第 A 章 希尔伯特空间的张量积

A.1 两体系统的希尔伯特空间

两个无自旋可分辨粒子所构成的量子体系的波函数 $\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ 依赖于两个粒子的坐标位置 $\vec{r}_1$ 和 $\vec{r}_2$。如果两粒子之间无相互作用，那么波函数可以分解如下

$$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)=\phi(\vec{r}_1)\chi(\vec{r}_2), \tag{A.1.1}$$

或以狄拉克符号记作为

$$\left|\psi\right\rangle=\left|\phi\right\rangle\otimes\left|\chi\right\rangle. \tag{A.1.2}$$

这里 $\left|\psi\right\rangle$ 是两粒子系统的希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 中的一个矢量，$\left|\phi\right\rangle$ 是第一个粒子的希尔伯特空间 $\mathcal{H}_1$ 中的矢量，而 $\left|\chi\right\rangle$ 是第二个粒子的希尔伯特空间 $\mathcal{H}_2$ 中的矢量。$\left|\phi\right\rangle\otimes\left|\chi\right\rangle$ 乘积表示：第一个粒子处于 $\left|\phi\right\rangle$ 态而第二个粒子处于 $\left|\chi\right\rangle$ 态。这个乘积具有两个重要的性质：

(1) 如果 $\left|n\right\rangle_1$ 和 $\left|m\right\rangle_2$ 分别是希尔伯特空间 $\mathcal{H}_1$ 和 $\mathcal{H}_2$ 的基矢，那么乘积

$$\left|n\right\rangle_1\otimes\left|m\right\rangle_2,\quad n,m=1,2,3,\cdots \tag{A.1.3}$$

形成两粒子希尔伯特空间的正交基矢。

(2) 态矢量的乘积满足如下内积关系：

$$\left(\left\langle\phi'\right|\otimes\left|\chi'\right\rangle\right)\left(\left|\phi\right\rangle\otimes\left|\chi\right\rangle\right)=\left\langle\phi'\middle|\phi\right\rangle\left\langle\chi'\middle|\chi\right\rangle. \tag{A.1.4}$$

当一个希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 可以通过 $\mathcal{H}_1$ 和 $\mathcal{H}_2$ 乘积得到时，我们称 $\mathcal{H}$ 是 $\mathcal{H}_1$ 和 $\mathcal{H}_2$ 的张量积，记作为

$$\mathcal{H}=\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2. \tag{A.1.5}$$

注意：

- 数学上的张量积定义比较复杂而且不直观。在量子力学中，我们将 $\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ 视作为由 $\mathcal{H}_1$ 和 $\mathcal{H}_2$ 中的波函数的乘积就足够了。
- 上面的写法并不意味着 $\mathcal{H}$ 中的每个矢量都是矢量乘积。它表示：矢量乘积可以张满整个 $\mathcal{H}$ 希尔伯特空间，即 $\mathcal{H}$ 中的每个态矢量都可以表示为矢量乘积的和。

当量子系统存在两个或多个独立自由度时，其希尔伯特空间都存在张量积。我们可以将 $\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ 视作为 $\mathcal{H}$ 的因式分解。值得指出的是，一个给定的希尔伯特空间可以有

多种分解形式。例如，两体波函数 $\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ 也可以写作为质心和相对运动坐标的函数。令

$$\vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \qquad \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2. \tag{A.1.6}$$

显然，$\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ 的函数空间可以被 $\phi'(\vec{R})\chi'(\vec{r})$ 函数乘积所涵盖，因此有

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_{cm} \otimes \mathcal{H}_{rel}, \tag{A.1.7}$$

其中 $\mathcal{H}_{cm}$ 和 $\mathcal{H}_{rel}$ 分别表示质心坐标 $\vec{R}$ 和相对坐标 $\vec{r}$ 的函数空间。在处理中心势场问题时，$\mathcal{H}_{cm} \otimes \mathcal{H}_{rel}$ 更具有优势。

与波函数类似，算符也具有类似的乘积形式。如果 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是分别作用在 $\mathcal{H}_1$ 和 $\mathcal{H}_2$ 上的算符，我们可以定义作用在 $\mathcal{H}$ 上的算符乘积 $\hat{A} \otimes \hat{B}$ 如下：

$$\left(\hat{A} \otimes \hat{B}\right)\left(|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle\right) = \hat{A}|\phi\rangle \otimes \hat{B}|\chi\rangle. \tag{A.1.8}$$

两粒子体系的基本动力学变量都是 $\hat{A} \otimes \hat{I}$ 或 $\hat{I} \otimes \hat{B}$ 的形式。例如，第一个粒子的动量算符为

$$\hat{P}_1(\text{on } \mathcal{H}) = \hat{P}_1(\text{on } \mathcal{H}_1) \otimes \hat{I}(\text{on } \mathcal{H}_2). \tag{A.1.9}$$

这意味着，当 $\hat{P}_1$ 作用在两粒子态矢量 $|\phi\rangle \otimes |\chi\rangle$ 上时，$\hat{P}_1$ 算符将 $|\phi\rangle$ 替换成 $\hat{P}_1|\phi\rangle$，但不改变 $|\chi\rangle$。当考虑两粒子体系空间波函数 $\psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ 时，上面算符乘积的定义意味着

$$\hat{P}_1 = -i\hbar\nabla_1. \tag{A.1.10}$$

同理可得，第二个粒子的动量算符是

$$\hat{P}_2(\text{on } \mathcal{H}) = \hat{I}_1(\text{on } \mathcal{H}_1) \otimes \hat{P}_2(\text{on } \mathcal{H}_2). \tag{A.1.11}$$

因为这两个动量算符代表不同的自由度，因此算符 $\hat{P}_1 \otimes \hat{I}$ 和 $\hat{I} \otimes \hat{B}$ 对易。在实际计算中我们没有必要区别 $\hat{A} \otimes \hat{I}$ 和 $\hat{A}$，为方便起见，我们通常将两者都记作为 $\hat{A}$。同样，将 $\hat{I} \otimes \hat{B}$ 简记作为 $\hat{B}$，$\hat{A} \otimes \hat{B} = \left(\hat{A} \otimes \hat{I}\right) \otimes \left(\hat{I} \otimes \hat{B}\right)$ 简记作 $\hat{A}\hat{B}$。当然了，当需要强调算符乘积结构时，我们再将算符乘积写作为张量积的形式。

A.2 示例：三维自由粒子

在量子力学中每个厄米算符（或每个动力学自由度）都与一个希尔伯特空间相联系。自由粒子有 3 个动力学自由度，对应于三个动量算符 $\hat{P}_{x,y,z}$，其本征函数 $|p_i\rangle$ 满足

$$\hat{P}_i |p_i\rangle = p_i |p_i\rangle. \tag{A.2.1}$$

这些本征函数构成希尔伯特空间 $\mathcal{H}_x$ 的基矢。完整哈密顿算符的本征函数是由每个坐标方向的动量本征函数的张量积得到，

$$|p_x, p_y, p_z\rangle = |p_x\rangle \otimes |p_y\rangle \otimes |p_z\rangle. \tag{A.2.2}$$

在此张量积空间中，算符 $\hat{p}_x$ 形式为

$$\hat{P}_x \;\rightarrow\; \hat{P}_x \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{I}_z. \tag{A.2.3}$$

它作用在完整哈密顿算符的本征函数上可得

$$\begin{aligned}\left(\hat{P}_x \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{I}_z\right)\left(|p_x\rangle \otimes \left|p_y\right\rangle \otimes |p_z\rangle\right) &= \left(\hat{P}_x \otimes |p_x\rangle\right) \otimes \left(\hat{I}_y \otimes \left|p_y\right\rangle\right) \otimes \left(\hat{I}_z \otimes |p_z\rangle\right) \\ &= p_x |p_x\rangle \otimes \left|p_y\right\rangle \otimes |p_z\rangle. \end{aligned} \tag{A.2.4}$$

所以，三维自由粒子的哈密顿算符的完整形式是

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left[\left(\hat{P}_x \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{I}_z\right)^2 + \left(\hat{I}_x \otimes \hat{P}_y \otimes \hat{I}_z\right)^2 + \left(\hat{I}_x \otimes \hat{I}_y \otimes \hat{P}_z\right)^2\right]. \tag{A.2.5}$$

虽然这个哈密顿算符的形式是完整的，但毫无疑问，没人愿意将 $\hat{H}$ 写成上面的样子。

A.3 示例：有自旋粒子的希尔伯特空间

自旋为 s 的粒子的希尔伯特空间是

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{space}} \otimes \mathcal{H}_{\text{spin}}, \tag{A.3.1}$$

其中 $\mathcal{H}_{\text{space}}$ 是通常空间波函数的 $\mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$ 希尔伯特空间，而 $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ 是 $(2s+1)$ 为的自旋空间。通常用自旋算符的第 3 个分量 $\hat{S}_3$ 的本征函数 $|m\rangle$ 作为自旋空间的基矢，

$$\hat{S}_3 |m\rangle = m|m\rangle. \tag{A.3.2}$$

其中 m 取值为 $-s, -s+1, \cdots, s$。自旋空间中的任意函数都可以表示为

$$|\chi\rangle = \sum_{m=-s}^{s} \chi_m |m\rangle. \tag{A.3.3}$$

虽然自旋为 s 的粒子自旋空间仅有 $(2s+1)$ 个基矢，但粒子自旋却具有无穷多的自旋态。正如上边所示，可以具有无穷多的组合形式。

粒子的自旋态 $|\chi\rangle$ 可以用展开系数 $\{\chi_m\}$ 来完备描述。我们可以将这些系数组成一个 $(2s+1)$ 分量的旋量

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi_s \\ \ddots \\ \chi_{-s} \end{pmatrix}. \tag{A.3.4}$$

通常，人们忽视抽象态矢量 $|\chi\rangle$ 和旋量表示 χ 之间的区别，将两者视为相同。在这种情况下，作用在自旋空间 $\mathcal{H}_{\text{spin}}$ 上的算符可以视作为 $(2s+1)$ 为方矩阵。例如，我们可以将自旋 1/2 粒子的自旋算符记作为 $\vec{S} = \vec{\sigma}/2$，其中 $\sigma_{1,2,3}$ 是通常的泡利矩阵。

我们通常选取动量算符 $\hat{\vec{P}}$ 和 $\hat{S}_3$ 的本征矢来刻画有自旋粒子的希尔伯特空间，所以其基矢为

$$\left|\vec{p},m\right\rangle=\left|\vec{p}\right\rangle\otimes|m\rangle. \tag{A.3.5}$$

进一步考虑两个可分辨粒子体系，设其自旋分别为 s_1 和 s_2。此两粒子体系的希尔伯特空间是

$$\mathcal{H}=\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2, \tag{A.3.6}$$

其中

$$\mathcal{H}_{1,2}=\mathcal{H}_{1,2}^{\text{space}}\otimes\mathcal{H}_{1,2}^{\text{spin}}. \tag{A.3.7}$$

其空间波函数是 $\psi_{m_1m_2}(\vec{r}_1,\vec{r}_2)$ 形式，这里 $m_{1,2}$ 是粒子的自旋量子数。如同无自旋两粒子体系一样，我们可以用质心系坐标位置和相对位置来描述空间波函数 $\psi_{m_1,m_2}(\vec{R},\vec{r})$。显然，波函数乘积 $\phi(\vec{R})\chi_{m_1m_2}(\vec{r})$ 可以涵盖 $\psi_{m_1,m_2}(\vec{R},\vec{r})$，因此我们可以将 $\mathcal{H}$ 分解如下

$$\mathcal{H}=\mathcal{H}_{\text{cm}}\otimes\mathcal{H}_{\text{rel}}, \tag{A.3.8}$$

其中 $\mathcal{H}_{\text{cm}}$ 描述质心系位置，而 $\mathcal{H}_{\text{rel}}$ 描述两个粒子的相对位置和自旋态。

A.4 补充材料：张量积

在线性代数中，我们可以利用多个小矢量空间构造大矢量空间，这种方法叫做张量积，通常也被称作为 Kronecker 积或直积（direct prodcut）。考虑两个空间：n 维的空间 $\mathcal{V}$ 和 m 维的空间 $\mathcal{W}$，设两空间基矢分别为

$$\begin{aligned}\mathcal{V} &: \quad \{\vec{e}_1,\vec{e}_2,\cdots,\vec{e}_n\},\\ \mathcal{W} &: \quad \{\vec{f}_1,\vec{f}_2,\cdots,\vec{f}_m\}.\end{aligned} \tag{A.4.1}$$

两空间的张量积给出一个 $n\times m$ 维空间 $\mathcal{V}\otimes\mathcal{W}$，其基矢为

$$\vec{e}_i\otimes\vec{f}_j \quad (i=1,2,\ldots,n;j=1,2,\cdots,m). \tag{A.4.2}$$

注意：张量意味着基矢具有两个或多个指标。例如 $\mathcal{V}\otimes\mathcal{W}$ 空间中矢量 $\vec{v}\otimes\vec{w}$ 可以在基矢 $\vec{e}_i\otimes\vec{f}_j$ 上展开，

$$\vec{v}\otimes\vec{w}=\left(\sum_{i=1}^{n}v_i\vec{e}_i\right)\otimes\left(\sum_{j=1}^{m}w_j\vec{f}_j\right)=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}v_iw_j\left(\vec{e}_i\otimes\vec{f}_j\right), \tag{A.4.3}$$

其中 v_iw_j 是展开系数。

例子：取 $n=2$ 和 $m=3$，张量积空间为 $2\times3=6$ 维，基矢为

$$\vec{e}_1=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix};\vec{e}_2=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix};\vec{f}_1=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix};\vec{f}_2=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix};\vec{f}_3=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}. \tag{A.4.4}$$

两向量空间直乘后的基矢为

$$\vec{e}_1\otimes\vec{f}_1=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\—\\0\\0\\0\end{pmatrix},\quad \vec{e}_1\otimes\vec{f}_2=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\—\\0\\0\\0\end{pmatrix},\quad \vec{e}_1\otimes\vec{f}_3=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\—\\0\\0\\0\end{pmatrix},$$

$$\vec{e}_2\otimes\vec{f}_1=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\—\\1\\0\\0\end{pmatrix},\quad \vec{e}_2\otimes\vec{f}_2=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\—\\0\\1\\0\end{pmatrix},\quad \vec{e}_2\otimes\vec{f}_3=\begin{pmatrix}0\\0\\0\\—\\0\\0\\1\end{pmatrix}. \tag{A.4.5}$$

其中我们用“—”符号来分割两组基矢。考虑 $\mathcal{V}$ 空间中任意矢量 $\vec{v}$ 和 $\mathcal{W}$ 空间中任意矢量 $\vec{w}$，

$$\vec{v}=\begin{pmatrix}v_1\\v_2\end{pmatrix},\quad \vec{w}=\begin{pmatrix}w_1\\w_2\\w_3\end{pmatrix}, \tag{A.4.6}$$

它们在 $\mathcal{V}\otimes\mathcal{W}$ 直乘空间的基矢上表示为：

$$\vec{v}\otimes\vec{w}=\begin{pmatrix}v_1w_1\\v_1w_2\\v_1w_3\\—\\v_2w_1\\v_2w_2\\v_2w_3\end{pmatrix}. \tag{A.4.7}$$

在希尔伯特空间中，态矢量可用列向量表示，算符可用矩阵描述。数学上矩阵是向量空间到向量空间的线性映射。现在我们考虑算符 $\hat{A}$ 是将 $\mathcal{V}$ 空间的一个矢量映射到同一个空间 $\mathcal{V}$ 中，即 $A:\mathcal{V}\to\mathcal{V}$。例如 $\vec{v}\mapsto A\vec{v}$，或者更详细地写出如下：

$$\begin{pmatrix}v_1\\v_2\\\vdots\\v_n\end{pmatrix}_{\mathcal{V}}\mapsto\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}&\cdots&a_{1n}\\a_{21}&a_{22}&\cdots&\\\vdots&\vdots&&\vdots\\a_{n1}&a_{n2}&\cdots&a_{nn}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}v_1\\v_2\\\vdots\\v_n\end{pmatrix}_{\mathcal{V}}. \tag{A.4.8}$$

在张量积空间中，矩阵 A 还是作用在矢量 $\vec{v}$，同时并不改变矢量 $\vec{w}$，此时矩阵 A 为

$$\hat{A}_{n\times n}\otimes\hat{I}_{m\times m}=[A\otimes I]_{nm\times nm}. \tag{A.4.9}$$

例如，在 $\mathcal{V}$ 中矩阵 $A_{2\times 2}$ 和 $\mathcal{W}$ 空间中单位矩阵 $\hat{I}_{3\times 3}$ 是

$$A_{2\times 2}=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix},\quad \hat{I}_{3\times 3}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{A.4.10}$$

所以

$$A\otimes I=\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & a_{12} & 0 & 0 \\ 0 & a_{11} & 0 & 0 & a_{12} & 0 \\ 0 & 0 & a_{11} & 0 & 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 & 0 & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & a_{21} & 0 & 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{21} & 0 & 0 & a_{22} \end{pmatrix}. \tag{A.4.11}$$

用此矩阵作用在矢量 $\vec{v}\otimes\vec{w}$ 上得

$$\begin{aligned} (A\otimes I)(\vec{v}\otimes\vec{w}) &= \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & a_{12} & 0 & 0 \\ 0 & a_{11} & 0 & 0 & a_{12} & 0 \\ 0 & 0 & a_{11} & 0 & 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 & 0 & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & a_{21} & 0 & 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{21} & 0 & 0 & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1w_1 \\ v_1w_2 \\ v_1w_3 \\ v_2w_1 \\ v_2w_2 \\ v_2w_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (a_{11}v_1+a_{12}v_2)w_1 \\ (a_{11}v_1+a_{12}v_2)w_2 \\ (a_{11}v_1+a_{12}v_2)w_3 \\ (a_{21}v_1+a_{22}v_2)w_1 \\ (a_{21}v_1+a_{22}v_2)w_2 \\ (a_{21}v_1+a_{22}v_2)w_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11}v_1+a_{12}v_2 \\ a_{21}v_1+a_{22}v_2 \end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{pmatrix}=(A\vec{v})\otimes\vec{w}. \end{aligned} \tag{A.4.12}$$

显然，A 仅仅作用在 $\vec{v}\in\mathcal{V}$，并不改变 $\vec{w}\in\mathcal{W}$。

再考虑算符 $\hat{B}:\mathcal{W}\to\mathcal{W}$。算符 $\hat{B}$ 是以 $I_{n\times n}\otimes B_{m\times m}$ 形式作用在 $\mathcal{V}\otimes\mathcal{W}$ 直积空间：

$$I_{2\times2}\otimes B_{3\times3}=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & 0 & 0 & 0\\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & 0 & 0 & 0\\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & b_{11} & b_{12} & b_{13}\\ 0 & 0 & 0 & b_{21} & b_{22} & b_{23}\\ 0 & 0 & 0 & b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix} \tag{A.4.13}$$

将 $(I\otimes B)$ 作用在 $(\vec{v}\otimes\vec{W})$ 上得

$$\begin{aligned}(I\otimes B)(\vec{v}\otimes\vec{W}) &= \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & 0 & 0 & 0\\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & 0 & 0 & 0\\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & b_{11} & b_{12} & b_{13}\\ 0 & 0 & 0 & b_{21} & b_{22} & b_{23}\\ 0 & 0 & 0 & b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_1w_1\\ v_1w_2\\ v_1w_3\\ v_2w_1\\ v_2w_2\\ v_2w_3\end{pmatrix}\\ &= \begin{pmatrix} v_1(b_{11}w_1+b_{12}w_2+b_{13}w_3)\\ v_1(b_{21}w_1+b_{22}w_2+b_{23}w_3)\\ v_1(b_{31}w_1+b_{32}w_2+b_{33}w_3)\\ v_2(b_{11}w_1+b_{12}w_2+b_{13}w_3)\\ v_2(b_{21}w_1+b_{22}w_2+b_{23}w_3)\\ v_2(b_{31}w_1+b_{32}w_2+b_{33}w_3)\end{pmatrix}\\ &= \begin{pmatrix} v_1\\ v_2\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix} b_{11}w_1+b_{12}w_2+b_{13}w_3\\ b_{21}w_1+b_{22}w_2+b_{23}w_3\\ b_{31}w_1+b_{32}w_2+b_{33}w_3\end{pmatrix}=\vec{v}\otimes(B\vec{w}).\end{aligned} \tag{A.4.14}$$

小结：直乘向量空间中矩阵运算规则如下：

$$\begin{aligned} &\left(\hat{A}\otimes\hat{I}\right)\left(\hat{A}_2\otimes\hat{I}\right)=\left(\hat{A}_1\hat{A}_2\right)\otimes I\\ &\left(\hat{I}\otimes\hat{B}_1\right)\left(\hat{I}\otimes\hat{B}_2\right)=\left(\hat{I}\otimes\hat{B}_1\hat{B}_2\right)\\ &\left(\hat{A}\otimes\hat{I}\right)\left(\hat{I}\otimes\hat{B}\right)=\left(\hat{I}\otimes\hat{B}\right)\left(\hat{A}\otimes\hat{I}\right)=\hat{A}\otimes\hat{B}\\ \\ &\left(\hat{A}\otimes\hat{I}\right)(\vec{v}\otimes\vec{w})=\left(\hat{A}\vec{v}\right)\otimes\vec{w}\\ &\left(\hat{I}\otimes\hat{B}\right)(\vec{v}\otimes\vec{w})=\vec{v}\otimes\left(\hat{B}\vec{w}\right)\\ &\left(\hat{A}\otimes\hat{B}\right)(\vec{v}\otimes\vec{w})=\left(\hat{A}\vec{v}\right)\otimes\left(\hat{B}\vec{w}\right).\end{aligned} \tag{A.4.15}$$

A.5 原子单位制

进入库伦场的薛定谔方程中的物理常数共有三个：$\hbar$，e，m_e，

$$\hat{H}\psi = E\psi = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{\partial}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]\psi - \frac{e^2}{r}\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi. \tag{A.5.1}$$

原子单位制令 $\hbar = e = m_e = 1$，这样可以大大简化理论计算。在计算完成后只需按照物理量的性质添加这三个常数的适当幂次组合来凑得正确量纲即可。通过量纲分析可得

$$\frac{[\hbar]^2}{[m_e][r]^2} = \frac{[e]^2}{[r]} = \frac{[\hbar]}{[t]}, \tag{A.5.2}$$

所以

$$\begin{aligned}
\text{质量特征单位} &\ :\ [m_e] \\
\text{长度特征单位} &\ :\ [r] = \frac{[\hbar]^2}{[m_e][e]^2} \\
\text{时间特征单位} &\ :\ [t] = \frac{[h]^3}{[m_e][e]^4}
\end{aligned} \tag{A.5.3}$$

取自然单位制后，按照所计算的物理量性质，我们需要补上如下的量纲常数组合：

$$\begin{aligned}
\text{计算长度：} &\quad a_B = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \\
\text{计算时间：} &\quad \frac{\hbar^3}{m_e e^4} \\
\text{计算速度：} &\quad \frac{e^2}{\hbar} \\
\text{计算动量：} &\quad \frac{m_e e^2}{\hbar} \\
\text{计算能量：} &\quad \frac{m_e e^4}{\hbar^2}
\end{aligned} \tag{A.5.4}$$