



含时微扰论

含时微扰问题

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

未受微扰
有精确定态解
 $\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$
 $|n(t)\rangle = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$

$$0 \leq t \leq \tau$$

时间间隔之内
的微扰作用

导致体系能量
不守恒

无法讨论能量修正

当微扰不大时，体系在 H_0 的各个本征态之间跃迁

当 $V=0$ 时,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle \quad C_n \text{ 与时间无关}$$

问：如果体系初始时刻处于 H_0 的本征态 $|i\rangle$ 中，含时微扰项作用后，体系处于 H_0 的另一个本征态 $|f\rangle$ 的几率是多少？

当 $V(t)$ 显含时间时， C_n 是时间的函数，此时 t 时刻波函数

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$$

体系波函数在 H_0 表象的表示

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$$

体系波函数满足薛定谔方程

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

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle$$

代入

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n C_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right) \sum_n C_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$$

→
$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle + \sum_n C_n(t) E_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$$

$$= \sum_n C_n(t) E_n e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle + \hat{V}(t) \sum_n C_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$$

→
$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle = \hat{V}(t) \sum_n C_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$$

这实质上是相互作用绘景中的薛定谔方程

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle = \hat{V}(t) \sum_n C_n(t) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$$

用 $\langle m | e^{i\frac{E_m t}{\hbar}}$ 标积上式

$$i\hbar \sum_n \dot{C}_n(t) e^{\frac{i(E_m - E_n)t}{\hbar}} \underbrace{\langle m | n \rangle}_{\delta_{mn}} = \sum_n \langle m | \hat{V}(t) | n \rangle C_n(t) e^{\frac{i(E_m - E_n)t}{\hbar}}$$

$$i\hbar \dot{C}_m(t) = \sum_n \langle m | \hat{V}(t) | n \rangle C_n(t) e^{\frac{i(E_m - E_n)t}{\hbar}}$$

$$i\hbar \dot{C}_m(t) = \sum_n V_{mn} e^{i\omega_{mn}t} C_n(t)$$

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \quad V_{mn} = \langle m | \hat{V}(t) | n \rangle$$

矩阵形式

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \\ \dot{C}_3 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t} & V_{13}e^{i\omega_{13}t} & \dots & \dots \\ V_{21}e^{i\omega_{21}t} & V_{22} & V_{23}e^{i\omega_{23}t} & \dots & \dots \\ V_{31}e^{i\omega_{31}t} & V_{32}e^{i\omega_{32}t} & V_{33} & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

求解这组耦合方程就可以得到 $C_n(t)$ 系数，也就可以得到在任意时刻发现体系处于 $|n\rangle$ 特定状态的几率。

对于一般性的 $\hat{V}(t)$ ，求解上述方程是非常困难的。但当 $V \ll \hat{H}_0$ 时 $C_n(t)$ 随时间变化缓慢，体系仍然有很大几率停留在原来状态，此时就可以用微扰论逐级逼近来近似求解。

$$i\hbar\dot{C}_m(t) = \sum_n V_{mn} e^{i\omega_{mn}t} C_n(t)$$

按照微扰论精神，设

$$C_m = C_m^{(0)} + \lambda C_m^{(1)} + \lambda^2 C_m^{(2)} + \dots$$

代入到薛定谔方程中可得

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} C_m^{(0)} &= 0 \\ i\hbar \frac{d}{dt} C_m^{(1)} &= \sum_n V_{mn} e^{i\omega_{mn}t} C_n^{(0)} \\ i\hbar \frac{d}{dt} C_m^{(2)} &= \sum_n V_{mn} e^{i\omega_{mn}t} C_n^{(1)} \\ &\vdots \end{aligned}$$

初始时刻处于 $|i\rangle$ 的系统在 t 时刻时系统处于 $|f\rangle$ 的几率?

几率幅 $C_{fi} \equiv C_{f \leftarrow i} = \langle i(t=0) | f(t) \rangle$

首先考虑零阶近似 ($V=0$)

$$\dot{C}_f(t) = 0 \quad \longrightarrow \quad C_{fi}^{(0)}(t) = \delta_{fi}$$

将 $C_{fi}^{(0)}$ 代入到一级系数方程中

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_{fi}^{(1)} = V_{fi} e^{i\omega_{fi}t} \quad \longrightarrow \quad C_{fi}^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}t'} dt'$$

t 时刻发现系统处于 $|f\rangle$ 的几率

$$P_{fi}(t) = |C_{fi}(t)|^2 = |\delta_{fi} + C_{fi}^{(1)} + \dots|^2$$

微扰论成立条件是

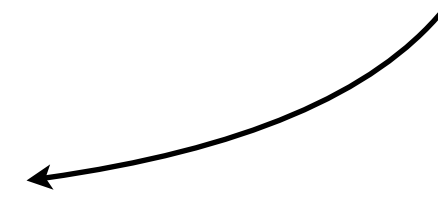
$$|P_{fi}(t)| \ll 1$$

第0级近似

$$C_{fi}^{(0)}(t) = \delta_{fi}$$

第1级近似

$$C_{fi}^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{fi}(t') e^{i\omega_{fi}t'} dt'$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} C_{fi}^{(1)} = V_{fi} e^{i\omega_{fi}t}$$



第k级近似

$$C_{fi}^{(k)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^k \sum_{n_1 n_2 \dots n_{k-1}} \int_0^t dt_k \int_0^{t_k} dt_{k-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 V_{fn_{k-1}}(t_k) e^{i\omega_{fn_{k-1}}t_k} \\ V_{n_{k-1}n_{k-2}}(t_{k-1}) e^{i\omega_{n_{k-1}n_{k-2}}t_{k-1}} \dots V_{n_1 i}(t_1) e^{i\omega_{n_1 i}t_1}$$

相互作用绘景和 戴森序列 (Dyson Series)

薛定谔绘景

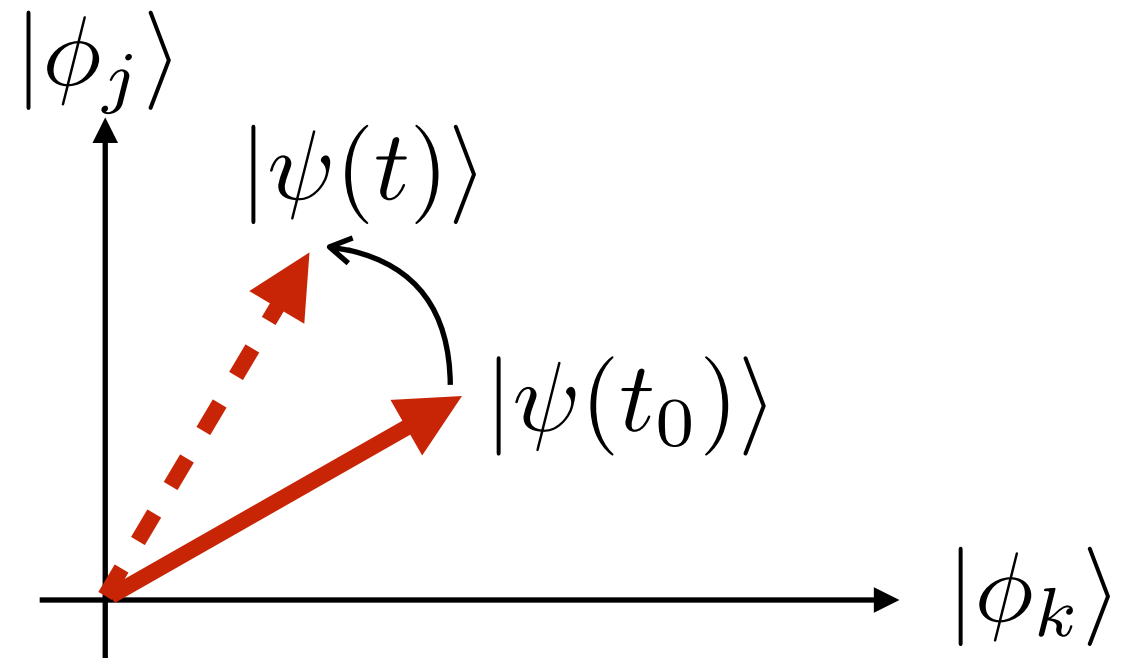
波函数随时间演化而算符是不随时间变化

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


$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{I}$$

$$\hat{U}(t, t) = \hat{I}$$

$$\hat{U}(t_1, t_2) \hat{U}(t_2, t_3) = \hat{U}(t_1, t_3)$$



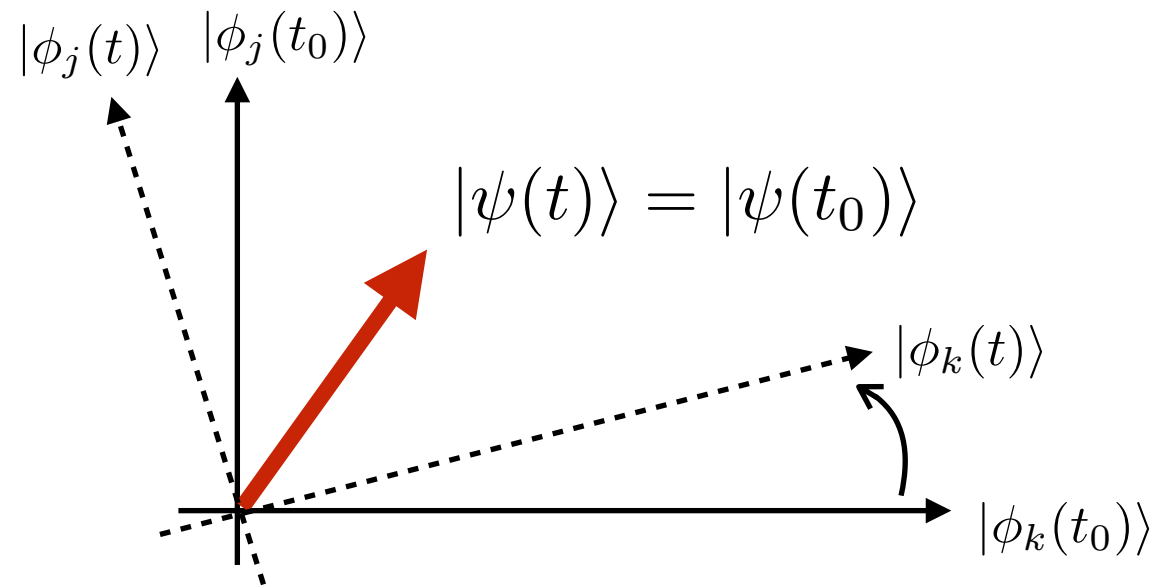
薛定谔绘景

海森堡绘景

波函数不随时间变化而算符随时间变化

$$|\psi(t)\rangle_H = \hat{U}^\dagger(t) |\psi(t)\rangle_S = |\psi(0)\rangle_S = e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} |\psi(t)\rangle_S$$

$$\frac{d|\psi(t)\rangle_H}{dt} = 0$$



力学量算符

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A} \hat{U}(t) = e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}$$

海森堡运动方程

$$\frac{d\hat{A}_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_H, \hat{H}]$$

薛定谔绘景和海森堡绘景

力学量算符平均值相等

$$\begin{aligned}\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle_S &= \left\langle \psi(0) \left| e^{i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \hat{A} e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}} \right| \psi(0) \right\rangle \\ &= \left\langle \psi(0) | \hat{A}_H | \psi(0) \right\rangle_H\end{aligned}$$

相互作用绘景 (狄拉克绘景)

描述哈密顿算符是随时间变化的物理体系

波函数和算符都随时间变化

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$$

波函数定义为

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} |\psi(t)\rangle_S$$

$$t = 0 \text{ 时} \quad |\psi(0)\rangle_I = |\psi(0)\rangle_S = |\psi(0)\rangle_H$$

相互作用绘景中波函数随时间演化关系

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} |\psi(t)\rangle_S$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I &= -\hat{H}_0 e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} |\psi(t)\rangle_S + e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \left(i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_S \right) \\ &= -\hat{H}_0 |\psi(t)\rangle_I + e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{H} |\psi(t)\rangle_S \\ &= -\hat{H}_0 |\psi(t)\rangle_I + e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} (\hat{H}_0 + \hat{V}) |\psi(t)\rangle_S \\ &= -\hat{H}_0 |\psi(t)\rangle_I + \underbrace{\hat{H}_0 e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} |\psi(t)\rangle_S}_{|\psi(t)\rangle_I} + \underbrace{e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{V}(t) e^{-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}}_{\hat{V}_I(t)} \underbrace{e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} |\psi(t)\rangle_S}_{|\psi(t)\rangle_I} \end{aligned}$$

相互作用绘景
的薛定谔方程

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I &= \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I \\ \hat{V}_I(t) &= e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{V}(t) e^{-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \end{aligned}$$

相互作用绘景中算符

$$\hat{A}_I = e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{A} e^{-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}$$

满足如下的运动方程

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_I(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}_I(t), \hat{H}_0]$$

表 11.1: 薛定谔绘景、海森堡绘景和相互作用绘景比较

	态矢量	算符
薛定谔绘景	演化由 \hat{H} 决定	没有变化
海森堡绘景	没有变化	演化由 \hat{H} 决定
相互作用绘景	演化由 \hat{V}_I 决定	演化由 \hat{H}_0

相互作用绘景中时间演化算符

在薛定谔绘景中

$$|\psi(t)\rangle_S = \hat{U}(t, t_i) |\psi(t_i)\rangle_S$$

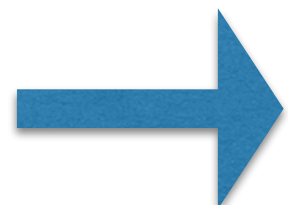
相互作用绘景中

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_I &= e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} |\psi(t)\rangle_S = e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{U}(t, t_i) |\psi(t_i)\rangle_S \\ &= \underbrace{e^{i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{U}(t, t_i) e^{-i\frac{\hat{H}_0 t_i}{\hbar}}}_{\hat{U}_I(t, t_i)} \underbrace{e^{i\frac{\hat{H}_0 t_i}{\hbar}} |\psi(t_i)\rangle_S}_{|\psi(t_i)\rangle_I} \end{aligned}$$

$$|\psi(t)\rangle_I = \hat{U}_I(t, t_i) |\psi(t_i)\rangle_I$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I$$

$$|\psi(t)\rangle_I = \hat{U}_I(t, t_i) |\psi(t_i)\rangle_I$$


$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_I(t, t_i) = \hat{V}_I(t) \hat{U}_I(t, t_i)$$

$$\hat{U}_I(t, t_i) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t') \hat{U}_I(t', t_i) dt'$$

当 \hat{V}_I 足够微弱时，我们可用微扰展开方法
逐级求解此积分方程的近似解

$$\hat{U}_I(t, t_i) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t') \hat{U}_I(t', t_i) dt'$$

考虑第一级近似，因为 $\hat{U}^{(0)}(t', t_i) = 1$

可得
$$\hat{U}^{(0+1)}(t, t_i) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t \hat{V}_i(t') dt'$$

将 $\hat{U}^{(1)}(t', t_i)$ 代入到积分方程右方可得二级近似

$$\begin{aligned} \hat{U}^{(2)}(t, t_i) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t dt_2 \hat{V}_I(t_2, t_i) U_I^{(1)}(t_2, t_i) \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_i}^t dt_2 \hat{V}_I(t_2) \int_{t_i}^{t_2} dt_1 \hat{V}_I(t_1) \end{aligned}$$

戴森序列 (Dyson Series)

F.J. Dyson (1949). "The S matrix in quantum electrodynamics".
Phys. Rev. 75 (II): 1736–1755.

$$\begin{aligned}\hat{U}_I(t, t_i) &= 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t_1) dt_1 \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t_2) dt_2 \int_{t_i}^{t_2} \hat{V}_I(t_1) dt_1 \\ &+ \dots \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_i}^t \hat{V}_I(t_n) dt_n \int_{t_i}^{t_n} \hat{V}_I(t_{n-1}) dt_{n-1} \cdots \int_{t_i}^{t_2} \hat{V}_I(t_1) dt_1 \\ &+ \dots\end{aligned}$$

在微扰 $V(t)$ 作用下，体系从初始时刻状态 i 跃迁到末态 f 的概率

$$\begin{aligned}
 P_{i \rightarrow f}(t) &= \left| \langle f | \hat{U}_S(t, t_i) | i \rangle \right|^2 \\
 &= \left| \langle f | e^{-i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} e^{i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{U}_S(t, t_i) e^{-i \frac{\hat{H}_0 t_i}{\hbar}} e^{i \frac{\hat{H}_0 t_i}{\hbar}} | i \rangle \right|^2 \\
 &= \left| e^{-i \frac{E_f t}{\hbar}} \right|^2 \left| e^{i \frac{E_i t_i}{\hbar}} \right|^2 \left| \langle f | \hat{U}_I(t, t_i) | i \rangle \right|^2 \\
 &= \left| \langle f | \hat{U}_I(t, t_i) | i \rangle \right|^2 \\
 &= \left| \langle f | i \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f | \hat{V}_I(t') | i \rangle dt' \right. \\
 &\quad \left. + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_n \int_{t_i}^t \langle f | \hat{V}_I(t_1) | n \rangle dt_1 \int_{t_i}^{t_1} \langle n | \hat{V}_I(t_2) | i \rangle dt_2 + \dots \right|^2 \\
 &= \left| \delta_{fi} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} V_{fi}(t') dt' \right. \\
 &\quad \left. + \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_n \int_{t_i}^t e^{i\omega_{fn}t_1} V_{fn}(t_1) dt_1 \int_{t_i}^{t_1} e^{i\omega_{ni}t_2} V_{ni}(t_2) dt_2 + \dots \right|^2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle f | \hat{V}_I(t') | i \rangle &= \left\langle f \left| e^{i \frac{\hat{H}_0 t'}{\hbar}} \hat{V} e^{-i \frac{\hat{H}_0 t'}{\hbar}} \right| i \right\rangle \\
&= \langle f | \hat{V}(t') | i \rangle e^{i \frac{E_f - E_i}{\hbar} t'} = \langle f | \hat{V}(t') | i \rangle e^{i \omega_{fi} t'} \\
&\equiv \hat{V}_{fi} e^{i \omega_{fi} t'}
\end{aligned}$$

按照微扰展开级数我们得到如下的跃迁几率

$$\begin{aligned}
C_{fi}^{(0)} &= \delta_{fi}, \\
C_{fi}^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f | \hat{V}(t') | i \rangle e^{i \omega_{fi} t'} dt', \\
&\vdots
\end{aligned}$$

跃迁几率是

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \left| C_{fi}^{(0)} + \lambda C_{fi}^{(1)} + \lambda^2 C_{fi}^{(2)} + \dots \right|^2$$

其中我们用无量纲常数 λ 来标记展开级数。注意：跃迁几率是不同跃迁振幅叠加所得之和的平方，在同一级微扰展开所得到的不同跃迁振幅（或路径）之间通常存在着干涉效应，会产生增强或减弱的跃迁几率。当跃迁初末态之间不同时，即 $i \neq f$ ，跃迁几率是

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \left| C_{fi}^{(1)} \right|^2 + O(\lambda^3)$$

跃迁初末态不同时，虽然跃迁振幅可以有一级微扰修正，但跃迁几率却是二级修正。在 t 时刻体系仍然保持初始时刻状态的几率是

$$P_{i \rightarrow i}(t) = 1 - \lambda^2 \sum_{i \neq f} \left| C_{fi}^{(1)} \right|^2 + O(\lambda^3)$$

戴森 (Freeman Dyson)

早年在剑桥大学追随著名的数学家G.H. 哈代研究数学，1945年获得数学系的学士学位后，于1947年到美国康奈尔大学跟随汉斯·贝特和理查德·费曼学习。他证明了施温格和朝永振一郎发展的变分法方法和费曼的路径积分法的等价性，为量子电动力学的建立做出了决定性的贡献。

1949年戴森提出Dyson series，该工作启发Ward研究并提出Ward等式。

戴森没有博士学位。但由于他的杰出贡献，康奈尔大学于1951年聘请戴森为物理学正教授。这在今天是难以想象的。成名后戴森获得很多荣誉学位，其中包括

Yeshiva University (1966),	University of Glasgow (1974),	Princeton University (1974),
University of York (1980),	City University of London (1981),	New School of Social Research (1982),
Rensselaer Polytechnic (1983),	Susquehanna University (1984),	Depauw University (1987),
Rider College (1989),	Bates College (1991),	Haverford College (1991),
Dartmouth College (1995),	Federal Inst. of Tech. (ETH), Switzerland (1995),	
Scuola Normale Superiore, Pisa, Italy (1996),		University of Puget Sound (1997),
Oxford University (1997),	Clarkson University (1998),	Rockefeller University (2001),
St. Peter's College (2004),	Georgetown University (2005),	University of Michigan (2005),
University of the Sciences (2011)		

量子电动力学 (QED)

拉格朗日量:

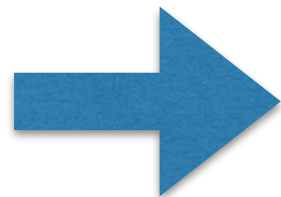
$$\begin{aligned}\mathcal{L} &= \bar{\psi} (i\gamma^\mu D_\mu - m) \psi - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \\ &= \bar{\psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m) \psi - q A_\mu \bar{\psi} \gamma^\mu \psi - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}\end{aligned}$$

可精确求解

不可精确求解

微扰求解

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi} = \frac{1}{137}$$



n 个光子
贡献 α^n

量子力学二阶微扰项

$$E_a^{(2)} = \sum_{i \neq a} \frac{|\langle \psi_i^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_a^{(0)} \rangle|^2}{E_a^{(0)} - E_i^{(0)}} = \sum_{i \neq a} \frac{1}{E_a^{(0)} - E_i^{(0)}} \langle \psi_a^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_i^{(0)} \rangle \langle \psi_i^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_a^{(0)} \rangle$$

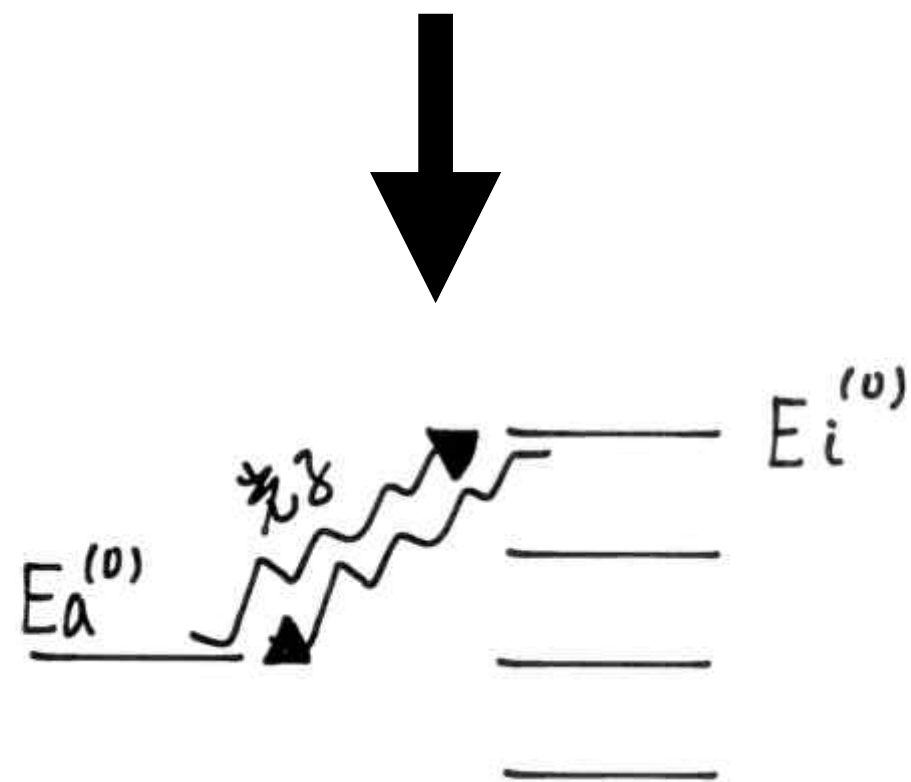
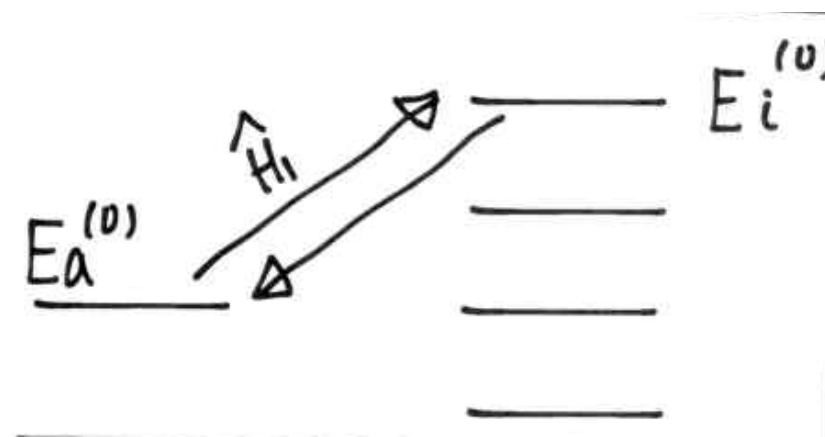
收敛性:

1) $\langle \psi_i^{(0)} | \hat{H}_I | \psi_a^{(0)} \rangle$ 很大,
导致对各态求和不收敛

(紫外发散)

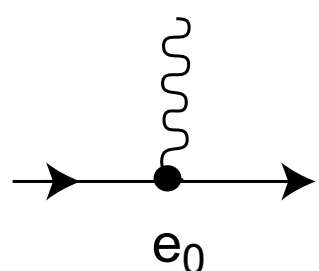
2) E_a 能级附近存在许多 (或连续的)
能级满足 $|E_i - E_a| \sim 0$,
导致对各态求和不收敛

(红外发散)

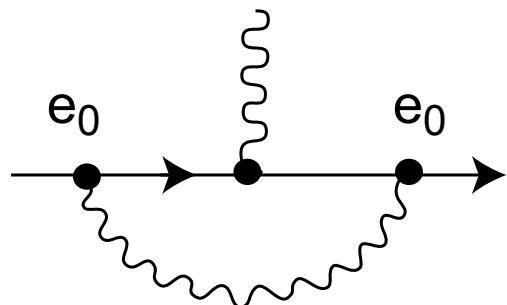


重整化

QED: 微扰展开计算中的无穷大问题



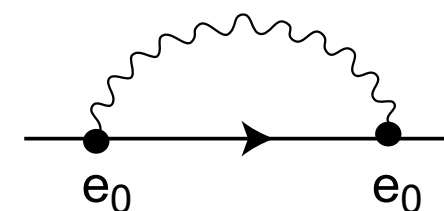
Bare vertex



Radiative correction



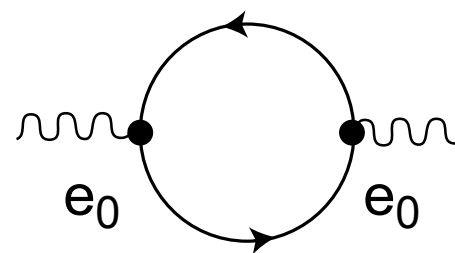
Electron propagator



Radiative correction
(Self-energy)



Photon propagator



Radiative correction
(Vacuum polarization)

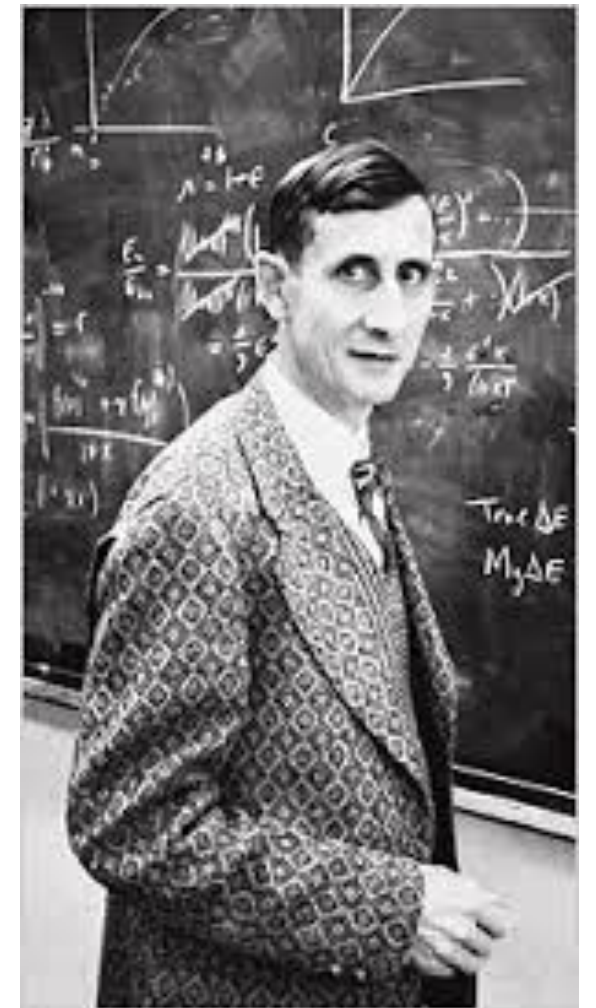
整个30年代，物理学界共识是，量子场论并不被看好。它可能有用，但只是权宜之计，需要添加全新的东西才能使它说的通。

QED重整化

- 20世纪40年代后期才消除QED理论中的不健全之处
Feynman, Schwinger, Tomonaga分别提出重整化思想
1949年Dyson证明他们三种方案是等价的



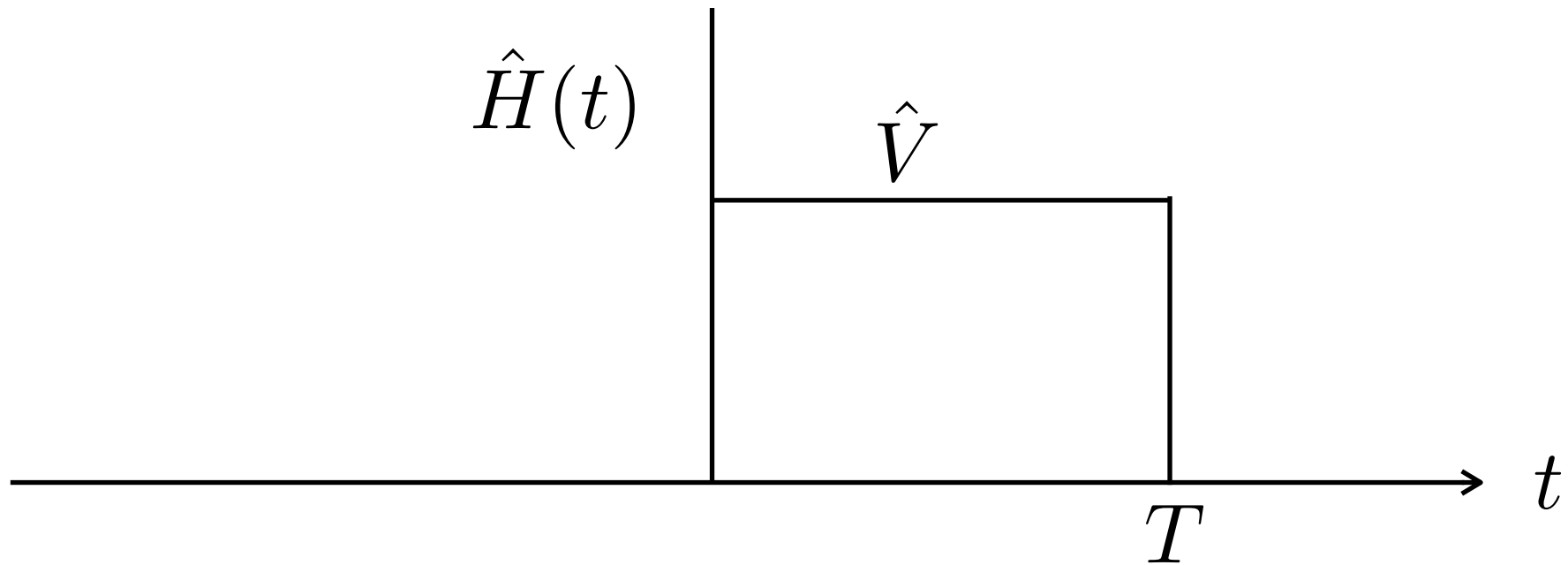
1965 Nobel



Dyson

例 I：常微扰

常微扰



初态 $|i\rangle$ 到不同末态 $|f\rangle$ 的跃迁几率是

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \left| \frac{e^{i\omega_{fi}t} - 1}{\omega_{fi}} \right|^2 \end{aligned}$$

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \left| \frac{e^{i\omega_{fi}t} - 1}{\omega_{fi}} \right|^2$$

$$|e^{i\theta} - 1|^2 = 4 \sin^2(\theta/2)$$



$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{4 \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi}t}{2} \right) \equiv \frac{4|V_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi}t}{2} \right)$$

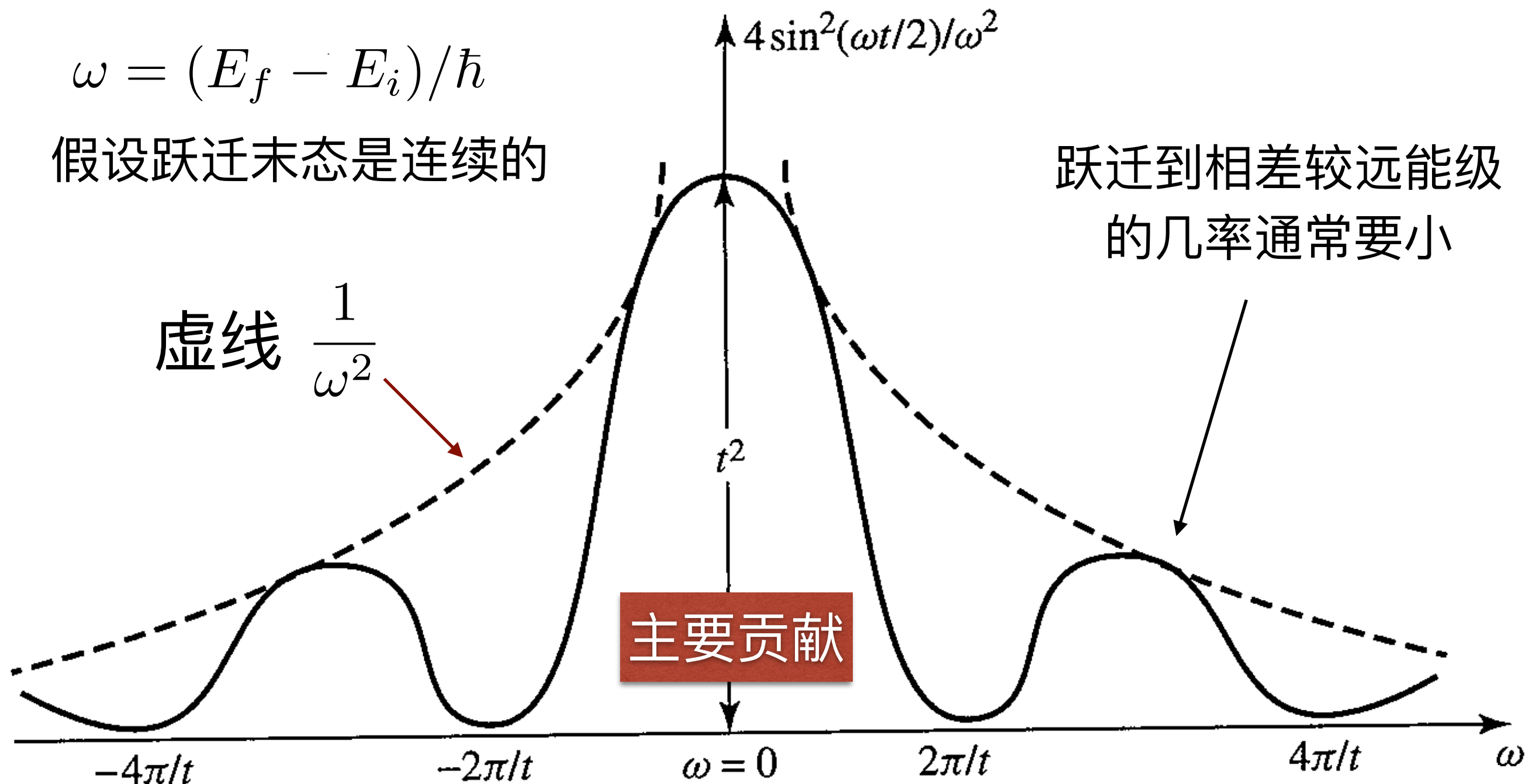
微扰论成立的条件要求

$$P_{i \rightarrow f} \ll 1 \quad \text{或} \quad |V_{fi}| \ll \Delta E \equiv |E_f - E_i|$$

$$\omega = (E_f - E_i) / \hbar$$

假设跃迁末态是连续的

跃迁到相差较远能级的
的几率通常要小



虚线 $\frac{1}{\omega^2}$

主要贡献

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{4 \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi} t}{2} \right) \equiv \frac{4 |V_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi} t}{2} \right)$$

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{4 \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi} t}{2} \right) \equiv \frac{4 |V_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi} t}{2} \right)$$

当 $t \rightarrow 0$ 时

$$\lim_{t \rightarrow 0} P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} t^2$$

跃迁几率和跃迁起始状态 ω_{fi} 无关

体系从初始状态可以跃迁到满足 $V_{fi} \neq 0$ 的所有末态，并且到每一个末态的概率仅和 V_{fi} 有关。

但我们知道，一个小微扰不可能在短时间内使得系统从初态跃迁到能量相差非常悬殊的末态中，那么我们应该如何理解上式哪？

含时微扰论中的时间尺度

$$[h] = [\text{能量}] \times [\text{时间}]$$

量子体系的特征能量标度给出一个特征时间

$$\tau_0 \sim \frac{\hbar}{E_0}$$

微扰论将不同能级之间的跃迁联系起来，这些能级的能量差也给出一个特征时间

$$\tau_{ba} \sim \frac{\hbar}{|E_b - E_a|} = \frac{1}{\omega_{ba}}$$

注意：它与微扰贡献无关

含时微扰论中的时间尺度

微扰贡献的特征时间 $\tau_{\text{pert}} \sim \frac{\hbar}{|V_{ba}|}$

微扰论使用条件

$$|E_b - E_a| \gg |V_{ba}| \quad \longrightarrow \quad \tau_{\text{pert}} \gg \tau_{ba}$$

$$P_{a \rightarrow b}(t) \sim \frac{|V_{ab}|^2}{(E_b - E_a)^2} \ll 1$$

此时微扰作用非常缓慢，和体系特征时间相比，并不剧烈，从而不会改变体系固有性质。

当 $t \rightarrow 0$ 时 $\Delta E \rightarrow \infty$ 微扰项无法区分量子体系的不同能级之间的差异

含时微扰论中的时间尺度

微扰论适用性要求：微扰项作用时间要足够长

$$\tau_{\text{pert}} \gg \tau_{ba} \quad \longrightarrow \quad |E_b - E_a| \gg |V_{ba}|$$

当 $t \rightarrow 0$ 时 $\lim_{t \rightarrow 0} P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} t^2$

微扰项无法区分量子体系的不同能级之间的差异
末态能量不确定，跃迁到各个能级都有可能

 能量不守恒

$\Delta t \rightarrow 0$ 外场本身具有不确定的能量

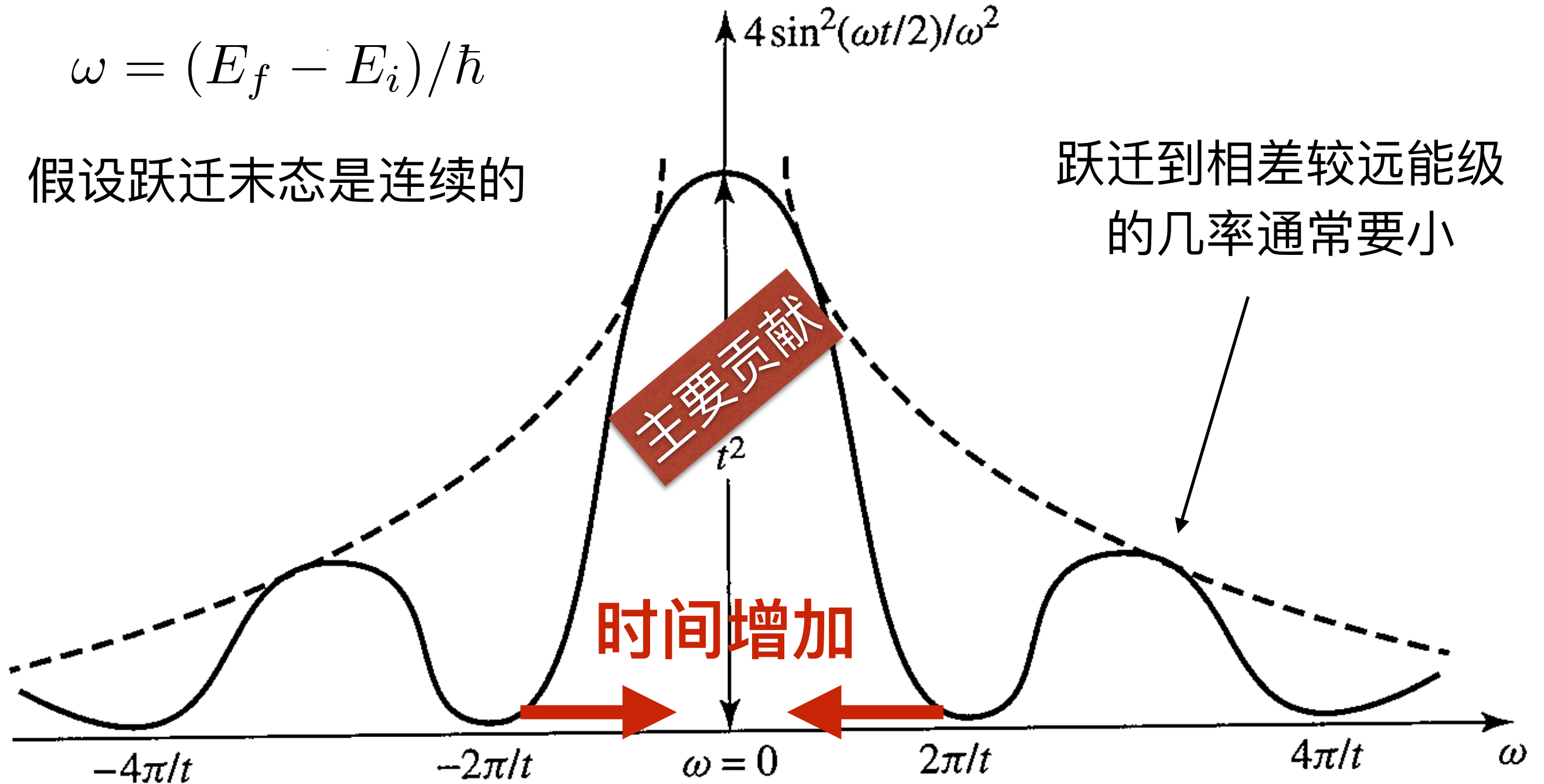
$$\Delta E \rightarrow \infty$$

长时间微扰贡献

$$\omega = (E_f - E_i) / \hbar$$

假设跃迁末态是连续的

跃迁到相差较远能级的
的几率通常要小



$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{4 \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi} t}{2} \right) \equiv \frac{4 |V_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{fi}^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi} t}{2} \right)$$

利用 $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 yt}{\pi y^2 t} = \delta(y)$ 可得 $t \rightarrow \infty$ 极限下

$$\frac{1}{(\omega_{fi}/2)^2} \sin^2 \left(\frac{\omega_{fi}}{2} t \right) = 2\pi t \hbar \delta(\hbar \omega_{fi}) = 2\pi t \hbar \delta(E_f - E_i)$$

$$\delta \left(\frac{\omega_{fi}}{2} \right) = \delta \left(\frac{\hbar \omega_{fi}}{2\hbar} \right) = 2\hbar \delta(\hbar \omega_{fi})$$

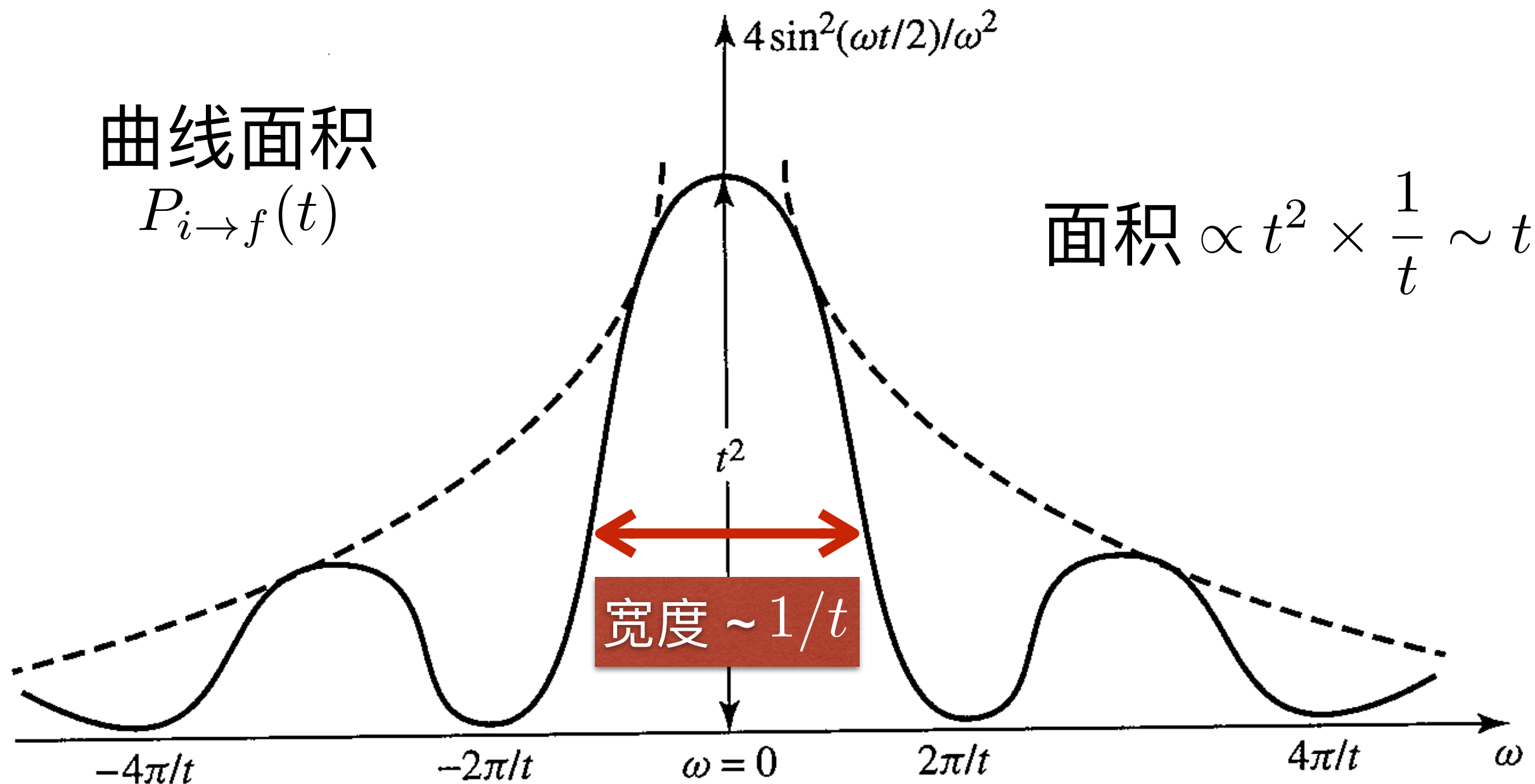
当微扰作用时间足够长，远大于体系两能级之间的特征时间时，跃迁几率为

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{2\pi t}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i)$$

线性时间
依赖关系

能量守恒

跃迁仅仅发生在
能量相等的
两个能级之间



跃迁速率 (单位时间内跃迁概率)

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{dP_{i \rightarrow f}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i)$$

经过长时间的常微扰作用, 跃迁速率和时间无关

费米黄金定则

Delta函数仅在量子系统能级是连续时才成立。

令 $\rho(E_f)$ 表示末态的态密度 每单位能量间隔内的状态数

注意： H_0 的态密度

总跃迁速率是

$$\begin{aligned} W_{i \rightarrow f} &= \int \frac{dP_{if}(t)}{dt} \rho(E_f) dE_f \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{V} | i \rangle \right|^2 \int \rho(E_f) \delta(E_f - E_i) dE_f \end{aligned}$$

$$\rightarrow W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{f \neq i} |V_{fi}|^2 \rho(E_i)$$

- 1) 单位时间跃迁概率和时间无关
- 2) 当t达到一定大小后，跃迁贡献来自同初态能量相同的末态

费米黄金定则

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{f \neq i} |V_{fi}|^2 \rho(E_i)$$

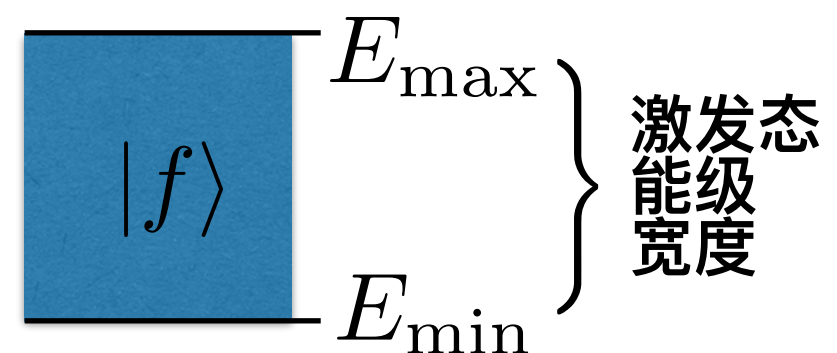
方便估计小量子系统衰变到大量子末态的速度

此过程是不可逆的：

各个衰变末态之间的相位具有随机性，
导致这些末态之间的干涉彼此相消

这要求足够长的时间来使得
衰变连续末态之间的相位变为随机

$$t \gg \frac{\hbar}{E_{\max} - E_{\min}}$$



费米黄金定则

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{f \neq i} |V_{fi}|^2 \rho(E_i)$$

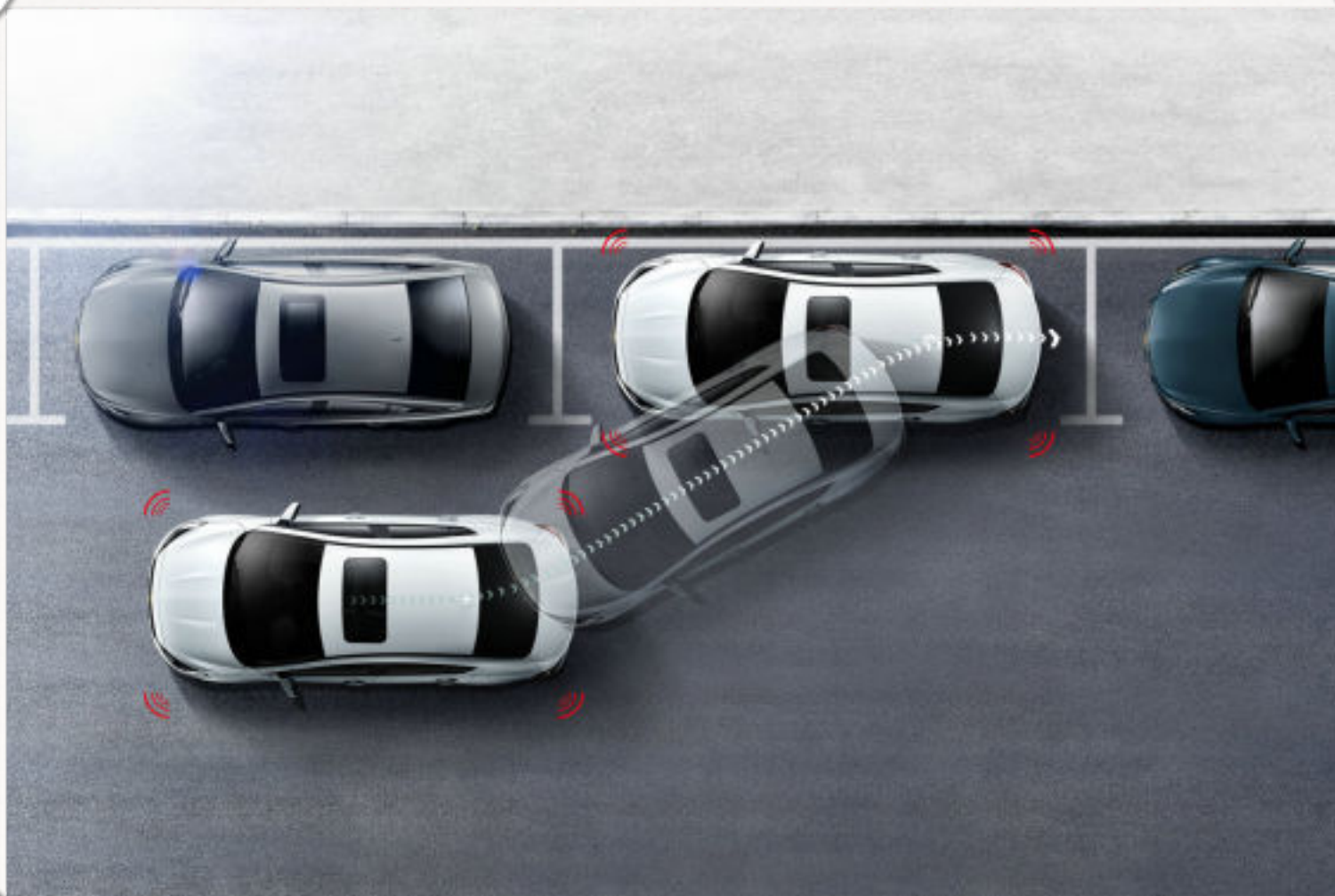
态密度的作用



费米黄金定则

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{f \neq i} |V_{fi}|^2 \rho(E_i)$$

态密度的作用



线性时间依赖关系

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{2\pi t}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i)$$

要满足微扰论，需要 $P_{i \rightarrow f}(t) \ll 1 \rightarrow |V_{fi}|^2 \ll 1$
但即便微扰项非常微弱，只要时间足够长，我们总可以得到

$$P_{i \rightarrow f}(t) > 1$$

几率不守恒？

线性时间依赖关系

$$P_{i \rightarrow f}(t) = \frac{2\pi t}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i)$$

在一级近似中，我们令 $C_{fi}^{(0)} = 1$ ，这相当于假设物理系统并不是封闭的，外部有粒子源不断为物理系统提供处于 $|i\rangle$ 状态的粒子，使得物理系统处于 $|i\rangle$ 态的粒子数不减少。

由于 $|i\rangle$ 态粒子以确定跃迁速度不断地向末态 $|f\rangle$ 跃迁，这必然导致末态粒子数目随时间增大而无限制地增多。

如果整个物理系统是封闭的，那么此跃迁概率公式仅仅适用于短时间。

跃迁速率（单位时间内跃迁几率）

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{dP_{i \rightarrow f}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i)$$

经过长时间的常微扰作用，跃迁速率和时间无关

$C_i \approx 1$ 时，初态中一个粒子在单位时间之内
从 $|i\rangle$ 态跃迁到末态 $|f\rangle$ 态的概率

设初态中有 N 个粒子处于 $|i\rangle$ 态，在 t 时刻由于跃迁而减少的粒子数为

$$dN(t) = -N(t)W_{i \rightarrow f} dt$$

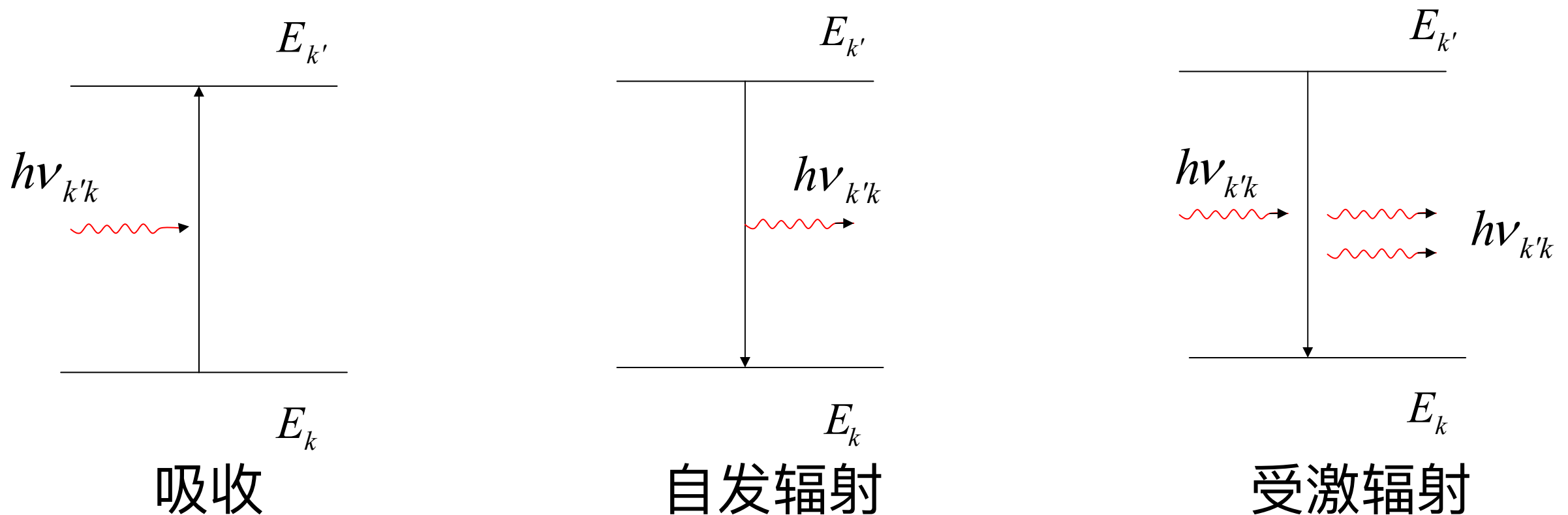
$$N(t) = N(0)e^{-W_{i \rightarrow f} t}$$

例2：周期微扰

光的吸收与辐射的半经典处理

我们对原子结构的认知主要是来自于光(辐射场)与原子的相互作用。在光的照射下，原子可能吸收光而从低能级跃迁到较高能级，或从较高能级跃迁到较低能级并放出光。这现象分别称为**光的吸收** (absorption) 和**受激辐射** (induced radiation)。

实验上还观察到，如果原子本来处于激发能级，即使没有外界光的照射，也可能跃迁到某些低能级而放出光来，这称为**自发辐射** (spontaneous radiation)。



对原子吸收或放出的光进行光谱分析，可获得关于原子能级及有关性质的知识。光谱分析中两个重要的观测量——谱线频率(或波数)与谱线相对强度，前者取决于初末态的能量差 ΔE ($\nu = \Delta E / h$, 频率条件)，后者则与跃迁速率成比例。光的吸收和辐射现象，涉及到光子的产生与湮灭，其严格处理需要用量子电动力学，即需要把电磁场量子化(光子即电磁场量子)。

但对于光的受激和辐射现象，可以在非相对论量子力学中采用半经典方法来处理，即把光子产生和湮灭的问题，转化为在电磁场的作用下原子在不同能级之间跃迁的问题。在这里，原子已作为一个量子力学体系来对待，但辐射场仍然用一个连续变化的经典电磁场来描述，并未进行量子化，即把光辐射场当作一个与时间有关的外界微扰，用微扰论来近似计算原子的跃迁速率。

光的吸收与受激辐射

为简单起见，先假设入射光为平面单色光，其电磁场强度为

$$\begin{cases} \vec{E} = \vec{E}_0 \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \\ \vec{B} = \vec{k} \times \vec{E} / |\vec{k}| \end{cases} \quad (1)$$

其中 \vec{k} 为波矢，其方向即光传播方向， ω 为角频率。在原子中，电子的速度 $v \ll c$ (光速)，磁场对电子的作用力远小于电场对电子的作用力：

$$\left| \frac{e}{c} \vec{v} \times \vec{B} \right| / |e \vec{E}| \sim \frac{v}{c} \ll 1$$

因此只需考虑电场的作用。

此外，对于可见光，波长 λ 为 $(4000 \sim 7000) \times 10^{-10} m \gg a$ (玻尔半径)。在原子大小范围内 $\vec{k} \cdot \vec{r} \approx (2\pi/\lambda)a \ll 1$ ，电场变化极微，可以看成均匀电场，所以

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos \omega t \quad (2)$$

它相应的电势为

$$\phi = -\vec{E} \cdot \vec{r} + \text{常数} \quad (3)$$

常数项对于跃迁无贡献，不妨略去。因此，入射可见光对于原子中电子的作用可表示为

$$H' = -e\phi = -\vec{D} \cdot \vec{E}_0 \cos \omega t = W \cos \omega t \quad (4)$$

其中

$$W = -\vec{D} \cdot \vec{E}_0, \quad \vec{D} = -e\vec{r} \text{ (电偶极矩)}$$

施加一个频率为 ω 的周期性微扰

$$\hat{V}(t) = \hat{v}e^{i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{-i\omega t}$$

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f}(t) &= \left| -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f | \hat{V}(t') | i \rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle f | \hat{v} | i \rangle \int_0^t e^{i(\omega_{fi} + \omega)t'} dt' + \langle f | \hat{v}^\dagger | i \rangle \int_0^t e^{i(\omega_{fi} - \omega)t'} dt' \right|^2 \end{aligned}$$

定义 $v_{fi} = \langle f | \hat{v} | i \rangle$ 和 $v_{fi}^* = \langle f | \hat{v}^\dagger | i \rangle$

忽略干涉项，周期势场微扰引起的跃迁几率为

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} |v_{fi}|^2 \left| \frac{e^{i(\omega_{fi} + \omega)t} - 1}{\omega_{fi} + \omega} \right|^2 + \frac{1}{\hbar^2} |v_{fi}^*|^2 \left| \frac{e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} - 1}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \\ &= \frac{4}{\hbar^2} \left[|v_{fi}|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi} + \omega}{2}t\right)}{(\omega_{fi} + \omega)^2} + |v_{fi}^*|^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2}t\right)}{(\omega_{fi} - \omega)^2} \right] \end{aligned}$$

跃迁振幅正比于

$$v_{fi} \frac{\sin\left(\frac{\omega + \omega_{fi}}{2} t\right)}{\omega + \omega_{fi}} \quad v_{fi}^* \frac{\sin\left(\frac{\omega - \omega_{fi}}{2} t\right)}{\omega - \omega_{fi}}$$

在共振区域 ($\omega \approx |\omega_{fi}|$) 附近, 跃迁振幅中两项的微扰贡献的大小比值约为

$$\frac{\omega - |\omega_{fi}|}{\omega + |\omega_{fi}|} \approx \frac{\omega - |\omega_{fi}|}{2|\omega_{fi}|}$$

两项之间的干涉
效应非常微弱

$$\omega - |\omega_{fi}| \ll \omega + |\omega_{fi}|$$

以可见光为例, $\omega \sim 10^{15} \text{s}^{-1}$, $\Delta = \omega - \omega_{fi} \sim 10^7 \text{s}^{-1}$,
远离共振区域的贡献和共振区域贡献的比值约为 10^{-8}

共振增强

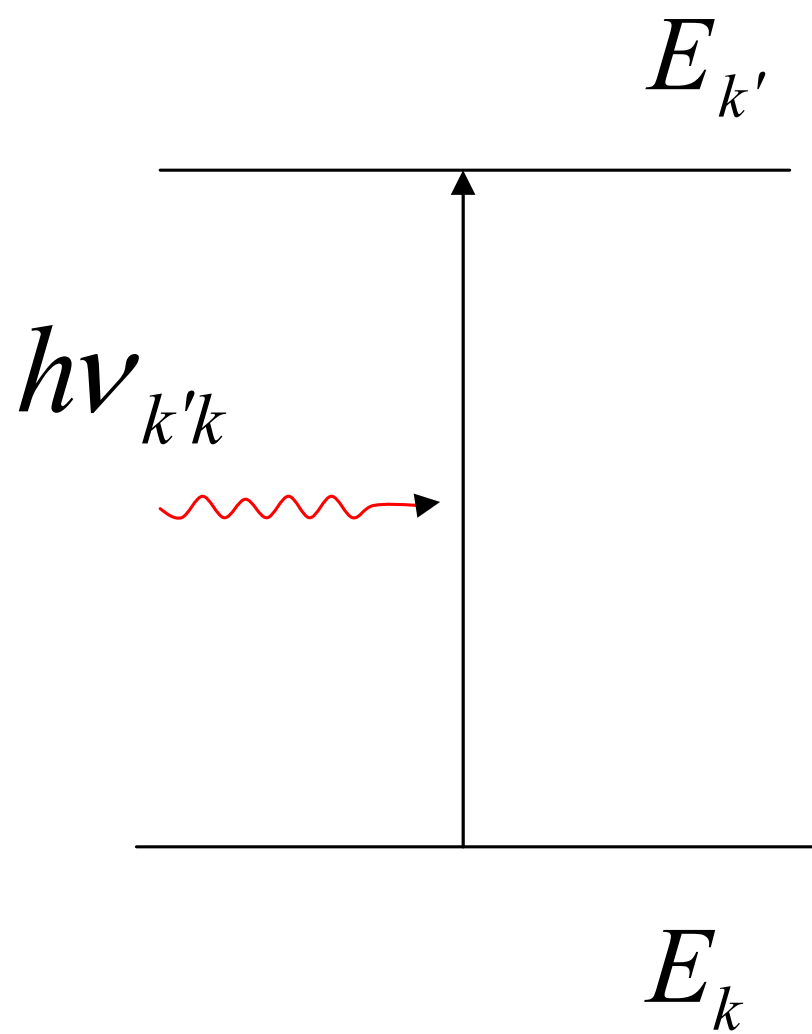
跃迁几率在 $\omega_{fi} = \pm\omega$ 处有极值

$$P_{i \rightarrow f}^{\text{Max}} = \frac{t^2}{\hbar^2} |\langle f | \hat{v} | i \rangle|^2_{\omega_{fi} = -\omega},$$

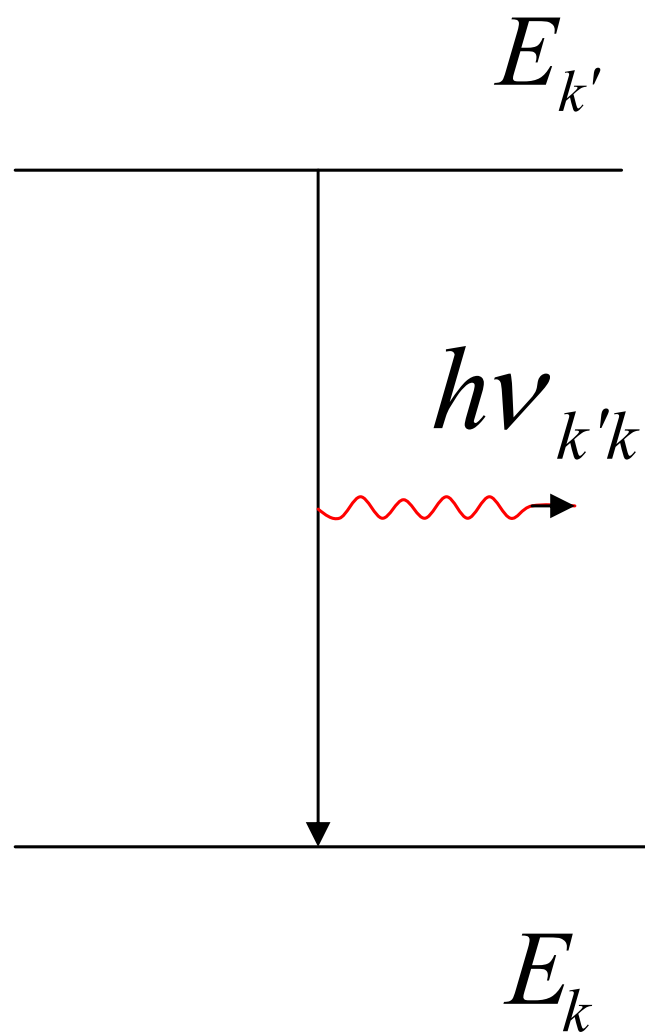
$$P_{i \rightarrow f}^{\text{Max}} = \frac{t^2}{\hbar^2} |\langle f | \hat{v}^\dagger | i \rangle|^2_{\omega_{fi} = \omega}$$

微扰作用时间非常长时，跃迁速率为

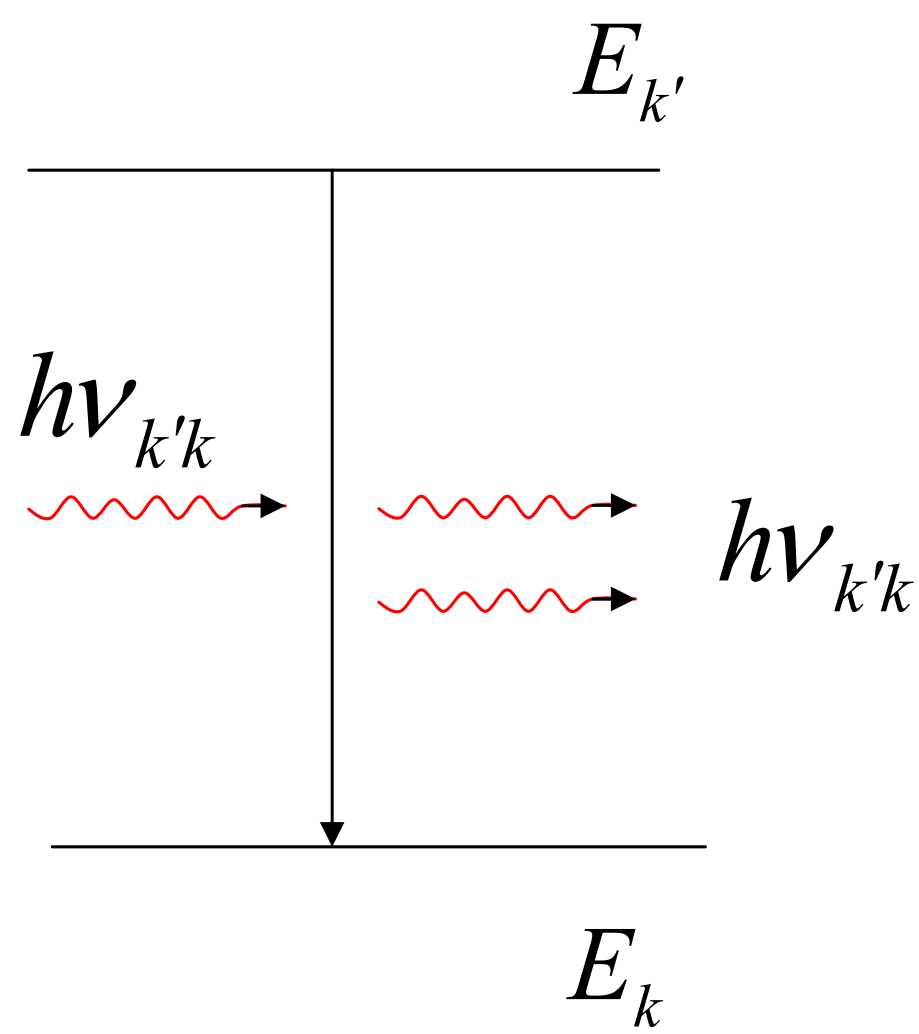
$$W_{i \rightarrow f}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{v} | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) \\ + \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{v}^\dagger | i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$



(a) 吸收



(b) 自发辐射



(c) 受激辐射

课程内容小结

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) |\psi(t)\rangle \quad |\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle$$

1) 含时微扰

$$i\hbar \dot{C}_m(t) = \sum_n V_{mn} e^{i\omega_{mn}t} C_n(t)$$

2) 相互作用绘景

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi(t)\rangle_I$$

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} |\psi(t)\rangle_S$$

3) Dyson Series

$$\hat{V}_I(t) = e^{i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}} \hat{V}(t) e^{-i \frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}}$$

4) 跃迁速率

(单位时间内跃迁几率)

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{dP_{i \rightarrow f}(t)}{dt}$$

5) 常微扰

(费米黄金规则)

$$W_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{f \neq i} |V_{fi}|^2 \rho(E_i)$$

6) 周期微扰