高等量子力学讲义

November 19, 2023

Shu-yi Wei
魏 树 一

http://shuyi.eu
shuyi [AT] sdu.edu.cn

目 录

第一章
经典力学回顾

在走进量子世界之前，我们首先回顾一下经典力学中的一下基本知识。这部分请大家仔细阅读朗道《力学》[1]一书的第 1、2、3、7 章节。在本讲义中，我们简单总结一下几个重要知识点。

第一节 拉格朗日量与最小作用量原理

关键字：拉格朗日量；最小作用量原理；变分原理；拉格朗日方程。

拉格朗日量又称拉氏量是理论力学体系中描述体系运动状态的一个非常重要的物理量。它一般用 $\mathscr{L}$ 来表示。假设一个体系在 t 时刻所有粒子的位置信息，既所有的广义坐标 r_i，是已知的。其中，i 是所有的位置自由度的编号。显然，该体系的运动状态并不能够被唯一确定下来，因为下一刻每个粒子如何运动仍然是未知的。因此要想完整描述一个体系的运动状态，除了在 t 时刻所有粒子的位置信息 r_i 以外，我们还需要指定这些粒子在该时刻的速度 $\dot{r}_i$ 信息。有了这些信息，我们就可以唯一确定下体系的运动状态。粒子的加速度及坐标对时间的更高阶导数由运动方程决定。

因此，拉格朗日量是如下广义坐标、广义速度和时间的函数：

$$\mathscr{L}[t, r_i(t), \dot{r}_i(t)]. \tag{1.1}$$

其中，广义坐标与广义速度是时间的函数。

在基础物理课程中，大家首先学习的是牛顿力学。牛顿力学的出发点是牛顿三定律。牛顿三定律是通过总结实验规律得出的，是我们进行下一步研究最根本的前提假设。而在理论力学中，我们的前提假设是拉格朗日量与最小作用量原理。在这个前提假设下，我们可以推导出之前学过所有的力学公式。最小作用量原理（the principle of least action）是这样表示的：

最小作用量原理：假设在 t_1 时刻，体系所有粒子的位置为 $q_i^{(1)}$。随后，在 t_2 时刻，体系所有粒子的位置信息由 $q_i^{(2)}$ 标记。那么体系中粒子如何从 $q_i^{(1)}$ 运动到 $q_i^{(2)}$ 由作用量取最小值决定。作

[1] L.D. Landau and E.M. Lifshitz; *Mechanics*.

用量 S 定义式为：

$$S \equiv \int_{t_1}^{t_2} \mathscr{L}[t, q_i(t), \dot{q}_i(t)]dt. \tag{1.2}$$

下面，我们从最小作用量原理出发，推导出欧拉-拉格朗日方程，也就是运动方程。

假设体系内粒子的运动轨迹为 $q_i(t)$ 时作用量最小化。那么，我们考虑一个在此路径上一个无穷小的偏移 $q_i(t) + \delta q_i(t)$。由于 t_1 与 t_2 时刻体系内所有粒子的位置信息是我们预先指定的。因此，在边界条件处的偏移必须为 0，即 $\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$。该偏离导致作用量的变化为：

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \mathscr{L}[t, q_i(t) + \delta q_i(t), \dot{q}_i(t) + \delta\dot{q}_i(t)]dt - \int_{t_1}^{t_2} \mathscr{L}[t, q_i(t), \dot{q}_i(t)]dt = 0. \tag{1.3}$$

最小作用量原理要求作用量在最佳运动路径上对任意广义坐标（时间的函数）的变分为 0。由上式我们可得：

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q_i(t)} \delta q_i(t) + \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i(t)} \delta \dot{q}_i(t) \right) = 0 = \int_{t_1}^{t_2} dt \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q_i(t)} \delta q_i(t) + \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i(t)} \frac{d\delta q_i(t)}{dt} \right). \tag{1.4}$$

下一步，我们利用分步积分法，可以简单得到：

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \bigg|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} dt \left[\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) \right] \delta q_i = 0. \tag{1.5}$$

利用之前我们提过的 δq_i 的边界条件以及该积分对于任意 δq_i 都必须为 0 可得拉格朗日方程：

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i} \right) = 0. \tag{1.6}$$

上述这些推导非常重要。在以后大家学量子场论的时候会用到类似的计算技巧。希望大家自己独立重复一次该计算，仔细体会一下如何从最小作用量原理推导出拉格朗日方程。

第二节　时间平移不变性与能量守恒

关键字：时间平移不变性；能量；哈密顿量。

在理论力学中，我们引入的另外一个重要思想就是如果体系由某种对称性，那么该对称性将会对应于某个守恒量。在这里，我们介绍一下几个常见的对称性以及他们对应的守恒量。

首先是时间平移不变性。假设一个体系的拉格朗日量不**显含**时间（即 $\partial\mathscr{L}/\partial t = 0$），那么这

个体系是具有时间平移不变性的。那么拉格朗日量对时间的导数就变成了：

$$\frac{d\mathscr{L}}{dt} = \sum_i \left[\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i} \frac{d\dot{q}_i}{dt} \right]. \tag{1.7}$$

将上式右手边第一项利用拉格朗日方程替换掉，我们得到

$$\frac{d\mathscr{L}}{dt} = \sum_i \frac{d}{dt} \left[\dot{q}_i \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i} \right]. \tag{1.8}$$

因此，我们得到如下守恒量：

$$H \equiv \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i} - \mathscr{L}, \qquad \frac{dH}{dt} = 0. \tag{1.9}$$

我们将此物理量定义为哈密顿量（既能量）。因此在本节，我们得到一个重要的经验：时间平移不变性对应能量守恒。这一点在之后量子力学以及量子场论中会经常用到。

此外，通过空间平移不变性我们得到一个守恒量，称之为动量，广义坐标 q_i 共轭的广义动量的定义式为 $p_i \equiv \partial \mathscr{L} / \partial \dot{q}_i$。因此我们得到：

$$H(q_i, p_i, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}(q_i, \dot{q}_i, t). \tag{1.10}$$

这就是勒让德变换。通过勒让德变换，我们发现可以将原本是坐标、速度函数的拉格朗日量 $\mathscr{L}$ 转变称为坐标、动量函数的哈密顿量。在拉格朗日力学下，运动方程是欧拉-拉格朗日方程。在哈密顿力学下，运动方程为哈密顿方程。当然，二者之间是完全等价的，因为他们都描述同一系统的运动状态。

第三节　空间平移不变性与动量守恒

关键字：空间平移不变性；动量。

首先，假如我们将某广义坐标施加一个空间平移，而此时系统拉格朗日量保持不变（与时间无关），我们称系统具有空间平移不变性。即：

$$\mathscr{L}(t, q_i, \dot{q}_i) = \mathscr{L}(t, q_i + \epsilon, \dot{q}_i). \tag{1.11}$$

显然，这实际上是要求：

$$\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial q_i} = 0. \tag{1.12}$$

利用拉格朗日方程，我们得到

$$\frac{d}{dt}\left[\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i}\right] = 0. \tag{1.13}$$

因此，我们找到了空间平移不变性对应的守恒量：体系的总动量

$$p_i \equiv \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i}. \tag{1.14}$$

因此在本节，我们得到一个重要的经验：空间平移不变性对应动量守恒。

另外，假设我们对一个体系内所有粒子施加一个**相同的空间平移**，而此时体系的拉格朗日量保持不变的话，我们也可以称该体系具有空间平移不变性。即：

$$\mathscr{L}(t, \boldsymbol{q}_i, \dot{\boldsymbol{q}}_i) \to \mathscr{L}(t, \boldsymbol{q}_i + \boldsymbol{\epsilon}, \dot{\boldsymbol{q}}_i), \qquad \boldsymbol{q}_i \to \boldsymbol{q}_i + \boldsymbol{\epsilon}. \tag{1.15}$$

其中，$\boldsymbol{\epsilon}$ 为空间平移的大小，他与时间无关。在这一小章节内，我们用了三维矢量表示坐标与速度，下标 i 改为标记粒子编号。显然要求拉格朗日量具有空间平移不变性等效于：

$$\sum_i \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \boldsymbol{q}_i} = 0. \tag{1.16}$$

该方程也可以被看作是作用于系统上的合力为 0（或沿某方向合力为 0）。对 i 的求和可以看作是对所有粒子的求和。力的方向由 $\boldsymbol{q}$ 决定。再次利用拉格朗日方程，我们得到

$$\frac{d}{dt}\sum_i \left[\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\boldsymbol{q}}_i}\right] = 0. \tag{1.17}$$

因此，我们找到了空间平移不变性对应的守恒量：体系的总动量

$$\boldsymbol{P} \equiv \sum_i \boldsymbol{p}_i \equiv \sum_i \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{\boldsymbol{q}}_i}. \tag{1.18}$$

第四节　哈密顿量与哈密顿方程

关键字：哈密顿量；哈密顿方程；勒让德变换。

在以上的描述中，体系的拉格朗日量是由广义坐标 q_i 以及广义速度 $\dot{q}_i$ 来描述的。但同样的，有另外一套等价的描述方式就是用广义坐标 q_i 以及广义动量 $p_i = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i}$。这两套等价描述的表达方式之间的转换就需要用到勒让德变换。我们所用到的勒让德变换比较简单。方法如下：不考虑显含时间的情况下，拉格朗日量的全微分：

$$d\mathscr{L} = \sum_i \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i\right] = \sum_i \left[\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i}\right) dq_i + \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i\right] = \sum_i \left[\dot{p}_i dq_i + p_i d\dot{q}_i\right]. \tag{1.19}$$

在上式的推导过程中，我们先后用到了拉格朗日方程以及广义动量的表达式。下面一步我们可以将 $d\dot{q}_i$ 凑成全微分的形式移到公式左边，然后可得，

$$dH(t, q_i, p_i) \equiv d(\sum_i p_i\dot{q}_i - \mathscr{L}) = \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \dot{p}_i dq_i. \tag{1.20}$$

结合之前我们得到的能量表达式，我们发现哈密顿量就是能量用广义坐标和广义动量的表达形式。然后我们就可以很容易的得到如下哈密顿方程：

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \qquad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i. \tag{1.21}$$

哈密顿量对时间的全导数为：

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i}\dot{p}_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i}\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial t}. \tag{1.22}$$

上式的推导用到了哈密顿方程。当哈密顿量不**显含**时间的时候，显然 $dH/dt = 0$。也就是说能量/哈密顿量是守恒的。

第五节 泊松括号

关键字：守恒量；泊松括号；对易关系。

假设有一力学量，$f(p, q, t)$ 是广义坐标 p，广义动量 q 和时间 t 的函数。自然的，它对时间的全导数为：

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \frac{\partial f}{\partial q_i}\dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial f}{\partial p_i}\dot{p}_i = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right). \tag{1.23}$$

我们将第二项定义为泊松括号：

$$\{H, f\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial H}{\partial p_i}\frac{\partial f}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i}\frac{\partial f}{\partial p_i}\right). \tag{1.24}$$

如果，f 是一个不显含时间的守恒量，自然的，我们就要求，$\frac{df}{dt} = \{H, f\} = 0$。这和我们量子力学中，守恒力学量算符必须与哈密顿量对易是类似的。

更进一步，我们可以定义任意两个力学量算符的泊松括号：

$$\{f, g\} = \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i} - \frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}\right) = -\{g, f\}. \tag{1.25}$$

这和我们在量子力学中学到的对易/不对易关系式是一致的。

第二章
狭义相对论回顾

参考书：J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Sec. 11.3 ~ 11.7.

第一节　洛伦兹变换

正规洛伦兹变换：可以分为无穷多个无穷小变换的连续变换。非正规洛伦兹变换：分离变换，如时间反演，空间反演。

正规洛伦兹变换也包含两种，Lorentz boost 和洛伦兹转动。一般情况，我们定义四维坐标：

$$x^\mu = \{x^0, x^1, x^2, x^3\} = \{ct, x, y, z\}. \tag{2.1}$$

经过一个洛伦兹变换，我们换到另外一个惯性系 X^μ，他们之间的关系可以表述为：

$$X^\mu = a^\mu{}_\nu x^\nu. \tag{2.2}$$

注意：μ，ν 指标有先后的区别。写成矩阵的形式为：

$$\begin{pmatrix} X^0 \\ X^1 \\ X^2 \\ X^3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a^0{}_0 & a^0{}_1 & a^0{}_2 & a^0{}_3 \\ a^1{}_0 & a^1{}_1 & a^1{}_2 & a^1{}_3 \\ a^2{}_0 & a^2{}_1 & a^2{}_2 & a^2{}_3 \\ a^3{}_0 & a^3{}_1 & a^3{}_2 & a^3{}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix}. \tag{2.3}$$

即 Lorentz transformation 将 x^ν 线性地映射到 X^μ。我们有：

$$\frac{\partial X^\mu}{\partial x^\nu} = a^\mu{}_\nu. \tag{2.4}$$

注意上下标。

最常见的是 Lorentz boost。沿 z 轴速度为 v_z 的 boost 可以表述为：

$$X^0 = \gamma(x^0 - \beta x^3), \tag{2.5}$$

$$X^3 = \gamma(x^3 - \beta x^0), \tag{2.6}$$

$$X^1 = x^1, \tag{2.7}$$

$$X^2 = x^2. \tag{2.8}$$

其中，$\beta = v_z/c$，$\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$。

第二节　洛伦兹标量

我们定义两点之间的距离为 $s(x, y)$。很容易证明该距离在任何惯性系下都是相等的。即：

$$\begin{aligned} s^2(x,y) &= (x^0 - y^0)^2 - (x^1 - y^1)^2 - (x^2 - y^2)^2 - (x^3 - y^3)^2 \\ &= (X^0 - Y^0)^2 - (X^1 - Y^1)^2 - (X^2 - Y^2)^2 - (X^3 - Y^3)^2. \end{aligned} \tag{2.9}$$

它随惯性坐标系的选取无关。当然，s^2 可以大于 0、等于 0 与小于 0。这一点与三维欧式几何里面的距离是不一样的。

第三节　洛伦兹矢量

对于矢量，我们要区分协变矢量（covariant vector）和逆变矢量（contravariant vector）。对于任意矢量，我们总是可以定义逆变矢量：$A^\mu = (A^0, A^1, A^2, A^3)$ 以及协变矢量 $A_\mu = (A_0, A_1, A_2, A_3) = (A^0, -A^1, -A^2, -A^3)$。

逆变矢量：逆变矢量在洛伦兹变换下的变换规律为：

$$A'^\alpha = \frac{\partial X^\alpha}{\partial x^\beta} A^\beta = a^\alpha{}_\beta A^\beta. \tag{2.10}$$

协变矢量：协变矢量在洛伦兹变换下的变换规律为：

$$B'_\alpha = \frac{\partial x^\beta}{\partial X^\alpha} B_\beta. \tag{2.11}$$

二者的点积为：

$$B' \cdot A' = B'_\alpha A'^\alpha = \frac{\partial x^\beta}{\partial X^\alpha} B_\beta \frac{\partial X^\alpha}{\partial x^\gamma} A^\gamma = \frac{\partial x^\beta}{\partial x^\gamma} B_\beta A^\gamma = \delta^\beta_\gamma B_\beta A^\gamma = B \cdot A. \tag{2.12}$$

即：协变矢量与逆变矢量的点乘是一个 Lorentz 标量。

第四节　度规

狭义相对论里面另一个重要的概念是度规（metric tensor）：$g_{\mu\nu}$

$$g_{00} = 1, \qquad g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1. \tag{2.13}$$

其他分量均为 0。

几个有用关系式：

$$g^{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta}, \qquad g_{\alpha\gamma}g^{\gamma\beta} = \delta_{\alpha}^{\beta}. \tag{2.14}$$

协变矢量与逆变矢量可以通过度规相互转化：

$$A^{\mu} = g^{\mu\nu}A_{\nu}, \qquad A_{\mu} = g_{\mu\nu}A^{\nu}. \tag{2.15}$$

矢量间的点乘：

$$A \cdot B = A^{\mu}B_{\mu} = g_{\mu\nu}A^{\mu}B^{\nu} = g^{\mu\nu}A_{\mu}B_{\nu} \tag{2.16}$$

$$= B^0A_0 + B^1A_1 + B^2A_2 + B^3A_3 = B^0A^0 - B^1A^1 - B^2A^2 - B^3A^3 \tag{2.17}$$

关于度规的理解：我们考察三维欧式空间内的两个矢量点积：

$$\boldsymbol{V} \cdot \boldsymbol{W} = (v^1\boldsymbol{e}_1 + v^2\boldsymbol{e}_2 + v^3\boldsymbol{e}_3) \cdot (w^1\boldsymbol{e}_1 + w^2\boldsymbol{e}_2 + w^3\boldsymbol{e}_3) = v^iw^j\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_j = v^iw^jg_{ij}. \tag{2.18}$$

即三维欧式空间中，度规就是：$g_{ij} \equiv \boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_j$。当我们选择直角坐标系时，$g_{ij} = \delta_{ij}$。

基于以上我们对于度规的理解，那么我们就可以更好的欣赏逆变矢量与协变矢量之间的对应关系。逆变矢量的定义为：

$$\boldsymbol{A} = A^i\boldsymbol{e}_i \tag{2.19}$$

由 A^i 构建的矢量。那么协变矢量定义就是 $\boldsymbol{A}$ 在基矢 $\boldsymbol{e}_j$ 上的投影：

$$A_j \equiv \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{e}_j = A^i\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_jA^ig_{ij}. \tag{2.20}$$

这里，我们用到了爱因斯坦求和规则。一个指标只能出行一次或者两次。出现一次的时候为明指标，表示该物理量为一个矢量。出现两次的时候，一定一个在上，一个在下。称之为哑指标，默认对该指标求和。度规张量可以将下指标提升为上指标，也可以将上指标下降为下指标。

传统的欧式几何中，通常不区分协变矢量与逆变矢量，是因为这时候，我们通常采用正交

的直角坐标基矢，协变矢量与逆变矢量是相同的。在狭义相对论中，我们需要用到协变矢量、逆变矢量。我们处理的都是惯性参考系，仍然是平直时空，因此度规张量是一个常数张量矩阵。但在广义相对论的时候，我们讲弯曲时空，这时候，度规张量就是一个坐标依赖的张量函数。

第五节 其他有用的几个关系式

约定：相同指标求和。

$$\frac{\partial}{\partial x^{\alpha}} = \frac{\partial X^{\beta}}{\partial x^{\alpha}} \frac{\partial}{\partial X^{\beta}}, \tag{2.21}$$

$$\frac{\partial}{\partial x^{\alpha}} = (\frac{\partial}{\partial x_0}, \vec{\nabla}) = \partial_{\alpha}, \tag{2.22}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} = (\frac{\partial}{\partial x_0}, -\vec{\nabla}) = \partial^{\alpha}, \tag{2.23}$$

$$\partial^{\alpha} A_{\alpha} = \partial_{\alpha} A^{\alpha} = \frac{\partial}{\partial x_0} A^0 + \vec{\nabla} \cdot \vec{A}, \tag{2.24}$$

$$\partial_{\alpha} \partial^{\alpha} = \frac{\partial^2}{\partial x_0^2} - \nabla^2 = \Box = \Box^2, \tag{2.25}$$

其中，$\Box$ 或 $\Box^2$ 是达朗贝尔算子（d'Alembert operator），其平方号可加可不加。$\nabla^2 = \Delta$ 是拉普拉斯算子。

第六节 自然单位制

在高能物理中，通常采用的一个单位制是自然单位制。在这种单位制下，$\hbar = c = 1$。物理量的量纲都统一用质量的 n 次幂来表示。

如：质量、能量、动量的量纲为 1。长度、时间的量纲为 -1。

第三章
量子力学回顾

第一节 基本概念

在本节，我们回顾一下量子力学的几个重要概念。

（1）量子力学是建构在态矢与力学量算符之上的。

（2）态的叠加原理：

$$c_1|A\rangle + c_2|B\rangle = |R\rangle. \tag{3.1}$$

（3）线性代数：

$$\langle A|A\rangle \geq 0, \tag{3.2}$$
$$\langle B|A\rangle = \langle A|B\rangle^*, \text{(complex number)} \tag{3.3}$$
$$\langle B|(c_1|A_1\rangle + c_2|A_2\rangle) = c_1\langle B|A_1\rangle + c_2\langle B|A_2\rangle. \tag{3.4}$$

（4）力学量算符：

$$x_i \to \hat{x}_i, \tag{3.5}$$
$$p_i \to \hat{p}_i. \tag{3.6}$$

某经典力学量的量子力学对应：$\Omega(x_i, p_i) \to \hat{\Omega}(x_i \to \hat{x}_i, p_i \to \hat{p}_i)$。

（5）力学量算符的具体形式取决于所采用的表象。通常采用的一个表象是坐标表象，这时，

$$\hat{x}_i = x_i, \qquad \hat{p}_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}, \qquad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}. \tag{3.7}$$

（6）对易关系式：$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0, \qquad [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, \qquad [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{3.8}$$

两个力学量算符不对易，意味着这两个力学量没有办法同时确定（不确定性原理）。

（7）本征态与完备基矢。

$$\hat{\Omega}|\omega_i\rangle = \Omega_i|\omega_i\rangle. \tag{3.9}$$

我们称这个方程为力学量算符 $\hat{\Omega}$ 的本征方程，其中，$|\omega_i\rangle$ 为力学量算符的本征态，c-number Ω_i 为该力学量算符的本征值。力学量算符 $\hat{\Omega}$ 的所有本征解构成完备基矢。任何态都可以在该基矢空间展开：

$$|R\rangle = \sum_i |\omega_i\rangle\langle\omega_i|R\rangle = \sum_i c_i|\omega_i\rangle. \tag{3.10}$$

其中，$c_i = \langle\omega_i|R\rangle$ 是个 c 数。而且 $\langle\omega_i|\omega_j\rangle = \delta_{ij}$ 满足正交归一条件。

（8）力学量期待值：$\bar{\Omega} = \langle\psi|\hat{\Omega}|\psi\rangle$.

（9）Schrödinger Equation

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi = [\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)]\psi = [-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)]\psi. \tag{3.11}$$

本质上讲，Schrödinger equation 对应的是 $E = T + V = \vec{p}^2/2m + V$。显然是不满足 Lorentz 协变性的。忽略势能时，相对论协变性要求，

$$E = \sqrt{\vec{p}^2c^2 + m_0^2c^4}. \tag{3.12}$$

因此，Schrödinger equation 明显不满足相对论协变性的要求，它只是在 $\vec{p}^2 \ll m_0^2c^2$ 下的一个近似。

$$E = m_0c^2\sqrt{1 + \frac{\vec{p}^2}{m_0^2c^2}} = m_0c^2\left(1 + \frac{1}{2}\frac{\vec{p}^2}{m_0^2c^2} + \cdots\right). \tag{3.13}$$

第二节　不确定性原理

在本章节，我们首先向大家展示一下如何从不对易关系式推导出不确定性关系，随后向大家展示一下，海森堡不确定性原理与傅立叶变换之间的等价关系。

不对易关系式与不确定性原理。假设有 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 两个力学量算符不对易，即 $[\hat{A},\hat{B}] = i\hat{C} \neq 0$。

其中，$\hat{C}$ 为另外一个新的力学量算符。之所以有 i 因子，是因为 $[\hat{A},\hat{B}]^\dagger = -[\hat{A},\hat{B}]$。

力学量算符的不确定度被定义为（方差）：

$$\Delta A^2 \equiv \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2 = \langle (\hat{A} - \bar{A})^2 \rangle \equiv \langle \hat{\hat{A}}^2 \rangle. \tag{3.14}$$

其中，$\bar{A} \equiv \langle \hat{A} \rangle$ 为算符 $\hat{A}$ 在某量子态上的期待值，为一固定数。

现在我们计算 $\Delta A^2 \Delta B^2$：

$$\Delta A^2 \Delta B^2 = \langle \psi | \hat{\hat{A}}^2 | \psi \rangle \langle \psi | \hat{\hat{B}}^2 | \psi \rangle = \langle \hat{\hat{A}}\psi | \hat{\hat{A}}\psi \rangle \langle \hat{\hat{B}}\psi | \hat{\hat{B}}\psi \rangle. \tag{3.15}$$

即：算符 $\hat{\hat{A}}$ 作用在某（归一的）量子态上时，实际上是将其映射到同一线性空间的另外一个量子态，用 $|\hat{\hat{A}}\psi\rangle$ 标记。该新量子态一般情况下不归一。

下面，利用 Schwarz 不等式，$|\langle u|v\rangle|^2 \le \langle u|u\rangle\langle v|v\rangle$。该不等式的证明方法如下：

$$\text{(1) Define: } |z\rangle \equiv |v\rangle - \frac{\langle u|v\rangle}{\langle u|u\rangle}|u\rangle. \tag{3.16}$$

$$\text{(2) Calculate: } \langle z|z\rangle \ge 0. \tag{3.17}$$

$$\text{(3) Obtain: } \langle u|u\rangle\langle v|v\rangle \ge \langle u|v\rangle\langle v|u\rangle. \tag{3.18}$$

$$\text{Q.E.D.} \tag{3.19}$$

因此，我们得到：

$$\begin{aligned} \Delta A^2 \Delta B^2 &= \langle \hat{\hat{A}}\psi | \hat{\hat{A}}\psi \rangle \langle \hat{\hat{B}}\psi | \hat{\hat{B}}\psi \rangle & (3.20) \\ &\ge \langle \hat{\hat{A}}\psi | \hat{\hat{B}}\psi \rangle \langle \hat{\hat{B}}\psi | \hat{\hat{A}}\psi \rangle = |\langle \psi | \hat{\hat{A}}\hat{\hat{B}} | \psi \rangle|^2. & (3.21) \end{aligned}$$

下面，我们将 $\hat{\hat{A}}\hat{\hat{B}}$ 写为

$$\hat{\hat{A}}\hat{\hat{B}} = \frac{1}{2}(\hat{\hat{A}}\hat{\hat{B}} + \hat{\hat{B}}\hat{\hat{A}}) + \frac{1}{2}(\hat{\hat{A}}\hat{\hat{B}} - \hat{\hat{B}}\hat{\hat{A}}) = \frac{1}{2}\{\hat{\hat{A}},\hat{\hat{B}}\} + \frac{1}{2}[\hat{\hat{A}},\hat{\hat{B}}] \tag{3.22}$$

于是得到，

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \ge \left| \frac{1}{2}\langle \psi | \{\hat{\hat{A}},\hat{\hat{B}}\} | \psi \rangle + \frac{i}{2}\langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle \right|^2. \tag{3.23}$$

注意到：$\{\hat{\hat{A}},\hat{\hat{B}}\}$ 与 $\hat{C}$ 都是厄米算符，他们的期待值都是实数。因此，我们知道，上面这个式子其实是一个实部加一个虚部的形式。其模为

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \ge \left| \frac{1}{2}\langle \psi | \{\hat{\hat{A}},\hat{\hat{B}}\} | \psi \rangle + \frac{i}{2}\langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle \right|^2 = \frac{1}{4}\langle \psi | \{\hat{\hat{A}},\hat{\hat{B}}\} | \psi \rangle^2 + \frac{1}{4}\langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle^2. \tag{3.24}$$

如果 $\hat{A}, \hat{B}$ 算符的对易关系式比较特殊，$\hat{C}$ 为一具体数乘以单位算符的形式，例如 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbb{I}$，那么第二项期待值对于任意一个态都是常数。我们有

$$\Delta x^2 \Delta p^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \tag{3.25}$$

从这里，我们可以看出，如果两个力学量算符不对易，那么他们之间不存在共同完备本征态。然而，这并不一定意味着二者之间一定存在不确定性关系。如果两个力学量之间存在不确定性关系，那么必须二者的对易式为一个常数（纯虚数乘以单位算符的形式）。

举个具体的粒子，自旋 1/2 粒子的自旋算符：

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i \tag{3.26}$$

其中，$\hat{\sigma_i}$ 为泡利矩阵。显然 σ_x 与 σ_z 并不对易。那么我们可以研究某个确定量子态的不确定度：取沿着 z 方向正向极化的量子态 $|z, +\rangle$ 为例：

$$\Delta S_z^2 = \langle z, +|\hat{S}_z^2|z, +\rangle - \langle z, +|\hat{S}_z|z, +\rangle^2 = 0, \tag{3.27}$$

$$\Delta S_x^2 = \langle z, +|\hat{S}_x^2|z, +\rangle - \langle z, +|\hat{S}_x|z, +\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \neq \infty \tag{3.28}$$

显然，$\Delta S_x^2 \Delta S_z^2 = 0$。注意其与坐标动量不确定关系之间的区别。

另外一个粒子，计算沿 y 方向正向极化量子态 $|y, +\rangle$ 的不确定度：

$$\Delta S_z^2 = \langle y, +|\hat{S}_z^2|y, +\rangle - \langle y, +|\hat{S}_z|y, +\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4}, \tag{3.29}$$

$$\Delta S_x^2 = \langle y, +|\hat{S}_x^2|y, +\rangle - \langle y, +|\hat{S}_x|y, +\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4}. \tag{3.30}$$

这时，$\Delta S_x^2 \Delta S_z^2 = \frac{\hbar^4}{16}$。

总结：并不是对于任意某量子态，$\Delta S_x^2 \Delta S_z^2$ 都大于某确定数值。

下面，我们简单的讨论一下不确定性关系与傅立叶变换之间的联系。

坐标表象波函数与动量表象波函数之间满足傅立叶变换关系：

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{ipx/\hbar} \phi(p), \tag{3.31}$$

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx e^{-ipx/\hbar} \psi(x) \tag{3.32}$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx e^{-ipx/\hbar} \int dp' e^{ip'x/\hbar} \phi(p') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' (2\pi) \delta(\frac{p - p'}{\hbar}) \phi(p'). \tag{3.33}$$

其中，下标 i 指代特定的一个方向。这里我们将傅立叶变换的 2π 因子在对动量和坐标一边放了

一半，他们是对称的。这是数学上定义傅立叶变换的方法，物理上，一般都是将这个因子放在对坐标的积分上。但这两种做法只是约定不同，最终是等价的。

因此，我们在坐标表象下计算 $(\Delta x)(\Delta p)$：

$$(\Delta x)^2 \equiv \int dx\psi^*(x)(x-\bar{x})^2\psi(x), \tag{3.34}$$

$$(\Delta p)^2 \equiv \int dx\psi^*(x)(\hat{p}-\bar{p})^2\psi(x). \tag{3.35}$$

我们将第二行做个傅立叶变换：

$$(\Delta p)^2 = \int dx\psi^*(x)(\hat{p}-\bar{p})^2\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\psi^*(x)(\hat{p}-\bar{p})^2\int dp e^{ipx/\hbar}\phi(p) \tag{3.36}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\int dp\psi^*(x)\phi(p)e^{ipx/\hbar}(p-\bar{p})^2. \tag{3.37}$$

现在我们在这里面插入一个恒等于 1 的相因子：

$$(\Delta x)^2 = \int dx\psi^*(x)e^{i\bar{p}x/\hbar}(x-\bar{x})^2\psi(x)e^{-i\bar{p}x/\hbar} = \int dx|S(x)|^2(x-\bar{x})^2. \tag{3.38}$$

其中，$S(x)=\psi(x)e^{-i\bar{p}x/\hbar}$。$\bar{p}$ 是一个 c 数。（下面计算公式3.41时，我们连续用到两次分布积分。）

$$(\Delta p)^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\int dp\psi^*(x)e^{i\bar{p}x/\hbar}\phi(p)e^{i(p-\bar{p})x/\hbar}(p-\bar{p})^2 \tag{3.39}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\int dp\psi^*(x)e^{i\bar{p}x/\hbar}\phi(p)\frac{\hbar^2}{i^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}e^{i(p-\bar{p})x/\hbar} \tag{3.40}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\phi(p)\int dxS^*(x)\frac{\hbar^2}{i^2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}e^{i(p-\bar{p})x/\hbar} \tag{3.41}$$

$$= -\hbar^2\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dx\int dp\phi(p)e^{i(p-\bar{p})x/\hbar}\frac{\partial^2 S^*(x)}{\partial x^2} \tag{3.42}$$

$$= -\hbar^2\int dxS(x)\frac{\partial^2 S^*(x)}{\partial x^2} = \hbar^2\int dx\left|\frac{\partial S(x)}{\partial x}\right|^2. \tag{3.43}$$

利用不等式关系：

$$\left|\frac{\partial S(x)}{\partial x} + a\frac{x-\bar{x}}{(\Delta x)^2}S(x)\right|^2 \geq 0. \tag{3.44}$$

该不等式关系对于任意 a 都成立。当 a 为实数时，

$$\left|\frac{\partial S(x)}{\partial x}\right|^2 + \frac{a^2(x-\bar{x})^2}{(\Delta x)^4}|S(x)|^2 + a\frac{x-\bar{x}}{(\Delta x)^2}\left(S^*(x)\frac{\partial S(x)}{\partial x} + S(x)\frac{\partial S^*(x)}{\partial x}\right) \geq 0. \tag{3.45}$$

将第三项凑成全微分的形式，我们得到：

$$\left|\frac{\partial S(x)}{\partial x}\right|^2 + \frac{a^2(x-\bar{x})^2}{(\Delta x)^4}|S(x)|^2 + a\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{x-\bar{x}}{(\Delta x)^2}|S(x)|^2\right) - \frac{a}{(\Delta x)^2}|S(x)|^2 \geq 0. \tag{3.46}$$

将该不等式对 dx 做全空间积分，利用边界条件、波函数的归一化，我们得到：

$$\frac{(\Delta p)^2}{\hbar^2} + a^2\frac{1}{(\Delta x)^2} - a\frac{1}{(\Delta x)^2} \geq 0. \tag{3.47}$$

简单变形，我们得到：

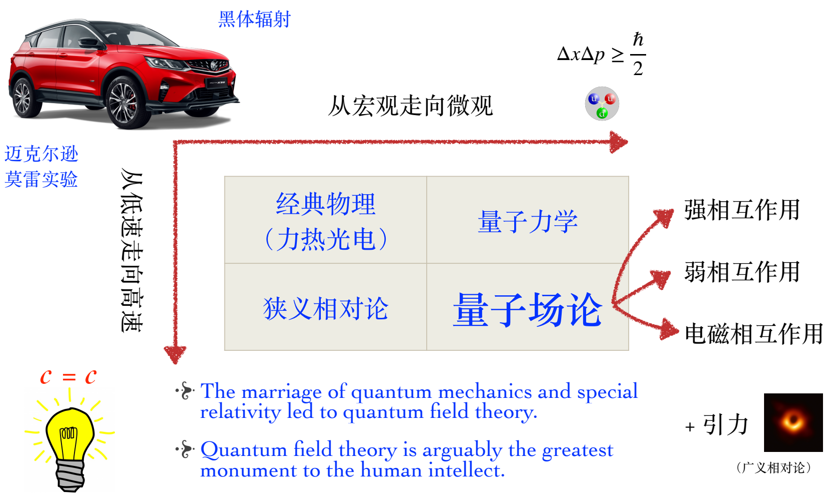
$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq (a-a^2)\hbar^2. \tag{3.48}$$

该等式对于任意 a 值都成立。$\max[a-a^2] = 1/4$ 因此，我们得到：

$$(\Delta x)(\Delta p) \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{3.49}$$

第四章
Klein-Gordon Equation

第一节 为什么要构建相对论协变的理论？



摘自：A. Zee, *Quantum Field Theory, as simply as possible*.

19 世纪末，笼罩在雄伟的经典物理学大厦的两朵巨大的乌云：迈克尔逊莫雷实验以及黑体辐射实验。这两朵巨大的乌云直接导致了物理学沿着两个不同方向的革命：（1）从宏观走向微观，量子物理；（2）从低速走向高速，狭义相对论。

首先，量子物理是对的：氢原子基态能级。其次，狭义相对论也一定是对的，$c = c$。因此，我们知道，这两个理论一定是一个更完善理论在某些条件下的近似。这个更完善的理论，就是量子场论。

相对论量子力学就是在发展这样一套更完善理论的过程中的一个短暂的过渡。在这里，我们主要学习，在发展量子场论的过程中，伟大的科学家们是如何构建新理论的。在这过程中，取得了什么成就以及遇到了什么问题？这样，才能更欣赏量子场论的成就。

第二节 相对论协变理论的首次尝试

Klein-Gordon 方程是我们从非相对论性理论走向相对论协变理论的首次尝试。非相对论量子力学是由 Schrödinger 方程描述的（自由粒子）：

$$\hat{E}\psi(\vec{x},t) = \hat{H}\psi(\vec{x},t), \tag{4.1}$$

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2, \quad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}. \tag{4.2}$$

而相对论协变性要求

$$E = \sqrt{\vec{p}^2c^2 + m_0^2c^4}. \tag{4.3}$$

自然的我们猜想，相对论协变的量子理论应该由如下方程描述：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = \left(\sqrt{-\hbar^2c^2\nabla^2 + m_0^2c^4}\right)\psi(\vec{x},t). \tag{4.4}$$

但这个猜想有个很大的问题：右侧是对 nabla 算子求平方根。我们可以对其做泰勒展开，会发现这个方程包含对空间位置的无穷阶导数。这样的方程非常难解，而且是一个非定域的方程。我们描述物理规律不会是非定域的方程，会有因果性的问题。解决办法就是方程左右两侧分别再作用一次对时间的偏导数，并利用 $[\hat{E},\hat{H}] = 0$，我们得到：

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = (-\hbar^2c^2\nabla^2 + m_0^2c^4)\psi. \tag{4.5}$$

这也对应于 $E^2 = \vec{p}^2c^2 + m_0^2c^4$。简单变形，我们得到：

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial(ct)^2} - \nabla^2 + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right]\psi = \left(\Box + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}\right)\psi = 0. \tag{4.6}$$

我们可以定义四维动量算符：

$$\hat{p}^\mu = i\hbar\partial^\mu = i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\mu} = i\hbar(\frac{\partial}{\partial(ct)}, -\vec{\nabla}), \tag{4.7}$$

$$\hat{p}_\mu = i\hbar\partial_\mu = i\hbar\frac{\partial}{\partial x^\mu} = i\hbar(\frac{\partial}{\partial(ct)}, \vec{\nabla}). \tag{4.8}$$

这样，自由粒子满足的 Klein-Gordon 方程也可以写为：

$$\hat{p}^\mu\hat{p}_\mu\psi = m_0^2c^2\psi. \tag{4.9}$$

自由粒子满足的哈密顿量与动量算符是对易的。因此，我们可以用动量本征态去构建一般解。也就是平面波解。本征值为 $p^\mu = (E/c, \vec{p})$ 的平面波解为：

$$\psi = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} p_\mu x^\mu\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - \vec{p}\cdot\vec{x})\right]. \tag{4.10}$$

将平面波解代入 Klein-Gordon 方程，我们就得到了 E 与 $\vec{p}$ 之间要满足的关系式：

$$E^2/c^2 - \vec{p}^2 = m_0^2 c^2. \tag{4.11}$$

即：$E = \pm\sqrt{\vec{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4}$。能量存在两个解，分别取正负值。历史上，这个负能解的存在是大家抛弃 Klein-Gordon 方程，进一步去推导出 Dirac 方程的原因之一。但是，大家推导出 Dirac 方程之后，发现仍然存在负能解。于是，Dirac 就将负能解解释成反粒子。当时，反粒子在实验上还没有被看到。Dirac 对负能解的解释，预言了反粒子的存在。后来，实验上确实也找到了反粒子，从而验证了理论的成功。

这是历史上的发展，现在回过头来看 Klein-Gordon 方程，这个负能解其实也可以被解释成反粒子，因此也不是问题。现在我们知道了，Dirac 方程是描述自旋 1/2 粒子的运动方程，而 Klein-Gordon 方程是描述自旋为 0 粒子的运动方程。这一点，我们可以从下一节 Klein-Gordon 方程的相对论协变性看出来。

第三节 Klein-Gordon 方程的相对论协变性

在 x^μ 坐标系中，Klein-Gordon 方程可以写为：

$$[\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu - m_0^2 c^2]\psi(x) = 0. \tag{4.12}$$

在 $x'^\mu = a^\mu{}_\nu x^\nu$ 坐标系中，如果 Klein-Gordon 方程具有相对论协变性，那么该方程应该可以写为：

$$[\hat{p}'^\mu \hat{p}'_\mu - m_0^2 c^2]\psi'(x') = 0. \tag{4.13}$$

显然，

$$\frac{\partial}{\partial x'^\mu}\frac{\partial}{\partial x'_\mu} = \frac{\partial x^\alpha}{\partial x'^\mu}\frac{\partial}{\partial x^\alpha}\frac{\partial x_\beta}{\partial x'_\mu}\frac{\partial}{\partial x_\beta}. \tag{4.14}$$

根据前面我们定义的 x^μ 与 x'^μ 之间的 Lorentz 变换关系式，我们有：

$$\frac{\partial}{\partial x'^\mu}\frac{\partial}{\partial x'_\mu} = (a^{-1})^\alpha{}_\mu (a^{-1})_\beta{}^\nu \partial_\alpha \partial^\beta = a_\mu{}^\alpha a^\mu{}_\beta \frac{\partial}{\partial x^\alpha}\frac{\partial}{\partial x_\beta}. \tag{4.15}$$

注意，由于 $x^\mu x_\mu = x'^\mu x'_\mu$ 是个标量，因此，我们要求

$$x'^\mu x'_\mu = a^\mu{}_\alpha x^\alpha a_\mu{}^\beta x_\beta = \delta^\beta_\alpha x^\alpha x_\beta, \qquad \rightarrow \qquad a^\mu{}_\alpha a_\mu{}^\beta = \delta^\beta_\alpha. \tag{4.16}$$

于是，我们得到：

$$\frac{\partial}{\partial x'^\mu}\frac{\partial}{\partial x'_\mu} = \delta^\alpha_\beta \frac{\partial}{\partial x^\alpha}\frac{\partial}{\partial x_\beta} = \frac{\partial}{\partial x^\mu}\frac{\partial}{\partial x_\mu} \tag{4.17}$$

因此，我们要求满足相对论协变性的 Klein-Gordon 方程就是：

$$[\hat{p}'^\mu \hat{p}'_\mu - m_0^2c^2]\psi'(x') = [\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu - m_0^2c^2]\psi'(x') = 0. \tag{4.18}$$

即：我们要求 $\psi'(x') = \psi(x)$。因此在场论中，Klein-Gordon 场也被称为标量场。

我们可以考察一下我们的平面波解就可以很容易验证上面的表达式：

$$\psi'(x') = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}p'^\mu x'_\mu\right] = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}p^\mu x_\mu\right] = \psi(x). \tag{4.19}$$

第四节 守恒流

在 Schrödinger 量子力学中，波函数的模平方被解释为几率密度。原因如下：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = [-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V]\psi, \tag{4.20}$$

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^* = [-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V]\psi^*. \tag{4.21}$$

这里，我们假设势能 V 是实数。第一个公式左边乘上 ψ^*，第二个公式左边乘上 ψ。然后取二者之差，我们得到：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}[\psi^*\psi] = -\frac{\hbar^2}{2m}[\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*] = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\cdot[\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*]. \tag{4.22}$$

于是，我们得到这样一个流守恒公式：

$$\frac{\partial}{\partial t}[\psi^*\psi] + \vec{\nabla}\cdot\frac{i\hbar}{2m}[\psi\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi] = 0, \tag{4.23}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0. \tag{4.24}$$

第二个流守恒公式，大家肯定在电磁学中见过，其实就是电流连续性方程。ρ 是电荷密度，$\vec{j}$ 是电流密度矢量。考虑一个对三维体积的积分，

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho dV = -\int_V \vec{\nabla}\cdot\vec{j}dV = -\oint_S \vec{j}\cdot d\vec{S}. \tag{4.25}$$

等式左边是单位时间内，体积 V 中电荷增大的数目。等式右边是单位时间内流过体积 V 表面 S 的电荷量。负号是因为我们约定流出的方向为正方向。在量子力学中，我们将 $\psi^*\psi$ 解释成几率密度，自然的，后面这一串东西就是几率流密度矢量。

我们也想在 Klein-Gordon 方程中找到类似的几率解释。首先考察以下两个方程：

$$\psi^*(\hat{p}^\mu\hat{p}_\mu - m_0^2c^2)\psi = 0, \qquad \psi(\hat{p}^\mu\hat{p}_\mu - m_0^2c^2)\psi^* = 0. \tag{4.26}$$

将上下两个等式相减，我们得到：

$$\psi^*\partial_\mu\partial^\mu\psi - \psi\partial_\mu\partial^\mu\psi^* = 0. \tag{4.27}$$

利用分步积分，

$$\partial_\mu(\psi^*\partial^\mu\psi) - (\partial_\mu\psi^*)(\partial^\mu\psi) - \partial_\mu(\psi\partial^\mu\psi^*) + (\partial_\mu\psi)(\partial^\mu\psi^*) = \partial_\mu(\psi^*\partial^\mu\psi - \psi\partial^\mu\psi^*) = 0. \tag{4.28}$$

因此，我们找到了一个 $\partial_\mu j^\mu = 0$ 形式的守恒流。写成分量的形式：

$$\frac{\partial}{\partial(ct)}j_0 + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = \frac{\partial}{\partial(ct)}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial(ct)}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial(ct)}\psi^*\right) - \vec{\nabla}\cdot(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*) = 0. \tag{4.29}$$

整理一下，我们可以写成

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla}\vec{j} = 0, \tag{4.30}$$

$$\rho = \frac{1}{c^2}\left(\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right), \tag{4.31}$$

$$\vec{j} = -(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*). \tag{4.32}$$

这个东西就跟我们之前电磁学中学到的电流连续性方程很像。因此，我们也想把 ρ 解释成几率密度，$\vec{j}$ 解释成流出表面的几率流密度。但这里有个严重的问题，就是 ρ 并不是正定的。因此，我们是没办法把它直接解释成几率密度。历史上，这是大家抛弃 Klein-Gordon 方程的又一大原因。现在，我们知道负能解可以被解释成反粒子。因此，我们可以将 ρ 解释成电荷密度，从而解决了正定性问题。

重新定义流密度矢量：

$$j^\mu \equiv \frac{ie\hbar}{2m_0}(\psi^*\partial^\mu\psi - \psi\partial^\mu\psi^*). \tag{4.33}$$

其中，e 为元电荷单位。

动量为 $\vec{p}$ 的平面波解有正负能两个解，$E_p = \pm\sqrt{\vec{p}^2c^2 + m_0^2c^4}$。其波函数为：

$$\psi_\pm = A_\pm \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot x \mp |E_p|t)\right]. \tag{4.34}$$

代入重定义后的流密度矢量：

$$\rho_\pm = \frac{ie\hbar}{2m_0c^2}|A_\pm|^2\left(\mp\frac{i}{\hbar}|E_p| - \pm\frac{i}{\hbar}|E_p|\right) = \pm\frac{e|E_p|}{m_0c^2}|A_\pm|^2. \tag{4.35}$$

通过选择合适的归一化使得

$$\int_V \rho_\pm dV = \pm e = \pm\frac{e|E_p|}{m_0c^2}|A_\pm|^2 V, \qquad \rightarrow \qquad A_\pm = \sqrt{\frac{m_0c^2}{|E_p|V}}. \tag{4.36}$$

这样，我们就可以将 ρ 解释成电荷密度分布。正能解对应的是正粒子（正电荷）的密度分布，负能解对应的是反粒子（负电荷）的密度分布。

那么中性粒子的电荷密度分布会是什么样的呢？我们要求电荷的密度分布 ρ 处处为 0，而且要求电荷流密度矢量 $\vec{j} = 0$，即：

$$\rho \propto \left(\psi^*\frac{\partial}{\partial t}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\right) = 0, \qquad \vec{j} \propto \left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right) = 0. \tag{4.37}$$

因此，我们要求 ψ 为实波函数。即，我们可以构建如下波函数：

$$\psi_{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_+(\vec{p}) + \psi_-(-\vec{p})\right] = \sqrt{\frac{2m_0c^2}{|E_p|V}}\cos\left[\frac{1}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - |E_p|t)\right]. \tag{4.38}$$

第五节 Klein-Gordon 方程的非相对论极限

之前我们提到过，非相对论极限就是对应于 $\vec{p}^2 \ll m_0^2c^2$，这样，

$$E = m_0c^2\sqrt{1 + \frac{\vec{p}^2}{m_0^2c^2}} \sim m_0c^2\left(1 + \frac{1}{2}\frac{\vec{p}^2}{m_0^2c^2}\right) = m_0c^2 + \frac{\vec{p}^2}{2m_0}. \tag{4.39}$$

其中第一项为静止能量（是个常数）。第二项就是我们要的经典动能项。

这样，当静止能量远大于其动能时，（$E \sim m_0c^2$），满足 Klein-Gordon 方程的波函数可以写成：

$$\psi(t,\vec{x}) = \phi(t,\vec{x})\exp\left[-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t\right], \tag{4.40}$$

这样，

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(\frac{\partial}{\partial t}\phi - \frac{i}{\hbar}m_0c^2\phi\right)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t\right], \tag{4.41}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi - 2\frac{i}{\hbar}m_0c^2\frac{\partial\phi}{\partial t} - \frac{1}{\hbar^2}m_0^2c^4\phi\right)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t\right] \approx \left(-2\frac{i}{\hbar}m_0c^2\frac{\partial\phi}{\partial t} - \frac{1}{\hbar^2}m_0^2c^4\phi\right)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t\right]. \tag{4.42}$$

其中，最大的一项贡献是 $m_0^2c^4$，这一项会与 Klein-Gordon 方程中右侧的质量项完全抵消。因此，我们要保留到次最大贡献，即 m_0c^2 项。第一项贡献最小，在非相对论极限下可以忽略掉。将上式代回 Klein-Gordon 方程，我们得到

$$-\frac{\hbar^2}{c^2}\left(-2\frac{i}{\hbar}m_0c^2\frac{\partial\phi}{\partial t} - \frac{1}{\hbar^2}m_0^2c^4\phi\right)\exp\left[-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t\right] = \left(-\hbar^2c^2\nabla^2 + m_0^2c^4\right)\phi\exp\left[-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t\right], \tag{4.43}$$

因此，我们就得到（Schrödinger 方程）：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2\phi. \tag{4.44}$$

第五章 Dirac Equation

第一节　相对论协变理论的再次尝试

之前我们也提到过，我们首次尝试写出一个相对论协变的运动方程的时候，遇到了两大"问题"：（1）负能解；（2）几率流密度的正定性问题。自从我们引进了反粒子的概念，这两大问题其实都已经不是问题了。不管怎样，历史上，大家基于上述原因，进一步探索其它可能的相对论协变理论。

Dirac 从 Schrödinger 方程的思想出发，猜想，具有正定几率密度的波函数所满足的运动方程应该是对时间的一阶偏导数。因此他猜测：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \hat{H}\psi = [-i\hbar c(\hat{\alpha}_1\frac{\partial}{\partial x_1} + \hat{\alpha}_2\frac{\partial}{\partial x_2} + \hat{\alpha}_3\frac{\partial}{\partial x_3}) + \hat{\beta}m_0c^2]\psi. \tag{5.1}$$

（1）这个方程中，$\hat{\alpha}_1$、$\hat{\alpha}_2$ 和 $\hat{\alpha}_3$ 两两之间不能相等。因为，如果任意两个之间相同的话，$E/c = \hat{\alpha}_1(p_x + p_y) + \hat{\alpha}_3 p_z + \hat{\beta}m_0c$，我们就有 $E^2/c^2 = \hat{\alpha}_1^2(p_x^2 + p_y^2 + 2p_xp_y) + \cdots$。从而破坏了相对论协变性。

（2）$\hat{\alpha}_i$ 和 $\hat{\beta}$ 不能是简简单单的 c 数。否则的话，也不满足相对论协变性的要求（以及转动不变性）。

结论：$\hat{\alpha}_i$ 和 $\hat{\beta}$ 必须是算符。我们可以将他们写成 $N\times N$ 矩阵的形式。那么波函数 ψ 也就必须是 N 行 1 列矩阵。即：

$$\psi = \begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\\ \cdots\\ \phi_N\end{pmatrix}, \qquad \hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix}a^i_{11} & a^i_{12} & \cdots & a^i_{1N}\\ a^i_{21} & a^i_{22} & \cdots & a^i_{2N}\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ a^i_{N1} & a^i_{N2} & \cdots & a^i_{NN}\end{pmatrix}. \tag{5.2}$$

我们可以将 Dirac 方程写成分量的形式：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi_\sigma = [-i\hbar(\hat{\alpha}_1\frac{\partial}{\partial x_1} + \hat{\alpha}_2\frac{\partial}{\partial x_2} + \hat{\alpha}_3\frac{\partial}{\partial x_3})_{\sigma\tau} + m_0c^2\hat{\beta}_{\sigma\tau}]\phi_\tau. \tag{5.3}$$

我们要求该方程满足相对论协变性（$E^2 = \vec{p}^2c^2 + m_0^2c^4$），从而可以得出 $\hat{\alpha}_i$，$\hat{\beta}$ 的性质。我们将方程左右两边再次作用对时间的一阶偏导数，我们应该可以返回到 Klein-Gordon equation。即：

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\phi_\sigma = (-i\hbar c\hat{\vec{\alpha}}\cdot\vec{\nabla} + \hat{\beta}m_0c^2)_{\sigma\tau}(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi_\tau) \tag{5.4}$$

$$= (-i\hbar c\hat{\vec{\alpha}}\cdot\vec{\nabla} + \hat{\beta}m_0c^2)_{\sigma\tau}(-i\hbar c\hat{\vec{\alpha}}\cdot\vec{\nabla} + \hat{\beta}m_0c^2)_{\tau\gamma}\phi_\gamma \tag{5.5}$$

$$\stackrel{!}{=} (-\hbar^2c^2\nabla^2 + m_0^2c^4)\phi_\sigma. \tag{5.6}$$

要想满足最后一行的 should be equal to 关系，我们得到：

$$\nabla_x^2: \quad \hat{\alpha}_{1,\sigma\tau}\hat{\alpha}_{1,\tau\gamma} = \delta_{\sigma\gamma}, \tag{5.7}$$

$$\nabla_y^2: \quad \hat{\alpha}_{2,\sigma\tau}\hat{\alpha}_{2,\tau\gamma} = \delta_{\sigma\gamma}, \tag{5.8}$$

$$\nabla_z^2: \quad \hat{\alpha}_{3,\sigma\tau}\hat{\alpha}_{3,\tau\gamma} = \delta_{\sigma\gamma}, \tag{5.9}$$

$$m_0^2c^4: \quad \hat{\beta}_{\sigma\tau}\hat{\beta}_{\tau\gamma} = \delta_{\sigma\gamma}, \tag{5.10}$$

$$\nabla_x\nabla_y: \quad \hat{\alpha}_{1,\sigma\tau}\hat{\alpha}_{2,\tau\gamma} + \alpha_{2,\sigma\tau}\hat{\alpha}_{1,\tau\gamma} = 0, \tag{5.11}$$

$$\nabla_x\nabla_z: \quad \hat{\alpha}_{1,\sigma\tau}\hat{\alpha}_{3,\tau\gamma} + \alpha_{3,\sigma\tau}\hat{\alpha}_{1,\tau\gamma} = 0, \tag{5.12}$$

$$\nabla_y\nabla_z: \quad \hat{\alpha}_{2,\sigma\tau}\hat{\alpha}_{3,\tau\gamma} + \alpha_{3,\sigma\tau}\hat{\alpha}_{2,\tau\gamma} = 0, \tag{5.13}$$

$$\nabla_x m_0c^2: \quad \hat{\alpha}_{1,\sigma\tau}\hat{\beta}_{\tau\gamma} + \beta_{\sigma\tau}\hat{\alpha}_{1,\tau\gamma} = 0, \tag{5.14}$$

$$\nabla_y m_0c^2: \quad \hat{\alpha}_{2,\sigma\tau}\hat{\beta}_{\tau\gamma} + \beta_{\sigma\tau}\hat{\alpha}_{2,\tau\gamma} = 0, \tag{5.15}$$

$$\nabla_z m_0c^2: \quad \hat{\alpha}_{3,\sigma\tau}\hat{\beta}_{\tau\gamma} + \beta_{\sigma\tau}\hat{\alpha}_{3,\tau\gamma} = 0. \tag{5.16}$$

总结成简洁的形式，我们有：

$$\hat{\alpha}_i^2 = \hat{\beta}^2 = \mathbb{I}, \qquad \hat{\alpha}_i\hat{\alpha}_j + \hat{\alpha}_j\hat{\alpha}_i = 2\delta_{ij}\mathbb{I}, \qquad \hat{\alpha}_i\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}_i = 0. \tag{5.17}$$

此外，我们还希望 $\hat{H}$ 是厄米的。于是我们得到 $\hat{\alpha}_i^\dagger = \hat{\alpha}_i$，$\hat{\beta}^\dagger = \hat{\beta}$。也就是说 $\hat{\alpha}_i$ 和 $\hat{\beta}$ 都是厄米算符，他们的本征值都是实数。此外由于 $\hat{\alpha}_i^2 = \mathbb{I}$，因此，$\hat{\alpha}_i$ 的本征解只能是 ±1。

（1）由于 $\hat{\alpha}_i\hat{\beta} + \hat{\beta}\hat{\alpha}_i = 0$ 以及 $\hat{\beta}^2 = 1$，我们得到

$$\mathrm{Tr}[\hat{\alpha}_i] = -\mathrm{Tr}[\hat{\beta}^{-1}\hat{\alpha}_i\hat{\beta}] = -\mathrm{Tr}[\hat{\alpha}_i\hat{\beta}\hat{\beta}^{-1}] = -\mathrm{Tr}[\hat{\alpha}_i] \qquad \rightarrow \qquad \mathrm{Tr}[\hat{\alpha}_i] = 0 \tag{5.18}$$

（2）在 $\hat{\alpha}_i$ 的本征表象下，算符 $\hat{\alpha}_i$ 是对角的。第 n 行 n 列对角元 $a_{i,nn}$ 只能取 ±1。而由于迹为 0，$\sum_{n=1}^N a_{i,nn} = 0$，我们可知，$N$ 必须是偶数。

最小的偶数是 2×2 维矩阵。这时，满足 $\hat{\alpha}_i$、$\hat{\beta}$ 间反对易关系的就是 Pauli 矩阵。最多 3 个线性独立矩阵，无法构建出完整的 $\hat{\alpha}_i$ 和 $\hat{\beta}$。

因此，最小的可能是 4×4 矩阵。在 Dirac 表象下：

$$\hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ \hat{\sigma}_i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}. \tag{5.19}$$

其中，$\mathbb{I}$ 是单位矩阵（按照需要，有时候是 2×2 矩阵，有时候是 4×4 矩阵。）$\hat{\sigma}_{i=1\sim 3}$ 是 Pauli 矩阵。在 $\hat{\sigma}_3$ 本征表象下，

$$\mathbb{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{5.20}$$

综上，我们得到，满足洛伦兹协变性要求的 Dirac 方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = -i\hbar c \left(\sum_{i=1}^{3} \hat{\alpha}_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) + m_0 c^2 \hat{\beta} \psi. \tag{5.21}$$

其中，$\hat{\alpha}_i$ 和 $\hat{\beta}$ 都是 4×4 矩阵，且满足之前给出的反对易关系式。波函数 ψ 是 4×1 旋量，它的每个分量都满足 Klein-Gordon 方程。

第二节　正定的几率密度

首先，Dirac 方程及其厄米共轭：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi = -i\hbar c \left(\sum_{i=1}^{3} \hat{\alpha}_i \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) + m_0 c^2 \hat{\beta} \psi, \tag{5.22}$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi^\dagger = i\hbar c \left(\sum_{i=1}^{3} \frac{\partial \psi^\dagger}{\partial x_i} \hat{\alpha}_i \right) + m_0 c^2 \psi^\dagger \hat{\beta}. \tag{5.23}$$

注意，由于波函数和算符都是矩阵，之前的取复共轭换成了取转置后取复共轭（取 dagger）。第一个公式左乘 $\psi^\dagger$ 减去第二个公式右乘 ψ 得：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(\psi^\dagger \psi) = -i\hbar c \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial x_i}(\psi^\dagger \hat{\alpha}_i \psi) = -i\hbar c \vec{\nabla} \cdot (\psi^\dagger \hat{\vec{\alpha}}_i \psi). \tag{5.24}$$

这样我们就找到了守恒流：

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0. \tag{5.25}$$

其中，$\rho = \psi^\dagger\psi$，$\vec{j} = c\psi^\dagger\hat{\vec{\alpha}}\psi$。我们可以将 ρ 写成分量的形式：

$$\rho = \psi^\dagger\psi = \left(\phi_1^*, \phi_2^*, \phi_3^*, \phi_4^*\right)\begin{pmatrix}\phi_1\\ \phi_2\\ \phi_3\\ \phi_4\end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{4}\phi_i^*\phi_i. \tag{5.26}$$

很容易看出，它是正定的。

对守恒流的体积做积分，我们得到：

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho dV = -\int_V \vec{\nabla}\cdot\vec{j}dV = -\oint \vec{j}\cdot d\vec{S}. \tag{5.27}$$

左边是在体积 V 内找到粒子的几率随时间的变化，右边是流出表面 S 的几率流。

第三节　自由粒子 Dirac 方程的解

我们将 Dirac 方程写成更紧凑的形式，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{x},t) = \left(c\hat{\vec{\alpha}}\cdot\hat{\vec{p}} + m_0c^2\hat{\beta}\right)\Psi(\vec{x},t) = \hat{H}\Psi(\vec{x},t), \qquad \hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{\nabla}. \tag{5.28}$$

显然，对于自由 Dirac 方程，哈密顿量与动量算符对易，他们有共同本征态，我们可以寻找这些共同本征态。首先，我们将波函数对时间的依赖关系拿走，写出能量为 E 的定态 Dirac 方程的解：

$$\Psi(\vec{x},t) = \psi(\vec{x})\exp\left[-\frac{i}{\hbar}Et\right], \tag{5.29}$$

$$\hat{H}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x}). \tag{5.30}$$

现在 $\psi(\vec{x})$ 只包含对空间坐标的依赖项。它是一个 4 行 1 列矩阵。我们将它写成两个二分量的形式：

$$\psi(\vec{x}) = \begin{pmatrix}\phi(\vec{x}) = \begin{pmatrix}\psi_1(\vec{x})\\ \psi_2(\vec{x})\end{pmatrix}\\ \chi(\vec{x}) = \begin{pmatrix}\psi_3(\vec{x})\\ \psi_4(\vec{x})\end{pmatrix}\end{pmatrix}. \tag{5.31}$$

这样，定态 Dirac 方程就变成：

$$E\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} = c\begin{pmatrix}0 & \vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}}\\ \vec{\sigma}\cdot\hat{\vec{p}} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix} + m_0c^2\begin{pmatrix}\mathbb{I} & 0\\ 0 & -\mathbb{I}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi\\ \chi\end{pmatrix}. \tag{5.32}$$

现在，我们寻找处于动量本征态的平面波解，本征值为 $\vec{p}$。那么 Dirac 方程的解可以写成：

$$\begin{pmatrix}\phi(\vec{x})\\ \chi(\vec{x})\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\phi_0\\ \chi_0\end{pmatrix}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x})\right]. \tag{5.33}$$

这样 Dirac 方程就变为：

$$E\phi_0 = c(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p})\chi_0 + m_0c^2\phi_0, \tag{5.34}$$
$$E\chi_0 = c(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p})\phi_0 - m_0c^2\chi_0. \tag{5.35}$$

在这里，$\vec{p}$ 是一个具体的三矢量，不再是一个算符了。根据线性代数，该方程组有非平庸解的条件为：

$$\begin{vmatrix}(E-m_0c^2)\mathbb{I} & -c(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p})\\ -c(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}) & (E+m_0c^2)\mathbb{I}\end{vmatrix} = 0. \tag{5.36}$$

Pauli 矩阵的性质：

$$(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{A})(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{B}) = \vec{A}\cdot\vec{B}\mathbb{I} + i\hat{\vec{\sigma}}\cdot(\vec{A}\times\vec{B}). \tag{5.37}$$

要证明这项性质，我们只需要将上式写成分量的形式：

$$(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{A})(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{B}) = \left(\sum_i \hat{\sigma}_i A_i\right)\left(\sum_j \hat{\sigma}_j B_j\right) = \sum_{ij} A_iB_j\left[\frac{\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j+\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i}{2} + \frac{\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j-\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i}{2}\right] \tag{5.38}$$
$$= \sum_{ij} A_iB_j\left[\delta_{ij}\mathbb{I} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k\right] \tag{5.39}$$

我们发现：

$$E^2 = \vec{p}^2c^2 + m_0^2c^4 \qquad \rightarrow \qquad E = \pm\sqrt{\vec{p}^2c^2+m_0^2c^4}. \tag{5.40}$$

同时，ϕ_0 与 χ_0 间的关系为：

$$\chi_0 = \frac{c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}}{E+m_0c^2}\phi_0, \qquad \phi_0 = \frac{c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}}{E-m_0c^2}\chi_0 \tag{5.41}$$

最终，完整的定态 Dirac 方程的解可以写为：

$$\Psi_{\vec{p},E_p}(\vec{x},t) = N\begin{pmatrix}\phi_0\\ \frac{c\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}}{E_p+m_0c^2}\phi_0\end{pmatrix}\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x}-E_pt)\right], \tag{5.42}$$

其中，$E_p = \pm\sqrt{\vec{p}^2c^2+m_0^2c^4}$.

归一化条件：

$$\phi_0^\dagger \phi_0 = 1, \tag{5.43}$$

$$\int d^3x \Psi^\dagger_{\vec{p}_1,E_p}(\vec{x},t)\Psi_{\vec{p}_2,E_p}(\vec{x},t) = \delta^3(\vec{p}_1 - \vec{p}_2). \tag{5.44}$$

因此，我们有：

$$|N|^2\left(\phi_0^\dagger\phi_0 + \phi_0^\dagger \frac{c^2(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}_1)(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{p}_2)}{(E+m_0c^2)^2}\phi_0\right)(2\pi)^3\hbar^3\delta^3(\vec{p}_1-\vec{p}_2) = \delta^3(\vec{p}_1-\vec{p}_2). \tag{5.45}$$

等效的，我们要求

$$|N|^2 = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{(E+m_0c^2)^2}{(E+m_0c^2)^2+\vec{p}^2c^2} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{(E+m_0c^2)^2}{E^2+m_0^2c^4+2Em_0c^2+\vec{p}^2c^2} \tag{5.46}$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{(E+m_0c^2)^2}{E^2+2Em_0c^2+E^2} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{E+m_0c^2}{2E}. \tag{5.47}$$

第四节　γ 矩阵及双线性协变量

上节课我们推导出了 Dirac 方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = (c\hat{\vec{\alpha}}\cdot\hat{\vec{p}} + m_0c^2\hat{\beta})\psi. \tag{5.48}$$

其中，

$$\hat{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I}\end{pmatrix}, \qquad \hat{\vec{\alpha}} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\vec{\sigma}} \\ \hat{\vec{\sigma}} & 0\end{pmatrix}. \tag{5.49}$$

通过引进 γ 矩阵，我们可以将狄拉克写成更漂亮的形式。

$$\gamma_0 \equiv \hat{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I}\end{pmatrix}, \qquad \gamma_{i=1\sim3} \equiv \hat{\beta}\hat{\alpha}_i = \begin{pmatrix} 0 & \hat{\sigma}_i \\ -\hat{\sigma}_i & 0\end{pmatrix}. \tag{5.50}$$

我们将 Dirac 方程左右两边同时左乘 γ_0/c 得：

$$\left[i\hbar\gamma^\mu\frac{\partial}{\partial x^\mu} - m_0c\right]\psi = \left[i\hbar(\gamma_0\frac{\partial}{\partial(ct)} + \gamma_1\frac{\partial}{\partial x_1} + \gamma_2\frac{\partial}{\partial x_2} + \gamma_3\frac{\partial}{\partial x_3}) - m_0c\right]\psi = 0, \tag{5.51}$$

$$(\gamma^\mu\hat{p}_\mu - m_0c)\psi = (\hat{\not{p}} - m_0c)\psi = 0. \tag{5.52}$$

此外，我们还有引进 γ_5 符号：$\gamma_5 \equiv \gamma_0\gamma_1\gamma_2\gamma_3$。

这些 γ 矩阵满足的反对易关系式可以很容易得到：

$$\gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}\mathbb{I}, \qquad \gamma_5\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma_5 = 0. \tag{5.53}$$

γ 矩阵可以构建从 16 个线性独立的矩阵，他们可以用来展开任意的 4×4 矩阵。

$$\mathbb{I} \qquad \gamma_5 \qquad \gamma^\mu \qquad \gamma_5\gamma^\mu \qquad \sigma^{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu] \tag{5.54}$$

$$1 \qquad 1 \qquad 4 \qquad 4 \qquad 6 \tag{5.55}$$

场论中经常用到 γ 矩阵的迹。

$$\mathrm{Tr}[\mathbb{I}] = 4, \qquad \mathrm{Tr}[\gamma_5] = 0, \qquad \gamma_5^2 = \mathbb{I}. \tag{5.56}$$

利用矩阵求迹的关系以及 γ_5 的特性：

$$\mathrm{Tr}[\gamma^\mu] = \mathrm{Tr}[\gamma_5\gamma_5\gamma^\mu] = -\mathrm{Tr}[\gamma_5\gamma^\mu\gamma_5] = -\mathrm{Tr}[\gamma^\mu\gamma_5\gamma_5] = -\mathrm{Tr}[\gamma^\mu] \quad \rightarrow \quad \mathrm{Tr}[\gamma^\mu] = 0. \tag{5.57}$$

同理可得任何奇数个 γ 矩阵的迹为 0。偶数个 γ 矩阵的迹可以通过如下方法计算：

$$\mathrm{Tr}[\gamma^\mu\gamma^\nu] = \mathrm{Tr}[\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} - \gamma^\nu\gamma^\mu] = \mathrm{Tr}[2g^{\mu\nu}\mathbb{I} - \gamma^\nu\gamma^\mu] = 8g^{\mu\nu} - \mathrm{Tr}[\gamma^\nu\gamma^\mu] \quad \rightarrow \quad \mathrm{Tr}[\gamma^\mu\gamma^\nu] = 4g^{\mu\nu}. \tag{5.58}$$

Dirac 方程的守恒流也可以进一步写为：

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0. \tag{5.59}$$

其中，

$$\rho = \psi^\dagger\psi, \qquad \vec{j} = c\psi^\dagger\hat{\vec{\alpha}}\psi. \tag{5.60}$$

利用 γ 矩阵以及 $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma_0$，我们得到：

$$\partial_\mu j^\mu = \frac{\partial}{\partial(ct)}j_0 + \frac{\partial}{\partial x_1}j_1 + \frac{\partial}{\partial x_2}j_2 + \frac{\partial}{\partial x_3}j_3 = 0. \tag{5.61}$$

其中，

$$j^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi. \tag{5.62}$$

双线性协变量：标量 $\bar{\psi}\psi$；赝标量 $\bar{\psi}\gamma_5\psi$；矢量 $\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$；轴矢量 $\bar{\psi}\gamma_5\gamma^\mu\psi$；张量 $\bar{\psi}\sigma^{\mu\nu}\psi$。

第五节 Dirac 方程的相对论协变性

首先，要证明 Dirac 方程的相对论协变性，我们需要证明在两个坐标系 $x'^{\mu} = a^{\mu}{}_{\nu} x^{\nu}$ 间，

$$[i\hbar\gamma^{\mu}\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - m_0 c]\psi(x) = 0, \tag{5.63}$$

$$[i\hbar\gamma'^{\mu}\frac{\partial}{\partial x'^{\mu}} - m_0 c]\psi'(x') = 0. \tag{5.64}$$

运动方程的形式是一样的。其中，γ'^{μ} 是在带撇系中的 gamma 矩阵。根据狭义相对论要求，物理规律在不同坐标系下是一样的。因此，我们要求，新的 gamma 矩阵满足同样的反对易关系式以及厄米关系。即：

$$\gamma'^{\mu}\gamma'^{\nu} + \gamma'^{\nu}\gamma'^{\mu} = 2g^{\mu\nu}\mathbb{I}, \qquad (\gamma'^{\mu})^{\dagger} = \gamma'^{0}\gamma'^{\mu}\gamma'^{0}. \tag{5.65}$$

线性代数可以证明（Rev. Mod. Phys., 27, 187(1955)）：满足上述这种运算规则的 γ 和 γ' 矩阵可以通过幺正变换联系起来：

$$\gamma'^{\mu} = \hat{U}^{\dagger}\gamma^{\mu}\hat{U}, \qquad \hat{U}^{\dagger} = \hat{U}^{-1}. \tag{5.66}$$

这样，带撇系中的 Dirac 方程可以写为：

$$[i\hbar\gamma'^{\mu}\frac{\partial}{\partial x'^{\mu}} - m_0 c]\psi'(x') = [i\hbar\hat{U}^{\dagger}\gamma^{\mu}\hat{U}\frac{\partial}{\partial x'^{\mu}} - m_0 c]\psi'(x') = 0. \tag{5.67}$$

左乘 $\hat{U}$ 得到：

$$[i\hbar\gamma^{\mu}\frac{\partial}{\partial x'^{\mu}} - m_0 c]\hat{U}\psi'(x') = 0. \tag{5.68}$$

波函数 $\psi'(x')$ 经过一个幺正变换之后仍然是一个等价的波函数。因此，证明 Dirac 方程协变性等效为寻找波函数 $\psi(x)$ 在洛伦兹变换下的变换形式，使得以下方程是成立的：

$$[i\hbar\gamma^{\mu}\frac{\partial}{\partial x^{\mu}} - m_0 c]\psi(x) = 0, \tag{5.69}$$

$$[i\hbar\gamma^{\mu}\frac{\partial}{\partial x'^{\mu}} - m_0 c]\psi'(x') = 0. \tag{5.70}$$

坐标间的变换关系为：

$$x'^{\mu} = a^{\mu}{}_{\nu} x^{\nu}, \qquad \frac{\partial}{\partial x^{\mu}} = \frac{\partial x'^{\nu}}{\partial x^{\mu}}\frac{\partial}{\partial x'^{\nu}} = a^{\nu}{}_{\mu}\frac{\partial}{\partial x'^{\nu}}. \tag{5.71}$$

我们假设波函数之间的 Lorentz 变换可以写为：

$$\psi'(x') = \hat{S}(\hat{a})\psi(x), \quad \psi(x) = \hat{S}^{-1}(\hat{a})\psi'(x') = \hat{S}^{-1}(\hat{a})\psi'(\hat{a}x) = \hat{S}(\hat{a}^{-1})\psi'(x') = \hat{S}(\hat{a}^{-1})\psi'(\hat{a}x). \tag{5.72}$$

显然，物理上我们要求：$\hat{S}^{-1}(\hat{a}) = \hat{S}(\hat{a}^{-1})$。

带入第一个 Dirac 方程，我们得到：

$$[i\hbar\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} - m_0 c]\psi(x) = [i\hbar\gamma^\mu a^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} - m_0 c]\hat{S}^{-1}(\hat{a})\psi'(x') = 0. \tag{5.73}$$

主要，$\hat{S}$ 里面不包含空间坐标，可以与导数对易。因此，上式左乘 $\hat{S}(\hat{a})$ 可得，

$$[i\hbar\hat{S}(\hat{a})\gamma^\mu\hat{S}^{-1}(\hat{a})a^\nu{}_\mu \frac{\partial}{\partial x'^\nu} - m_0 c]\psi'(x') = 0. \tag{5.74}$$

这样，证明 Dirac 方程的协变性就是要找到一个变换矩阵 $\hat{S}(\hat{a})$ 使得

$$\hat{S}(\hat{a})\gamma^\mu\hat{S}^{-1}(\hat{a})a^\nu{}_\mu = \gamma^\nu \tag{5.75}$$

首先，我们考虑一个无穷小 Lorentz 变换，$a^\mu{}_\nu = \delta^\mu_\nu + \Delta\omega^\mu{}_\nu$。由于 $a^\mu{}_\nu a_\mu{}^\rho = \delta^\rho_\nu$，我们得到：

$$a^\mu{}_\nu a_\mu{}^\rho = (\delta^\mu_\nu + \Delta\omega^\mu{}_\nu)(\delta^\rho_\mu + \Delta\omega_\mu{}^\rho) = \delta^\rho_\nu + \Delta\omega_\nu{}^\rho + \Delta\omega^\rho{}_\nu + \Delta\omega^2 = \delta^\rho_\nu. \tag{5.76}$$

因此，我们有：

$$\Delta\omega_\nu{}^\rho + \Delta\omega^\rho{}_\nu = 0. \tag{5.77}$$

乘以 $g^{\mu\nu}$ 变成上标，我们得到：

$$\Delta\omega^{\nu\rho} + \Delta\omega^{\rho\nu} = 0. \tag{5.78}$$

证明 Dirac 方程的相对论协变性也就成了证明：

$$\hat{S}(\hat{a})\gamma^\mu\hat{S}^{-1}(\hat{a})a^\nu{}_\mu = \gamma^\nu \qquad \to \qquad \hat{S}(\hat{a})\gamma^\rho\hat{S}^{-1}(\hat{a}) = a_\nu{}^\rho\gamma^\nu. \tag{5.79}$$

我们可以将 $\hat{S}(\hat{a})$ 也写成无穷小洛伦兹变换展开的形式，即：

$$\hat{S}(\hat{a}) = \mathbb{I} - i\hat{\Sigma}_{\alpha\beta}\Delta\omega^{\alpha\beta}, \qquad \hat{S}^{-1}(\hat{a}) = \mathbb{I} + i\hat{\Sigma}_{\alpha\beta}\Delta\omega^{\alpha\beta}. \tag{5.80}$$

传统上讲，我们将上式带入 Dirac 方程协变性要求里面，就可以得出 $\hat{\Sigma}$ 与 γ 矩阵的对易关系式，从而推导出矩阵 $\hat{\Sigma}$ 的具体形式。现在我们直接把答案代入上式，我们就验证了 Dirac 的协变性。

我们抄来的答案是：

$$\hat{S}(\Delta\omega) = \mathbb{I} - \frac{i}{4}\hat{\sigma}_{\alpha\beta}\Delta\omega^{\alpha\beta}, \qquad \hat{\sigma}_{\alpha\beta} = \frac{i}{2}[\gamma_\alpha, \gamma_\beta]. \tag{5.81}$$

自然的，我们可以计算 $\hat{S}\gamma\hat{S}^{-1}$

$$\hat{S}(\Delta\omega)\gamma^\rho\hat{S}^{-1}(\Delta\omega) = \left(\mathbb{I} + \frac{i}{4}\hat{\sigma}_{\mu\nu}\Delta\omega^{\mu\nu}\right)\gamma^\rho\hat{S}^{-1}(\Delta\omega) = \gamma^\rho + \frac{i}{4}([\gamma^\rho, \hat{\sigma}_{\mu\nu}] - \gamma^\rho\hat{\sigma}_{\mu\nu})\Delta\omega^{\mu\nu}\hat{S}^{-1}(\hat{a}). \tag{5.82}$$

其中，

$$[\gamma^\rho, \hat{\sigma}_{\mu\nu}] = \frac{i}{2}[\gamma^\rho\gamma_\mu\gamma_\nu - \gamma^\rho\gamma_\nu\gamma_\mu - \gamma_\mu\gamma_\nu\gamma^\rho + \gamma_\nu\gamma_\mu\gamma^\rho] \tag{5.83}$$

我们以第三项为例计算一下：

$$\gamma_\mu\gamma_\nu\gamma^\rho = \gamma_\mu(\{\gamma_\nu, \gamma^\rho\} - \gamma^\rho\gamma_\nu) = 2\delta^\rho_\nu\gamma_\mu - \gamma_\mu\gamma^\rho\gamma_\nu = 2\delta^\rho_\nu\gamma_\mu - 2\delta^\rho_\mu\gamma_\nu + \gamma^\rho\gamma_\mu\gamma_\nu. \tag{5.84}$$

我们将第四项做同样恒等变形将 γ^ρ 移到最前面就会发现：

$$[\gamma^\rho, \hat{\sigma}_{\mu\nu}] = 2i(\delta^\rho_\mu\gamma_\nu - \delta^\rho_\nu\gamma_\mu). \tag{5.85}$$

如此，

$$\hat{S}(\Delta\omega)\gamma^\rho\hat{S}^{-1}(\Delta\omega) = \gamma^\rho + \frac{1}{2}(\gamma_\mu\Delta\omega^{\mu\rho} - \gamma_\nu\Delta\omega^{\rho\nu})\hat{S}^{-1}(\Delta\omega). \tag{5.86}$$

首先将哑指标 ν 换成 μ，然后保留 $\Delta\omega$ 一次方项，并利用 $\Delta\omega$ 反对称的特性，得到：

$$\hat{S}(\Delta\omega)\gamma^\rho\hat{S}^{-1}(\Delta\omega) = \gamma^\rho + \gamma_\mu\Delta\omega^{\mu\rho} = a_\mu{}^\rho\gamma^\mu. \tag{5.87}$$

论证完毕。

第六节　自旋 1/2 带电粒子在电磁场中运动：高斯单位制

在这一节，我们考察带电粒子在电磁场中的受力情况。在这一节，我们首先回顾经典理论，通过区分运动学动量和正则动量、推导经典理论中的哈密顿量，从而得到启发。进一步将自由粒子 Dirac 方程扩展到包含相互作用的情况。在高斯单位制下：洛伦兹力 $\vec{F} = q\vec{E} + \frac{q}{c}\vec{v}\times\vec{B}$。同时电磁场与标量势矢量势之间的关系：

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}, \tag{5.88}$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}. \tag{5.89}$$

在经典电磁学中，我们引入了标量势 $\Phi(\vec{x},t)$ 与矢量势 $\vec{A}(\vec{x},t)$。我们构建拉氏量 $\mathcal{L}$

$$\mathcal{L}=\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2-q\Phi(\boldsymbol{x},t)+\frac{q}{c}\boldsymbol{v}\cdot\vec{A}(\boldsymbol{x},t). \tag{5.90}$$

欧拉-拉格朗日方程：

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x_i}=\frac{d}{dt}\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial v_i}=\frac{d}{dt}\left[mv_i+\frac{q}{c}A_i(\boldsymbol{x},t)\right]=ma_i+\frac{q}{c}\frac{dA_i(\boldsymbol{x},t)}{dt}=ma_i+\frac{q}{c}\frac{\partial A_i(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}+\frac{q}{c}\sum_j\frac{\partial x_j}{\partial t}\frac{\partial A_i(\boldsymbol{x},t)}{\partial x_j}. \tag{5.91}$$

上式左边还等于：

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial x_i}=-q\frac{\partial}{\partial x_i}\Phi(\boldsymbol{x},t)+\frac{q}{c}\sum_j v_j\frac{\partial A_j(\boldsymbol{x},t)}{\partial x_i} \tag{5.92}$$

联立二者，我们发现：

$$ma_i=F_i=-q[\nabla_i\Phi+\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}A_i]+\frac{q}{c}\sum_j[v_j\nabla_iA_j-v_j\nabla_jA_i] \tag{5.93}$$

写成矢量形式：

$$\vec{F}=m\vec{a}=-q\left(\vec{\nabla}\Phi+\frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\right)+\frac{q}{c}\vec{v}\times(\vec{\nabla}\times\vec{A}). \tag{5.94}$$

物理的场 $\vec{E}$，$\vec{B}$ 与矢量场及标量场的关系可知：

$$\vec{F}=m\vec{a}=q\vec{E}+\frac{q}{c}\vec{v}\times\vec{B}. \tag{5.95}$$

这正是我们之前电磁学中学过的带电粒子在电磁场中受到的洛伦兹力。从而确认了该拉氏量确实是描述带点粒子在电磁场中运动状态的量。

自然的，根据我们正则动量的定义式：

$$\vec{P}=\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\vec{v}}=m\vec{v}+\frac{q}{c}\vec{A}. \tag{5.96}$$

也就是说我们在运动学动量 $m\vec{v}$ 的基础上，又加了 $q\vec{A}$ 这一项。

根据哈密顿方程，我们写出这样系统的哈密顿量为：

$$H=\sum P_iv_i-\mathcal{L}=mv^2+\frac{q}{c}\vec{v}\cdot\vec{A}-\frac{1}{2}mv^2+q\Phi-\frac{q}{c}\vec{v}\cdot\vec{A}=\frac{1}{2}mv^2+e\Phi=\frac{1}{2m}(\vec{P}-\frac{q}{c}\vec{A})^2+q\Phi. \tag{5.97}$$

因此，我们可以对自由 Dirac 方程做最小扩展，从而将电磁相互作用考虑进来：

$$\hat{\vec{p}} \Rightarrow \hat{\vec{p}} - \frac{q}{c}\vec{A}, \qquad\qquad \hat{H} \Rightarrow \hat{H} + q\Phi. \tag{5.98}$$

于是，我们得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left[c\hat{\vec{\alpha}} \cdot (\hat{\vec{P}} - \frac{q}{c}\vec{A}) + m_0c^2\hat{\beta} + q\Phi\right]\psi. \tag{5.99}$$

其中，$\hat{\vec{P}} = -i\hbar\vec{\nabla}$ 是**正则动量**。为了简单起见，我们引入新的符号 $\vec{\mathbb{P}} \equiv \hat{\vec{P}} - \frac{q}{c}\vec{A} = -i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A}$。

我们采取非相对论极限，即 $E \sim m_0c^2 \gg pc$。我们将其随质量变化的部分单独拿出来：

$$\psi = \begin{pmatrix}\phi(\vec{x},t)\\ \chi(\vec{x},t)\end{pmatrix}\exp\left[-\frac{i}{\hbar}m_0c^2t\right]. \tag{5.100}$$

二分量的 Dirac 方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi = c\vec{\sigma}\cdot\vec{\mathbb{P}}\chi + q\Phi\phi, \tag{5.101}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi = c\vec{\sigma}\cdot\vec{\mathbb{P}}\phi + q\Phi\chi - 2m_0c^2\chi. \tag{5.102}$$

在非相对论极限下，$i\hbar\partial\chi/\partial t \ll m_0c^2\chi$，弱场近似下，$q\Phi\chi \ll m_0c^2\chi$。这时，二分量 Dirac 方程变为：

$$\chi = \frac{\vec{\sigma}\cdot\vec{\mathbb{P}}}{2m_0c}\phi, \qquad\qquad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi = \frac{(\vec{\sigma}\cdot\vec{\mathbb{P}})(\vec{\sigma}\cdot\vec{\mathbb{P}})}{2m_0}\phi + q\Phi\phi. \tag{5.103}$$

其中，

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{\mathbb{P}})(\vec{\sigma}\cdot\vec{\mathbb{P}}) = \vec{\mathbb{P}}\cdot\vec{\mathbb{P}} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{\mathbb{P}}\times\vec{\mathbb{P}}) = \vec{\mathbb{P}}\cdot\vec{\mathbb{P}} + i\vec{\sigma}\cdot[(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A})\times(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A})] \tag{5.104}$$

$$= \vec{\mathbb{P}}\cdot\vec{\mathbb{P}} + i\vec{\sigma}\cdot[i\frac{q}{c}\hbar(\vec{\nabla}\times\vec{A} + \vec{A}\times\vec{\nabla})]. \tag{5.105}$$

注意，这里 nabla 算子的作用域。第一个 nabla 算子既作用在 $\vec{A}$ 上，又作用于之后的波函数上。我们以 z 方向为例，展示一下如何计算

$$(\vec{\nabla}\times\vec{A} + \vec{A}\times\vec{\nabla})_z = \nabla_xA_y - \nabla_yA_x + A_x\nabla_y - A_y\nabla_x \tag{5.106}$$

$$= (\nabla_xA_y) + A_y\nabla_x - (\nabla_yA_x) - A_x\nabla_y + A_x\nabla_y - A_y\nabla_x \tag{5.107}$$

$$= (\nabla_xA_y) - (\nabla_yA_x) = (\nabla\times\vec{A})_z \tag{5.108}$$

其中，括号表示 nabla 算子仅仅作用在内部的 A 上。这样，

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{\mathbb{P}})(\vec{\sigma}\cdot\vec{\mathbb{P}}) = \vec{\mathbb{P}}\cdot\vec{\mathbb{P}} - \frac{q}{c}\hbar\vec{\sigma}\cdot(\vec{\nabla}\times\vec{A}) = \vec{\mathbb{P}}\cdot\vec{\mathbb{P}} - \frac{q}{c}\hbar\vec{\sigma}\cdot\vec{B}. \tag{5.109}$$

这样，我们就回到 Schrödinger 方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(\vec{x},t) = \left(\frac{(-i\hbar\vec{\nabla} - \frac{q}{c}\vec{A})^2}{2m_0} - \frac{q\hbar}{2m_0 c}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{B} + e\Phi\right)\phi(\vec{x},t) \tag{5.110}$$

其中，第一项为动能项，最后一项对应的电势能，中间这项就是自旋磁矩在磁场中的势能项。而 $e\hbar/2m_0c$ 就是玻尔磁子。而 $\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$ 则是自旋-1/2 粒子的自旋角动量算符。$\hat{\vec{\sigma}}$ 的本征值为 ± 1。

在国际单位制下：

洛伦兹力：$\vec{F} = q\vec{E} + q\vec{v}\times\vec{B}$。电磁场与标量势、矢量势之间的关系：

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t}, \tag{5.111}$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}. \tag{5.112}$$

拉格朗日量可以写为：

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 - q\Phi(\boldsymbol{x},t) + q\boldsymbol{v}\cdot\vec{A}(\boldsymbol{x},t). \tag{5.113}$$

第六章
氢原子问题

第一节 中心势场

自然界存在一大类的球对称势场。在这种场中，空间中某点的势能仅依赖于该点距离原点的距离。即：$V(r)$ 仅仅是径向距离 r 的函数，与极角 θ 和方位角 ϕ 都没有关系。这种势场的拉氏量具有转动不变性，因此也就自然的对应角动量守恒。

在中心势场，最自然的我们应用球坐标系最为方便。我们首先介绍一下球坐标系下的 nabla 算子、Laplace 算子。

在薛定谔方程中，哈密顿量为：

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r). \tag{6.1}$$

其中 nabla 算子在球坐标系下的表示形式为：

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_x\frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y\frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z\frac{\partial}{\partial z} = \left(\vec{\nabla}r\right)\frac{\partial}{\partial r} + \left(\vec{\nabla}\theta\right)\frac{\partial}{\partial \theta} + \left(\vec{\nabla}\phi\right)\frac{\partial}{\partial \phi}, \tag{6.2}$$

反复利用直角坐标系与球坐标系间的对应关系：

$$\vec{e}_r = \sin\theta\cos\phi\vec{e}_x + \sin\theta\sin\phi\vec{e}_y + \cos\theta\vec{e}_z, \qquad \vec{e}_x = \cos\phi(\sin\theta\vec{e}_r + \cos\theta\vec{e}_\theta) - \sin\phi\vec{e}_\phi, \tag{6.3}$$

$$\vec{e}_\theta = \cos\theta\cos\phi\vec{e}_x + \cos\theta\sin\phi\vec{e}_y - \sin\theta\vec{e}_z, \qquad \vec{e}_y = \sin\phi(\sin\theta\vec{e}_r + \cos\theta\vec{e}_\theta) + \cos\phi\vec{e}_\phi, \tag{6.4}$$

$$\vec{e}_\phi = -\sin\phi\vec{e}_x + \cos\phi\vec{e}_y, \qquad \vec{e}_z = \cos\theta\vec{e}_r - \sin\theta\vec{e}_\theta. \tag{6.5}$$

而且 (x, y, z) 坐标与 (r, θ, ϕ) 间的对应关系为：

$$x = r\sin\theta\cos\phi, \qquad y = r\sin\theta\sin\phi, \qquad z = r\cos\theta, \tag{6.6}$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \qquad \theta = \arccos\frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}, \qquad \phi = \arctan\frac{y}{x}. \tag{6.7}$$

我们得到：

$$\vec{\nabla}r = \vec{e}_r, \qquad \vec{\nabla}\theta = \frac{1}{r}\vec{e}_\theta, \qquad \vec{\nabla}\phi = \frac{1}{r\sin\theta}\vec{e}_\phi. \tag{6.8}$$

因此，nabla 算子在球坐标系下表示为：

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{e}_\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\vec{e}_\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}. \tag{6.9}$$

在球坐标系下，nabla 算子向后作用时，要非常小心：

$$\frac{\partial\vec{e}_r}{\partial r} = 0, \qquad \frac{\partial\vec{e}_r}{\partial\theta} = \vec{e}_\theta, \qquad \frac{\partial\vec{e}_r}{\partial\phi} = \sin\theta\vec{e}_\phi, \tag{6.10}$$

$$\frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial r} = 0, \qquad \frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\theta} = -\vec{e}_r, \qquad \frac{\partial\vec{e}_\theta}{\partial\phi} = \cos\theta\vec{e}_\phi, \tag{6.11}$$

$$\frac{\partial\vec{e}_\phi}{\partial r} = 0, \qquad \frac{\partial\vec{e}_\phi}{\partial\theta} = 0 \qquad \frac{\partial\vec{e}_\phi}{\partial\phi} = -(\sin\theta\vec{e}_r + \cos\theta\vec{e}_\theta). \tag{6.12}$$

因此，对于矢量 $\vec{A} = A_r\vec{e}_r + A_\theta\vec{e}_\theta + A_\phi\vec{e}_\phi$，

$$\vec{\nabla}\cdot\vec{A} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2A_r) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta A_\theta) + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}A_\phi. \tag{6.13}$$

同样的，对于标量函数 f

$$\nabla^2 f = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}[rf] + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\phi^2} \tag{6.14}$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}[r^2\frac{\partial f}{\partial r}] + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\phi^2}. \tag{6.15}$$

第二节 薛定谔方程中的角动量

在量子力学里面，某力学量守恒意味着该力学量算符与哈密顿量算符对易。下面我们分别考察 Schrödinger 方程和 Dirac 方程中角动量算符的性质。

在经典物理中，角动量就是轨道角动量，$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$。因此，在量子力学中我们的角动量算符自然也是对应的：

$$\hat{\vec{L}} = \vec{r}\times\hat{\vec{p}} = -i\hbar\vec{r}\times\vec{\nabla} = -i\hbar\vec{r}\times\left(\vec{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{e}_\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\vec{e}_\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right) = -i\hbar\left(\vec{e}_\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \vec{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \tag{6.16}$$

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cos\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) = -\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right). \tag{6.17}$$

下面，我们以 z 方向为例证明 $[\hat{H},\hat{\vec{L}}]=0$：

$$[\hat{H},\hat{L}_z]=\frac{1}{2m}[\hat{p}^2,x\hat{p}_y-y\hat{p}_x]+[V(r),x\hat{p}_y-y\hat{p}_x]. \tag{6.18}$$

首先，我们看第一项：

$$\begin{aligned}[\hat{p}^2,x\hat{p}_y-y\hat{p}_x]&=[\hat{p}_x^2,x]\hat{p}_y-[\hat{p}_y^2,y]\hat{p}_x=(\hat{p}_x^2x-\hat{p}_xx\hat{p}_x+\hat{p}_xx\hat{p}_x-x\hat{p}_x^2)\hat{p}_y-[\hat{p}_y^2,y]\hat{p}_x && (6.19)\\ &=\hat{p}_x[\hat{p}_x,x]\hat{p}_y+[\hat{p}_x,x]\hat{p}_x\hat{p}_y-\hat{p}_y[\hat{p}_y,y]\hat{p}_x-[\hat{p}_y,y]\hat{p}_y\hat{p}_x=0. && (6.20)\end{aligned}$$

现在，我们计算第二项：

$$\begin{aligned}\frac{1}{-i\hbar}[V(r),x\hat{p}_y-y\hat{p}_x]&=V(r)x\nabla_y-V(r)y\nabla_x-x\nabla_yV(r)+y\nabla_xV(r) && (6.21)\\ &=V(r)x\nabla_y-V(r)y\nabla_x-x[\nabla_yV(r)]-xV(r)\nabla_y+y[\nabla_xV(r)]++yV(r)\nabla_x && (6.22)\\ &=-x[\nabla_yV(r)]+y[\nabla_xV(r)]=-x\frac{\partial r}{\partial y}\frac{\partial V(r)}{\partial r}+y\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial V(r)}{\partial r}=0. && (6.23)\end{aligned}$$

对 x，y 方向角动量算符的证明是类似的。因此，我们得到了

$$[\hat{H},\hat{\vec{L}}]=0,\qquad\qquad [\hat{H},\hat{L}^2]=0. \tag{6.24}$$

也就是说，我们可以找到能量与总角动量算符的共同本征态来展开一般解。这也是我们能够运用分离变量法把 r 与 θ，ϕ 分开的理论依据之一。另外，由于 $[\hat{L}^2,\hat{\vec{L}}]=0$，$[\hat{L}_i,\hat{L}_j]\neq 0$ for $i\neq j$。因此，我们通常选取 $\hat{H}$，$\hat{L}^2$ 以及 $\hat{L}_z$ 的共同本征态来求解薛定谔方程。

$$\hat{L}_z=\vec{e}_z\cdot\hat{\vec{L}}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{6.25}$$

现在，我们考虑轨道角动量算符 $\hat{L}^2$ 与 $\hat{L}_z$ 的本征解。（它是作用在 θ 与 ϕ 上的算符。）我们有本征方程：

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}Y(\theta,\phi)\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}Y(\theta,\phi)=\frac{A}{-\hbar^2}Y(\theta,\phi), && (6.26)\\ &\frac{\partial}{\partial\phi}Y(\theta,\phi)=\frac{B}{-i\hbar}Y(\theta,\phi). && (6.27)\end{aligned}$$

对 ϕ 角的依赖更容易求解，我们得到：

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\exp\left[i\frac{B}{\hbar}\phi\right]. \tag{6.28}$$

因为 ϕ 是方位角，物理上讲 ϕ 与 $\phi+2\pi$ 是同样的事情。因此我们要求 $B=m\hbar$，其中，m 是整数。

这样，将这个解带入第一个方程我们得到：

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Theta(\theta)\right)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}=\frac{-A}{\hbar^2}\Theta(\theta). \tag{6.29}$$

为了解这个方程，我们做如下替换：$x=\cos\theta$，$\frac{d}{d\theta}=\sin\theta\frac{d}{dx}$。因此，我们有

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\sin^2\theta\frac{\partial}{\partial x}\Theta(x)\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left((1-x^2)\frac{\partial}{\partial x}\Theta(x)\right)=(1-x^2)\Theta''(x)-2x\Theta'(x). \tag{6.30}$$

于是，我们就有了这样一个微分方程

$$(1-x^2)\Theta''(x)-2x\Theta'(x)+(\lambda-\frac{m^2}{1-x^2})\Theta(x)=0, \qquad \lambda=\frac{A}{\hbar^2}. \tag{6.31}$$

这个方程叫做 Associate Legendre Equation.

第三节　Legendre Equation

首先，我们考察如下微分方程，$x=\cos\theta$ 属于 $[-1,1]$：

$$(1-x^2)\Theta''(x)-2x\Theta'(x)+\lambda\Theta(x)=0, \qquad \Theta''(x)-\frac{2x}{1-x^2}\Theta'(x)+\frac{\lambda}{1-x^2}\Theta(x)=0. \tag{6.32}$$

首先，可以看出这个方程在 $x=0$ 处没有奇点，因此，我们可以使用 power expansion 来求解它。设

$$\Theta(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a_nx^n, \tag{6.33}$$

$$\Theta'(x)=\sum_{m=1}^{\infty}ma_mx^{m-1}=\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)a_{n+1}x^n, \tag{6.34}$$

$$\Theta''(x)=\sum_{m=2}^{\infty}m(m-1)a_mx^{m-2}=\sum_{n=0}^{\infty}(n+2)(n+1)a_{n+2}x^n. \tag{6.35}$$

带入到微分方程，我们得到：

$$\sum_{n=0}^{\infty}(n+2)(n+1)a_{n+2}x^n-\sum_{n=2}^{\infty}n(n-1)a_nx^n-2\sum_{n=1}^{\infty}na_nx^n+\lambda\sum_{n=0}^{\infty}a_nx^n=0. \tag{6.36}$$

上式中，虽然有部分 n 是从 2 或者 1 开始求和的，但我们仍然可以将它们平庸的推广到从 0 开始求和。这是因为前面有 n 及 $n-1$ 系数。于是，我们就得到 a_{n+2} 与 a_n 之间的递推关系，

$$a_{n+2}=\frac{n(n-1)+2n-\lambda}{(n+1)(n+2)}a_n=-\frac{\lambda-n(n+1)}{(n+1)(n+2)}a_n. \tag{6.37}$$

只要给定 a_0 和 a_1 的值，后续所有的 a_n 都可以给出来。

如果没有截断的话，当 $n \to \infty$ 时，$a_{n+2} \sim a_n$。一般情况下当 $|x| < 1$ 时也没有问题，因为 $x^n \to 0$。但当 $|x| = 1$ 时就会出现奇点。因此物理上，有意义的解一定会发生截断，也就是说 $\lambda = l(l+1)$ 使得的 $a_{l+2} = 0$。另外，当 l 是奇数时，我们必须设置 $a_0 = 0$，否则的话偶数列无法截断。同样的话，如果 l 是偶数时，我们必须设置 $a_1 = 0$，否则的话奇数列无法截断。

第四节 Associate Legendre Equation

现在我们对 Legendre Equation 求 m 阶导数，那么我们得到：

$$\frac{d^m}{dx^m}\left((1-x^2)\Theta''(x)\right) - 2\frac{d^m}{dx^m}\left(x\Theta'(x)\right) + \lambda\frac{d^m}{dx^m}\Theta(x) = 0. \tag{6.38}$$

其中这个方程的解还是 $\Theta(x) = P_{\lambda=l(l+1)}(x)$。上面这个方程变为：

$$(1-x^2)\frac{d^{m+2}}{dx^{m+2}}\Theta + m(-2x)\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}\Theta + \frac{m(m-1)}{2}(-2)\frac{d^m}{dx^m}\Theta - 2x\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}\Theta - 2m\frac{d^m}{dx^m}\Theta + \lambda\frac{d^m}{dx^m}\Theta = 0. \tag{6.39}$$

合并同类项得：

$$(1-x^2)\frac{d^{m+2}}{dx^{m+2}}\Theta - 2(m+1)x\frac{d^{m+1}}{dx^{m+1}}\Theta + [\lambda - m(m+1)]\frac{d^m}{dx^m}\Theta = 0 \tag{6.40}$$

令 $Y = \frac{d^m}{dx^m}\Theta$，我们得到

$$(1-x^2)Y'' - 2(m+1)xY' + [\lambda - m(m+1)]Y = 0. \tag{6.41}$$

再令 $Z = (1-x^2)^{m/2}Y$，我们得到：

$$(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2}[(1-x^2)^{-m/2}Z] - 2(m+1)x\frac{d}{dx}[(1-x^2)^{-m/2}Z] + [\lambda - m(m+1)][(1-x^2)^{-m/2}Z] = 0. \tag{6.42}$$

分步积分：

$$Y = (1-x^2)^{-m/2}Z, \tag{6.43}$$

$$Y' = (1-x^2)^{-m/2}Z' + mx(1-x^2)^{-m/2-1}Z, \tag{6.44}$$

$$Y'' = (1-x^2)^{-m/2}Z'' + 2mx(1-x^2)^{-m/2-1}Z' + m(1-x^2)^{-m/2-1}Z + 2mx^2(\frac{m}{2}+1)(1-x^2)^{-m/2-2}Z \tag{6.45}$$

上式自动变为：

$$(1-x^2)\left(Z''+\frac{2mx}{1-x^2}Z'+\frac{m}{1-x^2}Z+\frac{m(m+2)x^2}{(1-x^2)^2}Z\right) \tag{6.46}$$

$$-2(m+1)x\left(Z'+\frac{mx}{1-x^2}Z\right)+[\lambda-m(m+1)]Z=0. \tag{6.47}$$

继续变形：

$$(1-x^2)Z''-2xZ'+(\lambda-\frac{m^2}{1-x^2})Z=0. \tag{6.48}$$

这个方程就是我们要求解的 associate Legendre Equation。它的解是：

$$Z=(1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_l(x)\equiv P_l^m(x), \tag{6.49}$$

其中，$P_l(x)$ 是 Legendre Equation 的解。我们得到物理解的条件是 l 为整数，而且级数最高为 x^l。associate Legendre equation 有非零解的条件是：$m\leq l$。

第五节　回到薛定谔方程，库仑势

这样，我们就解出了 $\hat{L}^2$ 与 $\hat{L}_z$ 的联合本征态：

$$Y_l^m(\theta,\phi)=P_l^m(\cos\theta)\exp(im\phi), \tag{6.50}$$

本征值为：

$$\hat{L}^2Y_l^m(\theta,\phi)=l(l+1)\hbar^2Y_l^m(\theta,\phi), \qquad \hat{L}_zY_l^m(\theta,\phi)=m\hbar Y_l^m(\theta,\phi). \tag{6.51}$$

有了这个关系式，我们就得到了径向方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}[r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}]\right]+\frac{1}{r^2}\frac{\hat{L}^2}{2m_0}\psi+V(r)\psi=-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}[r\psi]\right]+\frac{1}{r^2}\frac{\hat{L}^2}{2m_0}\psi+V(r)\psi=E\psi \tag{6.52}$$

通过分离变量法：$\psi(r,\theta,\phi)=\phi(r)Y_l^m(\theta,\phi)$，得：

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}[r\phi(r)]\right]+\frac{1}{r^2}\frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_0}\phi(r)+V(r)\phi(r)=E\phi(r). \tag{6.53}$$

其中，$\phi(r)$ 只包含径向部分，$E=T+V<0$ 是束缚态能量。通过定义 $\phi(r)=R(r)/r$，我们就得到这样一个方程

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}R(r)+\frac{2m_0}{\hbar^2}[E-V(r)]R(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}R(r)=0. \tag{6.54}$$

现在，我们只考虑静电力。具体求解氢原子能级。在静电场中库仑势可以写为：

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r} = -\frac{K}{r}. \tag{6.55}$$

这里我们使用了国际单位制，在其他单位制中，可能没有 $1/\epsilon_0$ 等。这样，我们就要解如下方程：

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}R(r) + \left[\frac{2m_0}{\hbar^2}(E + \frac{K}{r}) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R(r) = 0. \tag{6.56}$$

我们首先考察波函数在两种极限情况下的行为：（1）$r \to \infty$；（2）$r \to 0$。

$r \to \infty$ 极限下：

方程可以近似为：

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}R(r) + \frac{2m_0E}{\hbar^2}R(r) = 0. \tag{6.57}$$

由于束缚态能量 $E < 0$，我们很容易解出：

$$R(r)_{r\to\infty} = \exp[\pm ar], \qquad a = \sqrt{-2m_0E}/\hbar. \tag{6.58}$$

显然，如果取 $+a$ 解时，波函数在无穷远处发散，无法归一化。因此物理的解必须是：$R(r) = e^{-ar}$。

$r \to 0$ 极限下：

方程可以近似为：

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}R(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}R(r) = 0. \tag{6.59}$$

由于 $r \sim 0$，这个解我们可以用级数展开。为了得到收敛解，$R(r)$ 应该有个最小的幂次，即：

$$R(r)_{r\to 0} = r^{\alpha}(a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + \cdots) \tag{6.60}$$

将该解带入我们的微分方程，取最低阶近似，即 $r^{\alpha-2}$，

$$\alpha(\alpha-1)r^{\alpha-2} - l(l+1)r^{\alpha-2} + \cdots = 0. \tag{6.61}$$

因此，非平庸解为：$\alpha = l+1$ 和 $\alpha = -l$。由于 $l > 0$，显然，我们应该取的收敛解为

$$R(r)_{r\to 0} = r^{l+1}. \tag{6.62}$$

一般情况下：

自然的，我们猜想，在一般情况下，方程的解应该采取一下形式：

$$R(r) = r^{l+1}e^{-ar}F(r). \tag{6.63}$$

在 $r \to 0$ 时，power 项比较重要，$r \to \infty$ 时，指数项占主导。将我们猜出的这个解的形式带入到微分方程中，我们就找到了 $F(r)$ 所满足的方程。利用

$$R'(r) = (l+1)r^{l}e^{-ar}F(r) - ar^{l+1}e^{-ar}F(r) + r^{l+1}e^{-ar}F'(r), \tag{6.64}$$

$$R''(r) = l(l+1)r^{l-1}e^{-ar}F(r) - 2a(l+1)r^{l}e^{-ar}F(r) + a^2r^{l+1}e^{-ar}F(r) \tag{6.65}$$

$$+ 2(l+1)r^{l}e^{-ar}F'(r) - 2ar^{l+1}e^{-ar}F'(r) + r^{l+1}e^{-ar}F''(r), \tag{6.66}$$

我们得到：

$$rF''(r) + (2l+2-2ar)F'(r) - 2a(l+1)F(r) + \frac{2m_0K}{\hbar^2}F(r) = 0. \tag{6.67}$$

我们再做一次变量替换，$z = 2ar$，$\lambda = 2m_0K/2a\hbar^2$，这样我们就得到如下 Kummer 方程：

$$z\frac{d^2}{dz^2}F(z) + (2l+2-z)\frac{d}{dz}F(z) - (l+1-\lambda)F(z) = 0. \tag{6.68}$$

第六节　Kummer 方程，合流超几何函数

Kummer Equation 的解被称为合流超几何函数（confluent hypergeometric function）。

$$x\frac{d^2\Phi}{dx^2} + (A-x)\frac{d\Phi}{dx} - B\Phi = 0. \tag{6.69}$$

我们同样用级数展开去求解

$$\Phi = x^k\sum_{i=0}^{\infty}c_ix^i = \sum_{i=0}^{\infty}c_ix^{k+i}. \tag{6.70}$$

将该级数解带入 Kummer 方程，我们首先计算 k 的可能取值。这个可以由 x 的最低阶幂次项系数得到：

$$a_0k(k-1)x^{k-1} + Aa_0kx^{k-1} = 0. \tag{6.71}$$

我们发现 k 有两个可能解：$k = 0$ 和 $k = 1 - A$。

我们分别研究这两种可能。对于 $k=0$，我们可以如下计算 c_i 的值，

$$\sum_{i=2}^{\infty} i(i-1)c_i x^{i-1} + A\sum_{j=1}^{\infty} jc_j x^{j-1} - \sum_{k=1}^{\infty} kc_k x^k - B\sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n = 0 \tag{6.72}$$

稍微做些恒等变换我们得到：

$$\sum_{n=1}^{\infty} n(n+1)c_{n+1}x^n + A\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)c_{n+1}x^n - \sum_{n=1}^{\infty} nc_n x^n - B\sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \tag{6.73}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\left[n(n+1)c_{n+1} + A(n+1)c_{n+1} - nc_n - Bc_n\right]x^n = 0. \tag{6.74}$$

因此，我们得到了 c_{n+1} 与 c_n 间的关系。

$$c_{n+1} = \frac{n+B}{(n+1)(n+A)}c_n \tag{6.75}$$

如果我们约定 $c_0 = 1$，自然的我们得到

$$c_n = \frac{B(B+1)\cdots(B+n-1)}{A(A+1)\cdots(A+n-1)n!}c_0 \equiv \frac{(B)_n}{(A)_n n!}c_0. \tag{6.76}$$

这样我们就找到了 Kummer 函数的一个解：

$$\Phi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(B)_n}{(A)_n n!}x^n \equiv {}_1F_1(B;A;x). \tag{6.77}$$

对于 $k = 1 - A$ 的情况，我们也可以类似的得到一个级数解。但这个级数解在我们研究的问题中不收敛，因此在此不再详细计算。我们只保留第一个级数解。

另外一种理解方法：在 $r \to 0$ 时，方程的渐进解应该是 r^{l+1}。该项已经被从 $F(r)$ 中，剥离出来，剩下部分的级数应该就是从 r^0 开始的，否则会破坏其级数展开。

第七节　再次回到薛定谔方程，氢原子能级

显然，利用 Kummer 方程的解，我们很容易将氢原子的径向波函数解也写出来：

$$R(r) = Nr^{l+1}\exp\left[-ar\right]\ {}_1F_1\left(l+1-\frac{m_0K}{a\hbar^2}; 2l+2; 2ar\right), \qquad a = \frac{\sqrt{-2m_0E}}{\hbar}. \tag{6.78}$$

根据合流超几何函数的定义：

$$
{}_1F_1(B; A; x) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(B)_n}{(A)_n n!} x^n \tag{6.79}
$$

如果 B 不是小于等于 0 的整数的话，在大 N 阶，这个级数前的系数

$$
a_N = \frac{(B+N-1)(B+N-2)\cdots B}{(A+N-1)(A+N-2)\cdots A} \frac{x^N}{N!} \sim \frac{x^N}{N!}. \tag{6.80}
$$

这样一个级数求和将对导致 e^x。因此波函数全空间积分是发散的，无法归一化。要想避免这种情况，得到物理的解，我们就需要要求这个级数求和必须在某一阶截断。这种截断就要求 B 是一个小于等于 0 的整数。也就是说：

$$
l + 1 - \frac{m_0 K}{a\hbar^2} = -n_r, \qquad n_r \geq 0 \tag{6.81}
$$

这样，

$$
a = \frac{\sqrt{-2m_0 E}}{\hbar} = \frac{1}{n_r + l + 1} \frac{m_0 K}{\hbar^2}, \tag{6.82}
$$

$$
E = -\frac{m_0 K^2}{2n^2\hbar^2} = -\frac{e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2} \frac{m_0}{2n^2\hbar^2}, \tag{6.83}
$$

其中，$n = n_r + l + 1 \geq 1$。这样我们就得到氢原子基态能级：

$$
E_{n=1} = -2.18 \times 10^{-18}\text{J} = -13.6\text{eV}, \qquad 1\text{J} = 6.24 \times 10^{18}\text{eV}. \tag{6.84}
$$

第八节　思路总结

我们将用求解氢原子波函数、能级的计算思路总结如下：

（1）写出球坐标系下的电子满足的薛定谔方程。（中心势场）中心势场哈密顿量与轨道角动量算符 $\hat{L}^2$ 以及任意方向角动量分量 $\hat{L}_z$ 对易。因此，我们可以找到 $\hat{H}$，$\hat{L}^2$ 以及 $\hat{L}_z$ 的共同本征态从而求解薛定谔方程。这一点也就是我们可以应用分离变量法的原因。

（2）$\hat{L}_z$ 的本征态很容易得到。由于物理上无法区分 ϕ 和 $\phi + 2\pi$ 两种态，本征值必须为 m，其中 m 为整数。

（3）将上面 $\hat{L}_z$ 的本征态带入到 $\hat{L}^2$ 的本征方程。经过简单计算可得（变形）勒让德方程。我们通过级数展开来求解该微分方程。为了使得在 $\cos\theta = \pm 1$ 处波函数收敛，我们要求其本征值必须为 $l(l+1)$，其中，l 为大于等于 0 的正整数。而且非平庸解的要求是 $|m| \leq l$。

（4）将上述结果带回到径向方程。这个方程在 $r \to 0$ 和 $r \to \infty$ 都比较好解。

（5）假设一般解为 $R(r) = R(r)_{r\to 0}R(r)_{r\to\infty}F(r)$，我们就能得到 $F(r)$ 所满足的方程（Kummer 方程、合流超几何方程）。我们同样可以利用级数求解法求解该微分方程，最终，我们得到合流超几何函数。要想该合流超几何函数收敛，我们要求合流超几何函数必须在某阶截断。这样我们就得到能量本征值必须是分离的，也就解出了能级、波函数等。