

现代物理基础丛书

9

辐射和光场的 量子统计理论

曹昌祺 著



科学出版社
www.sciencep.com

内 容 简 介

本书是作者在北京大学物理系为光学专业和理论物理专业研究生授课讲义的基础上修改和补充写成的。内容包括了量子电动力学基础和量子光学的基本概念和理论方法(包括新近发展的量子随机轨迹方法),其中包括作者本人的研究结果。

本书内容大致分为两部份:一是有关光场和电子场(相对论性)的量子化,光子的基本性质(如自旋、宇称、动量和角动量、能量等),狄拉克方程的物理内涵和正反电子对的概念,量子电动力学的基本方程组,洛伦兹条件问题,散射算符和费曼图,原子对光子的吸收,电多极辐射和磁多极辐射,原子在强光下的拉比振荡,共振荧光等;二是光场的相干态和挤压相干态,光场的量子统计描述,光学测量与光场的相关函数,原子和光场与库的作用,耗散与涨落的量子统计理论(主方程和量子朗之万方程),激光的量子理论等。

本书可作为光学专业、物理专业和量子电子学专业研究生教材,也可供从事激光理论、非线性光学理论、量子光学和量子电子学以及量子信息学理论的专业人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

辐射和光场的量子统计理论/曹昌祺著. —北京:科学出版社, 2006
(现代物理基础丛书;9)

ISBN 7-03-016984-0

I. 辐… II. 曹… III. ①辐射-量子统计物理学②光-电磁场-量子统计物理学 IV. O414.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2006)第 016592 号

责任编辑:胡 凯 张邦固/责任校对:李奕莹

责任印制:安春生/封面设计:王 浩

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

新蕾印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2006年3月第一版 开本: B5(720×1000)

2006年3月第一次印刷 印张: 31

印数: 1—3 000 字数: 594 000

定价: 60.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

《现代物理基础丛书》编委会

主 编 杨国桢

副主编 阎守胜 聂玉昕

编 委 (按姓氏笔画排序)

王 牧 王鼎盛 朱邦芬 刘寄星

邹振隆 宋菲君 张元仲 张守著

张海澜 张焕乔 张维岩 侯建国

侯晓远 夏建白 黄 涛 解思深

前 言

辐射和光场的量子统计理论是量子光学的理论基础。

量子光学是近代光学的重要组成部分,它是 20 世纪中后期才发展起来的,距今不过 50 年。其创始标志是 Hanbury Brown-Twiss 关于光场强度相关性的实验和对它的量子解释,以及对激光量子统计性的研究。众所周知,相位相关性显示了光场的波动性质,而强度的相关性则显示出光子的量子统计性质。对激光的动力学研究进一步发展了光场与原子相互作用的量子统计理论方法。

量子光学的研究对象正是光场的量子统计特性以及光场与物质相互作用的微观过程,以探索新的特征量子光场(例如反群聚光场,光场的挤压态)和发展新的发光器件。

量子光学与光学中其他分支如激光物理,信息光学和非线性光学等有着紧密联系,例如:探讨新机制的激光器,发展量子信息学,从量子统计的深度来研究非线性光学过程。其他如量子测量以及对量子力学基本理论的验证(通过量子光学来进行有它的优越性)也是量子光学的内容。量子计算机的研究是目前国际上很受重视的方向,但难度很大,其中也涉及许多量子光学范畴内的问题,目前正在进行多方面的探索。最后想指出的是,过去光场与物质的相互作用主要是指光场与原子分子的作用。现在又延伸到与半导体中的电子、空穴以及激子的作用,派生出半导体微腔量子电动力学(QED)这一分支。它发展出的微型光学器件,有可能在集成光电路方面发挥重要作用。至于新开始研究的原子波学(将光子场替换成原子场,通常又称为原子光学)也常是量子光学研究的范围,但已不是原来意义上的量子光学领域。

以上情况表明:具有较深厚的辐射和光场量子统计理论基础,可能对培养 21 世纪的创新人才具有重要意义,正是在这种认识下,北京大学物理系决定为光学专业开设这门必修课,选修此课的还有部分理论物理专业和电子学系的研究生。

本书内容大致分为两部分,一是有关光场和电子场的量子化^①,光子的基本性质(如自旋、宇称、动量和角动量、能量),狄拉克方程的物理内涵,量子电动力学的

^① 考虑到以后量子光学过程可能会扩展到高能电子,本课中将采用相对论性的电子场。其实对于重原子的内层电子,其束缚能的相对论修正已不小,达到了 10% 左右。原子物理中的自旋-轨道耦合项,也需从相对论性理论来推导。更重要的是,不通过相对论性理论就得出双光子作用项,而此作用项对光子-原子散射过程极为重要。

基本方程组,对洛伦兹条件的处理,散射算符,费曼对正电子的处理和费曼图规则,原子对光子的吸收,电多极辐射和磁多极辐射,原子和自由电子对光子的散射等(原子的拉比振荡和共振荧光也可算在这一部分,但亦与第二部分相关).二是光场的相干态与挤压相干态,光场的量子统计描述,光学测量与光场的相关函数,原子和光场与库的作用,耗散与涨落的量子统计理论(主方程与量子朗之万方程),简单激光系统的量子理论等.

由此可见,本书包括了量子电动力学基础和量子光学的基本概念和理论方法(含新近发展的量子随机轨迹方法).正文后并有若干附录,其中包含了作者本人与合作者的一些研究成果.

本书是作者在十多年来于北京大学讲授此课的讲稿的基础上写成的,具有教材的性质,注重可读性,并特别着重于对基本概念의深入阐述.因此本书的第一部分也可作为量子力学和量子场论的参考书.

在从讲稿写成书时,又补充了一些内容,其分量已超出教学的要求(文中用小字号表示),有些章节作了较大的修改,几个附录完全是新加的(具有简介的性质,不是按教材写的).学生在学本门课程以前,已经学过分析力学、电动力学、统计物理和量子力学,这些都是本课的先备课程,其中电动力学和量子力学尤其重要.在本书中,电磁单位采用高斯制.高斯单位制在理论物理中具有明显的优点,其中, E, B, D 和 H 都具有相同的量纲,真空的介电常数和导磁系数都等于1.高斯制中有三个基本量纲,比国际单位制少,比自然单位制多(后者只有一个基本量纲),数目比较适中.作者认为,学物理的人如果只知有国际单位制,不知其他,则犹如《桃花源记》中的人“不知有汉,无论魏晋”,连阅读国际科学文献都可能会遇到困难,是很不合适的.

本课程主要参考书前后共计有:阿希叶泽尔和别列斯捷茨基《量子电动力学》(有中译本和英译本);Louisell: Quantum Statistical Properties of Radiation, Loudon: The Quantum Theory of Light(有中译本);Haken: Light Vol1, 2; Sargent III, Scully and Lamb: Laser Physics; Haken: Laser Theory; Nussenzveig: Introduction to Quantum Optics; Walls and Milburn: Quantum Optics; Carmichael: An Open System Approach to Quantum Optics; Scully and Zubairy: Quantum Optics; Carmichael: Statistical Methods in Quantum Optics; Master Equations and Fokker-Plank Equations 等.

本书是作者《理论物理三卷集》之三,其一为《电动力学》,其二为《量子规范场论》,这两本曾于1961年和1990年由人民教育出版社和高等教育出版社分别出版,修定后将归入三卷集重新出版.

作者最初学习半导体物理,研究生毕业后分配到兰州大学任教,研究方向改成基本粒子物理.1957年调回到北京大学物理系,仍继续这一方向.但1958年后,

正常科研工作受到极大干扰. 再加上“科学革命”、“三年困难”、“下放劳动”、“社教四清”以及“文革”动乱, 华年蹉跎而去(聊寄数语, 是为青年读者共勉). 20 世纪 90 年代初, 转到量子光学方向, 在此领域工作不过十多年, 认识甚为有限. 书中不当和疏误之处在所难免. 如蒙指正, 不胜感谢. 来信请寄北京大学物理学院.

曹昌祺

2004 年 5 月于密歇根湖畔

(时值在美国西北大学任访问教授)

目 录

前言

第一章 电磁场的量子化 自由光子的状态	1
§ 1.1 对量子力学的简单概括	1
§ 1.2 场的广义坐标和它的量子化	8
§ 1.3 电磁场的量子化 吸收和发射算符	14
§ 1.4 光子的自旋 具有确定动量和螺度的自由光子态	24
§ 1.5 具有确定能量、总角动量和宇称的自由光子态	32
第二章 狄拉克方程 电子场的量子化	45
§ 2.1 狄拉克方程和旋量波函数	46
§ 2.2 动量和螺度确定的态函数	52
§ 2.3 能量、角动量和宇称确定的自由电子态	57
§ 2.4 狄拉克方程的非相对论近似和它的物理内涵	59
§ 2.5 电子场的量子化和负能级问题的最终解决	64
第三章 量子电动力学的基本方程组 S 算符的协变微扰论	72
§ 3.1 电子场与电磁场的相互作用 量子电动力学的基本方程组	72
§ 3.2 作用图象和演化算符的微扰展开	84
§ 3.3 S 算符(S 矩阵)和它的约化	91
§ 3.4 自由场的传播子 推迟格林函数和超前格林函数	99
§ 3.5 S 矩阵元的计算和费曼图形表示	109
第四章 微扰论的应用——电磁跃迁.....	120
§ 4.1 原子对光子的吸收和辐射	120
§ 4.2 电多极辐射和磁多极辐射	130
§ 4.3 高速电子在库仑势中的韧致辐射	140
§ 4.4 光子与自由电子的散射	146
§ 4.5 光子在原子上的散射和双光子辐射	155
第五章 量子光场的相干态 光场的量子统计描述.....	168
§ 5.1 光场的相位因子算符	168
§ 5.2 量子光场的相干态和它的基本性质	174
§ 5.3 光场态矢量按相干态的展开 相干态全纯表象.....	185
§ 5.4 量子混合态的统计描述 光场密度算符的全纯表示和 P 表示	190

§ 5.5 量子光场的分布函数与特征函数	203
§ 5.6 纯态经典电流的量子辐射场 半经典理论的近似性问题	217
第六章 原子与光场相互作用的过程 开放系统的主方程	224
§ 6.1 二能级原子的自发辐射过程 马尔可夫近似	224
§ 6.2 单模光与原子的作用 拉比振荡和缀饰原子	234
§ 6.3 强相干光激励下的共振荧光	243
§ 6.4 二能级原子与热光场的作用 原子运动的主方程	252
§ 6.5 热光驱动下的单模腔场 量子主方程 福克尔-普朗克方程和随机微分方程	260
第七章 光学测量和光场相关函数 光场的挤压相干态	268
§ 7.1 光场一阶相关函数和光强测量的量子理论	268
§ 7.2 HanburyBrown-Twiss 实验和高阶相关函数	279
§ 7.3 条件检测率 光子群聚及反群聚和光子计数问题	287
* § 7.4 等待时间分布 遍举多重检测 and 随机量子轨迹	301
* § 7.5 光场的正交挤压相干态	310
* § 7.6 经典源与双光子的耦合 挤压相干态的生成	324
第八章 耗散与涨落的量子朗之万理论 简单的激光系统	332
§ 8.1 量子阻尼振子问题 耗散与涨落	332
§ 8.2 开放光学系统的量子朗之万方程	342
§ 8.3 浸渐近似 激光的量子速率方程	354
§ 8.4 激光的半经典理论 光子数的饱和、阈值和稳恒态	364
§ 8.5 激光稳恒态的涨落 功率谱与威纳-亨钦定理	373
§ 8.6 激光涨落的功率谱、谱线宽度和输出场的流强度	379
§ 8.7 原子束流与腔内场的作用 Scully-Lamb 的激光模型	389
附录	400
A 耗散介质中爱因斯坦 A 系数的修正和谱线的附加宽度	400
B 原子自发辐射的非马尔可夫理论	408
C 介质中原子自发辐射的局域场修正因子	419
D 原子集合的相干态和全纯表象	425
E 半导体微腔 QED 激子的概念和局域激子的共振荧光	432
F 超辐射的基本概念 自由激子的超辐射	441
G 超辐射微激光器的随机量子轨迹理论	458
H 规则注入原子对无阻尼腔内相干光场的挤压	463
I Golubev-Sokolov 主方程 生成函数的精确解	468
J 生成函数方法在阻尼腔中规则注入原子问题中的应用	477

第一章 电磁场的量子化 自由光子的状态

光的量子性是历史上奠定量子论的第一个基本事实. 所谓光子就是指光场或电磁场的量子. 光子的动量和能量分别与电磁场的波矢量 $\mathbf{k}$ 和角频率 ω 成正比: $\mathbf{P} = \hbar \mathbf{k}$, $E = \hbar \omega$. 除此而外光子还有角动量和宇称. 角动量包括自旋角动量和轨道角动量, 光子的自旋量子数为 1. 相应地, 宇称分为内禀宇称和轨道宇称, 光子的内禀宇称为 -1 .

我们知道, 自旋量子数为半整数的粒子(场量子)服从费米统计, 因此这种粒子统称为费米子, 自旋为整数的粒子服从玻色统计, 因而统称为玻色子. 现在已知的基本费米子分为轻子和夸克子两类, 它们的自旋量子数都是 $1/2$. 在我们通常所熟悉的粒子中, 电子和中微子属于轻子, 而质子、中子和 π 介子等则是由夸克子构成的复合粒子. 至于现在已知的基本玻色子, 除了人们熟悉的光子(它传递电磁作用)以外, 还有传递强作用的色胶子以及传递弱作用的 $W^\pm$ 玻色子和 Z^0 玻色子. 它们的自旋量子数都等于 1.

现代物理学认为, 场是物质存在的基本形式, 所有的粒子实际上都是场的量子. 场量子与量子力学中的粒子相比, 并不完全相同, 只有在非相对论近似下, 才能把两者拟合起来(参见第二章). 对于光子, 由于不存在非相对论近似, 故光子在任何情况下都不能看作是某种量子力学意义下的粒子.

在本章中, 我们将讨论电磁场的量子化, 并通过这种讨论来阐明光子的基本性质和自由光子的一些重要状态. 讨论将主要采用海森伯图象(§ 1.1 除外).

§ 1.1 对量子力学的简单概括

如上文所述, 按照现代物理学的观点, 量子理论的根本形式是量子场论. 量子力学基本上是在非相对论情况下它的一种近似形式: 在非相对论情况, 电子场的狄拉克方程近似为薛定谔方程, 场的量子化对应于薛定谔波函数的量子化即通常所说的二次量子化, 它等价于多体的量子力学. 然而从历史上说, 先建立起来的是量子力学. 在物理教学中也是先学习量子力学. 因此在这一节中我们将从量子力学出发, 总结量子理论的一般特点, 以便在此基础上建立量子场的理论.

什么是量子力学与经典力学的基本差别? 只要学过初等量子力学的人都会知道:

- i) 在经典力学中, 一个(无自旋)粒子的状态由它的坐标和动量(普通意义的

或广义的)的一组值,例如 $(x_1, x_2, x_3, p_1, p_2, p_3)$ 来确定,对应于相空间中的一个点. 该粒子的一切物理量均可表示为它们的函数. 而在量子力学中,粒子的状态则由一个波函数 $\varphi(x_1, x_2, x_3)$ 来确定,有关该粒子的一切可能的物理知识,都可从该波函数得出.

ii) 在经典力学中,任一个力学量都是用一个普通数(称为 c 数)来表示,而在量子力学中则是用一个运算在波函数上的算符(又称 q 数)来表示.

然而上述回答只说明了(在最简单的单粒子情况下)两者在数学表述上的差别,并没有阐明这种差别的物理内涵.

首先要指出,量子力学中的波函数并不就是现实三维坐标空间中实质性的波(在这一点上它与场不同,场是现实三维空间中实质性的波),这可从多粒子或刚体(如多原子分子)的波函数即可看出. 对双粒子体系,波函数为 $\varphi(x_1, x_2, x_3, x'_1, x'_2, x'_3)$,它是六维空间中的函数. 刚体的广义坐标则可取为其质心坐标 (x_1^c, x_2^c, x_3^c) 和三个取向角 $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$,其量子波函数为 $\varphi(x_1^c, x_2^c, x_3^c, \theta_1, \theta_2, \theta_3)$,即刚体位形空间中的函数. 就是对单粒子而言,它的波函数也可用动量空间(或其他广义空间)中的函数如 $\psi(p_1, p_2, p_3)$ 来表示. 动量空间是一种作为数学表示手段的抽象空间,并不是现实的三维空间.

那么量子力学波函数的本质意义是什么呢? 应该说,它在本质上是状态叠加表示中的系数,属粒子量子状态的一种数学表示. 例为对单粒子,若用抽象代数符号 $|A\rangle$ 表示它的任意一个状态,用 $|x_1, x_2, x_3\rangle$ 和 $|p_1, p_2, p_3\rangle$ 分别表示具有确定坐标 (x_1, x_2, x_3) 和确定动量 (p_1, p_2, p_3) 的状态,则根据状态叠加原理, $|A\rangle$ 可表示为各个 $|x_1, x_2, x_3\rangle$ 态的叠加,也可表示为各个 $|p_1, p_2, p_3\rangle$ 态的叠加,而波函数 $\varphi(x_1, x_2, x_3)$ 和 $\psi(p_1, p_2, p_3)$ 就是相应叠加表示中的系数:

$$|A\rangle = \int \varphi(x_1, x_2, x_3) |x_1, x_2, x_3\rangle d^3x,$$

或

$$|A\rangle = \int \psi(p_1, p_2, p_3) |p_1, p_2, p_3\rangle d^3p.$$

要进一步说明上式的物理内涵,就要涉及量子力学中两个最主要的新概念,一是与“测不准关系”相联系的概念,它表明在量子理论中并非所有力学量都可以同时准确地测量,另一是“状态叠加”的概念,这也是经典理论中所没有的. 力学量之所以要用算符表示也同这些问题相关.

量子力学究竟在物理概念上与经典力学有哪些基本差别? 它的理论框架是怎样建立的? 我们简单列举如下:

1) 在微观物理中,力学量的取值可能受到经典理论所没有的限制,例如角动

量和原子的束缚能级就只能取某些特定的离散值. 量子力学把一个力学量全部可能取的值得称作它的本征值.

2) 对于一个经典状态,所有的力学量的值都是确定的,而对于微观体系的量子状态,不可能所有的力学量都具有确定的(测量)值. 换句话说,对该态作某些力学量的测量时,所得出的结果将具有随机性:它的各个本征值以一定概率出现. 如果某个力学量 M 在该态的值是确定的,则该态就称为力学量 M 的本征态,相应的值 m 则称为该力学量的本征值. 若干个可同时测准的力学量将具有共同的本征态.

3) 量子力学认定:可同时测准的独立的力学量的最大数目等于该体系的自由度 n . 此值比经典理论中的值少一半. 在经典理论中,所有的力学量原则上都可测准,但独立的数目为 $2n$,可取为 n 个广义坐标和 n 个广义动量. 其他力学量都可表为它们的函数因而不是独立的.

在量子力学中,由 n 个可同时测准的独立力学量所构成的集合将称为力学量的一个完全集合,如果它们的本征值集合能完全确定体系的一个状态,不再有简并. 按此标准, (p_1, p_2, p_3^2) 就不构成单粒子力学量的完全集合. 完全集合有不同的选取方案,如 $(x_1, x_2, x_3), (p_1, p_2, p_3)$.

4) 状态的叠加,这是量子力学新引入的另一个基本概念. 仍以单粒子为例,对于能量、角动量的平方和角动量的第 3 分量的本征态(以下简称“能量和角动量”的本征态) $|E, l, l_3\rangle$,当我们测这些力学量时,得出的值确定地等于 $E, l(l+1)\hbar^2$ 和 $l_3\hbar$. 但是当我们对该态测量动量时,结果具有随机性,可能出现各种 p_1, p_2 和 p_3 的值. 这一情况使得我们把状态 $|E, l, l_3\rangle$ 看作是各种动量本征态 $|p_1, p_2, p_3\rangle$ 的叠加. 值得强调的是,这并不意味着一个“能量和角动量”态“包含”各种动量的子态. 因为当我们对上述测量后出现的某个动量本征态再进行能量和角动量测量,其结果并不一定就是原来的 $(E, l(l+1)\hbar^2, l_3\hbar)$, 而可能取其他的一系列值. 这就表明,当初的态 $|E, l, l_3\rangle$ 是由各种动量本征态以某种方式叠加而成的单纯态,而任一个动量本征态又是各种“能量和角动量”态叠加而成的单纯态. 为了强调这一特性,我们常把这种叠加称作相干叠加,它不同于若干个状态的混合. 或者说,它不同于一个统计系综. 一个状态并可以多种方式表成其他状态的叠加,如 $|E, l, l_3\rangle$ 又可表成各种坐标本征态 $|x_1, x_2, x_3\rangle$ 的叠加.

需要强调的是,只有同一个体系的状态才能叠加在一起,两个体系的状态是不能叠加在一起的.

很显然,在经典力学中不存在这种状态叠加,经典波的叠加与量子状态叠加也有着本质差别. 对于经典波,叠加出来的波并不部分地处于原来各个波的状态,当对叠加波的任何力学量进行测量时,都不会以一定概率显示原来各个波的值.

以上四条都属于量子力学引入的新概念,其中第2,4条是对经典概念的根本性变革.

5) 设 S 为体系力学量的一个完全集合,则它们全部的共同本征态 $|s_j\rangle$ 将构成体系状态的完备集(其中 s_j 代表集合 S 的任一组本征值). 于是体系的任何状态 $|A\rangle$ 都可表示为它们的叠加. 在 j 取分立值的情况下,叠加式可表为

$$|A\rangle = \sum_j a(s_j) |s_j\rangle, \quad (1.1.1)$$

$a(s_j)$ 一般为复数,在 $|A\rangle$ 和 $|s_j\rangle$ 都归一的情况下, $a(s_j)$ 称为概率幅,它的绝对值平方 $P(s_j)$ 等于“对状态 $|A\rangle$ 进行力学量集合 S 的测量时,得出结果为 s_j 的概率”. 要特别指出的是, $a(s_j)$ 不能简单地取成 $P(s_j)$ 的平方根. 否则,(举例来说)当 $|E, l, l_3\rangle$ 表成各动量本征态 $|p_1, p_2, p_3\rangle$ 的叠加,而每个动量本征态又表成各种能量角动量的叠加时,就不能还原到原来的 $|E, l, l_3\rangle$. 引入复数的概率幅正是叠加的相干性的体现,也显示出“量子叠加”与“混合”的区别.

两个相同状态如两个 $|s_{j0}\rangle$ 的叠加结果将为 $c|s_{j0}\rangle$. 在归一化后,与原态 $|s_{j0}\rangle$ 最多差一个因子 $e^{i\theta}$. 而 $|s_{j0}\rangle$ 与 $e^{i\theta}|s_{j0}\rangle$ 在物理上没有什么不同,因为对 S 测量的结果未变. 上述情况也反映量子状态的叠加与经典波叠加的差异. 在经典力学中,两个相同波叠加后,其能量和动量等物理量都与原波不同.

(1.1.1)式中的 $a(s_j)$ 又称为 $|A\rangle$ 在 $|s_j\rangle$ 上的投影,并记作 $\langle s_j|A\rangle$. 若 $a(s_j)=0$ 则称 $|A\rangle$ 与 $|s_j\rangle$ 正交,代表对态 $|A\rangle$ 进行 S 的测量时,得出测量值为 s_j 的概率为零. 显然,集合 S 的两个不同本征态 $|s_i\rangle$ 和 $|s_j\rangle$ 是正交的. 因而 S 的本征态集构成体系状态的正交完备集. 利用 $|s_j\rangle$ 的正交归一性,不难验证(1.1.1)式左方的 $|A\rangle$ 确是归一的.

量子状态的上述性质使它类似于矢量,因而量子态的数学表示被称为态矢量(抽象代数意义下的矢量). 全部态矢量 $|s_j\rangle$ 的集合构成态矢量空间(无穷维)中的一组基矢. “系数集合” $a(s_j)$ 称为状态在 S 表象中的表示. 对于单粒子(在不改变其自旋时),状态在坐标表象中的表示就是通常所谓的波函数 $\varphi(x_1, x_2, x_3)$. 由此可见,量子波函数的本质意义是与状态的叠加性相联系的^①.

6) 关于表示系数的相因子. 如上所述,(1.1.1)式中 $|A\rangle$ 的表示系数 $a(s_j)$ 的绝对值由概率 $P(s_j)$ 确定,因而具有客观性. 至于各个 $a(s_j)$ 的相位因子 $e^{i\theta}$,则情况与 $|a(s_j)|$ 不同,它们既含有客观性因素又含有约定性因素. 这是因为作为基矢

^① 以上讨论表明,早期的提法“微观粒子具有波粒二象性”并不妥当. 因为它把“波”和“粒”各作一象并提,暗含着“波”是现实三维空间中的实体波. 我们在第2页还曾指出:对于刚体(如多原子分子),波函数为 $\varphi(x_1^i, x_2^i, x_3^i, \theta_1, \theta_2, \theta_3)$,并不就是三维空间坐标的函数.

的 $|s_j\rangle$ 乘上任一个相位因子 $e^{i\theta_j}$ 后仍代表同一状态(为前所述,它仍为力学量集合 S 的“本征值为 s_j 的”本征态,而且仍是归一的),于是当用 $|s_j\rangle' \equiv e^{i\theta_j} |s_j\rangle$ 来代替 $|s_j\rangle$ 作基矢进行展开时,原来的系数 $a(s_j)$ 即变换成 $a'(s_j) = a(s_j)e^{-i\theta_j}$. 新的 $a'(s_j)$ 同样是状态 $|A\rangle$ 在 S 表象中的表示. 这表明状态表示中的位相因子含有约定性因素. 但是两个态 $|A\rangle$ 和 $|B\rangle$ 在基矢 $|s_j\rangle$ 上的投影 $a(s_j)$ 和 $b(s_j)$ 之间的位相差在上述变换下保持不变. 这个结果是必须的,因上述位相差具有客观性意义:在 $|A\rangle$ 和 $|B\rangle$ 的叠加态中测出 S 的本征值为 s_j 的概率就与上述位相差的取值有关.

7) 关于力学量的数学表示. 定义线性算符 $\hat{M}$ 如下:它作用到力学量 M 的本征态 $|m_j\rangle$ 上的结果即定义为 $m_j|m_j\rangle$,而作用到任意状态 $|A\rangle$ 上时,要先将 $|A\rangle$ 按 $|m_j\rangle$ 展开,再按上面的定义作用到展开的各项上. 例如当 $|A\rangle = \sum_j a_j |m_j\rangle$ 时, $\hat{M}|A\rangle = \sum_j a_j m_j |m_j\rangle$. 根据这一定义,力学量 M 在任意态 $|A\rangle$ 中的期望值 $\sum_j |a_j|^2 m_j$ 就可表示成 $\langle A|\hat{M}|A\rangle$. 而且 M 的任意函数 $f(M)$ 在状态 $|A\rangle$ 中的期望值就等于 $\langle A|f(\hat{M})|A\rangle$ [$f(\hat{M})$ 作用到 $|m_j\rangle$ 上的结果,按定义就是 $f(m_j)|m_j\rangle$]. 在上述意义下,算符 $\hat{M}$ 成为力学量 M 的数学表示.

我们看到,在量子力学中力学量之所以要用算符表示是与前面所阐述的第2, 4点相关. 在经典力学中,由于各力学量在所有可能的状态中都具有确定值,也不存在状态的叠加,故力学量只需用普通数(c 数)表示即可.

力学量算符像态矢量一样可以用不同表象来表示. 算符 $\hat{M}$ 在它自己的表象中的表示矩阵是对角的,即 $M_{jk} = \langle m_j|\hat{M}|m_k\rangle = \delta_{jk}m_j$. 在其他表象中则有非对角元,如在 S 表象中 $M_{jk}^s = \langle s_j|\hat{M}|s_k\rangle$ 一般不为零. 当我们将基矢 $|s_j\rangle$ 乘上任意相因子即用 $|s_j\rangle' = e^{i\theta_j} |s_j\rangle$ 来代替 $|s_j\rangle$ 时, M_{jk}^s 将相应地变为 $M_{jk}' = M_{jk}^s e^{-i(\theta_j - \theta_k)}$. 这表明非对角元的相因子同样含有约定性因素,情况与态矢量相应.

8) 根据5)~7)的讨论,可以得出:两个“可同时测准”的力学量所对应的算符是可以对易的. 对于任意两个力学量 $\hat{L}_1$ 和 $\hat{L}_2$,如令 $\hat{\delta} \equiv \frac{1}{i}(\hat{L}_1 \hat{L}_2 - \hat{L}_2 \hat{L}_1)$,则在任意态中, $\hat{L}_1$ 和 $\hat{L}_2$ 测量值的均方差将满足下述测不准关系:

$$\Delta L_1 \Delta L_2 \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{\delta} \rangle|, \quad (1.1.2)$$

其中 ΔL 代表 $(\langle \hat{L}^2 \rangle - \langle \hat{L} \rangle^2)^{\frac{1}{2}}$,称为算符 $\hat{L}$ 在该态中的测不准度, $\langle \hat{\delta} \rangle$ 代表 $\hat{\delta}$ 在该态中的期望值. $\hat{L}_1 \hat{L}_2 - \hat{L}_2 \hat{L}_1$ 称作两算符的对易子并记作 $[\hat{L}_1, \hat{L}_2]$. 在 $\hat{\delta}$ 的定义中将对易子除以 i 是使 $\hat{\delta}$ 成为厄米算符.

在体系的力学量可表为广义坐标算符 $\hat{q}_j$ 和广义动量算符 $\hat{p}_j$ 的代数函数情况下,只要知道 $\hat{q}_j$ 和 $\hat{p}_k$ 之间的对易子就可确定这些力学量之间的对易子,例如

$[\hat{p}_k^2, \hat{q}_j] = \hat{p}_k [\hat{p}_k, \hat{q}_j] + [\hat{p}_k, \hat{q}_j] \hat{p}_k$. 量子理论的基本假设是(指在薛定谔图象中. 若取海森伯图象, 则应为等时对易子)

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}, \quad [\hat{q}_j, \hat{q}_k] = [\hat{p}_j, \hat{p}_k] = 0. \quad (1.1.3)$$

这就是说在不同自由度之间, $\hat{q}$ 与 $\hat{p}$ 是可对易的(从而不同自由度的任何力学量算符都是可对易的), 只有同一自由度的 $\hat{q}$ 与 $\hat{p}$ 才不可对易, 即不可同时完全测准. 相应的测不准度关系为

$$\Delta q_j \Delta p_j \geq \frac{1}{2} \hbar. \quad (1.1.4)$$

(1.1.3)式通常称作量子化条件. 对于单粒子系, 上述基本假设(即量子化条件)的物理基础就是德布罗意关系 $p = \hbar k$ (以及平面波的表式要用 $e^{ik \cdot x}$ 的形式而不是 $\sin(k \cdot x + \theta)$ 的形式. 原因是: 这时电子在空间各点的概率密度是均匀的). 这样, 在 x 表象 $\hat{p}_i$ 的表示就是 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$, 以使(1.1.3)式成立. 狄拉克从另一角度普遍地论证了这一基本假设. 他引入量子泊松括号 $\{\hat{L}, \hat{M}\}_Q$. 要求它与经典的泊松括号满足相同的交换、分配和结合等规则, 由此即得出 $\{\hat{L}, \hat{M}\}_Q$ 与 $\frac{1}{i}(\hat{L}\hat{M} - \hat{M}\hat{L})$ 成正比. 比例系数为一普通常数并具有[作用量] $^{-1}$ 的量纲, 因而与普朗克常数成反比. 将它记作 $\hbar^{-1}$, 并称 $\hbar$ 为约化的普朗克常数. 狄拉克再假定 q 与 p 之间的量子泊松括号与经典泊松括号的值相等, 这样就得出(1.1.3)式及 $\hbar = h/2\pi$.

物理学中所引入的物理量原则上都是从守恒律定出来的, 否则引入的量就没有什么意义. 而守恒律又与物理规律具有的对称性相联系: 动量(指平动量)守恒来自空间坐标架平移对称性, 能量守恒来自时间原点平移的对称性. 角动量守恒来自空间坐标架转动对称性. 在量子理论中, 情况也一样, 并且还引入宇称这个新物理量, 其守恒与空间坐标架的反射对称性(即从右手坐标系变成左手坐标系)相联系. 对于角动量守恒和能量守恒, 有时也简单地通过它们的经典表达式, 将其中动量换成算符来给出.

9) 在薛定谔图象中, 状态随时间的变化可由德布罗意另一关系式 $E = \hbar\omega$ 来确定. 对能量本征态于是有^①

$$|t\rangle = |t_0\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}. \quad (1.1.5)$$

对任意态, 可先将 $|t_0\rangle$ 按能量算符 $\hat{H}$ 的本征态 $|E_j\rangle$ 来展开, 再按上式确定每项随时间的变化. 这样, 若

$$|t_0\rangle = \sum_j a(E_j) |E_j\rangle,$$

① 归一化条件要求: 状态随时间变化应由因子 $e^{-iEt/\hbar}$ 表示而不是由 $\sin(Et/\hbar + \theta)$ 表示.

则有

$$|t\rangle = \sum_j a(E_j) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j (t-t_0)} |E_j\rangle.$$

两边对 t 微商即得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |t\rangle = \sum_j E_j a(E_j) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j (t-t_0)} |E_j\rangle = \hat{H} |t\rangle, \quad (1.1.6)$$

这就是薛定谔方程. 它是时间的一阶方程, 而且是一个线性方程因此状态之间的叠加关系并不随时间而改变.

薛定谔方程虽然表明状态随时间连续地变化, 但它并不与量子跃迁的概念相矛盾. 将此两者统一起来的关键就是状态叠加原理. 例如若

$$|t\rangle = \sum_j a_j(t) |m_j\rangle, \quad a_j(0) = \delta_{j0},$$

其中 $|m_j\rangle$ 为一组正交归一的完备态集合. 则当 $t=0$ 时, 体系完全处于 $|m_0\rangle$ 态, 而当 $t=\epsilon$ (ϵ 为任意正值小量) 时, 就会出现从 $|m_0\rangle$ 到 $|m_j\rangle_{j \neq 0}$ 态的跃迁, 只是跃迁的概率为相应的小量. 在这里, 状态 $|t\rangle$ 随时间的连续变化只是表明跃迁到 $|m_j\rangle$ 的概率幅是连续变化的.

由于量子力学课程中通常采用薛定谔图象, 下面将对读者较不熟悉的海森伯图象作一些说明.

10) 在海森伯图象中, 态矢量与 t 无关. 这时体系的每个态矢量 $|s\rangle$ 可视为标志它的一个运动过程. 该态矢量可通过该过程在初始时或其他某个时刻的状况来描述. 例如“在给定力场中运动”的单粒子, 可用 $|x_0, t_0\rangle$ 来标志这样一个过程, 即 $t=t_0$ 时粒子具有确定的位置 x_0 . 因此在海森伯图象中态矢量的作用相当于给出某种“初”条件, 而体系的运动体现在力学量算符随时间的变化上 (好比经典物理中力学量随时间变化), 任意 t 时刻的算符要作用到态矢量上, 先要通过运动方程将它用 t_0 时刻的算符表示出来, 然后再对态矢量作用.

在海森伯图象中, 状态之间同样存在叠加关系. 而量子化条件 (1.1.3) 应写成等时的对易关系, 即为

$$[\hat{q}_j(t), \hat{p}_k(t)] = i\hbar \delta_{jk}, \quad [\hat{q}_j(t), \hat{q}_k(t)] = [\hat{p}_j(t), \hat{p}_k(t)] = 0. \quad (1.1.7)$$

注意当 $t' \neq t$ 时, $[\hat{q}_j(t), \hat{q}_k(t')]$ 和 $[\hat{p}_j(t), \hat{p}_k(t')]$ 一般都不等于零, 即使 $j \neq k$.

如果两个算符的时间不同, 可通过运动方程将它们化成同一时刻的算符再应用 $[\hat{A}, \hat{B}_1 \hat{B}_2] = [\hat{A}, \hat{B}_1] \hat{B}_2 + \hat{B}_1 [\hat{A}, \hat{B}_2]$ 等关系来求其对易关系. 算符满足的运动方程为

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{L}(t) = [\hat{L}(t), \hat{H}]. \quad (1.1.8)$$

(1.1.8) 式可通过海森伯图象与薛定谔图象间的变换, 由薛定谔图象中的运动方程

导出,因此它的实验基础仍是关系式 $E = \hbar\omega$.

另外,(1.1.7)和(1.1.8)式可以写成量子泊松括号形式. 两个算符 $\hat{A}, \hat{B}$ 的量子泊松符号 $\{\hat{A}, \hat{B}\}_Q$ 定义即为 $[\hat{A}, \hat{B}]$. 于是有

$$\{\hat{q}_j(t), \hat{p}_k(t)\}_Q = \delta_{jk}, \quad \{\hat{q}_j(t), \hat{q}_k(t)\}_Q = \{\hat{p}_j(t), \hat{p}_k(t)\}_Q = 0, \quad (1.1.9)$$

和

$$\frac{d}{dt} \hat{L}(t) = \{\hat{L}(t), \hat{H}\}_Q. \quad (1.1.10)$$

它们与经典力学中的方程形式相同.

以上十个基本点从一般的角度概括了量子力学的物理内涵和它的理论构架,进行这种抽象概括的目的是为了对场进行量子化,以在经典场论的基础上建立量子场论.

§ 1.2 场的广义坐标和它的量子化

从经典的拉格朗日-哈密顿理论体系来看,场(指有经典意义的场,如标量场、矢量场和张量场等)与粒子系的主要差别是自由度数的差别. 质点系的自由度数是有限的,而场的自由度数则是无限的(参见下文说明). 在经典理论中,对于自由度数为 n 的粒子系,它在某个时刻的运动状态可由 $2n$ 个数来表示,它们可取为 n 个广义坐标 q_j 和 n 个广义动量 p_j ($j=1, 2, \dots, n$),当然这 $2n$ 个数也可取作广义坐标和相应的广义速度 $\dot{q}_j$. 场的情况则不同,它的运动状态要用若干个场函数来表示. 下面先来看标量场 $\varphi(x_1, x_2, x_3)$ 的情况,然后再转到电磁场的问题上来.

1. 标量场的广义坐标和广义动量 标量场的量子化

在经典理论中,标量场在某个时刻的状态要用两个函数 $\varphi(x_1, x_2, x_3)$ 和 $\dot{\varphi}(x_1, x_2, x_3)$ 来描述. φ 和 $\dot{\varphi}$ 分别对应于粒子系的广义坐标 q 和广义速度 $\dot{q}$, (x_1, x_2, x_3) 对应于自由度指标 j . 换句话说,空间每一点,对应于场的一个自由度. 该点的场值 φ 代表场的一个“广义坐标”,该点的 $\dot{\varphi}$ 代表场的一个“广义速度”.

但量子化理论所需要的是正则动量. 与广义坐标 $\varphi(\mathbf{x}, t)$ 对应的正则动量可通过场的拉格朗日量 $L(t)$ 来确定,而 $L(t)$ 可表成场的拉格朗日函数(也就是拉格朗日量密度) $\mathcal{L}(\mathbf{x}, t)$ 的体积分形式

$$L(t) = \int \mathcal{L}(\mathbf{x}, t) d^3x. \quad (1.2.1)$$

$\mathcal{L}$ 对 $\mathbf{x}$ 和 t 的依赖是通过 $\varphi(\mathbf{x}, t)$ 来体现的, 即

$$\mathcal{L}(\mathbf{x}, t) = \mathcal{L}(\varphi(\mathbf{x}, t), \nabla\varphi(\mathbf{x}, t), \dot{\varphi}(\mathbf{x}, t)). \quad (1.2.2)$$

与 $\varphi(\mathbf{x}, t)$ 共轭的正则动量函数 $\pi(\mathbf{x}, t)$ 的定义为

$$\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial \mathcal{L}(\varphi(\mathbf{x}, t), \nabla\varphi(\mathbf{x}, t), \dot{\varphi}(\mathbf{x}, t))}{\partial \dot{\varphi}(\mathbf{x}, t)}, \quad (1.2.3)$$

即拉格朗日量密度 $\mathcal{L}$ 对“广义速度”的偏微商. 自由标量场满足的方程为克莱因-戈登方程

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \kappa^2 \right) \varphi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (1.2.4)$$

写成协变形式即为 $\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_\mu^2} - \kappa^2 \varphi = 0$, 其中 κ 为量纲等于 L^{-1} 的参量. 相应的标量场的拉格朗日量密度 $\mathcal{L}$ 应为

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[-(\nabla\varphi)^2 + \frac{1}{c^2} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} \right)^2 - \kappa^2 \varphi^2 \right] = -\frac{1}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} \frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} - \frac{1}{2} \kappa^2 \varphi^2, \quad (1.2.5)$$

因为将它代入拉格朗日方程

$$\frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} \right)} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} \quad (1.2.6)$$

中, 正好化出场方程(1.2.4) (参见电动力学书: 注意, 在上式的计算中 $\frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu}$ 和 φ 都要看成独立变量).

有了(1.2.5)式, 将它代入(1.2.3)式右方得

$$\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t}, \quad (1.2.7)$$

即 π 与“广义速度”成正比. 场的哈密顿量为

$$H = \int \mathcal{H}(\pi, \varphi, \nabla\varphi) d^3x, \quad (1.2.8)$$

其中

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\varphi} - \mathcal{L} \quad (1.2.9)$$

称为哈密顿量密度. 通常 $\mathcal{H}$ 要用 $\varphi, \nabla\varphi$ 和 π 来表示, 将(1.2.9)式右方所含的 $\dot{\varphi}$ 用 $c^2 \pi$ 代替, 即得出

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} [c^2 \pi^2 + (\nabla\varphi)^2 + \kappa^2 \varphi^2]. \quad (1.2.10)$$