，当粒子 a 被带着绕C_k一周时，$\psi'(\{\mathbf{r}_a\})$乘以因子$\exp(-iq_a\Phi_k/\hbar)$。因此，边界条件不同于磁通量为零的情形，并且应当预期能级将取决于 Φ_k的值。由于所有粒子的电荷都是基本电子电荷 e 的倍数，对于相差磁通量子 Φ_0整数倍的磁通量 Φ_k，边界条件的变化是相同的。因此，这种周期性应当出现在解 ψ' 中，从而也应当出现在由式（1.92）得到的能级集合中。因此，由该集合确定的物理量必定表现出这种周期性。这一结论以及前述论证的全部内容都非常普遍，仅仅基于规范不变性的基本原理、波函数单值性的要求以及电荷 e的基本性质。

1.8 磁矩

1.8.1 g因子

现在我们回到关系式 (1.10)，它描述了磁矩与自旋算符之间的关系。通常将粒子磁矩的数值记为其投影的最大值，即 $s_z = s$ 对应的值 $\mu_z = g(q/2mc)s_z$。本节将讨论该关系式中的无量纲旋磁比 g，它称为 g因子。

对于基本粒子，g 由相对论量子力学波动方程决定。例如，对于电子，狄拉克方程给出 $g = 2$，即经典值的两倍。与轨道角动量或复合粒子的自旋不同，基本粒子的自旋值是固定的，因此其磁矩也是固定的，并且

必须将其视为粒子的特征之一，就像粒子的电荷、质量等一样。电子磁矩（自旋 1/2）在很好的近似下可用狄拉克值 [6] 表示

$$\mu_0 = \frac{|\, e \,|\, \hbar}{2mc} \,. \tag{1.94}$$

这个量称为玻尔磁子，在原子物理学中作为测量磁矩的便捷单位。其数值为 $5.79 \cdot 10^{-9}$ eV/高斯。

在核物理学中，更合适的单位是核磁子，其定义与（1.94）相同，但其中的质量采用质子的质量，并用于 m。实验测得质子的磁矩为2.793个核磁子，这意味着其g因子为5.586。对于中子，相应的数值分别为–1.913和–3.826。这些g因子与相应狄拉克值 $g = 2$ 和 $g = 0$ 的偏离，是质子和中子并非基本粒子，而是复合粒子的最初实验迹象之一。一般而言，计算复合粒子的g因子需要了解其内禀动力学，即基本组分的波函数、自旋等。下面我们将讨论此类计算的示例。

1.8.2 磁场中的原子

哈密顿量

考虑置于均匀磁场中的原子。假设重原子核固定，原子中的电子由哈密顿量[7]描述

$$H = \frac{1}{2m}\sum_a \Big(\mathbf{p}_a + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_a)\Big)^2 + U(\mathbf{r}_a) + \frac{e}{mc}\mathbf{B}\cdot\sum_a \mathbf{s}_a \,, \tag{1.95}$$

其中，我们用 $\mathbf{r}_a$ 、$\mathbf{p}_a$ 和$\mathbf{s}_a$ 表示电子的坐标、动量和自旋算符，并在 $U(\mathbf{r}_a)$ 中纳入了电子与原子核之间的相互作用，以及电子彼此之间的库仑相互作用。我们对电子使用了 $q = -e$ ，并为简便起见忽略了原子核自旋。

选择形如 $\mathbf{A} = (\mathbf{r} \times \text{磁场})/2$ 的矢势，其中 $\nabla\cdot\mathbf{A} = 0$，我们可以将哈密顿量写成如下形式

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \frac{e}{2mc}\mathbf{B}\cdot\sum_a(\mathbf{r}_a\times\mathbf{p}_a) + \frac{e^2}{8mc^2}\sum_a(\mathbf{B}\times\mathbf{r}_a)^2 + \frac{e}{mc}\mathbf{B}\cdot\sum_a\mathbf{s}_a \qquad (1.96)\\ &= H_0 + \mu_0(\mathbf{L}+2\mathbf{S})\cdot\mathbf{B} + \frac{e^2}{8mc^2}\sum_a(\mathbf{B}\times\mathbf{r}_a)^2 \,, \qquad (1.97)\end{aligned}$$

其中 H_0 是无磁场时的哈密顿量， μ_0 是玻尔磁子，并且我们使用了表达式 $\mathbf{L} = \sum_a(\mathbf{r}_a \times \mathbf{p}_a)$ 和 $\mathbf{S} = \sum_a \mathbf{s}_a$，分别表示总轨道角动量

[6]量子电动力学能够通过与周围虚光子和电子–正电子对云的相互作用效应，非常精确地描述相对于该值的小偏差。[7]在本节及以下各节中，我们使用厘米-克-秒制单位

动量和自旋。 H 其中依赖于磁场的项可以写为 $-\boldsymbol{\mu}\cdot$**磁场**，其中磁矩的算符

$$\boldsymbol{\mu} = -\mu_0(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) + \frac{e^2}{8mc^2}\sum_a [\mathbf{r}_a^2\mathbf{B} - \mathbf{r}_a(\mathbf{r}_a \cdot \mathbf{B})] \,. \tag{1.98}$$

该表达式中的第一项与**磁场**无关，可以视为原子在没有外场时就存在的内禀磁矩算符。它是轨道角动量贡献与自旋贡献之和，后者的系数是前者的两倍。至关重要的是，由于自旋 g因子的狄拉克值不符合经典值，内禀磁矩并不平行于系统的总角动量$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$。我们很快就会看到，这正是原子 g因子通常不具有普适的经典值 $g = 1$，而是取决于原子态的主要原因。

$\boldsymbol{\mu}$ 中的第二项取决于**磁场**，必须视为由磁场诱导的磁矩算符。其大小 –($e^2/8m^2c^2$) $\sum_j I_{ij}B_j$与转动惯量 $I_{ij} = \sum_a m(r_{a,\ i}r_{a,\ j} - \delta_{ij}\mathbf{r}_a^2)$ 成正比，这是拉莫尔定理的体现之一。

微扰处理依赖磁场的项。LS 耦合与 jj 耦合

即使已知不存在磁场时的解，也无法对哈密顿量 (1.97) 进行精确对角化。处理这个问题的标准方法是针对依赖磁场的项使用微扰理论。我们先从 (1.97) 中的线性项入手。由于旋转对称性，原子的态由$\mathbf{J}^2$ 的本征值 $J(J+1)$ 表征；当 J 非零时，这些态构成简并态多重态，可用J的某个投影来标记。因此，必须使用简并微扰理论，并在每个多重态的子空间内，对微扰 $H_1 = \mu_0(\mathbf{L} + 2\mathbf{S})\cdot$**磁场** 进行最低阶对角化。磁场打破了旋转对称性，消除了多重态简并。绕**磁场** 方向旋转所保留的轴对称性表明，在每个简并态多重态内，能对角化 H_1 的正确组合是**J** 在**磁场**方向上的投影本征态。这些态相对于未受扰值的能量位移，正好等于 H_1 的期望值，

$$\Delta E = \mu_0 B < \alpha; J, M|L_z + 2S_z|\alpha; J, M >= \mu_0 B < \alpha; J, M|J_z + S_z|\alpha; J, M > , \tag{1.99}$$

其中，我们选择 z轴 沿着**磁场** 的方向，并将 α 记作除 J 及其投影 M 之外的附加量子数，这些量子数是确定原子态所必需的。

根据维格纳–埃卡特定理，参见参考文献 [11], ，任意矢量算符的某个分量在具有给定 J的多重态的态之间的矩阵元，与算符**J** 的同一分量的相同矩阵元成正比，其中比例常数与 M 无关。因此我们可以写成

$$\Delta E = \mu_0 g_{\alpha,J} B < \alpha; J, M|J_z|\alpha; J, M >= \mu_0 g_{\alpha,J} BM \,, \tag{1.100}$$

其中，尚未确定的比例常数$g_{\alpha,J}$ 显然代表该原子态的 g 因子。求出$g_{\alpha,J}$ 的显式表达式，需要关于 $|\alpha, J, M>$结构的进一步信息，并且只能在某些极限情况下完成。

如果原子中的相互作用是普通的库仑力，那么总轨道角动量、自旋角动量及其投影 M_L 和 M_S 将分别守恒；在这种情况下

$$\Delta E = \mu_0 B(M_L + M_S)\,. \tag{1.101}$$

然而，实际上，相对论效应十分重要，并会导致原子能级出现所谓的精细结构。主要的相对论效应是在原子哈密顿量 H_0 中存在自旋—轨道项 $\sum_a V_{so}(|\mathbf{r}_a|)\,\mathbf{l}_a\cdot\mathbf{s}_a$，其中 $V_{so}(r)$ 正比于 r^{-1}乘以原子势 $-Ze^2/r$对 r 的导数。当这一项相对较弱时（大多数原子态都是如此），可以将其作为微扰处理，并在每个由给定 L 和 S 的 $(2L+1)(2S+1)$ 态构成的简并多重态内单独对角化。

结果就是所谓的多重态精细分裂，即分裂为彼此靠近、且具有确定 J 值的态。在微扰处理的零阶近似下，这些态是未扰动波函数的线性组合，它们具有相同的 L 和 S 值，但 M_L 和 M_S 值不同。形式上，这些零阶原子态写作

$$|n; L, S; J, M>=\sum_{M_L+M_S=M} < L, M_L; S, M_S|L, S; J, M > |n, L, M_L > |S, M_S >$$

并称为“LS –耦合”方案中的态。在这里， n 表示轨道运动的其余量子数，而求和中的系数是耦合两个角动量时所用的标准克莱布施–戈尔丹系数。

在强自旋—轨道相互作用的另一种极端情况下，不能再谈论轨道角动量和自旋角动量的分别守恒。必须用电子的总角动量j来表征单个电子，并将它们组合起来得到总角动量J。这样构造零阶波函数的方案称为“jj耦合”。这种极限情况在原子中很少见，但在核谱学中发挥着核心作用。

朗德公式

对于具有 LS 耦合的态，可以推导出一种称为朗德公式的 g因子通用表达式，

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}\,. \tag{1.102}$$

这是如下得到的。如前所述，维格纳–埃卡特定理给出

$$<\mathbf{S}>= const\cdot <\mathbf{J}> \tag{1.103}$$

其中我们用尖括号表示相对于态 $|n;\ L,\ S;\ J,\ M>$的平均值。由于算符 $\mathbf{J}$ 与$\mathbf{L}$ 和 $\mathbf{S}$ 对易，它不会改变该态的量子数，因此我们可以写成

$$<\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}>= const <\mathbf{J}\cdot\mathbf{J}>$$

使用相同的常数。利用 $<\mathbf{J}\cdot\mathbf{J}>=J(J+1)$ 可得

$$<S_z>=const\ M=M\frac{<\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}>}{J(J+1)} \tag{1.104}$$

利用$\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}=(\mathbf{J}-\mathbf{S})^2=\mathbf{J}\cdot\mathbf{J}+\mathbf{S}\cdot\mathbf{S}-2\mathbf{J}\cdot\mathbf{S}$ 以及 LS 耦合态的性质，我们可以得出

$$<\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}>=\frac{1}{2}[J(J+1)-L(L+1)+S(S+1)] \tag{1.105}$$

汇总式 (1.99) 中的结果可知， ΔE 具有形式 (1.100)，其中 $g_{\alpha,J}$由朗德表达式 (1.102) 给出。与微扰理论的结果通常一样，该公式在 ΔE 相较于未受扰动的原子能级之间的间隔较小时才成立。在本例中，这些间隔由精细结构分裂造成。

1.8.3 塞曼效应

原子能级在磁场中分裂的普遍现象称为塞曼效应。朗德公式在 $S=0$的情况下给出经典值 $g=1$，而在 $L=0$时给出狄拉克值 $g=2$。历史上，测得的 g 偏离经典值 1 的现象被称为反常塞曼效应。当磁场非常强，以至于 $\mu_0 B$ 大于精细结构的间隔时，能量分裂 ΔE 会偏离朗德公式的预测。这称为帕邢 - 巴克效应。我们不讨论其细节。

现在让我们转向哈密顿量 (1.97)中的最后一项，该项为二次型，正如我们已经提到的，它描述了感生磁矩与场 **磁场**的相互作用。这种相互作用有时被称为抗磁相互作用，以区别于称为顺磁相互作用的线性项。这两项的相对大小可以估计为 $(e/\hbar c)$ $r^2B\sim 4\cdot 10^6(r/\mathrm{cm})^2 B/Gauss$，由此可知，对于实验室中的典型磁场，当r具有原子尺度时，抗磁项可以忽略。然而，当原子态具有零自旋和轨道角动量($L=S=0$) 时，线性项在微扰的任何阶数下都不会影响能级，因为它的矩阵元为零。在这种情况下，全部效应由二次型项决定。在微扰理论的一阶中，相应的能量位移为

$$\Delta E=\frac{e^2}{8mc^2}\sum_a <(\mathbf{r}_a\times\mathbf{B})^2>, \tag{1.106}$$

其中平均是相对于具有 $\mathrm{L}=\mathrm{S}=0$ 的（非简并）态而言的。由于$<$ (**磁场**)$^2>=B^2<r_a^2\sin^2\theta_a>$，并且具有$\mathrm{L}=\mathrm{S}=0$的态的波函数是球对称的，因此可以先对角度取平均，得到 $<$ (**磁场**)$^2>=2B^2<r_a^2>/3$，其中我们使用了

$$<\sin^2\theta_a>=\int \sin^2\theta_a\ 2\pi\cos\theta_a\ d\theta_a/4\pi=2/3$$

因此

$$\Delta E = \frac{e^2}{12mc^2} B^2 \sum_a < r_a^2 > \tag{1.107}$$

考虑到一般表达式 $-\boldsymbol{\mu}\cdot$**磁场**，我们可以看到，在这种情况下，感生磁矩随场的变化为负，这意味着该态具有抗磁性。

1.9 磁场中的时间反演。克拉默斯简并

在没有磁场且对于无自旋粒子的情况下，具有与时间无关的哈密顿量的薛定谔方程在进行替换 $t \to -t$ 时保持不变，前提是同时改变 $\psi \to \psi^*$。人们采用

$$\psi(\mathbf{r},\mathrm{t}) \to T\psi(\mathbf{r},\mathrm{t}) \equiv \psi^*(\mathbf{r},-t) \tag{1.108}$$

作为此情况下时间反演变换的定义。磁场和粒子自旋需要对该定义进行修改。由于磁场也作用于自旋变量，因此将它们放在一起讨论是自然的。

即使是静态磁场也会破坏时间反演对称性。这在经典物理学中早已为人所知。对于任意静态$\mathbf{E}$，只要$\mathbf{B}=0$，运动方程 **(1.4)** 就具有时间反演不变性。对于非零的**B(r)**，这种对称性不再成立；但可以发现，若在 t 变号的同时也将磁场变号，方程仍保持原来的形式。因此，在给定的**E(r)** 和**B(r)** 中得到的所有解**r(**t**)**，都必须在相关问题中有对应的“伙伴”解**r(**$-t$**)**，其场为**E(r)** 和 $-$**B(r)**。当然，必须确保为相关解正确定义匹配的初始条件，也就是说，施加时间反演后的初始速度。很容易理解为什么**B**的符号必须反转——这与麦克斯韦方程相一致，麦克斯韦方程将**B**与外部电流联系起来，而电流在时间反演下会改变方向。类似的论证也清楚地表明，为什么**E** 应保持不变。

现在让我们转向静态电磁场中的量子力学。首先注意，同时改变 t 和 **磁场** 的符号而不改变 **E**，仅意味着 **A** $\to -$**A** 以及 $t \to -t$。在薛定谔方程 **(1.12)** 中还对 ψ**(r** t**)** $\to \psi^*$**(r** $-t$**)** 作变换后，我们看到，这种组合变换使方程中的所有项保持不变，除了最后的自旋相关项，它变为 ge**磁场** $\cdot\mathbf{s}^*\psi^*/2mc$，而不是 $-ge$**磁场** $\cdot\,\mathbf{s}\psi^*/2mc$。类比轨道角动量，需要反转自旋算符的符号，而复共轭无法做到这一点。事实上，回想一下自旋算符用泡利矩阵表示的标准形式，

$$s_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad s_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad s_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

可以看出，（在这个特定的表示中，其中 s_z 是对角的）复共轭只会导致$s_x^* = s_x$、$s_y^* = -s_y$ 和$s_z = s_z^*$。因此还必须同时

进行复共轭，并改变 s_x 和 s_z 的符号，同时保持 s_y不变。这可以通过在自旋变量的“空间”中绕y轴旋转角度 π 来实现。由于**s** 是该空间中无穷小旋转的算符，因此这种旋转可由算符$\exp[i\pi s_y/\hbar]$实现。据此，我们将带自旋粒子的波函数的时间反演变换推广为

$$\psi(\mathbf{r},\mathrm{t}) \to T\psi(\mathbf{r},\mathrm{t}) \equiv \exp[i\pi s_y/\hbar]\psi^*(\mathbf{r},-t)\,, \tag{1.109}$$

这必须通过在磁场存在时对**A** 和**磁场**的符号进行改变来补充。当然，现在方程**(1.12)**中的所有项都将正确地变换。我们注意到，变换**(1.109)**（以及不完整的**(1.108)**）是反线性的，即 $T(\alpha\psi_1+\beta\psi_2) = \alpha^*T\psi_1+\beta^*T\psi_2$，并且是反幺正的，即 $<T\psi|T\phi>=<\psi|\phi>^*$。

任意（可能与时间有关的）量子力学算符 O_{op} 在时间反演下的变换性质，可通过考察来确定。

$$T(O_{op}\psi) = \exp[i\pi s_y/\hbar]\; O^*_{op}(-t)\psi^*(\mathbf{r},-t)$$

并与 $T(O_{op}\psi) = (T\,O_{op}\,T^{-1})(T\psi)$ 比较。因此我们得到

$$T\,\mathbf{r}\,T^{-1} = \mathbf{r}\;\;,\;\; T\,\mathbf{p}\,T^{-1} = -\mathbf{p}\;\;,\;\; T\,\mathbf{s}\,T^{-1} = -\mathbf{s}\,, \tag{1.110}$$

符合直觉。

需要记住的是，上面给出的时间反演算符的显式形式是在特定表示中推导出来的，即在坐标表象和对角自旋投影 s_z 中。一般而言，它在其他表示中并不成立，但可以按照表示之间的变换规则推导出来。例如，坐标表象中的平面波 $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ 在动量表象中变为 $\delta(\mathbf{p}-\hbar\mathbf{k})$；对于后者，复共轭显然不会产生时间反演下所预期的结果——$\mathbf{k}$ 的符号改变。利用坐标表象和动量表象之间的关系式，我们得到

$$<\mathbf{p}\mid T\psi>=\int d\mathbf{r}<\mathbf{p}\mid\mathbf{r}><\mathbf{r}\mid\psi(-t)>^*=<-\mathbf{p}\mid\psi(-t)>^*\,, \tag{1.111}$$

其中我们忽略了自旋，并使用了 $<\mathbf{p}\mid\mathbf{r}>=<-\mathbf{p}\mid\mathbf{r}>^*$。可以看出，动量表象中的时间反演是复共轭与动量变号的联合作用——这并不令人意外。

让我们回到没有外磁场的物理系统。它们的哈密顿算符在时间反演下具有对称性，$[H,T]=0$.对于H 的一个本征态 ψ_n，这给出 $HT\psi_n = TH\psi_n = E_n\psi_n$这意味着 ψ_n和 $T\psi_n$具有相同的能量。由此可得两个重要结论:

- 对于无自旋粒子，H 的非简并本征态总可以选为实数，且

- 具有半整数总自旋的本征态总是至少二重简并。这种简并称为克拉默简并。

为证明第一个结论，我们注意到，对于无自旋粒子，$T\psi_n(\mathbf{r}) = \psi_n^*(\mathbf{r})$；又由于根据假设，$E_n$ 不简并，因此函数 $\psi_n(\mathbf{r})$ 必须与 $\psi_n^*(\mathbf{r})$ 相同，至多相差一个与$\mathbf{r}$无关的常数。对于归一化波函数，这个常数至多是一个相位因子；它对任何物理结果都无关紧要，因此可以忽略。

为了证明第二个结论，考虑本征态波函数 $\psi_n = \psi_{\alpha jm}$ 及其时间反演伙伴态 $T\psi_{\alpha jm}$，其中我们用 jm 表示系统的总自旋及其投影，用 α 表示所有其他量子数。若这些函数与无自旋情形一样表示同一个态，那么它们之间应满足关系 $T\psi_{\alpha jm} = C\psi_{\alpha jm}$，其中 C 为某个复常数。再次作用 T，我们得到 $T^2\psi_{\alpha jm} = |C|^2\psi_{\alpha jm}$。但另一方面，$T^2 = \exp[2i\pi s_y/\hbar]$，将其作用于 $\psi_{\alpha jm}$时得到 $(-1)^{2j}$，参见习题 1。对于半整数 j，这不可能等于一个正的 $|C|^2$。因此我们得出结论：对于半整数 j，$\psi_{\alpha jm}$ 和 $T\psi_{\alpha jm}$ 必定对应不同的态，这意味着相应的本征值 E_n 至少是二重简并。这种克拉默简并意味着，例如，对于含有奇数个电子的系统，即使置于任意复杂的电场中，其能级也始终至少是二重简并的。

1.10 含外电磁场的路径积分

存在电磁场时，粒子的路径积分量子化推导遵循标准步骤。传播子

$$K(\mathbf{r}_f, t_f; \mathbf{r}_i, t_i) \equiv \langle \mathbf{r}_f | e^{-iH_{op}(t_f - t_i)} | r_i \rangle$$

表示为多个

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}_f, t_f; \mathbf{r}_i, t_i) \quad &= \quad \lim_{N\to\infty} \int d^3 r_N \int d^3 r_{N-1} \ldots \int d^3 r_1 \; K(\mathbf{r}_f, t_f; \mathbf{r}_N, t_N) \times \\ &\quad \times \; . \; . \; . \times K(\mathbf{r}_1, t_1; \mathbf{r}_i, t_i) \; , \end{aligned} \tag{1.112}$$

无穷小传播子的积分，这些传播子应根据式（1.8）给出的哈密顿算符计算（我们不考虑自旋相关项——这类项在路径积分表述中需要特殊处理）。根据路径积分的经验，我们可以预期，在无穷小时间间隔内，传播子 $K(\mathbf{r}\ t+\epsilon; \mathbf{r}',\ t)\ \epsilon$ 可表示为

$$\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{3/2} \exp\{\frac{i}{\hbar}\epsilon L[(\mathbf{r}+\mathbf{r}')/2, (\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\epsilon]\}$$

根据式（1.5）给出的经典拉格朗日量 $L(\mathbf{r},\ \mathbf{v})$。直接计算确实表明

$$\psi(\mathbf{r}, t+\epsilon) = \int d\mathbf{r}' K(\mathbf{r}, t+\epsilon; \mathbf{r}', t)\ \psi(\mathbf{r}', t) \tag{1.113}$$

得到了薛定谔方程，其无穷小传播子为

$$K(\mathbf{r},t+\epsilon;\mathbf{r}',t) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar\epsilon}\right)^{3/2}\exp\left\{\frac{i\epsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}'}{\epsilon}\right)^2 - eA_0\left(\frac{\mathbf{r}+\mathbf{r}'}{2}\right)\right] + \right. \\ \left. + \frac{ie}{\hbar c}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\mathbf{A}\left(\frac{\mathbf{r}+\mathbf{r}'}{2}\right)\right\} \tag{1.114}$$

这项计算的细节相当繁琐，这里不再赘述。参见文献 [4]。

将无穷小传播子的表达式代入$K(\mathbf{r}f,t_f;\mathbf{r}_i,t_i)$的多重积分中，把指数函数的乘积合并为和的指数函数，并采用连续记法后，我们得到

$$K(\mathbf{r}_f,t_f;\mathbf{r}_i,t_i) = \int_{\mathbf{r}(t_i)=\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}(t_f)=\mathbf{r}_f} D[\mathbf{r}(t)]\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\int_{t_1}^{t_2}dt\left[\frac{m\mathbf{v}^2}{2} - eA_0(\mathbf{r}) + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{v}\right]\right\} \tag{1.115}$$

其中，按照惯例， $D[\mathbf{r}(t)]$ 的定义包含各个 N d^3r_i的乘积，每个都乘以 ed 式 (1.114) 中的指数前因子。

式 (1.115) 中的前两项是通常的动能和势能，而最后一项是这个路径积分中的新特征。它将坐标和速度混合在一起，但它对$\mathbf{v}$ 的线性依赖尤为特殊。作替换$\mathbf{v}\cdot dt = d\mathbf{r}$ 后，路径积分中每条路径对这一项的贡献都可以写成

$$\exp\left[\frac{ie}{\hbar c}\int_{\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}_f}\mathbf{A}[\mathbf{r}(t)]\cdot d\mathbf{r}\right] .$$

这个相位因子取决于路径，但不取决于沿路径传播的速度。如果考虑两条任意路径之间的相位差，可以将其写成 $\mathbf{A}$ 沿一条路径从 $\mathbf{r}_i$到 $\mathbf{r}f$ ，然后沿另一条路径返回$\mathbf{r}_i$ 所形成的闭合路径的环流。利用斯托克斯定理$\oint\mathbf{A}\cdot d\mathbf{r} = \int\nabla\times\mathbf{A}\cdot d\mathbf{S} = \int\mathbf{B}\cdot d\mathbf{S}$ ，可以将这个相位差写成

$$\exp\left[2\pi\, i\,\frac{\Phi}{\Phi_0}\right] , \tag{1.116}$$

其中， Φ 是穿过由两条路径界定的闭合轮廓的磁场磁通量， $\Phi_0 = hc/e$ 是我们在讨论阿哈罗诺夫–玻姆效应时已经熟悉的磁通量子。

我们想指出路径积分中出现诸如$\mathbf{A}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{v}$这类项时存在一个重要的微妙之处。在无穷小传播子 (1.114) 中，若在 $(\mathbf{r}+\mathbf{r}')/2$、$\mathbf{r}$、$\mathbf{r}'$ 处或两者之间的某处计算$\mathbf{A}(\mathbf{r})$，得到的结果会有所不同。这种歧义称为伊藤歧义，参考文献 [4] 对此进行了详细讨论。文中证明，正确的处理方式是按照式 (1.114) 中的写法取$\mathbf{A}$ ，即取中点。这有时也称为中点

规则。只有采用这一规则，才能得到正确的薛定谔方程。中点规则对于 $A\cdot\mathbf{v}$ 项很重要，但对于常规的势能项 $eA_0(\mathbf{r})$ 则不重要。这是因为不同的幂次 ϵ，即 ϵ^0 和 ϵ^1，在无穷小传播子的表达式中分别乘在$\mathbf{A}\cdot\mathbf{v}$ 和 eA_0 的离散化形式上。正如路径积分的标准论述中所示，传播点之间的典型距离满足估算式 $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\sim\sqrt{\epsilon}$。在 $eA_0[(\mathbf{r}+\mathbf{r}')/2]$ 的自变量中发生这一量级的变化，再加上前面的因子 ϵ^1，只会带来量级为 $\sim\epsilon^{3/2}$ 的可忽略差异。而$\mathbf{A}[(\mathbf{r}+\mathbf{r}')/2]$ 发生同样的变化时，与乘在它前面的项$\mathbf{r}-\mathbf{r}'\sim\epsilon^{1/2}$ 相结合，会产生 $O(\epsilon^1)$，不能忽略。

现在让我们考察规范变换如何影响路径积分 (1.115)。对势 $\mathbf{A}$ 和 A_0 进行规范变换 (1.3) 后，会在作用量中加入与.....成正比的项

$$\int_{t_i}^{t_f}dt\left[\frac{d\mathbf{r}}{dt}\cdot\nabla\chi(\mathbf{r},\mathrm{t})+\frac{\partial\chi(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial t}\right]=\int_{t_i}^{t_f}\frac{d\chi(\mathbf{r},\mathrm{t})}{dt}dt=\chi(\mathbf{r}_f,t_f)-\chi(\mathbf{r}_i,t_i)\,, \tag{1.117}$$

其中，最后一个等式成立是因为采用了积分离散化的中点法则，并且得到的结果对所有路径都相同。利用这一点，我们发现，在规范变换下，传播子变为

$$K'(\mathbf{r}_f,t_f;\mathbf{r}_i,t_i)=\exp[ie\chi(\mathbf{r}_f,t_f)/\hbar c]K(\mathbf{r}_f,t_f;\mathbf{r}_i,t_i)\exp[-ie\chi(\mathbf{r}_i,t_i)/\hbar c]\,. \tag{1.118}$$

这当然与波函数（1.14）的相位变化源于同一原点。 K（$\mathbf{r}f,t_f$； $\mathbf{r}_i,t_i$）的相位变化仅取决于初始坐标和末坐标。不同路径之间的相位差严格规范不变。

在均匀电场和磁场中，拉格朗日量 (1.5) 是坐标和速度的二次函数，因此此时路径积分属于高斯型，可以精确求出（参见本章末的问题 2）。

1.11 狄拉克磁单极子

1.11.1 多值波函数。不可积相位

当深入考察薛定谔¨方程的解必须是单值的这一要求时，会出现一个以令人惊讶的方式与规范变换一般问题相关的富有启发性的讨论。通常，人们将这一要求视为自然条件，而它也是找出能量、角动量等物理量的标准量子化的值的主要原因。沿着狄拉克[8] 的讨论，让我们试着看看，如果取消这一要求，会发生什么。

当然，对于具有直接物理意义的量，仍然必须得到明确无歧义的结果。这当然意味着波函数的振幅必须是单值的，因为它的平方是一个物理密度函数。另一方面，波函数的相位在某个特定点上不必具有唯一值，因此一般而言，波函数可以写作 $\psi(\mathbf{r},\mathrm{t})=\phi(\mathbf{r},\mathrm{t})\exp[i\beta]$，其中 $\phi(\mathbf{r},\mathrm{t})$ 是通常的单值复函数，而所有多值性都体现在其性质之中

[8]本节自由参考 P.A.M. Dirac 的原始论文，参见文献 [14]。

相位 β。描述这种多值性的一个有效方法，是考察沿着连接时空中两点的某条曲线移动时，β 如何变化。由于 ψ**(r,t)** 满足薛定谔方程，它必须是连续的，因此自然可以假定， β 几乎在每一点 **(r,t)** 都有确定的导数。稍后我们将讨论导数不存在的那些点。

沿着一条不穿过此类奇异点的曲线， β 的变化可以表示为沿该曲线取的积分 $\sum_\mu \int \kappa_\mu dx_\mu$ ，其中 $\kappa_i = \partial\beta$**(r,t)**$/\partial x_i$ 和 $\kappa_0 = \partial\beta$**(r,t)**$/\partial t$。由于κ_μ 通常不满足可积性条件$\partial\kappa_\mu/\partial x_\nu = \partial\kappa_\nu/\partial x_\mu$ ，该积分的值取决于曲线；特别是，当沿闭曲线计算积分时，相位 β 的总变化不一定为零。所有可能闭曲线的这类环流积分的值，完全刻画了不可积相位 β的多值性质。

现在我们说明，为了使物理量得到无歧义的结果，任何这类环流积分对于所有波函数都必须相同。事实上，测量物理量的概率由与不同波函数$\int \psi_m^* \psi_n d^3r$ 和 ψ_m 、 ψ_n的重叠积分的模平方给出。为了使任何此类积分具有确定的模，被积函数虽然不必在每一点具有确定的相位，但必须在任意两点之间具有确定的相位差。因此， $\psi_m^* \psi_n$ 沿闭曲线的相位变化必须为零。这要求 ψ_n 沿闭曲线的相位变化应等于 ψ_m 中的相位变化；由于 ψ_m 是任意的，对于给定曲线，它必须是所有波函数的一个普适值。

这意味着，不失一般性，可以将波函数中可能存在的不可积相位因子 exp($i\beta$) 视为普适的，适用于所有波函数。现在考虑 ψ 的薛定谔¨方程。由于

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi = e^{i\beta}\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} + \hbar\kappa_x\right)\phi \tag{1.119}$$

对 y、 z 和 t 导数也有类似的关系，由此可得，一般波函数 ψ 的单值部分 ϕ 满足薛定谔方程，其中的规范势与不可积相位 β 的导数成正比。在最常见的情形下，这些规范势必须被认定为电磁势。

$$\mathbf{A} = (\hbar c/e)\boldsymbol{\kappa} \ , \ A_0 = -(\hbar/e)\kappa_0 \ . \tag{1.120}$$

因此我们得出结论：在量子力学描述中，无需考虑多值波函数，因为在外部规范场存在的情况下，它们等价于单值波函数。

尽管这个结论当然成立，但上述讨论仍存在两个歧义。第一个与阿哈罗诺夫–玻姆效应有关，可能出现在多连通区域中，例如环的内部，正如上文第 1.7 节已经讨论过的那样。在这种情况下，即使区域内部的电磁场 为零，也通常不能假定波函数必须是单值的。如果能在该区域中找到不可收缩的闭曲线，就必须先像第 1.7 节那样，按照不同的同伦类对这些曲线进行分类。随后，可以为每个基本同伦类任意指定一个固定的相位因子 exp($i\beta_k$) C_k ，并要求只允许薛定谔方程的解在相位变化时符合这些指定的因子。

直观地说，可以把这种情况理解为：多连通区域是一个带有“孔洞”的区域。即使区域内部的电磁场为零，“孔洞”中仍然可以存在任意的磁通量。这些磁通量会使环绕“孔洞”的闭曲线产生阿哈罗诺夫–玻姆相位，前提是这些曲线不能连续形变为一个点。因此，为曲线的基本类指定不同组的相位因子 $\exp(i\beta_k)$，相当于假设“孔洞”中存在不同分布的阿哈罗诺夫–玻姆磁通 $\exp(2\pi i\Phi_k/\Phi_0)$。

在讨论量子力学中可能出现的不可积相位时，还存在另一种重要的歧义。狄拉克最先注意到了这一点，它与以下事实有关：尽管在单连通区域内不存在电磁场时，因子 $\exp(i\beta)$ 可以取单值，但相位 β 本身可能改变任意整数倍的 2π。允许这种变化，就需要重新审视不可积相位 β 的导数 κ 与电磁势之间的关系，并由此引出一种新的物理现象——可能存在具有量子化电荷的磁单极子。现在我们来讨论这一迷人的课题。

1.11.2 磁单极子

麦克斯韦方程 $\nabla\cdot$**磁场** $=0$意味着磁场没有源，也就是说，自然界中不存在磁荷。然而，在经典理论中，假设存在非零的 $\nabla\cdot$**磁场** $=4\pi\sigma$，其中 σ 表示磁荷密度，在概念上并不会产生任何问题。事实上，这种情况下理论会更加对称，因为若同时交换磁荷和电荷，就会存在所谓的对偶变换 $\mathbf{E}\ \rightarrow$**磁场**、**磁场** $\rightarrow -\mathbf{E}$ 。然而，非零的 $\nabla\cdot$**磁场** 在量子理论中会带来一个问题：在磁场存在时进行正则量子化或路径积分量子化，需要通过**磁场** $=\nabla\times\mathbf{A}$显式引入矢势。没有这一关系，就无法定义理论的哈密顿量或拉格朗日量，但该关系仅对无散的**磁场**成立。我们来更仔细地分析这个问题，并考虑一个假想的点状粒子，称为磁单极子，它携带磁荷 g。在它存在的情况下

$$\nabla\cdot\mathbf{B}=4\pi g\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\quad,\quad \mathbf{B}=g\frac{\mathbf{r}-\mathbf{r}_0}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|^3}\,, \tag{1.121}$$

其中$\mathbf{r}_0$ 表示磁单极子的位置， g 是它的磁荷。

对于空间中除$\mathbf{r}_0$ 的无穷小邻域以外的所有点，磁场$\mathbf{B}$ 的散度为零，因此可以写成 $\mathbf{B(r)}=\nabla\times\mathbf{A(r)}$。虽然该函数$\mathbf{A(r)}$在局部上是正确的，但它并非单值函数。考虑关系式 $\mathbf{B}=\nabla\times\mathbf{A}$的积分形式，即斯托克斯定理，可以看出这一点，

$$\int_S\mathbf{B}\cdot d\mathbf{S}=\oint_C\mathbf{A}\cdot d\mathbf{r}$$

其中 C 是空间中的某条闭合曲线，左侧的积分是在任意曲面 S 上进行的，该曲面的边界为 C 。然而，在当前情况下，这样的积分——**磁场**的磁通量——并不唯一。对于所有能够连续变形为彼此、且变形过程中不穿过磁单极位置的曲面，该积分都不会发生变化。

但是一旦曲面穿过$\mathbf{r}_0$，磁通量就会发生变化。磁单极子"两侧"的曲面之间的磁通量差，等于这两个曲面所构成的闭合曲面上的总磁通量。对该曲面内部的体积积分（1.121），并使用高斯定理，可以得到该磁通量等于 $4\pi\, g$。非零的 $\nabla\cdot$**磁场** 因此影响了 **A** 的全局定义，而不仅仅是在$\mathbf{r}_0$附近。利用斯托克斯定理，将连续变化的轮廓 C 作为连续定义**A(r)**与**磁场(r)**之间关系式的一种方式，我们将发现这一关系式的两个"分支"，这取决于我们选择曲面 S位于$\mathbf{r}_0$ 的"哪一侧"。

克服这一困难有多种方法。历史上，最早的方法由 P. M. 狄拉克提出，参见文献 [14]。我们将采用一种更现代的方式来阐述这一方法。这个想法与多值解析函数理论中的做法有些类似，也就是从一个分支点引出一条分支切割线。将磁单极子的位置视为类似这样的分支点，便可避免在使用斯托克斯定理确定**A(r)**与**磁场(r)**之间的关系式时产生歧义：只需将空间中从该点延伸至无穷远处（或延伸至另一个带相反电荷的磁单极子）的细管连同$\mathbf{r}_0$ 一起排除在外。所谓排除，是指对于轮廓 C，绝不能选择会被该管穿过的曲面 S。这样便唯一确定了在斯托克斯公式中绘制曲面时应选择磁单极子的"哪一侧"。因此，除了被排除的管内之外，我们可以确保**磁场(r)** $\to$**A(r)**关系式在整个空间中都是单值的。我们可以让管子尽可能细，并将其朝任意方向延伸。

让我们说明这一讨论，并考虑一个放置在原点的磁单极子作为例子，同时选择沿正 z 轴的排除管。容易验证，其旋度给出磁场 (1.121) 的矢势，除了在正 z 之外，可以选为

$$A_r = A_\theta = 0 \ , \ \ A_\phi = -\frac{g}{r}\frac{(1+\cos\theta)}{\sin\theta} \tag{1.122}$$

其中 A_r, A_θ 和 A_ϕ 是**A** 的球分量，而 θ 和 ϕ 是通常的极角和方位角。在 z 轴上，该势并不再现磁单极子的场(1.121)，而是给出一个指向磁单极子并携带磁通量 $4\pi\, g$ 的奇异磁场。因此，由 (1.122) 的旋度表示的总有效磁场是

$$\mathbf{B}_{eff} = g\frac{\mathbf{r}}{r^3} - g\ \ \delta(x)\,\delta(y)\,\mathbf{e}_z\ . \tag{1.123}$$

其中，$\theta(z)$ 表示阶跃函数。

我们可以选择另一个矢势

$$A'_r = A'_\theta = 0 \ , \ \ A'_\phi = \frac{g}{r}\frac{(1-\cos\theta)}{\sin\theta} \tag{1.124}$$

这也给出了所需的磁场(1.121)，但排除的管沿负 z 轴方向。相应的"有效"场沿该管再次具有一个指向磁单极子的奇异分量。沿该管的磁通量等于**磁场**$_{eff}$ 第一分量的总磁通量，即磁单极子场的磁通量。

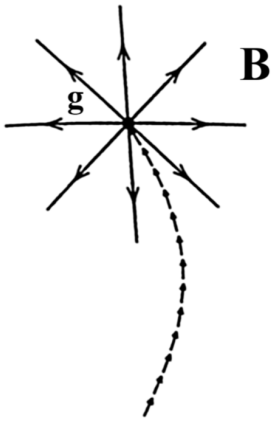


图 1.7：包含奇异弦的狄拉克磁单极子磁场。注意，图中的弦画成了弯曲的形状，这是允许的；但在正文的示例中，为了简便起见，我们将其设为沿正 z 轴延伸的直线，见式（1.123）。

现在很容易理解排除管构造背后的逻辑。沿管的磁通量会“供给”单极子的径向场，使所得的“有效”场无散，$\nabla \cdot \textbf{磁场}_{eff} = 0$ 并且可以像上面的例（1.122）和（1.124）那样表示为某个矢势的旋度。

此时，一个关键问题随之而来。我们用包含磁通管的有效场替代了所需的磁单极子磁场。如何确保这种修改没有改变问题的物理性质？由于整个构造是为量子力学而提出的，我们必须考虑：在磁单极子的场中加入磁通管，是否会影响薛定谔方程的解。事实上，我们知道，这种磁通管确实会产生全局影响，其形式就是阿哈罗诺夫–玻姆效应。显然，也有办法避免这种效应，使磁通管在远距离处不可观测。我们必须要求管中携带的磁通量等于磁通量量子的整数倍，

$$4\pi\, g = n\Phi_0 = 2\pi n\hbar c/e$$

这对量子化条件限定了 g的可能取值，

$$eg = \frac{1}{2} n\hbar c\,, n = \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{1.125}$$

这个关系式称为狄拉克量子化条件。携不可观测的磁通量管带整数个磁通量子的磁通量管称为狄拉克弦。我们刚才描述的整个构造称为狄拉克磁单极子，参见图 1.7

磁单极子电荷的量子化条件(1.125)表明，如果宇宙中任何地方存在磁单极子，那么所有电荷都将被量子化：$e = n(\hbar c/2g)$。注意，这一量子化条件显式依赖于普朗克常数，因而也依赖于量子理论。

迄今为止，对自然界中是否存在磁单极子的实验搜索均未获得肯定结果。我们注意到，由于 $g = (137/2)\, e$ 两个磁单极子之间的力是两个电子之间作用力的（$137/2$）$^2 \cong 4692$ 倍。这或许意味着自然界中的所有磁单极子都紧密地束缚成符号相反的成对粒子。为了判断这是否属实，需要知道磁单极子的质量，而上述理论对此并未提供任何信息。

近年来，t 'Hooft 和 Polyakov 在所谓的对称性破缺非阿贝尔规范理论的背景下提出了另一种磁单极子理论，参见 Ref. [16], 。该理论预言磁单极子的质量应当非常大。从远距离观察，狄拉克磁单极子和非阿贝尔磁单极子看起来应当完全相同，因此我们对磁单极子场中量子力学的讨论预计在这样的距离下仍然有效。

在量子力学中引入磁单极子还有另一种方法，可以避免出现奇异的狄拉克弦。该方法由 Wu 和 Yang 提出，见文献 [15], ，采用了分片的思路，类似于制图师将地球的球面绘制到平面地图上时所用的方法。显然，单张地图会在某一点出现奇点。想象一下，一张铺有矩形坐标网格的橡胶片，试着把它包裹在球体上。为了避免单张地图出现奇点，可以引入两张地图，例如一张覆盖北半球，另一张覆盖南半球。两张地图合在一起，就能构成一幅没有奇点的地球地图。为了能够在两张地图之间平滑切换，应让每张地图覆盖超出其对应半球的区域，从而在赤道附近形成重叠区。在这个重叠区内，对于地球表面的同一点，两张地图上的坐标必须一一对应。类似地，也可以为磁单极子找到无奇点的矢势。

这种由此产生的表述本质上就是所谓的纤维丛量子力学中的规范场表述。这里不再展开，读者可参阅相关文献。

1.11.3 单极子存在时的角动量和旋转对称性

尽管磁单极子的磁场是球对称的，但显然，作用于运动粒子且垂直于其速度的洛伦兹力，不会使相对于原点的角动量的通常表达式 $\mathbf{r} \times m\mathbf{v}$ 守恒。例如，考虑一个沿着围绕磁单极子的平面圆形轨道出发的粒子。磁场会使它偏离该平面，从而改变初始的 $\mathbf{r} \times m\mathbf{v}$。利用运动方程，可以计算这一表达式的变化率。

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{r} \times m\mathbf{v}) = \mathbf{r} \times m\frac{d}{dt}\mathbf{v} = \frac{eg}{cr^3}(\mathbf{r} \times (\mathbf{v} \times \mathbf{r})) = \frac{d}{dt}\left(\frac{eg}{c}\frac{\mathbf{r}}{r}\right) . \tag{1.126}$$

这表明我们可以将总角动量定义为

$$\mathbf{J} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v} - \left(\frac{eg}{c}\frac{\mathbf{r}}{r}\right) = \mathbf{r} \times \mathbf{p} - \frac{e}{c}\left[\mathbf{r} \times \mathbf{A} + g\frac{\mathbf{r}}{r}\right] , \tag{1.127}$$

使其守恒。

在电磁场存在时，守恒量表达式中出现的不寻常项，应该已经可以从均匀电场和磁场中动量的表达式（式 (1.45) 和(1.74)）中熟悉。除了对称性的生成元之外，还必须包括规范变换的生成元，以便保持表述处于“相同”的规范中。通过考虑无穷小旋转 $\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \delta\boldsymbol{\phi} \times \mathbf{r}$ 并相应地

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \to \mathbf{A}'(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r} - \delta\boldsymbol{\phi} \times \mathbf{r}) + \delta\boldsymbol{\phi} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \to \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \delta\boldsymbol{\phi} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) - [(\delta\boldsymbol{\phi} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla]\, \mathbf{A}(\mathbf{r})$$

对于与磁单极子的球对称磁场相对应的 $\mathbf{A(r)}$，该表达式中的最后一项必须是规范变换，即等于标量函数 $\nabla\xi(\mathbf{r})$ 的梯度。可得

$$\xi(\mathbf{r}) = -\delta\boldsymbol{\phi} \cdot \left(\mathbf{r} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) + g\frac{\mathbf{r}}{r} \right) ,$$

因此，波函数在旋转下的变换为

$$[1 + \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\phi} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p})]\, [1 + i\frac{e}{\hbar c}\xi(\mathbf{r})]\, \psi(\mathbf{r}) .$$

在 ξ 的表达式的方括号中，可以找到恰好需要添加的两项；将它们乘以 e/c后加到规范的 $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ 上，即可得到守恒的方程 (1.127)。

对于表达式 (1.127) 中的最后一项，还有另一种截然不同的解释。它是存在于运动粒子和固定磁单极子周围空间中的电磁场所包含的角动量。利用磁单极子的**磁场** 表达式，以及粒子在$\mathbf{r}_0$ 处的电场$\mathbf{E} = e(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)/4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^3$ 的表达式，确实可以得到

$$\mathbf{L}_{em} = \int d^3r\ \mathbf{r} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = \frac{egr_0}{4\pi} \int d^3r\ \frac{r^2(\hat{\mathbf{r}}\cos\theta - \hat{\mathbf{r}}_0)}{r^3(r^2 + r_0^2 - 2\,r\,r_0\,\cos\theta)^{3/2}} \tag{1.128}$$

其中， θ 是$\mathbf{r}$ 与$\mathbf{r}_0$之间的夹角。直接计算积分可得$-eg\mathbf{r}_0/|\mathbf{r}_0|$ ， 对于 $eg = \hbar c/2$ ，这给出了 (1.127) 中的最后一项。对本文作者而言，这种对 $\mathbf{L}$ 中附加项的解释背后的物理图像仍不清楚。

1.12 非阿贝尔规范场

在第 1.3.3 节中，我们讨论了如何通过要求自由薛定谔方程的全局对称性变为局域对称性，即对这一对称性进行“规范化”，来预言电磁场的存在。现在我们举例说明，对一种更复杂的非阿贝尔对称性进行规范化会产生什么结果，并由此引出非阿贝尔规范场的概念，参见文献 [17]。假设我们的理论中的粒子除了自旋之外，还带有另一种离散的内禀动力学变量 τ，我们暂且称之为赝自旋，它可以取两个值， $\tau = 1,2$。类比自旋变量，波函数现在还会带有一个额外的指标 τ，对其积分并求和

对所有其他变量（**r**、自旋等）积分并求和后，得到测量到这一特定值 τ 的概率。我们还必须引入作用于变量 τ 的算符，并用这些算符表示涉及该变量的所有可观测量。这些算符必须是厄米 2×2 矩阵。任何这样的算符 $O_{\alpha\beta}$ 都可以写成单位矩阵和泡利矩阵的线性组合，且系数为实数

$$O = O_0\delta_{\alpha\beta} + \sum_{a=1}^{3} O_a \tau_{\alpha\beta}^{(a)} \ , \tag{1.129}$$

$$\tau^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \tau^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \tau^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} ,$$

由于泡利矩阵与单位矩阵构成了展开任意 2×2 矩阵的一组完备基，参见本课程讲义中的“密度矩阵”一章。

现在来考虑一个自由的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_\tau(\mathbf{r},\mathrm{t}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_\tau(\mathbf{r},\mathrm{t})$$

对于一个具有赝自旋的粒子而言。这个方程显然在矩阵为任意矩阵 S的线性变换 $\psi\,'_\tau = \sum_{\tau'} S_{\tau\tau'}\psi_{\tau'}$ 下保持不变。为了保持 ψ 的归一化，矩阵 S 必须是幺正的。因此，它的一般形式必定是任意厄米矩阵的虚指数函数，因而可以用泡利矩阵表示为

$$S = \exp\left(i\varphi_0 + i\sum_a \varphi_a\tau^{(a)}\right) \ . \tag{1.130}$$

其中实数 φ 任意。为简单起见，我们将只考虑满足 $\varphi_0 = 0$ 的变换，这等价于对允许的矩阵 S施加条件 $\det S = 1$ 。我们称薛定谔方程在全局 ***SU(2)*** 变换下保持不变，也就是说，在所有行列式为 1 的幺正 2×2 矩阵构成的群 SU(2) 中的变换下保持不变。该群是非阿贝尔群——任意两个 SU(2) 矩阵通常并不对易。现在，让我们将第 1.3.3 节的规范原理用于这个 SU(2) 对称性，并要求我们的理论不仅在全局变换下，而且在局部变换下也保持不变。这意味着，参数 ϕ_a 是关于$\mathbf{r}$ 和 t 的任意函数的矩阵 S 所对应的变换，应使薛定谔方程保持不变。实现这种局部规范变换不变性的方法，是引入规范场势，以补偿变换后的 S 的导数

$$\psi\,'(\mathbf{r},\mathrm{t}) = S(\mathbf{r},\mathrm{t})\psi(\mathbf{r},\mathrm{t}) \tag{1.131}$$

代入薛定谔方程中。由于矩阵的导数显然也是矩阵，因此补偿势也应为矩阵。由于薛定谔方程中有四个导数 $\partial/\partial t$ 和 $\nabla = (\partial/\partial x,\ \partial/\partial y,\ \partial/\partial z)$，所以必须

引入四个这样的矩阵补偿势 $A^{(\mu)},\quad \mu=0$，1，2，3，4。它们可以表示为线性组合

$$A^{(\mu)}(\mathbf{r},\mathrm{t})=\sum_{a=1}^{3}A_a^{(\mu)}(\mathbf{r},\mathrm{t})\frac{\tau^{(a)}}{2}=A^{(\mu)}\cdot\frac{\tau}{2}\,, \tag{1.132}$$

其中，我们对任意实函数 $A_a^{(\mu)}$**(r,t)** 与泡利矩阵 $\tau^{(a)}$ 的乘积之和采用了显而易见的简写记法，并引入因子 $1/2$ ，以遵循该领域的惯用定义。在 $\tau^{(a)}$ 的固定基底下表示矩阵 $A^{(\mu)}$，等价于给出三个函数 $A_a^{(\mu)}$。

类比电磁学，我们现在引入规范协变导数。

$$\begin{aligned} D_0 &= \frac{\partial}{\partial t}+\frac{ig}{\hbar}A^{(0)}\cdot\frac{\tau}{2}\,,\\ \mathbf{D} &= \nabla-\frac{ig}{\hbar c}\mathbf{A}\cdot\frac{\tau}{2}\,, \end{aligned} \tag{1.133}$$

并在薛定谔方程中用它们代替普通导数,

$$i\hbar D_0\psi(\mathbf{r},\mathrm{t})=-\frac{\hbar^2}{2m}\mathbf{D}^2\psi(\mathbf{r},\mathrm{t})\,. \tag{1.134}$$

此处引入的常数 g 类似于电磁学中的电荷 e 。它决定了该方程所描述的粒子与非阿贝尔规范场 $A_a^{(\mu)}$ 耦合的强度。为了使方程在局域规范变换 **(1.131)** 下保持不变，我们要求 $D_0\psi$ 和 $\mathbf{D}\psi$ 具有与 ψ 本身相同的变换性质，即陪 тәләп

$$D_0\,'\psi\,'\equiv\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{ig}{\hbar}A^{(0)\,\prime}\cdot\frac{\tau}{2}\right)\psi\,' = SD_0\psi\equiv S\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{ig}{\hbar}A^{(0)}\cdot\frac{\tau}{2}\right)\psi \tag{1.135}$$

$$\mathbf{D}\,'\psi\,'\equiv\left(\nabla-\frac{ig}{\hbar c}\mathbf{A}\,'\cdot\frac{\tau}{2}\right)\psi\,' = S\mathbf{D}\psi\equiv S\left(\nabla-\frac{ig}{\hbar c}\mathbf{A}\cdot\frac{\tau}{2}\right)\psi\,. \tag{1.136}$$

这显然是式 **(1.134)** 不变性的充分条件，并确定了规范势的变换性质。

$$A^{(\mu)\prime}(\mathbf{r},\mathrm{t})\cdot\frac{\tau}{2}=S(\mathbf{r},\mathrm{t})A^{(\mu)}(\mathbf{r},\mathrm{t})\cdot\frac{\tau}{2}S^{-1}(\mathbf{r},\mathrm{t})-\frac{i}{g}\left[\frac{\partial S(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial x_{(\mu)}}S^{-1}(\mathbf{r},\mathrm{t})\right]\,. \tag{1.137}$$

我们看到，在规范变换下，每个矩阵规范势在每个时空点都由规范变换矩阵 S**(r,t)** 在局部**“**旋转**”**，同时还会发生一个平移，其大小取决于 S**(r,t)**的相应导数。这个表达式以及上面的关系式，对于任意酉群**SU(N)** 都成立，只需对变换矩阵 S 和泡利矩阵 $\tau^{(a)}$作适当的推广即可。对于阿贝尔群 **U(1)**，我们显然会得到熟知的薛定谔方程以及电磁场的规范势。一般而言，将有 $d\times(N^2-1)$ 个规范势，其中 $d=4$**–** 时空的维数，而 (N^2-1) **–** 的数量为

SU(N) 群的独立生成元。式（1.137）所表达的规范自由度意味着，一般而言，规范势中只有 $(d-1) \times (N^2-1)$ 个组合是独立的。最后我们指出，在自然界已知的规范场中，统一的电磁相互作用和弱相互作用（通常称为电弱相互作用）由$U(1) \times SU(2)$ 描述，而强相互作用则由 SU(3) 非阿贝尔规范势描述。这些相互作用的内禀量子数（类似于我们所称的赝自旋）分别是通常所说的电荷、所谓的弱同位旋以及色荷。正如前面提到的，引力场也是一种规范场，因此，四种基本相互作用都由规范场描述。

习题

1. 考虑时间反演算符的自旋部分 $U = \exp[i2\pi\, s_y/\hbar]$。

   - 证明当 U = -1 作用于自旋1/2粒子的波函数时。
   - 自旋j的自旋波函数的分量，就其变换性质而言，可以视为由 2j 个自旋1/2粒子组成的系统的波函数中适当选取的分量。利用这一点证明 $U\psi_{jm} = (-1)^{2j}\psi_{jm}$。

2. 通过计算相应的高斯型路径积分，求均匀电场和磁场中的传播子，参见 [5]

3. 电子被限制在一个平面内运动（x， y），并置于垂直于该平面的均匀磁场中。

   (a) 考虑两种不同的规范选择 a) $A_x = -By$， $A_y = A_z = 0$ 和 b)$A_x = -\frac{1}{2}By$，$Ay = \frac{1}{2}Bx$，$A_z = 0$。计算得到的电子本征函数对导引中心坐标的哪些组合进行对角化？这两组本征函数之间有何关系？计算并解释上述各情形下电流密度的行为。总电流是多少？如果在上述 a) 情形中，沿 x 方向添加均匀电场，电流会如何变化？沿 y 方向呢？此时的总电流是多少？它沿哪个方向流动？在上述 b) 情形中，假设沿 z 轴（位于 $x = y = 0$处）添加一根磁通量为 Φ 的极细螺线管。它会产生什么影响，又会如何影响？考虑 Φ 的各种取值，看看是否存在特殊的 ϕ 值。

   此外，它们是势 $U = \frac{1}{2}\alpha x^2$。

   a) 这个势如何改变朗道能级？与有 $U = 0$ 的情况相比，朗道能级中单个态的电流密度是多少？

   b) Now repeat for $U = \frac{1}{2}\alpha(x^2 + y^2)$.

   2. 证明，在均匀磁场存在的情况下，导引中心坐标的算符 x_o 和 y_o 是平移的生成元。

3.考虑具有确定的 x_o值的朗道能级波函数。它们与具有 y_o的类似波函数有何关系? 现在考虑具有确定 $x_o^2 + y_0^2$ 的波函数。假设有一根磁通量为 ϕ 的极细螺线管?

4. 考虑强磁场中的量子力学。

a.投影到最低朗道能级（LLL）。证明， x_0和 y_0 的本征态与一维量子力学中 p 和 x 的本征态完全等价。

b.推导 $\ell \to 0$ 极限下的半经典近似。

c. 求出强磁场中二维空间内两个相互作用电子的半经典能级。还要讨论异号带电粒子的情况（例如电子-正电子系统，或固态中的电子-空穴系统）。

“

参考文献

[1] D. J. Griffith, 《电动力学导论》第4版，剑桥大学出版社。

[2]Ta-Pei Cheng 和 Ling-Fong Li, 《基本粒子物理学的规范理论》，Clarendon Press，牛津，1984 年。本书及下一条参考文献是较为高深的量子场论课程教材，不过其中有几章即使对基础较薄弱的学生也颇有裨益。

[3] Lewis H. Ryder, 《量子场论》，剑桥大学出版社，1985 年。

[4] L. S. Schulman, 《路径积分的技巧与应用》，Wiley，纽约，1981 年。第 4 节和第 5 节以教学方式讨论了含矢势的路径积分所涉及的微妙问题，以及相关的“伊藤积分”。另一种推导见 L. S. Schulman 的《路径积分选题》，载于《路径积分讲义：的里雅斯特 1991》，H.A. Cerdeira 等编，World Scientific，新加坡。

[5] Hagen Kleinert, 《量子力学、统计与高分子物理中的路径积分》，World Scientific，新加坡，1989 年。本书有几节讨论了磁场存在时的路径积分。

[6] Y. Aharonov 和 D. Bohm, 《物理评论》115（1959）484——这是最初的发表文章，其中描述了后来被称为阿哈罗诺夫–玻姆效应的现象。R. G. Chambers 在《物理评论快报》5（1060）3 中首次通过实验观测到这一效应。T. T. Wu 和 C. N. Yang 在《物理评论》D12（1975）3845 中对其作了非常清晰的讨论。

[7] 我们对阿哈罗诺夫–玻姆版本双缝实验的讨论基于 R. P. 费曼、R. B. Leighton 和 N. Sands, 《费曼讲义》，第 2 卷，第 15.5 节，马萨诸塞州雷丁：Addison-Wesley 出版社，1964 年。

[8] Palash B. Pal, 《代数结构导论：物理学家的视角》，第 22 章，剑桥大学出版社，2019 年。

[9] F. Bloch, 《物理评论》2（1970）109。这是一篇极其清晰、论述优美的“老大师”论文，探讨了超导环中的约瑟夫森效应背景下，在存在阿哈罗诺夫–玻姆磁通量时，量子力学在多连通区域中的最一般后果。

[10] 关于艾里函数的性质，例如可参见 M. Abramovitz 和 I. A. Stegun, 《数学函数手册》。华盛顿特区：国家标准局。[11] J. J. Sakurai, 《现代量子力学》（修订版），Addison-Wesley，第239页。[12] Ho-Fai Cheung 等, 《物理评论》B37（1988）6050。[13] B. I. Halperin, 《物理评论》B25（1982）2185。[14] 关于磁单极子的第一篇论文 P. A. M. 狄拉克, 《皇家学会学报》A133（1931）60，实际上研究的是一个更一般的主题：论证要求波函数具有单值性的依据。这篇论文极具现代气息，可读性很强；其重印本收录于较易获得的《量子场论中的磁单极子》，《磁单极子会议论文集》，意大利的里雅斯特，1981年12月，N. S. Craigie、P. Goddard 和 W. Nahm 编，World Scientific 出版。第一篇论文的后续研究见 P. A. M. 狄拉克, 《物理评论》74（1948年）817。[15] T.T. Wu 和 C.N. Yang, 《核物理》B107（1976）365[16] G. t´ Hooft, 《核物理》B79（1974）276；A.M. Polyakov, 《JETP Letters》20（1974）194。[17] C. N. Yang 和 R. L. Mills, 《物理评论》96（1954）191。这是首次提出电磁学非阿贝尔推广的原始论文；这种推广后来被称为杨–米尔斯场。在文献 [3] 第3.5章中，介绍了杨–米尔斯场的教学性综述。

第2章

电磁场量子力学

在本章中，我们将展示如何将一个或多个粒子的量子力学描述扩展到电磁场的量子化。与通过其位置的坐标 $\mathbf{r}_a$, $a = 1,\ldots, N$（N——粒子数）描述的粒子不同，电磁场由电场和磁场的构型 **E(r)** 和 **B(r)**描述。为了了解量子力学中如何处理这类扩展系统，我们将从一个简单得多的系统——一维弦——开始。

2.1 简单系统第一部分——吉他弦的量子力学

2.1.1 经典弦

我们考虑图 2.1 中描绘的一根弦。

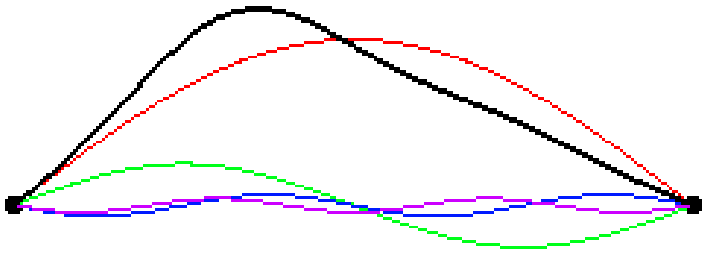


图2.1：吉他弦的构型。将图的横坐标（弦的平衡位置）记为x，将纵坐标（弦偏离平衡位置的位移）记为 ϕ，吉他弦的构型由函数 $\phi(x)$ 描述。

经典地，其一般构型可方便地由函数 $\phi(x)$ 描述，该函数决定了偏差 ϕ：弦在轴 x 的每一点处相对于平衡位置 $\phi = 0$ 的偏离。为简单起见，我们假设弦的两端固定在 $x = 0$ 和 $x = L$

$$\phi(0) = 0 \ , \ \phi(L) = 0 \ . \tag{2.1}$$

在下一节中，我们将把讨论扩展到一个更相关的例子：具有周期性边界条件的弦——所谓的闭弦。

我们将假设，在经典情况下，弦由一个简单的线性波动方程描述

$$\frac{\partial^2\phi(x,t)}{\partial t^2} = v^2\frac{\partial^2\phi(x,t)}{\partial x^2} \tag{2.2}$$

其中 v 具有速度的量纲，并且实际上是波的相位（以及群）速度

$$\phi(x,t) = A\sin[kx \pm \omega(k)t + \alpha] \ .$$

这些都是波动方程的解，直接代入即可轻松验证。这里，A 和 α 是任意的常数振幅和相位，色散关系为

$$\omega(k) = vk \ . \tag{2.3}$$

将函数 $\phi(x)$ 视为描述弦"位置"的坐标集合将非常有用。为强调这一点，可以将 $\phi(x)$ 看作一个集合 $\{\phi_x\}$，这表明 x 实际上是为不同坐标编号的索引。为了使其更加精确，可以将 x 变量离散化，并将 $\phi(x)$ 化简为 $N+1$ 个变量，如下所示

$$\phi_x \equiv \phi(x = n\Delta x) \ , \ \Delta x = L/N \ , \ n = 0, 1, ..., N$$

严格来说，最后应令 $N \to \infty$、 $\Delta x \to 0$ ，但实际上只需使 Δx 远小于所要考虑的波中最小的波长 Λ 即可。截断 Λ 背后的物理原因实际上可能是这一要求：它应远大于与构成弦的各个组分之间的距离等相关的微观长度尺度。

2.1.2 弦的量子描述

波泛函

我们的目标是按照上述方法将经典弦量子化。我们将采用正则量子化程序的直接推广，这一程序适用于具有少量自由度的系统，例如一个或多个粒子。这意味着，我们不再用一个确定的 $\phi(x)$ 来描述弦的构型，而必须假设，对于每个 $\phi(x)$，都存在一个概率振幅 $\Psi[\phi(x)]$ ，其中包含有关弦的全部（量子）信息。特别是， $|\Psi[\phi(x)]|^2$ 给出了找到特定构型 $\phi(x)$ 的概率密度。

从数学上说， $\Psi[\phi(x)]$ 表示从满足条件（2.1）的所有函数$\phi(x)$组成的集合，到复数集合 Ψ 之间的一种对应关系。这种对应关系称为泛函。读者在经典力学中应该已经熟悉泛函的例子，其中经典作用量 $S[q(t)]$ 是轨迹 $q(t)$ 的泛函。

泛函 $\Psi[\phi(x)]$称为波泛函。使用函数 $\phi(x)$ 的近似离散形式 ϕ_x ，泛函 $\Psi[\phi(x)]$ 实际上可以视为关于 $N-1$ 个变量 $\{\phi_{x=n\Delta x}\}$ 的函数。为符合公式 (2.1)，变量 ϕ_0 和 $\phi_{x=N\Delta x}$ 固定为 0。

经典情况下，弦动力学由时间依赖关系 $\phi(x,\ t)$ 描述，并由方程 (2.2) 支配。量子力学时间演化应由波泛函 $\Psi[\phi(x)\ t]$ 的时间依赖关系描述。这种时间演化由什么支配？继续类比少数自由度系统，它应当由薛定谔方程描述

$$i\hbar\frac{\partial\Psi[\phi(x),t]}{\partial t}=H_{\mathrm{op}}\Psi[\phi(x),t] \tag{2.4}$$

其中 H_{op} 是弦的哈密顿算符。现在我们将按照标准方法确定这个算符。

弦哈密顿量

我们将首先求出弦的经典哈密顿函数。为此，我们将把弦方程(2.2)重写为哈密顿形式。需要注意的是，该方程表示了一组相互耦合的弦坐标牛顿方程 ϕ_x。通过将其重写为离散形式可以看出这一点

$$\frac{d^2\phi_x}{dt^2}=\frac{v^2}{\Delta x^2}\left(\phi_{x+\Delta x}-2\phi_x+\phi_{x-\Delta x}\right) \tag{2.5}$$

其中我们使用了二阶导数的离散形式

$$\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} \to \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{\phi_{x+\Delta x}-\phi_x}{\Delta x} - \frac{\phi_x-\phi_{x-\Delta x}}{\Delta x}\right)$$

我们将把弦的二阶时间波动（牛顿）方程改写为一对一阶方程

$$\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial t} = \pi(x,t) \quad , \quad \frac{\partial\pi(x,t)}{\partial t} = v^2\frac{\partial^2\phi(x,t)}{\partial x^2} \tag{2.6}$$

其中（照例）第一个方程实际上是动量的定义。下一步，我们引入如下泛函

$$H[\pi(x),\phi(x)] = \int_0^L dx\left[\frac{1}{2}\pi^2(x) + \frac{v^2}{2}\left(\frac{\partial\phi(x)}{\partial x}\right)^2\right] \tag{2.7}$$

利用它，我们可以将方程组（2.6）写成

$$\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial t} = \frac{\delta H[\pi(x,t),\phi(x,t)]}{\delta\pi(x,t)} \quad , \quad \frac{\partial\pi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\delta H[\pi(x,t),\phi(x,t)]}{\delta\phi(x,t)} \ . \tag{2.8}$$

这里，记号 $\delta/\delta\pi(x,t)$ 和 $\delta/\delta\phi(x,t)$ 分别表示关于 $\pi(x,t)$ 和 $\phi(x,t)$ 的变分导数（见下文）。现在我们证明，上述方程确实等价于方程组（2.6），同时顺便回顾变分导数的定义和计算方法。

我们令泛函（2.7）中的函数 $\pi(x)$ 和 $\phi(x)$ 发生无穷小变分 $\delta\pi(x)$ 和 $\delta\phi(x)$。由此产生的相应变分 δH 为

$$\begin{aligned}
\delta H &\equiv H[\pi(x)+\delta\pi(x),\phi(x)+\delta\phi(x)] - H[\pi(x),\phi(x)] = \\
&= \int_0^L dx\left[\pi(x)\delta\pi(x) + v^2\frac{\partial\phi(x)}{\partial x}\frac{\partial\delta\phi(x)}{\partial x}\right] + \text{higher order terms} \\
&= \int_0^L dx\left[\pi(x)\delta\pi(x) - v^2\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2}\delta\phi(x)\right] + \text{higher order terms}
\end{aligned}$$

其中第二项使用了分部积分。

类比于多变量函数的微分 dF 与其偏导数之间的关系式$F(q_1,q_2,...,q_N)$

$$dF = \sum_{n=1}^{N}\frac{\partial F}{\partial q_n}dq_n$$

$H[\pi(x,\ t)\ \phi(x,\ t)]$ 的泛函导数，按定义就是在变分表达式 δH 中分别乘以 $\delta\pi(x,\ t)$ 和 $\delta\phi(x,\ t)$ 的函数，

$$\frac{\delta H[\pi(x),\phi(x)]}{\delta\pi(x)} = \pi(x) \quad , \frac{\delta H[\pi(x),\phi(x)]}{\delta\phi(x)} = -v^2\frac{\partial^2\phi(x)}{\partial x^2} \tag{2.9}$$

将这些关系式代入式 (2.8)，我们看到它们确实重现了式 (2.6)。

方程（2.8）具有哈密顿形式，其中 $H[\pi(x)\ \phi(x)]$ 是哈密顿量， $\pi(x)$、 $\phi(x)$ 分别是动量和坐标。或许暂时改用记号 π_x 和 ϕ_x ，而不用 $\pi(x)$ 和 $\phi(x)$，并将 x 视为标签，这样会更清楚一些。用这些记号表示的方程（2.8）为

$$\frac{\partial\phi_x(t)}{\partial t}=\frac{\partial H[\pi_x(t),\phi_x(t)]}{\partial\pi_x(t)}\quad,\quad\frac{\partial\pi_x(t)}{\partial t}=-\frac{\delta H[\pi_x(t),\phi_x(t)]}{\partial\phi_x(t)}\quad.$$

弦的基本量子算符

现在我们将开始定义量子力学算符 $H_{\rm op}$。为此，我们首先确定与 $\pi(x)$ 和 $\phi(x)$ 对应的算符，然后在经典哈密顿量的表达式 (2.7) 中用这些算符替换后两者。

由于在我们的表述中， $\phi(x)$ 是弦的坐标，因此相应的算符 $\phi_{\rm op}(x)$ 应当就是乘以 $\phi(x)$ 的算符，即其对任意波泛函的作用量是

$$\phi_{\rm op}(x)\Psi[\phi(x')]=\phi(x)\Psi[\phi(x')]\tag{2.10}$$

为避免混淆，我们对算符中的 ϕ 和 Ψ 中的 ϕ 使用不同的自变量。如果（再次暂时）我们改用记号$\phi_{x'}$ 代替 $\phi(x')$，这或许会更容易理解。那么，泛函 $\Psi[\phi(x')]$ 就只是一个关于所有带帽 $\phi_{x'}$ 变量的函数 $\Psi(\{\phi_{x'}\})$。算符 ϕ_x 的作用，即弦的坐标中第 $x-$ 个分量的算符，只不过是乘以 ϕ_x ，其中取这个特定的 x。注意，为了避免双重下标，我们在这里用 ϕ 表示算符。

同样，我们可以确定与动量 $\pi(x)$ 对应的算符。在"简化"的记法中，它应为 $\hat{}$ $\pi_x=-i\hbar\partial/\partial\phi_x$ ，这意味着用泛函导数表示时，它是

$$\pi_{\rm op}(x)\Psi[\phi(x')]=-i\hbar\frac{\delta}{\delta\phi(x)}\Psi[\phi(x')]\tag{2.11}$$

我们注意到，基本算符的对易子是

$$[\phi_{\rm op}(x),\pi_{\rm op}(y)]=i\hbar\delta(x-y)\tag{2.12}$$

这可以通过让对易子作用于任意波泛函来验证。

$$[\phi_{\rm op}(x),\pi_{\rm op}(y)]\Psi[\phi(x')]=-i\hbar\left(\phi(x)\frac{\delta}{\delta\phi(y)}\Psi[\phi(x')]-\frac{\delta}{\delta\phi(y)}\phi(x)\Psi[\phi(x')]\right)=$$

$$=-i\hbar\left(\phi(x)\frac{\delta}{\delta\phi(y)}\Psi[\phi(x')]-\frac{\delta\phi(x)}{\delta\phi(y)}\Psi[\phi(x')]-\phi(x)\frac{\delta}{\delta\phi(y)}\Psi[\phi(x')]\right)=$$

$$=i\hbar\delta(x-y)\Psi[\phi(x')]$$

将算符 $\phi_{\rm op}(x)$ 和 $\pi_{\rm op}(x)$ 代入哈密顿量（2.7），我们得到

$$H_{\rm op}=\int_0^L dx\left[\frac{1}{2}\pi_{\rm op}^2(x)+\frac{v^2}{2}\left(\frac{\partial\phi_{\rm op}(x)}{\partial x}\right)^2\right]\tag{2.13}$$

借助我们系统的哈密顿算符这一明确形式，我们可以继续求解薛¨定谔方程（2.4）。由于哈密顿量与时间无关，求解定态方程就足够了。

$$H_{\mathrm{op}}\Psi = E\Psi \tag{2.14}$$

求出它的所有解，就能够找到方程（2.4）的最一般解。

弦的哈密顿算符（2.7）看起来可能很复杂，但实际上相当简单，因为它对坐标和动量呈二次型依赖。这当然是弦方程（2.2）线性的直接结果。从离散形式（2.5）可以看出，这类方程描述的是耦合的简谐振子。求解这类问题的标准方法是变换到正则模。

2.1.3 提醒——振动正则模

让我们回顾一下，在由以下 N 个耦合方程构成的一般情形中，如何进行向正则模的变换

$$m_l\ddot{q}_l = -\sum_{n=1}^{N} k_{ln}q_n \ \ , l = 1, ..., N \tag{2.15}$$

其中质量为 m_l ，弹性常数由 N 对称矩阵 $k_{ln} = k_{nl}$ 表示。为简单起见，以下假设所有质量均相等，即 $m_1 = ... = m_N$ =m。这个问题的哈密顿量是动能与势能的标准和

$$H = \frac{1}{2m}\left[\sum_{l=1}^{N} p_l^2 + \sum_{l,n=1}^{N} mk_{ln}q_lq_n\right] \tag{2.16}$$

我们来尝试方程 (2.15) 的如下解

$$q_l = Re(C_l e^{i\omega t}), \ \ l = 1, ..., N$$

其中 Re 表示实部， C_l 是常数。这种形式假设所有自由度都以相同的频率振动。将其代入方程 (2.15)，得到

$$\sum_{n=1}^{N}(k_{ln} - m\omega^2\delta_{ln})C_n = 0 \tag{2.17}$$

这里提醒一下，为简便起见，我们令所有 $m_i = m$。要使解非平凡，必须要求

$$\det(k_{ln} - m\omega^2\delta_{ln}) = 0 \tag{2.18}$$

这表明 ω^2 是矩阵 k_{ln}/m 的本征值，这意味着一般而言会有 N 个这样的解，它们将具有 $\omega^2 > 0$ ，前提是 k_{ln} 为正定矩阵。

我们用 ω_ν and $\{C_n^\nu\}$ 表示方程（2.17）的 N 个解。k_{ij} 的对称性保证了具有不同本征值 ω_ν的本征向量$\{C_n^\nu\}$'之间的正交性。对于一个

简并情形，即如果有些$\omega_\mu = \omega_\nu$ 人可以自由选择 $\{C_n^\mu\}$ 和 $\{C_n^\nu\}$ ，以确保正交性在此情形下也成立。我们还注意到，由于方程(2.17)是齐次的，给定矢量 $\{C_n^\nu\}$ 中至少有一个分量是任意的，可以用来将 $\{C_n^\nu\}$的归一化设为单位值。因此我们有正交归一性

$$\sum_{n=1}^{N} C_n^\mu C_n^\nu = \delta_{\mu\nu}$$

这 N 个向量 $\{C_n^\nu\}$ 每个都包含 N 个分量，它们构成一个 $N \times N$ 矩阵。正交归一性条件（以及这里不讨论的完备性）意味着该矩阵是正交的（对于复数 C_n，则是幺正的）。我们用它来变换到新的坐标:

$$q_n = \sum_{\nu=1}^{N} C_n^\nu Q_\nu \tag{2.19}$$

将此式代入方程 (2.15)（其中 $m_i = m$），并利用方程 (2.17)，可得

$$\sum_{\nu=1}^{N} [mC_l^\nu \ddot{Q}_\nu + \sum_{n=1}^{N} k_{ln} C_n^\nu Q_\nu] = \sum_{\nu=1}^{N} mC_l^\nu [\ddot{Q}_\nu + \omega_\nu^2 Q_\nu] = 0 \tag{2.20}$$

由于 C的正交性，可以发现 Q_ν的方程彼此解耦。事实上，将方程乘以 C_l^μ 并对 l 求和，可得

$$\ddot{Q}_\mu + \omega_\mu^2 Q_\mu = 0 \ , \ \mu = 1, ..., N \ . \tag{2.21}$$

从原坐标 q_l 到新坐标 Q_ν 的变换 (2.19) 称为正则模变换，而 Q_ν 则称为正则模坐标。

哈密顿量在新坐标下是什么形式？要回答这个问题，我们还需要在 (2.19) 中加入到相应正则模动量的变换。由于在我们的情形中 $p_l = m\dot{q}_l$ ，显然 p的变换方式与 q相同

$$p_n = \sum_{\nu=1}^{N} C_n^\nu P_\nu \tag{2.22}$$

将此式和式(2.19)代入哈密顿量 (2.16)，利用 C_n^μ 的正交归一性以及方程 (2.17)，可得

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^{\infty} [P_\mu^2 + \omega_\mu^2 Q_\mu^2] \tag{2.23}$$

其中，为简便起见，我们令 $m = 1$。用正则模变量表示时，哈密顿量就是一组独立振子。

2.1.4 弦作为解耦振子的集合

吉他弦的正则模

现在，我们将使用上一小节中描述的技术，把弦哈密顿量变换为一组独立振子。我们正在寻找

从弦坐标 $\phi(x)$ 到正则模坐标的变换（2.19）的类比。由于这里 x 扮演 q_n 中指标 n 的角色，因此该变换的矩阵 C_n^ν 的类比应为定义在区间 $0 \le x \le L$ 上的 x 函数。我们将这些函数的集合记为 $u_n(x)$，并写作

$$\phi(x) = \sum_\nu u_\nu(x) Q_\nu \quad , \quad u_\nu(0) = u_\nu(L) = 0 \tag{2.24}$$

其中我们指出，为确保边界条件 (2.1)， $u_\nu(x)$ 应在弦的端点处为零。

通过比较弦方程 (2.2) 和耦合振子方程 (2.15)，我们看到耦合矩阵 k_{ij} 的作用由 $-v^2\partial^2/\partial x^2$ 承担，因此函数 $u_n(x)$ 必须满足（参见方程 (2.17)）

$$-v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u_\nu(x) = \omega^2 u_\nu(x) \quad , \quad u_\nu(0) = u_\nu(L) = 0 \tag{2.25}$$

其具有正交归一特征函数解

$$u_\nu(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_\nu x \quad , \quad k_\nu = \frac{\pi\nu}{L} \quad , \quad \nu = 1, 2, ... \tag{2.26}$$

具有本征值

$$\omega_\nu = v k_\nu \tag{2.27}$$

我们已确定 $u_\nu(x)$'s 中的系数，使这些函数归一化。

总结而言，函数(2.26) 表示弦的正则模的构型，在这些构型中，弦上的所有点都以相同的频率 ω_ν 振荡，该频率取决于该模式的波数 k ，见式(2.27)。我们提醒读者，一般而言，频率关于波矢的关系式 $\omega = \omega(k)$ 被称为色散关系。它是线性波最重要的特征。

弦正则模的量子力学

利用 $u_\nu(x)$，我们可以将弦的哈密顿算符（2.13）变换为独立振子的和。我们将算符 $\phi_{\rm op}(x)$ 和 $\pi_{\rm op}(x)$ 视为 x 的函数并展开。

$$\phi_{\rm op}(x) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_\nu x \, \hat{Q}_\nu \quad , \quad \pi_{\rm op}(x) = \sum_{\nu=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin k_\nu x \, \hat{P}_\nu \tag{2.28}$$

ˆ ˆ 由于我们展开的是算符值函数，因此这里的系数 Q_ν 和 P_ν 是算符；为避免出现双重下标，我们在上文用帽子标记了它们。

这些算符必须满足一些重要关系，才能保持 $\phi_{\rm op}(x)$ 与 $\pi_{\rm op}(x)$ 之间的正则对易关系 (2.12)。这些算符本身必须是正则的，即必须遵循

$$[\hat{Q}_\mu, \hat{P}_\nu] = i\hbar\delta_{\mu\nu} \quad , \quad [\hat{Q}_\mu, \hat{Q}_\nu] = [\hat{P}_\mu, \hat{P}_\nu] = 0 \tag{2.29}$$

这可以通过两种方式之一来验证。我们可以将展开式 (2.28) 代入 $[\phi_{\rm op}(x)\ \pi_{\rm op}(y)]$。利用上面的第一个对易子和完备关系式

$\sum_\nu u_\nu(x)u_\nu(y) = \delta(x-y)$ 我们将得到 (2.12) 确实成立。其余两个对易子仅仅保证 $\phi_{\rm op}(x)$ 和 $\pi_{\rm op}(x)$ 在不同点处对易。另一种方法是"反演" (2.28)

$$\hat{Q}_\nu = \int_0^L \phi_{\rm op}(x)\sqrt{\frac{2}{L}}\sin k_\nu x\, dx \quad , \quad \hat{P}_\nu = \int_0^L \pi_{\rm op}(x)\sqrt{\frac{2}{L}}\sin k_\nu x\, dx \tag{2.30}$$

并计算所需的对易子。顺便说一句，上述关系式还展示了 ^ 算符 Q_ν 和 P_ν 应如何作用于波泛函 $\Psi[\phi(x)]$。

对易关系 (2.29) 意味着 P_μ 和 Q_μ 分别是弦的正则模的坐标与动量算符。如从 (2.28) 可见，在经典情况下，它们是表示弦所能支持的所有简谐驻波振幅及其速度的坐标与动量。

将上述展开代入（2.13），并利用集合（2.26）的正交归一性，我们得到

$$H_{\rm op} = \frac{1}{2}\sum_{\nu=1}^{\infty}(\hat{P}_\nu^2 + \omega_\nu^2\hat{Q}_\nu^2) \tag{2.31}$$

哈密顿算符化简为若干项之和，其中每一项代表一个质量为单位质量、频率为 ω_ν 的简谐振子。需要注意的是，弹性弦上的底层波只能通过振子的 ω 对相应波矢的依赖性体现出来，而这种依赖关系编码在色散关系（2.27）中。

从经典角度看，用正则模的动力学变量表示的哈密顿量简单形式 (2.31)，表明可以将弦的描述从 $\phi(x,\ t)$ $\pi(x,\ t)$ 切换为集合 $\{Q_\nu(t)\ P_\nu(t)\}$。从量子角度看，我们注意到，关系式 (2.10) 和 (2.30) 中的第一个 ^ 意味着算符 Q_ν 是简单的乘法算符。

$$\hat{Q}_\nu\Psi[\phi(x)] = Q_\nu\Psi[\phi(x)]$$

根据对易关系 (2.29)，正则共轭算符 ^ P_ν 可取为

$$\hat{P}_\nu\Psi[\phi(x)] = -i\hbar\frac{\partial}{\partial Q_\nu}\Psi[\phi(x)]$$

这表明应切换到这样的描述，其中波泛函 $\Psi[\phi(x)]$ 被视为（形式上无限多个）变量 Q_ν 的函数

$$\Psi[\phi(x)] \to \Psi(\{Q_\nu\})$$

现在我们注意到，表示 $H_{\rm op}$的求和式中的各项彼此对易，这是由于式 (2.29) 中最后一对对易子所致。这意味着， $H_{\rm op}$ 的本征函数是求和式中所有各个项的本征函数的乘积，而相应的本征值则是各个本征值之和。

$$\begin{aligned} E_{\{N_\nu\}} &= \sum_{\nu=1}^{\infty}\hbar\omega_\nu(N_\nu+\frac{1}{2}) \ = E_{\text{ground state}} + \sum_{\nu=1}^{\infty}\hbar\omega_\nu N_\nu \ , \ N_\nu = 0,1,2,... \\ E_{\text{ground state}} &= \sum_{\nu=1}^{\infty}\frac{\hbar\omega_\nu}{2} \ , \ \Psi_{\{N_\nu\}}(\{Q_\nu\}) = \prod_{\nu=1}^{\infty}\psi_{N_\nu}(\beta_\nu Q_\nu) \ , \ \beta_\nu = \sqrt{\omega_\nu/\hbar} \end{aligned} \tag{2.32}$$

本征函数 ψ_N 是众所周知的谐振子本征函数。

$$\psi_N(y) = \frac{1}{\sqrt{2^N N!}} \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-y^2/2} H_N(y) \tag{2.33}$$

其中， $H_N(y)$表示 N 阶厄米特多项式。图 2.2 展示了其中若干函数的图像。

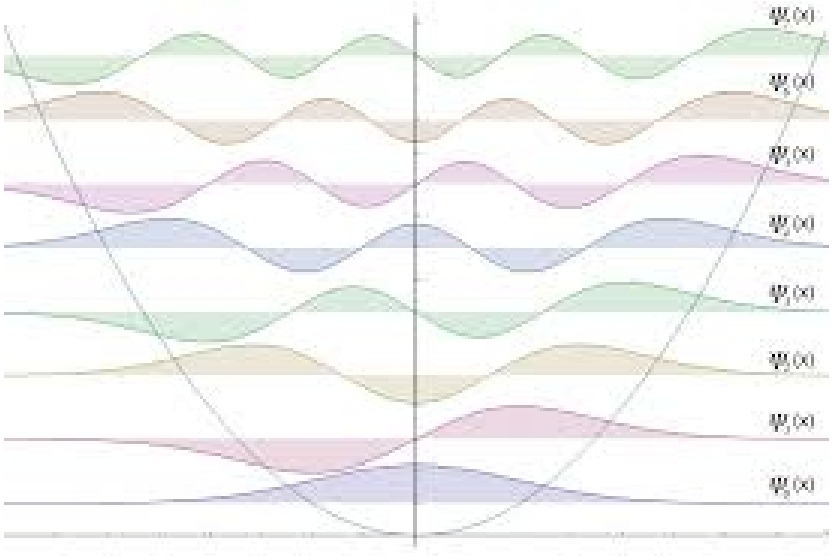


图 2.2：谐振子的能级及其对应的波函数。能级是“等间距”的，相邻能级之间的能量间隔相等

能量（2.32）体现了弦量子化讨论中最重要的结论：它可以看作由能量为 $\hbar\omega_\nu = \hbar v k_\nu$ 的独立量子组成的集合。这是两个普遍特征的结果：弦是一个线性动力系统，因此由一系列正则模振子组成；而振子的量子能级是“等间距”的，即相邻能级之间的能量间隔相等 $\hbar\omega$。

下一节我们将讨论闭弦。它不仅能像当前讨论的两端固定的弦那样支持驻波形式的正则模，也能支持行波。我们将证明，这些模式对应的能量量子携带机械动量，因此可以视为粒子。

弦基态。卡西米尔效应

(2.32) 中的基态能量形式上是无穷多个“零点运动”项之和。这是一个与存在具有$k_\nu \to \infty$ 的波（即无限小的波长 $\lambda_\nu = 2\pi/k_\nu$）这一形式可能性相关的“紫外”无穷大。当然，在实际中，式 (2.2) 给出的简单描述在原子尺度上不再有效，应由更为复杂的模型取代。作为一种（更加实用的）替代方案，可以引入

对模型中“允许的”正则模设置截止值 k_{cutoff}，并将模型（2.2）的有效范围限制在尺度 $\gg \lambda_{cutoff} = 2\pi/k_{cutoff}$。

记 ν_c 为对应于 $k_{cutoff} = \pi\nu_c/L$ 的最大整数 ν，基态波函数是 ν_c 个高斯函数的乘积

$$\begin{aligned}\Psi_{\text{ground state}}(\{Q_\nu\}) = \prod_{\nu=1}^{\nu_c} \psi_0(\beta_\nu Q_\nu) = \\ = \prod_{\nu=1}^{\nu_c} \left(\frac{\omega_\nu}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\sum_{\nu=1}^{\nu_c} \omega_\nu Q_\nu^2/2\hbar\right)\end{aligned} \tag{2.34}$$

它们表示量子弦的“零点”涨落；即使处于最低能量态，量子弦也并非静止不动。

正如我们将在后续章节中看到的，电磁场的基态预计也会表现出类似的零点涨落；其基态就是该理论的真空。我们能否观测到这些真空涨落？在1948年一篇著名论文中，卡西米尔提出了一种实现这一点的方法，这种方法后来被称为卡西米尔效应。现在，我们将以吉他弦基态这个简单例子来解释其基本原理。

让我们来看看，如果我们“按住”量子吉他弦，也就是说，在某个位置 $x = d$ 用一根想象中的手指用力按压，使弦在此处无法振动（见图2.3），会发生什么。显然，这会改变弦的正则模，排除在 $x = d$处不为零的模式。这意味着基态能量密度会发生变化。事实上，新的正则模将由两个族构成，分别满足$\omega'_\nu = vk_\nu = v\pi\nu/d$ 和 $\omega''_\nu = v\pi\nu/$（$L - d$）。相应的基态能量也将由两部分构成

$$E_0(d) = \sum_{\nu=1}^{\nu_c} \frac{\hbar v\pi}{2}\left[\frac{\nu}{d} + \frac{\nu}{L-d}\right] \tag{2.35}$$

显然，对于 $d = L/2$，两部分相等；而对于 $d < L/2$ （$d > L/2$），第一 st 项，也就是说，较窄（较宽）部分的能量小于（大于）第二项 .

上述表达式中的有限截止频率 $\sim \nu_c$ 对求和 $\sum_\nu \nu$ 的（紫外）散度进行了“规整”。要从最终结果中消去 ν_c，必须对其进行“重整化”，参见文献 [2], ；具体做法是计算 E_0（d）相对于 $d = L/2$ 处对称构型的值，结果为 [1]

$$\Delta E_0(d) \equiv E_0(d) - E_0(L/2) = -\frac{\pi\hbar v}{24}\left(\frac{1}{d} + \frac{1}{L-d} - \frac{4}{L}\right)$$

[1]常见的计算方法是采用“软”截止，即将例如 $\sum_{\nu=1}^{\nu_c} \nu$ 替换为 $\sum_{\nu=1}^{\infty} \nu e^{-\nu/\nu_c}$，再使用 $\nu_c \to \infty$ 计算最后一个求和

$$\sum_{\nu=1}^{\infty} \nu e^{-\alpha\nu} = -\frac{\partial}{\partial\alpha}\sum_{\nu=1}^{\infty} e^{-\alpha\nu} = \frac{\partial}{\partial\alpha}\frac{1}{1-e^\alpha} \underset{\alpha\to 0}{\longrightarrow} \frac{1}{\alpha^2} - \frac{1}{12} + ...$$

与 $\alpha = 1/\nu_c$

可以看出， $\Delta E_0(d)$ 关于 $d \to L-d$ 对称，并且随着 $d \to 0$ 单调递减，随着 $d \to L$ 递减

$$\Delta E_0(d)|_{d \ll L/2} \to -\frac{\pi\hbar v}{24}\frac{1}{d} \quad , \quad \Delta E_0(d)|_{L-d \ll L/2} \to -\frac{\pi\hbar v}{24}\frac{1}{L-d} \tag{2.36}$$

对 d 的依赖意味着，函数 $E_0(d)$可以被视为弦在 $x = d$ 处分离点的势能，并且存在一个力

$$F(d) = -\frac{\partial E_0(d)}{\partial d}$$

作用在导致弦的两部分分离的因素上（想象中的按弦手指）。这种力“试图将”分离推向弦的端点。关于这种力，一个简单的物理直觉是，在分离点 $x = d$ when $d \neq L/2$ 两侧，基态涨落辐射压强并不平衡。不过必须注意，情况要微妙得多，因为力的方向取决于在 $x = d$ 假设的边界条件类型。详情参见参考文献 [2]。

力 $F(d)$ 称为卡西米尔力，它的出现是卡西米尔效应的一种表现。稍后，我们将在量子化电磁场的真空涨落这一背景下重新讨论这种效应。

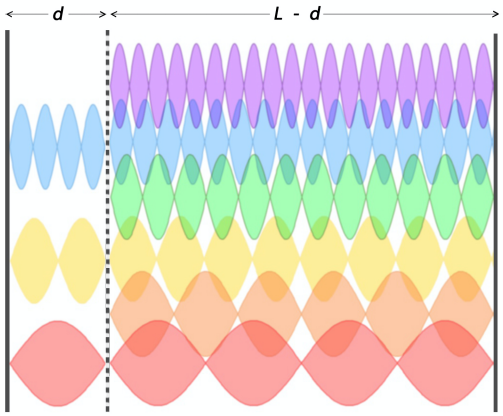


图 2.3：在 $x = d$ 处按下的吉他弦及其（示意绘制的）正则模

2.2 行波的量子化。闭弦

上一节描述的弦的正则模是驻波，这一点从考察展开式 (2.28) 可以最清楚地看出。在经典情况下， Q_ν 和 P_ν 是函数 $Q_\nu(t)$ $P_\nu(t)$，每个函数都以频率 ω_ν 随时间作简谐变化。因此，(2.28) 中的每一项都是驻波 $\sim Q_\nu(t) \sin k_\nu x$ 和 $\sim P_\nu(t) \sin k_\nu x$。

2.2.1 行波展开

周期性边界条件

定义正则模的方程 (2.25) 的驻波解，是吉他弦的固定端边界条件 (2.1)的结果。这些条件反映在正则模方程 Eqs. (2.25) 的边界条件 $u_\nu(0) = u_\nu(L) = 0$ 中。本节将探讨一种更有趣且实用的情形，即正则模是行波。当对弦假设周期性边界条件时，这种情形就能实现，即对于每个 x

$$\phi(x,t) = \phi(x+L,t) \tag{2.37}$$

这实际上意味着这根弦没有端点，也就是说，它是闭合的，相当于一个圆。顺便指出，对周期性条件关于x 求导可知， ϕ 的导数 $\partial\phi/\partial x$、 $\partial^2\phi/\partial x^2$等也都是周期性的。根据弦方程 (2.2)，时间导数也是周期性的。

$\phi(x)$的周期性边界条件可转化为以下条件

$$u_\nu(x) = u_\nu(x+L)$$

取代正则模方程 (2.25) 中的固定端条件。现在，解构成一组无限多个简并对，每对都具有相同的频率

$$\sqrt{\frac{2}{L}}\sin k_\nu x \quad , \quad \sqrt{\frac{2}{L}}\cos k_\nu x \quad , \quad k_\nu = \frac{2\pi\nu}{L} \quad , \quad \omega_\nu = vk_\nu \quad , \quad \nu = 1,2,... \tag{2.38}$$

这种简并由 k_ν 取值间隔增大一倍$\Delta k = 2\pi/L$ 来“补偿”，相比于 $\Delta k = \pi/L$的驻波解 (2.26) 是如此。在实空间中，这意味着闭弦的正则模在弦长 L 上包含整数个 $L/\lambda_\nu = \nu$ 波长 $\lambda_\nu = 2\pi/k_\nu = L/\nu$ ，而不是像固定端弦的情形那样包含整数个半波长 $\lambda_\nu = 2L/\nu$ 。

属于不同频率的解自动正交，我们还选择使每个简并对内部的解也彼此正交。下面是一个有用的积分

$$\begin{aligned}\int_0^L \sin k_\nu x \cos k_\mu x dx &= \int_0^L \frac{1}{2}\left[\sin(k_\nu + k_\mu)x + \sin(k_\nu - k_\mu)x\right]dx = \\ &= -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{k_\nu + k_\mu}\cos(k_\nu + k_\mu)x\Big|_0^L + \frac{1}{k_\nu - k_\mu}\cos(k_\nu - k_\mu)x\Big|_0^L\right] = 0\end{aligned}$$

我们也像固定端情形一样对它们进行归一化。

正如简并情形下一贯如此，上述选择当然并非唯一。另一个有用的可能性是

$$\frac{1}{\sqrt{L}}e^{ik_\nu x} \quad , \quad k_\nu = \frac{2\pi\nu}{L} \quad , \quad \omega_\nu = v|k_\nu| \quad , \quad \nu = \pm1, \pm2, ... \tag{2.39}$$

再次选择频率简并的正交对。我们将在下面看到这种选择的结果，参见公式 (2.64)。在接下来的各节中，我们将利用指定闭弦正则模简并的自由度来求得行波展开。

还要注意，存在一个不振动的常数解 $u_0(x) = \text{const}$，其满足$\omega = 0$。这意味着，该模式下的弦构型是常数，与x无关，并且具有线性的时间依赖关系 $\phi(x,t) = at + b$。它描述了一条做匀速运动的弦，并且在所谓的超弦理论中发挥着重要作用。它与我们无关，因此不会纳入我们的讨论。

尝试最简单的展开

利用上述简并模式进行的最自然的展开为

$$\begin{aligned}\phi(x,t) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{\nu=1}^{\infty}[Q_{1,\nu}(t)\sin k_\nu x + Q_{2,\nu}(t)\cos k_\nu x] \\ \pi(x,t) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{\nu=1}^{\infty}[P_{1,\nu}(t)\sin k_\nu x + P_{2,\nu}(t)\cos k_\nu x]\end{aligned} \tag{2.40}$$

其中有两组独立的振幅 $\{Q_{1,\nu}(t)P_{1,\nu}(t)\}$ 和 $\{Q_{2,\nu}(t)P_{2,\nu}(t)\}$，分别对应两个简并模式。将其代入弦方程，并对每个模式进行投影，可得到相互解耦的方程

$$\ddot{Q}_{i,\nu} + \omega_\nu^2 Q_{i,\nu} = 0 \quad ; \quad i = 1,2 \quad ; \quad \nu = 1,2,... \tag{2.41}$$

以及相应的哈密顿量

$$H = \sum_{i=1,2}\sum_{\nu=1}^{\infty} H_{i,\nu} \quad , \quad H_{i,\nu} = \frac{1}{2}\left(P_{i,\nu}^2 + \omega_\nu Q_{i,\nu}^2\right)$$

通解

$$\begin{aligned}Q_{i,\nu}(t) &= Q_{i,\nu}(0)\cos\omega_\nu t + P_{i,\nu}(0)/\omega_\nu \sin\omega_\nu t \\ P_{i,\nu}(t) &= -\omega_\nu Q_\nu(0)\sin\omega_\nu t + P_\nu(0)\cos\omega_\nu t\end{aligned} \tag{2.42}$$

然而，任意初始条件 $Q_{i,\nu}(0)$ 和 $P_{i,\nu}(0) = Q_{i,\nu}(0)$ 表明，上述展开将根据这些条件以驻波或行波的形式表示。

变换到新的正则模变量

为了得到行波展开，我们利用每个 k_ν 处两个模式的简并性，并进行如下变换

$$\begin{aligned}Q_{1,\nu} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q_k - Q_{-k}) \quad , \quad P_{1,\nu} = \frac{1}{\sqrt{2}}(P_k - P_{-k}) \\ Q_{2,\nu} &= \frac{1}{\omega_k\sqrt{2}}(P_k + P_{-k}) \quad , \quad P_{2,\nu} = -\frac{\omega_k}{\sqrt{2}}(Q_k + Q_{-k})\end{aligned} \tag{2.43}$$

变换到新变量 $Q_{\pm k}$，$P_{\pm k}$。注意，为简化记号，我们省略了右侧的下标ν，并相应地记作 $\omega_k = v|k|$。我们注意到，上述

变换混合了坐标和动量。在附录中，我们证明该变换是正则的。

将（2.43）代入展开式（2.40），我们得到

$$\begin{aligned}\phi(x,t) &= \sqrt{\frac{1}{L}}\sum_k \left[Q_k(t)\sin kx + \frac{P_k(t)}{v|k|}\cos kx\right] \\ \pi(x,t) &= \sqrt{\frac{1}{L}}\sum_k \left[P_k(t)\sin kx - v|k|Q_k(t)\cos kx\right]\ ,\ k = \frac{2\pi\nu}{L}\ ,\ \nu = \pm 1, \pm 2, ...\end{aligned} \tag{2.44}$$

其中，我们通过将求和范围扩展到包含 k 的负值，把关于 Q_k, P_k 和 Q_{-k}, P_{-k} 模式的求和合并在了一起。我们在附录中证明，这正是所需的行波展开——具有正、负 k 的波向相反方向传播。新变量下的哈密顿量具有独立振子的形式

$$H = \frac{1}{2}\sum_k \left(P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2\right) \tag{2.45}$$

其中求和范围包括正负两种 k。需要注意的关键点是，与式（2.40）相比，在展开式（2.44）中，这是通过令第二个简并模式的振幅不再独立，而是与第一个模式振幅的正则共轭量成正比，并将求和范围扩展到负 k 来实现的。

变换求逆

我们要指出，对（2.44）求逆时需要格外小心。最简单的方法是回想一下，对于正的 $k > 0$，$\sqrt{2/L}\sin\ kx$ 和 $\sqrt{2/L}\cos\ kx$ 构成一组正交归一集，并结合关系式（2.43）使用展开式（2.40）。这意味着， Q_k 和 P_k 的以下组合是简单的投影。

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{2}}(Q_k - Q_{-k}) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\int_0^L dx\ \phi(x)\sin kx \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(P_k - P_{-k}) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\int_0^L dx\ \pi(x)\sin kx \\ \frac{1}{\omega_k\sqrt{2}}(P_k + P_{-k}) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\int_0^L dx\ \phi(x)\cos kx \\ -\frac{\omega_k}{\sqrt{2}}(Q_k + Q_{-k}) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\int_0^L dx\ \pi(x)\cos kx\end{aligned} \tag{2.46}$$

由此，只需简单计算即可得到各个 Q_k 和 P_k 的表达式 .

$$\begin{aligned}Q_k &= \frac{1}{\sqrt{L}}\int_0^L dx[\phi(x)\sin kx - \frac{1}{\omega_k}\pi(x)\cos kx] \\ P_k &= \frac{1}{\sqrt{L}}\int_0^L dx[\pi(x)\sin kx + \omega_k\phi(x)\cos kx]\end{aligned} \tag{2.47}$$

新变量的物理学

我们将展开式 (2.44) 中各项的表达式写成一个单独的函数。为此，我们将其变换为

$$Q_k = C_k \cos\alpha_k \ \ , \ \ P_k = -\omega_k C_k \sin\alpha_k \ \ , \ \ C_k = \frac{1}{\omega_k}\sqrt{P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2} \tag{2.48}$$

这给出

$$\begin{aligned} Q_k \sin kx + \frac{P_k}{\omega_k}\cos kx &= C_k \sin(kx - \alpha_k) \\ P_k \sin kx - \omega_k Q_k \cos kx &= -\omega_k C_k \cos(kx - \alpha_k) \end{aligned} \tag{2.49}$$

由于振幅 C_k 与模式能量的平方根成正比，因此对于该模式随时间的振荡，它是一个运动常数。容易证明，相位 $\alpha_k(t)$正是

$$\alpha_k(t) = \omega_k t + \alpha_k(0)$$

事实上，写成

$$C_k = \sqrt{2I_k/\omega_k}$$

可以发现，方程（2.48）本质上是从 P_k, Q_k 到谐振子的作用-角变量 I_k, α_k 的正则变换，参见文献[3], ，其中

$$\begin{aligned} I_k &= \frac{1}{2\omega_k}(P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2) \ \ , \ \ \tan\alpha = -P_k/\omega_k Q_k \\ \dot{I}_k &= 0 \ \ , \ \ \dot{\alpha}_k = \omega_k \end{aligned} \tag{2.50}$$

弦的机械动量

除了哈密顿量之外，描述弦物理性质的一个重要量是其机械动量（请不要将此 $\mathbb{P}$ 与正则 P_k 动量混淆）

$$\mathbb{P} = -\int_0^L \pi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\phi(x,t)dx \tag{2.51}$$

它由弦的运动方程（2.2）守恒，正如下述计算所示。定义 P的密度

$$\mathcal{P}(x,t) = -\pi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\phi(x,t)$$

我们有

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{P}(x,t)}{\partial t} &= -\frac{\partial \pi(x,t)}{\partial t}\frac{\partial \phi(x,t)}{\partial x} - \pi(x,t)\frac{\partial^2 \phi(x,t)}{\partial t \partial x} \\ &= -v^2 \frac{\partial^2 \phi(x,t)}{\partial x^2}\frac{\partial \phi(x,t)}{\partial x} - \pi(x,t)\frac{\partial \pi(x,t)}{\partial x} \\ &= -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left[v^2\left(\frac{\partial \phi(x,t)}{\partial x}\right)^2 + \pi^2(x,t)\right] \end{aligned}$$

这是连续性方程的一维类比，它将 $\mathcal{P}(x,t)$ 的时间导数与哈密顿量密度的空间导数联系起来

$$\mathcal{H}(x,t) = \frac{1}{2}\left[\pi^2(x,t) + v^2\left(\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial x}\right)^2\right]$$

对其积分并使用边界条件（必须使用周期边界条件，而非固定端边界条件），我们得到守恒定律

$$\frac{\partial\mathbb{P}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}\int_0^L \mathcal{P}(x,t)dx = 0 \tag{2.52}$$

2.2.2 行波的量子力学

基本算符。弦哈密顿量与动量

与固定端弦的情形一样，通过引入弦坐标的波泛函 $\Psi[\phi(x)\ t]$ 以及算符 $\phi_{op}(x) = \phi(x)$ 和 $\pi_{op}(x) = -i\hbar\delta/\delta\phi(x)$，对闭弦进行量子化。哈密顿算符与式（ 2.13 ）给出的一样，因为弦方程相同。不同之处在于边界条件，这些条件导致正则模发生修正（简并），并得到相应的展开式（2.44）。

利用算符的这些展开式

$$\begin{aligned}\phi_{op}(x) &= \sqrt{\frac{1}{L}}\sum_k\left[\sin kx\ \hat{Q}_k + \frac{1}{v|k|}\cos kx\ \hat{P}_k\right]\\ \pi_{op}(x) &= \sqrt{\frac{1}{L}}\sum_k\left[\sin kx\ \hat{P}_k - v|k|\cos kx\ \hat{Q}_k\right]\end{aligned} \tag{2.53}$$

由此得到行波振幅的正则对易关系

$$[\hat{Q}_k, \hat{P}_{k'}] = i\hbar\delta_{kk'}\ ,\ [\hat{Q}_k, \hat{Q}_{k'}] = [\hat{P}_k, \hat{P}_{k'}] = 0 \tag{2.54}$$

这些关系当然可以由基本对易子（2.12）和表达式（2.47）推出。用 Q_k 和 P_k 表示的哈密顿算符形式与解耦振子的形式相同

$$H_{op} = \frac{1}{2}\sum_k\left[\hat{P}_k^2 + \omega_k^2\hat{Q}_k^2\right] \tag{2.55}$$

在量子力学中，弦动量 $\mathbb{P}$（式（2.51））变成了一个算符

$$P_{\rm op} = -\frac{1}{2}\int_0^L dx\left\{\pi_{\rm op}(x)\frac{\partial}{\partial x}\phi_{\rm op}(x)dx + \left[\frac{\partial}{\partial x}\phi_{\rm op}(x)\right]\pi_{\rm op}(x)\right\} \tag{2.56}$$

像往常处理非对易算符的乘积（此处为 $\pi_{\rm op}(x)$ 和 $\phi_{\rm op}(x)$）一样，必须使用对称化表达式。

算符 $P_{\rm op}$ 是平移生成元

$$\phi_{\rm op}(x) \to \phi_{\rm op}(x+a)\ \ ,\ \ \pi_{\rm op}(x) \to \pi_{\rm op}(x+a)$$

事实上，利用基本对易子（2.12）可以很容易地验证

$$[P_{\rm op},\phi_{\rm op}(x)]=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\phi_{\rm op}(x)\quad,\quad[P_{\rm op},\pi_{\rm op}(x)]=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\pi_{\rm op}(x)\tag{2.57}$$

正如平移生成元应有的那样。

将展开式（2.53）代入动量 $P_{\rm op}$ 中，我们得到

$$\begin{aligned}P_{\rm op}&=-\frac{1}{L}\sum_{kk'}\int_0^L\left[\sin kx\ \hat{P}_k-v|k|\cos kx\ \hat{Q}_k\right]\left[k'\cos k'x\ \hat{Q}_{k'}-\frac{k'}{v|k'|}\sin k'x\ \hat{P}_{k'}\right]dx\\&=\frac{1}{2}\sum_k\left[\frac{k}{v|k|}\hat{P}_k^2+vk|k|\hat{Q}_k^2\right]=\sum_k\frac{k}{\omega_k}\frac{1}{2}\left[\hat{P}_k^2+\omega_k^2\hat{Q}_k^2\right]\end{aligned}$$

本征态。行波量子的能量和动量

行波哈密顿量（2.55）具有与驻波（2.31）相同的解耦正则模振子形式，因此从形式上看，其解与（2.32）具有相同形式

$$\begin{aligned}&E_{\{N_k\}}=E_{\text{ground state}}+\sum_k\hbar\omega_kN_k\quad,\quad N_k=0,1,2,....\\&\Psi_{\{N_k\}}(\{Q_k\})=\prod_k\psi_{N_k}(\beta_kQ_k)\quad,\quad\beta_k=\sqrt{\omega_k/\hbar}\end{aligned}\tag{2.58}$$

与熟悉的谐振子本征函数 $\psi_N(\beta Q)$（式 (2.33)）相似，但仍存在重要差异。

由于 $\omega_k=v|k|$ 行波能量量子 $\epsilon_k=\hbar\omega_k$ 关于 k 的符号（方向）是二重简并的。更深刻的是，这些量子也携带动量。事实上，将弦动量的表达式 (2.58) P_{op} 与哈密顿量 H_{op} 进行比较，可以发现 P_{op} 具有相同的本征函数（这并不令人意外），其本征值为[2]

$$P_{\{N_k\}}=\sum_k\hbar kN_k\tag{2.59}$$

每个量子都有“机械”动量 $p_k=\hbar k$。因此，闭弦可以视为由行波“准”粒子构成的集合，其能量—动量关系为

$$\epsilon_k\equiv\hbar\omega_k=\hbar v|k|=v|p_k|\quad\Rightarrow\quad\epsilon(p)=v|p|\tag{2.60}$$

值得注意的是，这个结果可以看作是由三个基本关系（其中两个是基本的量子力学关系）——普朗克-爱因斯坦 $\epsilon=\hbar\omega$ 关系、德布罗意 $p=\hbar k$ 关系以及弦的色散关系$\omega=v|k|$——通过简便方法得到的推论。类似地，我们将在下文发现，电磁场的量子是具有能量-动量关系 $\epsilon=\hbar\omega=\hbar ck=cp$ 的粒子（光子），也就是说，它们是无质量的相对论粒子。薛定谔场的量子则具有 $\epsilon=\hbar\omega=\hbar^2k^2/2m=p^2/2m$，即非相对论粒子的能量-动量关系。

[2]此表达式中 $\pm\hbar k$ 项的存在有助于抵消其中的 $1/2$ “零点运动”项存在于能量表达式中。

向产生与湮灭算符的变换

在实际应用中，按照标准方式引入产生与湮灭算符非常方便。

$$\begin{gathered}\hat{Q}_k=\sqrt{\hbar/2\omega_k}\left(\hat{a}_k+\hat{a}_k^\dagger\right)\quad,\quad\hat{P}_k=i\sqrt{\hbar\omega_k/2}\left(\hat{a}_k^\dagger-\hat{a}_k\right)\\ \hat{a}_k=\sqrt{1/2\hbar\omega_k}\left(i\hat{P}_k+\omega_k\,\hat{Q}_k\right)\;,\;\hat{a}_k^\dagger=\sqrt{1/2\hbar\omega_k}\left(-i\hat{P}_k+\omega_k\,\hat{Q}_k\right)\\ [\hat{a}_k,\hat{a}_{k'}^\dagger]=\delta_{kk'}\quad,\quad[\hat{a}_k,\hat{a}_{k'}]=0=[\hat{a}_k^\dagger,\hat{a}_{k'}^\dagger]\end{gathered}\tag{2.61}$$

利用这些算符，我们可以写出哈密顿量

$$\hat{H}_r=E_0+\sum_k\hbar\omega_k\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k\tag{2.62}$$

及其本征态

$$|\{N_k\}>=\prod_k|N_k>=\prod_k\frac{(\hat{a}_k^\dagger)^{N_k}}{(N_k!)^{1/2}}|0>\tag{2.63}$$

使用$\hat{a}$ 和$\hat{a}^\dagger$ 算符而非 $\hat{}P$ 和 $\hat{}\,Q$ 算符的一大优势，是这些算符对“数态”（即每个正则模中准粒子数目固定的态）的“作用”非常简单。示意如下:

$$\hat{a}|n>=\sqrt{n}|n-1>\quad,\quad\hat{a}^\dagger|n>=\sqrt{n+1}|n+1>$$

用详细记号表示

$$\hat{a}_k|\{N_k\}>=\sqrt{N_k}|N_k-1>\prod_{k'\neq k}|\{N_{k'}\}>$$

$$\hat{a}_k^\dagger|\{N_k\}>=\sqrt{N_k+1}|N_k+1>\prod_{k'\neq k}|\{N_{k'}\}>$$

我们称算符$\hat{a}_k^\dagger$ 和$\hat{a}_k$ 分别产生和湮灭能量为 $\hbar\omega$、动量为 $\hbar k$的准粒子。

用 a 和$a^\dagger$表示场算符很有用。利用（2.53），我们得到

$$\begin{aligned}\phi_{op}(x)&=-i\sum_k\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_kL}}\left[\hat{a}_ke^{ikx}-\hat{a}_k^\dagger e^{-ikx}\right]=-i\sum_k\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_kL}}\left[\hat{a}_k-\hat{a}_{-k}^\dagger\right]e^{ikx}\\ \pi_{op}(x)&=-\sum_k\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2L}}\left[\hat{a}_ke^{ikx}+\hat{a}_k^\dagger e^{-ikx}\right]=-\sum_k\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2L}}\left[\hat{a}_k+\hat{a}_{-k}^\dagger\right]e^{ikx}\end{aligned}\tag{2.64}$$

其中的是一些项的和，这些项要么产生一个动量为 $\hbar k$ 的量子，要么湮灭一个动量为相反值 $-\hbar k$ 的量子。

2.3 电磁场量子化

电磁场的量子化沿用上述简单弦的同一思路。场的经典方程是麦克斯韦方程。现在，我们将把它们写成哈密顿形式，并确定场的哈密顿量、正则坐标和动量。随后，我们将用满足正则对易关系、作用于相应波泛函的算符来取代它们。

2.3.1 麦克斯韦方程的哈密顿形式

麦克斯韦方程具有熟悉的形式[3]

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad , \quad \nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r},t) = 0 \tag{2.65}$$
$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r},t)}{\partial t} \quad , \quad \nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r},t) = \frac{1}{c^2}\frac{\partial \mathbf{E}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r},t)}{c^2\epsilon_0}$$

这里 c 是光速， ϵ_0 是一个称为真空介电常数的常数，它与我们选择国际单位制有关。

麦克斯韦方程描述了给定电流分布 $\mathbf{j}(\mathbf{r}\ t)$ 和电荷密度 $\rho(\mathbf{r}\ t)$ 时的电磁场构型。假设我们处理的是一个由 N 个电荷组成的系统，并用 $\mathbf{r}_a(t)$ 、$\mathbf{v}_a(t)$ $a = 1, ..., N$ 表示它们的位置和速度，我们有

$$\rho(\mathbf{r},t) = \sum_{a=1}^{N} q_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)) \ , \ \mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \sum_{a=1}^{N} q_a \mathbf{v}_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a(t)) \tag{2.66}$$

这些表达式必须辅以电荷在给定的 $\mathbf{E}(\mathbf{r}\ t)$ 和 **磁场**$(\mathbf{r}\ t)$ 中运动时所满足的力学运动方程。这些方程就是电荷的牛顿方程

$$m_a \frac{d\mathbf{v}_a}{dt} \quad = \quad q_a \mathbf{E}(\mathbf{r}_a,t) + q_a \left(\mathbf{v}_a \times \mathbf{B}(\mathbf{r}_a,t)\right) \ , \ \mathbf{v}_a = \frac{d\mathbf{r}_a}{dt} \quad , \quad a =, ..., N \tag{2.67}$$

耦合方程 (2.65)、(2.66) 和 (2.67) 构成了完整的系统，它决定了电荷的位置及其运动如何决定电磁场，以及该场如何决定电荷的运动。我们的首要目标是将这个系统写成哈密顿形式，从而确定其正则变量和哈密顿量。

矢势。 $A_0 = 0$ 规范

我们首先注意到，麦克斯韦方程的第一对方程（2.65）不涉及时间导数。从某种意义上说，它们是对$\mathbf{E}(\mathbf{r})$ 和 $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ 可能的泛函依赖关系所施加的约束。这两个约束都很容易解决。条件 $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ 意味着自然界中不存在磁荷，并且$\mathbf{B}$ 可以表示为任意矢量函数的旋度

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \tag{2.68}$$

[3]本章采用国际单位制。

这通常称为矢势。在讨论外部电磁场中运动的那一章里，我们已经看到，如果不显式使用这个函数，量子力学表述就无法实现。同样，我们现在也会发现，电磁场量子化离不开**A**。

麦克斯韦方程的第二组由动力学方程组成。将式（2.68）代入这组方程中的第一个方程，我们得到

$$\nabla \times (\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla A_0 \tag{2.69}$$

这里 A_0 是（用非相对论术语来说）“标势”，它与 **A**一起完全确定场 **E** 和 **磁场**。势 **A** 和 A_0 并非唯一确定的。我们可以改为选择不同的函数 $A_0'(\mathbf{r}\ t)$ 和 $\mathbf{A}'(\mathbf{r}\ t)$，它们与 A_0 和**A** 通过规范变换相关

$$A_0' = A_0 - \frac{\partial \chi}{\partial t} \quad , \quad \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \chi \tag{2.70}$$

以及任意函数 $\chi(\mathbf{r}\ t)$。我们将利用这一自由度，取 A_0 恒等于零，并写成

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\mathbf{E} \tag{2.71}$$

这种选择称为“在 $A_0 = 0$ 规范下工作”。重要的是，这种选择并未穷尽全部规范自由度。我们仍然可以向 **A** 添加一个 与时间无关的函数 $\chi(\mathbf{r})$ 的梯度，而不会改变我们的 $A_0 = 0$ 假设。

将 (2.68) 代入麦克斯韦方程 (2.65) 中的最后一个方程，我们得到

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = c^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} - \frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0} \tag{2.72}$$

利用（2.71），该方程变为

$$\frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -c^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} + \frac{\mathbf{j}}{\epsilon_0} \tag{2.73}$$

将左边的二阶时间导数视为$\mathbf{A}(\mathbf{r}\ t)$的加速度，可以把上述方程看作自由度$\mathbf{A}(\mathbf{r})$所满足的耦合牛顿方程。从这个角度看，空间中的每一点都有三个这样的自由度（场坐标），可用符号$A_{i,\mathbf{r}}$表示。三维矢量指标为 $i = 1, ...,3$，而$\mathbf{r}$ 遍历三维空间中的所有点，这类似于在弦的例子中， x 遍历轴上的各点。不同的$A_{i,\mathbf{r}}$ 之间通过复杂的二阶矢量导数 $\nabla \times \nabla \times$ 耦合，该导数将$\mathbf{A}(\mathbf{r})$在相邻点处的不同矢量分量联系起来。

(2.72) 中的最后一项是物质对场坐标施加的“力”。暂且忽略这个力（即考虑空旷区域中的电磁场），我们可以把坐标$\mathbf{A}(\mathbf{r})$视为耦合振子。这是因为上述方程去掉最后一项后是线性的。尽管从矢量分析的角度来看很复杂，导数组合 $\nabla \times \nabla \times$ 是一种线性运算。

哈密顿量

继续采用电磁场动力学的“力学”解释，我们注意到，去掉最后一项后的两个一阶方程 (2.71) 和 (2.72) 可以合起来视为哈密顿方程，其场哈密顿量如下

$$H_f = \frac{\epsilon_0}{2}\int d^3r \left[\mathbf{E}^2(\mathbf{r}) + c^2(\nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2\right] \tag{2.74}$$

以及以 A_i**(r)**为坐标、以 $-\epsilon_0 E_i$**(r)**为动量的正则变量。我们稍后会验证这一点，但首先注意到，猜测哈密顿量表达式最简单的方法或许是注意到，根据式（2.71），其中第一项具有动能的形式。将式（2.72）的左边与**E**作标量积，即可确定它如何随时间变化。将右边第一项（记住，我们仍忽略电流项）乘以相等的量$-\partial\mathbf{A}/\partial t$，便可对**r**两边积分。经过简单的推导[4] 可以证明，动能随时间的变化等于 H_f 中第二项随时间变化的负值，该项具有势能的含义。这当然验证了 H_f 是守恒的， $dH_f/dt = 0$。

回到哈密顿量 (2.74)，我们求其一阶变分。

$$\begin{aligned}
\delta H_f &= \int d^3r \left[\epsilon_0\mathbf{E}\cdot\delta\mathbf{E} + \epsilon_0 c^2(\nabla\times\mathbf{A})\cdot(\nabla\times\delta\mathbf{A})\right] \\
&= \int d^3 \left[\epsilon_0\mathbf{E}\cdot\delta\mathbf{E} + \epsilon_0 c^2\epsilon_{ijk}\partial_j A_k\epsilon_{ilm}\partial_l\delta A_m\right] \\
&= \int d^3r \left[\epsilon_0\mathbf{E}\cdot\delta\mathbf{E} - \epsilon_0 c^2\delta A_m\epsilon_{ilm}\epsilon_{ijk}\partial_l\partial_j A_k\right] \\
&= \int d^3r \left[\epsilon_0\mathbf{E}\cdot\delta\mathbf{E} + \epsilon_0 c^2\delta\mathbf{A}\cdot\nabla\times\nabla\times\mathbf{A})\right]
\end{aligned}$$

其中我们对第二项进行了分部积分。由此可得

$$\frac{\delta H_f}{\delta(-\epsilon_0\mathbf{E})} = -\mathbf{E} \quad , \quad \frac{\delta H_f}{\delta\mathbf{A}} = \epsilon_0 c^2\nabla\times\nabla\times\mathbf{A} \tag{2.75}$$

表明，采用这个哈密顿量以及正则变量 **A(r)** 和 $-\epsilon_0$**E(r)**

$$\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} = \frac{\delta H_f}{\delta(-\epsilon_0\mathbf{E})} = -\mathbf{E} \quad , \quad \frac{\partial(-\epsilon_0\mathbf{E})}{\partial t} = -\frac{\delta H_f}{\delta\mathbf{A}} = -\epsilon_0 c^2\nabla\times\nabla\times\mathbf{A} \tag{2.76}$$

[4]以下是详细信息

$$\int d^3r\ \mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t} = -c^2\int d^3r\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\cdot\nabla\times\nabla\times\mathbf{A} \quad = \quad -c^2\int d^3r\partial_t A_i\epsilon_{ijk}\partial_j\epsilon_{klm}\partial_l A_m =$$

$$= \text{(integrate by parts)} = c^2\int d^3r\epsilon_{ijk}\partial_j\partial_t A_i\epsilon_{klm}\partial_l A_m \quad = \quad -c^2\int d^3r\left(\nabla\times\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\right)\cdot(\nabla\times\mathbf{A})\ .$$

$$\text{Rewrite as } \frac{d}{dt}\ \frac{1}{2}\int d^3r\ \mathbf{E}^2 = -\frac{c^2}{2}\frac{d}{dt}\int d^3r(\nabla\times\mathbf{A})^2$$

确实与公式（2.71）和（2.72）一致，只是不含电流项。

现在我们来说明如何将电流项和电荷的动力学牛顿方程（2.67）纳入考虑。这里，我们借鉴了电荷在给定电磁场中运动时的哈密顿量（参见第《外电磁场中的运动》章）。我们只需将其加到 H_f 上方，即可得到

$$H = \frac{\epsilon_0}{2}\int d^3r \left[\mathbf{E}^2(\mathbf{r}) + c^2(\nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2\right] + \sum_{a=1}^{N}\frac{1}{2m_a}\left[\mathbf{p}_a - q_a\mathbf{A}(\mathbf{r}_a)\right]^2 \tag{2.77}$$

采用与《外电磁场中的运动》一章完全相同的计算，我们可以证明哈密顿方程

$$\frac{d\mathbf{r}_a}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_a} \quad , \quad \frac{d\mathbf{p}_a}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_a} \tag{2.78}$$

等价于牛顿方程（2.67）。现在，我们来考虑式（2.77）最后一项关于**A(r)**的一阶变分。得到

$$-\sum_{a=1}^{N}\frac{q_a}{m_a}\left[\mathbf{p}_a - q_a\mathbf{A}(\mathbf{r}_a)\right]\cdot\delta\mathbf{A}(\mathbf{r}_a) = -\sum_{a=1}^{N}\frac{q_a}{m_a}\left[\mathbf{p}_a - q_a\mathbf{A}(\mathbf{r}_a)\right]\cdot\int d^3r\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\delta\mathbf{A}(\mathbf{r})$$

$$= \quad -\int d^3r\sum_{a=1}^{N}\frac{q_a}{m_a}\left[\mathbf{p}_a - q_a\mathbf{A}(\mathbf{r}_a)\right]\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\cdot\delta\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\int d^3r\ \mathbf{j}(\mathbf{r})\cdot\delta\mathbf{A}(\mathbf{r})$$

其中**j(r)**是式（2.67）中定义的电流，其中

$$\mathbf{v}_a = \frac{1}{m_a}\left[\mathbf{p}_a - q_a\mathbf{A}(\mathbf{r}_a)\right]$$

将这一结果代入式（2.76）的第二个方程，并将 H_f 替换为完整的 H （2.77），现在得到

$$\frac{\partial(-\epsilon_0\mathbf{E})}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta\mathbf{A}} = -\epsilon_0 c^2\nabla\times\nabla\times\mathbf{A} + \mathbf{j} \tag{2.79}$$

重现完整方程 (2.72)。我们还注意到，由于完整 H中的第二项不依赖于$\mathbf{E}$ ，因此当在第一条方程(2.76) 中用 H 替换 H_f 时，该方程保持不变。

2.3.2 正则量子化

既然已经确立了该理论的正则结构，现在我们就可以对其进行量子化了。细心的读者应该已经注意到，我们尚未处理方程组（2.65）中的第一个方程，即表达高斯定律的方程。我们似乎还遗漏了哈密顿量（2.77）中的电荷 $\{q_a\}$之间通常的库仑相互作用能。我们很快会处理这些问题，但与此同时，先让我们继续进行量子化。

从经典描述转向量子描述时，我们认识到，我们系统的坐标集合由矢势 **A(r)**（即位置空间中每一点的3 个向量分量，即 $3\times\infty^3$ 变量）以及表示粒子位置的 3N 个向量 $\{\mathbf{r}_a\}$ 组成。

因此，我们引入场**A(r)**的波泛函，它还取决于（是.....的函数）N个粒子的位置以及

$$\Psi = \Psi[\mathbf{A}(\mathbf{r}), \mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N, t] \tag{2.80}$$

这应被视为所有场构型与一组 N 个粒子的位置 $\{\mathbf{r}_a\}$ 之间的一种对应关系，以及（一般而言）随时间变化的复概率振幅。

物理算符通过正则替换由相应的经典量构造而成

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \to \mathbf{A}_{op}(\mathbf{r}) &= \mathbf{A}(\mathbf{r}) \ , \ \mathbf{E}(\mathbf{r}) \to \mathbf{E}_{op}(\mathbf{r}) = \frac{i\hbar}{\epsilon_0}\frac{\delta}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{r})} \\ \mathbf{r}_a \to \hat{\mathbf{r}}_a &= \mathbf{r}_a \ , \ \mathbf{p}_a \to \hat{\mathbf{p}}_a = -i\hbar\nabla_a \end{aligned} \tag{2.81}$$

其中，我们考虑到了这样一个事实：与**A(r)**正则共轭的是组合 $-\epsilon_0$**E(r)**，而不仅仅是**E(r)**。利用等式

$$\frac{\delta A_j(\mathbf{r}')}{\delta A_i(\mathbf{r})} = \delta_{ij}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

因此，场算符满足对易关系

$$\left[\hat{E}_i(\mathbf{r}), \hat{A}_j(\mathbf{r}')\right] = \frac{i\hbar}{\epsilon_0}\delta_{ij}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \ , \ \left[\hat{A}_i(\mathbf{r}), \hat{A}_j(\mathbf{r}')\right] = \left[\hat{E}_i(\mathbf{r}), \hat{E}_j(\mathbf{r}')\right] = 0 \tag{2.82}$$

波泛函/函数 $\Psi[\mathbf{A(r)}, \mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N, t]$ 的时间演化由薛定谔方程支配

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t} = H_{op}\Psi(t) \tag{2.83}$$

其中，哈密顿算符 H_{op} 是通过将经典表达式 (2.77) 中的场 **A(r)**、**E(r)** 以及粒子变量 $\{\mathbf{r}_a\}$、$\{\mathbf{p}_a\}$ 替换为相应的算符 (2.81) 而得到的，

$$H_{op} = \frac{\epsilon_0}{2}\int d^3r \left[\mathbf{E}^2_{op}(\mathbf{r}) + c^2(\nabla \times \mathbf{A}_{op}(\mathbf{r}))^2\right] + \sum_{a=1}^{N}\frac{1}{2m_a}\left[-i\hbar\nabla_a - q_a\mathbf{A}_{op}(\hat{\mathbf{r}}_a)\right]^2 \ . \tag{2.84}$$

上述哈密顿量不随时间变化，因为我们讨论的是一个封闭的电磁场 + 物质系统。因此，能量守恒；在量子力学中，我们可以按照标准方法，将上述含时薛定谔方程的求解化简为求解定态方程

$$H_{op}\Psi = E\Psi \tag{2.85}$$

这是一个描述耦合场-物质系统的复杂方程，不可能求得精确解。我们将在下文讨论近似解。不过，在此之前，我们必须先澄清几个形式上看似平常、实则非常重要的问题，这些问题将有助于我们在一定程度上简化问题。

2.3.3 规范不变性

高斯定律

现在我们将说明，上文给出的哈密顿表述巧妙地兼顾了高斯定律以及电荷之间的库仑相互作用。关键在于注意到，哈密顿量在以下规范变换下保持不变

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r},t) &\to \mathbf{A}(\mathbf{r},t)+\nabla\chi(\mathbf{r}) \qquad , \qquad \mathbf{E}(\mathbf{r},t)\to\mathbf{E}(\mathbf{r},t) \\ \mathbf{p}_a(t) &\to \mathbf{p}_a(t)+q_a\nabla\chi(\mathbf{r}_a(t)) \quad , \qquad \mathbf{r}_a(t)\to\mathbf{r}_a(t) \end{aligned} \tag{2.86}$$

其中 $\chi(\mathbf{r})$是任意的时间无关函数。这就是我们在式（2.72）之后简要提到的剩余规范变换。

H 在变换（2.86）下的对称性，源于矢势$\mathbf{A}(\mathbf{r})$在其中的出现方式，即它仅通过组合 $\nabla\times\mathbf{A}$ 和 $[\mathbf{p}_a-q_a\mathbf{A}(\mathbf{r}_a)]$出现。这是一种局部对称性，其特征是由依赖于$\mathbf{r}$的参数 $\chi(\mathbf{r})$描述。概括而言，这里有 ∞^3 个参数，对应于向量$\mathbf{r}$所处三维空间中点的“数量”。如下文所示，这种对称性的生成元为

$$g_{op}(\mathbf{r})=-\epsilon_0\nabla\cdot\mathbf{E}_{op}(\mathbf{r})+\rho_{op}(\mathbf{r}) \tag{2.87}$$

它们对$\mathbf{r}$ 的依赖意味着，在式（2.86）中， $\chi(\mathbf{r})$这些参数对应着 ∞^3 个生成元。

在经典情况下，与哈密顿量的对称性生成元相对应的表达式由哈密顿方程守恒。动量和角动量当然是这类守恒量的经典例子。因此，让我们证明，当上述生成元 $g_{op}(\mathbf{r}\ t)$ 取经典形式，并且其中的 $\mathbf{E}$ 和 ρ 按照这些方程演化时，方程 (2.71)、(2.72) 和 (2.67) 会守恒上述生成元表达式。我们有

$$\frac{\partial}{\partial t}[-\epsilon_0\nabla\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r})+\rho(\mathbf{r})]=-\epsilon_0\nabla\cdot\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=\nabla\cdot\mathbf{j}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0 \tag{2.88}$$

其中我们使用了公式(2.72)以及电荷的连续性方程。[5]

$\partial g(\mathbf{r})/\partial t$ 的消失意味着局域量 $-\epsilon_0\nabla\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r})+\rho(\mathbf{r})$ 构成一个关于 $\mathbf{r}$ 的常数、与时间无关的函数。自然地，我们将这个函数记为 $\rho_0(\mathbf{r})$

$$-\epsilon_0\nabla\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r})+\rho(\mathbf{r})=\rho_0(\mathbf{r})$$

并将其解释为固定静态电荷的密度。我们注意到，除了由方程 (2.67) 描述的动力学电荷 q_a 之外，还出现了这些电荷。通常情况下，不存在此类额外的静态电荷。事实上，它们的存在会破坏平移、旋转、洛伦兹等对称性。因此应假设 $\rho_0=0$。将其代入上述关系式，即可恢复高斯定律。

[5]连续性方程是 $\rho(\mathbf{r}\ t)$ 与 $\mathbf{j}(\mathbf{r}\ t)$ 之间的一般关系式，由式 (2.66) 给出

$$\frac{\partial\rho(\mathbf{r},t)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial t}\sum_{a=1}^{N}q_a\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a(t))=\sum_{a=1}^{N}q_a\nabla_{\mathbf{r}_a}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a(t))\cdot\frac{d\mathbf{r}_a}{dt}=$$
$$=(\text{using }\ \nabla_{\mathbf{r}_a}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)=-\nabla_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\ )=-\nabla_{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{j}(\mathbf{r},t)$$

规范变换的量子力学

让我们推导规范变换(2.86) 的量子力学。我们要证明的是，它由 ∞^3 算符 $g_{op}(\mathbf{r})$ 生成，即以下关系式成立

$$e^{-(i/\hbar)\int d^3r\chi(\mathbf{r})g_{op}(\mathbf{r})}\begin{pmatrix}\mathbf{A}_{op}(\mathbf{r}')\\ \hat{\mathbf{p}}_a\end{pmatrix}e^{(i/\hbar)\int d^3r\chi(\mathbf{r})g_{op}(\mathbf{r})}=\begin{pmatrix}\mathbf{A}_{op}(\mathbf{r}')+\nabla\chi(\mathbf{r}')\\ \hat{\mathbf{p}}_a+q_a\nabla\chi(\mathbf{r}_a)\end{pmatrix} \tag{2.89}$$

和往常一样，只需考虑无穷小的 $\chi(\mathbf{r})$，此时左边化简为

$$-\frac{i}{\hbar}\int d^3r\chi(\mathbf{r})\left[g_{op}(\mathbf{r}),\begin{pmatrix}\mathbf{A}_{op}(\mathbf{r}')\\ \hat{\mathbf{p}}_a\end{pmatrix}\right]=-\frac{i}{\hbar}\int d^3r\chi(\mathbf{r})\begin{pmatrix}-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\\ -i\hbar q_a\nabla_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\end{pmatrix} \tag{2.90}$$

这里我们省略了恒等项，并使用了

$$[g_{op}(\mathbf{r}),\mathbf{A}_{op}(\mathbf{r}')]=[-\epsilon_0\nabla\cdot\mathbf{E}_{op}(\mathbf{r}),\mathbf{A}_{op}(\mathbf{r}')]=-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{2.91}$$

and

$$[g_{op}(\mathbf{r}),\hat{\mathbf{p}}_a]=[\rho_{op}(\mathbf{r}),\hat{\mathbf{p}}_a]=i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_a}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)=-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a) \tag{2.92}$$

现在我们进行分部积分，并使用狄拉克δ函数

$$-\frac{i}{\hbar}\int d^3r\chi(\mathbf{r})\begin{pmatrix}-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\\ -i\hbar q_a\nabla_{\mathbf{r}}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\end{pmatrix}=\int d^3r\nabla\chi(\mathbf{r})\begin{pmatrix}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\\ q_a\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\nabla\chi(\mathbf{r}')\\ q_a\nabla\chi(\mathbf{r}_a)\end{pmatrix} \tag{2.93}$$

从而恰好得到右边 Eq.(2.89) 中依赖于 $\chi(\mathbf{r})$ 的项。

因此 ∞^3 算符 $g_{op}(\mathbf{r})$确实是规范变换的生成元。由于哈密顿算符 H_{op} 在此变换下是不变的，因此必须有H_{op} 与 $g_{op}(\mathbf{r})$对易

$$[H_{op},g_{op}(\mathbf{r})]=0 \tag{2.94}$$

与更简单的量子力学系统一样，这意味着 H_{op} 和 $g_{op}(\mathbf{r})$ 具有共同的本征函数。我们用符号表示为

$$H_{op}\Psi=E\Psi\quad,\quad g_{op}(\mathbf{r})\Psi=\rho_0(\mathbf{r})\Psi \tag{2.95}$$

其中，我们用 $\rho_0(\mathbf{r})$ 表示 ∞^3 算符 $q_{op}(\mathbf{r})$ 的本征值。与经典情形一样， $\rho_0(\mathbf{r})$ 的含义是静态（"背景"）电荷的密度。之所以称它们为"背景"，是因为它们不是动力学的一部分。它们只是作为初始条件的一部分存在那里。它们的存在会违反基本对称性（平移、旋转、洛伦兹），因此物理学要求我们只能选择属于系统希尔伯特空间中某个"扇区"的本征函数，对于该扇区

$$g_{op}(\mathbf{r})\Psi=0 \tag{2.96}$$

换言之——规范不变部分。

分离场的纵向分量

在哈密顿表述中，电磁场有 $3\times\infty^3$ 个自由度；在我们的表述中，这些自由度由坐标 A_i**(r)**及其对应的动量 $-\epsilon_0 E_i$**(r)** , $i=1,2,3$描述。利用局域规范对称性 **(2.86)**，可以消去其中三分之一的自由度。因此，我们将函数**A(r)** 和 **E(r)** 表示为所谓的横向分量和纵向分量之和

$$\mathbf{A}(\mathbf{r})=\mathbf{A}_T(\mathbf{r})+\mathbf{A}_L(\mathbf{r}) \quad , \quad \mathbf{E}(\mathbf{r})=\mathbf{E}_T(\mathbf{r})+\mathbf{E}_L(\mathbf{r}) \tag{2.97}$$

其中 $\mathbf{A}_T$、$\mathbf{A}_L$、$\mathbf{E}_T$ 和$\mathbf{E}_L$ 满足

$$\nabla\cdot\mathbf{A}_T(\mathbf{r})=\nabla\cdot\mathbf{E}_T(\mathbf{r})=0 \quad , \quad \nabla\times\mathbf{A}_L(\mathbf{r})=\nabla\times\mathbf{E}_L(\mathbf{r})=0 \tag{2.98}$$

任何矢量场都可以这样表示。利用傅里叶展开可以证明这一点（并理解纵向和横向这两个名称的由来）。例如，取 **A(r)** 并将其展开。

$$\mathbf{A}(\mathbf{r})=\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{A}_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{2.99}$$

为方便起见，为了使**k** 具有离散值，我们考虑处于一个很大但有限的体积中的场。对于本讨论而言，精确的边界条件并不重要。

傅里叶振幅 **Ak** 是向量。原则上，它们的方向与相应波矢 **k** 的方向毫无关系。不过，我们可以将每个傅里叶振幅表示为两个向量之和，这两个向量分别平行于和垂直于**“**它们的**”k**。

$$\mathbf{A}=\mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{(L)}+\mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{(T)} \quad , \quad \text{with } \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{(L)}\times\mathbf{k}=0 \ , \ \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{(T)}\cdot\mathbf{k}=0$$

利用这一点，我们可以将傅里叶展开写成求和的形式

$$\mathbf{A}(\mathbf{r})=\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{(L)}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}+\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{A}_{\mathbf{k}}^{(T)}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{2.100}$$

利用

$$\nabla\cdot(\mathbf{a}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})=i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad , \quad \nabla\times(\mathbf{a}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})=i\mathbf{k}\times\mathbf{a}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

我们看到，**A(r)** 的傅里叶展开中的两项分别是$\mathbf{A}_L$**(r)**和$\mathbf{A}_T$**(r)**，如式（2.97）所示。

我们还注意到，矢量场的纵向分量可以写成某个标量函数的梯度。因此，我们可以写出

$$\mathbf{A}(\mathbf{r})=\mathbf{A}_T(\mathbf{r})+\nabla\xi(\mathbf{r}) \quad , \quad \mathbf{E}(\mathbf{r})=\mathbf{E}_T(\mathbf{r})-\nabla\phi(\mathbf{r}) \tag{2.101}$$

其中，两个标量函数 ξ**(r)**和-ϕ**(r)**分别完全确定纵向分量$\mathbf{A}_L$**(r)**和$\mathbf{E}_L$**(r)**。正如下一节将明确说明的， ϕ**(r)**就是我们在库仑定律及其他静电学问题中所熟悉的标量电势。

恢复库仑相互作用。所得哈密顿量

将上述关于**A(r)**和**E(r)**的表达式代入哈密顿量（2.77），我们得到

$$H = \frac{\epsilon_0}{2}\int d^3r\left[\mathbf{E}_T^2(\mathbf{r}) + (\nabla\phi)^2 + c^2(\nabla\times\mathbf{A}_T(\mathbf{r}))^2\right] + \sum_{a=1}^{N}\frac{1}{2m_a}\left[\mathbf{p}_a - q_a\mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a)\right]^2 \quad (2.102)$$

我们已将 $\mathbf{p}_a$ 转换为 $\mathbf{p}_a + q_a\nabla\xi$（$\mathbf{r}_a$）。包含 $\mathbf{E}_T\cdot\nabla\phi$ 的混合项并未出现，因为对其进行分部积分后可以看出该项为零

$$\int d^3r\ \mathbf{E}_T\cdot\nabla\phi = -\int d^3r\ (\nabla\cdot\mathbf{E}_T)\phi\ =\ 0$$

作为变换 H 的最后一步，我们注意到高斯定律允许用 ρ**(r)**表示 ϕ**(r)**

$$\nabla\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla^2\phi(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r})}{\epsilon_0} \quad\Rightarrow\quad \phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int d^3r'\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\rho(\mathbf{r}') \quad (2.103)$$

我们看到，在这一表述中，熟悉的标势出现在电场的纵向分量 $\mathbf{E}_L$**(r)** 中，并且完全由电荷的密度决定。这使我们能够将 H containing $(\nabla\phi)^2$ as 中的项表示为

$$\frac{\epsilon_0}{2}\int d^3r(\nabla\phi)^2 = -\frac{\epsilon_0}{2}\int d^3r\phi\nabla^2\phi = \frac{1}{2}\int d^3r\phi(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{8\pi\epsilon_0}\int d^3rd^3r'\frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

这只是 ρ**(r)** 中电荷之间的库仑相互作用，并且可以使用 **(2.67)** 中给出的 ρ**(r)** 表达式写成

$$\frac{\epsilon_0}{2}\int d^3r(\nabla\phi)^2 = \frac{1}{8\pi\epsilon_0}\sum_{a\neq b}^{N}\frac{q_aq_b}{|\mathbf{r}_a-\mathbf{r}_b|} + \sum_{a=1}^{N}\epsilon^a_{\text{self interaction}} \quad (2.104)$$

其中$\epsilon^a_{\text{self 相互作用}}$ 是表示每个粒子库仑自能的常数。对于点粒子而言，它们会发散。我们不打算详细讨论这一点，但假设粒子具有很小但有限的尺寸（截断），我们将简单地忽略这一常数项。

总之，哈密顿量具有如下形式

$$H = H_r + \sum_{a=1}^{N}\frac{1}{2m_a}\left[\mathbf{p}_a - q_a\mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a)\right]^2 + V_{\text{Coul}} \quad (2.105)$$

其中我们定义了哈密顿量中的辐射部分和库仑相互作用部分 ian

$$\begin{aligned} H_r &= \frac{\epsilon_0}{2}\int d^3r\left[\mathbf{E}_T^2(\mathbf{r}) + c^2(\nabla\times\mathbf{A}_T(\mathbf{r}))^2\right] \quad (2.106)\\ V_{\text{Coul}} &= \frac{1}{8\pi\epsilon_0}\sum_{a\neq b}^{N}\frac{q_aq_b}{|\mathbf{r}_a-\mathbf{r}_b|} \end{aligned}$$

通常，将这个哈密顿量写成三个部分之和会很方便。

$$H = H_r + H_{\text{matter}} + U_{\text{radiation}-\text{matter interaction}} \tag{2.107}$$

其中， H_r 由式（3.25）给出，且

$$\begin{aligned} H_{\text{matter}} &= \sum_{a=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_a^2}{2m_a} + V_{\text{Coul}} && (2.108) \\ U_{\text{radiation}-\text{matter interaction}} &= -\sum_{a=1}^{N} \frac{q_a}{m_a} \mathbf{p}_a \cdot \mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a) + && (2.109) \\ &\quad + \sum_{a=1}^{N} \frac{q_a^2}{2m_a} \mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a) \cdot \mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a) \end{aligned}$$

请注意，转为算符后，项 $\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a)$ 中不会出现算符排序歧义，因为两者之差，即对易子

$$\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a) - \mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a) \cdot \hat{\mathbf{p}}_a = -i\hbar \nabla_a \cdot \mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a) = 0$$

旁注——分离横向与纵向麦克斯韦方程

现在我们来考察哈密顿（麦克斯韦）方程（2.71）和（2.72）用横向场 $\mathbf{A}_T(\mathbf{r})$、$\mathbf{E}_T(\mathbf{r})$ 表示时的形式。可以看到，每个方程都分为两个方程，分别关联横向分量和纵向分量

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{A}_T}{\partial t} &= -\mathbf{E}_T \quad , \quad \frac{\partial \mathbf{A}_L}{\partial t} = -\mathbf{E}_L && (2.110) \\ \frac{\partial \mathbf{E}_T}{\partial t} &= c^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{A}_T - \frac{\mathbf{j}_T}{\epsilon_0} \quad , \quad \frac{\partial \mathbf{E}_L}{\partial t} = -\frac{\mathbf{j}_L}{\epsilon_0} \end{aligned}$$

最后一个方程等价于电流的连续性方程

$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\nabla \cdot \mathbf{j}_L(\mathbf{r}, t)}{\epsilon_0} = -\frac{\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t)}{\epsilon_0} \tag{2.111}$$

正如对两部分分别取散度并对 $\nabla \cdot \mathbf{E}_L$ 使用高斯定律所示。方程 $\partial \mathbf{A}_L / \partial t = -\mathbf{E}_L$ 表明，对于给定的$\mathbf{A}$ 的纵向分量——该分量不进入哈密顿量（即为“循环”坐标）——它如何随时间演化；而给定$\mathbf{E}_L$ 又由高斯定律通过电荷密度确定。可以将此看作类似于球对称问题中角坐标的运动由（守恒的）角动量所决定。

2.4 光子

2.4.1 场振子

在本节及接下来的几节中，我们将忽略辐射-物质相互作用，专注于由 H_r 描述的辐射部分。由于这个哈密顿量是

二次型的，我们将沿用弦的情形。我们将施加周期性边界条件，并用行波展开 $\mathbf{E}_T(\mathbf{r})$ 和 $\mathbf{A}_T(\mathbf{r})$。正如我们将看到的， H_r 将变为一系列解耦振子的总和，因此行波就是辐射的正则模。

行波展开

沿用弦的例子，参见式（2.44）及下方脚注[6]，我们在大体积 Ω 中展开场的正则坐标与动量 $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ 和 $-\epsilon_0\mathbf{E}(\mathbf{r})$，参见式（2.76）

$$\begin{aligned}\mathbf{A}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{\Omega\epsilon_0}}\sum_{\mathbf{k}}\left(\mathbf{q}_{\mathbf{k}}\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})+\frac{1}{ck}\mathbf{p}_{\mathbf{k}}\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right) \qquad (2.112)\\ \mathbf{E}(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{\sqrt{\Omega}\epsilon_0}\sum_{\mathbf{k}}\left(\mathbf{p}_{\mathbf{k}}\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})-ck\,\mathbf{q}_{\mathbf{k}}\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right)\end{aligned}$$

展开所用的矢量系数为 $\mathbf{qk}$ 和 $\mathbf{pk}$。为了使上述展开在 ϵ_0 的形式上更加对称，我们将正则变量改为

$$\mathbf{A}(\mathbf{r})\to\mathbf{A}(\mathbf{r})/\sqrt{\epsilon_0}\ ,\ -\epsilon_0\mathbf{E}(\mathbf{r})\to-\sqrt{\epsilon_0}\,\mathbf{E}(\mathbf{r})$$

周期性边界条件使波矢取离散值

$$\mathbf{k}=\left\{(n_x,n_y,n_x)\frac{2\pi}{\Omega^{1/3}}\right\}\ ,\ n_i=0,\pm1,\pm2\ldots \qquad (2.113)$$

这里假设体积为一个立方体，即长、宽、高相等，均为 $\Omega^{1/3}$。

文献中更为传统的展开式（参见方程(2.112(；另参见朗道和栗弗席兹，《经典场论》，第52节，或参考文献 [7] ）是用正则变换变量写成的

$$\mathbf{q}_{\mathbf{k}}\to-\frac{1}{\omega_k}\mathbf{p}_{\mathbf{k}}\ ;\ \mathbf{p}_{\mathbf{k}}\to\omega_k\mathbf{q}_{\mathbf{k}} \qquad (2.114)$$

对于场的横向分量，这将得到

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_T(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{\Omega\epsilon_0}}\sum_{\mathbf{k}}\left(\mathbf{Q}_{\mathbf{k}}\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})-\frac{1}{\omega_k}\mathbf{P}_{\mathbf{k}}\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right) \qquad (2.115)\\ \mathbf{E}_T(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{\sqrt{\Omega\epsilon_0}}\sum_{\mathbf{k}}\left(\mathbf{P}_{\mathbf{k}}\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})+\omega_k\mathbf{Q}_{\mathbf{k}}\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right)\end{aligned}$$

[6]为便于比较，我们在此重现这一展开式。

$$\phi(x,t)=\sqrt{\frac{1}{L}}\sum_k\left[Q_k(t)\sin kx+\frac{P_k(t)}{v|k|}\cos kx\right]$$

$$\pi(x,t)=\sqrt{\frac{1}{L}}\sum_k\left[P_k(t)\sin kx-v|k|Q_k(t)\cos kx\right]\ ,\ k=\frac{2\pi\nu}{L}\ ,\ \nu=\pm1,\pm2,\ldots$$

$\mathbf{A}_T(\mathbf{r})$ 和 $\mathbf{E}_T(\mathbf{r})$ 的横向性意味着，$\mathbf{Qk}$ 和$\mathbf{Pk}$ 始终与相应的$\mathbf{k}$正交，

$$\mathbf{k}\cdot\mathbf{Q}_\mathbf{k}=0 \quad , \quad \mathbf{k}\cdot\mathbf{P}_\mathbf{k}=0.$$

使用一对固定的单位偏振矢量 $\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}\alpha$, $\alpha=1$,2 很方便，其中

$$\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}1}\cdot\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}2}=0 \quad , \quad \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}\cdot\mathbf{k}=0 \quad , \quad \alpha=1,2 \tag{2.116}$$

因此我们可以写成

$$\mathbf{Q}_\mathbf{k}=\sum_{\alpha=1,2}Q_{\mathbf{k}\alpha}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha} \quad , \quad \mathbf{P}_\mathbf{k}=\sum_{\alpha=1,2}P_{\mathbf{k}\alpha}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha} \tag{2.117}$$

我们现在将展开式 (2.115) 和 (2.117) 代入横向分量的麦克斯韦方程，即代入在无电流情况下方程组 (2.110) 的第 1 个和第 3 个方程（回想一下，我们讨论的是纯辐射）。通过直接计算，我们得到关于 $Q\mathbf{k}\alpha$ 和 $P\mathbf{k}\alpha$ 的彼此独立的线性方程。

$$\dot{Q}_{\mathbf{k}\alpha}=P_{\mathbf{k}\alpha} \quad , \quad \dot{P}_{\mathbf{k}\alpha}=-\omega_k^2Q_{\mathbf{k}\alpha} \quad \text{with} \;\; \omega_k=ck \tag{2.118}$$

可以清楚地看出，这些是标记为$\mathbf{k}\alpha$ 的简谐振子的哈密顿方程，每个振子都具有哈密顿量

$$H_{\mathbf{k}\alpha}=\frac{1}{2}\left(P_{\mathbf{k}\alpha}^2+\omega_k^2Q_{\mathbf{k}\alpha}^2\right) \tag{2.119}$$

以及$Q\mathbf{k}\alpha$ 和 $P\mathbf{k}\alpha$ 分别为广义坐标和动量。还可以将展开式 (2.115) 和 (2.117) 代入 H_r，从而得到

$$H_r=\sum_{\mathbf{k}\alpha}H_{\mathbf{k}\alpha}=\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\alpha}\left(P_{\mathbf{k}\alpha}^2+\omega_k^2Q_{\mathbf{k}\alpha}^2\right) \quad \text{with} \quad \omega_k=ck \tag{2.120}$$

可以看出，我们确实将 H_r 表示为一系列解耦振子的总和，其频率由电磁波的著名色散关系给出。对于每个$\mathbf{k}$，都有两个具有不同偏振的振子。由于 ω_k 取决于 k 的大小，所有具有 $|\mathbf{k}|=k$ 的振子频率都相同。

场波　　函数与本征态。光子出

现

现在我们转向辐射的量子力学。对于由哈密顿量 (2.120) 所描述的场的解耦本征模，采用这种方法最为简单。我们不再考虑经典的含时变量 $Q\mathbf{k}\alpha(t)$ 和 $P\mathbf{k}\alpha(t)$，而是考虑波函数 $\Psi(\{Q_{\mathbf{k}\alpha}\},t)$，它包含了全部量子信息。通过为每个物理量使用算符来“提取”这些信息；这些算符由两组基本算符构成，分别对应“坐标”和“动量”。

$$\begin{gathered} Q_{\mathbf{k}\alpha} \;\rightarrow\; \hat{Q}_{\mathbf{k}\alpha}=Q_{\mathbf{k}\alpha} \quad ; \quad P_{\mathbf{k}\alpha} \;\rightarrow\; \hat{P}_{\mathbf{k}\alpha}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial Q_{\mathbf{k}\alpha}} \\ \left[P_{\mathbf{k}\alpha},P_{\mathbf{k}'\alpha'}\right]=\left[Q_{\mathbf{k}\alpha},Q_{\mathbf{k}'\alpha'}\right]=0 \quad ,\left[Q_{\mathbf{k}\alpha},P_{\mathbf{k}'\alpha'}\right]=i\hbar\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\alpha\alpha'} \end{gathered} \tag{2.121}$$

一切都与力学系统的量子力学中的通常做法相同。

$\Psi(\{Q_{\mathbf{k}\alpha}\},t)$ 的时间演化由薛定谔方程支配。

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\{Q_{\mathbf{k}\alpha}\},t)}{\partial t}=\hat{H}_r\Psi(\{Q_{\mathbf{k}\alpha}\},t) \tag{2.122}$$

其中，哈密顿算符$\hat{}$ H_r 由方程(2.120)通过将其中的坐标和动量替换为相应算符而得到

$$\hat{H}_r=\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\alpha}\left(\hat{P}^2_{\mathbf{k}\alpha}+\omega_k^2\hat{Q}^2_{\mathbf{k}\alpha}\right) \tag{2.123}$$

薛定¨谔方程最重要的解是定态，它们$\hat{}$是 H_r 的本征态

$$\hat{H}_r\Psi(\{Q_{\mathbf{k}\alpha}\})=E\Psi(\{Q_{\mathbf{k}\alpha}\}) \tag{2.124}$$

$\hat{}$由于 H_r 是由独立项组成的，每一项都表示一个振子，因此$\hat{}H_r$ 的本征值是独立振子的本征能量之和

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{\{N_{\mathbf{k}_\alpha}\}}&=\sum_{\mathbf{k}\alpha}\hbar\omega_k\left(N_{\mathbf{k}\alpha}+\frac{1}{2}\right)\equiv\mathcal{E}+\sum_{\mathbf{k}\alpha}\hbar\omega_kN_{\mathbf{k}\alpha}\\ \mathcal{E}_0&=\sum_{\mathbf{k}\alpha}\frac{\hbar\omega_k}{2}\quad,\quad N_{\mathbf{k}\alpha}=0,1,2,3,...\end{aligned} \tag{2.125}$$

相应的本征函数是乘积。

$$\Psi_{\{N_{\mathbf{k}_\alpha}\}}(\{Q_{\mathbf{k}\alpha}\})=\prod_{\mathbf{k}\alpha}\psi_{N_{\mathbf{k}_\alpha}}(Q_{\mathbf{k}\alpha})\quad,\quad N_{\mathbf{k}\alpha}=0,1,2,3,... \tag{2.126}$$

其中，$\psi_{N\mathbf{k}_\alpha}(Q_{\mathbf{k}\alpha})$ 是谐振子的标准本征函数，参见式（2.33）；其质量为单位质量，频率为 $\omega_k=ck$。

与我们讨论弦量子化时（实际上，在任何线性动力系统的量子化中）的情况一样，我们发现电磁场可以看作由能量量子组成的集合

$$\epsilon_{\mathbf{k}\alpha}=\hbar\omega_k$$

这些量子处于正则模中。在接下来的章节中，我们将说明，这些量子具备粒子的所有特性。它们携带动量、角动量和自旋，并满足无质量粒子以光速运动时的能量-动量关系，参见式（2.141）。这些量子粒子就是光子。

着眼于细节，我们注意到电磁模式是三维矢量波。在我们的推导中，我们选择了波矢为 $\mathbf{k}$ 、偏振为$\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}$的平面波。不过请注意，这些模式的本征频率 $\omega_k=ck$ 以及量子能量 $\epsilon_{\mathbf{k}\alpha}$ 只取决于$\mathbf{k}$的大小，也就是波长，而与矢量$\mathbf{k}$ 的方向及模式的偏振无关。

正如例如$\epsilon_{\mathbf{k}}=\hbar^2k^2/2m$ 普通物质粒子一样，这意味着模式存在连续谱简并，因此量子力学态也存在连续谱简并

自由光子的简并性带来了自由度：可以将具有给定能量 ϵ 的基态从矢量平面波（如我们上文所做的那样）变换为球面波（矢量球面波！）、柱面波（矢量柱面波！）等。此时，量子数$\mathbf{k}\alpha$将被相应变换后的量子数取代，例如 k, l, m，它们取代了标量波中的 k_x, k_y, k_z。关于矢量球面波的近期参考文献，例如参见文献[4]。

真空的波函数。卡西米尔效应

在没有物质和其他量子场的情况下，电磁场的基态就是该理论的真空。其波函数是由高斯函数相乘得到的，这与我们讨论吉他弦时所熟悉的形式相同，见式（2.34），

$$\Psi_{\{N_{\mathbf{k}_\alpha}=0\}}(\{Q_{\mathbf{k}\alpha}\}) = \prod_{\mathbf{k}\alpha} \psi_0(Q_{\mathbf{k}\alpha}) = \prod_{\mathbf{k}\alpha} \left(\frac{\omega_k}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\sum_{\mathbf{k}\alpha} \omega_k Q^2_{\mathbf{k}\alpha}/2\hbar\right) \tag{2.127}$$

I这或许是量子场论中场自由度的量子真空涨落最简单的例子
度的
自由度。

人们能观测到这些涨落吗？在一篇具有突破性意义的论文中，**Ref.**[1], 卡西米尔探讨了这一问题。他提出，这种涨落会导致“两个理想导体板之间的吸引力”。在这样的极板上，平行于极板的电场分量必须为零，因此，不满足这一条件的场正则模将被排除在场自由度之外，因而也被排除在真空涨落之外。这在图 2.4 中作了示意性说明。极板之间的正则模频率密度将小于外部自由空间中的密度。

我们在量子吉他弦的背景下，于第 2.1.4 节讨论了这一效应的一维版本。我们在那里表明，它会在（相当于）板的两侧产生吸引力，其中一侧的间距比弦的另一部分更窄。对于具有量子化电磁场的真实三维情形，也会发生同样的情况。卡西米尔计算预测，板间距为 a 时，单位面积上的吸引力（压强）为

$$P = -\frac{\hbar\pi^2 c}{240 a^4}$$

请注意，距离的四次方反比依赖关系在物理学中极为罕见。还值得一提的是，对于某些特殊的板材组合，卡西米尔力可能是排斥性的。卡西米尔后来将其所得结果推广到板的各种几何形状，其预测也得到了实验验证，参见参考文献[6]。

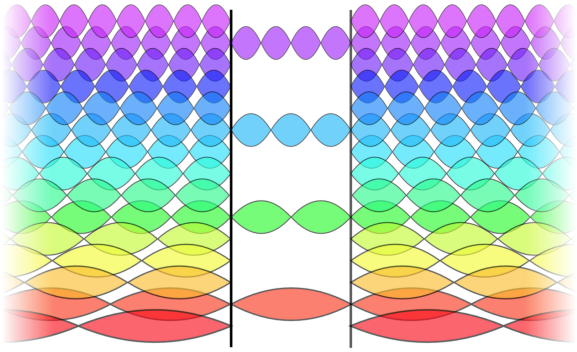


图 2.4：两个板存在时场振动的正则模示意图，板强制场在板位置处为零（参考文献 [5] 中的图 1）。与外部自由空间相比，这导致板之间场正则模的频率密度差异。该差异取决于板之间的距离，并导致板之间的卡西米尔效应吸引力

光子产生与湮灭算符。场算符

在实际应用中，引入光子的产生与湮灭算符 in
标准方法

$$\begin{gathered}\hat{Q}_{\mathbf{k}\alpha}=\sqrt{\hbar/2\omega_k}\left(\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}+\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}\right)\quad,\quad\hat{P}_{\mathbf{k}\alpha}=i\sqrt{\hbar\omega_k/2}\left(\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}-\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}\right)\\ \hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}=\sqrt{1/2\hbar\omega_k}\left(i\hat{P}_{\mathbf{k}\alpha}+\omega_k\,\hat{Q}_{\mathbf{k}\alpha}\right)\;,\;\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}=\sqrt{1/2\hbar\omega_k}\left(-i\hat{P}_{\mathbf{k}\alpha}+\omega_k\,\hat{Q}_{\mathbf{k}\alpha}\right)\\ [\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha},\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}'\alpha'}]=\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\alpha\alpha'}\quad,\quad[\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha},\hat{a}_{\mathbf{k}'\alpha'}]=0=[\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha},\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}'\alpha'}]\end{gathered}\tag{2.128}$$

利用这些算符，我们可以写出哈密顿量

$$\hat{H}_r=E_0+\sum_{\mathbf{k}\alpha}\hbar\omega_k\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}\tag{2.129}$$

及其本征态

$$|\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}>=\prod_{\mathbf{k}\alpha}|N_{\mathbf{k}\alpha}>=\prod_{\mathbf{k}\alpha}\frac{(\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha})^{N_{\mathbf{k}\alpha}}}{(N_{\mathbf{k}\alpha}!)^{1/2}}|0>\tag{2.130}$$

使用$\hat{a}$ 和$\hat{a}^{\dagger}$ 算符处理光子的一个显著优点，是这些算符对“作用量”于“数态”的描述很简单，即每个正则模中光子数固定的态。示意地

$$\hat{a}|n>=\sqrt{n}|n-1>\quad,\quad\hat{a}^{\dagger}|n>=\sqrt{n+1}|n+1>$$

以“完整荣耀”展现

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}|\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}>=\sqrt{N_{\mathbf{k}\alpha}}|N_{\mathbf{k}\alpha}-1>\prod_{\mathbf{k}'\neq\mathbf{k},\alpha'\neq\alpha}|\{N_{\mathbf{k}'\alpha'}\}>$$

$$a^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}|\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}>=\sqrt{N_{\mathbf{k}\alpha}+1}|N_{\mathbf{k}\alpha}+1>\prod_{\mathbf{k}'\neq\mathbf{k},\alpha'\neq\alpha}|\{N_{\mathbf{k}'\alpha'}\}>$$

称算符 $\hat{a}^{\dagger}\mathbf{k}\alpha$ 和 $\hat{}a\mathbf{k}\alpha$ 分别为产生和湮灭光子的算符。

将磁场的算符 $\hat{}$ 用产生和湮灭算符表示

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}\alpha}\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)^{1/2}\left[\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}+\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right]= \\
&= \sum_{\mathbf{k}\alpha}\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)^{1/2}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}+\hat{a}^{\dagger}_{-\mathbf{k}\alpha}) \\
\hat{\mathbf{E}}_T(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} i\left(\frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0\Omega}\right)^{1/2}\left[\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}-\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right] \\
\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} i\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)^{1/2}\left[\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}-\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha}(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right]
\end{aligned} \tag{2.131}$$

将场 $\mathbf{A}_{op}(\mathbf{r})$ 和 $\mathbf{E}_{op}(\mathbf{r})$ 的纵向分量分离后，剩余的横向部分 $\hat{}\,\hat{}\,\mathbf{A}_T(\mathbf{r})$ 和 $\mathbf{E}_T(\mathbf{r})$ 不满足正则对易关系（2.82）。相反，其中的狄拉克δ函数被所谓的“横向”$\delta^{\cdot}$函数所取代，参见参考文献[7], 第III.A.1章。

2.4.2 光子动量

在本小节中，我们将考虑电磁场的动量算符 $\mathbf{P}_{\text{field}}$。利用它，我们将能够证明，光子不仅仅是电磁场能量的“部分”，它们还携带着其动量的“相应”部分。此外，这些部分的能量与动量之间的关系，就像以光速运动的无质量粒子一样。

物质场系统中的平移生成元

从量子力学的角度看，回想动量是无穷小平移的生成元，可能是猜出动量表达式最简单的方法。对于由哈密顿量 (2.84) 描述的粒子（物质）与电磁场相互作用的系统，其

无穷小平移是如下变换

$$\begin{aligned} e^{(i/\hbar)\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}}\mathbf{A}_{op}(\mathbf{r})e^{(-i/\hbar)\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}} &= \mathbf{A}_{op}(\mathbf{r}+\mathbf{a}) \approx \mathbf{A}_{op}(\mathbf{r}) + (\mathbf{a}\cdot\nabla)\mathbf{A}_{op}(\mathbf{r}) \\ e^{(i/\hbar)\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}}\mathbf{E}_{op}(\mathbf{r})e^{(-i/\hbar)\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}} &= \mathbf{E}_{op}(\mathbf{r}+\mathbf{a}) \approx \mathbf{E}_{op}(\mathbf{r}) + (\mathbf{a}\cdot\nabla)\mathbf{E}_{op}(\mathbf{r}) \\ e^{(i/\hbar)\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}}\hat{\mathbf{r}}_a e^{(-i/\hbar)\mathbf{a}\cdot\hat{\mathbf{P}}} &= \hat{\mathbf{r}}_a + \mathbf{a}, \;\; a = 1, ..., N \end{aligned} \tag{2.132}$$

因此，系统的（矢量）动量算符 $\hat{}\mathbf{P} = \{\hat{}P_x, \hat{}P_y, \hat{}P_z\}$ 应满足：对于其每个分量 P_k，以下对易子关系成立

$$[\hat{P}_k, \hat{A}_j(\mathbf{r})] = -i\hbar\partial_k \hat{A}_j(\mathbf{r}) \quad , \quad [\hat{P}_k, \hat{E}_j(\mathbf{r})] = -i\hbar\partial_k E_j(\mathbf{r}) \tag{2.133}$$

$$[\hat{P}_k, r_{j,a}] = -i\hbar\frac{\partial r_{j,a}}{\partial r_{k,a}} = -i\hbar\delta_{kj} \tag{2.134}$$

$\hat{}$ 实际上，很容易猜出这样的$\mathbf{P}$ 应该是什么

$$\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{P}}_{\text{matter}} + \hat{\mathbf{P}}_{\text{field}} = \sum_{a=1}^{N}\hat{\mathbf{p}}_a + \frac{\epsilon_0}{2}\sum_{j=1}^{3}\int d^3r\left\{\hat{E}_j(\mathbf{r})\nabla\hat{A}_j(\mathbf{r}) + h.c.\right\} \tag{2.135}$$

其中 $\hat{}p_a = -i\hbar\nabla_a$, $a = 1, ...N$ 并且“h.c.”缩写表示“厄米共轭”。

确实，第一项 $\mathbf{P}_{\text{matter}}$ 具有所需的对易关系，同时与 $\hat{}\mathbf{E}_{op}(\mathbf{r})$ 和 $\mathbf{A}_{op}(\mathbf{r})$ 对易，而第二项 $\mathbf{P}_{\text{field}}$ 与 $\hat{}\mathbf{r}_a$ 对易，并满足

$$\begin{aligned} [\hat{P}_{\text{field},k}, \hat{A}_j(\mathbf{r})] &= \frac{\epsilon_0}{2}\sum_{n=1}^{3}\int d^3r'\left\{[\hat{E}_n(\mathbf{r}')\partial'_k\hat{A}_n(\mathbf{r}'), \hat{A}_j(\mathbf{r})] + ...\right\} = \\ &= -\epsilon_0\sum_{n=1}^{3}\int d^3r'\frac{i\hbar\delta_{nj}}{\epsilon_0}\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}))\partial'_k\hat{A}_n(\mathbf{r}') = -i\hbar\partial_k\hat{A}_j(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [\hat{P}_{\text{field},k}, \hat{E}_j(\mathbf{r})] &= \frac{\epsilon_0}{2}\sum_{n=1}^{3}\int d^3r'\left\{[\hat{E}_n(\mathbf{r}')\partial'_k\hat{A}_n(\mathbf{r}'), \hat{E}_j(\mathbf{r})] + ...\right\} = \\ &= -\epsilon_0\sum_{n=1}^{3}\int d^3r'\hat{E}_n(\mathbf{r}'))\partial'_k\frac{-i\hbar\delta_{nj}}{\epsilon_0}\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})) = -i\hbar\partial_k\hat{E}_j(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

其中在最后一行我们使用了分部积分。

回顾一下存在电磁场时守恒动量的经典表达式。根据麦克斯韦方程和牛顿方程（式（2.65–2.67））, 可以得出,

$$\mathbf{P} = \sum_{a=1}^{N} m_a\mathbf{v}_a + \epsilon_0\int d^3r\,\mathbf{E}(\mathbf{r})\times\mathbf{B}(\mathbf{r}) \tag{2.136}$$

是场-物质系统守恒的总动量

$$\frac{d\mathbf{P}}{dt} = 0 \tag{2.137}$$

参见参考文献[7] 第61页，或者参见一篇不太正式的文本——参考文献[8]。在下面的附录2.5.3中，我们展示表达式（2.135）和（2.136）的等价性。

电磁辐射的动量

ˆ ˆ在不存在带电粒子的情况下，我们可以使用 $\nabla\cdot$**电场** $=0$，并将（2.135）中动量的场部分里的 E_j替换为横向ˆ ˆE_{Tj} 。对其中的 A_j 也可以进行相同的处理。事实上，$\mathbf{A}$ 的纵向部分可以写成梯度$\mathbf{A}_L = \nabla\xi$。因此，它在替换 $E_j \to E_{Tj}$后贡献的项为

$$\frac{\epsilon_0}{2}\sum_{j=1}^{3}\int d^3r\left\{\hat{E}_{Tj}(\mathbf{r})\nabla\hat{A}_{Lj}(\mathbf{r})+h.c.\right\}=\frac{\epsilon_0}{2}\sum_{j=1}^{3}\int d^3r\left\{\hat{E}_{Tj}(\mathbf{r})\nabla\partial_j\hat{\xi}(\mathbf{r})+h.c.\right\}$$

ˆ在 $\mathbf{P}_{\text{field}}$中。然而，通过对右侧ˆ进行分部积分并使用 $\partial_j E_{Tj}=0$，可以看出该项为零。

因此，我们可以将“纯”辐射的动量写为

$$\hat{\mathbf{P}}_r=\frac{\epsilon_0}{2}\int d^3r\sum_{j=1}^{3}\left[\hat{E}_{T,j}(\mathbf{r})\nabla\hat{A}_{T,j}(\mathbf{r})+h.c.\right] \tag{2.138}$$

代入算符 $\mathbf{A}_T(\mathbf{r})$ 和 $\mathbf{E}_T(\mathbf{r})$ 的表达式，得到

$$\hat{\mathbf{P}}_r=\sum_{\mathbf{k}\alpha}\hbar\mathbf{k}\;\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\alpha}\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha} \tag{2.139}$$

其中我们用了$\sum_{\mathbf{k}\alpha}\hbar\mathbf{k}=0$ [7]。正如预期的那样，ˆ$\mathbf{P}_r$ 与哈密顿量ˆ H_r 对易。其本征值为

$$\mathbf{P}_{\{N_{\mathbf{k}_\alpha}\}}=\sum_{\mathbf{k}\alpha}\hbar\mathbf{k}\;N_{\mathbf{k}\alpha}\quad,\quad N_{\mathbf{k}\alpha}=0,1,2,3,... \tag{2.140}$$

我们可以看到，每个具有 $N\mathbf{k}_\alpha$ 量子的态都具有动量 $\hbar\mathbf{k}N\mathbf{k}_\alpha$ ，因此每个携带 $\epsilon_k=\hbar\omega_k$ 的能量量子都具有动量 $\mathbf{p}_k=\hbar\mathbf{k}$。利用（经典）光波（电磁正则模）的色散关系$\omega_k=c|\mathbf{k}|$ ，我们可以得到光量子的能量-动量关系

$$\epsilon_k=c|\mathbf{p}_k| \tag{2.141}$$

即，质量为零且以光速运动的粒子。

2.4.3 光的常见态

数态

这些只是ˆ H_r的本征态$|\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}\rangle$ ，参见式 (2.129)。虽然从形式角度来看最为自然，但它们具有高度非经典性，实际上极难“按需”制备[8]。数态是能量确定的态，但不是.....

[7]这里有一个微妙之处——这个求和是发散的，因此必须通过某种方式进行正则化，例如假设在某个较大的 k_c 处设置截止值。[8]例如，M. Oxborrow 和 A.G. Sinclair，Contemp. Phys. 46, 173 (2005)。

良定义电磁场的态。举例来说，考虑电场的一个单模，即在（2.131）中$\mathbf{E}_T$ 的表达式里只保留$\mathbf{k}$ α 给定的一项，并计算

$$\langle N_{\mathbf{k}\alpha}|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})|N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle = i\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}\left(\frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0\Omega}\right)^{1/2}\langle N_{\mathbf{k}\alpha}|\left[\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \hat{a}^+_{\mathbf{k}\alpha}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right]|N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle = 0 \quad (2.142)$$

and

$$\begin{aligned}\Delta E &= \sqrt{\langle N_{\mathbf{k}\alpha}|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})\cdot\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})|N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle} = \\ &= \left(\frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0\Omega}\right)^{1/2}\langle N_{\mathbf{k}\alpha}|\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}\hat{a}^+_{\mathbf{k}\alpha} + \hat{a}^+_{\mathbf{k}\alpha}\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}|N_{\mathbf{k}\alpha}\rangle = \left(\frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0\Omega}\right)^{1/2}(2N_{\mathbf{k}\alpha}+1)^{1/2}\end{aligned} \quad (2.143)$$

ˆ 使得**E**的期望值为零，而涨落则随光子数增加而增大。

经典电磁场背后的量子力学。光的相干态

对世界的正确描述是量子的，而经典物理学只是一种近似。因此，自然会提出这样的问题：经典电磁场背后的量子力学态是什么？由于场的电分量和ˆ ˆ磁分量**E(r)**与**A(r)**所对应的量子力学算符不对易，因此不存在一个能使它们同时具有确定值的态。

在这些限制条件下，经典电磁场背后恰当的量子态 $|\Psi(t)\rangle$ 必须满足：场算符的平均值，即期望值

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) \equiv \langle\Psi(t)|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})|\Psi(t)\rangle \quad , \quad \mathbf{A}(\mathbf{r},t) \equiv \langle\Psi(t)|\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})|\Psi(t)\rangle$$

将随时间发展为经典麦克斯韦方程的解，并且是“经典上较大的”，即远大于量子不确定性，也就是这些场相对于平均值的标准差。

对于自由电磁场，要找到具有上述性质的态并不困难。由于这样的场可以表示为一组相互独立的模式，因此从考虑一个具有给定波数$\mathbf{k}$ 和偏振 $\boldsymbol{\lambda}$的简单单模开始是很有用的。聚焦于电场，我们有算符

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) = \frac{\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\Omega\epsilon_0}}\left[ck\hat{Q}_{\mathbf{k}}\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) - \hat{P}_{\mathbf{k}}\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right] \quad (2.144)$$

ˆ**E(r)** 的量子力学及其与 ˆ**A(r)** 的非对易性被“编码”在算符 $\hat{}P_{\mathbf{k}}$, $\hat{}Q_{\mathbf{k}}$ 构成的正则不对易对中。它们的动力学（对于自由场）很简单——就是谐振子的动力学，参见式 (2.123)。

因此，任务是求出谐振子的一个量子态，即薛定谔方程的解 $|\psi(t)\rangle$ ¨

$$i\hbar\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{h}|\psi(t)\rangle \ \text{ with } \quad \hat{h} = \frac{1}{2}\left(\hat{p}^2 + \omega^2\hat{q}^2\right) \quad (2.145)$$

使得其平均值

$$q(t) = \langle\psi(t)|\hat{q}|\psi(t)\rangle \quad , \quad p(t) = \langle\psi(t)|\hat{p}|\psi(t)\rangle$$

遵循谐振子的经典方程

$$\dot{q} = p \ , \ \dot{p} = -\omega^2 q \tag{2.146}$$

并且具有尽可能小的量子不确定性。

这种态最早由 Schr¨odinger 于 1926 年提出，并有一个名称——相干态。其通常的形式定义是，它是湮灭算符的本征态。

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \ \Rightarrow \ \left(\hbar\frac{\partial}{\partial q} + \omega\ q\right)\psi_\alpha(q) = \sqrt{2\hbar\omega}\alpha\psi_\alpha(q) \tag{2.147}$$

其本征态 $|\alpha\rangle$ 由本征值 α 标记，并且我们使用了 $\hat{a}$ 的坐标表示

$$\hat{a} = \left(i\hat{p} + \omega\ \hat{q}\right)/\sqrt{2\hbar\omega}$$

注意，由于 $\hat{a}$ 不是厄米的， α 通常是复值的[9]。另请注意，对于$\alpha = 0$ ，相干态就是谐振子的一个基态

$$\psi_0(q) = Ae^{-\omega q^2/2\hbar} \ , \ A = (\omega/\pi\hbar)^{1/4} \tag{2.148}$$

本章附录讨论了相干态的性质。附录中指出，相干态是一个波包，其动力学特征使得其平均值

$$q_0 \equiv \langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle \ , \ p_0 \equiv \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle \tag{2.149}$$

沿着相应的经典轨迹运动，且不确定度满足最小不确定性关系式

$$\Delta q\Delta p = \hbar/2 \tag{2.150}$$

如图2.5所述，在经典相位空间中以示意方式呈现这一图景是有用的。

[9]因此， $|\alpha\rangle$ 态具有许多陌生的特征，例如不同 α 下的非正交性或过完备性。本章附录将对此作部分介绍

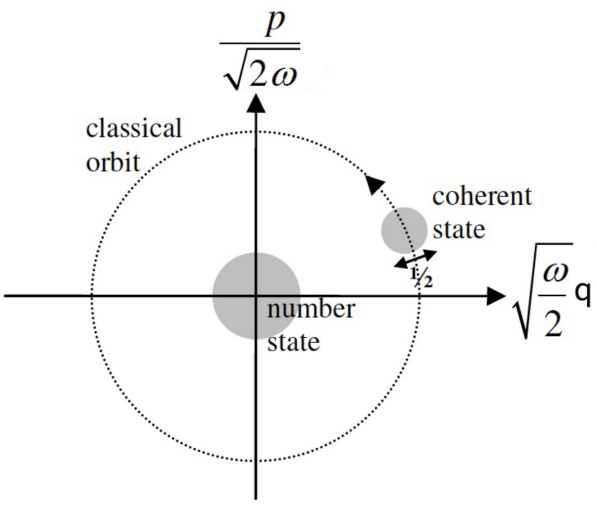


图2.5：相干态及其作为经典相空间中一种弥散分布（例如维格纳分布）的运动示意图，参见公式(2.163)。此处我们使用 $\hbar = 1$ 单位。作为比较，还示意性地展示了一个以相空间原点（$\langle n|q|n\rangle = \langle n|p|n\rangle = 0$）为中心的数态 $\psi_n(q) = \langle q|n\rangle$ 。

让我们简要考虑一下电磁场在相干态中"看起来"是什么样的。考虑用光子表示的单模 (2.144)，并假设它处于相干态$|\alpha_{\mathbf{k}}(t)\rangle$。然后

$$\begin{aligned}\langle\alpha_{\mathbf{k}}(t)|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})|\alpha_{\mathbf{k}}(t)\rangle = i\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}}\left(\frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0\Omega}\right)^{1/2}\left[\alpha_{\mathbf{k}}(t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \alpha^*_{\mathbf{k}}(t)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right] = \\ = \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}}|\alpha_{\mathbf{k}}(0)|\left(\frac{2\hbar\omega_k}{\epsilon_0\Omega}\right)^{1/2}\sin(\omega_k t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \phi_{\mathbf{k}})\end{aligned} \tag{2.151}$$

其中我们使用了附录中的结果(2.168, 2.169)。平均值$\mathbf{E}(\mathbf{r})$的这一表达式具有经典场的形式。其振幅由$|\alpha_{\mathbf{k}}(0)|$控制，参见图2.5中经典轨迹的半径。

计算

$$\langle\alpha_{\mathbf{k}}(t)|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})\cdot\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})|\alpha_{\mathbf{k}}(t)\rangle = \frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0\Omega}\left[1 + 4|\alpha_{\mathbf{k}}(0)|^2\sin^2(\omega_k t - \mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \phi_{\mathbf{k}})\right] \tag{2.152}$$

我们得到量子涨落

$$\Delta E \equiv \sqrt{\langle\alpha_{\mathbf{k}}(t)|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})\cdot\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})|\alpha_{\mathbf{k}}(t)\rangle - \langle\alpha_{\mathbf{k}}(t)|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r})|\alpha_{\mathbf{k}}(t)\rangle^2} = \frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0\Omega} \tag{2.153}$$

它与平均值的大小无关，再参见图 2.5。因此，对于电场 $\gg$ 若大于涨落的量子尺度 ΔE ，就可以将该场视为经典场。

热光

热辐射是处于热平衡的辐射，这意味着（如量子统计物理学中的通常情况）这种辐射不是由波函数（或者更准确地说，波泛函）描述，而是由密度矩阵描述。该密度矩阵在能量本征态基底中是对角的

$$\rho = \sum_{\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}} w(\{N_{\mathbf{k}\alpha}\})|\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}\rangle\langle\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}| \tag{2.154}$$

概率由玻尔兹曼因子给出

$$w(\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}) = \frac{1}{Z(T)} \exp\left[-\frac{\mathcal{E}(\{N_{\mathbf{k}\alpha}\})}{T}\right] \quad , \quad Z(T) = \sum_{\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}} \exp\left[-\frac{\mathcal{E}(\{N_{\mathbf{k}\alpha}\})}{T}\right]$$

这当然等同于说，辐射功率遵循普朗克定律。 w.
仅作提醒 - 通过使用

$$\mathcal{E}(\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}) = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \hbar\omega_k N_{\mathbf{k}\alpha}$$

将 $w(\{N_{\mathbf{k}\alpha}\})$ 和 $Z(T)$ 中的指数函数分离成包含不同 $\mathbf{k}\alpha$ 的乘积，并对 $N\mathbf{k}\alpha$ 求和，其中每个 $\mathbf{k}\alpha$ 都取自 $Z(T)$，即可得到

$$w(\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}) = \prod_{\mathbf{k}\alpha} w(N_{\mathbf{k}\alpha}) \quad \text{with} \quad w(N_{\mathbf{k}\alpha}) = \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega_k}\right) \exp\left(-\beta\hbar\omega_k N_{\mathbf{k}\alpha}\right) \tag{2.155}$$

以及 $\beta = (k_B T)^{-1}$。每个模的平均能量为

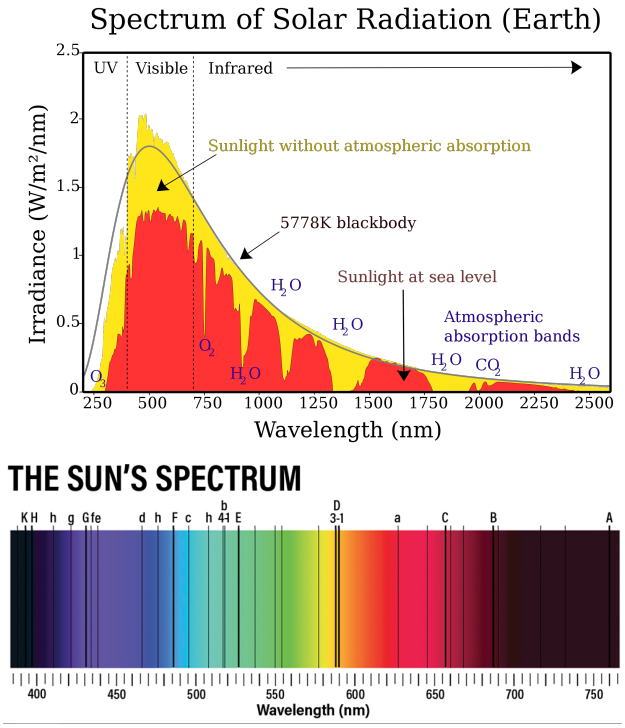
$$\langle\mathcal{E}\rangle_{\mathbf{k}\alpha} = \sum_{N_{\mathbf{k}\alpha}} \left(\hbar\omega_k N_{\mathbf{k}\alpha}\right) w(N_{\mathbf{k}\alpha}) = \hbar\omega_k \langle N\rangle_{\mathbf{k}\alpha} = \frac{\hbar\omega_k}{e^{\beta\hbar\omega_k} - 1}$$

以及普朗克谱能量密度

$$dn = \sum_{\alpha} \int_{\gamma\in 4\pi} \langle\mathcal{E}\rangle_{\mathbf{k}\alpha} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{\hbar\omega_k}{e^{\beta\hbar\omega_k} - 1} \int_{\gamma\in 4\pi} \frac{2k^2 dk d\gamma}{(2\pi)^3} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{h\nu}{e^{\beta h\nu} - 1} d\nu$$

其中 $h\nu = \hbar\omega$。

这种谱是对物质源所发出的辐射谱的一种理想化描述：这些物质源本身处于热平衡状态，而且它们发出的辐射在物质内部“有足够的时间”与其达到平衡。使这类谱“失真”的主要因素，是处于已达平衡的物质—辐射系统与观测者之间的物质层（例如太阳和地球大气层）。如果这些物质层温度不同且过于稀薄，光在穿过它们时便“没有时间”重新达到平衡。这些物质层只会吸收部分经过的辐射，吸收的波长取决于它们的化学组成。这会在辐射谱中产生相应的“吸收线”。物质层中的高温激发态原子、分子等也会发射辐射，在特定波长处加入未达平衡的光，从而产生“发射线”。观测到的太阳辐射谱示例（参见图2.6）很好地展示了这些特征。



F图 2.6：上方——普朗克黑体谱及其在现实世
ld. 磁场
下方——连续太阳光谱背景上的离散吸收线 um

2.4.4 光子角动量和自旋

利用麦克斯韦方程和牛顿方程 (2.65)、(2.67)，以及电荷、电流和密度 (2.66)，可以证明（参见参考文献 [7] 第 1A 章），物质场系统的守恒角动量为

$$\mathbf{J} = \sum_{a=1}^{N} \mathbf{r}_a \times m_a \mathbf{v}_a + \epsilon_0 \int d^3r\, \mathbf{r} \times [\mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r})] \tag{2.156}$$

C与物质场动量的表达式 (2.136) 比较，两个项 h
具有
直观上清晰的含义。

需要注意的是，与角动量的定义通常一样，表达式 (2.156) 指的是一个特定的点——所选坐标系的原点——相对于该点计算$\mathbf{J}$ 。当然，只需在$\mathbf{r}_a \to \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_0$ 和$\mathbf{r} \to \mathbf{r} - \mathbf{r}_0$ 中分别以任意矢量$\mathbf{r}_0$ 替换$\mathbf{J}$ 两项中的相应内容，就可以轻松改变这一点。这一变化直接推广了经典力学中关于角动量在此类变换下的关系式

$$\mathbf{J} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{J}' = \mathbf{J} - \mathbf{r}_0 \times \mathbf{P}$$

物质场系统中的旋转生成元

考虑坐标系的无穷小旋转

$$\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \delta\mathbf{r} = \mathbf{r} + \delta\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r}$$

其中，按照惯例，矢量 $\delta\boldsymbol{\alpha}$ 的大小等于旋转角度，其方向沿旋转轴（右手定则）。我们希望确定波泛函$\Psi[\mathbf{A(r)}, \mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N]$ 在此变换下如何变化。

让我们先回顾一下，标量场的变化遵循直观的规则

$$\phi(\mathbf{r}) \to \phi'(\mathbf{r}') = \phi(\mathbf{r})$$

这表示，旋转后的场 ϕ' 在旋转后的点 $\mathbf{r}'$ 处的值，与未旋转的场 ϕ 在原始点 $\mathbf{r}$处的值相同。利用 $\mathbf{r} = \mathbf{r}' - \delta\mathbf{r}$ 并在等式两边省略 $\mathbf{r}'$ 中的撇号，可以写成

$$\begin{aligned} \phi'(\mathbf{r}) &= \phi(\mathbf{r} - \delta\mathbf{r}) \approx \phi(\mathbf{r}) - \delta\mathbf{r} \cdot \nabla\phi(\mathbf{r}) = \\ &= \phi(\mathbf{r}) - (\delta\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla\phi(\mathbf{r}) = [1 - \delta\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla)]\phi(\mathbf{r}) = \\ &= [1 - \frac{i}{\hbar}\delta\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{l}}]\phi(\mathbf{r}) \quad \text{with} \quad \hat{\mathbf{l}} = -i\hbar[\mathbf{r} \times \nabla] \end{aligned} \tag{2.157}$$

对于矢量场，还必须对场本身进行旋转

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \to \mathbf{A}'(\mathbf{r}') = [1 + \delta\boldsymbol{\alpha}\times]\mathbf{A}(\mathbf{r}' - \delta\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r})$$

这给出（去掉 $\mathbf{r}'$ 上的撇号后）

$$\begin{aligned} \mathbf{A}'(\mathbf{r}) &\approx \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \delta\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \delta\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) - [(\delta\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{r}) \cdot \nabla]\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \\ &= \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \delta\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) - [\delta\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla)]\mathbf{A}(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{2.158}$$

ˆ 与标量场的情形一样，最后一项对应于绕 $\mathbf{l} = -i\hbar\mathbf{r} \times \nabla$ 的“轨道角动量”旋转；而在下文的附录中，我们将说明，额外的第二项则是（并不令人意外地）利用自旋一矩阵对矢量$\mathbf{A}$ 的各分量进行旋转。

现在来考察波泛函 $\Psi[\mathbf{A(r)}]$的自变量按照式（2.158）变换时会发生什么。为简化讨论，我们略去粒子坐标 $\{\mathbf{r}_a\}$，因为它们对应的旋转生成元部分显而易见。设

$$\begin{aligned} \Psi[\mathbf{A}(\mathbf{r})] &\to \Psi[\mathbf{A}(\mathbf{r}) + \delta\mathbf{A}(\mathbf{r})] \approx \Psi[\mathbf{A}(\mathbf{r})] + \int d^3r\, \delta\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \frac{\delta\Psi[\mathbf{A}(\mathbf{r})]}{\delta\mathbf{A}(\mathbf{r})} = \\ &= \left[1 + \int d^3r\, \delta\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \frac{\delta}{\delta\mathbf{A}(\mathbf{r})}\right] \Psi[\mathbf{A}(\mathbf{r})] = \\ &= \left[1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon_0 \int d^3r\, \delta\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_{op}(\mathbf{r})\right] \Psi[\mathbf{A}(\mathbf{r})] \end{aligned}$$

这里使用了式（2.81）中定义的 $\mathbf{E}_{op}\mathbf{(r)}$ 的表达式。利用式（2.158）中的$\delta\mathbf{A}$ 的显式形式，我们可以写出第二项中的积分

$$\begin{aligned} \epsilon_0 \int d^3r\, \delta\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{E}_{op}(\mathbf{r}) &= \epsilon_0 \int d^3r\, \{\delta\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) - [\delta\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{r} \times \nabla)]\mathbf{A}(\mathbf{r})\} \cdot \mathbf{E}_{op}(\mathbf{r}) \\ &= \epsilon_0\delta\boldsymbol{\alpha} \cdot \int d^3r \left\{\mathbf{A} \times \mathbf{E}_{op} - \sum_i [(\mathbf{r} \times \nabla)A_i(\mathbf{r})]\hat{E}_i\right\} \end{aligned}$$

由此可以看出场部分的旋转生成元。它可以写成两部分之和——自旋和轨道角动量

$$\hat{\mathbf{J}}_{field} = \hat{\mathbf{L}}_{field} + \hat{\mathbf{S}}_{field} \tag{2.159}$$

with

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}_{field} &= \epsilon_0 \int d^3r \sum_i \hat{E}_i (\mathbf{r} \times \nabla) \hat{A}_i \\ \hat{\mathbf{S}}_{field} &= \epsilon_0 \int d^3r \, [\mathbf{E}_{op} \times \mathbf{A}_{op}] \end{aligned} \tag{2.160}$$

在这里我们指出，这个表达式中的$\mathbf{A}$ 应视为算符（尽管它在$\mathbf{A}^{op} =$$\mathbf{A}$的表示中是对角的，其中 $\Psi[$ $\mathbf{A(r)}$]。

^ ^ ^ 注意，在$\mathbf{L}^{field}$ 和$\mathbf{S}^{field}$ 的表达式中，我们可以自由地将 E_i 分量移到左侧。事实上，在$\mathbf{L}^{field}$中，$\mathbf{(r \times \nabla)} A_i$ 与 E_i 的对易子正比于狄拉克δ函数的导数 $\delta\mathbf{(r - r')}$

$$\Big[(\mathbf{r} \times \nabla)\hat{A}_i(\mathbf{r}), \hat{E}_i(\mathbf{r}')\Big]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = -\frac{i\hbar}{\epsilon_0}(\mathbf{r} \times \nabla)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}'} = 0$$

它在$\mathbf{r}$ $=$$\mathbf{r}'$处为零。在^$\mathbf{S}^{field}$ 中，只有不同的、即彼此对易的分量^ A_i 和^ E_j与 $i \neq j$ 参与其矢量积。

2.4.5 光子宇称与光子统计

矢势$\mathbf{A(r)}$是一个极矢量——它在宇称变换下改变符号

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \to -\mathbf{A}(-\mathbf{r}) \tag{2.161}$$

$\mathbf{A(r)}$的这一性质是如下表述的基础：光子，即$\mathbf{A(r)}$振动的量子，具有负宇称。我们注意到，在这一阶段，这一表述相当晦涩；当研究物质系统的光子发射时，它便会变得清晰（参见本课程后文）。

光子是玻色子！在目前阶段，这个说法也有些晦涩。在讨论薛定谔场的二次量子化形式与量子多体系统之间的关系时，这一点会变得清晰。这里我们只指出，同一态中可以有任意数量的光子，也就是说，在由$\mathbf{k}$ α量子数表征的同一模式中，可以有任意数量的光子。

可以计算电场和磁场算符 ^ ^ ^$\mathbf{E}_T\mathbf{(r)}$ 与 $\mathbf{B(r)} = \nabla \times \mathbf{A}_T\mathbf{(r)}$ 的对易子，并发现它们不对易。这会产生所有通常的量子力学后果。事实上，在辅导课和作业中，我们/你们会探讨与诸如“光子的电场/磁场是什么？”这类问题相关的议题。

2.5 附录

2.5.1 从驻波到行波变换的细节

变换方程 (2.43) 实现了什么?

L我们先指出，对于给定的 k_ν，哈密顿量具有相同的形式，在 n ew v变量

$$H_\nu = \frac{1}{2}\sum_{i=1,2}(P_{i,\nu}^2 + \omega_\nu^2 Q_{i,\nu}^2) = \frac{1}{2}[(P_k^2 + \omega_k^2 Q_k^2) + (P_{-k}^2 + \omega_k^2 Q_{-k}^2)]$$

并且由于它们具有正则性（参见下文）， $Q_{\pm k}, P_{\pm k}$ 的动力学方程与$Q_{i,\nu}, P_{i,\nu}, i = 1,2$的动力学方程相同，因此它们的解与式 (2.42) 中的形式相同。现在，将该解中的两项代入展开式 (2.44) 时，都会给出行波。事实上，将这些解中的第一项代入 $\phi(x)$的展开式时，有

$$\sqrt{\frac{1}{L}}\sum_k Q_k(0)\left[\sin kx\cos\omega t - \cos kx\sin\omega t\right] = \sqrt{\frac{1}{L}}\sum_k Q_k 0)\sin(kx-\omega t)$$

对于第二项

$$\sqrt{\frac{1}{L}}\sum_k \frac{P_k(0)}{\omega_\nu}\left[\sin kx\sin\omega t + \cos kx\cos\omega t\right] = \sqrt{\frac{1}{L}}\sum_k \frac{P_k(0)}{\omega}\cos(kx-\omega t)$$

这些行波会沿正向或负向 x方向“运行”，具体取决于 k的符号。

验证正则性

从驻波展开式 (2.40) 到行波 (2.44) 的变换，相当于从$Q_{i,\ \nu}$，$P_{i,\ \nu}$ 相空间变量变换到 $Q_{\pm k}$，$P_{\pm k}$，见式 (2.43)。现在让我们检查这一变换是否为正则变换。

回顾一下，对于由一组广义坐标和动量 $\{q,p\}$ 描述的力学系统，变换到正则共轭组 $\{Q,P\}$ 必须满足

$$\sum_i p_i dq_i = \sum_k P_k dQ_k + dF$$

其中 dF 表示一个全微分。在我们的情形下，集合 $\{q,p\}$ 是 $Q_{i,\nu}$,$P_{i,\nu}$，而我们是

变换为 $Q_{\pm k}$, $P_{\pm k}$。我们得到

$$\begin{aligned}\sum_i P_{i,\nu}dQ_{i,\nu} &= \frac{1}{2}\left[(P_k-P_{-k})d(Q_k-Q_{-k})-(Q_k+Q_{-k})d(P_k+P_{-k})\right]= \\ &= \frac{1}{2}[P_kdQ_k+P_{-k}dQ_{-k}-P_kdQ_{-k}-P_{-k}dQ_k- \\ &\quad -Q_kdP_k-Q_{-k}dP_{-k}-Q_kdP_{-k}-Q_{-k}dP_k]= \\ &= P_kdQ_k+P_{-k}dQ_{-k}-\frac{1}{2}(P_kdQ_k+P_{-k}dQ_{-k}+Q_kdP_k+Q_{-k}dP_{-k})- \\ &\quad -\frac{1}{2}(P_kdQ_{-k}+P_{-k}dQ_k+Q_kdP_{-k}+Q_{-k}dP_k)= \\ &= P_kdQ_k+P_{-k}dQ_{-k}-\frac{1}{2}d(P_kQ_k+P_{-k}Q_{-k}-P_kQ_{-k}-P_{-k}Q_k)\end{aligned}$$

验证一般变换(2.44)的正则性也很有启发性。在这种情况下，集合 $\{q,p\}$ 是 $\{\phi(x)\ \pi(x)\}$，对 i 的求和是对 x 的积分，而我们正变换到 Q_k, P_k。于是我们有

$$\begin{aligned}&\int_0^L dx\pi(x,t)\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial t}= \\ &= \frac{1}{L}\sum_{kk'}\int_0^L dx\,[\sin k'x\ P_{k'}(t)-v|k'|\cos k'x\ Q_{k'}(t)]\times \\ &\times \left[\sin kx\ \dot{Q}_k(t)+\frac{1}{v|k|}\cos kx\ \dot{P}_k(t)\right]= \\ &= \sum_k\frac{1}{2}\left[P_k(t)\dot{Q}_k(t)-Q_k(t)\dot{P}_k(t)\right]= \\ &= \sum_k P_k(t)\dot{Q}_k(t)-\frac{1}{2}\sum_k\frac{d}{dt}[Q_k(t)P_k(t)]\end{aligned}$$

这表明了 P_k 和 Q_k的正则性。

2.5.2 相干态的详细内容

有用的平均值。最小不确定性

很容易找到方程(2.147)的显式解。但在此之前，先计算以下平均值会很有用。

$$\begin{aligned}q_0 &\equiv \langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle=\sqrt{\hbar/(2\omega)}\langle\alpha|(\hat{a}+\hat{a}^+)|\alpha\rangle=\sqrt{\hbar/(2\omega)}(\alpha+\alpha^*)=\sqrt{2\hbar/\omega}\ \mathrm{Re}\ \alpha \\ p_0 &\equiv \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle=i\sqrt{\hbar\omega/2}\langle\alpha|(\hat{a}^+-\hat{a})|\alpha\rangle=i\sqrt{\hbar\omega/2}(\alpha^*-\alpha)=\sqrt{2\hbar\omega}\ \mathrm{Im}\ \alpha\end{aligned} \tag{2.162}$$

其给出的是

$$\alpha=\sqrt{\omega/2\hbar}\ q_0+i\sqrt{1/(2\hbar\omega)}\ p_0 \tag{2.163}$$

也有

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\hat{q}^2|\alpha\rangle &= (\hbar/2\omega)\langle\alpha|\hat{a}^2+\hat{a}\hat{a}^+ +\hat{a}^+\hat{a}+(\hat{a}^+)^2|\alpha\rangle = \\ &= (\hbar/2\omega)\langle\alpha|\hat{a}^2+2\hat{a}^+\hat{a}+1+(\hat{a}^+)^2|\alpha\rangle = \\ &= (\hbar/2\,\omega)[(\alpha+\alpha^*)^2+1) = \langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle^2+\hbar/(2\omega)\end{aligned} \tag{2.164}$$

and

$$\begin{aligned}\langle\alpha|p^2|\alpha\rangle &= -(\hbar\omega/2)\langle\alpha|\hat{a}^{+2}-\hat{a}^+\hat{a}-\hat{a}\hat{a}^+ +\hat{a}^2|\alpha\rangle = \\ &= -(\hbar\omega/2)[(\alpha-\alpha^*)^2-1] = \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle^2+\hbar\omega/2\end{aligned} \tag{2.165}$$

这表明，该态中的坐标和动量不确定性与 α无关

$$\begin{aligned}\Delta q &\equiv \sqrt{\langle\alpha|\hat{q}^2|\alpha\rangle-\langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle^2} = \sqrt{\hbar/(2\omega)} \\ \Delta p &\equiv \sqrt{\langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle-\langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle^2} = \sqrt{\hbar\omega/2}\end{aligned} \tag{2.166}$$

这反过来意味着，对于 q_0 和 p_0的较大（经典）值，即对于较大的 $|\alpha|$（参见公式（2.163）），量子不确定性可以忽略不计。 Δq 和 Δp的实际值表明， $|\alpha\rangle$ 是一个最小不确定性态，见公式（2.150）。

相干态的动力学

现在让我们考察一个相干态的动力学，即求出

$$|\alpha(t)\rangle \equiv e^{-i\hat{h}t/\hbar}|\alpha\rangle \;\text{ with }\; \hat{h} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a}+1/2)$$

为此，我们使用 的海森堡表示$\hat{a}(t) = e^{i\hat{h}t/\hbar}\,\hat{a}\;e^{-i\hat{h}t/\hbar}$ 以及相应的海森堡方程，该方程很容易求解

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\hat{a}(t)}{\partial t} &= -\hat{h}\hat{a}(t)+\hat{a}(t)\hat{h} = \hbar\omega[-\hat{a}^+(t)\hat{a}(t)\hat{a}(t)+\hat{a}(t)\hat{a}^+(t)\hat{a}(t)] = \\ &= \hbar\omega\hat{a}(t) \;\;\Rightarrow\;\; \hat{a}(t) = \hat{a}e^{-i\omega t}\end{aligned} \tag{2.167}$$

这给出

$$\hat{a}|\alpha(t)\rangle = \hat{a}e^{-i\hat{h}t/\hbar}|\alpha\rangle = e^{-i\hat{h}t/\hbar}\hat{a}(t)|\alpha\rangle = e^{-i\hat{h}t/\hbar}\hat{a}e^{-i\omega t}|\alpha\rangle = \alpha e^{-i\omega t}|\alpha(t)\rangle \tag{2.168}$$

这表明 $|\alpha(t)\rangle$ 仍然是一个相干态，具有

$$\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t} \tag{2.169}$$

用相应的 $q_0(t)$ 和 $p_0(t)$ 表示

$q_0(t) = \sqrt{2\hbar/\omega}$实部 $\alpha(t) = \sqrt{2\hbar/\omega}[$实部 α余弦 $\omega t+$虚部 α正弦 $\omega t] = q_0$余弦 $\omega t+(p_0/\omega)$正弦$\omega t p_0(t) = \sqrt{2\hbar\omega}$虚部 $\alpha(t) = \sqrt{2\hbar\omega}[$虚部 α余弦$\omega t-$实部 α正弦 $\omega t] = p_0$余弦 $\omega t-\omega q_0$正弦ωt

它们与经典方程（2.146）的解一致。

显式表达式。平移谐振子的基态

利用 $\alpha = 0$ 处相干态的显式表达式 (2.148)，通过在(2.147) 中使用分解(2.163)，很容易找到一般 α 下方程 (2.147) 的解

$$\left(\hbar\frac{\partial}{\partial q} + \omega\, q\right)\psi_\alpha(q) = [\omega q_0 + i\, p_0]\psi_\alpha(q) \;\Rightarrow\; \left[\left(\hbar\frac{\partial}{\partial q} - ip_0\right) + \omega(q - q_0)\right]\psi_\alpha(q) = 0$$

并注意到该方程与含有 $\alpha = 0$的方程（式(2.148)）相似，但带有平移 $q \to q - q_0$ 和一个依赖于 p_0 的相位

$$\psi_\alpha(q) = A\exp\{-[\omega(q - q_0)^2 + ip_0]/\hbar\}\ ,\ \ A = (\omega/\pi\hbar)^{1/4} \tag{2.170}$$

显然可以将其视为平移谐振子的基态，即视为.....的基态。

$$\hat{h} = \frac{1}{2}\left[(\hat{p} - p_0)^2 + \omega^2(\hat{q} - q_o)^2\right] \tag{2.171}$$

这一观察对于对激光器光的定性讨论很重要。

注意，相干态也可以写成完备数态组（即谐振子的本征态） $|n\rangle$的展开。

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle$$

作用于$\hat{a}$ 我们得到

$$\begin{aligned}\hat{a}|\alpha\rangle = \sum_{n=0} c_n\hat{a}|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\sqrt{n}|n-1\rangle = \alpha\sum_{n=0}^{\infty} c_n|n\rangle = \\ = \alpha\sum_{k=1}^{\infty} c_{k-1}|k-1\rangle \;\;\Rightarrow\; \sqrt{n}c_n = \alpha c_{n-1} \\ \Rightarrow c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}c_0 \quad\Rightarrow\quad |\alpha\rangle = c_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\end{aligned}$$

查找 c_0 ，从归一化中

$$1 = \langle\alpha|\alpha\rangle = |c_0|^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{|\alpha|^2}{n!} = |c_0|^2 e^{|\alpha|^2} \quad\Rightarrow\quad c_0 = e^{-|\alpha|^2/2}$$

so

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{2.172}$$

计算重叠也很容易

$$\langle\alpha|\beta\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}e^{-|\beta||^2/2}e^{\alpha^*\beta} \quad\Rightarrow\quad |\langle\alpha|\beta\rangle|^2 = e^{-|\alpha-\beta|^2}$$

这表明不同的 $|\alpha\rangle$ 态并不正交。集合 $|\alpha\rangle$ 是过完备的，但满足一个有用的单位分解关系式

$$\int \frac{d^2\alpha}{\pi}|\alpha\rangle\langle\alpha| = \sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n| = \hat{1} \quad \text{with} \;\; d^2\alpha = d\,\mathrm{Re}\,\alpha\; d\,\mathrm{Im}\,\alpha$$

利用展开式（2.172）并改用极坐标$\alpha = re^{i\phi}$，$d^2\alpha = rdrd\phi$ 在积分中很容易证明。

2.5.3 关于电磁场动量的更多内容

与物质场动量经典表达式的关系式

经典表达式 (2.136) 可以写成

$$\mathbf{P}_f = \epsilon_0 \int d^3r\, \mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \epsilon_0 \int d^3r\, \mathbf{E}(\mathbf{r}) \times \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \tag{2.173}$$

它与坡印廷矢量的积分有关。关于这一结果的物理学讨论，请参见上文引用的《费曼讲义》。

我们将该表达式写成分量形式（使用列维-奇维塔张量和求和约定）

$$\begin{aligned}(\mathbf{E} \times \nabla \times \mathbf{A})_i &= \epsilon_{ijk}E_j\epsilon_{klm}\partial_l A_m = \epsilon_{kij}\epsilon_{klm}E_j\partial_l A_m = \\ &= (\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{lj})E_j\partial_l A_m = E_j\partial_i A_j - E_j\partial_j A_i\end{aligned} \tag{2.174}$$

于是

$$\epsilon_0 \int d^3r\, (\mathbf{E} \times \nabla \times \mathbf{A})_i = \epsilon_0 \int d^3r\, (E_j\partial_i A_j - E_j\partial_j A_i) = \epsilon_0 \int d^3r\, (E_j\partial_i A_j + \partial_j E_j A_i) \tag{2.175}$$

其中在最后一个等式中我们进行了分部积分。利用高斯定律 $\partial_j E_j = \rho/\epsilon_0$，得到

$$(\mathbf{P}_f)_i = \epsilon_0 \int d^3r\, E_j(\mathbf{r})\partial_i A_j(\mathbf{r}) + \int d^3r \rho(\mathbf{r})A_i(\mathbf{r})) = \epsilon_0 \int d^3r\, E_j(\mathbf{r})\partial_i A_j(\mathbf{r}) + \sum_{a=1}^{N} q_a A_i(\mathbf{r}_a) \tag{2.176}$$

其中我们利用 $\rho(\mathbf{r}) = \sum_{a=1}^{N} q_a \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)$ 进行了积分。

将此结果代入总动量的表达式 (2.136)（为清晰起见，恢复对重复指标 j 的求和符号），得到

$$\mathbf{P} = \sum_{a=1}^{N} \mathbf{p}_a + \epsilon_0 \int d^3r \sum_{j=1}^{3} E_j(\mathbf{r})\nabla A_j(\mathbf{r}) \tag{2.177}$$

with

$$\mathbf{p}_a = m_a\mathbf{v}_a + q_a\mathbf{A}(\mathbf{r}_a) \tag{2.178}$$

这与表达式 (2.135) 一致。

用横向分量表示的场动量

表达式 (2.136) 中的两项分别都是规范不变的。然而，变换后的表达式 (2.177) 中的两项并非如此，只有它们的和才是规范不变的。我们可以通过重新进行计算 (2.175) 来修正这一点，但首先要在起始的左侧将 $\mathbf{A}$ 替换为 $\mathbf{A}_T$ 。这样得到的表达式与 (2.177) 相同，只是其中的 $\mathbf{A}_T$ 替换了 $\mathbf{A}$ 。

$$\mathbf{P}=\sum_{a=1}^{N}(m_a\mathbf{v}_a+q_a\mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a))+\epsilon_0\int d^3r\sum_{j=1}^{3}E_j(\mathbf{r})\nabla A_{T,j}(\mathbf{r})$$

现在这两项都是规范不变的。此外，在第二项中我们可以将 E 替换为E_T。事实上，写成

$$E_j=E_{T,j}+E_{L,j}=E_{T,j}-\partial_j\phi$$

并使用

$$\int d^3r\sum_{j=1}^{3}\partial_j\phi(\mathbf{r})\nabla A_{T,j}(\mathbf{r})=-\int d^3r\phi(\mathbf{r})\nabla\left[\sum_{j=1}^{3}\partial_j A_{T,j}(\mathbf{r})\right]=0$$

我们表示

$$\mathbf{P}=\sum_{a=1}^{N}(m_a\mathbf{v}_a+q_a\mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a))+\epsilon_0\int d^3r\sum_{j=1}^{3}E_{T,j}(\mathbf{r})\nabla A_{T,j}(\mathbf{r}) \tag{2.179}$$

在不存在带电物质的情况下（即所有 q_a 都为零时），这个动量的场部分就变成了自由辐射的动量，正如我们已经在（2.138）中推导出的那样。

2.5.4 关于电磁场角动量的更多内容

与经典表达式的关系式

参见参考文献[7], 补充材料 B_I。

矢量场旋转的自旋1部分

我们可以将式 (2.158) 中的第 2 项写成

$$[\delta\boldsymbol{\alpha}\times\mathbf{A}]_j=\epsilon_{jkl}\delta\alpha_k A_l=-\frac{i}{\hbar}\delta\alpha_k s^k_{jl}A_l=-\frac{i}{\hbar}[\delta\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{s}]_{jl}A_l$$

其中矩阵

$$s^k_{jl}=i\hbar\epsilon_{jkl}$$

自旋 1 矩阵是用笛卡尔分量基 $x_1=x,x_2=y,x_3=z$ 表示的，而不是用更熟悉的球分量基 $(x_m,\ m=\pm1,0)$

$$x_{+1}=-\frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy)\quad,\quad x_{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy)\quad,\quad x_0=z$$

即 $x_m \sim rY_{1m}(\theta,\phi)$。

可以很容易验证，对易子确实具有正确的形式

$$[s^i, s^j] = i\hbar\epsilon_{ijn}s^n \tag{2.180}$$

为此必须证明

$$[s^i, s^j]_{kl} = -\hbar^2[\epsilon_{kim}\epsilon_{mjl} - \epsilon_{kjm}\epsilon_{mil}]$$

等于

$$i\hbar\epsilon_{ijn}s^n_{kl} = i\hbar\epsilon_{ijn}i\hbar\epsilon_{knl} = -\hbar^2\epsilon_{ijn}\epsilon_{knl}$$

Have

$$\epsilon_{kim}\epsilon_{mjl} - \epsilon_{kjm}\epsilon_{mil} = (\delta_{kj}\delta_{il} - \delta_{kl}\delta_{ij}) - (\delta_{ki}\delta_{jl} - \delta_{kl}\delta_{ji}) = \delta_{kj}\delta_{il} - \delta_{ki}\delta_{jl}$$

这确实等于

$$\epsilon_{ijn}\epsilon_{knl} = \epsilon_{ijn}\epsilon_{lkn} = \delta_{il}\delta_{jk} - \delta_{ik}\delta_{jl}$$

参考文献

[1] H. B. G. Casimir，荷兰皇家艺术与科学学院院刊 51，793（1948年）

[2] T. H. Boyer，《美国物理学杂志》71，990（2003年）

[3] 作用-角变量。罗切斯特大学。
https://phys.libretexts.org/@go/page/9653

[4] G. Kristensson. 球矢量波. 隆德，2014年
https://www.eit.lth.se/fileadmin/eit/courses/eit080f/Literature/book.pdf

[5] K.Kingsbury，卡西米尔效应，第3版，综合练习，2009年。
https://aphyr.com/media/comps.pdf

[6] A. Stange、D. K. Campbell 和 D.J. Bishop，《卡西米尔效应的科学与技术》，《今日物理》74(1)，42（2021年）；[7] C. Cohen-Tannoudji、J. Dupont-Roc、G. Grynberg，《光子与原子：量子电动力学导论》，Wiley，2004年。[8] http://www.feynmanlectures.caltech.edu/II_27.html .

第 3 章

光子-物质相互作用

本章是《电磁场量子力学》一章的延续。我们将使用该章中讨论的电磁场量子描述，介绍几个光子如何被量子物质系统发射和吸收的简单示例。

3.1 相互作用哈密顿量

3.1.1 分离相互作用项

正如《电磁场量子力学》一章中所示，与（非相对论）物质相互作用的电磁场哈密顿量算符为

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^{N} \frac{1}{2m_a}[\hat{\mathbf{p}}_a - q_a \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}_a)]^2 + V_{Coul} + \frac{\epsilon_0}{2}\int \left[\hat{\mathbf{E}}_T(\mathbf{r})^2 + c^2(\nabla \times \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}))^2\right] d^3r \quad (3.1)$$

with

$$\hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\alpha}\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)^{1/2}\left[\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\alpha}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right] \quad (3.2)$$

$$\hat{\mathbf{E}}_T(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\alpha} i\left(\frac{\hbar\omega_k}{2\epsilon_0\Omega}\right)^{1/2}\left[\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\alpha}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\right] \quad (3.3)$$

and

$$V_{Coul} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0}\sum_{a\neq b}^{N}\frac{q_a q_b}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|}$$

这个表达式可以写成

$$\hat{H} = \hat{H}_{matter} + \hat{H}_r + \hat{H}_{matter-radiation\ interaction} \quad (3.4)$$

with

$$\begin{aligned}\hat{H}_{matter} &= \sum_{a=1}^{N} \frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m_a} + V_{Coul}(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_n) \\ \hat{H}_r &= \frac{\epsilon_0}{2} \int \left[\hat{\mathbf{E}}_T(\mathbf{r})^2 + c^2 (\nabla \times \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}))^2 \right] d^3 r \\ \hat{H}_{matter-radiation\ interaction} &= \hat{H}_{I1} + \hat{H}_{I2}\end{aligned} \tag{3.5}$$

and

$$\hat{H}_{I1} = -\sum_{a=1}^{N} \frac{q_a}{2m_a} \left[\hat{\mathbf{p}}_a \cdot \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}_a) + \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}_a) \cdot \hat{\mathbf{p}}_a \right] \tag{3.6}$$

$$\hat{H}_{I2} = \sum_{a=1}^{N} \frac{q_a^2}{2m_a} [\hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}_a)]^2 \tag{3.7}$$

ˆ ˆ H_{I1} 和 H_{I2} 的表达式取决于粒子的坐标和动量，以及场的“坐标”$\mathbf{A}_T(\mathbf{r})$。值得注意的是，ˆ$\mathbf{A}_T$ 的横向性意味着$\mathbf{p}_a$ 与$\mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a)$可对易

$$\sum_{i=1}^{3} \left[\hat{p}_{a,i}, \hat{A}_{T,i}(\mathbf{r}_a) \right] = -i\hbar \nabla_a \cdot \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}_a) = 0$$

ˆ，因而相互作用 H_{I1} 可写成一项

$$\hat{H}_{I1} = -\sum_{a=1}^{N} \frac{q_a}{m_a} \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}_a) \cdot \hat{\mathbf{p}}_a \tag{3.8}$$

3.1.2 添加自旋和外场

物质粒子具有自旋时，必须在粒子坐标 $\mathbf{s}_a$ 之外加入自旋自由度 $\mathbf{r}_a$。通常，自旋粒子具有非零磁矩 $\boldsymbol{\mu}_a$[1]，它与自旋平行，并随自旋的动力学变化。相应算符之间的比例关系通常写作

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_a = g_a \frac{q_a}{2m_a} \hat{\mathbf{s}_a} \tag{3.9}$$

其中，g_a 称为朗德因子或 g 因子（例如参见“外电磁场中的运动”一章中的相关部分）。

粒子的磁矩与磁场相互作用，因此必须在相互作用哈密顿量 $H_{matter-radiation\ interaction}$ 中加入一个新的ˆ项,

$$\hat{H}_{I3} = -\sum_{a=1}^{N} \hat{\boldsymbol{\mu}}_a \cdot \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}_a) \tag{3.10}$$

[1]带电粒子具有磁矩显而易见；但事实上，具有自旋的中性粒子，例如分子、原子、中子等，也可能具有非零 $\boldsymbol{\mu}$，这是由于整体中性系统内部存在“旋转”的电荷。中子内带电的夸克就是一个明显的例子。

与磁场的算符（参见“电磁场的量子力学”一章）

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\alpha} i \left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega_k \Omega} \right)^{1/2} \left[\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha} (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha} (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] \tag{3.11}$$

到目前为止，我们考虑的都是一个封闭的物质—电磁场系统。人们经常会遇到这样的情况：除此之外，还有外场作用于物质粒子。例如，作用于原子电子的重原子核的库仑势，或作用于朗道能级中电子的外磁场。在很好的近似下，这些外场是具有预先给定的空间和时间依赖关系的经典场。在这些外场存在时，应通过加入外部经典矢势、外部标势和外磁场来修改哈密顿量（3.1）。于是，完整的哈密顿量将具有如下形式[2]

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{a=1}^{N} \frac{1}{2m_a} \left[\hat{\mathbf{p}}_a - q_a \mathbf{A}^{external}(\mathbf{r}_a, t) - q_a \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}_a \right]^2 + V_{Coul} + \\ &\quad + \sum_{a=1}^{N} U^{external}(\mathbf{r}_a, t) - \sum_{a=1}^{N} \hat{\boldsymbol{\mu}}_a \cdot \mathbf{B}^{external}(\mathbf{r}_a, t) - \\ &\quad - \sum_{a=1}^{N} \hat{\boldsymbol{\mu}}_a \cdot \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}_a) + \frac{\epsilon_0}{2} \int \left[\hat{\mathbf{E}}_T(\mathbf{r})^2 + c^2 \nabla \times \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}) \right] d^3 r \\ V_{Coul} &= \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{a \neq b}^{N} \frac{q_a q_b}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} \end{aligned} \tag{3.12}$$

其中，我们还加入了通过粒子的磁矩与外磁场相互作用的自旋自由度。

3.1.3 将辐射与物质自由度解纠缠

表达式 (3.6)、(3.7) 和 (3.10)中的诸如 $\hat{}\mathbf{A}_T(\mathbf{r}_a)$ 和 $\hat{}\mathbf{B}(\mathbf{r}_a)$这样的对象，是由算符（粒子坐标）构成的算符值函数（场）。利用下列恒等式，可以轻松且方便地理清这种复杂的依赖关系

$$\hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}_a) = \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r})\, d^3 r \ , \ \hat{\mathbf{A}}^2_T(\mathbf{r}_a) = \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \hat{\mathbf{A}}^2_T(\mathbf{r})\, d^3 r$$

and

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}_a) = \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r})\, d^3 r$$

[2]注意，外场只能通过物质影响辐射，不会直接影响辐射的动力学。这是麦克斯韦方程线性的结果。

利用这些，可以将相互作用式 (3.6)、(3.7) 和 (3.10) 写成这里只有精品

$$\hat{H}_{I1} = -\int d^3r \sum_{a=1}^{N} \frac{q_a}{2m_a} [\hat{\mathbf{p}}_a \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a) + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\hat{\mathbf{p}}_a] \cdot \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}) \tag{3.13}$$

$$\hat{H}_{I2} = \int d^3r \sum_{a=1}^{N} \frac{q_a^2}{2m_a} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)[\hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r})]^2 \tag{3.14}$$

$$\hat{H}_{I3} = -\int d^3r \sum_{a=1}^{N} \hat{\boldsymbol{\mu}}_a \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a) \cdot \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) \tag{3.15}$$

这些表达式中的第 1 个和第 3 个形式简单。

$$\hat{H}_{I1} = -\int \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r})\, d^3r \tag{3.16}$$

and

$$\hat{H}_{I3} = -\int \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r})\, d^3r \tag{3.17}$$

与电流算符

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\sum_{a=1}^{N} \frac{q_a}{m_a} [\hat{\mathbf{p}}_a \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)) + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\hat{\mathbf{p}}_a]$$

和磁化算符

$$\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r}) = \sum_{a=1}^{N} \hat{\boldsymbol{\mu}}_a \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)$$

ˆ第二项 H_{I2} 在所有粒子的电荷和质量都相等时会简化$q_1 = q_2 = ... = q_N = q$, $m_1 = m_2 = ... = m_N = m$。 那么

$$\hat{H}_{I2} = \frac{q}{m}\int \hat{\rho}(\mathbf{r})[\hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r})]^2\, d^3r \tag{3.18}$$

使用电荷密度算符

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{a=1}^{N} q\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)$$

3.1.4 所得洞见

物质产生、湮灭并散射光子

如果用光子产生与湮灭算符表示场 $\mathbf{A}_T$**(r)** 和 **磁场(r)**，便可定性地了解相互作用项的本质

写成[3]的形式

$$\hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\alpha}\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)^{1/2}\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}+\hat{a}^\dagger_{-\mathbf{k}\alpha}) \tag{3.19}$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\alpha} i\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)^{1/2}(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\left(\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}+\hat{a}^\dagger_{-\mathbf{k}\alpha}\right) \tag{3.20}$$

代入方程（3.13–3.15）中。相互作用项 $\hat{} H_{I1}$ 的形式为

$$\hat{H}_{I1} = -\sum_{\mathbf{k}\alpha}\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)^{1/2}(\hat{\mathbf{j}}_{-\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha})(\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}+\hat{a}^\dagger_{-\mathbf{k}\alpha}) \tag{3.21}$$

with

$$\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}} = \int\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,d^3r = \sum_{a=1}^{N}\frac{q_a}{2m_a}\left[\hat{\mathbf{p}}_a e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_a}+e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_a}\hat{\mathbf{p}}_a\right] \tag{3.22}$$

可以看出，在一阶近似下[4]，这种相互作用通过产生或湮灭单个光子起作用，其动量 $\hbar\mathbf{k}$ 的符号相反（这并不令人意外，但值得注意）。还需注意的是（这一点稍后会变得更加清楚，尤其是在“二次量子化”一章中），这个表达式

$$\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

通常可以看作具有确定动量 $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ 和偏振 $\boldsymbol{\lambda}_\alpha$ 的光子波函数。

将 $\hat{}\mathbf{B(r)}$ 的表达式代入相互作用 $\hat{} H_{I3}$（方程（3.15））， 得到

$$\hat{H}_{I3} = -\sum_{\mathbf{k}\alpha} i\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)^{1/2}\left[\hat{\mathbf{m}}_{-\mathbf{k}}\cdot(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha})\right](\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}+\hat{a}^\dagger_{-\mathbf{k}\alpha}) \tag{3.23}$$

with

$$\hat{\mathbf{m}}_{\mathbf{k}} = \int\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,d^3r = \sum_{a=1}^{N}\hat{\boldsymbol{\mu}}_a e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_a} \tag{3.24}$$

可以看出，这个相互作用项在一阶近似下也会产生或湮灭一个光子。$\hat{}$ 与 H_{I1} 的区别在于，前一种情况下，光子的产生或湮灭会“伴随”相应分量对物质变量的“作用量”

[3]为简化表达式，这里以及下文中，我们假设 $\mathbf{k}$ 和 $-\mathbf{k}$ 模式的偏振矢量选取为相同的 $\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}=\boldsymbol{\lambda}_{-\mathbf{k}\alpha}$。[4]这里以及下文中，“一阶近似”是指相互作用在波函数上作用一次。请注意，在求解薛定谔方程时，哈密顿量可以说是“作用无数次”。这一点可以通过观察时间演化

$$\psi(t)=\exp[-(i/\hbar)\hat{H}(t-t_0)]\psi(t_0)=[1+(-i/\hbar)\hat{H}(t-t_0)+(-i/\hbar)^2\hat{H}^2(t-t_0)^2+...]\psi(t_0)$$

电流算符投影到光子偏振 $\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}_\alpha$ 上的 ˆ ˆ**j**–**k** 分量。在 H_{I3} 中，这个作用被磁化密度的 ˆ **m**–**k** 分量取代，该分量投影到 $\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}_\alpha$ 上：ˆ**m(r)**。

现在转到 ˆ H_{I2}，式 (3.14)，我们注意到平方 $[\hat{}\mathbf{A}_T(\mathbf{r})]^2$的存在意味着产生与湮灭算符将在该表达式中以乘积形式出现

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}\hat{a}_{\mathbf{k}'\alpha'} \quad , \quad \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\alpha}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'\alpha'} \quad , \quad \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\alpha}\hat{a}_{\mathbf{k}'\alpha'} \quad , \quad \hat{a}_{\mathbf{k}\alpha}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}'\alpha'}$$

这表明，这些一阶相互作用项要么产生或湮灭两个光子，要么同时产生一个光子并湮灭另一个动量和偏振不同的光子。

物质“移位”、“混合”辐射振子

让我们回顾一下，ˆ**A**$_T$**(r)**可表示为运动平面波的形式

$$\mathbf{A}_T(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega\epsilon_0}}\sum_{\mathbf{k}}\left(\mathbf{Q}_{\mathbf{k}}\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) - \frac{1}{\omega_k}\mathbf{P}_{\mathbf{k}}\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right)$$

ˆ，其中 $\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}\alpha$’ 是与 **k** 正交的固定偏振矢量。还要记住， H_r 是正则模振子之和。

$$\hat{H}_r = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\alpha}\left(\hat{P}^2_{\mathbf{k}\alpha} + \omega_k^2\hat{Q}^2_{\mathbf{k}\alpha}\right) \tag{3.25}$$

ˆ ˆ 我们发现，用 $P\mathbf{k}\,\alpha$ 和 $Q_{\mathbf{k}\alpha}$ 表示时，哈密顿量可写为

$$\hat{H} = \hat{H}_{matter} + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}\alpha}\left(\hat{P}^2_{\mathbf{k}\alpha} + \omega_k^2\hat{Q}^2_{\mathbf{k}\alpha}\right) + \sum_{\mathbf{k}\alpha}\left(\hat{S}_{\mathbf{k}\alpha}\hat{Q}_{\mathbf{k}\alpha} + \hat{C}_{\mathbf{k}\alpha}\hat{P}_{\mathbf{k}\alpha}\right) + \hat{H}_{I2} + \hat{H}_{I3} \tag{3.26}$$

with

$$\begin{aligned}\hat{S}_{\mathbf{k}\alpha} &= -\frac{1}{\sqrt{\Omega\epsilon_0}}\int \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}\cdot\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\,d^3r \\ \hat{C}_{\mathbf{k}\alpha} &= \frac{1}{\sqrt{\Omega\epsilon_0\omega^2}}\int \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}\cdot\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d^3r\end{aligned} \tag{3.27}$$

ˆ 示意地说，通过 H_{I1} 相互作用，物质使辐射正则模的振荡器发生偏移。偏移同时发生在坐标$Q_{\mathbf{k}\alpha}$ 和动量 $P\mathbf{k}_\alpha$上。对于固定的经典 $S\mathbf{k}\alpha$ 和 $C\mathbf{k}\alpha$，每个振荡器都会发生偏移。

$$\frac{1}{2}\left(\hat{P}^2_{\mathbf{k}\alpha} + \omega^2\hat{Q}^2_{\mathbf{k}\alpha}\right) \to \frac{1}{2}\left[\left(\hat{P}_{\mathbf{k}\alpha} - P^{(0)}_{\mathbf{k}\alpha}\right)^2 + \omega_k^2\left(\hat{Q}_{\mathbf{k}\alpha} - Q^{(0)}_{\mathbf{k}\alpha}\right)^2\right] + E^{(0)}_{\mathbf{k}\alpha} \tag{3.28}$$

其中 $P^{(0)}\,\mathbf{k}\alpha$ 、 $Q^{(0)}\,\mathbf{k}\alpha$ 和 $E^{(0)}\,\mathbf{k}\alpha$ 以显而易见的方式由 $S\mathbf{k}\alpha$ 和 $C\mathbf{k}\alpha$ 确定。当然，在真实情形下， $S\mathbf{k}\alpha$ 和 $C\mathbf{k}\alpha$ 是动力学的，并且是量子化的。

还要注意，相互作用项 H_{I3} 可以像我们上面为 H_{I1} 概述的那样，从示意角度加以理解，因为它关于**磁场(r)** $= \nabla\times\mathbf{A}_T$**(r)**是线性的，因此也关于$Q_{\mathbf{k}\alpha}$ 和 $P\mathbf{k}_\alpha$ 变量是线性的。

另一方面，相互作用项 ˆ H_{I2} 关于 ˆ**A**$_T$**(r)** 是二次型。因此，它对场正则模变量的依赖也是二次型，取决于乘积 $Q_{\mathbf{k}\alpha}Q_{\mathbf{k}'\alpha'}$、$P_{\mathbf{k}\alpha}P_{\mathbf{k}'\alpha'}$ 和 $Q_{\mathbf{k}\alpha}P_{\mathbf{k}'\alpha'}$，从而混合了已经在一阶中出现的正则模 $\mathbf{k}\alpha$。

相干态的生成。激光器的示意模型

让我们回顾一下《电磁场量子力学》章节第 6.1.3 节中讨论的相干态的性质。该节中已表明，这类态可以被视为平移谐振子的基态。转到表达式 (3.28)，我们注意到，如果只选择一个光子模式 $\mathbf{k}\alpha$ ，并且为该模式“供给”的电流是外部的、恒定不随时间变化的且为经典的，那么相应哈密顿量的最低本征态将是一个相干态。

这样的哈密顿量实际上可以作为一个最简单的示意模型，用于开始理解激光器发射的光的量子力学。选择单模是对激光谐振腔进行建模（以最简单的方式）。经典外部电流是电荷激发源的（非常简化的）描述；这些电荷通过向谐振腔模式中发射光子而退激发。显然，这个平移谐振子模型极其简化，遗漏了激光器的许多重要特征和细节。不过，它正确地表明，对（单模）激光器发射的光的态而言，一个简单而合理的近似是相干态。

3.2 光子的发射与吸收

本节将讨论光子发射与吸收的量子力学描述细节。我们将使用微扰理论处理辐射-物质相互作用，并仅考虑最低阶的一阶项。正如上文讨论中所清楚说明的，这类一阶过程的相关项是 $H_{I1}\hat{}\,\hat{}$ 和 H_{I3}。我们将首先只考虑 H_{I1} 的作用，即由物质系统中电流的态发生变化而导致的光子发射与吸收。从经典角度看，这对应于交变电流发射辐射（例如由简单的天线发射辐射）。通过改变物质的自旋态来处理光子发射，也就是考虑 H_{I3} 相互作用项的作用，将自然地融入对这些过程的讨论，并联系电流磁矩的变化，参见第 3.2.6 节。

在这段引言之后，我们将首先考虑哈密顿量

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{I1} \tag{3.29}$$

其中未受扰动的部分为

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{matter} + \sum_{\mathbf{k}\alpha} \hbar\omega_k \, \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}\alpha} \hat{a}_{\mathbf{k}\alpha} \tag{3.30}$$

并且我们舍去了常数真空能量项 $E_{vacuum} = (1/2)\sum_{\mathbf{k}\alpha} \hbar\omega_k$.

3.2.1 辐射自发发射的范式 - 离散物质能级耦合于光子连续谱

未扰动能量

我们假设知道如何求解物质哈密顿量，也就是说，知道它的本征态及相应的本征值

$$\hat{H}_{matter}|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{3.31}$$

因此，我们知道未扰动的 ˆ H_0 的本征态，见公式 (3.30)，

$$|n\rangle|\{N_{\mathbf{k},\alpha}\}\rangle \quad \text{with eigenenergies} \quad E(n,\{N_{\mathbf{k}\alpha}\}) = E_n + \sum_{\mathbf{k},\alpha} N_{\mathbf{k}\alpha}\ \hbar\omega_k \tag{3.32}$$

我们假设，（正如原子、分子或核系统中通常的情况），(3.32) 中较低的物质本征能量构成一个离散的能级系统，其后是能量更高的连续态（例如处于静止状态的最简单氢原子[5]）。让我们考虑没有光子的未微扰能级扇区

$$E_n + 0 \text{ photons}$$

并与单光子扇区中的对应能级进行比较

$$E_n + 1 \text{ photon} = E_n + \hbar\omega_k$$

值得注意的是

$$\hbar\omega_k = \hbar ck$$

由于 k 的取值本质上是连续的（对于较大的量子化体积），因此形成了一个能级连续谱。

绘制这些能量（参见图 3.1）可以看到，不含光子的物质离散能级“嵌入”在物质 + 连续谱中的一个或多个光子能级内。最简单的例子是没有光子的第一个物质激发能级

$$|n=1\rangle|\{0_{\mathbf{k}\alpha}\}\rangle \quad \text{with} \quad E(1,\{0_{\mathbf{k}\alpha}\}) = E_1 + 0 \text{ photons}$$

与基态 E_0 加一个光子

$$|n=0\rangle|1_{\mathbf{k}\alpha},\{0_{\mathbf{k}'\alpha'}\}\rangle \quad \text{with} \quad E(0,1_{\mathbf{k}\alpha},\{0_{\mathbf{k}'\alpha'}\}) = E_0 + \hbar\omega_k$$

连续谱的能级。

[5]我们目前忽略发射体的质心运动。其影响将在下文讨论

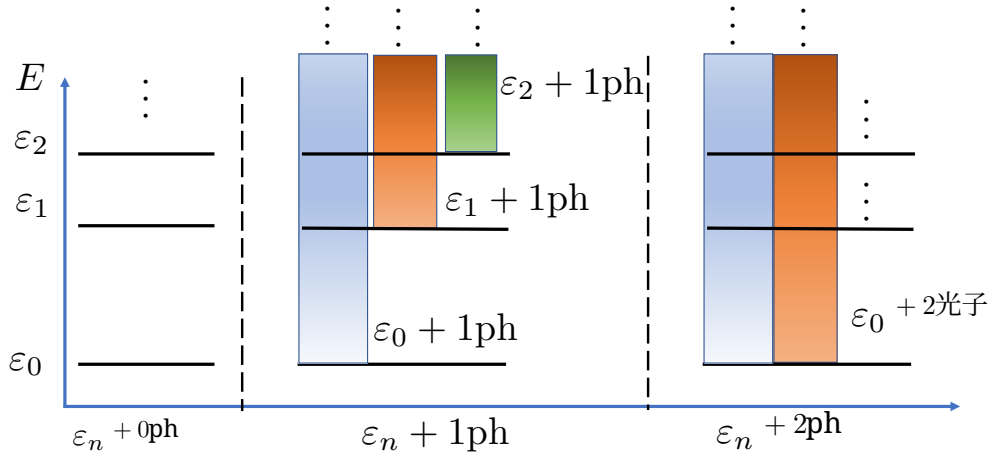


图3.1：光子能级连续谱的存在，即电磁场模式连续谱中的光子（图中以色荷带示意），意味着物质的离散激发能级嵌入了这一连续谱中。如本节所述，物质与电磁场的耦合反过来意味着，离散物质能级会在附近的光子能级连续谱上“弥散”开来。结果是，它们的能量位置发生偏移，并获得一定的宽度，从而变得有些类似于经典共振。

与连续谱耦合——时间域。指数衰减

ˆ现在我们转而讨论微扰 H_{I1} 会导致什么，这种微扰的矩阵元连接着这样的能级。我们将在一个简单模型的框架下进行讨论——一个与态的连续谱耦合的单个离散态。这被称为魏斯科普夫-维格纳模型。这里给出该模型的主要结果。本章的附录以及参考文献[1]的 Ch.I-C3 和补充材料 C_I 中均有详细说明。

我们将使用简化的记号。考虑一个能量为 $\mathcal{E}_0$ 、波函数为 ψ_0 的量子态，它嵌入在一个宽广的连续能级谱中，这些能级的能量为 $\mathcal{E}_\nu$ ，波函数为 ψ_ν。在上一节的记号中，$\mathcal{E}_0$ 表示 $E(1, \{0\mathbf{k}_\alpha\})$，而 $\mathcal{E}_\nu$ 表示 $E(0; 1\mathbf{k}_\alpha, \{0\mathbf{k}'_{\alpha'}\})$，并分别对应相应的波函数。

设 V 为各能级之间的相互作用，其矩阵元为

$$V_{0\nu} = V^*_{\nu 0} \quad , \quad V_{\nu\mu} = V^*_{\mu\nu}$$

我们想要考察系统最初（例如在 $t = 0$ ）处于离散态 ψ_0时，如何随时间演化。形式上，我们需要求解该系统的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V})\Psi(t) \tag{3.33}$$

初始条件

$$\Psi(t=0)=\psi_0 \tag{3.34}$$

我们将 $\Psi(t)$ 写成未扰动态基底 $\{\psi_0,\psi_\nu\}$ 中的展开式

$$\Psi(t)=c_0(t)\psi_0 e^{-i\mathcal{E}_0 t/\hbar}+\int c_\nu(t)\psi_\nu e^{-i\mathcal{E}_\nu t/\hbar}\,d\nu \tag{3.35}$$

其中，为方便起见，我们将因子 $e^{-i\mathcal{E}_0 t/\hbar}$ and $e^{-i\mathcal{E}_\nu t/\hbar}$ 从（尚未确定的）时间依赖系数 $c_0(t)$和 $c_\nu(t)$ 中“提取”出来。我们注意到，系数$c_0(t)e^{-i\mathcal{E}_0 t/\hbar}$ 决定了“持存振幅”的时间依赖性，该振幅对应于初态 ψ_0

$$\langle\psi_0|\Psi(t)\rangle=c_0(t)e^{-i\mathcal{E}_0 t/\hbar} \tag{3.36}$$

而振幅 $c_\nu(t)e^{-i\mathcal{E}_\nu t/\hbar}$ 则给出了初始离散态在连续态中的扩展随时间的变化。

将展开式 (3.35) 代入 Schr¨odinger 方程，利用

$$\hat{H}_0\psi_0=\mathcal{E}_0\psi_0 \quad , \quad \hat{H}_0\psi_\nu=\mathcal{E}_\nu\psi_\nu$$

并投影到 ψ_0 和 ψ_μ 上，我们得到关于系数的耦合方程

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{dc_0}{dt} &= \int V_{0\mu}c_\mu e^{-i\omega_{\mu 0}t}\,d\mu \\ i\hbar\frac{dc_\mu}{dt} &= V_{\mu 0}c_0 e^{-i\omega_{0\mu}t}+\int V_{\mu\nu}c_\mu e^{-i\omega_{\nu\mu}t}\,d\nu \end{aligned} \tag{3.37}$$

采用记号

$$\omega_{\nu\mu}=(\mathcal{E}_\nu-\mathcal{E}_\mu)/\hbar$$

以及初始条件

$$c_0(0)=1 \quad , \quad c_\nu(0)=0 \tag{3.38}$$

魏斯科夫–维格纳方法中的关键步骤/近似是忽略连续谱能级之间的耦合，即令

$$V_{\mu\nu}=0 \tag{3.39}$$

在方程（3.37）中。该近似使我们能够对第二个方程积分（回想一下， $c_0(0)=0$）

$$c_\mu(t)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t V_{\mu 0}e^{-i\omega_{0\mu}t'}\,c_0(t')\,dt' \tag{3.40}$$

I将其代入第一个方程，我们得到一个单独的积分微分方程
$_0(t)$对于c

$$\frac{dc_0}{dt}=\int_0^t K(t-t')c_0(t')dt' \tag{3.41}$$

其中我们引入了核 $K(t-t')$ 的记号

$$K(t)=-\frac{1}{\hbar^2}\int |V_{0\mu}|^2 e^{i\omega_{0\mu}t}\,d\mu \tag{3.42}$$

这类方程称为含记忆的方程（原因显而易见）。如果核 $K(t)$ 的"作用范围" T 有限，即当 t 远大于某个有限时间间隔 T 时核趋于零，那么记忆时间就是有限的。

这里让我们作一个重要观察—— $K(t)$与初态 ψ_0 中 $\hat{V}(t)$ 的时间关联成正比。

$$\int d\mu \langle\psi_0|\hat{V}|\psi_\mu\rangle\langle\psi_\mu\ |\hat{V}|\psi_0\rangle e^{i(\mathcal{E}_0-\mathcal{E}_\mu)t/\hbar} = \langle\psi_0|\hat{V}(t)\hat{V}(0)|\psi_0\rangle \tag{3.43}$$

其中

$$\hat{V}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}\hat{V}e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$$

$\hat{}$是所谓相互作用表示中的相互作用 V。为了理解这对自发光子发射意味着什么，让我们回顾一下该问题中的未扰动能量及其对应的波函数，参见式 (3.32)及其后续讨论。我们也来回顾一下相互作用的显式形式，

$$\hat{H}_{I1} = -\int \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\cdot\hat{\mathbf{A}}_T(\mathbf{r})\,d^3r \quad , \quad \hat{H}_{I3} = -\int \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\cdot\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r})\,d^3r \tag{3.44}$$

参见公式 (3.16,3.17)。将其用于关联函数 $\langle\psi_0|\hat{V}(t)\hat{V}(0)|\psi_0\rangle$ 时，我们注意到，在$\hat{}$这种情况下，它是物质部分的乘积，其中包含初始物质态中的电流 **j(r)** 或磁化强度 $\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})$ 的关联，以及这些关联

$$\langle vacuum|\hat{A}_{T,a}(\mathbf{r},t)\hat{A}_{T,b}(\mathbf{r},0)|vacuum\rangle \text{ and } \langle vacuum|\hat{B}_a(\mathbf{r},t)\hat{B}_b(\mathbf{r},0)|vacuum\rangle$$

真空中电磁场分量的。这些关联函数测量驱动物质（例如原子）从激发态自发发射光子并衰变到较低能态的场的真空涨落。

回到式 (3.41)，我们注意到它可以通过拉普拉斯变换形式求解。不过，要反演该变换，必须采用近似方法。在附录中，我们将讨论另一种使用马斯洛夫近似求解式 (3.41) 的方法。为了陈述结果，我们可以将式 (3.42) 中对连续态 ψ_μ 的积分 $\int d\mu$ 改写为先对能量固定为 $\mathcal{E}_\mu = \mathcal{E}$ 的态积分，再对 $\mathcal{E}$ 积分。可以通过以下方式实现：

$$\int d\mu ... = \int d\mathcal{E}\int d\mu\,\delta(\mathcal{E}-\mathcal{E}_\mu)... \tag{3.45}$$

核 $K(t)$ 为

$$\begin{aligned} K(t) = -\frac{1}{\hbar^2}\int d\mathcal{E}\overline{|V_{0\mu}|^2}\big|_{\mathcal{E}_\mu=\mathcal{E}} e^{i(\mathcal{E}_0-\mathcal{E})t/\hbar} \text{ with} \\ \overline{|V_{0\mu}|^2}\big|_{\mathcal{E}_\mu=\mathcal{E}} = \int d\mu\ \delta(\mathcal{E}_0-\mathcal{E}_\mu)|V_{0\mu}|^2 \end{aligned} \tag{3.46}$$

利用这一点，我们在附录中证明，采用马斯洛夫近似法求解方程(3.41)，可得"持存振幅"的时间依赖性

在长时间极限下，初态 ψ_0 的方程(3.36)（参见方程(3.145)）由指数函数给出

$$\langle\psi_0|\Psi(t)\rangle \equiv c_0(t)e^{-i\mathcal{E}_0 t/\hbar} = b_0 e^{-\Gamma t/2}e^{-i(\mathcal{E}_0+\Delta\mathcal{E})t/\hbar} \tag{3.47}$$

其中， b_0 是一个常数，取决于 $c_0(t)$的短时行为，并且

$$\begin{aligned}\Gamma =& \frac{2\pi}{\hbar}\overline{|V_{0\mu}|^2}\Big|_{\mathcal{E}_\mu=\mathcal{E}_0} = \frac{2\pi}{\hbar}\int d\mu\ \delta(\mathcal{E}_0-\mathcal{E}_\mu)|V_{0\mu}|^2 \\ \Delta\mathcal{E} =& \mathcal{P}\int d\mathcal{E}\,\overline{|V_{0\mu}|^2}\Big|_{\mathcal{E}_\mu=\mathcal{E}}\ \frac{1}{\mathcal{E}_0-\mathcal{E}}\end{aligned} \tag{3.48}$$

这里， $\mathcal{P}$ 表示积分的“柯西主值”，参见，

$$\mathcal{P}\int_a^b \frac{f(x)}{x}dx \equiv \lim_{\epsilon\to 0}\left[\int_a^{-\epsilon} dx + \int_\epsilon^b dx\right]\frac{f(x)}{x}\ \text{, for } a<0\,, b>0$$

我们看到，初态的“存活概率”渐近地呈指数衰减，其中 Γ 控制衰减率

$$w_0(t) \equiv |\langle\psi_0|\Psi(t)\rangle|^2 = |b_0|^2 e^{-\Gamma t} \tag{3.49}$$

倒数比值 $1/\Gamma$ 通常称为该能级的寿命。

我们注意到， Γ是一个和

$$\Gamma = \int d\mu \Gamma_{0\to\mu}$$

由下式给出的部分 $\Gamma_{0\to\mu}$

$$\Gamma_{0\to\mu} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{0\mu}|^2\delta(\mathcal{E}-\mathcal{E}_\mu)$$

这些只是跃迁到特定连续态 ψ_μ的单位时间黄金法则概率。

离散态衰变至连续谱的不可逆动力学，可以作为一个简单示例，说明不可逆性如何出现在形式上可逆的理论框架中。从这一角度看，循序考察以下过程颇有启发意义：先用单个能级取代连续的能级，再换成几个能级，接着是多个但仍然离散的能级，最后换成连续谱。显然，在能级数较少的情况下，系统会在有限时间后重新“回到”初始能级。这些“返回时间”会随着能级数增加而延长；到了连续谱的情形，它们则趋于无穷大（即表现为衰变）。

与连续谱耦合——能量域。线型、位移和宽度

方程(3.47)中的量 $\Delta\mathcal{E}$ 是由 $V_{0\mu}$ 将 ψ_0 与 ψ_μ的连续谱耦合所导致的未扰动能量 $\mathcal{E}_0$ 的能量位移。为了更好地理解这一表述，我们现在想介绍上述讨论的“定态”版本，即确定未扰动哈密顿量 $\hat{} H_0$ 的离散态 ψ_0 是如何被“涂抹”的，

即，分布到该问题中与连续态耦合的精确态上。

我们注意到，对于含时薛定谔方程 (3.33)，其解 (3.35) 可以形式上按“完整”哈密顿量 ($\hat{}H_0 + \hat{}V$)$\Psi_\chi = E_\chi \Psi_\chi$ 的本征函数 Ψ_χ 展开：¨

$$\Psi(t) = \int d\chi \mathcal{A}_\chi \Psi_\chi e^{-i\Omega_\chi t} \quad , \quad \Omega_\chi = E_\chi/\hbar \tag{3.50}$$

展开系数 $\mathcal{A}_\chi$ 由初始条件 (3.34)[6] 确定

$$\mathcal{A}_\chi = \langle \Psi_\chi | \psi_0 \rangle \tag{3.51}$$

于是，振幅 (3.47) 可以写成

$$\langle \psi_0 | \Psi(t) \rangle = \int d\chi |\langle \psi_0 | \Psi_\chi \rangle|^2 e^{-i\Omega_\chi t} = \int dE \overline{|\langle \psi_0 | \Psi_\chi \rangle|^2}\big|_{E_\chi = E} e^{-iEt/\hbar} \tag{3.52}$$

其中，对于积分 $\int d\chi$ ，我们使用了恒等式 Eq. (3.45)，并对 $|\langle \psi_0 | \Psi_\chi \rangle|^2\big|_{E_\chi = E}$ 采用了与 Eq. (3.46) 类似的记号。得到

$$\overline{|\langle \psi_0 | \Psi_\chi \rangle|^2}\big|_{E_\chi = E} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \psi_0 | \Psi(t) \rangle e^{iEt/\hbar} \tag{3.53}$$

左边正是我们感兴趣的量——未受扰动的离散态 ψ_0 在该问题的精确定态中的概率分布。

为了计算等式右侧的积分，我们需要将解（3.47）延拓到负时间 $t < 0$。只需注意，解中从$c_\mu(t)$到 $c_0(t)$的所有项都保持其形式表达式即可。唯一的不同在于附录中式（3.146）对长时间极限 $t_0 \to \infty$ 的讨论，必须将其替换为$t_0 \to -\infty$。为了计算这个极限，我们将再次移动能量积分路径，但这次需要将其移入 $Im\,\mathcal{E}$ 上半平面。容易看出，这将得到与正 t 时相同的结果，但Γ的符号相反。因此，上述积分由两部分组成

$$\frac{1}{2\pi}\left[\int_{-\infty}^{0} dt e^{-i(\mathcal{E}_0 + \Delta\mathcal{E} + i\hbar\Gamma/2 - E)t/\hbar} + \int_{0}^{\infty} dt e^{-i(\mathcal{E}_0 + \Delta\mathcal{E} - i\hbar\Gamma 2 - E)t/\hbar}\right]$$

这两部分很容易计算，结果为

$$\overline{|\langle \psi_0 | \Psi_\chi \rangle|^2}\Big|_{E_\chi = E} = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar\Gamma/2}{(E - \mathcal{E}_0 - \Delta\mathcal{E})^2 + (\hbar\Gamma/2)^2} \tag{3.54}$$

这表明，具有固定能量 $\mathcal{E}_0$ 的未受扰离散态会在能量范围 $\hbar\Gamma$ 内的精确态上“摊开”，相对于 $\mathcal{E}_0$偏移了 $\Delta\mathcal{E}$ 。上述等式右端的函数是洛伦兹函数（也称为布赖特-维格纳分布）。

[6]我们假设连续谱本征函数 Ψ_χ 按狄拉克δ函数 $\langle \Psi_\chi | \Psi_{\chi'} \rangle$归一化 $= \delta(\chi - \chi')$

人们常说，能量中位置确定的离散态会“获得”具有宽度和位移的线形。

也可以将结果 Eq.(3.54) 描述为一个离散态转变为共振。这是因为它与经典谐振子在耗散力 $-\gamma v$ 的作用下、以频率 ω_0 振荡时发生的现象类似。振子运动（单位质量时）

$$q(t) = q_0 e^{-\gamma t/2}\sin(\omega t + \phi_0) \quad , \quad \omega = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2/4}$$

是频率发生偏移的阻尼振荡，振幅随时间呈指数函数衰减。

3.2.2 光子发射率

根据上一节的讨论，我们现在将使用费米黄金法则

$$\Gamma_{i\to f} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|V|i\rangle|^2\delta(E_n - E_0 - \hbar\omega_k) \tag{3.55}$$

计算物质态从较高能态变为较低能态时的自发光子发射速率（单位时间内的概率）。将这些物质态记为 $|n\rangle$ 和 $|0\rangle$，则在这种情况下

$$|i\rangle = |n\rangle|\{0_{\mathbf{k}\alpha}\}\rangle \quad |f\rangle = |0\rangle|1_{\mathbf{k}\alpha}, \{0_{\mathbf{k}'\alpha'}\}\rangle \tag{3.56}$$

其中$\mathbf{k}'\alpha'$ 表示除$\mathbf{k}\alpha$之外的所有光子态。我们已将初态和末态能量 E_n 和 $E_0 + \hbar\omega_k$ 代入上面的 δ 函数。

利用 $\hat{}$式（3.21）的H_{I1}，结合这些初态和末态，我们计算得

$$\begin{aligned}\langle f|\hat{H}_{I1}|i\rangle &= \langle 0|\langle 1_{\mathbf{k}\alpha}, \{0_{\mathbf{k}'\alpha'}\}|\hat{H}_{I1}|\{0_{\mathbf{k}\alpha}\}\rangle|n\rangle = \\ &= -\sum_{\mathbf{k}''\alpha''}\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k''\Omega}\right)^{1/2}\langle 0|\hat{\mathbf{j}}_{-\mathbf{k}''}\cdot\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}''\alpha''}|n\rangle\langle 1_{\mathbf{k}\alpha}, \{0_{\mathbf{k}'\alpha'}\}|\hat{a}_{\mathbf{k}''\alpha''} + \hat{a}^\dagger_{-\mathbf{k}''\alpha''}|\{0_{\mathbf{k}\alpha}\}\rangle\end{aligned}$$

我们得到物质和辐射矩阵元乘积的总和。后者很容易计算

$$\langle 1_{\mathbf{k}\alpha}, \{0_{\mathbf{k}'\alpha'}\}|\hat{a}_{\mathbf{k}''\alpha''} + \hat{a}^\dagger_{-\mathbf{k}''\alpha''}|\{0_{\mathbf{k}\alpha}\}\rangle = \delta_{-\mathbf{k}'',\mathbf{k}}\delta_{\alpha''\alpha} \tag{3.57}$$

这意味着对模式求和时，只有一项不为零。

因此我们得到

$$\langle f|\hat{H}_{I1}|i\rangle = -\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)^{1/2}\langle 0|\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|n\rangle \tag{3.58}$$

这个表达式的平方中出现量子化体积的倒数 $1/\Omega$，很容易理解。我们计算的是在给定的 $\mathbf{k}$ 动量态中找到发射光子的概率率。对于宏观尺度的大 Ω，这个概率率非常小$\sim 1/\Omega$，但 $\mathbf{k}$ 的取值却非常密集。事实上，它们的密度为 $\sim\Omega$，这将抵消概率率中的 $1/\Omega$。现在我们将考虑一个说明这一点的例子。

典型探测器测量什么

我们来考虑一种实际情况：发射光子由一个探测器探测，该探测器放置在距离发射系统足够远处，并测量围绕$\mathbf{k}$的小立体角 $d\gamma$ 内发射的所有光子。

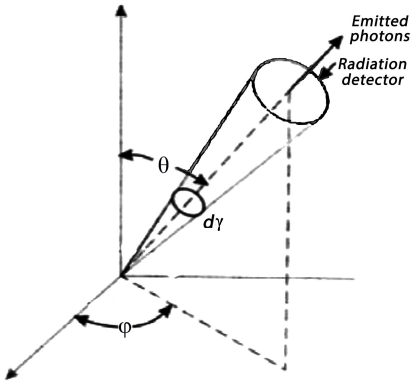


图3.2：探测发射光子的示意几何图。探测器的开口覆盖以方向 θ, ϕ 为中心的 $d\gamma$ 立体角，沿该方向测量发射率。

为了计算探测器测量的量，我们注意到，单位时间内测量到具有给定偏振 α 和动量 $\hbar\mathbf{k}$ 的光子的概率，在给定 $\mathbf{k}$ 附近的一个小 " 体积 "$\Delta^3 k$ 内由下式给出

$$dw_{\mathbf{k}\alpha} = \sum_{\mathbf{k}' \; in \; \Delta^3 k} \Gamma_{i\to\mathbf{k}'\alpha} \approx \Gamma_{i\to\mathbf{k}\alpha} \times \left(\text{number of } \mathbf{k}'\text{s in } \Delta^3\text{k}\right) \to \Gamma_{i\to\mathbf{k}\alpha} \frac{\Omega d^3 k}{(2\pi)^3}$$

这里我们用 $\Gamma_{i\to\mathbf{k}'\alpha}$ 示意地表示向 $\mathbf{k}'\alpha$ 态发射光子的速率，并假设 $\Delta^3 k$ 足够小，使得上述求和中的这一速率变化不大。按照惯例，我们还在记号中改用了微分形式 $d^3 k$ ，并用表达式 $\Omega d^3 k/(2\pi)^3$ 表示 $d^3 k$中的$\mathbf{k}$的数目。

为了继续讨论我们假定该探测器所测量的内容，我们应调整上述表达式，以计及立体角 $d\gamma$ 中的所有$\mathbf{k}$。为此，我们表示 $d^3 k = k^2 dk d\gamma$，保持 $d\gamma$ 不变，并对 dk 积分。利用$\Gamma_{i\to\mathbf{k}'\alpha}$ 的显式表达式以及矩阵元(3.58)，并变换为 $k = \omega/c$ 我们得到，在重复实验中，探测器每单位时间测得的光子数的概率，或者更实际地说，相对数量，由下式给出

$$dN_{\mathbf{k}\alpha} = d\gamma \int \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0 \omega \Omega}\right) |\langle 0|\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|n\rangle|^2 \delta(E_n - E_0 - \hbar\omega) \, \frac{\Omega \omega^2 d\omega}{(2\pi c)^3} \tag{3.59}$$

我们注意到 Ω 抵消了。使用 δ 函数进行积分，我们得到

$$\frac{dN_{\mathbf{k}\alpha}}{d\gamma} = \frac{\omega}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0 \hbar} |\langle 0|\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|n\rangle|^2 \tag{3.60}$$

其中必须记住，ω 以及$\mathbf{k}$ 的大小由能量守恒确定

$$\hbar\omega = ck = E_n - E_0 \tag{3.61}$$

上述发射率表达式是本节的主要结果。它说明了如何求出沿$\mathbf{k}$ 方向、小角度发射光子时的退激发率，以及偏振矢量为 $\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}_\alpha$的情况。我们应当能够计算矩阵元

$$\langle 0|\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}|n\rangle$$

物质电流的第$\mathbf{k}$个傅里叶分量，将其投影到偏振$\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}$上，将结果平方，再乘以(3.60)前面的系数。

需要指出的是，在球坐标中

$$\mathbf{k} = k(\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) \tag{3.62}$$

对于光子发射问题，线偏振矢量的一种方便选取方式为

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\lambda}_1 = (\cos\theta\cos\phi, \cos\theta\sin\phi, -\sin\theta) \quad , \quad \lambda_2 = (-\sin\phi, \cos\phi, 0) \\ &\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\lambda}_{1,2} = \boldsymbol{\lambda}_1\cdot\boldsymbol{\lambda}_2 = 0 \end{aligned} \tag{3.63}$$

这一选择对应于 $\boldsymbol{\lambda}_1$ 位于$\mathbf{k}$,$\mathbf{e}_z$ 平面内，也就是说平行于$\mathbf{e}_\theta$ ；而 $\boldsymbol{\lambda}_2$ 与其垂直，也就是说平行于$\mathbf{e}_\phi$。

如果探测器无法区分光子偏振（通常如此），就必须求和

$$\frac{dN_{\mathbf{k}}}{d\gamma} = \sum_{\alpha=1,2} \frac{dN_{\mathbf{k}\alpha}}{d\gamma} \tag{3.64}$$

经典极限

在接下来的几节中，我们将讨论式 (3.60) 中电流矩阵元的各种性质及其简化方法。在此之前，让我们将该表达式与相应的经典结果进行比较。为此，让我们用光子能量 $\hbar\omega$ 将其乘上。这样，我们就能得到系统发出的功率。

$$\frac{d\mathcal{P}_{\mathbf{k}\alpha}}{d\gamma} = \frac{\omega^2}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0} |\langle 0|\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}|n\rangle| \cdot \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 \tag{3.65}$$

值得注意的是，该表达式中没有显式的 $\hbar$ 依赖，而量子力学则体现在电流矩阵元的出现上。

将此表达式与经典结果（参见参考文献[3], 第279页）比较，可以发现这些表达式在形式上完全相同[7] ，前提是将.....的矩阵元视为

[7]从CGS制 转换到 SI 时，应记住 elec 平方的额外 $1/4\pi\epsilon_0$ 因子
tric c
harge

量子力学表达式中的ˆ 电流算符 **j(r)**，与经典电流 **j(r** *t)* 的频率为 **(3.61)** 的傅里叶分量。

这种对应关系符合半经典规则（参见文献 [4] 第 48 节）：在经典极限下，矩阵元 f_{mn} 趋近于经典函数 *f(t)*的傅里叶展开分量 f_{m-n}。海森堡最初在其矩阵量子力学方法中猜想了这一规则。

动量守恒和反冲能量

让我们考虑这样一种常见情况：光子辐射物质系统的初态和末态分别是总动量为$\mathbf{P}_i$ 和 $\mathbf{P}_f$ 的动量本征态。孤立原子、分子、原子核将处于此类态中。因此，此类系统中的初态和末态将是

$$|i\rangle = |n, \mathbf{P}_i\rangle|\{0_{\mathbf{k}\alpha}\}\rangle \quad |f\rangle = |0, \mathbf{P}_f\rangle|1_{\mathbf{k}\alpha}, \{0_{\mathbf{k}'\alpha'}\}\rangle$$

以及跃迁矩阵元 **(3.58)**

$$|\langle f|V|i\rangle|^2 = \left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)|\langle 0, \mathbf{P}_f|\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}|n, \mathbf{P}_i\rangle \cdot \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 \tag{3.66}$$

ˆ当算符**jk** 作用于具有给定总动量 $\mathbf{P}$ 的物质态时，它具有将该态变换为具有 $\mathbf{P} - \hbar$ **k**的态的性质。为证明这一点，让我们使用动量算符ˆ$\mathbf{P} = \sum_{a=1}^{N}$ ˆ$\mathbf{p}_a$，并计算其分量 ˆ ˆ P_m 作用于由**jk** 作用于 $|n,\mathbf{P}_i\rangle$所生成的态时的作用量。

$$\hat{P}_m\left(\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}|n, \mathbf{P}_i\rangle\right) = \left[\hat{P}_m\,,\,\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}\right]|n, \mathbf{P}_i\rangle + P_m^{(i)}\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}|n, \mathbf{P}_i\rangle \tag{3.67}$$

为避免混淆，我们用 $P_m^{(i)}$表示$\mathbf{P}_i$ 矢量的第 m 个分量，并在右端第二项中使用了 ˆ $P_m|n, \mathbf{P}_i\rangle = P_m^{(i)}|n, \mathbf{P}_i\rangle$。现在，让我们利用 **jk** 的显式表达式 **(3.22)** 以及以下关于 $\mathbf{P}$ 各分量 ˆ $\mathbf{p}_a$ 的关系式，计算第一项中的 ˆ 对易子

$$\left[\hat{\mathbf{p}}_a\,,\,e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_b}\right] = -\delta_{ab}\,i\hbar\nabla_a e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_b} = -\delta_{ab}\,\hbar\mathbf{k}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_b} \quad \rightarrow \quad \left[\hat{P}_m\,,\,\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}\right] = -\hbar k_m\,\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}$$

由此得到式 **(3.67)**

$$\hat{P}_m\left(\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}|n, \mathbf{P}_i\rangle\right) = (\mathbf{P}_i - \hbar\mathbf{k})_m\left(\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}|n, \mathbf{P}_i\rangle\right) \tag{3.68}$$

ˆ 这表明，态**jk**$|^n$,$\mathbf{P}_i\rangle$ 确实具有确定的动量$\mathbf{P} = \mathbf{P}_i - \hbar$**k**值。由于具有不同动量的态彼此正交，这一性质意味着，跃迁矩阵元 $\langle 0, \mathbf{P}_f|$**jk**$|^n, \mathbf{P}_i\rangle$ 仅在以下情况下非零

$$\mathbf{P}_i = \mathbf{P}_f + \hbar\mathbf{k}$$

即发射的光子守恒总动量。

上述讨论涉及发射光子的物质系统的动量变化。但这一反冲动量 $\Delta\mathbf{P} \equiv \mathbf{P}_f - \mathbf{P}_1$ 意味着还存在相应的反冲能量。原则上，这一能量应包含在能量守恒关系式Eq.(3.61) 中。然而可以证明，对于典型的光子动量，反冲能量在极好的近似下可以忽略，并可假定物质系统在其质心系中保持静止。

显然，对于光子能量 $\epsilon_{\text{photon}} = \hbar\omega$，传递给反冲物质的动量为 $p_{\text{recoil}} = \hbar k = \hbar\omega/c$。因此，物质的反冲动能为 $\epsilon_{\text{recoil}} = p_{\text{recoil}}^2/2M = (\hbar\omega)^2/2Mc^2$，这里我们假设物质是非相对论性的，并且在一个物质初始静止的参考系中进行计算。

因此，反冲能量与光子能量之比为

$$\frac{\epsilon_{\text{recoil}}}{\epsilon_{\text{photon}}} \sim \frac{\hbar\omega}{Mc^2}$$

对于典型的辐射物质系统（分子、原子、原子核），该比值为

$$\frac{1eV \div 10\,MeV}{(1 \div 100)\,GeV} \ll 1$$

因此，对于这类系统，反冲能量确实可以忽略不计。

请注意，无量纲反冲速度由相同的表达式给出

$$\frac{v}{c} = \frac{p}{Mc} = \frac{\hbar\omega}{Mc^2}$$

例如，对于氢原子，有

$$\frac{v_{\text{recoil}}}{c} \sim \frac{10eV}{10^9 eV} \quad \rightarrow \quad v_{\text{recoil}} \sim 10^{-8}c = 3m/s$$

3.2.3 长波长近似

考虑两种典型的发射光子量子系统——原子和原子核，并考察它们的尺寸与发射光子的波长之间的关系。后者与光子能量的关系为

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi c}{ck} = \frac{2\pi\hbar c}{\hbar\omega} \approx \frac{6.28 \times 197\ eV \cdot nm}{\hbar\omega} \approx \frac{1200\ eV \cdot nm}{\hbar\omega}$$

典型的原子尺寸为 $\sim 0.1 \div 0.2\ nm$，而原子光子的典型发射能量为 $\sim 1 \div 10^3\ eV$。这意味着发射光子的波长为

$$\lambda \sim (1.2 \div 1200)\ nm \gg 0.1 \div 0.2\ nm \text{ atomic sizes}$$

类似的结果也适用于原子核，其大小为 $5 \div 10fm$，而典型的发射能量为 $(1 \div 10)\ MeV$。所以

$$\lambda \approx \frac{1200\ MeV \cdot fm}{\hbar\omega} \sim 120 \div 1200\ fm \gg 5 \div 10\ fm \text{ nuclear sizes}$$

对于固态发射系统（其中典型尺寸是晶体晶胞等）和小分子，同样的估算也成立。

这些估算对于发射率表达式 Eq. (3.60) 中电流矩阵元的计算及其大小有重要影响。将其明确写出

$$\langle 0|\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}|n\rangle = \int d^3r\, e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\langle 0|\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})|n\rangle \tag{3.69}$$

我们看到，被积函数不为零的积分范围由电流的矩阵元决定。因此，该范围必须为 $|\mathbf{r}| \leq a$，其中 $a \sim$ 发射系统的大小。正如我们上面所看到的，对于大多数我们感兴趣的物质系统而言，该范围将为 $a \ll \lambda$ ——发射光子的波长。这给出了条件 $ka \ll 1$，在该条件下可以展开上述积分中的指数

$$\hat{\langle 0|\mathbf{j}_{\mathbf{k}}|n\rangle} = \int d^3r(1 - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + ...)\langle 0|\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})|n\rangle = \langle 0|\hat{\mathbf{j}}_0|n\rangle - i\int d^3r\,(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\langle 0|\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})|n\rangle + ... \tag{3.70}$$

并且只保留最低阶的非零项。

这构成了光子发射（正如我们将在下文看到的，光子吸收）处理中一个重要要素的基础——长波近似（LWA）。

3.2.4 电偶极发射

让我们讨论一下，在仅保留最低阶项时预期的光子发射率 st
在 LWA 展开式（3.70）中。我们使用

$$\hat{\mathbf{j}}_0 = \int d^3r \sum_{a=1}^{N} \frac{q_a}{2m_a}[\hat{\mathbf{p}}_a\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a) + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\hat{\mathbf{p}}_a] = \sum_{a=1}^{N}\frac{q_a}{m_a}\hat{\mathbf{p}}_a \tag{3.71}$$

为了计算该算符在物质本征能量态之间的矩阵元，使用对易关系会很方便

$$[\mathbf{r}_a, \hat{H}_{matter}] = [\mathbf{r}_a, \sum_{b=1}^{N}\frac{\hat{\mathbf{p}}_b^2}{2m_b}] = i\hbar\frac{\hat{\mathbf{p}}_a}{m_b}$$

因此

$$\hat{\mathbf{j}}_0 = \sum_{a=1}^{N}\frac{q_a}{m_a}\hat{\mathbf{p}}_a = \frac{1}{i\hbar}[\hat{\mathbf{d}}, \hat{H}_{matter}] \quad \text{with} \quad \hat{\mathbf{d}} = \sum_{a=1}^{N} q_a\mathbf{r}_a \tag{3.72}$$

其中 $\hat{\mathbf{d}}$ 是物质系统偶极矩的算符。

因此，对于 (3.70) 第一项中的矩阵元，我们有

$$\langle 0|\hat{\mathbf{j}}_0|n\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle 0|[\hat{\mathbf{d}}, \hat{H}_{matter}]|n\rangle = \frac{E_n - E_0}{i\hbar}\langle 0|\hat{\mathbf{d}}|n\rangle \tag{3.73}$$

其中我们利用了 $|0\rangle$ 和 $|n\rangle$ 是 $\hat{}\, H_{matter}$的本征态。因此，在 ka的最低阶近似下

$$\langle 0|\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}|n\rangle \approx -i\omega\langle 0|\hat{\mathbf{d}}|n\rangle$$

由这些矩阵元描述的跃迁称为电偶极跃迁。将其代入光子发射率的表达式 (3.60)，得到

$$\frac{dN_{\mathbf{k}\alpha}}{d\gamma} = \frac{\omega^3}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0 \hbar} |\langle 0|\hat{\mathbf{d}}|n\rangle \cdot \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 \tag{3.74}$$

由此公式描述的辐射称为电偶极辐射。

上述表达式取决于三个因素——物质本征态之间偶极算符的矩阵元矢量，

$$\mathbf{d}_{on} \equiv \langle 0|\hat{\mathbf{d}}|n\rangle \ ,$$

这些态之间的能量差 $\hbar\omega$ 以及发射光子的偏振 $\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}\alpha$ 。

ˆ 正如下面将看到的，偶极算符 $\mathbf{d}$是一个矢量这一事实，使我们能够对矩阵元构成的结果矢量$\mathbf{d}_{on}$ 作出许多一般性陈述。对于初态和末态 $|n\rangle$ 和 $|0\rangle$ 是物质系统角动量的本征态的情形，我们将能够确定$\mathbf{d}_{on}$ 何时不为零，并推导出$\mathbf{d}_{on}$各分量之间的一般关系式，即确定其方向。

光子发射的方向和偏振之间的关系。我们将在下面的讨论中使用式 (3.74) 来推导这种关系，其中偏振矢量垂直于 $\mathbf{k}$。显然，发射光子的角分布围绕矢量$\mathbf{d}_{on}$ 的方向呈对称分布。此外，由于 $\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}\alpha$ 垂直于 $\mathbf{k}$，沿$\mathbf{d}_{on}$ 方向的直线上的发射率为零。对于$\mathbf{k}$ 的任意方向，使用偏振矢量 $\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}_1$ 和 $\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}_2$ 会很方便，它们分别平行和垂直于由$\mathbf{d}_{on}$ 和 $\mathbf{k}$ 所定义的平面。选择坐标系，使$\mathbf{d}_{on}$ 沿其 z轴，并用 θ 和 ϕ 表示 $\mathbf{k}$ 的球角，不难看出这样的选择对应于方程 (3.63)。然后

$$|\mathbf{d}_{on} \cdot \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}1}|^2 = |\mathbf{d}_{on}|^2 \sin^2\theta \tag{3.75}$$

我们在图 3.3 中绘出了所得图样。显然，对于这种偏振$\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}2}$，各个辐射方向上的发射率都恒为零

$$|\mathbf{d}_{on} \cdot \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}2}|^2 = 0$$

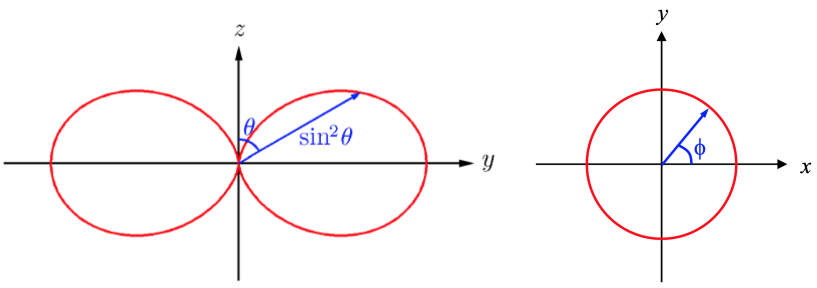


图3.3：电偶极辐射的角分布与发射光子波矢的球角θ 和 ϕ 的关系 $\mathbf{k}$，其中偶极矩阵元矢量 $\mathbf{d}_{on}$取为沿z轴方向。

将式 (3.74) 乘以 $\hbar\omega$，即可得到偶极辐射发射的功率

$$\frac{d\mathcal{P}_{\mathbf{k}\alpha}}{d\gamma} = \frac{\omega^4}{8\pi^2 c^3 \epsilon_0} |\langle 0|\hat{\mathbf{d}}|n\rangle \cdot \boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|^2 \tag{3.76}$$

正如我们在公式 (3.65) 后的讨论中所指出的，这一表达式中没有显式的 $\hbar$ 依赖，而量子力学"仅仅"体现在偶极算符的矩阵元中。再次与经典表达式进行比较，参见 [8]，可以看出，在经典极限下，这一矩阵元变为经典偶极矩 $\mathbf{d}(t)$ 的傅里叶分量，其频率为 (3.61)。

以下是经典电偶极辐射的图示表示。

https://www.youtube.com/watch?v=UOVwjKi4B6Y

3.2.5 角动量和宇称选择定则

在讨论单个分子、原子、原子核和亚核粒-子所发射的光子时，人们处理的是具有旋转不变性的物质哈密顿量，其本征态同时也是总角动量（包括自旋）的本征态

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} = \sum_{a=1}^{N} \mathbf{r}_a \times \hat{\mathbf{p}}_a + \sum_{a=1}^{N} \hat{\mathbf{s}}_a$$

或者更准确地说，是其平方 $\hat{\mathbf{J}}^2$ 及其一个投影，通常选为 $\hat{J}_z$。这里的求和遍及所研究的分子、原子等的各个组成部分。因此，在这些（非常常见的）情况下，需要考虑的偶极矩阵元为

$$\langle 0|\hat{\mathbf{d}}|n\rangle \to \langle \nu_2 J_2 M_2|\hat{\mathbf{d}}|\nu_1 J_1 M_1\rangle \tag{3.77}$$

其中，我们明确标出了角动量量子数，并用ν 表示完全确定物质系统各态所需的所有其余量子数。例如，在球对称势中运动且具有自旋轨道耦合的自旋为 $1/2$ 的粒子，其能级由 4 个量子数确定。

$$n_r\ ,\ l\ ,\ j\ ,\ m$$

因此，在这种情况下，ν 将表示 n_r，l 个数字。

偶极矩是一个 $\ell = 1$ 对象。向量的球分量

$\hat{}$ 当矩阵元式 (3.77) 中的偶极算符 $\mathbf{d}$ 作用于初态$|\nu_1 J_1 M_1\rangle$ 时，会产生一个角动量不同的态；一般来说，它是具有确定的 J 和 M 的各态的叠加。$\mathbf{d}$ 的矢量特性使我们能够确定这些量子数可能取值的范围，并在一定程度上确定所得线性组合的系数。为了

[8] https://farside.ph.utexas.edu/teaching/em/lectures/node95.html

ˆ 为了说明这一点，将矢量 $\mathbf{d}$ 从笛卡尔分量变换为所谓的球分量会很有帮助。

任意矢量**磁场**的此类分量的一般表达式按定义为

$$v_{\mu=1} = -\frac{v_x + iv_y}{\sqrt{2}} \quad , \quad v_{\mu=0} = v_z \quad , \quad v_{\mu=-1} = \frac{v_x - iv_y}{\sqrt{2}} = -v^*_{\mu=1} \tag{3.78}$$

球分量中向量的标量积表示为

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_{\mu=-1,0,1} (-1)^\mu a_\mu b_{-\mu} = \sum_{\mu=-1,0,1} a_\mu b^*_\mu \tag{3.79}$$

构成球分量组合的实用性，在球坐标[9]中尤其清晰可见

$$v_x = v \sin\theta_v \cos\phi_v \quad , \quad v_y = v \sin\theta_v \sin\phi_v \quad , \quad v_z = v \cos\theta_v \tag{3.80}$$

以便

$$v_0 = v\cos\theta_v \quad , \quad v_{\pm 1} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}} v \sin\theta_v e^{\pm i\phi_v} \quad \rightarrow \quad v_\mu = \sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, v\, Y_{1\mu}(\Omega_v) \quad \mu = 1, 0, -1 \tag{3.81}$$

强调矢量的三个分量在旋转下按照 $Y_{1\mu}$ 变换。在群论术语中，人们称矢量按照旋转群 $O(3)$ 的 $j = 1$ 表示进行变换。

ˆ 当然，这对电偶极矩的矢量$\mathbf{d}$ 也成立。现在让我们探讨这一认识所带来的结果。

偶极角动量选择定则——先看氢原子

让我们从氢原子中最简单的电偶极跃迁情形开始。在这个只有一个电子的简单系统中，偶极算符及其球分量为

$$\hat{\mathbf{d}} = e\mathbf{r} \quad \rightarrow \quad \hat{d}_\mu = e\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\, r\, Y_{1\mu}(\theta, \phi)$$

我们可以忽略自旋，考察氢原子轨道本征态之间的偶极跃迁

$$|n, l, m\rangle \rightarrow |n', l', m'\rangle$$

这些态的坐标表象具有熟悉的形式

$$\langle \mathbf{r}|n, l, m\rangle = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

在该表示中，电偶极算符作用于初态 $|n,\ l,\ m\rangle$ 得到 ˆ一个态 $d_\mu|n,\ l,\ m\rangle$ ，该态在坐标表象中为

$$\langle \mathbf{r}|\hat{d}_\mu|n, l, m\rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} e r R_{nl}(r) Y_{1\mu}(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{3.82}$$

[9]请注意，这里的角度下标 v 表示它们不一定与 t 的相同 he real space coordinate vector $\{x, y, z\}$.

让我们利用量子角动量代数中的直觉，将两个球谐函数 $Y_{1\mu}Y_{lm}$ 的乘积视为两个角动量 $\ell_1 = 1$ 和 $\ell_2 = l$ 的（量子）和的本征函数。我们知道，得到的角动量ℓ 可能取值为

$$l-1\ ,\ l\ ,\ l+1 \quad \text{with the projection}\ \ \mu+m$$

ˆ 继续基于这一理解，我们预计态 $d_\mu|n,l,m\rangle$ 是具有上述 ℓ 值及其投影的态的线性组-合。

ˆ 构成偶极矩阵元 $\langle n',l',m'|d_\mu|n,l,m\rangle$ 意味着将末态$|n',l',m'\rangle$ 投影到这个线性组合上。除非末态角动量 $l'm'$ 等于上述数值之一，否则所得重叠应为零，也就是说，必须满足熟知的角动量加法三角规则

$$|l-1| \le l' \le l+1\ \ ,\ \ m' = m+\mu \tag{3.83}$$

形式上，这些考量可通过利用已知的两个球谐函数乘积展开式得到支持和扩展：将 $Y_{1_1m_1}(\theta,\phi)Y_{l_2m_2}(\theta,\phi)$ 视为角度 θ,ϕ 的函数，并用完备集合 $\{Y_{LM}(\theta,\phi)\}$ 展开。

$$Y_{l_1m_1}(\theta,\phi)Y_{l_2m_2}(\theta,\phi) = \sum_{L=0}^{\infty}\sum_{M=-L}^{L} G^{Mm_1m_2}_{L\,l_1\,l_2}\, Y_{LM}(\theta,\phi) \tag{3.84}$$

其中，$G^{Mm_1m_2}_{L\,l_1\,l_2}$是所谓的盖恩特系数，与相应的克莱布什-戈丹（CG）系数成正比，参见文献[5], 第57页

$$G^{Mm_1m_2}_{L\,l_1\,l_2} = a(l_1,l_2,L)\langle LM|l_1m_1,l_2m_2\rangle \tag{3.85}$$

这里的比例因子 $a(l_1,\ l_2,\ L)$ 不依赖于投影量 $m_1,\ m_2,\ M$。CG 系数非零的条件是

$$|l_1-l_2| \le L \le l_1+l_2 \quad \text{and} \quad M = m_1+m_2$$

这对展开式（3.84）中的 L 求和施加了约束，并消去了关于 M 的求和。应用于我们的情况，即式（3.82）与乘积 $Y_{1\mu}Y_{lm}$ ，便可得到我们根据定性论证所猜测的结果，即规则（3.83）。这些规则称为电偶极角动量选择定则。换言之，它们表明只有角动量至多改变一个单位的跃迁才是允许的，即 $\Delta l = 0,\ \pm1$。下面我们还将通过考察宇称守恒的后果，完成对这些规则的讨论。

进一步注意到，高恩特系数对角动量投影量子数 M, m_1, m_2 的依赖仅通过 CG 系数体现。为了了解这对电偶极跃迁意味着什么，我们示意性地勾勒一下偶极矩阵元 $\langle n',l',m'|d_\mu|n,l,m\rangle$ 的计算过程。我们需要计算

$$\langle n',l',m'|\hat{d}_\mu|n,l,m\rangle = \int(\text{radial part})\int(\text{angular part}) \tag{3.86}$$

其中

$$\begin{aligned}\int(\text{radial part}) &= e\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\int_0^\infty r^2 dr R^*_{n'l'}(r) r R_{nl}(r)\\ \int(\text{angular part}) &= \int Y^*_{l'm'}(\theta,\phi)Y_{1\mu}(\theta,\phi)Y_{lm}(\theta,\phi)\ \sin\theta d\theta d\phi\end{aligned} \tag{3.87}$$

展开式 (3.84) 表明，角积分等于相应的高斯系数$G^{m'\mu m}_{l'\,1\,l}$。利用式 (3.85)，我们看到

$$\langle n',l',m'|\hat{d}_\mu|n,l,m\rangle = \langle lm,1\mu|l'm'\rangle\langle n'l'||\hat{d}||nl\rangle \tag{3.88}$$

ˆ 其中我们引入了通常的记号 $\langle n'l'||d||nl\rangle$ ，称为约化矩阵元，用于表示完整矩阵元中与 m,m' 以及 μ无关的部分。在当前情况下，它是(3.87)中的径向部分与关系式(3.85)中的因子 $a(l,1,l')$ 的乘积。

表达式(3.88)是一个更一般关系式的特殊情形，这一关系式被称为维格纳-埃卡特定理，将在下一节中讨论。它表明，偶极矩阵元对 $m,,m'$ 和 μ 的依赖完全由已知的（列表给出的）克莱布施-戈尔丹系数决定，参见参考文献[5]。

由此可知，如果对于给定的 nl 和 $n'l'$ 量子数，需要求出 ˆ 所有的 $\langle n',l',m'|d_\mu|n,l,m\rangle$ 矩阵元，那么只需确定其中一个即可，例如具有 $m=m'$， $\mu=0$ 的矩阵元。利用其值，可以计算约化矩阵元ˆ$\langle n'l'||d||nl\rangle$ ，然后通过关系式(3.88) 以及适当的克莱布施-戈尔丹系数，求出所有的 $(2l+1)\times 3$ 。

我们还注意到，对于给定的初态和末态，选择定则式 (3.83) 表明矢量[10] $\langle n',l',m'|$ ˆ $d_\mu|n,\ l,\ m\rangle$ 仅有一个球分量不为零，即 $\mu=m'-m$ 对应的分量。回顾一下，在当前语境中，这个矢量就是电偶极发射率表达式 (3.74) 中记作 ˆ$\langle 0|\mathbf{d}|n\rangle$ 的量。由此我们得出结论，该表达式中的标量积 $\langle 0|\mathbf{d}|n\rangle\cdot\boldsymbol{\lambda}$ 相应地只有一项，即 ˆ$\langle 0|d_\mu|n\rangle\lambda^*_\mu$ 与该 μ 的标量积，而角分布由 $|\lambda_\mu|^2$ 的角依赖关系给出。

我们以一个例子来说明：考虑 $m=m'$ˆ 相同的态之间的跃迁，此时唯一非零的矩阵元为 $\langle n',l',m|d_0|n,l,m\rangle$。按照方程 (3.74) 的记号，这就是 $\langle 0|d_z|n\rangle$ ，相应地，发射光子的角分布为 λ_z^2 ；对于 $\boldsymbol{\lambda}_1$ 取值为 (3.63) 的情况，该角分布由方程 (3.75) 给出，而当 $\boldsymbol{\lambda}_2$时为零。更多例子和细节将在辅导课和作业中讨论。

偶极宇称选择定则——氢原子（第一部分）

现在让我们考察宇称守恒对从给定初态出发的电偶极跃迁可能的末态施加的限制。我们首先注意到，在宇称变换 $\mathbf{r}\to-\mathbf{r}$ 下，也就是说，在镜面反射下

$$x,y,z \quad\to\quad -x,-y,-z \tag{3.89}$$

[10]对于偶极算符 ˆd 的复数矩阵元，我们采用“矢量”这一术语，简要介绍。我们感兴趣的是它三个分量的相对大小 ity

ˆ ˆ 的坐标系中，电偶极算符变号 $\mathbf{d} \rightarrow -\mathbf{d}$。让我们在积分式 (3.86) 中进行这一坐标变换。在球坐标中，这一变换是

$$r, \theta, \phi \quad \rightarrow \quad r, \pi - \theta, \phi + \pi$$

这样径向部分保持不变，而球谐函数则按[11]变换

$$Y_{lm}(\theta, \phi) \rightarrow Y_{lm}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\theta, \phi) \tag{3.90}$$

结果是，式 (3.86) 右边的整个积分等于其自身乘以 $-(-1)^l(-1)^{l'}$。这当然意味着它为零，与此同时，矩阵元 $\langle n', l', m' | d_\mu | n, l, m \rangle$ 也为零，除非

$$(-1)^l(-1)^{l'} = -1 \tag{3.91}$$

即 l' 和 l 具有相反的宇称（即奇与偶，或偶与奇）。这称为宇称选择定则。结合角动量，我们发现电偶极选择定则可以表述为

$$l' = l \pm 1 \tag{3.92}$$

在图 3.4 中，我们展示了电偶极跃迁的示例

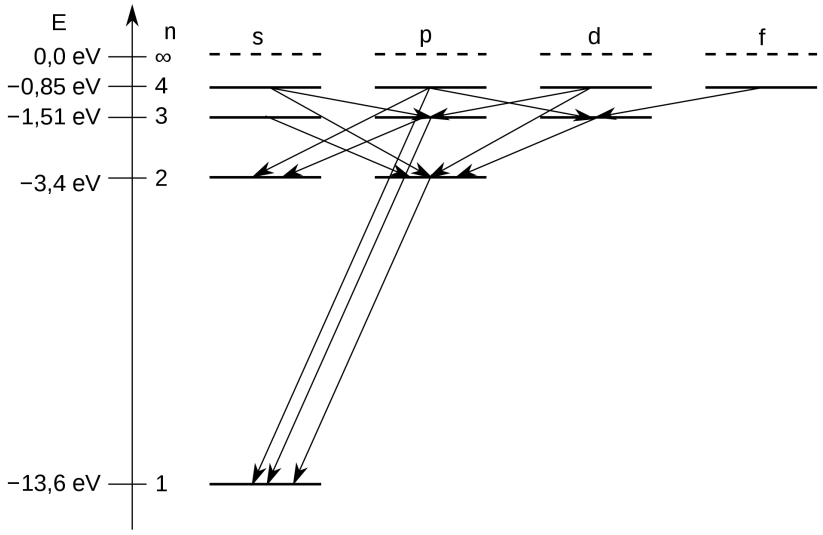


图3.4：氢原子中的辐射跃迁。根据角动量和宇称选择定则的综合作用，只有相邻角动量列之间的偶极跃迁才被允许 $\Delta l = \pm 1$

[11]要看出这一点，先从简单的 $Y_{ll} \sim \sin^l \theta e^{il\phi}$ 开始，然后使用 $Y_{lm} \sim \hat{L}_- Y_{lm+1}$，再结合 $\hat{L}_-$ 在 $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ 下为偶函数，证明所有 Y_{lm} 都按 Y_{ll}变换。

角动量选择定则——一般观点。维格纳–埃卡特定理

在本节中，我们将把关于角动量选择定则的讨论从最简单的情形——氢原子中的辐射跃迁——推广并形式化到一般情形，即哈密顿量在旋转下保持不变的任意物理系统（例如多电子原子、原子核、分子）。我们将证明，主要关系式 Eq.(3.88) 对这类系统成立，其所有推论也同样成立。

旋转不变哈密顿量系统中的本征态具有一般结构 $|\nu JM\rangle$，参见式 (3.77)，其中 ν 表示指定该态所需的所有量子数，但角动量 J 及其投影 M除外。这种结构意味着，在 O 旋转下，这些态按如下方式变换

$$\begin{aligned}\hat{U}(\alpha\mathbf{n})|\nu JM\rangle \equiv e^{i\alpha\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}}|\nu JM\rangle = \sum_{M'=-J}^{J} D^J_{MM'}(\alpha\mathbf{n})|\nu JM'\rangle \\ D^J_{MM'}(\alpha\mathbf{n}) = \langle\nu JM'|e^{i\alpha\mathbf{n}\cdot\hat{\mathbf{J}}}|\nu JM\rangle\end{aligned} \tag{3.93}$$

i也就是说，具有不同 J 的态多重态不会相互混合。这里我们用 α 表示角动量 le 旋转，并用单位矢量 $\mathbf{n}$ 表示旋转轴的方向。

在讨论氢原子时，我们已经看到偶极算符的矢量特性，即它在旋转下的行为，起着非常重要的作用。现在我们将对这一讨论加以推广。回顾一下，在任意幺正变换下，若波函数按 $|\psi\rangle \to U|\psi\rangle$ 变换，则算符按 $U\hat{}fU^{-1}$ 变换。通过考察作用于态 f 后得到的态如何变换，可以直接看出这一点

$$\hat{f}|\psi\rangle \to U\hat{f}|\psi\rangle = U\hat{f}U^{-1}U|\psi\rangle$$

这表明， $U\hat{}fU^{-1}$作用于变换后的波函数 $U|\psi\rangle$，确实会产生正确的变换结果。

ˆ 基于这一认识，人们将球张量算符 $T_{j\mu}$ 定义为一组$2j+1$ 算符，它们在 O(3)旋转下彼此变换

$$\hat{U}^{-1}(\alpha\mathbf{n})\hat{T}_{j\mu}\hat{U}(\alpha\mathbf{n}) = \sum_{\mu'} D^j_{\mu\mu'}(\alpha\mathbf{n})\hat{T}_{j\mu'}$$

ˆ 显然，电偶极算符 d_μ 是秩为 $j=1$的球张量 $T_{j\mu}$ 的一个例子。在下一节中，我们会遇到电多极和磁多极算符的例子，它们对应于秩更高的球张量 $T_{j\mu}$ j。在物理学的其他领域中，也会遇到类似的物理算符按球张量算符 $T_{j\mu}$ 展开的情形，例如在原子与原子核壳层模型中。

为了理解球张量算符的性质，让我们考察当 $T_{j\mu}$ 作用于 $|\nu JM\rangle$ 时得到的ˆ态在旋转下的行为

$$U\hat{T}_{j\mu}|\nu JM\rangle = U\hat{T}_{j\mu}U^{-1}U|\nu JM\rangle = \sum_{\mu'}\sum_{M'} D^j_{\mu\mu'}D^J_{MM'}\hat{T}_{j\mu'}|\nu JM'\rangle$$

这里出现的两个 D 矩阵的乘积，与旋转具有角动量 j，μ和 J，M的态的直积所得的结果相同。这表明，$\hat{}\ T_{j\mu}$ 作用于 $|\nu JM\rangle$ 会生成一个总角动量等于（在量子力学意义下）j，μ与 J，M之和的态。这意味着在矩阵中

$$\langle \nu' J' M' | \hat{T}_{j\mu} | \nu J M \rangle \tag{3.94}$$

只有满足角动量求和的量子力学规则的矩阵元

$$|J - j| \leq J' \leq J_1 + j \ \ , \ \ M' = M + m \tag{3.95}$$

才可能非零。

这些直观预期可由经典的 Wigner–Eckart 定理得到严格证明。该定理将等式 Eq.(3.88)推广至矩阵元 (3.94)，也就是推广至具有球对称性的任意物理系统中最一般的球张量算符和本征态

$$\langle \nu' J' M' | \hat{T}_{j\mu} | \nu J M \rangle = \langle J' M' | j\mu, JM \rangle \langle \nu' J' || \hat{T}_j || \nu J \rangle \tag{3.96}$$

这里 $\langle J'M'|jm, JM\rangle$ 是克莱布施–戈尔丹系数，而记号 $\langle \nu' J' ||\hat{}\, T_j || \nu J\rangle$所称的约化矩阵元表示完整矩阵元中与投影 M, M' 和 m 无关的部分。这种依赖关系完全包含在克莱布施–戈尔丹系数中，它们也承载着关于角动量选择定则的信息，见 Eq.(3.95)。

与氢原子的情形一样，约化矩阵元表示原矩阵元中与取向无关的部分，见式 (3.94)。要找到它们，只需计算一组特定 M，m，$M' = M + m$取值下的 $\langle \nu' J' M' | T_{jm} | \nu J M \rangle$，再将结果除以相应的克莱布施-戈尔丹系数。对于固定的 νJ 和 $\nu' J'$，只需进行一次计算，就能通过（已知且列表给出的）克莱布施-戈尔丹系数，确定关系式 (3.96) 左侧所有 $(2J+1)\times(2j+1)$ 矩阵元。

最后请注意，式 (3.96) 的形式证明可在许多参考资料中找到，例如参考文献 [7] 第 252 页。

旁注——宇称对称性回顾

在讨论氢原子的宇称选择定则时，它们看起来像是一个特殊情形，取决于球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\ \phi)$ 在角度变换（式（3.90））下的行为。现在我们希望将这些考量推广到更复杂系统中的光子辐射。

宇称变换是一种坐标系的反演变换，其中所有轴的符号都发生改变，例如式（3.89）。请注意，在二维中，这一变换可以通过将轴旋转 π 来实现。三维中则并非如此，因为坐标系会从右手系变为左手系。这就是宇称变换能够探测三维物理系统中其他特性的原因。

请注意，从技术上讲，坐标反演可以通过先关于任意平面反射，再绕垂直于该平面的轴进行 π 旋转来实现。我们还注意到，在坐标反演下，向量的符号预期会改变，参见图 3.5。然而，作为

下面我们将看到，存在一类在宇称变换下符号不变的向量。这类向量称为轴矢量或赝矢量，以区别于也称为极矢量的真正向量。

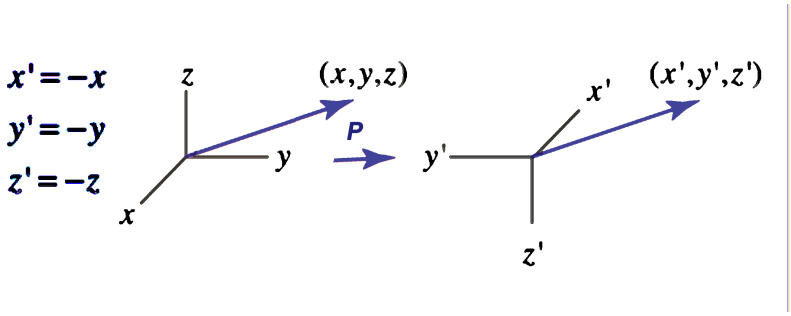


图 3.5：宇称变换——在反演后的坐标轴系中观察到相同的物理现象（例如相同的粒子位置、动量等），$\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$、$\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$ 等

自然界在宇称变换下是否保持不变？历史上，这是一个非常重要的问题。简而言之，通过引力、电磁相互作用和强相互作用相互作用的物理系统保持不变，但弱相互作用会破坏这种不变性。深入探讨这一论断的细节超出了本讲义的范围，参见参考文献 [8]。我们还是回到所研究的框架，从式 (3.1) 给出的哈密顿量入手，考察这一问题。我们注意到，如果作如下变换，该哈密顿量仍保持不变

$$\mathbf{r}_a \to -\mathbf{r}_a, \quad , \quad \mathbf{p}_a \to -\mathbf{p}_a \quad \mathbf{A}(\mathbf{r}) \to -\mathbf{A}(-\mathbf{r}) \quad , \quad \mathbf{E}(\mathbf{r}) \to -\mathbf{E}(-\mathbf{r}) \tag{3.97}$$

ˆ，显然这就是宇称变换。非相对论物质-电磁场哈密顿量的其余部分 H_{I3}，

式 (3.10) 的推广在附录 3.3.2 中讨论，其中证明了磁场$\mathbf{B}(\mathbf{r})$以及粒子的角动量$\mathbf{l}_a$ 和自旋$\mathbf{s}_a$ 都是轴矢量，即它们在坐标反演下不会改变。

现在让我们来考察哈密顿量在宇称变换下的不变性意味着什么。为了实现我们的目标，只需将讨论限于式（3.5）中的物质哈密顿量部分 ˆ H_{matter} 。我们通过定义宇称算符对物质粒子波函数的作用来引入该算符

$$\hat{P}\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1; \mathbf{r}_2, \sigma_2; ...; \mathbf{r}_N, \sigma_N) = \psi(-\mathbf{r}_1, \sigma_1; -\mathbf{r}_2, \sigma_2; ...; -\mathbf{r}_N, \sigma_N) \tag{3.98}$$

或者更正式地说

$$\langle \mathbf{r}_1, \sigma_1; ...; \mathbf{r}_N, \sigma_N | \hat{P} | \psi \rangle = \langle -\mathbf{r}_1, \sigma_1; ...; -\mathbf{r}_N, \sigma_N | \psi \rangle$$

这里的 σ 表示粒子的自旋变量（例如，对于自旋1/2，它们是 $\sigma = \pm 1/2$），我们使用了自旋的轴矢量性质。

显然

$$\hat{P}^2 \equiv \hat{P}\hat{P} = 1$$

这意味着

$$\hat{P} = \hat{P}^{-1} \tag{3.99}$$

与对称性通常的情况一样，物质哈密顿量在宇称变换下的不变性意味着，对任意 $|\psi\rangle$ 作用 $\hat{}H$ 所得的结果，与对变换后的 $|\psi\rangle$作用$\hat{}H$ 所得的结果相同。

$$\hat{P}\left(\hat{H}_{matter}|\psi\rangle\right) = \hat{H}_{matter}\hat{P}|\psi\rangle \tag{3.100}$$

形式上，这意味着

$$\hat{P}\hat{H}_{matter} = \hat{H}_{matter}\hat{P} \quad \rightarrow \quad [\hat{H}_{matter}\ ,\ \hat{P}] = 0 \tag{3.101}$$

或使用（3.99）

$$\hat{P}\hat{H}_{matter}\hat{P} = \hat{H}_{matter}$$

$\hat{}$ 此类哈密顿量的本征态都是或可以选为 P 的本征态。事实上，$\hat{}$ 作用于 P

$$\hat{H}_{matter}|n\rangle = E_n|n\rangle \ \rightarrow \ \hat{P}\hat{H}_{matter}|n\rangle = E_n\hat{P}|n\rangle \ \rightarrow \ \hat{H}_{matter}\hat{P}|n\rangle = E_n\hat{P}|n\rangle$$

我们看到，如果 $|n\rangle$ 是$\hat{}$ H_{matter} 的本征态，那么$\hat{}$ $P|n\rangle$ 也是本征态，且本征能量相同，为 E_n。$\hat{}$ 这意味着有两种可能——要么 $P|n\rangle$ 与 $|n\rangle$成比例。

$$\hat{P}|n\rangle = \text{const}|n\rangle$$

或者它是一个不同的态。在前一种情况下，我们发现

$$\hat{P}^2|n\rangle = \text{const}\hat{P}|n\rangle = \text{const}^2|n\rangle$$

并且由于$\hat{}P^2 = 1$ 具有 $\text{const}^2 = 1 \quad \rightarrow \text{const} = \pm 1$。

W$\hat{P}|n\rangle$ 是一个不同于 $|n\rangle$ 的态，我们存在简并，因此可以将这些态进行线性组合。

$$|n\rangle_\pm \equiv \frac{1}{2}(1 \pm \hat{P})|n\rangle$$

$\hat{}$， P 的本征态

$$\hat{P}|n\rangle_\pm = \hat{P}\frac{1}{2}(1 \pm \hat{P})|n\rangle = \frac{1}{2}(\hat{P} \pm \hat{P}^2)|n\rangle = \pm\frac{1}{2}(1 \pm \hat{P})|n\rangle = \pm|n\rangle_\pm \tag{3.102}$$

与非简并情形完全相同。

宇称选择定则——总体概述

现在我们想了解宇称对称性对表达式 (3.74) 中偶极矩阵元施加了哪些限制。按照上一节中的讨论，我们可以假设态 $|0|\rangle$ and $|n\rangle$ 具有定义良好的宇称，分别记为 P_f and P_i。于是利用

$$\hat{P}^2 = 1 \quad \text{and} \quad \hat{P}\hat{\mathbf{d}}|n\rangle = -\hat{\mathbf{d}}\hat{P}|n\rangle$$

我们可以写成

$$\langle 0|\hat{\mathbf{d}}|n\rangle = \langle 0|\hat{P}^2\hat{\mathbf{d}}|n\rangle = \left(\langle 0|\hat{P}\right)\left(\hat{P}\hat{\mathbf{d}}|n\rangle\right) = -(-1)^{P_f}(-1)^{P_i}\langle 0|\hat{\mathbf{d}}|n\rangle \tag{3.103}$$

这意味着必须具有

$$(-1)^{P_f}(-1)^{P_i} = -1 \tag{3.104}$$

为了使偶极矩阵元 $\langle 0|\mathbf{d}|n\rangle$ 不为零。

跃迁初态和末态宇称的上述关系式称为偶极宇称选择定则。它与偶极角动量选择定则共同对能够通过非零辐射偶极跃迁“连接”的物质态对施加了相当严格的限制。

为本节作结，我们注意到，如果将偶极矩阵元明确写成积分形式，（3.103）中的形式运算实际上呈现出一种非常简单的形式

$$\langle 0|\hat{\mathbf{d}}|n\rangle = \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N} \int \psi_0^*(\mathbf{r}_1\sigma_1,\ldots,\mathbf{r}_n\sigma_n)\left[\sum_{a=1}^{N} q_a \mathbf{r}_a\right]\psi_n(\mathbf{r}_1\sigma_1,\ldots,\mathbf{r}_n\sigma_n)\, d^3r_1\ldots d^3r_n$$

其中，σ 表示自旋变量。改变积分变量 $\mathbf{r}_a = -\mathbf{r}'_a$ 并利用

$$\psi_n(-\mathbf{r}'_1\sigma_1,\ldots,-\mathbf{r}'_n\sigma_n) = (-1)^{P_n}\psi_n(\mathbf{r}'_1\sigma_1,\ldots,\mathbf{r}'_n\sigma_n)$$

重现了式（3.103）的形式论证。

在接下来的章节中，上述讨论将有助于推导长波长展开式 Eq.(3.70) 中高阶项的宇称选择定则。

3.2.6 “禁戒”（高阶多极）跃迁

当一对态 $|n_i\rangle$ 和 $|n_f\rangle$ 之间的偶极矩阵元因选择定则而为零时，传统上称这些态之间的辐射跃迁为禁戒。但当然，跃迁仍有可能通过 $\langle 0|\mathbf{jk}\cdot\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|n\rangle$ 的长波长展开式 (3.70) 中的高阶项发生。

本节考察该展开中偶极项之后的下一阶项。该项为

$$-i\langle 0|\int d^3r\,(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})(\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\cdot\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha})|n\rangle \tag{3.105}$$

将被积函数作如下变换很有用（省略 $\boldsymbol{\lambda}$ 的下标，并采用求和约定）

$$(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})(\hat{\mathbf{j}}\cdot\boldsymbol{\lambda}) = k_l r_l\,\hat{j}_s\lambda_s = \frac{1}{2}k_l\lambda_s[(r_l\hat{j}_s + r_s\hat{j}_l) + (r_l\hat{j}_s - r_s\hat{j}_l)] \tag{3.106}$$

我们将分别考察这一表达式的两个部分。

电四极跃迁

我们首先考虑式 (3.106) 中的对称项。该项对

$$-\frac{i}{2}k_l\lambda_s\int d^3r\langle 0|r_l\hat{j}_s(\mathbf{r}) + r_s\hat{j}_l(\mathbf{r})|n\rangle \tag{3.107}$$

跃迁矩阵元 (3.105) 有贡献。我们将利用算符 $\hat{\rho}$ 和 $\mathbf{j}$ 的连续性方程来变换这一表达式

$$\frac{\partial\hat{\rho}(\mathbf{r},t)}{\partial t}=-\nabla\cdot\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r},t)\equiv-\frac{\partial\hat{j}_m}{\partial r_m}\quad\text{(with summation over repeated indices)}$$

让我们考虑

$$\int d^3r\,r_s r_l\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}=-\int d^3r\,r_s r_l\frac{\partial\hat{j}_m}{\partial r_m}=-\int d^3r[\delta_{ms}r_l+r_s\delta_{ml}]j_m=\int d^3r[r_l j_s+r_s j_l]$$

其中我们使用了连续性方程，随后进行了分部积分。由此得到的关系式可以将对称项（3.107）的矩阵元表示为

$$-\frac{i}{2}k_l\lambda_s\int d^3r\,r_s r_l\langle 0|\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}|n\rangle$$

利用海森堡方程，对于 $\hat{\rho}$，我们可以写出

$$\langle 0|\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}|n\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle 0|[\rho,H_{matter}]|n\rangle=\frac{E_n-E_0}{i\hbar}\langle 0|\rho|n\rangle=-i\omega\langle 0|\rho|n\rangle$$

由此，对称项变为

$$-\frac{\omega}{2}k_l\lambda_s\int d^3r\,r_l r_s\langle 0|\hat{\rho}|n\rangle \tag{3.108}$$

利用 $\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\lambda}\equiv k_l\lambda_l=0$ 可写为

$$-\frac{\omega}{2}k_l\lambda_s\int d^3r\,(r_l r_s-\frac{1}{3}\delta_{ls}r^2)\langle 0|\hat{\rho}|n\rangle=-\frac{\omega}{6}k_l\lambda_s\langle 0|\hat{Q}_{ls}|n\rangle \tag{3.109}$$

其中 Q_{ls} 是辐射发射物质的电四极张量算符的分量。

$$\hat{Q}_{ls}=\int d^3r\,(3r_l r_s-\delta_{ls}r^2)\hat{\rho}(\mathbf{r})=\sum_{a=1}^{N}q_a(3r_{a,l}r_{a,s}-\delta_{ls}r_a^2) \tag{3.110}$$

发射光子的参数通过式(3.109)中的因子 $(\omega/6)k_l\lambda_s$ 进入，而物质由电四极矩算符表示。通过这一项产生的辐射跃迁称为电四极跃迁。

电四极矩是一个 $\ell=2$ 对象。选择定则

电四极矩是一个对称无迹张量。这意味着它有 5 个独立分量，在旋转下彼此变换。这类似于二阶球谐函数的 5 个分量 $Y_{2\mu}$，或者用更正式的语言来说，是旋转群的 $\ell=2$ 表示（多重态）的 5 个分量。

要看出这个关系式，回到式 (3.108)，将乘积 $r_l r_s$ 写成球分量

$$r_m r_{m'} = \frac{4\pi}{3} r^2 Y_{1,m}(\Omega) Y_{1,m'}(\Omega) \text{ with } m, m' = -1, 0, 1$$

并使用关系式 Eqs. (3.84,3.85) 处理 $l_1 = l_2 = 1$

$$Y_{1,m}(\Omega) Y_{1,m'}(\Omega) = \sum_{l=0,1,2} a(1,1,l) \langle l\mu | 1, m; 1, m' \rangle Y_{l\mu}(\Omega) \ , \ \mu = m + m'$$

在这种情况下цстазаара

$$a(1,1,l) = \frac{3}{\sqrt{4\pi(2l+1)}} \langle l0 | 1, 0; 1, 0 \rangle$$

这里，总和中 $l = 0, 1, 2$ 的允许取值对应于两个单位角动量的相加，并由克莱布施-戈尔丹系数形式上决定。总和中的 $l = 1$ 项消失，因为 $\langle 10 | 1, 0; \ \mathbf{1}, 0 \rangle = 0$，这反映了两个相同矢量 Y_{1m}的反对称（矢量）积为零，参见文献 [5]。在 $l = 0$ 项（标量积）中，相应的克莱布施-戈尔丹系数 $\langle 00 | 1, 0; \ \mathbf{1}, 0 \rangle \sim \delta_{m,-m'}$，并且由于 $r_m r_{m'}$ 在写成球分量形式时以如下形式进入公式 (3.108)

$$\sum_{m,m'=-1,0,1} k_m^* \lambda_{m'}^* \, r_m r_{m'}$$

它因正交性 $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\lambda} = 0$ 而消失（与前面类似的项一样）。

因此我们只剩下 $l = 2$ 项，这表明在球分量中，四极矩的笛卡尔张量变成该张量的球表示的五个分量（的线性组合）[12]

$$\hat{Q}_{2\mu} = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \int r^2 Y_{2\mu}(\theta, \phi) \hat{\rho}(\mathbf{r}) \, d^3 r = \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \sum_{a=1}^{N} q_a r_a^2 Y_{2\mu}(\theta_a, \phi_a) \tag{3.111}$$

综上所述，并使用 $\langle 20 | 1, 0; \ \mathbf{1}, 0 \rangle = \sqrt{2/3}$ 我们得到式 (3.108) 的结果。

$$\begin{aligned} -\frac{\omega}{2} k_l \lambda_s \int d^3 r \, r_l r_s \langle 0 | \hat{\rho} | n \rangle = \\ = -\frac{\omega}{\sqrt{6}} \sum_{\mu} \Phi_\mu(\Omega_k, \boldsymbol{\lambda}) \langle 0 | \hat{Q}_{2\mu} | n \rangle \end{aligned} \tag{3.112}$$

其中我们记为

$$\begin{aligned} \Phi_\mu(\Omega_k, \boldsymbol{\lambda}) = \sum_{m,m'=-1,0,1} \langle 2\mu | 1, m; 1, m' \rangle k_m^* \lambda_{m'}^* = \\ = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{m,m'=-1,0,1} \langle 2\mu | 1, m; 1, m' \rangle \, k \, Y_{1\mu}^*(\Omega_k) \lambda_{m'}^* \end{aligned} \tag{3.113}$$

[12]球分量 $Q_{2\mu}$ 与笛卡尔分量 Q_{ls}之间的显式关系见式 (3.110)：$Q_{20} = -(1/2) Q_{zz}$ ， $Q_{2, \pm 1} = \pm(1/\sqrt{6})(Q_{xz} \pm i Q_{yz})$ $Q_{2, \pm 2} = -(1/2\sqrt{6})(Q_{xx} - Q_{yy} + 2i Q_{xy})$

上述表达式有助于确定具有确定角动量值本征态的物理系统中电四极跃迁的选择定则。

$$\langle 0|\hat{Q}_{2\mu}|n\rangle \to \langle \nu' J' M'|\hat{Q}_{2\mu}|\nu J M\rangle \tag{3.114}$$

利用Wigner–Eckart 定理（式（3.96）），对于电四极矩算符，有

$$\langle \nu' J' M'|\hat{Q}_{2\mu}|\nu J M\rangle = \langle J' M'|2\mu, JM\rangle\langle \nu' J'||\hat{Q}_2||\nu J\rangle$$

w这表明，使用此算符进行跃迁时的角动量选择定则
或 i
.e. 对于电四极跃迁而言是

$$J' = |J-2|, ..., J+2 \quad , \quad M' = M+\mu \tag{3.115}$$

对 ˆ Q_{ml} 进行宇称变换 $\mathbf{r}_a \to -\mathbf{r}_a$, $a = 1$, ..., N，由式 (3.110) 可知，该式不变。因此，电四极跃迁的宇称选择定则为

$$P_f = P_i \tag{3.116}$$

这一条与偶极选择定则（式（3.104））“相反”的规则，是下文所解释的电四极跃迁和磁偶极跃迁成为偶极选择定则所禁止的跃迁的主要机制的原因。由于与长波长展开（式（3.70））中的高阶项有关，这类跃迁在小 ka 参数下的跃迁率，比允许的偶极跃迁小一个数量级。

当然，这适用于满足角动量选择定则（式 (3.115)）的能级。角动量差异更大的能级之间的跃迁由 LWA展开中的更高阶项控制，而这些项相应地更弱；参见下文的讨论以及文献 [3]。在这方面，当一个物质系统具有一个低能级的高角动量态时，会出现一种有趣的情况。如果该态以下的所有能级都具有较低的角动量，那么该态将具有很长的辐射寿命。这类态称为同质异能态；如果非辐射跃迁的概率（例如气体中的碰撞或固体中的声子发射）也很小，则它们是亚稳态。

电四极辐射的角分布

现在让我们简要讨论在关系式 (3.114)有效这一非常常见的情况下，电四极跃迁中发射的光子的角分布。由于在这种情况下μ 是固定的， $\mu = M' - M$ 求和中将只剩下方程 (3.112) 中的一项。角分布显然由相应的函数 $\Phi_\mu(\Omega_k, \boldsymbol{\lambda})$ 给出，其中对偏振矢量角度的依赖性例如由方程 (3.63) 中的关系式给出。后者的球分量为

$$(\boldsymbol{\lambda}_1)_{\mu=\pm1} = \mp\frac{\cos\theta e^{\pm i\phi}}{\sqrt{2}} \quad , \quad (\boldsymbol{\lambda}_1)_{\mu=0} = -\sin\theta$$
$$(\boldsymbol{\lambda}_2)_{\mu=\pm1} = -\frac{ie^{\pm i\phi}}{\sqrt{2}} \quad , \quad (\boldsymbol{\lambda}_2)_{\mu=0} = 0$$

例如，让我们考虑带有 $M = M'$, $\mu = 0$ 的跃迁。使用

$$\langle 2\mu|1, m; 1, -m\rangle = (-1)^{1-m}\frac{3m^2-1}{\sqrt{6}}$$

可以发现，(??)中的和对于 $\boldsymbol{\lambda}_1$ 光子偏振为 $-3\sin\theta\cos\,\theta$，而对于 $\boldsymbol{\lambda}_2$则消失。因此，电四极跃迁中相应的角分布是

$$\frac{dN_{\mathbf{k}1}}{d\gamma} \sim \sin^2\theta\cos^2\theta \quad , \quad \frac{dN_{\mathbf{k}2}}{d\gamma} = 0 \tag{3.117}$$

参见图 3.6。

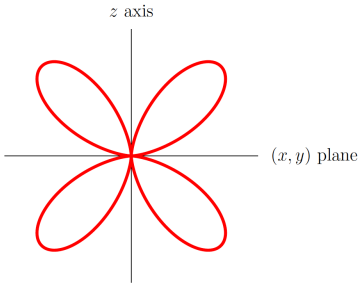


图3.6：具有 $\boldsymbol{\lambda}_1$ 偏振的电四极辐射的角分布，参见式(3.117)，以与图3.3类似的方式绘制。注意，方位角 ϕ 的独立性意味着，该图的三维版本可通过绕z轴旋转该图获得。

磁偶极跃迁

(3.106) 的反对称部分可方便地通过向量积表示。

$$\frac{1}{2}k_l\lambda_m(r_l\hat{j}_m - r_m\hat{j}_l) = \frac{1}{2}k_l\lambda_m\epsilon_{lmn}(\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{j}})_n = \frac{1}{2}(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda})\cdot(\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{j}}) \tag{3.118}$$

它将在式（3.105）中贡献为

$$-i(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha})\cdot\langle 0|\frac{1}{2}\int d^3r(\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}))|n\rangle \tag{3.119}$$

发射光子参数通过因子（$\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}\alpha$）引入，而物质由物质组成粒子的轨道运动所产生的电流的磁偶极矩表-示,

$$\frac{1}{2}\int d^3r(\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})) = \frac{1}{2}\sum_{a=1}^{N}\frac{q_a}{2m_a}[-\hat{\mathbf{p}}_a\times\mathbf{r}_a + \mathbf{r}_a\times\hat{\mathbf{p}}_a] = \sum_{a=1}^{N}\frac{q_a}{2m_a}(\mathbf{r}_a\times\hat{\mathbf{p}}_a).$$

此时，重要的是回顾我们此前尚未讨论过的相互作用项 H_{I3}，即式（3.23）。这一项也取决于物质组成粒子的磁矩。不过，这些磁矩并非由轨道运动产生，而是源于它们的内禀运动，即自旋。

.H_{I3}的跃迁矩阵元的推导很简单，只需沿用导出 $\langle f|H_{I1}|i\rangle$ 表达式（3.58）的相同步骤即可，结果为

$$\langle f|\hat{H}_{I3}|i\rangle = -i\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)^{1/2}(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha})\cdot\langle 0|\hat{\mathbf{m}}_{-\mathbf{k}}|n\rangle \tag{3.120}$$

其中

$$\hat{\mathbf{m}}_{\mathbf{k}} = \int \hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,d^3r = \sum_{a=1}^{N}\hat{\boldsymbol{\mu}}_a e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_a}$$

在长波长极限下

$$\langle 0|\hat{\mathbf{m}}_{-\mathbf{k}}|n\rangle \approx \langle 0|\hat{\mathbf{m}}_0|n\rangle = \langle 0|\int d^3\mathbf{r}\,\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\,|n\rangle = \langle 0|\sum_{a=1}^{N}\hat{\boldsymbol{\mu}}_a|n\rangle$$

考虑到这一项，表达式（3.119）变为

$$\begin{gathered}-i(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha})\cdot\langle 0|\hat{\mathbf{M}}|n\rangle\ ,\\ \text{with}\\ \hat{\mathbf{M}} = \int d^3r\left[\frac{1}{2}\left(\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\right)+\hat{\mathbf{m}}(\mathbf{r})\right] = \sum_{a=1}^{N}\left[\frac{q_a}{2m_a}(\mathbf{r}_a\times\hat{\mathbf{p}}_a)+\hat{\boldsymbol{\mu}}_a\right]\end{gathered} \tag{3.121}$$

由该项产生的辐射跃迁称为 磁偶极跃迁。

原子中的电子具有相同的荷质比 e/m ，因此该表达式的轨道部分简化为

$$\frac{e}{2m}\sum_{a=1}^{N}(\mathbf{r}_a\times\hat{\mathbf{p}}_a) = \frac{e}{2m}\hat{\mathbf{L}} \tag{3.122}$$

而自旋部分

$$\sum_{a=1}^{N}\hat{\boldsymbol{\mu}}_a = g\frac{e}{2m}\sum_{a=1}^{N}\hat{\mathbf{s}}_a = g\frac{e}{2m}\hat{\mathbf{S}} \tag{3.123}$$

其中 $\mathbf{L}$ 和$\mathbf{S}$ 分别是辐射物质系统的总轨道角动量和自旋。在自旋部分的表达式（式 (3.123)）中，我们使用旋磁比 $g(e/2m)$ 将内禀磁矩与自旋联系起来。部分 $e/2m$ 表示经典值，而 g ——称为 g因子——是用于说明偏离经典 $g=1$ 值的无量纲量。自旋1/2粒子的狄拉克相对论方程预言值为 $g=2$ ，而场论修正会将其略微改变为 $g = 2($ $1+\alpha/2\pi+\cdots)\simeq 2.002319...$，其中 $\alpha = 1/137$。

因此，电子的表达式 (3.121) 为

$$-\frac{ie}{2m}(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha})\cdot\langle 0|\hat{\mathbf{L}}+g\hat{\mathbf{S}}|n\rangle \tag{3.124}$$

ˆ ˆ ˆ ˆ 也就是说，它正比于电子角动量和自旋的组合 $\mathbf{L}+g\mathbf{S}\ \approx\mathbf{L}+2\mathbf{S}$ 的矩阵元。

磁偶极跃迁的选择定则和角分布

现在让我们聚焦于具有确定角动量值本征态的发射系统中的电偶极跃迁和四极跃迁。

$$\langle 0|\hat{\mathbf{M}}|n\rangle \to \langle \nu', J', M'|\hat{M}_\mu|\nu, J, M\rangle \quad , \quad \mu=-1,0,1 \tag{3.125}$$

ˆ 其中我们还引入了矢量 $\mathbf{M}$ 的球分量。角动量选择定则显然

$$J'=|J-1|,...,J+1 \quad , \quad M'=M+\mu \tag{3.126}$$

与电偶极情形相同。

然而，宇称选择定则有所不同。事实上，磁偶极是一个赝矢量，因为它在宇称变换 $\mathbf{r}\ \to-\mathbf{r}$,$\mathbf{p}\ \to-\mathbf{p}$下不发生改变。因此，跃迁过程中宇称不会改变，即磁偶极 宇称选择定则为

$$P_f=P_i$$

我们还要注意以下几点。可以将式（3.124）中的算符 ˆ$\mathbf{L}+g$ˆ$\mathbf{S}$ 改写为 ˆ ˆ ˆ ˆ ˆ ˆ$\mathbf{L}\ +\mathbf{S}\ +(g-1)\mathbf{S}\ =\mathbf{J}\ +(g-1)\mathbf{S}$ ，其中$\mathbf{J}$ 是总角动量。对于本征态如式（3.125）的发射系统，算符$\mathbf{J}$ 不能引起跃迁，因此磁偶极发射必然通过“自旋翻转”进行，即（用通常的语言来说）通过自旋投影的改变 S_z进行。这反过来意味着，在式（3.125）的本征态中，自旋不可能是守恒量。这表明，物质哈密顿量中必然存在发射系统的自旋轨道相互作用。因此，磁偶极发射就是这种相互作用的度量。

最后，我们讨论磁偶极跃迁所发射光子的角分布。这由式（3.121）中向量（$\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}_\alpha$）各分量的角依赖性决定，这些分量由矩阵元向量 $\langle 0|$ ˆ$\mathbf{M}|n\rangle$加权。注意到我们在式（3.63）中对偏振所作的首选选择，与$\mathbf{k}$ 的方向一起构成右手单位矢量系，由此可知，向量（$\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda}$ $\mathbf{k}_\alpha$）在 $\alpha=1$ 和$\alpha=2$ 时分别与 $\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}_2$ 和 $\boldsymbol{\lambda}\mathbf{k}_1$成正比。因此，式（3.121）的角分布 ˆ 与电偶极情形相同，只需将 $\langle 0|\mathbf{d}|n\rangle$ 替换为ˆ$\langle 0|\mathbf{M}|n\rangle$ ，并对偏振矢量作适当调整。

通用多极展开

到目前为止，在我们对电偶极、四极和磁偶极发射的讨论中所看到的，本质上是将泰勒展开 (3.70) 中的各项变换为按“角”多极矩进行的展开。后者之所以更为合适，是因为长波长展开中的小参数 $ka\ll 1$涉及系统的“径向尺寸” a ， $|\mathbf{r}|\le a$ ，显然对角度没有任何限制。也许最简单、最熟悉的例子就是从泰勒展开进行一次“移动”

库仑势的

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int_{r'\le a}\frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r'$$

""电荷分布的外部", $r > a$ 至多极展开

$$\begin{aligned}\text{Taylor expansion} - \ \phi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0 r}\int \rho(\mathbf{r}')(1+\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'/r^2+...)d^3r' \ . \\ \text{Multipole expansion} - \ \phi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{M^E_{lm}}{R^{l+1}}\,Y_{lm}(\Omega_r)\end{aligned} \tag{3.127}$$

with

$$M^E_{lm} = \frac{4\pi}{2l+1}\int r^l\rho(\mathbf{r})Y^*_{lm}(\Omega_r)d^3r \quad - \quad \text{multipole electric moments}$$

在推导后一个表达式时，会使用已知的将 $1/|\mathbf{r}\ -\mathbf{r}'|$ 展开为乘积之和 $Y_{lm}(\Omega_r)Y^*_{lm}(\Omega_{r'})$的方法，从而可以将外部 $r > a$ 和内部$r' \le a$ 区域因式分解。结果是，将库仑势表示为多极势之和，而这些多极势由电多极矩 M^E_{lm} 产生。

回到我们的问题，我们希望为式（3.58）和（3.120）中的表达式找到类似的多极展开。我们先着重讨论前者，并考虑

$$\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\lambda} = \int d^3r\ \hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r})\cdot\boldsymbol{\lambda}\ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{3.128}$$

我们不再像在式 (3.70) 中那样将 $\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ 展开为泰勒级数，而是采用

$$\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) = 4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}(-i)^l g_l(kr)Y_{lm}(\Omega_k)Y^*_{lm}(\Omega_r)$$

其中球贝塞尔函数为 $g_l(kr) = \sqrt{\pi/2kr}J_{l+1/2}(kr)$。利用指数函数的这一展开式

$$\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\lambda} = 4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\sum_{q=-1}^{1}(-i)^l Y_{lm}(\Omega_k)\lambda_q\int d^3r\ g_l(kr)\hat{j}^*_q(\mathbf{r})Y^*_{lm}(\Omega_r) \tag{3.129}$$

ˆ 其中我们使用了矢量 $\boldsymbol{\lambda}$ 和 $\mathbf{j}$ 的球分量。

所得表达式 (3.129) 与 $\hat{\mathbf{j}}\mathbf{k}$ 的多极展-开式(3.127)具有相似特征。它是各项之和，每一项都分解为依赖于光子变量 $\mathbf{k}$ 和 $\boldsymbol{\lambda}$ 以及物质变量 $\mathbf{j}(\mathbf{r})$的分量之积。仍然存在通过 $g_l(kr)$依赖于 k 的物质分量，但在长波近似 (LWA) $kr \ll 1$ 下，当考察矩阵元 $\langle 0|\mathbf{j}\mathbf{k}^{|n\rangle}\cdot\boldsymbol{\lambda}$ 时，该分量将解耦；对于该近似，$g_l(kr) \sim k^l r^{l\hat{}}$。

展开式 Eq.(3.129) 中剩下的问题是，每一项中的光子和物质分量都没有确定的多极性。这在光子相关部分中最为明显，这些部分在旋转下按 $Y_{lm}(\Omega_k)$ 和 λ_q 的乘积变换，

即作为表示 $l-1$, l 和 $l+1$之和。其技术原因显而易见——与光子相关的 $Y_{lm}(\Omega_k)$与和物质相关的 $Y^*_{lm}(\Omega_r)$以及 λ_q耦合到 $\hat{}\ j^*_q(\mathbf{r})$。我们需要将这些乘积"重新耦合"为光子组和物质组。这可以利用克莱布什-戈登完备关系来完成，参见参考文献 [3],第 338 页,

$$\sum_{LM}\langle lm,1q|l1LM\rangle\langle l1LM|lm'1q'\rangle=\delta_{mm'}\delta_{qq'}$$

将其代入公式 (3.129)，可得

$$\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\lambda}=4\pi\sum_{L,l,M}(-i)^l\Phi_{LM,l}(\Omega_k,\boldsymbol{\lambda})\hat{\mathcal{M}}_{LM,l} \tag{3.130}$$

其中，在长波长极限下，带有 $g_l(kr)\approx(kr)^l/(2l+1)!!$ 有

$$\Phi_{LM,l}(\Omega_k,\boldsymbol{\lambda})=\sum_{m,q}\langle lm,1q|l1LM\rangle k^l Y_{lm}(\Omega_k)\lambda_q\quad,\quad l=L,L\pm1\,, \tag{3.131}$$

and

$$\hat{\mathcal{M}}_{LM,l}=\frac{1}{(2l+1)!!}\sum_{m'\ q'}\int d^3r\ r^l\langle l1LM|lm'1q'\rangle\hat{}\,j^*_{q'}(\mathbf{r})Y^*_{lm'}(\Omega_r)\quad,\ l=L,L\pm1\,, \tag{3.132}$$

表达式两侧的 $l=L,L\pm1$ 值，当然分别对应于向量 $\boldsymbol{\lambda}$ 和$\mathbf{j}$ 的一个单位角动量的矢量加法，以及 $Y_{lm}(\Omega_k)$ 和 $Y_{lm}(\Omega_r)$ 的 l 。

一般展开式 (3.130) 具有我们所期望的结构。$\Phi_{LM,l}(\Omega_k,\boldsymbol{\lambda})$ ˆ和 $\mathcal{M}_{LM,l}$ 都按照旋转的第 L 个表示的 M 分量变换。对于光子分量来说这一点显而易见，但要证明代表 $\mathcal{M}_{LM,l}$ 的积分 ˆ 也具有这一性质，还需要多做一些工作。这留作练习。

考虑几个简单的情形会很有帮助。

单极发射

从 $L=0$ 项开始，很容易证明它为零。事实上，对于 $L=0$ 有$M=0\to m=-q$，而 $l=1$ 是唯一可能的值。因此 $k^l Y_{lm}(\Omega_k) \to kY_{1m}(\Omega_k) \sim k_m$，并且

$$\Phi_{00,1}\sim\sum_m(-1)^m k_m\lambda_{-m}=\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\lambda}=0$$

因此，不存在单极光子发射。直观地说，这可以联系到光子具有自旋1这一事实——发射光子时，发射系统的角动量至少要改变一个单位。

偶极发射

含有 $L=1$ 的项具有 $l=0$ 和 $l=1$。对于 $l=0$，具有

$$\Phi_{1M,l=0}\sim\lambda_M\ ,\ \hat{\mathcal{M}}_{1M,l=0}\sim\int d^3r\hat{j}^*_M(\mathbf{r})$$

得到电偶极情形，参见式（3.73）。

对于 $l=1$ 值，有

$$\Phi_{1M,l=1}=k\sum_q\langle 1\ M-q,1q|111M\rangle Y_{1m}(\Omega_k)\lambda_{M-q}\sim(\mathbf{k}\times\boldsymbol{\lambda})_M$$

$$\hat{\mathcal{M}}_{1M,l=1}=\frac{1}{3}\sum_q\int d^3r\ r\langle 111M|1\ M-q1q\rangle\hat{j}^*_q(\mathbf{r})Y^*_{1M-q}(\Omega_r)\sim\int d^3(\mathbf{r}\times\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}))_M$$

即磁偶极发射。

高阶多极

关于 L 较高取值的讨论（参见参考文献[3], 第376页）证实了这一模式——$l=L$ 项对应磁多极，而 $l=L\pm1$ 项是电辐射项。因此，公式（3.130）中对 L 的求和，就是对导致光子发射的物质"振动"（量子力学跃迁矩阵元）所对应的不同多极的求和。

一般多极项的角分布、选择定则

式 (3.131)对于 $\Phi_{LM,l}(\Omega_k,\boldsymbol{\lambda})$的表达式，可以解释为由 l,L 物质多极矩向立体角 Ω_k 、具有偏振$\boldsymbol{\lambda}$发射的光子的概率振幅。它体现了这样的预期：光子的总角动量是其轨道角动量（编码于 $Y_{1m}(\Omega_k)$中）与其单位自旋（与偏振矢量相关联）之和。

公式（3.130）展开式中各项的角动量选择定则，可通过将Wigner–Eckart 定理应用于具有确定角动量值的物质本征态之间的多极矩算符矩阵元而得到。

$$\langle\nu',j',m'|\hat{\mathcal{M}}_{LM,l}|\nu,j,m\rangle=\langle j'm'|LM,jm\rangle\langle\nu',j'||\hat{\mathcal{M}}_{L,l}||\nu,j\rangle \tag{3.133}$$

由此我们得到角动量选择定则

$$|L-j| \leq j' \leq L+j \ , \ \ m' = m+M \tag{3.134}$$

或许并不令人意外的是，它们不涉及用于区分电多极与磁多极的 l 指标。不过，这一指标对于宇称选择定则十分重要。也许最快的理解方式是注意到，$\Phi_{LM,\ l}(\Omega_k,\ \boldsymbol{\lambda})$在宇称$\mathbf{r} \ \rightarrow \ -\mathbf{r}$ 变换下按照 $(-1)^{\ l+1}$ 发生变化，其中 l 来自轨道 $Y_{lm}(\Omega_k)$，而额外的负号来自偏振的极矢量。因此

$$(-1)^{P_f} = (-1)^{l+1}(-1)^{P_i}$$

最后需要指出的是，上述基于光子振幅宇称性质的论证，可以通过考察式（3.133）的矩阵元在宇称变换下的变化行为而变得更加形式化和严谨，参见文献 [3], 第379页。

3.2.7 诱导光子发射

在上文讨论激发态量子物质（原子、固体、原子核、分子）的光子发射时，我们假设在发射之前（即在初态中），辐射模$\mathbf{k}\alpha$ 中不存在光子，物质系统将光子发射到该模式中，参见式（3.56）。这种发射称为自发发射。

现在考虑这样一种情况：发射之前初态中已经包含 N 个光子，即有

$$|i\rangle = |n\rangle|N_{\mathbf{k}\alpha}, \{0_{\mathbf{k}'\alpha'}\}\rangle \quad |f\rangle = |0\rangle|(N_{\mathbf{k}\alpha}+1, \{0_{\mathbf{k}'\alpha'}\}\rangle$$

经过这一改变，式（3.57）中场矩阵元的计算变为

$$\langle N_{\mathbf{k}\alpha}+1, \{0_{\mathbf{k}'\alpha'}\}|\hat{a}_{\mathbf{k}''\alpha''} + \hat{a}^{\dagger}_{-\mathbf{k}''\alpha''}|N_{\mathbf{k}\alpha}, \{0_{\mathbf{k}\alpha}\}\rangle = \delta_{-\mathbf{k}'',\mathbf{k}}\delta_{\alpha''\alpha}\sqrt{N_{\mathbf{k}\alpha}+1}$$

这是由于谐振子产生算符的基本矩阵元

$$\langle N+1|\hat{a}^{\dagger}|N\rangle = \sqrt{N+1}$$

这会使相互作用绝对值平方的计算结果变为

$$|\langle f|\hat{H}_{I1}|i\rangle|^2 = \left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)|\langle 0|\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|n\rangle|^2\,(N_{\mathbf{k}\alpha}+1) \tag{3.135}$$

这意味着，发射率$\Gamma_{n\rightarrow 0,\ \mathbf{k}\alpha}$ 是自发发射情况下的 $N\mathbf{k}_{\alpha}+1$ 倍。因此，仅仅由于发射所涉及的辐射模式中初始存在 $N\mathbf{k}_{\alpha}$ 个光子，就会导致发射率增加。这种效应称为诱导发射或受激发射。人们通常将其解释为一种“玻色子喜欢聚在一起”的量子力学效应，即倾向于处于相同的态，这也是激光器概念的核心。

非常概略地说，这一思想可以概述如下。假设存在大量相同的“发射体”（例如原子、分子等），它们可以被“连续地”激发

达到某个能级，然后通过光子发射退激到较低能级。正如我们之前所学，发射光子的角分布和偏振将取决于初态和末态的角动量投影 M 和 M'，但如果只指定初始能量， M 值将是随机的，因此发射光子的方向和偏振也将是随机的。只要考虑的仅是自发发射，情况就是如此。

如果某些特定的光子模式$\mathbf{k}\alpha$ 中包含大量（预先发射的）光子，那么这些特定模式中就很可能发生受激发射（$\sim\ N\mathbf{k}\alpha$），即“激光发射”。从示意上说，要在受控模式中积累所需的光子，例如可以将发射体置于谐振腔中。这样便能选出共振模式，使光子在逸出之前在其中“来回反射”。

当然，以上解释都相当粗略。更详细的说明可参阅相关的量子光学文献。

值得注意的是，从历史上看，发射率的表达式通常写成一个求和式，其中一项包含 $N\mathbf{k}\alpha$，另一项包含数字 1，即求和式 $N\mathbf{k}\alpha+1$。

$$\Gamma=\Gamma^{\text{induced}}+\Gamma^{\text{spontaneous}}$$

于是，自发光子发射率的表达式 (3.60) 改写为

$$\frac{dN_{\mathbf{k}\alpha}}{d\gamma}=\left(\frac{dN_{\mathbf{k}\alpha}}{d\gamma}\right)^{\text{induced}}+\left(\frac{dN_{\mathbf{k}\alpha}}{d\gamma}\right)^{\text{sponteneous}} \tag{3.136}$$

with

$$\left(\frac{dN_{\mathbf{k}\alpha}}{d\gamma}\right)^{\text{induced}}=N_{\mathbf{k}\alpha}\left(\frac{dN_{\mathbf{k}\alpha}}{d\gamma}\right)^{\text{sponteneous}} \tag{3.137}$$

3.2.8 光子吸收

现在考虑光子吸收过程。我们有

$$|i\rangle=|0\rangle|N_{\mathbf{k}\alpha},...\rangle\quad,\quad|f\rangle=|n\rangle|N_{\mathbf{k}\alpha}-1,...\rangle \tag{3.138}$$

ˆ 这些态之间的 H_{I1} 的矩阵元给出的是

$$|\langle f|\hat{H}_{I1}|i\rangle|^2=\left(\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_k\Omega}\right)|\langle n|\hat{\mathbf{j}}_{-\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|0\rangle|^2\,N_{\mathbf{k}\alpha} \tag{3.139}$$

由于

$$\langle n|\hat{\mathbf{j}}_{-\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|0\rangle=\langle 0|\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{k}}\cdot\boldsymbol{\lambda}_{\mathbf{k}\alpha}|n\rangle^*$$

我们发现等式关系式

$$\Gamma^{\text{absorption}}_{0\to n}=\Gamma^{\text{induced emission}}_{n\to 0} \tag{3.140}$$

对于具有相同$\mathbf{k}$ 和 $\boldsymbol{\lambda}$的光子的吸收率和受激发射率。这个关系式对于激光物理至关重要。实际上，它表明，拥有 $N\mathbf{k}\alpha$ 个入射光子（单位时间内）的基态原子，吸收能量为 $\hbar\omega_k$ 的一个光子，或通过受激发射复制（放大！）一个光子的概率是相等的。

激发态原子。为了使发射多于吸收，激发态原子的数量必须多于基态原子的数量。这当然不会在处于热平衡的系统中发生。必须通过一种称为“泵浦”的过程加入能量，以产生非平衡状态，从而将足够多的原子提升到上能级。其结果称为“粒子数反转”，会导致光放大。泵浦可以是电泵浦、光泵浦或化学泵浦。

3.3 附录

3.3.1 与连续谱耦合的离散能级

这里我们详细介绍一种简单的非微扰方法，用于处理第（3.2.1）节中定义的魏斯科普夫-维格纳模型。关于这一问题的更一般处理，可参阅例如文献[2]。

忽略连续谱能级之间的耦合

如式(3.37)之后所述，Weisskopf-Wigner方法中的关键步骤/近似是忽略连续谱能级之间的耦合，即令$V_{\mu\nu}=0$。这意味着，在基底 $\{\psi_0,\psi_\nu\}$ 中，哈密顿量矩阵具有“带边框”的形式

$$H=\begin{pmatrix} E_0 & V_{01} & ... & V_{0\nu} & ... \\ V_{10} & E_1 & ... & 0 & .... \\ ... & ... & ... & ... & ... \\ V_{\nu 0} & 0 & ... & E_\nu & ... \\ ... & ... & ... & ... & ... \end{pmatrix}$$

这里我们不加说明地假设 ν 指标取离散值。此类矩阵很容易对角-化，尤其是在对 E_ν和 $V_{0\nu}$ 作出简化假设时。相关内容可参见例如文献 [1]。

马尔可夫近似

检查核 $K(t)$ 的积分表达式，即公式 (3.46)，为方便起见我们在此重写如下

$$K(t)=-\frac{1}{\hbar^2}\int d\mathcal{E}\overline{|V_{0\mu}|^2}\big|_{\varepsilon_\mu=\mathcal{E}}e^{i(\mathcal{E}_0-\mathcal{E})t/\hbar}$$

我们观察到，被积函数通常是 $\mathcal{E}$ 的一个光滑函数与一个指数函数的乘积，后者在 $\mathcal{E}$ 中以 $\sim \hbar/t$ 为周期振荡。将 Δ 记作 $|V_{0\mu}|^2\big|_{\varepsilon_\mu=\mathcal{E}}$ 变化所跨越的尺度，显然，长时间下，积分将趋于零$t\gg\hbar/\Delta$。在此条件下，核 $K(t)$ 具有“范围”

$$T\sim\frac{\hbar}{\Delta}$$

让我们将 (3.41) 中积分里的变量 t' 改为 $\tau=t-t'$

$$\frac{dc_0}{dt}=\int_0^t K(t-t')c_0(t')dt'=\int_0^t K(\tau)c_0(t-\tau)d\tau \tag{3.141}$$

对于给定的 t，只有 $K(\tau)$的“记忆时间” $\tau \leq T$内的 $c_0(t-\tau)$值才会对积分作出贡献。为进一步简化问题，接下来我们假设 $c_0(t)$在时间T内变化不大。我们将在下文讨论这一假设的含义。当该假设成立时，我们可以在积分号下近似

$$c_0(t-\tau) \approx c_0(t)$$

并写出

$$\frac{dc_0}{dt} = c_0(t)\int_0^t K(\tau)d\tau \tag{3.142}$$

这种近似称为马尔可夫近似—— $c(t)$ 的演化，即它在时间 t 的变化，只取决于它在时间 t 的值，而不取决于更早的时刻$t' < t$；换言之，它不会记忆过去。

上述方程右侧的积分是 t 的已知函数，因此可以对该方程进行积分，但我们先做一项进一步的简化。我们将关注 $c_0(t)$ 在 $t \gg T$时的长时间行为。由于根据假设，当 $\tau \gg T$ 时 $K(\tau)$ 很小，我们可以近似

$$\int_0^t K(\tau)d\tau \approx \int_0^\infty K(\tau)d\tau$$

让我们引入以下记号来表示该积分的实部和虚部

$$\mathrm{Im}\int_0^\infty K(\tau)d\tau = -\frac{\Delta\mathcal{E}}{\hbar} \quad , \quad Re\int_0^\infty K(\tau)d\tau = \frac{\Gamma}{2} \tag{3.143}$$

由此，我们得到初态 ψ_0的“持存振幅”的时间依赖性

$$\langle\psi_0|\Psi(t)\rangle = c_0(t)e^{-i\mathcal{E}_0 t/\hbar}|_{t\gg T} = c(0)e^{-i(\mathcal{E}_0+\Delta\mathcal{E})t/\hbar}e^{-\Gamma t/2} \tag{3.144}$$

我们将在下文看到， Γ 为正，因此该振幅以衰减率 Γ按指数函数衰减。其相位会产生能量位移 $\Delta\mathcal{E}$。

我们将在下一小节讨论 $\Delta\mathcal{E}$ 和 Γ 的显式形式。这里我们注意到， $c_0(t)$发生变化的时间尺度为 $\sim 1/\Gamma$ 或 $\sim \hbar/\Delta\mathcal{E}$。我们假设 $c_0(t)$在区间 $T = \hbar/\Delta$ 内变化缓慢，这意味着必须有

$$\hbar\Gamma \ll \Delta \quad , \quad \Delta\mathcal{E} \ll \Delta \tag{3.145}$$

衰减态的衰减率（宽度）和能量位移

现在我们给出 Γ和 $\Delta\mathcal{E}$的显式表达式。考虑积分

$$\hbar\lim_{t_0\to\infty}\int_0^{t_0} K(\tau)d\tau = i\lim_{t_0\to\infty}\int d\mathcal{E}\,\overline{|V_{0\mu}|^2}\big|_{\varepsilon_\mu=\varepsilon}\ \frac{e^{i(\mathcal{E}_0-\mathcal{E})t_0/\hbar}-1}{\mathcal{E}_0-\mathcal{E}} \tag{3.146}$$

这里我们对 $K(t)$ 使用了公式 (3.46)。为了计算 $t_0\to\infty$ 极限，我们将采用以下方法（参见参考文献 [4], 第 43 节）。让我们将积分路径沿 $\mathcal{E}$ 稍微移入下半虚平面（其中 $\mathrm{Im}\,\mathcal{E} < 0$），参见图 3.7 中的虚线

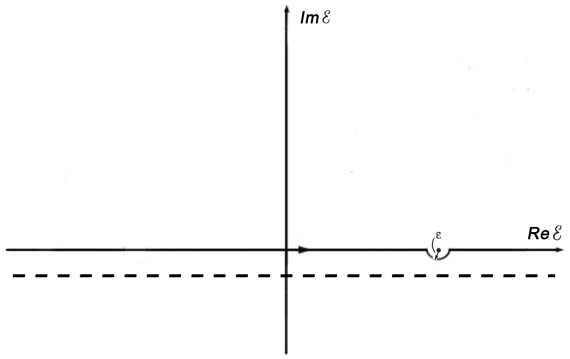


图 3.7: $i\epsilon$ 规定下得到的积分路径。首先将式 (3.146) 中的积分路径沿实轴移至下 $Im\mathcal{E} < 0$半平面，然后令 $t_0 \to \infty$，此时被积函数中的第 1 项消失；接着在奇点 $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0$ 周围绕过一个小半圆，将路径移回实轴。请注意，选择半圆形只是为了方便，以便轻松得到通常的结果 (3.149)，正文中对此已有说明。

由于被积函数在实轴上没有奇点，因此这样做不会改变积分的值[13]。于是，上述积分可以分解为两项之和

$$\int d\mathcal{E}\,\overline{|V_{0\mu}|^2}\big|_{\varepsilon_\mu=\varepsilon}\ \frac{e^{i(\mathcal{E}_0-\mathcal{E})t_0/\hbar}}{\mathcal{E}_0-\mathcal{E}} \quad \text{and} \quad -\int d\mathcal{E}\,\overline{|V_{0\mu}|^2}\big|_{\varepsilon_\mu=\varepsilon}\ \frac{1}{\mathcal{E}_0-\mathcal{E}}$$

当积分沿实 $\mathcal{E}$ 轴进行时，这是不可能的，因为每个 ter m 单独来看，在 $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0$ 处是奇异的。

在 $t_0 \to \infty$ 极限下，第一个积分趋于零（这是由于其被积函数中存在因子 $e^{Im\mathcal{E}\,t_0}$），因此只剩下第二个积分。对于第二个积分，我们可以将对 $\mathcal{E}$ 的积分路径移回实轴，但要注意不能越过 $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0$ 处的极点，参见图 3.7。

$$\hbar\int_0^\infty K(\tau)d\tau = i\int_{\text{contour in Fig.3.7}} d\mathcal{E}\,\overline{|V_{0\mu}|^2}\big|_{\varepsilon_\mu=\varepsilon}\ \frac{1}{\mathcal{E}-\mathcal{E}_0} \tag{3.147}$$

将上述积分中得到的积分路径按以下方式理解，既方便又符合惯例。首先给 $\mathcal{E}_0$ 加上一个微小的正虚部 $i\epsilon$，然后将积分路径移至实轴（它从极点下方经过，因此没有问题），最后考虑 $\epsilon \to 0$ 的极限，同时变形积分路径以避免极点穿过它。

[13]更准确地说，应写出带有其上下限的定性能量积分 $\int_{\mathcal{E}_{min}}^{\mathcal{E}_{max}} d\mathcal{E}\ldots$，并假定路径端点（固定不变且无法移至复平面）所产生的贡献可以忽略不计。

这一过程通常称为 $i\epsilon$ 处方。采用这种方法，我们将表达式 (3.147) 写为

$$\hbar \int_0^\infty K(\tau) d\tau = i \lim_{\epsilon \to 0} \int d\mathcal{E}\, \overline{|V_{0\mu}|^2}\ \frac{1}{\mathcal{E} - \mathcal{E}_0 - i\epsilon} \tag{3.148}$$

这里的积分可以使用该公式进行变换

$$\lim_{\epsilon \to 0} \int_a^b \frac{f(x)}{x \pm i\epsilon} dx = \mathcal{P} \int_a^b \frac{f(x)}{x} dx \mp i\pi f(0) \tag{3.149}$$

适用于 $a < 0$ 和 $b > 0$。这里 $\mathcal{P}$ 表示积分的主值

$$\mathcal{P} \int_a^b \frac{f(x)}{x} dx = \lim_{\epsilon \to 0} \left[\int_a^{-\epsilon} dx + \int_\epsilon^b dx \right] \frac{f(x)}{x} \tag{3.150}$$

(3.149) 中的两项分别对应于沿实轴上除去区间 $-\epsilon < x < \epsilon$ 后的积分，以及沿奇点 $x = 0$ 周围半径为 ϵ 的半圆的积分，参见图 3.7。第二项的值恰好是将柯西留数定理应用于整个圆周后所得 $\mp 2\pi i f(0)$的一半（或者直接在复平面中使用极坐标 $Re\, x = r \cos\, \phi$, $Im\, x = r \sin\, \phi$ 计算积分）。将这一结果用于式 (3.148) 中的积分，可得能量位移 $\Delta\mathcal{E}$ 和宽度 Γ的表达式 (3.48)。

ˆ3.3.2 哈密顿量的 H_{I3} 部分与宇称变换

（非相对论）物质-电磁场哈密顿量中ˆ H_{I3}部分（式（3.10））在宇称变换下保持不变，这是因为**磁场** 和粒子自旋ˆ$\mathbf{s}_a$在宇称变换下都不改变符号。它们是轴矢量（或赝矢量）。对于磁场，这一点已可从洛伦兹力中看出

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

由于力$\mathbf{F} = m d\mathbf{v}/dt$ 必须是极矢量，因此$\mathbf{E}$也必须是极矢量。在第二项中，由于$\mathbf{v}$ 是极矢量，**磁场** 必须是轴矢量。这一点也可从麦克斯韦方程中看出

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B}/\partial t \quad , \quad c^2 \nabla \times \mathbf{B} = \partial \mathbf{E}/\partial t + \mathbf{j}/\epsilon_0$$

以及关系式**磁场** $= \nabla \times \mathbf{A}$中也可以看出。

自旋矢量$\mathbf{s}$是轴向的，因为它们是总角动量 $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$的一部分，其中轨道部分为 $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$，它在宇称变换下显然不会改变。理解$\mathbf{l}$这一特殊性质并不困难。事实上，轨道角动量反映/测量了相对于原点$\mathbf{r} = 0$，在（选定的）坐标系中，处于位置 $\mathbf{r}$ 、以动量$\mathbf{p}$运动的粒子运动的“旋转”分量的大小和方向。改变粒子的位置$\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ 和动量$\mathbf{p} \to -\mathbf{p}$，不会改变运动的旋转分量的方向和大小。

参考文献

[1]原子-光子相互作用：基本过程与应用，Claude Cohen- Tannoudji、Jacques Dupont-Roc、Gilbert Grynberg[2] K.J.F Gaemers 和 T.D Visser，《量子力学》中指数衰变的偏差，Physica，A153 (1988) 234-251[3] G. Baym，《量子力学讲义》，Addison-Wesley，1993[4] L.D Landau 和 E.M. Lifshitz，《量子力学》，Pergamon Press，1965[5] D. Brink 和 G. R. Satchler，《角动量》，牛津大学出版社，第 2 版，1968[6] J. D. Bozek 等，《J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.》39 (2006) 4871?4882 [7] J.J. Sakurai、Jim Napolitano，《现代量子力学》，第 2 版，Addison Wesley，1994[8] D. Griffiths，《基本粒子导论》，第 2 修订版，Wiley，2008。

第4章

薛定谔场的量子化——二次量子化

4.1 引言

让我们考虑自由粒子的薛定谔¨方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},\mathrm{t}) \tag{4.1}$$

并将其视为经典场 $\psi(\mathbf{r}\ t)$ 的方程，就像我们将麦克斯韦方程视为电磁场的方程一样。提醒一下——量子化后的麦克斯韦场描述的是自由量子——光子——它们的行为类似于量子粒子。它们的能量-动量关系 $\epsilon = c|\mathbf{p}|$由自由电磁波的经典色散关系$\omega = c|\mathbf{k}|$ 决定，并辅以基本的量子力学粒子-波关系$\epsilon = \hbar\omega$ 以及 $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$。

对于自由薛定谔场，色散关系可由方程 (4.1) a 读出。 s

$$\hbar\omega=\frac{\hbar^2|\mathbf{k}|^2}{2m}$$

这表明，对该场进行量子化将导出具有能量-动量关系的自由量子的描述

$$\epsilon=\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$$

也就是说，描述非相对论粒子的情形。显然，这一过程称为二次量子化 。

我们将首先确认这一图景，然后将其扩展，用以描述在外势中运动且彼此相互作用的粒子。在此过程中，

我们会发现，这套形式体系描述的是遵循玻色子统计的全同粒子。随后，我们将了解如何扩展这套形式体系，以描述遵循费米子统计的粒子。

4.2 自由薛定谔场。量子化

薛定谔场 $\psi(\mathbf{r}\ t)$ 是一个标量场，因此比矢量电磁场更简单。不过，它是复值的，而电磁场是实值的。后一特点意味着，实际上应将方程（4.1）视为关于实部和虚部的一对方程，或者等价地，视为关于 $\psi(\mathbf{r})$ 及其复共轭 $\psi^*(\mathbf{r})$ 的方程。

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},\mathrm{t})\quad;\quad -i\hbar\frac{\partial\psi^*(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*(\mathbf{r},\mathrm{t})\ . \tag{4.2}$$

根据引言中概述的动机，我们考虑对该场进行量子化。我们遵循标准的量子化程序，首先确定薛定谔场的哈密顿量结构和正则共轭对。

我们注意到，方程组 (4.2) 可视为以哈密顿量为核心的哈密顿方程组

$$H=\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r|\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 \tag{4.3}$$

确实，该表达式的变分为

$$\begin{aligned}\delta H &= \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\left[\nabla\psi^*(\mathbf{r})\cdot\nabla\delta\psi(\mathbf{r})+\nabla\delta\psi^*(\mathbf{r})\cdot\nabla\psi(\mathbf{r})\right]= \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r\left\{[\nabla^2\psi^*(\mathbf{r})]\delta\psi(\mathbf{r})+[\nabla^2\psi(\mathbf{r})]\,\delta\psi^*(\mathbf{r})\right\}\end{aligned} \tag{4.4}$$

现在将 $\delta\psi(\mathbf{r})$和 $\delta\psi^*(\mathbf{r})$视为**相互独立的**，我们可得

$$\frac{\delta H}{\delta\psi(\mathbf{r})}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*(\mathbf{r})\quad;\quad\frac{\delta H}{\delta\psi^*(\mathbf{r})}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) \tag{4.5}$$

这表明，(4.2)确实是哈密顿量方程，只要将$\psi(\mathbf{r})$和 $i\hbar\psi^*(\mathbf{r})$（即它们在空间中每一点$\mathbf{r}$处的取值）分别视为**正则共轭坐标和动量**，

$$\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}=\frac{\delta H}{\delta(i\hbar\psi^*(\mathbf{r},t))}\quad,\quad\frac{\partial(i\hbar\psi^*(\mathbf{r},t))}{\partial t}=-\frac{\delta H}{\delta\psi(\mathbf{r},t)} \tag{4.6}$$

4.2.1 分离实部和虚部

ψ 和 $i\hbar\psi^*$ 的复值性使应用标准的正则量子化程序时遇到了一点问题。避免这一问题的一种可能方法是转换为实部和虚部

$$\psi=\mathrm{Re}\psi+i\mathrm{Im}\psi\quad;\quad\psi^*=\mathrm{Re}\psi-i\mathrm{Im}\psi \tag{4.7}$$

我们暂且采用这种方法，并借此了解如何使用原始的 ψ 和 $i\hbar\psi^*$进行量子化。正如我们将看到的，这将是一个更方便（也更常规）的选择。

必须注意，变换 (4.7) 是正则的，以确保变换后的变量也构成一个正则对。这可以通过

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}[\phi(\mathbf{r}) + i\pi(\mathbf{r})] \quad ; \quad \psi^*(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}[\phi(\mathbf{r}) - i\pi(\mathbf{r})] \tag{4.8}$$

其中 ϕ 和 π为实数。为了验证 ϕ 和 π 是正则的，我们利用已知性质[1]：从一组 p_k、 q_k 到 P_k、 Q_k 的定时正则变换满足

$$\sum_k p_k dq_k = \sum_k P_k dQ_k + dF$$

其中 dF 是全微分。在我们的例子中，对 k 求和相当于对 r 积分，因此

$$\begin{aligned}\int i\hbar\psi^*(\mathbf{r})d\psi(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \int i\hbar\frac{1}{2\hbar}\left[\phi(\mathbf{r})d\phi(\mathbf{r}) + i\phi(\mathbf{r})d\pi(\mathbf{r}) - i\pi(\mathbf{r})d\phi(\mathbf{r}) + \right.\\ \left. + \pi(\mathbf{r})d\pi(\mathbf{r})\right]d\mathbf{r} = \int \pi(\mathbf{r})d\phi(\mathbf{r})d\mathbf{r} + d\int\frac{i}{4}\left[\phi^2(\mathbf{r}) + \pi^2(\mathbf{r}) + 2i\phi(\mathbf{r})\pi(\mathbf{r})\right]d\mathbf{r}\end{aligned}$$

这表明 ϕ 和 π 确实是正则的，也就是说，旧的和新的正则变量的辛形式之差是一个全微分。

将 (4.8) 代入方程 (4.2)，得到

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\pi(\mathbf{r},\mathrm{t}) \quad ; \quad \frac{\partial\pi(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m}\nabla^2\phi(\mathbf{r},\mathrm{t})\ . \tag{4.9}$$

哈密顿量变为

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r|\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 = \frac{\hbar}{4m}\int d^3r\left[(\nabla\pi(\mathbf{r}))^2 + (\nabla\phi(\mathbf{r}))^2\right] \tag{4.10}$$

它的变化形式

$$\begin{aligned}\delta H &= \frac{\hbar}{2m}\int d^3r\left[\nabla\pi(\mathbf{r})\cdot\nabla\delta\pi(\mathbf{r}) + \nabla\phi(\mathbf{r})\cdot\nabla\delta\phi(\mathbf{r})\right] = \\ &= -\frac{\hbar}{2m}\int d^3r\left[\nabla^2\pi(\mathbf{r})\delta\pi(\mathbf{r}) + \nabla^2\phi(\mathbf{r})\delta\phi(\mathbf{r})\right]\end{aligned} \tag{4.11}$$

以便

$$\frac{\delta H}{\delta\phi(\mathbf{r})} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\phi(\mathbf{r}) \quad , \quad \frac{\delta H}{\delta\pi(\mathbf{r})} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\pi(\mathbf{r}) \tag{4.12}$$

因此我们看到，方程(4.9)确实是哈密顿形式。

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial t} = \frac{\delta H}{\delta\pi(\mathbf{r},t)} \quad , \quad \frac{\partial\pi(\mathbf{r},\mathrm{t})}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta\phi(\mathbf{r},t)}\ . \tag{4.13}$$

[1]参见 L. Landau 和 E. Lifshitz，《力学》，第45节，爱思唯尔有限公司，1976年

以 $\phi(\mathbf{r})$ 作为坐标，并以 $\pi(\mathbf{r})$ 作为动量。这些量是实数，我们可以按照通常的方式，通过引入波泛函 $\Psi[\phi(\mathbf{r})]$和作用于其上的算符来将理论量子化

$$\hat{\phi}(\mathbf{r})\Psi[\phi(\mathbf{r})] = \phi(\mathbf{r})\Psi[\phi(\mathbf{r})] \;\; ; \;\; \hat{\pi}(\mathbf{r})\Psi[\phi(\mathbf{r})] = -i\hbar\frac{\delta}{\delta\phi(\mathbf{r})}\Psi[\phi(\mathbf{r})] \; . \tag{4.14}$$

与薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi[\phi(\mathbf{r}),t] = H_{op}\Psi[\phi(\mathbf{r}),t] \tag{4.15}$$

其中哈密顿算符由表达式 (4.10) 给出，只需将 $\phi(\mathbf{r})$ 和 $\pi(\mathbf{r})$ 替换为相应的算符即可

$$H_{op} = \frac{\hbar}{4m}\int d^3r\left[(\nabla\hat{\pi}(\mathbf{r}))^2 + (\nabla\hat{\phi}(\mathbf{r}))^2\right] \tag{4.16}$$

我们注意到，算符 $\phi(\mathbf{r})$ 和 $\pi(\mathbf{r})$ 的对易关系为

$$\begin{aligned}[\hat{\phi}(\mathbf{r}),\hat{\phi}(\mathbf{r}')] = [\hat{\pi}(\mathbf{r}),\hat{\pi}(\mathbf{r}')] = 0 \\ [\hat{\pi}(\mathbf{r}),\hat{\phi}(\mathbf{r}')] = \hat{\pi}(\mathbf{r})\,\hat{\phi}(\mathbf{r}') - \hat{\phi}(\mathbf{r}')\,\hat{\pi}(\mathbf{r}) = -i\hbar\frac{\delta\phi(\mathbf{r}')}{\delta\phi(\mathbf{r})} = -i\hbar\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\end{aligned} \tag{4.17}$$

4.2.2 回到复值场

正如前面所述，使用复值场进行处理更为方便。利用 (4.8)，我们引入算符 $\phi(\mathbf{r})$ 和 $\pi(\mathbf{r})$ 的非厄米组合。

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}[\hat{\phi}(\mathbf{r}) + i\hat{\pi}(\mathbf{r})] \;\; ; \;\; \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}[\hat{\phi}(\mathbf{r}) - i\hat{\pi}(\mathbf{r})] \tag{4.18}$$

这里我们注意到，它与熟悉的算符 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^+$ 有着明显的类比

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}[\hat{x} + i\hat{p}] \;\; , \;\; \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}[\hat{x} - i\hat{p}] \; ,$$

即单个自由度的坐标与动量算符的非厄米组合。

在我们的情形中，对于每个$\mathbf{r}$，也就是对于 ∞^3 坐标-动量对，我们都有这样的组合（4.18）。

由对易关系（4.17）可得

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}),\hat{\psi}^+(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \;\; , \;\; [\hat{\psi}(\mathbf{r}),\hat{\psi}(\mathbf{r}')] = 0 = [\hat{\psi}^+(\mathbf{r}),\hat{\psi}^+(\mathbf{r}')] \tag{4.19}$$

回顾（4.6）可知，如果我们假设与复场的正则坐标与动量 $\psi(\mathbf{r})$ 和 $i\hbar\psi(\mathbf{r})$ 对应的算符满足通常的对易关系，

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), i\hbar\hat{\psi}^+(\mathbf{r}')] = i\hbar\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{4.20}$$

我们将得到相同的结果，即式（4.19）。

正如我们很快将看到的，对易关系（4.19）基本上就是（嗯，几乎就是）我们为理解算符 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ 和 $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})$ 如何作用于任意波函数所需要了解的一切。

4.2.3 自由薛定谔场的哈密顿量

哈密顿算符可直接由式 (4.3) 得到，只需将 $\psi(\mathbf{r})$ 和 $\psi^*(\mathbf{r})$ 替换为算符 $\hat{}\psi(\mathbf{r})$ 和 $\hat{}\psi^+(\mathbf{r})$。文献中通常会看到两种表达式。

$$H_{op} = \frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r \nabla\hat{\psi}^+(\mathbf{r})\nabla\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{4.21}$$

or

$$H_{op} = \int d^3r \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}\right)\hat{\psi}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3r \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\nabla^2\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{4.22}$$

显然，这种差异只是在远距离处的一个“表面项”。这是一个算符值项，因此，忽略这种差异意味着要求场的所有波函数在这些“表面”算符作用下都产生零。

还要注意上面表达式中算符的排列顺序，其中这种算符排列顺序（称为“正规序”）确保该理论的真空具有零能量。

4.2.4 本征态。场量子是自由的非相对论粒子

既然已经确定了该理论的哈密顿算符形式，我们接下来就应求解该理论的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H_{op}|\Psi(t)\rangle \tag{4.23}$$

注意——要解的是量子薛定谔场的薛定谔方程!

正则模

由于 H_{op} 与时间无关，我们可以用标准方法求解上述方程：首先求出薛定谔场哈密顿量的本征函数，也就是求解

$$H_{op}\Psi = E\Psi \tag{4.24}$$

为此，我们将转到场的正则模。如我们对有限自由度系统所知，当原有自由度变换为正则模时，二次型哈密顿量会变成若干独立项之和。

为了求出正则模，我们回顾一下：它们是经典方程的特殊解，其中物理系统的所有自由度都以相同的频率振荡。在本例中，经典方程就是场方程（4.2）。具有给定频率的解 $\psi(\mathbf{r}\ t) = u(\mathbf{r})\exp(-i\omega t)$ 满足

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 u(\mathbf{r}) + \hbar\omega\, u(\mathbf{r}) = 0 \tag{4.25}$$

并且可以选为平面波

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \ \text{ with } \ \hbar\omega = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{4.26}$$

其中我们假设在一个非常大的体积 Ω 中采用通常的周期性边界条件

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{\Omega^{1/3}}(n_x, n_y.n_z) \quad \text{with} \;\; n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, ...$$

现在我们使用这些正则模展开场算符

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}^{+}_{\mathbf{k}} u^{*}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}^{+}_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \tag{4.27}$$

上述场算符展开式中的系数$\hat{}a_{\mathbf{k}}$ 和$\hat{a}^{+}\mathbf{k}$ 显然是算符。这个展开必须被视为从一个由 $2 \times \infty^3$ 算符 $\hat{}\psi(\mathbf{r})$, $\hat{}\psi^{+}(\mathbf{r})$ 构成的正则集合到另一个由 $2 \times \infty^3$ 算符$\hat{}a_{\mathbf{k}}$, $\hat{a}^{+}\mathbf{k}$ 构成的正则集合的变换。利用 $^{u}\mathbf{k}$'s 的正交归一性，很容易将（4.27）反演

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int d^3r \, \hat{\psi}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad , \quad \hat{a}^{+}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int d^3r \, \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

利用对易关系（4.19），可以进一步求出 $\hat{}a_{\mathbf{k}}$ 与 $\hat{a}^{+}\mathbf{k}'$ 之间的对易关系,

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}} \, , \, \hat{a}^{+}_{\mathbf{k}'}] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \quad , \quad [\hat{a}_{\mathbf{k}} \, , \, \hat{a}_{\mathbf{k}'}] = 0 = [\hat{a}^{+}_{\mathbf{k}} \, , \, \hat{a}^{+}_{\mathbf{k}'}] \tag{4.28}$$

这当然表达了每个$\mathbf{k}$ 的正则模所具有的谐振子特性，以及不同 $\mathbf{k}$ 之间的独立性。

对角化场哈密顿量

将展开式 (4.27) 代入哈密顿量方程 (4.22)，我们得到一组彼此独立（可对易）的振子

$$H_{op} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{a}^{+}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \tag{4.29}$$

其中我们将振子量子的能量记为

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \tag{4.30}$$

据此，很容易求出每一项的本征函数和本征能量。显然，这个 H_{op} 的本征态是熟悉的类谐振子态的乘积（参见附录，式 (4.159)）

$$|\{n_{\mathbf{k}}\}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} |n_{\mathbf{k}}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \frac{(\hat{a}^{+}_{\mathbf{k}})^{n_{\mathbf{k}}}}{\sqrt{n_{\mathbf{k}}!}} |0\rangle \tag{4.31}$$

其本征值为

$$E_{\{n_{\mathbf{k}}\}} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}\, n_{\mathbf{k}} \quad \text{with each } n_{\mathbf{k}} = 0, 1, 2, \ldots \tag{4.32}$$

因此，自由薛定谔场的本征能量是对模式 $^{u}\mathbf{k(r)}$ 求和所得，每个模式包含整数个能量为 $^{\epsilon}\mathbf{k}$ 的量子 $^{n}\mathbf{k}$ 。要理解这些量子的物理性质，可以探究它们的动量是什么。为此，必须找到相应的算符。我们将在下一节讨论这个问题。

我们注意到，基态对应于所有 $^{n}\mathbf{k} = 0$，即它是真空态$|0\rangle$。其能量等于零，这是由我们采用的 H_{op} 的正规序形式（式 (4.22)）所保证的。还要指出，在这一表述中，我们所需的真空态的唯一性质是：任意一个算符 $\hat{}a\mathbf{k}$ 作用于它时，结果都为零；并且它是归一化的

$$\hat{a}_{\mathbf{k}}|0\rangle = 0 \ , \ \langle 0|0\rangle = 1 \tag{4.33}$$

还要指出，该理论最一般的态是本征态 (4.31) 的线性组合

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{n_{\mathbf{k}}\}} C_{\{n_{\mathbf{k}}\}} |\{n_{\mathbf{k}}\}\rangle \tag{4.34}$$

它们可能会出现，例如作为场的含时薛定¨谔方程的解

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = H_{op}|\Psi(t)\rangle \tag{4.35}$$

其中系数按通常的方式随时间变化

$$C_{\{n_{\mathbf{k}}\}}(t) = C_{\{n_{\mathbf{k}}\}}(0) \exp(-iE_{\{n_{\mathbf{k}}\}} t/\hbar)$$

我们注意到，上述关于$^{C_{\{n_{\mathbf{k}}\}}}$ 的表达式中的粒子数为

$$N = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}$$

需要指出的是，在形式体系中，从未出现要求 N固定不变的规定，即要求它在例如一般波函数 $|\Psi\rangle$的表达式中具有相同的值。原则上，该形式体系允许存在具有不同粒子数的相干叠加的态。我们将在最后一节讨论这一问题。

正则模的简并。球面波

式 (4.26) 中的正则模显然具有无限简并性，对于所有具有相同 $k = |\mathbf{k}|$的$\mathbf{k}$ ，其频率均为ω 。这当然源于自由薛定¨谔方程 (4.25) 的解所具有的简并性。这种简并意味着，对于给定的 k，还可以选择其他集合。熟悉的球面波或柱面波，而不是平面波，便是这类集合的例子。

让我们来考虑球面波解集。

$$u_{klm}(\mathbf{r}) = R_{kl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

其中，l，m 角动量及其投影（对于自由粒子），以及 $R_{kl}(r)$ 和$Y_{lm}(\theta,\ \phi)$ 分别为径向部分和角向部分[2]。我们可以利用这样的正则模展开场算符[3]

$$\begin{aligned}\hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \sum_{klm}\hat{a}_{klm}\,u_{klm}(r,\theta,\phi)\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}) &= \sum_{klm}\hat{a}^{+}_{klm}\,u^{*}_{klm}(r,\theta,\phi)\end{aligned} \tag{4.36}$$

其中算符为

$$\hat{a}_{klm} = \int d^3r\hat{\psi}(\mathbf{r})\,u^{*}_{klm}(r,\theta,\phi)\ ,\ \ \hat{a}^{+}_{klm} = \int d^3r\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\,u_{klm}(r,\theta,\phi)$$

并且（容易验证）其对易关系等价于式（4.28），只是将指标 klm 和 $k'l'm'$ 替换了$\mathbf{k}$和$\mathbf{k}'$。

将展开式（4.36）代入哈密顿量式（4.22），得到

$$H_{op} = \sum_{klm}\epsilon_{klm}\hat{a}^{+}_{klm}\hat{a}_{klm} \tag{4.37}$$

与平面波的情形一样，它是由彼此独立（对易）的振子组成的总和，其量子的能量仅取决于 k

$$\epsilon_{klm} = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

即等于平面波量子的能量——反映了正则模的简并性。

4.2.5 动量和角动量

场动量

现在我们讨论薛定谔场的总（机械）动量。要找到它的表达式，我们可以回到经典场并使用诺特定理。我们更倾向于通过考虑平移 $\mathbf{r}\to\mathbf{r}+\mathbf{a}$ 的生成元来求得它，其中 $\mathbf{a}$ 是一个常矢量。场算符的变化为 $\hat{}\psi(\mathbf{r})\to\hat{}\psi(\mathbf{r}+\mathbf{a})$ 和 $\hat{}\psi^{+}(\mathbf{r})\to\hat{}\psi^{+}(\mathbf{r}+\mathbf{a})$。因此，我们要寻找算符 $\mathbf{P}_{op}$，使得

$$e^{-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}_{op}/\hbar}\left\{\begin{array}{c}\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}e^{i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}_{op}/\hbar} = \left\{\begin{array}{c}\hat{\psi}(\mathbf{r}+\mathbf{a})\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}+\mathbf{a})\end{array}\right\} \tag{4.38}$$

[2]回顾自由粒子在球坐标中的定态薛定谔方程的解，参见 Sakurai，《现代量子力学》，第3.7节，Addison-Wesley，1994 年。[3]为方便起见，我们假设通过在一个大的球形盒中施加边界条件，使 k 值离散化

对于无穷小 $\mathbf{a}$ 这是

$$(1-i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}_{op}/\hbar)\left\{\begin{array}{c}\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}(1+i\mathbf{a}\cdot\mathbf{P}_{op}/\hbar)=\left\{\begin{array}{c}(1+\mathbf{a}\cdot\nabla)\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ (1+\mathbf{a}\cdot\nabla)\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}$$

这意味着必须具有对易子

$$\left[\mathbf{P}_{op}\,,\left\{\begin{array}{c}\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}\right]=\left\{\begin{array}{c}i\hbar\nabla\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ i\hbar\nabla\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}$$

这可以通过以下表达式实现。

$$\mathbf{P}_{op}=\int d^{3}r'\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'})\hat{\psi}(\mathbf{r}') \tag{4.39}$$

确实

$$\left[\mathbf{P}_{op},\left\{\begin{array}{c}\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}\right]=\int d^{3}r'\left[\begin{array}{c}\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'})\hat{\psi}(\mathbf{r}')\,,\,\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'})\hat{\psi}(\mathbf{r}')\,,\,\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right]=$$

$$=\quad\int d^{3}r'\left\{\begin{array}{c}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'}\hat{\psi}(\mathbf{r}')\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\end{array}\right\}=\left\{\begin{array}{c}i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}$$

其中，在最后一个等式的第二行中，我们使用了分部积分。

场量子是自由非相对论性粒子

动量 $\mathbf{P}^{op}$ 与哈密顿量 H_{op}对易，见式 (4.22)

$$[H_{op},\mathbf{P}_{op}]=0 \tag{4.40}$$

用场算符 $\hat{}\psi(\mathbf{r})$ 和 $\hat{}\psi^{+}(\mathbf{r})$ 表示 H_{op} 和 $\mathbf{P}^{op}$，并明确验证这一点，是一项很好的练习，这里留给读者完成。从物理上说，这是 H_{op} 在平移下不变的结果。

让我们用正规模算符 $\hat{}a_{\mathbf{k}}$ 和 $\hat{a}^{+}\mathbf{k}'$ 来表示 $\mathbf{P}^{op}$。将展开式 (4.27) 代入式 (4.39)，得到

$$\mathbf{P}_{op}=\sum_{\mathbf{k}}\hbar\mathbf{k}\;\hat{a}^{+}_{\mathbf{k}'}\hat{a}_{\mathbf{k}'} \tag{4.41}$$

将此表达式与式 (4.29) 比较，便可直接看出 $\mathbf{P}^{op}$ 确实与H_{op}对易。它具有相同的本征函数 (4.31)，其本征值为

$$\mathbf{P}_{\{n_{\mathbf{k}}\}}=\sum_{\mathbf{k}}\hbar\mathbf{k}\;n_{\mathbf{k}} \tag{4.42}$$

这表明，每个能量为 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 的场量子都携带动量 $p_{\mathbf{k}}=\hbar\mathbf{k}$。能量—动量关系式 $\epsilon(\mathbf{p})$ 可由 $\epsilon_{\mathbf{k}}=\hbar^{2}\mathbf{k}^{2}/2m$ 对 $\mathbf{k}$ 的显式依赖关系得到

$$\epsilon_{\mathbf{k}}(\mathbf{p})=\frac{|\mathbf{p}_{\mathbf{k}}|^{2}}{2m} \tag{4.43}$$

这就是熟悉的非相对论粒子的能量-动量关系式。这表明，自由薛定谔场的量子表现得像这样的粒子。

场角动量

类比于场动量，我们可以通过考虑无穷小旋转来求出场角动量算符的表达式$\mathbf{r} \to \mathbf{r} + \delta\phi\ \mathbf{n} \times \mathbf{r}$其中 $\delta\phi$ 为旋转角，$\mathbf{n}$ 为沿旋转轴的单位矢量（遵循通常的"右手定则"约定）。与动量的情况一样，我们应当寻找算符$\mathbf{L}_{op}$，使得

$$e^{-i\delta\phi\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}_{op}/\hbar}\left\{\begin{array}{c}\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}e^{i\delta\phi\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}_{op}/\hbar}=\left\{\begin{array}{c}\hat{\psi}(\mathbf{r}+\delta\phi\mathbf{n}\times\mathbf{r})\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}+\delta\phi\mathbf{n}\times\mathbf{r})\end{array}\right\} \tag{4.44}$$

对于无穷小的 $\delta\phi$，很容易得出结论：$\mathbf{L}_{op}$ 必须满足

$$\left[\mathbf{n}\cdot\mathbf{L}_{op}\,,\left\{\begin{array}{c}\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}\right]=\left\{\begin{array}{c}i\hbar(\mathbf{n}\times\mathbf{r})\cdot\nabla\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ i\hbar(\mathbf{n}\times\mathbf{r})\cdot\nabla\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}=\left\{\begin{array}{c}i\hbar\mathbf{n}\cdot(\mathbf{r}\times\nabla)\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ i\hbar\mathbf{n}\cdot(\mathbf{r}\times\nabla)\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}$$

这是通过以下表达式实现的

$$\mathbf{L}_{op}=\int d^{3}r'\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')[\mathbf{r}'\times(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'})]\hat{\psi}(\mathbf{r}') \tag{4.45}$$

确实。

$$\begin{aligned}\left[\mathbf{L}_{op},\left\{\begin{array}{c}\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}\right]&=\int d^{3}r'\left[\begin{array}{c}\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')[\mathbf{r}'\times(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'})]\hat{\psi}(\mathbf{r}')\,,\ \hat{\psi}(\mathbf{r})\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')[\mathbf{r}'\times(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'})]\hat{\psi}(\mathbf{r}')\,,\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right]=\\ =\quad&\int d^{3}r'\left\{\begin{array}{c}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')i\hbar(\mathbf{r}'\times\nabla_{\mathbf{r}'})\hat{\psi}(\mathbf{r}')\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')[-i\hbar(\mathbf{r}'\times\nabla_{\mathbf{r}'})]\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\end{array}\right\}=\left\{\begin{array}{c}i\hbar(\mathbf{r}\times\nabla_{\mathbf{r}})\hat{\psi}(\mathbf{r})\\ i\hbar(\mathbf{r}\times\nabla_{\mathbf{r}})\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\end{array}\right\}\end{aligned} \tag{4.46}$$

其中，在最后一个等式的第二行中，我们使用了分部积分。

角动量算符与自由场哈密顿量对易，见式。 (4.22)

$$[H_{op},\mathbf{L}_{op}]=0 \tag{4.47}$$

建议读者完成这一计算，其结果基本上可由这些算符表达式中出现的"第一量子化" $h_0 = -\hbar^2\nabla^2/2m$ 与$\mathbf{l} = \mathbf{r} \times(-i\hbar\nabla)$的对易性推出。当然，从物理上看，这反映了自由场 H_{op} 在旋转下的不变性。读者还可以进行另一项有用的计算，验证$\mathbf{L}_{op}$各分量的标准对易关系是否成立。

$$[L_{op,i}\,,\,L_{op,j}]=i\hbar\sum_{n}\epsilon_{ijn}\,L_{op,n} \tag{4.48}$$

同样，出现在$L_{op,i}$表达式中的$\mathbf{l}_i = [\mathbf{r} \times(-i\hbar\nabla)]_i$'的相应对易子，正是这一结果的"原因"。

在将场动量算符 $\mathbf{P}_{op}$ 变换到平面波基底后，我们可以进一步考察如何将场角动量算符 $\mathbf{L}_{op}$（式 (4.45)）中的场算符变换到式 (4.36) 所给出的球面波正规模基底$u_{klm}(\mathbf{r})$。与 $\mathbf{P}_{op}$ 不同，各个不同对象之间的不对易性#+#+#+#+

L的组成部分$_{op}$ 会导致不同$L_{op,j}$的表达式形式。最简单的是$L_{op,z}$

$$L_{op,z} = \sum_{klm} \hbar m \, \hat{a}^{+}_{klm} \hat{a}_{klm}$$

$L_{op,\ x}$和$L_{op,\ y}$的表达式将包含非对角 $m \to m \pm 1$项。具体推导留给读者完成。

4.3 添加外势

因此，在这一阶段得出的结论是：量子化的自由薛定谔场描述了一组量子，这些量子的行为就像自由运动的、相互不作用的非相对论性量子粒子。我们还注意到，这些粒子是全同的（关于这一点的更详细讨论见以下各节）。因此，自然要问：应如何引入粒子之间的相互作用，以及如何解释它们的统计?

4.3.1 哈密顿量

我们首先考虑存在外势时的薛定谔场。场方程是熟悉的

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r},t) \equiv h\psi(\mathbf{r},t) \tag{4.49}$$

其中 h 定义为

$$h = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \tag{4.50}$$

按照自由场情形下的处理（参见式 (4.2)），我们将该方程及其复共轭视为一对哈密顿方程，其中 ψ**(r)** 和 $i\hbar\psi^*$**(r)** 为正则变量，哈密顿量如下

$$H = \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 + U(\mathbf{r})|\psi(\mathbf{r})|^2 \right] \tag{4.51}$$

事实上，由

$$\begin{aligned} \delta H \quad = \quad & \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla\psi^*(\mathbf{r}) \nabla\delta\psi(\mathbf{r}) + \nabla\delta\psi^*(\mathbf{r}) \nabla\psi(\mathbf{r}) \right) + \right. \\ & \left. + U(\mathbf{r}) \left(\psi^*(\mathbf{r})\delta\psi(\mathbf{r}) + \delta\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \right) \right] \end{aligned}$$

我们得到关于 $i\hbar\psi^*$**(r)** 和 ψ**(r)** 的哈密顿方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi(\mathbf{r})}{\partial t} = \frac{\delta H}{\delta[i\hbar\psi^*(\mathbf{r})]} \quad &= \quad \frac{1}{i\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \right] \\ \frac{\partial[i\hbar\psi^*(\mathbf{r})]}{\partial t} = -\frac{\delta H}{\delta\psi(\mathbf{r})} \quad &= \quad -\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}) \right] \end{aligned}$$

正确写出场方程（4.49）及其复共轭式。

在此基础上，我们将按照目前已经熟悉的模式对这一场进行量子化

$$\psi(\mathbf{r}) \to \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad , \quad \psi^*(\mathbf{r}) \to \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \tag{4.52}$$

具有对易关系（4.19）和哈密顿算符

$$H_{op} = \int d^3r \left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla\hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \cdot \nabla\hat{\psi}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}) \right]$$

或者用等价形式表示（参见式（4.22）后的注释）

$$H_{op} = \int d^3r \ \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \hat{\psi}(\mathbf{r}) \equiv \int d^3r \ \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) h \hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{4.53}$$

其中 h 如式（4.50）所定义。与自由场的情形一样，理论的一般目标是求解薛定谔方程（4.35），但哈密顿算符由式（4.53）给出。与往常一样，求解这一问题的一般方法是找出该算符的本征函数。

在此之前，我们注意到，用哈密顿量 H_{op}（式（4.53））计算得到的场算符的海森堡方程，在形式上与我们已量子化的波动方程（4.49）一致（本应如此）

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[\hat{\psi}(\mathbf{r},t), H_{op} \right] = h\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$$

其中 h 如式（4.50）所定义。此式中对易子的计算可以通过将算符$\hat{}\psi(\mathbf{r}\ t)$依次与表达式 $\int d^3r' \hat{}\psi^+(\mathbf{r}',\ t)h\hat{}\psi(\mathbf{r}',\ t)$中的各项对易来高效完成，以求 H_{op}。由于$\hat{}\psi(\mathbf{r}\ t)$唯一非零的对易子是与$\hat{}\psi^+(\mathbf{r}',\ t)$的对易子，因此我们得到

$$\left[\hat{\psi}(\mathbf{r},t), H_{op} \right] = \int d^3r' \ \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')h\hat{\psi}(\mathbf{r}',t) = h\hat{\psi}(\mathbf{r},t)$$

$\hat{}\psi^+(\mathbf{r}\ t)$ 的海森堡方程在形式上与式 (4.49) 的复共轭相同。

4.3.2 本征态。场量子是外势中的粒子

要找出上述哈密顿量的本征函数

$$H_{op}\Psi = E\Psi$$

我们借鉴自由场的经验，寻找基底 $u_i(\mathbf{r})$，以此展开场算符 $\hat{}\psi(\mathbf{r})$，使 H_{op} 成为一系列彼此解耦且对易的项之和，就像自由场哈密顿量的式（4.29）那样。在此之前，我们先简要讨论基变换的一般方面。

基变换

从 $\hat{\psi}$**(r)** 和 $\hat{\psi}^+$**(r)** 到 $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ 和 $\hat{a}^+\mathbf{k}$ 的变换，可以看作更一般的算符变换的一个特例

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_i \hat{a}_i u_i(\mathbf{r}) \quad , \quad \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) = \sum_i \hat{a}_i^+ u_i^*(\mathbf{r}) \tag{4.54}$$

其中 $\{u_i$**(r)**$\}$ 是任意完备正交基，即满足以下条件的一组函数

$$\begin{aligned} \int d^3r\, u_i^*(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}) &= \delta_{ij} \quad \text{orthonormality} \\ \sum_i u_i(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \quad \text{completeness} \end{aligned} \tag{4.55}$$

变换求逆

$$\hat{a}_i = \int d^3r\, \hat{\psi}(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}) \quad , \quad \hat{a}_i^+ = \int d^3r \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r}) \tag{4.56}$$

并利用场算符 $\hat{\psi}$**(r)** 和 $\hat{\psi}^+$**(r)** 的对易关系 **(4.19)**，以及基组 $\{u_i$**(r)**$\}$ 的正交性，可以发现 $\hat{a}_i, \hat{a}_i^+$ 的对易关系仍然是正则的

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{ij} \quad , \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 = [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] \tag{4.57}$$

值得注意的是，展开式 **(4.54)** 可以视为将算符的"向量"从一个基变换到另一个基。例如，算符值希尔伯特函数空间中的向量 $\hat{\psi}_{\mathbf{r}}$ （即集合 $\{\hat{\psi}_{\mathbf{r}}\}$，其中 **r** 视为指标）借助变换矩阵 $\{u_{\mathbf{r}\ i}\}$ （其中 u_i**(r)** 中的 **r** 视为指标），变换为该空间中的向量 $\{\hat{a}_i\}$。集合 $\{u_i$**(r)**$\}$ 的正交关系和完备关系 **(4.55)**，正是矩阵 $\{u_{\mathbf{r}\ i}\}$ 幺正性的体现。在附录中，我们将回顾算符 $\hat{a}_j$ 和 $\hat{a}_i^+$ 对于一般基组 $\{u_i$**(r)**$\}$ 的性质，以及它们所生成的量子态。

将展开式（4.54）代入 H_{op} 的表达式（4.53），我们得到

$$H_{op} = \sum_{ij} h_{ij} \hat{a}_i^+ \hat{a}_j \tag{4.58}$$

其中

$$h_{ij} \equiv \int d^3r\, u_i^*(\mathbf{r}) h u_j(\mathbf{r})$$

是 h 在基底 u_i（**r**）中的矩阵元。

正则模

现在我们选择 u_i**(r)**，使其成为下式的解

$$h u_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i u_i(\mathbf{r}) \tag{4.59}$$

这些解显然是由线性方程（4.49）描述的场的正则模。事实上，场构型 $\psi(\mathbf{r}\ t) = u_i(\mathbf{r})$ $\exp(-i\epsilon_i t/\hbar)$ 显然满足经典场方程（4.49）；也就是说，在这些构型中，所有场自由度（由**r**标记）都以相同的频率 $\epsilon_i/\hbar$ 振荡。

我们注意到，在非相互作用极限下 $U(\mathbf{r}) = 0$ 算符 h 化为

$$h_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

而 $u_i(\mathbf{r})$ 变成平面波 $^{u}\mathbf{k}(\mathbf{r})$，式 (4.26)。

需要注意， h_0 和 h 是作用于**r**函数的算符。因此，它们与作用于场的态 $\hat{}\psi$上的算符 H_{op} 有很大不同，例如式 (4.34) 中的态。正如前面所指出的，场算符一方面是场的态空间中的算符（在这一作用中，**r** 只是标记这些算符的指标），另一方面又是**r** 的函数，算符 h 作用于这些函数。一个或许有帮助的类比是量子化电磁场，其中$\mathbf{E}^{op}(\mathbf{r})$和$\mathbf{B}^{op}(\mathbf{r})$的分量既是算符，又是**r**的函数。在当前语境下，出于将在下文各节中逐渐明了的原因， h_0 和 h这样的算符通常称为单粒子算符，而$^{u}\mathbf{k}(\mathbf{r})$或 $u_i(\mathbf{r})$这样的函数基称为单粒子基。

在 h 的本征态基底中，我们有

$$h_{ij} = \epsilon_i \delta_{ij}$$

因此，与自由场情形一样， H_{op} 是一组独立（彼此对易）的振子的总和

$$H_{op} = \sum_i \epsilon_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \tag{4.60}$$

它们对应于正则模（式 (4.59)）振幅的“振动”。 H_{op} 的本征函数是这些场振子的本征态 $|n_i\rangle$ 的乘积，即算符的本征态

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \tag{4.61}$$

参见附录式 (4.159)；本征能量则是相应的求和

$$|\Psi_{\{n_i\}}\rangle \equiv |n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \prod_i |n_i\rangle = \prod_i \frac{(\hat{a}_i^+)^{n_i}}{\sqrt{n_i!}}|0\rangle \quad , \quad E_{\{n_i\}} = \sum_i \epsilon_i n_i \tag{4.62}$$

总之，在存在外势的情况下，式 (4.49) 所描述的 Schr¨odinger 场的量子化，给出了由方程 (4.59) 的解所确定的正则模的一组独立量子。由于该方程只是一个单粒子在势 U (**r**) 中的 Schr¨odinger 方程，因此我们得到了一种描述由这类粒子组成的系统的方法，这些粒子处于该势的本征态 u_i(**r**) 中。

粒子数算符。 $U(1)$ 对称性

我们注意到，算符 $\hat{}n_i$（式 (4.61)）“计数”每个单粒子态 u_i（**r**）中的粒子数 n_i。在自由场的情形下，我们也有类似的算符 $\hat{}^{n}\mathbf{k}$ ，参见式 (4.29)。它

有必要且重要的是引入总粒子数算符

$$N_{op} = \sum_i \hat{n}_i \tag{4.63}$$

它"测量"所有 n_i 的总和

$$N_{op}|\Psi_{\{n_i\}}\rangle = N_{op}|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle = N|n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle \text{ with } N = \sum_i n_i \tag{4.64}$$

这个算符在任意完备正交基中具有相同的形式

$$N_{op} = \sum_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i = \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} = \int d^3r\, \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{4.65}$$

这一点可通过在最后一个积分中代入具有不同组 $u_i(\mathbf{r})$ 的展开式 (4.54) 加以验证。

哈密顿量 (4.60) 的本征函数 (4.62) 同时也是数算符 (4.63) 的本征函数，这一结果与 N_{op} 和哈密顿量对易这一事实有关

$$[H_{op}, N_{op}] = 0 \tag{4.66}$$

因此，粒子数是该理论中的一个守恒量子数，而不是从"外部"规定的固定量。

注意到， H_{op} 与各个模式数算符 $\hat{n}_i$对易，见式（4.61）。然而，这仅适用于场的本征模，也就是式（4.59）中的单粒子态。 N_{op} 的守恒是一种更一般的性质，与基底无关，参见式（4.65）。直观而言，这与算符 $\hat{a}_j$ 和 $\hat{a}_i^+$ 在一般哈密顿量（4.58）中的出现方式有关；其根源可追溯至场哈密顿量（4.53）包含场算符 $\hat{\psi}^+$ 和 $\hat{\psi}$的方式。形式上，这体现为表达式（4.53）在全局（与坐标无关的）相位变换下保持不变

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) \;\to\; e^{i\alpha}\hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad , \quad \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \;\to\; e^{-i\alpha}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \tag{4.67}$$

在更一般的语境中，这种变换称为全局 $U(1)$ 规范变换，而算符 N_{op} 是它的生成元。这意味着

$$e^{-i\alpha N_{op}}\hat{\psi}(\mathbf{r})e^{i\alpha N_{op}} = e^{i\alpha}\hat{\psi}(\mathbf{r}) \;\; , \;\; e^{-i\alpha N_{op}}\hat{\psi}^+(\mathbf{r})e^{i\alpha N_{op}} = e^{-i\alpha}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \tag{4.68}$$

和往常一样，要证明这一点，只需考虑无穷小的 α。只需对 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ 进行证明，因为 $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})$ 的关系式只是前者的厄米共轭。我们有

$$(1 - i\alpha N_{op})\hat{\psi}(\mathbf{r})(1 + i\alpha N_{op}) = (1 + i\alpha)\hat{\psi}(\mathbf{r}) \;\to\; [N_{op}, \hat{\psi}(\mathbf{r})] = -\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{4.69}$$

简单计算即可证明

$$[N_{op}, \hat{\psi}(\mathbf{r})] = \int d^3r' [\hat{\psi}^+(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}'), \hat{\psi}(\mathbf{r})] = -\int d^3r' \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}') = -\hat{\psi}(\mathbf{r})$$

利用式 (4.68)，根据 H_{op} 在 (4.67) 下的不变性，并记为

$$U_{op}(\alpha) \equiv e^{-i\alpha N_{op}}$$

有

$$\begin{aligned} U_{op}(\alpha)H_{op}U_{op}^{+}(\alpha) &= U_{op}(\alpha)\left[\int d^3r\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})h\hat{\psi}(\mathbf{r})\right]U_{op}^{+}(\alpha) = \\ &= \int d^3r\ U_{op}(\alpha)\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})U_{op}^{+}(\alpha)\ h\ U_{op}(\alpha)\hat{\psi}(\mathbf{r})U_{op}^{+}(\alpha) = H_{op} \end{aligned}$$

对于无穷小的 α

$$U_{op}(\alpha)H_{op}U_{op}^{+}(\alpha) \to (1-i\alpha N_{op})H_{op}(1+i\alpha N_{op}) = (H_{op} - i\alpha[N_{op}, H_{op}]) \tag{4.70}$$

并使其等于 H_{op}，必须有公式（4.66）。

回到 H_{op} 的本征函数和本征值，我们注意到，具有此 H_{op} 的薛定谔方程（4.35）的一般解是一个熟知的线性组合

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\{n_i\}} C_{\{n_i\}}|\Psi_{\{n_i\}}\rangle e^{-E_{\{n_i\}}t/\hbar} \tag{4.71}$$

其中（如往常一样），系数 $C_{\{n_i\}}$ 由 $|\Psi（t）\rangle$ 在$t = 0$的初始条件确定。我们还注意到，从原理上说，该形式体系允许存在具有不同粒子数$N = \sum_i n_i$的态的相干叠加。选择固定的 N，即使上述解中所有分量的该量都相同，属于设定适当初始条件的自由；这一条件由H_{op} 与 N_{op}的可交换性在时间演化中得到支持（保持守恒）。

4.3.3 使用场算符工作

式(4.65)中用场算符表示 N_{op} 的最后一个等式，将N_{op} 表示为对粒子数算符 $\hat{n}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})d^3r$ 的总和（积分），这些算符对应于位于$\mathbf{r}$处的无穷小体积 d^3r 。这表明

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{4.72}$$

这就是粒子密度算符。这也解释了场算符 $\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})$ 的物理意义。事实上，让我们考虑一个态

$$|\mathbf{r}'\rangle \equiv const\,\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')|0\rangle \tag{4.73}$$

其中我们引入了一个用于归一化的乘法常数，见下文。让我们用算符 $\hat{\rho}(\mathbf{r})$ 作用于这个态

$$\hat{\rho}(\mathbf{r})|\mathbf{r}'\rangle = const\,\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')|0\rangle = const\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')|0\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|\mathbf{r}'\rangle \tag{4.74}$$

其中，我们将 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ 与其右侧的 $\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')$ 对易，随后使用了 $\hat{\psi}(\mathbf{r})|0\rangle = 0$。结果表明，$\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})$ 作用于真空态时，会在位置 $\mathbf{r}$ 处产生一个粒子。更准确地说，它会在该位置产生 δ型粒子密度。

如果有多个 $\hat{}\psi^+$ 作用于真空，会发生什么？例如，考虑态

$$|\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N\rangle = const_N\,\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1)\dots\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_N)|0\rangle \tag{4.75}$$

让我们用 $\hat{}\rho$**(r)** 作用于这个态。与单粒子情形一样，我们先将 $\hat{}\psi$**(r)** 逐个越过其右侧的 $\hat{}\psi^+$**(r**$_a$**)**'s，一直移到真空态，从而得到结果。下面会在多个地方用到这一计算，因此我们详细写出

$$\begin{aligned}
&\hat{\psi}(\mathbf{r})\prod_{a=1}^{N}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)|0\rangle = [\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)+\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1)\hat{\psi}(\mathbf{r})]\prod_{a\neq 1}^{N}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)|0\rangle = \\
&= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)\prod_{a\neq 1}^{N}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)+\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1)[\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2)+\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_2)\hat{\psi}(\mathbf{r})]\prod_{a=3}^{N}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)]|0\rangle = \\
&= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)\prod_{a\neq 1}^{N}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)+\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2)\prod_{a\neq 2}^{N}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)+\dots+ \\
&+\prod_{a=1}^{N-1}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)[\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_N)+\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_N)\hat{\psi}(\mathbf{r})]|0\rangle = \\
&\qquad = \left[\sum_{b=1}^{N}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_b)\prod_{a\neq b}^{N}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)\right]|0\rangle
\end{aligned} \tag{4.76}$$

用 $\hat{}\psi^+$**(r)** 作用于此式，并利用每一项中的狄拉克δ函数将其中的 $\mathbf{r}\ \to\mathbf{r}_b$ 替换掉，可得

$$\hat{\rho}(\mathbf{r})|\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N\rangle = [\sum_{a=1}^{N}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)]|\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N\rangle$$

即在位置 $\mathbf{r}_a, a=1,\dots,N$处有 N 个粒子（δ 函数型粒子密度）。同理可以证明，$\hat{}\psi^+$**(r)** 作用于任意一般态（下文将讨论）时，会在 **r** 处产生一个粒子。我们还注意到，结果 **(4.76)** 表明，如果某个粒子的坐标与 **r**重合，$\hat{}\psi$**(r)** 就会摧毁（湮灭）该粒子。

需要注意的是，只有当 $\hat{}\psi^+$ 和 $\hat{}\psi$ 向右作用时，它们才会产生和湮灭粒子。向左作用时，结果正好相反——它们相应地湮灭和产生粒子。例如，态 $\langle\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N|$ 是 $|\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N\rangle$ 的厄米共轭，因此

$$\langle\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N| = [const_N\ \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1)\dots\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_N)|0\rangle]^+ = \langle 0|\hat{\psi}(\mathbf{r}_N)\dots\hat{\psi}(\mathbf{r}_1)(const_N)^* \tag{4.77}$$

因为 $[\hat{}\psi^+]^+ = \hat{}\psi$。因此，态 $\langle\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N|$ 是通过将 $N\hat{}\psi$ 作用于真空 $\langle 0|$ 的左侧而得到的。

$|\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N\rangle$ 的范数是多少？以一个粒子态方程为例并计算 (4.73)

$$\langle\mathbf{r}'|\mathbf{r}\rangle = |const|^2\langle 0|\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}^+(\mathbf{r})|0\rangle = |const|^2\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

结果表明，这样的态不可归一化。这并不奇怪，因为存在一连续谱的态，由**r**标记。正如更熟悉的动量情形一样

由$\mathbf{p}$ 标记的态。此外，动量态不可归一化。通常的正则化方法是通过引入非常大但有限的体积，使$\mathbf{p}$ 离散化，也就是引入红外截止。同样，也可以通过引入由离散的 $\mathbf{r}$构成的晶格，使 $\mathbf{r}$ 离散化。如果不这样做——那么可以按方便的方式进行归一化。

正如我们将在下一节看到的，态 $|\mathbf{r}\rangle$ 或其 N粒子推广形式 $|\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\rangle$（式（4.75））， 最常见的用途使得将这些态的归一化选为以下形式更加方便:

$$const_N = \frac{1}{\sqrt{N!}}$$

4.4 波函数。算符。与一次量子化描述的比较

薛定¨谔场的量子化（出于显而易见的原因）被称为第二量子化。对于由方程（4.49）描述的场，这似乎为处于外势 U（$\mathbf{r}$）中的量子非相互作用粒子提供了另一种描述。

这里我们想了解这种描述是否确实完整，以及它与例如由波函数$\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N,t)$ 遵循 N粒子薛¨定谔方程的标准量子力学描述之间有何关联

$$i\hbar\frac{\partial\Phi(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N,t)}{\partial t} = \sum_{a=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_a^2 + U(\mathbf{r}_a)\right]\Phi(\mathbf{r}_a,...,\mathbf{r}_N,t) \tag{4.78}$$

4.4.1 二次量子化中的波函数

坐标表象。二次量子化与一次量子化

前一节引入的态 $|\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\rangle$（参见公式（4.75））构成了在二次量子化中表示一般N个粒子波函数的非常方便的基底

$$|\Phi\rangle = \int\prod_{a=1}^{N} d^3r_a\ \Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N)|\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\rangle \tag{4.79}$$

对该表达式的解释非常清楚——我们有处于不同坐标位置 $\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N$的 N粒子线性组合，每个粒子都乘以概率振幅 $\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N)$。这些振幅构成坐标表示中的波函数 $|\Phi\rangle$，显然与第一量子化形式中的该波函数等价。在下面关于粒子可观测量的物理算符如何作用于 $|\Phi\rangle$ 的讨论中，我们将更加明确地看到这种等价性。

如附录中所述，为了使 $|\Phi\rangle$ 和 Φ（$\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N$）均归一化为 1，即使得

$$\int d^3r_1\ldots d^3r_N|\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N)|^2 = 1 \quad \text{and} \quad \langle\Phi|\Phi\rangle = 1 \tag{4.80}$$

必须选择归一化 $const_N = 1/\sqrt{N!}$，即在态$|\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\rangle$的定义 (4.75) 中，正如它们出现在 $|\Phi\rangle$ 与 $\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N)$ 之间的关系式 (4.79) 中。我们

因此有

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \prod_{a=1}^{N} d^3 r_a \; \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_2) \ldots \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_N) |0\rangle \tag{4.81}$$

置换对称性

场算符 $\hat{\psi}^+(\mathbf{r})$ 的可交换性质意味着，式 (4.81) 中的坐标概率幅 $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ 不能是任意的。这些函数必须在粒子坐标的所有可能置换下保持对称。

让我们以两个粒子的最简单情形来演示这一点

$$|\Phi\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_2) |0\rangle \tag{4.82}$$

两个变量的函数可以属于两种对称表示中的一种——对称或反对称，

$$\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi_S(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \;\text{ and }\; \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\Phi_A(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$$

并且通常具有

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{2}[\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] + \frac{1}{2}[\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)] \equiv \Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

不难证明，在公式 (4.82) 中，用 $\Phi_A(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ 得到的 $|\Phi\rangle_A$ 恒等为零。具有

$$\begin{aligned}
|\Phi\rangle_A &= \frac{1}{\sqrt{2}} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_2) |0\rangle = \\
&= -\frac{1}{\sqrt{2}} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \Phi_A(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_2) |0\rangle = \\
&= -\frac{1}{\sqrt{2}} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \Phi_A(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1) |0\rangle = \\
= -\frac{1}{\sqrt{2}} \int d^3 r_1 d^3 r_2 \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_2) |0\rangle &= -|\Phi\rangle_A
\end{aligned}$$

其中在第 3 行我们对易了 $\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1)\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_2) = \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_2)\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1)$，并且在第 4 行交换了积分变量 $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$。因此我们证明了 $|\Phi\rangle_A = -|\Phi\rangle_A$这意味着 $|\Phi\rangle_A = 0$。

对于一般波函数$\Phi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$中任意一对坐标，同样的证明显然成立。因此，在式（4.81）中，只有关于任意两个粒子的置换对称的 $\Phi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$才能产生非零结果。这意味着，对于关于任意数量粒子的排列均对称的 $\Phi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$，这一点同样成立。事实上（这很容易理解[4]，也可以通过归纳法证明），任意这样的

[4]参见 Messiah，《量子力学》（Dover 物理学丛书），第十四章。例如，用 (1532476) 表示一个置换 $1 \to 5 \to 3 \to 2 \to 4 \to 7 \to 6 \to 1$。显然，它可以写成对换的有序乘积 (15)(53)(32)(24)(47)(76)（从右向左的顺序）

置换都可以分解为两个粒子的置换（对换）的乘积。

波函数在置换下具有上述对称性，这是二次量子化形式最重要的特征之一。结合下文将讨论的、由算符表示的物理可观测量的对称性，这一性质意味着该理论的量子是玻色子，即遵循玻色统计的全同粒子。我们将在第4.4.3节中对此作进一步讨论。

占据数表象

将式（4.81）中的场算符按任意完备正交单粒子基展开，参见式（4.54），可得

$$|\Phi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N} C_{i_1,\ldots,i_N} \hat{a}^+_{i_1} \ldots \hat{a}^+_{i_N} |0\rangle \tag{4.83}$$

with

$$C_{i_1,\ldots,i_N} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \prod_{a=1}^{N} d^3 r_a \; \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) u^*_{i_1}(\mathbf{r}_1) \ldots u^*_{i_N}(\mathbf{r}_N)$$

系数 $C_{i_1,\ldots,i_N}$ 表示函数 $|\Phi\rangle$ 在由单粒子态 $u_i(\mathbf{r})$ 的乘积构成的基中的展开。正如我们在上一节所讨论的，函数 $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ 关于粒子坐标 $\mathbf{r}_a$'的置换是对称的。因此，可以将上述表达式中 $C_{i_1,\ldots,i_N}$'所含的 $u_i(\mathbf{r})$ 的乘积替换为对称化乘积

$$u^*_{i_1}(\mathbf{r}_1) \ldots u^*_{i_N}(\mathbf{r}_N) \to const \sum_P u^*_{i_1}(\mathbf{r}_{p_1}) \ldots u^*_{i_N}(\mathbf{r}_{p_N})$$

其中 P 表示粒子坐标 $\mathbf{r}_1$、.....、$\mathbf{r}_N$ $\to \mathbf{r}_{p_1}$、.....、$\mathbf{r}_{p_N}$ 的排列，归一化常数

$$const = \sqrt{n_1! \ldots n_N! / N!}$$

并适当调整展开系数 $C_{i_1,\ldots,i_N}$。从简单的 $N = 2$情形开始推导是个有益的练习：将 $u^*_{i_1}(\mathbf{r}_1) u^*_{i_2}(\mathbf{r}_2)$ 写成对称乘积和反对称乘积之和，其中反对称部分在其乘积的积分中消失，而对称部分为 $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$。

使用式（4.62）的记号，将展开式（4.83）写成单粒子态的占据数 n_i 的形式，既方便又符合惯例。在这种表示中，态 $|\Phi\rangle$ 将写作

$$|\Phi\rangle = \sum_{n_1,\ldots,n_i,\ldots;\text{with } \sum_i n_i = N} C_{n_1,\ldots,n_i,\ldots} |n_1, n_1, \ldots, n_i, \ldots\rangle \tag{4.84}$$

对系数$C_{n_1,\ldots,n_i,\ldots}$进行适当调整。这种 N粒子波函数的表示称为**占据数表象**。它强调了我们处理的是相同的量子（粒子），因此所需的全部信息就是它们在每个单粒子态中的数目 n_i。注意，在这种表示中，必须"提供"一个无限的（实际上 ∞^3）正整数集合 n_i。但由于它们受到约束 $\sum_i = N$，其中只有 $\leq N$ 个不为零。

4.4.2 二次量子化中的算符

在本节中，我们将阐明二次量子化形式中的物理可观测量算符如何作用于波函数。通过这种方式，我们也将更好地理解它与一次量子化之间的联系。

一体哈密顿量

我们将从讨论哈密顿量 (4.53) 对 $|\Phi\rangle$ 的作用开始。将其写成两项之和——动能项和势能项。

$$\begin{aligned} H_{op} &= K_{op} + U_{op} \\ K_{op} &= \int d^3r\ \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad , \quad U_{op} = \int d^3r \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \end{aligned} \tag{4.85}$$

并且我们先考虑势部分对 $|\Phi\rangle$ 的作用量

$$U_{op}|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \prod_{a=1}^{N} d^3r_a \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) \int d^3r \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \prod_{a=1}^{N} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)|0\rangle \tag{4.86}$$

使用结果式 (4.76)，将其乘以 $U(\mathbf{r})$ 和 $\hat{}\psi^+(\mathbf{r})$，并借助 δ 函数进行 d^3r 积分，我们得到

$$\int d^3r \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \prod_{a=1}^{N} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)|0\rangle = \left[\sum_{b=1}^{N} U(\mathbf{r}_b)\right] \prod_{a=1}^{N} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)|0\rangle \tag{4.87}$$

以便

$$U_{op}|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \prod_{a=1}^{N} d^3r_a \Phi'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) \prod_{a=1}^{N} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)|0\rangle \tag{4.88}$$

with

$$\Phi'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = \left[\sum_{a=1}^{N} U(\mathbf{r}_a)\right] \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) \tag{4.89}$$

我们看到，第二量子化算符 U_{op} 对 $|\Phi\rangle$ 的作用，等价于第一量子化的 $\sum_a U(\mathbf{r}_a)$ 对 $\Phi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$ 的作用，也就是说，作用于 $|\Phi\rangle$ 的第一量子化对应态。

计算 K_{op} 对 $|\Phi\rangle$ 的作用量稍微复杂一些，但很直接。详细内容见附录 4.7.3，结果为

$$K_{op}|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \prod_{a=1}^{N} d^3r_a \Phi'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) \prod_{a}^{N} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)|0\rangle \tag{4.90}$$

with

$$\Phi'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) = \left[\sum_{b=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\mathbf{r}_b}\right)\right] \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) \tag{4.91}$$

如在 U_{op} 情形中，我们看到， K_{op} 对 $|\Phi\rangle$ 的作用量等价于第一量子化动能算符的作用量

$$\sum_{a=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2_{\mathbf{r}_b}\right)$$

在 $|\Phi\rangle$的第一量子化对应项 $\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}2,\ldots,\mathbf{r}_N)$ 上

结合这些结果，我们发现，

$$H_{op}|\Phi\rangle=(K_{op}+U_{op})|\Phi\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\int\prod_{a=1}^{N}d^3r_a\left[\sum_{a=1}^{N}h_a\right]\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N)\prod_{a}^{N}\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}_a)|0\rangle \tag{4.92}$$

其中单粒子哈密顿量 h 由公式（4.50）给出

其他单体算符

上文讨论的算符 K_{op}、 U_{op} 和 H_{op} 都属于这样一种类型：在一次量子化表述中，其形式为

$$\hat{F}^{(1)}=\sum_{a=1}^{N}f_a^{(1)} \tag{4.93}$$

其中每个 $f_a^{(1)}$都是 $\mathbf{r}_a$ 和 $\mathbf{p}_a=-i\hbar\nabla_a$的函数。这类算符作用于 N 粒子的波函数，但一次只作用于一个粒子。它们被称为单体算符，而我们加在 $\hat{}_{F^{(1)}}$和 $f^{(1)}$上的下标用于对此加以区分。

基于我们以上对算符 K_{op}、 U_{op} 和 H_{op} 的讨论，我们可以作出 ke
如下一般性表述：在二次量子化中，单体算符具有如下形式

$$F_{op}^{(1)}=\int d^3r\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})f^{(1)}\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{4.94}$$

其中，最后一个表达式中的 $f^{(1)}$ 是求和式 (4.93) 中的某个（任意一个）算符，并且它作用于作为 <style id='r'>r的函数的 $\hat{}\psi$(r) 上。例如，角动量

$$\mathbf{L}=\sum_{a=1}^{N}\mathbf{l}_a\equiv\sum_{a=1}^{N}\mathbf{r}_a\times(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_a}) \tag{4.95}$$

变为

$$\mathbf{L}_{op}=\int d^3r\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})[\mathbf{r}\times(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}})]\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{4.96}$$

在二次量子化形式中。

需要注意的是，一次量子化公式 Eq.(4.93) 中出现在算符里的粒子数 N 是其定义的一部分，而二次量子化中的相应算符并不包含关于 N的任何信息。真正受到这些算符作用的是波函数，就像上一节中的 $|\Psi\rangle$ 一样

取决于 N。二次量子化 $F_{(1)op}$的“已准备好作用于” $|\Psi\rangle$，其N 可以取任意值，包括含有不同 N的线性组合（见下文关于一般福克空间的章节）。与此同时，这类特殊的算符不会改变 N，因为它们包含数量相等的产生与湮灭算符——每种各一个。但形式体系本身并不禁止使用会改变 N的算符。事实上，基本的算符 $\hat{}\psi(\mathbf{r})$ 和 $\hat{}\psi^{+}(\mathbf{r})$ 正是如此。

形式上，算符的守恒 N 性质可通过它们与粒子数算符 $N_{op} = \int d^3r\, \hat{}\psi^{+}(\mathbf{r})\, \hat{}\psi(\mathbf{r})$的对易性来表示，

$$[F_{op}^{(1)}, N_{op}] = 0 \tag{4.97}$$

与 H_{op}的情形一样，式（4.66）由式（4.94）在全局 $U(1)$变换式（4.67）下的不变性推出。

根据我们在上一节中的推导，也应该能清楚地了解单体二次量子化算符作用于 $|\Psi\rangle$这类函数的“力学”机制。形象地说，首先，湮灭算符$\hat{}\psi(\mathbf{r})$作用于 $|\Psi\rangle$，逐一“搜寻”所有处于位置$\mathbf{r}_a$, $a = 1, \ldots, N$的粒子并将它们“湮灭”。结果取决于粒子位置的坐标。接着，算符 f 作用于这些坐标，然后算符$\hat{}\psi^{+}(\mathbf{r})$将粒子放回原处（“创建”它们）。所有这些过程都乘以概率振幅$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$，并对所有可能的$\mathbf{r}_a$进行积分。

粒子相互作用。双体作用量 tors

现在让我们来理解，如何在二次量子化中写出表示粒子之间相互作用的算符。最常见的此类算符是势能，它是所有两两相互作用（例如库仑相互作用）的总和。它们在一次量子化中的形式是

$$V = \frac{1}{2} \sum_{a,b=1, a\neq b}^{N} V(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \tag{4.98}$$

正如我们所看到的，这是由一组算符构成的和，其中每个算符一次作用于两个粒子。这样的算符称为二体算符。

根据前面几节的经验，不难猜出在二次量子化中存在以下对应表达式。

$$V_{op} = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}) \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{4.99}$$

为了验证这一猜想，让我们像处理单体算符时那样——让我们用这个表达式作用于式(4.81)中的一般N粒子波函数。

$$\begin{aligned} V_{op}|\Phi\rangle \;\; = \;\; & \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \prod_{a=1}^{N} d^3r_a \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) \times \\ & \times \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}) \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}') V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \prod_{a=1}^{N} \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}_a)|0\rangle \end{aligned} \tag{4.100}$$

为求得该结果，我们使用关系式 Eq.(4.76)，对其作用以 $\hat{\psi}(\mathbf{r}')$，得到

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})\prod_{a=1}^{N}\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}_a)|0\rangle=\left[\sum_{b\neq c}^{N}\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_c)\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_b)\prod_{a\neq b,c}^{N}\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}_a)\right]|0\rangle$$

利用这一点，我们得到

$$\frac{1}{2}\int d^3rd^3r'\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})\prod_{a=1}^{N}\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}_a)|0\rangle=$$

$$\frac{1}{2}\int d^3rd^3r'\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\left[\sum_{b,c=1,b\neq c}^{N}\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_c)\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_b)\prod_{a\neq b,c}^{N}\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}_a)\right]|0\rangle=$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{b,c=1,b\neq c}^{N}V(\mathbf{r}_b-\mathbf{r}_c)\prod_{a=1}^{N}\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}_a)|0\rangle$$

因此

$$V_{op}|\Phi\rangle=\frac{1}{\sqrt{N!}}\int\prod_{a=1}^{N}d^3r_a\left[\frac{1}{2}\sum_{b,c=1,b\neq c}^{N}V(\mathbf{r}_b-\mathbf{r}_c)\right]\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N)\prod_{a=1}^{N}\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}_a)|0\rangle \tag{4.101}$$

所以，V_{op} 对 $|\Phi\rangle$ 的作用量等价于/导致第一量子化的 V，公式 (4.98)对 $\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\ldots,\mathbf{r}_N)$的作用量

对表达式 (4.99) 的直观理解类似于我们在单体算符情形中看到的情况——算符 $\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})$ “ 搜索 ” 以湮灭两个粒子（因为 $\mathbf{r}$ 和 $\mathbf{r}'$ 需要进行积分），从而 “ 揭示 ” 它们的位置。函数 $V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ 对结果进行加权，而算符 $\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})$ 将粒子放回。所有这些都要对所有可能的位置 $\mathbf{r}$ 和$\mathbf{r}'$进行积分。

一次量子化中双体算符的一般形式为

$$\hat{F}^{(2)}=\frac{1}{2}\sum_{a,b=1,a\neq b}^{N}f_{ab}^{(2)} \tag{4.102}$$

与二次量子化对应算符

$$F_{op}^{(2)}=\frac{1}{2}\int d^3rd^3r'\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}')f^{(2)}\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{4.103}$$

其中 $f^{(2)}$ 通常是 $\mathbf{r}$，$\mathbf{r}'$ 以及 $\hat{\mathbf{p}}=-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$，$\hat{\mathbf{p}}'=-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'}$ 的函数。

需要注意的是，与单体算符一样，这里的二次量子化算符不包含关于粒子数 N 的任何信息；这些信息编码在这些算符所作用的波函数中。同样，这里的算符 $F_{op}^{(2)}$ 不会改变 N 的值，并且与粒子数算符对易

$$[F_{op}^{(2)},N_{op}]=0 \tag{4.104}$$

这是 $U(1)$ 幺正对称性（式 (4.67)）的推论，而算符 $F_{(2)^{op}}$ 具有这种对称性。

改变单粒子基

上文讨论的单体和双体算符是用基本场算符 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ 和 $\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})$ 表示的。利用这些算符在一般单粒子基 $\{u_i(\mathbf{r})\}$ 中的展开式 (4.54) 来表示它们，既简单又有启发性。将 (4.54) 代入表达式 (4.94) 和 (4.103)，我们得到

$$F_{op}^{(1)} = \sum_{ij}\langle i|f^{(1)}|j\rangle \hat{a}_i^{+}\hat{a}_j \tag{4.105}$$

$$F_{op}^{(2)} = \sum_{ijkl}\langle ij|f^{(2)}|kl\rangle \hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+}\hat{a}_l\hat{a}_k \tag{4.106}$$

这里我们采用了初等单体算符和双体算符矩阵元的记号

$$\langle i|f^{(1)}|j\rangle = \int d^3r u_i^*(\mathbf{r})f^{(1)}u_j(\mathbf{r}) \tag{4.107}$$

$$\langle ij|f^{(2)}|kl\rangle = \int d^3r d^3r' u_i^*(\mathbf{r})u_j^*(\mathbf{r}')f^{(2)}u_k(\mathbf{r})u_l(\mathbf{r}') \tag{4.108}$$

我们要特别指出，在式 (4.84) 的占据数表象中，一般单粒子基下的波函数受到算符 $F_{(1)}{}_{op}$和 $F_{op}^{(2)}$作用的“逻辑”。对于单体 $F_{op}^{(1)}$，首先由算符$\hat{a}_j$湮灭态 u_j 中的一个粒子（该态属于单粒子基），使相应的 n_j占据数 n_j-1减一。然后乘以在占据数表象系数$C_{n_1,\ldots,n_j,\ldots}$中编码的相应振幅，以表示找到该 n_j的概率。接着，算符$\hat{a}_i^{+}$ 在态 u_i 中产生（放回）一个粒子，结果再乘以跃迁矩阵元 $\langle i|f^{(1)}|j\rangle$。最后，对所有这类跃迁求和。双体 $F_{op}^{(2)}$的作用方式类似，但涉及两个粒子的湮灭和产生，并对所有双粒子跃迁求和。

4.4.3 通过对易子进行二次量子化描述全同玻色子

在此阶段，必须注意上述形式体系的以下重要特征。二次量子化中各算符所对应的一次量子化算符，始终是在其作用的波函数中对所有粒子或粒子对等进行对称求和 。

这些求和的对称性源于它们的所有项作用于不同粒子时都完全相同。它们对坐标和动量具有相同的泛函依赖关系，且参数相同——质量、电荷等，例如相同的动能、相同的外势、相同的粒子间相互作用等。这一点可从公式（4.93） $\rightarrow$公式（4.94）以及公式（4.102） $\rightarrow$公式（4.103）之间的形式对应关系，以及公式（4.89、4.91、4.95、4.98）中的具体示例中看出。不可能存在表示可观测量的二次量子化算符来区分某个特定粒子，比如 $f_5^{(1)}$ 或若干

个特定粒子，例如 $f_{\begin{pmatrix}1\\7\end{pmatrix}} + f_{15}^{(1)})$ 。这是全同粒子量子系统的一般特征。

我们还要回顾一下，正如我们在第 4.4.1 节中发现的那样，与二次量子化相对应的一次量子化波函数 $\Phi(\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N)$ 在所有粒子的坐标置换下是对称的。这证实了粒子是全同的，而且满足玻色子系统的自旋统计定理要求。

请注意，由泡利证明的自旋统计定理指出（其第一部分）：由相同整数自旋粒子组成的系统，其波函数在交换任意两个粒子的坐标后必须保持对称。这样的粒子称为玻色子，遵循玻色-爱因斯坦统计。

在我们讨论的无自旋全同粒子的情形中，泡利定理所规定的对称性要求，是一次量子化形式体系中的一条附加规则，需在薛定谔方程 (4.78) 的波函数解中进行选择时加以施加。正如我们所见，在二次量子化的波函数方程 (4.79,4.81) 中，这一要求会自动满足。

自旋统计定理的第二部分涉及由相同半整数自旋粒子组成的系统的波函数。该定理指出，交换任意一对粒子时，波函数必须是反对称的。这类粒子是遵循费米-狄拉克统计的费米子。下一节将讨论如何通过二次量子化进行简单直接的修改，从而将其扩展到对费米子的描述。

关于自旋统计定理的证明——正如费曼在《物理学讲义》中所说：“.....泡利通过量子场论和相对论中的复杂论证，推导出了一种解释.....但我们还没有找到以初等方式重现他的论证的方法.....”[5]。

4.4.4 自相互作用的 Schr¨odinger 场。

总结。相互作用的哈密顿量

总而言之，我们学习了如何将波函数和物理算符转换为二次量子化形式。 N 个Φ玻色子的 N 粒子波函数$\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N$应当是对称的，并且成为表达式（4.79）或更明确的表达式（4.81）中 $|\mathbf{r}_1, ..., \mathbf{r}_N\rangle$ 态的振幅。

处理算符时，首先应确定它们属于哪一类——单体、二体等。单体算符的例子包括动量、密度、电流等

$$\begin{aligned}\mathbf{P} &= \sum_{a=1}^{N} \mathbf{p}_a = \sum_{a=1}^{N} (-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_a}) \quad , \quad \rho(\mathbf{r}) = \sum_{a=1}^{N} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a) \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2m} \sum_{a=1}^{N} [\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_a}) + (-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}_a})\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_a)]\end{aligned}$$

[5]参见，I. Duck 和E.Sudarshan，《迈向对自旋统计定理的理解》，《美国物理学杂志》，66 (4) 1998

注意，全同粒子意味着，任何此类算符都是作用于各个粒子的相同算符之和。因此，取和中的一项，并将其代入表达式 (4.94)，即可求出相应的第二量子化算符。若倾向于使用一般基底 $\{u_i\}$，而非场算符的坐标表象，则需要计算所有可能的 u_i 两两之间的矩阵元，并将其用于表达式 (4.105)。粒子数 N 在第一量子化形式体系的算符中显式出现，但在第二量子化中则不然。

二体算符的例子并不多。除了二体相互-作用(4.98) 之外，还有各种关联函数，例如密度-密度或电流-电流等。

$$\rho_{op}(\mathbf{r})\rho_{op}(\mathbf{r}') = \sum_{a,b=1}^{N} \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_b) \ \text{, etc}$$

与单体情形一样，必须从这样的双重求和中取出一项，并将其用于含有场算符的表达式 (4.103)，或者计算它在选定的单粒子态基底中的所有两粒子矩阵元。然后应使用这些矩阵元构造表达式 (4.106)。

一般来说，找到三体算符是极其罕见的，但将我们所学内容推广到这类情况是非常直接明了的。

让我们遵循上述规则，写出多体相互作用系统的完整二次量子化哈密顿量。考虑其在一次量子化中的（最常见）表达式

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^{N}\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m} + U(\mathbf{r}_a)\right] + \frac{1}{2}\sum_{a,b=1,a\neq b}^{N} V(\mathbf{r}_a-\mathbf{r}_b) \quad , \quad \hat{\mathbf{p}}_a = -i\hbar\nabla_a \tag{4.109}$$

外部固定数量为 N 的粒子。假设粒子是玻色子，则必须“手动”施加其粒子统计，只允许对称波函-数。

上述哈密顿量的二次量子化形式为

$$H_{op} = \int d^3r\hat{\psi}^+(\mathbf{r})\, h\, \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}\int d^3r d^3r' \hat{\psi}^+(\mathbf{r})\hat{\psi}^+(\mathbf{r}')V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r}) \tag{4.110}$$

with

$$h = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})$$

在一般的单粒子基中，这个哈密顿量可写为

$$H_{op} = \sum_{ij}\langle i|\, h\, |j\rangle \hat{a}_i^+\hat{a}_j + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\langle ij|V|kl\rangle \hat{a}_i^+\hat{a}_j^+\hat{a}_l\hat{a}_k \tag{4.111}$$

如果已知单体部分的解，即已知 h 的本征函数 $u_i(\mathbf{r})$ 和本征能量 ϵ_i，那么在式 (4.59) 中，就可以将这些信息“纳入”上面对 H_{op} 的表达式中。以集合 $\{u_i\}$ 为基底，可得 $\langle i|\, h\, |j\rangle = \epsilon_i\delta_{ij}$，并且

$$H_{op} = \sum_{i}\epsilon_i\hat{a}_i^+\hat{a}_i + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\langle ij|V|kl\rangle \hat{a}_i^+\hat{a}_j^+\hat{a}_l\hat{a}_k \tag{4.112}$$

在本课程的平均场近似一章中，我们将讨论并举例说明如何以更优的方式选择单粒子基，使其在平均意义上纳入多体系统中相互作用项的影响。

海森堡方程。经典极限——场与粒子

考虑场算符 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ 和 $\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})$ 对应的海森堡方程，以及一般的相互作用哈密顿量 (4.110)。我们有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\hat{\psi}(\mathbf{r},t)\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r},t)\end{pmatrix}=\left[\begin{pmatrix}\hat{\psi}(\mathbf{r},t)\\ \hat{\psi}^{+}(\mathbf{r},t)\end{pmatrix},H_{op}\right]$$

直接计算可得厄米共轭方程

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(\mathbf{r},t)}{\partial t} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\mathbf{r})\right]\hat{\psi}(\mathbf{r},t)+\int V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}',t)\hat{\psi}(\mathbf{r}',t)\,d^3r'\;\hat{\psi}(\mathbf{r},t) \\ -i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r},t)}{\partial t} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\mathbf{r})\right]\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r},t)+\int V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}',t)\hat{\psi}(\mathbf{r}',t)\,d^3r'\;\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r},t) \end{aligned} \tag{4.113}$$

这些方程在多粒子系统理论中有许多应用。格林函数方法就是一个很好的例子[6]。

这里我们想指出一个简单但在概念上很重要的方面——它们的经典极限。与其他量子系统一样，这一极限可以通过直观地将坐标和动量算符替换为相应的经典时间函数来得到，从而将海森堡方程转化为经典哈密顿方程。在上述方程 (4.113) 中，这意味着将 $\hat{\psi}(\mathbf{r}\;t)$ 和 $\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r}\;t)$ 替换为 c 数（经典、可交换）函数 $\psi(\mathbf{r}\;t)$ 和 $\psi^{*}(\mathbf{r}\;t)$。在无相互作用极限 $V=0$ 下，所得波动方程使我们回到出发点，参见薛定谔方程 (4.49)。完全相互作用情形的经典极限则导出一个非线性薛定谔方程，其中含有由相互作用控制的三次非线性项。

我们再补充两点说明。

a) 对式 (4.113) 经典极限的直观“推导”需要经过严格论证，这将在“多体问题的平均场近似”一章中讨论。从直观层面看，量子场的经典极限对应于这样的物理过程：极大量的量子（粒子）“凝聚”在同一个波模中，也就是同一个单粒子态中。

b) 上文所说的经典极限不同于 N 粒子哈密顿量式 (4.109) 通常所指的经典极限。后者是将相应海森堡方程中粒子坐标和动量的算符替换为经典变量得到的。很容易证明，这样得到的就是经典哈密顿方程

$$\frac{d\mathbf{r}_a}{dt}=\frac{\partial H}{\partial\mathbf{p}_a}\quad,\quad\frac{d\mathbf{p}_a}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial\mathbf{r}_a} \tag{4.114}$$

[6]参见《多粒子系统量子理论》，A. Fetter 和 J. Walecka 著，Dover，2003年

因此，我们有两种经典极限——对于场 $\psi(\mathbf{r}\ t)$ 和 $\psi^*(\mathbf{r}\ t)$ 的"场"经典极限，以及更为熟悉的、针对粒子坐标 $\mathbf{r}_a$ 和动量 $\mathbf{p}_a$ 的"粒子"经典极限。后一种经典极限是 $\hbar \to 0$ 的极限，而前一种则在理论中凝聚量子（即玻色子粒子）的数目 $N_0 \gg 1$ 很大时实现。

4.5 费米子——二次量子化的另一种选择

正如我们迄今所学，对薛定谔场进行量子化，可以在各个方面对许多粒子玻色子系统给出一种非常高效且优雅的描述。一个自然的问题是，这种处理方法能否扩展到费米子系统。

4.5.1 通过反对易子进行量子化

关于肯定答案的明确线索，可以在第 4.4.1 节的讨论中找到。我们在那里看到，玻色子波函数的对称性是由产生粒子的场算符 $\psi^\dagger(\mathbf{r}_a)$'s 的最基本性质——它们的可交换性——所保证的。正如我们接下来将要展示的，通过假设基本算符满足反对易关系，可以一致地将薛定谔场量子化。只需改变这一条量子化公设，就能得到一种对多费米子系统的描述，其形式类似于针对多玻色子的二次量子化形式。

处理费米子时，必须引入自旋变量和位置坐标，以描述该理论中的粒子。因此，我们从由函数描述的经典场开始。

$$\psi_\sigma(\mathbf{r}) \quad \text{and} \quad \psi^*_\sigma(\mathbf{r}) \tag{4.115}$$

带有自旋投影指标 $\sigma = \pm 1/2$ （我们假设自旋 $1/2$ 费米子，因为这是迄今最常见的情况）。将这些函数写成/查看为显式旋量形式通常很有用，即

$$\begin{pmatrix} \psi_{1/2}(\mathbf{r}) \\ \psi_{-1/2}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad \text{and} \quad \begin{pmatrix} \psi^*_{1/2}(\mathbf{r}) \\ \psi^*_{-1/2}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

我们通过引入两组算符来量子化这个场

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \ \text{ and } \ \hat{\psi}^\dagger_\sigma(\mathbf{r})$$

其中 $\mathbf{r}$ 和 $\sigma = \pm 1/2$ 分别标记每一组。我们需要定义这些 $2 \times \infty^3$ 算符作用于其上的态空间，以及它们作用后的结果。我们已经看到，对于上文讨论的玻色场 $\psi(\mathbf{r})$，只需定义一个抽象的真空态 $|0\rangle$以及场算符之间的对易关系，就足以实现这一点。由此，我们可以定义算符作用于其上的态空间的基底，并计算任意给定算符的任意矩阵元。

在这一经历之后，我们首先定义具有以下性质的真空态 $|0\rangle$

$$\begin{aligned} &a) \quad \langle 0|0\rangle = 1 \\ &b) \quad \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})|0\rangle = 0 \quad \text{for all values of } \mathbf{r} \text{ and } \sigma \end{aligned} \tag{4.116}$$

我们通过如下施加（假定）反对易关系来补充这一点

$$\begin{aligned}
&\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}') + \hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \equiv \{\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')\} = \delta_{\sigma\sigma'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \\
&\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') + \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}')\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \equiv \{\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}), \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}')\} = 0 \\
&\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}') + \hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r}) = \{\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})\,\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')\} = 0
\end{aligned} \tag{4.117}$$

其中花括号 $\{\ ,\ \}$ 定义反对易子。

如下文所示，这两个定义足以定义具有任意动力学的量子力学费米子场。我们注意到，尽管真空的定义与玻色情形相同，但反对易关系定义了一种新的量子化“范式”，这与通过对易子进行的熟悉的正则量子化不同。

4.5.2 外势中的费米子

为了理解上述定义的新量子化方案所带来的结果，我们首先考虑一个简单的例子——处于外势中的粒子。

场方程与哈密顿量

场在外势中的动力学的方程 (4.115) 是对方程 (4.49) 的推广，以包含自旋

$$i\hbar\frac{\partial\psi_\sigma(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \sum_{\sigma'} h_{\sigma\sigma'}\psi_{\sigma'}(\mathbf{r},t) \tag{4.118}$$

作为一个例子，我们考虑以下内容 $h_{\sigma\sigma'}$

$$h_{\sigma\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2 + U_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}) \tag{4.119}$$

我们假设了一个依赖于自旋的外势，例如自旋与非均匀磁场之间的相互作用（例如，在斯特恩–盖拉赫实验中）

$$U_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r}) = -\gamma\mathbf{B}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{s}_{\sigma\sigma'}$$

与常数 γ 和自旋为 $1/2$ 的矢量$\mathbf{s}$ 矩阵。

利用我们对无自旋场的经验并对其进行适当推广，我们将方程 (4.118) 及其复共轭视为一对哈密顿方程，其中 $\psi_\sigma(\mathbf{r})$ 和 $i\hbar\psi^*_\sigma(\mathbf{r})$ 为正则变量，而以下为经典哈密顿函数

$$H = \sum_{\sigma\sigma'}\int d^3r\left[\delta_{\sigma\sigma'}\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\psi_\sigma(\mathbf{r})|^2 + U_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r})\psi^*_\sigma(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}(\mathbf{r})\right] \tag{4.120}$$

确实，由

$$\begin{aligned}
\delta H \quad = \quad & \sum_{\sigma\sigma'}\int d^3r\left\{\delta_{\sigma\sigma'}\frac{\hbar^2}{2m}\left[\nabla\psi^*_\sigma(\mathbf{r})\nabla\delta\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}) + \nabla\delta\psi^*_\sigma(\mathbf{r})\nabla\psi_{\sigma'}(\mathbf{r})\right] + \right. \\
& \left. + U_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r})\left[\psi^*_\sigma(\mathbf{r})\delta\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}) + \delta\psi^*_\sigma(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}(\mathbf{r})\right]\right\}
\end{aligned}$$

我们得到

$$\frac{\partial\psi_\sigma(\mathbf{r})}{\partial t}=\frac{\delta H}{\delta[i\hbar\psi^*_\sigma(\mathbf{r})]}=\frac{1}{i\hbar}\sum_{\sigma\sigma'}\left[-\delta_{\sigma\sigma'}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_{\sigma'}(\mathbf{r})+U_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}(\mathbf{r})\right]$$

$$\frac{\partial[i\hbar\psi^*_\sigma(\mathbf{r})]}{\partial t}=-\frac{\delta H}{\delta\psi_\sigma(\mathbf{r})}=-\sum_{\sigma\sigma'}\left[-\delta_{\sigma\sigma'}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*_{\sigma'}(\mathbf{r})+U_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r})\psi^*_{\sigma'}(\mathbf{r})\right]$$

它们正确地重现了场方程（4.118）及其复共轭。

在此基础上，我们通过将该自旋or场替换为场算符来对其进行量子化

$$\psi_\sigma(\mathbf{r})\to\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})\quad,\quad\psi^*_\sigma(\mathbf{r})\to\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r}) \tag{4.121}$$

以及反对易关系 (4.117) 和哈密顿算符

$$H_{op}=\sum_{\sigma\sigma'}\int d^3r\left[\delta_{\sigma\sigma'}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})\cdot\nabla\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r})+U_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r})\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r})\right] \tag{4.122}$$

或以等价形式表示（参见公式（4.22）后的注释）

$$H_{op}=\sum_{\sigma\sigma'}\int d^3r\;\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})\left[-\delta_{\sigma\sigma'}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r})\right]\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r})=\sum_{\sigma\sigma'}\int d^3r\;\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r})h_{\sigma'\sigma}\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \tag{4.123}$$

转换到正则模

现在让我们求解由哈密顿量(4.123)定义的量子力学问题。这并不困难，因为它是二次型的。我们需要找出其正则模。按照处理 (4.53) 时非常相似的步骤，我们考虑单个粒子方程

$$\sum_{\sigma'}h_{\sigma\sigma'}u_i(\mathbf{r},\sigma)=\epsilon_i u_i(\mathbf{r},\sigma) \tag{4.124}$$

集合 $\{u_i(\mathbf{r}\;\sigma)\}$ 在 $\mathbf{r}\;\sigma$ 的函数空间中是完备且正交归一的。

$$\sum_\sigma\int d^3u^*_i(\mathbf{r},\sigma)u_j(\mathbf{r},\sigma)=\delta_{ij}\quad,\quad\sum_i u_i(\mathbf{r},\sigma)u^*_i(\mathbf{r}',\sigma')=\delta_{\sigma\sigma'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{4.125}$$

我们使用这组场算符进行展开

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})=\sum_i\hat{a}_i u_i(\mathbf{r},\sigma)\;\;,\;\;\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})=\sum_i\hat{a}^+_i u^*_i(\mathbf{r},\sigma) \tag{4.126}$$

算符 $\hat{a}_i$ 和 $\hat{a}^+_i$ 可以表示为

$$\hat{a}_i=\sum_\sigma\int d^3r\;\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})u^*_i(\mathbf{r},\sigma)\;\;,\;\;\hat{a}^+_i=\sum_\sigma\int d^3r\;\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})u_i(\mathbf{r},\sigma) \tag{4.127}$$

利用反对易子（4.117）以及集合 $\{u_i(\mathbf{r}\ \sigma)\}$ 的完备性，很容易看出 $\hat{a}_i$ 和 $\hat{a}_i^+$ 也满足反对易关系。

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^+\} = \delta_{ij} \quad , \quad \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} = 0 = \{\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+\} \tag{4.128}$$

将展开式 (4.126) 代入哈密顿量 (4.123)，我们得到

$$H_{op} = \sum_i \epsilon_i \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \tag{4.129}$$

与玻色情形完全相同，但算符遵循反对易关系。

本征态。处理反对易的 $\hat{a}$'和 $\hat{a}^+$'

哈密顿量 (4.129) 是对易部分之和。事实上，很容易验证：

$$[\hat{n}_i, \hat{n_j}] = 0 \tag{4.130}$$

其中我们记作

$$\hat{n}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i \tag{4.131}$$

我们需要求出 $\hat{n}_i$ 的本征函数。我们按照玻色情形中的相同构造进行，参见第 4.7.1 节。注意，由式 (4.127) 可知，在式 (4.116) 中定义的真空态 $|0\rangle$ 会被所有 $\hat{a}_i$ 湮灭

$$\hat{a}_i|0\rangle = 0 \quad \text{for} \quad \text{all} \ \ i'\text{s} \tag{4.132}$$

S由于它也会被所有 $\hat{n}_i$ 湮灭，因此显然是哈密顿量 (4.129) 的零能量本征值本征态。

现在我们定义单粒子态

$$|1_i\rangle \equiv \hat{a}_i^+|0\rangle$$

对任意 i。注意这类态具有以下性质

$$\begin{aligned} \langle 1_i|1_i\rangle &= \langle 0|\hat{a}_i\hat{a}_i^+|0\rangle = \langle 0|1 - \hat{a}_i^+\hat{a}_i|0\rangle = 1 \\ \langle 0|1_i\rangle &= \langle 0|\hat{a}_i^+|0\rangle = 0 \quad , \quad \hat{a}_i^+|1_i\rangle = (\hat{a}_i^+)^2|0\rangle = 0 \end{aligned} \tag{4.133}$$

在第一个等式中，我们使用了反对易关系式 $\{\hat{a}_i,\ \hat{a}_i^+\} = 1$ 和

$$\langle 1_i| \equiv [\hat{a}_i^+|0\rangle]^+ = \langle 0|[\hat{a}_i^+]^+ = \langle 0|\hat{a}_i$$

在第二个等式中，我们使用了

$$\langle 0|\hat{a}_i^+ = [\hat{a}_i|0\rangle]^+ = 0$$

在第 3 章中，我们使用了反对易子

$$\{\hat{a}_i^+, \hat{a}_i^+\} = 2[\hat{a}_i^+]^2 = 0$$

值得注意的是，这个最后的关系式体现了泡利不相容原理：两个（或更多个）相同的费米子不能占据同一个量子态——在本例中，该态为 u_i。

这些态对我们最重要的性质 $|1_i\rangle$ 是：它们是$\hat{}n_i$的本征态，本征值为 $n_i = 1$

$$\hat{n}_i|1_i\rangle = \hat{a}_i^+\hat{a}_i\hat{a}_i^+|0\rangle = \hat{a}_i^+[1 - \hat{a}_i^+\hat{a}_i]|0\rangle = \hat{a}_i^+|0\rangle = |1_i\rangle \tag{4.134}$$

式（4.133）中的最后一个关系式意味着，对于每个$\hat{}n_i$ - $|0\rangle$和 $|1_i\rangle$ ，只有两个本征态，其相应的本征值分别为 $n_i = 0$ 和 $n_i = 1$。

因此，哈密顿量（4.129）的本征函数是$\hat{}n_i$的所有可能本征态的乘积

$$|\Psi_{\{n_i\}}\rangle = |n_1, n_2, \ldots, n_i, \ldots\rangle = \prod_i |n_i\rangle = \prod_i [\hat{a}_i^+]^{n_i}|0\rangle \quad \text{with} \quad n_i = 0 \ \text{ or } \ 1$$

以及相应的本征能量

$$E_{\{n_i\}} = \sum_i \epsilon_i n_i \quad \text{with} \quad n_i = 0 \ \text{ or } \ 1 \ ; \ N = \sum_i n_i$$

将占据数 n_i 限制为0或1，当然是泡利原理的另一种表述，也是量子化过程中所假设的反对易关系的直接结果。

与玻色情形一样，总粒子数 N 是总粒子数算符的本征值

$$N_{op} = \sum_i \hat{n}_i \tag{4.135}$$

它与哈密顿量 H_{op} 对易，见式(4.129)。我们将在下面的第4.5.2节中进一步展开讨论。

总而言之，解决这个问题归结为求解单粒子薛定谔方程 (4.124)，然后根据泡利不相容原理，用粒子占据（填满）所得的单粒子态 u_i 。当然，这一解与我们在费米子的一次量子化形式下得到的结果完全相同，不同之处在于，在一次量子化形式下，它是问题中一个固定的给定参数，而在二次量子化形式下，它是一个量子数，可以取任意值。

自旋无关势

让我们讨论公式 (4.118) 中单粒子哈密顿量的一个重要极限情形，该哈密顿量与自旋无关，即在自旋指标上为对角形式

$$h_{\sigma\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'}h \quad \text{with} \quad h = -\frac{h^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})$$

并相应地

$$H_{op} = \sum_\sigma \int d^3r \, \hat{\psi}_\sigma^+(\mathbf{r}) h \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$$

随后，正则模就是空间部分和自旋部分的乘积。

$$u_i(\mathbf{r},\sigma) = u_k(\mathbf{r})\chi_s(\sigma)$$

其中 $u_k(\mathbf{r})$ 求解

$$hu_k(\mathbf{r}) = \epsilon_k u_k(\mathbf{r})$$

以及 $\chi_s(\sigma)$ $s = \pm 1/2$ 只是两个正交的空间无关自旋量，例如。

$$\chi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \chi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

单粒子能量 ϵ_k 现在是自旋简并的，且在正则模中的展开形式为

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{ks} \hat{a}_{ks} u_k(\mathbf{r})\chi_s(\sigma) \ , \ \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{ks} \hat{a}^+_{ks} u^*_k(\mathbf{r})\chi^*_s(\sigma)$$

与对易关系

$$\{\hat{a}_{ks}, \hat{a}^+_{k's'}\} = \delta_{kk'}\delta_{ss'} \ , \ \{\hat{a}_{ks}, \hat{a}_{k's'}\} = 0 = \{\hat{a}^+_{ks}, \hat{a}^+_{k's'}\}$$

哈密顿量表示为

$$H_{op} = \sum_{ks} \epsilon_k \hat{a}^+_{ks}\hat{a}_{ks} = \sum_{ks} \epsilon_k \hat{n}_{ks}$$

数算符$\hat{}n_{ks}$ 彼此对易，其本征函数很容易像以前一样求得，分别为 $|0\rangle$ 和 $|1_{ks}\rangle \equiv \hat{a}^+_{ks}|0\rangle$，对应的本征值为 $n_{ks} = 0$ 和 **1**。 H_{op} 的本征函数于是为

$$|\Psi_{\{n_{ks}\}}\rangle = |n_1, n_2, \ldots, n_{ks}, \ldots\rangle = \prod_{ks} |n_{ks}\rangle = \prod_{ks} [\hat{a}^+_{ks}]^{n_{ks}}|0\rangle \quad \text{with} \quad n_{ks} = 0 \ \text{ or } \ 1$$

以及相应的本征能量

$$E_{\{n_{ks}\}} = \sum_{ks} \epsilon_k n_{ks} \quad \text{with} \quad n_{ks} = 0 \ \text{ or } \ 1 \ ; \ N = \sum_{ks} n_{ks}$$

粒子数算符

与玻色情形一样，用场算符来表示总粒子数算符 N_{op} 很有用。将（4.127）代入表达式（4.135），得到

$$N_{op} = \sum_\sigma \int d^3 r \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$$

与玻色情形一样，该算符是全局 $U(1)$ 规范变换的生成元，即费米子场对应的式（4.67）。

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \ \rightarrow \ e^{i\alpha}\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \quad , \quad \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r}) \ \rightarrow \ e^{-i\alpha}\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r}) \tag{4.136}$$

确实很容易验证，尽管费米子场算符满足反对易关系，式（4.69）对每个自旋分量仍然成立。

$$[N_{op}, \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})] = -\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$$

因此，式 (4.68) 的相应推广也是如此

$$e^{-i\alpha N_{op}}\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})e^{i\alpha N_{op}} = e^{i\alpha}\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) \ , \ e^{-i\alpha N_{op}}\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})e^{i\alpha N_{op}} = e^{-i\alpha}\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})$$

由于哈密顿量方程 (4.123) 在此变换下保持不变，因此它与N_{op}对易。

处理费米子场算符

粒子数算符的表达式表明

$$\hat{\rho}_\sigma(\mathbf{r}) = \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$$

是自旋投影为 σ 的粒子的密度算符。让我们考虑一个态

$$|\mathbf{r}, \sigma\rangle \equiv \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})|0\rangle \tag{4.137}$$

并让我们用算符 $\hat{\rho}_{\sigma'}(\mathbf{r}')$ 作用于它。利用反对易关系 (4.117) 将 $\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}')$ 移向 $|0\rangle$，再利用式 (4.116)，我们得到

$$\hat{\rho}_{\sigma'}(\mathbf{r}')|\mathbf{r}, \sigma\rangle = \hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}')\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})|0\rangle = \delta_{\sigma\sigma'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')|0\rangle = \delta_{\sigma\sigma'}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|\mathbf{r}, \sigma\rangle \tag{4.138}$$

这表明，$\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})$会在位置$\mathbf{r}$ 处产生自旋投影为 σ的粒子。更准确地说，它会在该位置产生自旋投影为 σ 的粒子的δ型粒子密度。

延续我们在玻色子情形中的做法，让我们考虑该态

$$|\mathbf{r}_1\sigma_1, \ldots, \mathbf{r}_N\sigma_N\rangle = const_N\, \hat{\psi}^+_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1)\ldots\hat{\psi}^+_{\sigma_N}(\mathbf{r}_N)|0\rangle \tag{4.139}$$

其中我们引入了一个用于归一化的乘法常数，见下文。用算符 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ 作用于此态，将其与 $|0\rangle$ 对易，并利用式 (4.116)，得到

$$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})|\mathbf{r}_1\sigma_1, \ldots, \mathbf{r}_N\sigma_N\rangle = const_N \sum_{a=1}^{N}(-1)^{P_a}\delta_{\sigma\sigma_a}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\prod_{b\neq a}^{N}\hat{\psi}^+_{\sigma_b}(\mathbf{r}_b)|0\rangle \tag{4.140}$$

其中， P_a 是为了将 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ 移到 $\hat{\psi}^+_{\sigma_a}(\mathbf{r}_a)$ 右侧所需进行的排列次数的宇称。结果（4.140）意味着，当某个粒子的坐标与$\mathbf{r}$ 重合且其自旋投影为 σ 时，$\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ 会摧毁（湮灭）该粒子。在此过程中，如果排列次数 P_a 为奇数，它还会改变波函数相应部分的符号。因此，它的作用量取决于被摧毁粒子在波函数中的顺序。

我们可以利用上述结果，让算符 $\hat{}\rho_\sigma(\mathbf{r})$ 作用于态（4.139）。按照玻色子情形中的相同方式（参见公式（4.76）），我们得到

$$\hat{\rho}_\sigma(\mathbf{r})|\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\rangle = [\sum_{a=1}^{N}\delta_{\sigma\sigma_a}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)]|\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N\rangle$$

这表明该态描述了 N 个粒子（类似 δ 函数的粒子密度），其自旋投影为 σ_a，位置为$\mathbf{r}_a$，$a=1$，……，N。

4.5.3 与一次量子化的关系

在本节中，我们将采用与玻色子情形类似的推导，但场算符中增加了自旋指标，并使用反对易关系而不是对易关系。

波函数

考虑二次量子化中N个粒子波函数的费米子版本 n

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma_1,\ldots\sigma_N}\int\prod_{a=1}^{N}d^3r_a\ \Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1,\mathbf{r}_2\sigma_2,\ldots,\mathbf{r}_N\sigma_N)\hat{\psi}^+_{\sigma_1}(\mathbf{r}_1)\ldots\hat{\psi}^+_{\sigma_N}(\mathbf{r}_N)|0\rangle \quad (4.141)$$

这个表达式的解释非常清楚——我们有N粒子在$\mathbf{r}_1,\ldots,\mathbf{r}_N$位置、自旋投影为 $\sigma_1,\ldots,\sigma_N$，每个粒子都乘以概率振幅 $\Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1,\mathbf{r}_2\sigma_2,\ldots,\mathbf{r}_N\sigma_N)$。$\hat{}\psi^+_\sigma(\mathbf{r})$'s 的反对易性保证了该振幅关于交换任意一对$(\mathbf{r}\ \sigma)$'s[7]是反对称的。这个振幅显然是波函数 $|\Phi\rangle$ 的一次量子化对应物。

与玻色情形一样，对 $|\Phi\rangle$ 的归一化保证它是归一化的，即$\langle\Phi|\Phi\rangle=1$只要振幅 $\Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1,\ldots,\mathbf{r}_N\sigma_N)$为

$$\sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N}\int\prod_{a=1}^{N}d^3r_a|\Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1,\mathbf{r}_2\sigma_2,\ldots,\mathbf{r}_N\sigma_N)|^2=1$$

在任意单粒子基 $u_i(\mathbf{r}\ \sigma)$ 中，上述波函数看起来与玻色子情形完全相同

$$|\Phi\rangle = \sum_{i_1,\ldots,i_N}C_{i_1,\ldots,i_N}\hat{a}^+_{i_1}\ldots\hat{a}^+_{i_N}|0\rangle \quad (4.142)$$

唯一的区别是，算符$\hat{a}^+_i$ 彼此反对易。

如同玻色情形，使用**占据数表象**中的波函数进行处理是有用且实用的，参见式(4.84)，

$$|\Phi\rangle = \sum_{n_1,\ldots,n_i,\ldots;\text{with } n_i=0 \text{ or } 1\,,\,\sum_i n_i=N}C_{n_1,\ldots,n_i,\ldots}|n_1,n_1,\ldots,n_i,\ldots\rangle \quad (4.143)$$

唯一的区别是，费米子占据数 n_i被限制为零或一。

[7]正如在玻色情形中已经讨论过的，可以证明，N 个对象的任意置换 c an 可通过成对对换的有序“乘积”（序列）来实现。

算符

如同玻色情形，在费米子的第一量子化表述中，算符被分类为单体、二体等。

单体算符

提醒一下——这些算符逐个作用于全同粒子的波函数中的单个粒子，并具有由表达式（4.93）给出的一般形式。在当前的费米子情形中，不同之处在于，每个 $f_a^{(1)}$ operator 除了是 $\mathbf{r}_a$、$\hat{\mathbf{p}}_a = -i\hbar\nabla_a$ 的函数外，还可能依赖于自旋矩阵 $\mathbf{s}_a$。这意味着，一般而言，$f_a^{(1)}$'s 是自旋量矩阵，其矩阵元依赖于$\mathbf{r}_a$ 和 $\hat{\mathbf{p}}_a$，参见式（4.118）中的 $h_{\sigma\sigma'}$ 示例。

与玻色情形非常类似，可以证明（参见附录 4.7.4），在二次量子化中，单体算符具有如下形式

$$F_{op}^{(1)} = \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r \hat{\psi}_{\sigma'}^{+}(\mathbf{r}) f_{\sigma'\sigma}^{(1)} \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \tag{4.144}$$

其中，$f_{\sigma\sigma'}^{(1)}$ 是和式（4.93）中的任意一个算符推广而来、并纳入自旋依赖性的算符。它作用于 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$，后者是 $\mathbf{r}$ 的自旋量函数。外势中的哈密顿量的表达式（4.123）很好地示例了这类算符。

二体算符

在一次量子化中，带自旋的全同粒子的二体算符与玻色情形下具有相同的形式 (4.102)，但其中的基本算符 $f_{ab}^{(2)}$ 通常除了依赖于 $\mathbf{r}_a$,$\mathbf{r}_b$, $\hat{\mathbf{p}}_a$ 和 $\hat{\mathbf{p}}_b$ 之外，还依赖于自旋矩阵 $\mathbf{s}_a$,$\mathbf{s}_b$。一个例子是（现象学）双粒子相互作用中所谓的自旋交换项

$$\frac{1}{2} \sum_{a,b=1;a\neq b}^{N} \left[V(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) + W(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b) \left(\hat{\mathbf{s}}_a \cdot \hat{\mathbf{s}}_b \right) \right]$$

为简单起见，我们只考虑自旋无关的 $f_{ab}^{(2)}$。可以证明，费米子二次量子化中的这类二体算符，其形式与玻色情形下的表达式 (4.103) 相似，只是在场算符中加入了自旋指标

$$F_{op}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}_{\sigma}^{+}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{+}(\mathbf{r}') f^{(2)} \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$$

其中 $f^{(2)}$ 是 $\mathbf{r}, \mathbf{r}'$ 和 $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}' = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}'}$ [8] 的函数。请注意场算符的相对顺序。由于它们反对易，因此保持这一顺序很重要。

通用单粒子基

[8] 一般的自旋相关二体 $F_{op}^{(2)}$将具有成对的 $f^{(2)}$，它们除了依赖粒子对的自旋算符 $\hat{\mathbf{s}}$,$\hat{\mathbf{s}}'$ 之外，还会依赖其他因素。这意味着它们将是四指标矩阵 $f_{\sigma\sigma',\sigma''\sigma'''}^{(2)}$，而 $F_{op}^{(2)}$的表达式为

$$F_{op}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''} \int d^3r d^3r' \hat{\psi}_{\sigma}^{+}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{+}(\mathbf{r}') f_{\sigma\sigma',\sigma''\sigma'''}^{(2)} \hat{\psi}_{\sigma'''}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma''}(\mathbf{r})$$

要得到一般基底 u_i（$\mathbf{r}$ σ）中 $F_{op}^{(1)}$和 $F_{op}^{(2)}$的表达式，只需将其中的场算符展开为该基底下的形式，参见式（4.126）。所得结果与玻色子表达式（4.105）和（4.106）形式相同，但矩阵元除了涉及空间坐标积分外，还涉及自旋求和

$$\begin{aligned}\langle i|f^{(1)}|j\rangle &= \sum_{\sigma\sigma'}\int d^3r u_i^*(\mathbf{r},\sigma')f^{(1)}_{\sigma'\sigma}u_j(\mathbf{r},\sigma)\\ \langle ij|f^{(2)}|kl\rangle &= \sum_{\sigma\sigma'}\int d^3r d^3r' u_i^*(\mathbf{r},\sigma)u_j^*(\mathbf{r}',\sigma')f^{(2)}u_k(\mathbf{r},\sigma)u_l(\mathbf{r}',\sigma')\end{aligned} \tag{4.145}$$

其中，对于二体算符，我们只讨论自旋无关 $f^{(2)}$ 这一简单（但非常常见）的情形。

4.5.4 相互作用费米子

哈密顿量

相互作用费米子最常见的哈密顿量形式为

$$\begin{aligned}H_{op} &= \sum_{\sigma\sigma'}\int d^3r\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r})\,h_{\sigma'\sigma}\,\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}) + \\ &\quad +\frac{1}{2}\sum_{\sigma\sigma'}\int d^3r d^3r'\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}')\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})\end{aligned} \tag{4.146}$$

with

$$h_{\sigma'\sigma} = -\delta_{\sigma'\sigma}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U_{\sigma'\sigma}(\mathbf{r})$$

以及自旋无关的二体相互作用。在一般的单粒子基中，这个哈密顿量为

$$H_{op} = \sum_{ij}\langle i|\,h\,|j\rangle\hat{a}_i^+\hat{a}_j + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\langle ij|V|kl\rangle\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+\hat{a}_l\hat{a}_k \tag{4.147}$$

与玻色子情形一样，如果已知非相互作用部分的解，即已知单粒子哈密顿量的本征函数 h（参见式（4.124），例如原子中的库仑波函数），就可以在这个基底中使用算符 $\hat{a}_i^+$ 、$\hat{a}_j$ 。此时矩阵 $\langle i|\,h\,|j\rangle$ 为对角矩阵，使得 H_{op} 中的第一项变得简单。

$$H_{op} = \sum_i \epsilon_i\hat{a}_i^+\hat{a}_i + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\langle ij|V|kl\rangle\hat{a}_i^+\hat{a}_j^+\hat{a}_l\hat{a}_k \tag{4.148}$$

并有助于将"注意力聚焦"于粒子相互作用。

以及表达式（4.145）的相应推广

$$\langle ij|f^{(2)}|kl\rangle = \sum_{\sigma\sigma'\sigma''\sigma'''}\int d^3r d^3r' u_i^*(\mathbf{r},\sigma)u_j^*(\mathbf{r}',\sigma')f^{(2)}_{\sigma\sigma',\sigma''\sigma'''}u_k(\mathbf{r},\sigma'')u_l(\mathbf{r}',\sigma''')$$

海森堡方程。没有经典极限

尽管费米子场算符 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ 和 $\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})$ 满足反对易关系，这些算符的海森堡方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r},t)\\ \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r},t)\end{pmatrix}=\left[\begin{pmatrix}\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r},t)\\ \hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r},t)\end{pmatrix},H_{op}\right]$$

对于一般相互作用哈密顿量（4.146），除了存在自旋指标外，其形式与玻色子情形相同。读者可以练习将其明确推导出来。对于 $\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r})$ 的方程为

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r},t)}{\partial t}=\sum_{\sigma'}h_{\sigma\sigma'}\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r},t)+\int V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\sum_{\sigma'}\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}',t)\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}',t)d^3r'\,\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r},t)\quad(4.149)$$

以及该方程的厄米共轭。与玻色子情形不同，这些方程没有经典极限。原因很明显：泡利原理以及场算符形式上的反对易关系，使得同一个场模式中不能有多于一个费米子[9]。

平均场近似

为简单起见，假设自旋无关的 $U(\mathbf{r})$)，并将海森堡方程（4.149）写成如下形式

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r},t)}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\mathbf{r})+\int V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\hat{\rho}(\mathbf{r}',t)d^3r'\right]\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r},t)\qquad(4.150)$$

with

$$\hat{\rho}(\mathbf{r},t)=\sum_\sigma\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r},t)\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r},t)$$

这些方程中的势 $U(\mathbf{r})$ 在形式上被最后一项修正，该项是二体相互作用 $V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ 与粒子密度算符 $\hat{\rho}(\mathbf{r}',t)$ 的卷积。对于经典粒子密度函数 $\rho(\mathbf{r}\ t)$，这一项自然表示系统中的粒子所诱导的势[10]。在量子力学的语境下，可以定性地将 $\hat{\rho}(\mathbf{r}\ t)$ 视为一个随机变量，其概率

[9]所谓反对易 c 数（格拉斯曼变量）通常与费米子二次量子化算符的经典极限相关。非常粗略地说，它们是通过将式（4.117）中的所有反对易子置为零而得到的，

$$\{\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}),\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')\}=\{\hat{\psi}_\sigma(\mathbf{r}),\hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}')\}=\{\hat{\psi}^+_\sigma(\mathbf{r})\,\hat{\psi}^+_{\sigma'}(\mathbf{r}')\}=0$$

这与玻色情形的经典极限类似（同样只是粗略的类比）：在该极限下，所有正则对易子都消失；参见 Berezin, F. A.，《二次量子化方法》，Academic Press，1965。构造费米子系统的泛函积分时，最常使用格拉斯曼变量；参见 Negele, J. W. 和 Orland, H.，《量子多粒子系统》，Perseus Books Group，1998，第25—37页 10- 参见下一页的脚注

其振幅分布由所研究的多费米子系统的波函数 $|\Phi\rangle$ 决定。

给定 $|\Phi\rangle$，可以写成

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \langle\Phi|\hat{\rho}(\mathbf{r})|\Phi\rangle + \delta\hat{\rho}(\mathbf{r})$$

将 $\hat{\rho}(\mathbf{r}\ t)$ 的平均值与涨落分开。自然会想到，忽略涨落是否是一个良好的近似。这无疑会大大简化问题，也符合其他领域中类似近似的思路，这类近似被称为“平均场近似”[11]。在多费米子系统中，平均场近似最初由 Hartree 在原子物理学中提出，随后 Fock 对其加以补充，形成了 Hatree-Fock 方法。我们将在单独的一章中讨论这些发展。平均场近似及其推广，在原子、原子核和固体等多费米子系统的理论处理中发挥着非常重要的作用。

4.6 Fock 空间。

在一次量子化形式体系中，我们遇到了希尔伯特空间这一概念。对于 N个粒子，它是由所有以 N 变量为自变量的函数构成的空间

$$\begin{aligned}
&\Phi(x_1, x_2, ..., x_N) \qquad \text{with} \\
&x_a = \mathbf{r}_a\ ,\ a = 1, ..., N,\ \text{symmetrized for spinless bosons}\ , \\
&x_a = \mathbf{r}_a, \sigma_a\ ,\ a = 1, ..., N,\ \text{antisymmetrized for fermions}
\end{aligned}$$

作用于这类函数的算符不会改变粒子数 N。而在二次量子化表述中，情况则有所不同。这里，最基本的算符 $\hat{\psi}(\mathbf{r})$、$\hat{\psi}^{+}(\mathbf{r})$、$\hat{a}_i$、$\hat{a}_i^{+}$ 等都会改变粒子数，最一般的波函数应是形如 Φ_N 的函数的线性组合，其中 N 各不相同，并且包括真空

$$\begin{aligned}
|\Phi\rangle \quad &= \quad C^{(0)}|0\rangle + \sum_i C_i^{(1)}\hat{a}_i^{+}|0\rangle + \sum_{ij} C_{ij}^{(2)}\hat{a}_i^{+}\hat{a}_j^{+}|0\rangle + ... + \\
&+ \quad \sum_{i_1 i_2..} C_{i_1 i_2 ... i_N}^{(2)}\hat{a}_{i_1}^{+}\hat{a}_{i_2}^{+}...\hat{a}_{i_N}^{+}|0\rangle + ...
\end{aligned} \tag{4.151}$$

所有这类函数构成的希尔伯特空间称为福克空间，是一个直和

$$\begin{aligned}
&(\text{vacuum}) \bigoplus (\text{1 particle Hilbert space}) \bigoplus (\text{2 particle Hilbert space}) \bigoplus\ ... \\
&... \bigoplus (\text{N particle Hilbert space}) \bigoplus\ ...
\end{aligned} \tag{4.152}$$

[11]有一个重要方面必须首先加以处理。这与这样一个事实有关: $\hat{\rho}(\mathbf{r}\ t)$，因此其平均值包含系统中的所有粒子，而作用于任意给定粒子的平均场势

$$\int V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}', t)d^3r'$$

m我们只需排除这一特定粒子。Hartree-Fock 方法优雅地解决了这个问题。
hod d
在平均场近似一章中介绍的

4.7 附录

4.7.1 玻色子——回顾$\hat{a}$' s 和$\hat{a}^+$'s 的性质

真空态

定义一个特殊的态，记作 $|0\rangle$。我们将此态称为真空态。我们所需的唯一性质是：任意算符$\hat{a}_i$ 作用于此态时，结果均为零，且此态已归一化。

$$\begin{aligned} \hat{a}_i|0\rangle &= 0 \quad i=1,2,... \\ \langle 0|0\rangle &= 1 \end{aligned} \tag{4.153}$$

单模

我们首先考虑一对具有固定指标 i 的算符$\hat{a}_i\hat{a}_i^+$ 。我们将它们称为单一模式 u_i**(r)** 的算符。接着我们定义态（类比振子阶梯算符）

$$|1_i\rangle \equiv \hat{a}_i^+|0\rangle \tag{4.154}$$

很容易看出，这个态已经归一化。事实上，利用对易关系以及 $|0\rangle$ 的性质，可得

$$\langle 1_i|1_i\rangle = \langle 0|\hat{a}_i\hat{a}_i^+|0\rangle = \langle 0|1+\hat{a}_i^+\hat{a}_i|0\rangle = \langle 0|0\rangle = 1$$

此外，它们彼此正交

$$\langle 1_i|0\rangle = \langle 0|\hat{a}_i|0\rangle = 0$$

同理，我们定义

$$|2_i\rangle = \text{const}\ \hat{a}_i^+|1_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\ \hat{a}_i^+|1_i\rangle \tag{4.155}$$

通过计算范数可得归一化常数 $const = 1/\sqrt{2}$

$$\begin{aligned} \langle 2_i|2_i\rangle &= |const|^2\langle 1_i|\hat{a}_i\hat{a}_i^+|1_i\rangle = |const|^2\langle 1_i|\hat{a}_i\hat{a}_i^+\hat{a}_i^+|0\rangle = \\ &= |const|^2\langle 1_i|(1+\hat{a}_i^+\hat{a}_i)\hat{a}_i^+|0\rangle = |const|^2[\langle 1_i|\hat{a}_i^+|0\rangle + \\ &+ \langle 1_i|\hat{a}_i^+(1+\hat{a}_i^+\hat{a}_i)|0\rangle] = 2|const|^2\langle 1_i|1_1\rangle = 2|const|^2 \end{aligned}$$

它们彼此正交

$$\langle 2_i|1_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1_i|\hat{a}_i|1_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1_i|\hat{a}_i\hat{a}_i^+|0_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1_i|1+\hat{a}_i^+\hat{a}_i|0_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1_i|0_i\rangle = 0$$

而且更加显而易见的是

$$\langle 2_i|0_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1_i|\hat{a}_i|0\rangle = 0$$

通过迭代，我们定义

$$|n_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_i}}\hat{a}_i^+|n_i-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_i(n_i-1)}}(\hat{a}_i^+)^2|n_i-2\rangle = \cdots = \frac{1}{\sqrt{n_i!}}(\hat{a}_i^+)^{n_i}|0\rangle \qquad (4.156)$$

可以证明，所得态 $|n_i\rangle$ 构成正交集

$$\langle m_i|n_i\rangle = 0 \quad \text{for} \quad m_i \neq n_i$$

确实，写作

$$\langle m_i|n_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{m_i n_i}}\langle 0|(\hat{a}_i)^{m_i}(\hat{a}_i^+)^{n_i}|0\rangle$$

并将每个$\hat{a}_i$都一路对易到 $|0\rangle$ 的右侧，可以证明这在$m_i \neq n_i$时为零。

我们还有

$$\begin{aligned}
\hat{a}_i^+|n_i\rangle &= \hat{a}_i^+\frac{1}{\sqrt{n_i!}}(\hat{a}_i^+)^{n_i}|0\rangle = \sqrt{n_i+1}\frac{1}{\sqrt{(n_i+1)!}}(\hat{a}_i^+)^{n_i+1}|0\rangle \\
\hat{a}_i|n_i\rangle &= \hat{a}_i\frac{1}{\sqrt{n_i!}}(\hat{a}_i^+)^{n_i}|0\rangle = n_i\frac{1}{\sqrt{n_i!}}(\hat{a}_i^+)^{n_i-1}|0\rangle = \sqrt{n_i}\frac{1}{\sqrt{(n_i-1)!}}(\hat{a}_i^+)^{n_i-1}|0\rangle
\end{aligned}$$

其中，第二行的第二个等号中的因子 n_i 来自将$\hat{a}_i$与$(\hat{a}_i^+)^{n_i}$ 中的 n 个算符对易，使其作用于 $|0\rangle$。上述计算表明，

$$\hat{a}_i^+|n_i\rangle = \sqrt{n_i+1}|n_i+1\rangle \quad , \quad \hat{a}_i|n_i\rangle = \sqrt{n_i}|n_i-1\rangle \qquad (4.157)$$

还要注意，通过厄米共轭

$$\langle n_i|\hat{a}_i = \sqrt{n_i+1}\langle n_i+1| \quad , \quad \langle n_i|\hat{a}_i^+ = \sqrt{n_i}\langle n_i-1| \qquad (4.158)$$

最后两组等式定义了算符 $\hat{a}_i$ 和 $\hat{a}_i^+$ 对任意“属于”模式 u_i（$\mathbf{r}$）的态的作用。事实上，对于任意这样的态 $|\xi_i\rangle$，我们都可以将其写成基态 $|n_i\rangle$ 的线性组合 $|\xi_i\rangle = \sum_{n_i} c_{n_i}|n_i\rangle$，从而确定 $\hat{a}_i$ 或 $\hat{a}_i^+$ 作用于它的结果。

现在让我们考虑算符 $\hat{n}_i = \hat{a}_i^+\hat{a}_i$。基态 $|n_i\rangle$，式 (4.156)，是它的本征态

$$\hat{n}_i|n_i\rangle = \hat{a}_i^+\hat{a}_i|n_i\rangle = \sqrt{n_i}\,\hat{a}_i^+|n_i-1\rangle = n_i|n_i\rangle \qquad (4.159)$$

此算符是第 i 个模式数算符。

多种模式

现在，我们将上述单模构造推广到完整$u_i(\mathbf{r})$集合的所有模式。这主要是因为对于不同的 i，$\hat{a}_i$ 和$\hat{a}_i^+$ 的成对算符彼此对易，因此很容易完成。态 $|n_i\rangle$ 的一般多模对应形式为

$$|\{n_i\}\rangle \equiv |n_1, n_2, \ldots, n_k, \ldots\rangle = \prod_i |n_i\rangle = \prod_i \frac{1}{\sqrt{n_i!}}(\hat{a}_i^+)^{n_i}|0\rangle \qquad (4.160)$$

算符$\hat{a}_i$ 和$\hat{a}_i^+$ 对这些态的作用为

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^+|n_1,\dots,n_i,\dots\rangle &= \sqrt{n_i+1}|n_1,\dots,n_i+1,\dots\rangle \\ \hat{a}_i|n_1,\dots,n_i,\dots\rangle &= \sqrt{n_i}\,|n_1,\dots,n_i-1,\dots\rangle\end{aligned} \tag{4.161}$$

并且所有模式都有数算符

$$\hat{n}_i|n_1,\dots,n_i,\dots\rangle = \hat{a}_i^+\hat{a}_i|n_1,\dots,n_i,\dots\rangle = n_i|n_1,\dots,n_i,\dots\rangle \tag{4.162}$$

引入总粒子数算符是有用且重要的。

$$N_{op} = \sum_i \hat{n}_i = \sum_i \hat{a}_i^+\hat{a}_i \tag{4.163}$$

它“测量”所有 n_i 的总和

$$N_{op}|n_1,n_2,\dots,n_i,\dots\rangle = \left(\sum_i n_i\right)|n_1,n_2,\dots,n_i,\dots\rangle \tag{4.164}$$

4.7.2 玻色子——波函数归一化

让我们来考虑波函数（式 (4.79)）的范数。

$$\begin{aligned}\langle\Phi|\Phi\rangle &= \\ &= \int\int\prod_{a,b=1}^{N} d^3r_a d^3r'_b\ \Phi^*(\mathbf{r}'_1,\mathbf{r}'_2,\dots,\mathbf{r}'_N)\Phi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\dots,\mathbf{r}_N)\langle\mathbf{r}'_1,\dots,\mathbf{r}'_N|\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N\rangle\end{aligned} \tag{4.165}$$

我们需要计算重叠 $\langle\mathbf{r}'_1,\dots,\mathbf{r}'_N|\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N\rangle$。直接将 $\hat{\psi}(\mathbf{r}'_a)$ 向右移动，直至抵达真空态 $|0\rangle$，即可得到

$$\begin{aligned}&\langle\mathbf{r}'_1,\dots,\mathbf{r}'_N|\mathbf{r}_1,\dots,\mathbf{r}_N\rangle = |const_N|^2\langle 0|\hat{\psi}(\mathbf{r}'_N),...\hat{\psi}(\mathbf{r}'_1)\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_1)\dots\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_N)|0\rangle = \\ &\quad = |const_N|^2\langle 0|\hat{\psi}(\mathbf{r}'_N),...\hat{\psi}(\mathbf{r}'_2)\sum_{a=1}^{N}\delta(\mathbf{r}'_1-\mathbf{r}_a)\prod_{b\neq a}^{N}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_b)|0\rangle = \\ &= |const_N|^2\langle 0|\hat{\psi}(\mathbf{r}'_N),...\hat{\psi}(\mathbf{r}'_3)\sum_{a=1}^{N}\delta(\mathbf{r}'_1-\mathbf{r}_a)\sum_{b=1,b\neq a}^{N}\delta(\mathbf{r}'_2-\mathbf{r}_b)\prod_{c=1,c\neq a,b}^{N}\hat{\psi}^+(\mathbf{r}_c)|0\rangle = \\ &= ... = |const_N|^2\sum_{a=1}^{N}\delta(\mathbf{r}'_1-\mathbf{r}_a)\sum_{b=1,b\neq a}^{N}\delta(\mathbf{r}'_2-\mathbf{r}_b)\sum_{d=1,d\neq a,b,c}^{N}\delta(\mathbf{r}'_3-\mathbf{r}_d)..\langle 0|0\rangle = \\ &= |const_N|^2\sum_P\prod_{a=1}^{N}\delta(\mathbf{r}'_a-\mathbf{r}_{Pa})\end{aligned} \tag{4.166}$$

其中 P表示粒子指标 $a=1$、2、..、N 的排列。N 个指标共有 $N!$ 种排列，因此最后一个求和中有 $N!$ 项。

在式（4.165）中使用这一结果，可以利用狄拉克δ函数将范数$\langle\Phi|\Phi\rangle$ 化简为积分之和。

$$\langle\Phi|\Phi\rangle = |const_N|^2 \sum_P \int \prod_{a=1}^{N} d^3 r_a \Phi^*(\mathbf{r}_{P1}, \mathbf{r}_{P2}, \ldots, \mathbf{r}_{PN}) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$$

由于 $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)$ 关于其参数的排列是对称的，上述 $N!$ 个积分是相同的

$$\langle\Phi|\Phi\rangle = N!|const_N|^2 \int \prod_{a=1}^{N} d^3 r_a |\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N)|^2$$

这使得在选择常数为以下值时，一次量子化和二次量子化波函数都满足归一化条件，即范数为 1，见式（4.80）：

$$const_N = \frac{1}{\sqrt{N!}}$$

4.7.3 玻色子——计算 $K_{op}|\Phi\rangle$

与 $U_{op}|\Psi\rangle$ 一样，我们从考虑

$$\int d^3 r \; \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2_{\mathbf{r}} \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \prod_{a=1}^{N} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)|0\rangle$$

在该表达式中使用结果 (4.76) 并

$$\nabla^2_{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) = -\nabla_{\mathbf{r}} \nabla_{\mathbf{r}_b} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) = \nabla^2_{\mathbf{r}_b} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b)$$

我们得到其形式为

$$\int d^3 r \; \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \left[\sum_{b=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2_{\mathbf{r}_b} \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) \prod_{a \neq b}^{N} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a) \right] |0\rangle$$

因此

$$K_{op}|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \prod_{a=1}^{N} d^3 r_a \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) \int d^3 r \; \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2_{\mathbf{r}} \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \prod_{a=1}^{N} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a)|0\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int \prod_{a=1}^{N} d^3 r_a \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) \int d^3 r \; \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \left[\sum_{b=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2_{\mathbf{r}_b} \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) \prod_{a \neq b}^{N} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a) \right] |0\rangle =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^3 r \; \hat{\psi}^+(\mathbf{r}) \int \prod_{a=1}^{N} d^3 r_a \left[\sum_{b=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2_{\mathbf{r}_b} \right) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \ldots, \mathbf{r}_N) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_b) \prod_{a \neq b}^{N} \hat{\psi}^+(\mathbf{r}_a) \right] |0\rangle$$

在最后一行中，我们改变了积分顺序，然后进行了两次分部积分，以释放狄拉克δ函数，并将 $\nabla^2_{\mathbf{r}_b}$ 转移为作用于 $\Phi(\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_N)$。

再次换回积分次序，并利用狄拉克δ函数，我们得到

4.7.4 费米子——计算 $F_{op}|\Phi\rangle$

推导算符 $F_{op}^{(1)}$（式 (4.144)）对多费米子波函数（式 (4.141)）的作用时，我们先将 $\hat{}\psi_{\sigma'}^{+}(\mathbf{r})f_{\sigma'\sigma}^{(1)}$of $F_{(1)op}$作用于表达式 (4.140)，得到

$$const_N \sum_{a=1}^{N} f_{\sigma'\sigma}^{(1)}(\mathbf{r})\delta_{\sigma\sigma_a}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)\prod_{b<a}\hat{\psi}_{\sigma_b}^{+}(\mathbf{r}_b)\hat{\psi}_{\sigma'}^{+}(\mathbf{r})\prod_{b>a}\hat{\psi}_{\sigma_b}^{+}(\mathbf{r}_b)|0\rangle \tag{4.167}$$

这里为简单起见，我们假设 $f_{\sigma'\sigma}^{(1)}$ 仅是$\mathbf{r}$ 的函数，这样我们就可以将 $\hat{}\psi_{\sigma'}^{+}(\mathbf{r})$“移过它”，并对易到 $\hat{}\psi_{\sigma_a}^{+}(\mathbf{r}_a)$ 所在的位置。这个对易过程产生了额外的因子 $(-1)^{P_a}$，与式（4.140）中的相同因子结合后，整体为 1。我们注意到，对于依赖于 $-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$的 $f_{\sigma'\sigma}^{(1)}$，应采用中间的分部积分，这与我们在玻色子的动能情形中所做的类似，参见附录 4.7.3。

为完成计算，我们将结果 (4.167) 对 σ 和 σ' 求和，并对$\mathbf{r}$积分。使用 $\delta_{\sigma\sigma_a}$ 对 σ 求和，并使用 $\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_a)$进行积分，我们得到

$$F_{op}^{(1)}\prod_{a=1}^{N}\hat{\psi}_{\sigma_a}^{+}(\mathbf{r}_a)|0\rangle = \sum_{a=1}^{N}\sum_{\sigma'} f_{\sigma'\sigma_a}^{(1)}(\mathbf{r}_a)\prod_{b<a}\hat{\psi}_{\sigma_b}^{+}(\mathbf{r}_b)\hat{\psi}_{\sigma'}^{+}(\mathbf{r}_a)\prod_{b>a}\hat{\psi}_{\sigma_b}^{+}(\mathbf{r}_b)|0\rangle$$

这给出

$$\begin{aligned}
F_{op}^{(1)}|\Phi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma_1,\ldots\sigma_N}\int\prod_{a=1}^{N}d^3r_a\;\Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1,\mathbf{r}_2\sigma_2,\ldots,\mathbf{r}_N\sigma_N)F_{op}^{(1)}\prod_{a=1}^{N}\hat{\psi}_{\sigma_a}^{+}(\mathbf{r}_a)|0\rangle = \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma_1,\ldots\sigma_N}\int\prod_{b=1}^{N}d^3r_b\;\Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1,\mathbf{r}_2\sigma_2,\ldots,\mathbf{r}_a\sigma_a,\ldots,\mathbf{r}_N\sigma_N)\times \\
&\qquad\times\sum_{a=1}^{N}\sum_{\sigma'} f_{\sigma'\sigma_a}^{(1)}(\mathbf{r}_a)\prod_{b<a}\hat{\psi}_{\sigma_b}^{+}(\mathbf{r}_b)\hat{\psi}_{\sigma'}^{+}(\mathbf{r}_a)\prod_{b>a}\hat{\psi}_{\sigma_b}^{+}(\mathbf{r}_b)|0\rangle = \\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma_1,\ldots\sigma_N}\int\prod_{b=1}^{N}d^3r_b\;\sum_{a=1}^{N}\sum_{\sigma'} f_{\sigma_a\sigma'}^{(1)}(\mathbf{r}_a)\Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1,\mathbf{r}_2\sigma_2,\ldots,\mathbf{r}_a\sigma',\ldots,\mathbf{r}_N\sigma_N)\times \\
&\qquad\times\prod_{b<a}\hat{\psi}_{\sigma_b}^{+}(\mathbf{r}_b)\hat{\psi}_{\sigma_a}^{+}(\mathbf{r}_a)\prod_{b>a}\hat{\psi}_{\sigma_b}^{+}(\mathbf{r}_b)|0\rangle
\end{aligned}$$

其中，在最后一个等号之后，我们利用了对 σ_a 和 σ'的求和，并交换了它们求和变量 $\sigma_a \leftrightarrow \sigma'$ 的记号。这最终得到。

$$F_{op}^{(1)}|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{\sigma_1,\ldots\sigma_N}\int\prod_{a=1}^{N}d^3r_a\;\Phi'(\mathbf{r}_1\sigma_1,\mathbf{r}_2\sigma_2,\ldots,\mathbf{r}_N\sigma_N)\prod_{a=1}^{N}\hat{\psi}_{\sigma_a}^{+}(\mathbf{r}_a)|0\rangle$$

with

$$\Phi'(\mathbf{r}_1\sigma_1,\mathbf{r}_2\sigma_2,\ldots,\mathbf{r}_N\sigma_N) = \left[\sum_{a=1}^{N}\sum_{\sigma'} f_{\sigma_a\sigma'}^{(1)}(\mathbf{r}_a)\right]\Phi(\mathbf{r}_1\sigma_1,\mathbf{r}_2\sigma_2,\ldots,\mathbf{r}_a\sigma',\ldots,\mathbf{r}_N\sigma_N)$$