量子力学

第一卷

〔法〕A. 梅西亚 著

科学出版社

O-70/03

内 容 简 介

本书是一本量子力学方面的权威著作.全书分为两卷,共有二十一章,叙述详细全面,物理概念清楚,每章后附有习题及有关参考资料,适于大学物理系高年级学生、研究生阅读,也可供教师与科研人员参考.

A. Messiah

MÉCANIQUE QUANTIQUE I

Dunod, Paris (1973)

量 子 力 学

第 一 卷

〔法〕A. 梅西亚 著

苏汝铿 汤家镛 译

责任编辑 张邦固

科学出版社出版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1986年9月第一版 开本:787×1092 1/32

1986年9月第一次印刷 印张:16 7/8

印数:0001—4,700 字数:381,000

统一书号:13031·3284

本社书号:4415·13—3

定价: 3.95 元

[illegible]

本 书 章 目

第 一 卷

第一部分 公式体系及其解释

第一章 量子论的起源
第二章 物质波与薛定谔方程
第三章 一维量子化体系
第四章 统计解释与测不准关系
第五章 波动力学的发展及其解释
第六章 经典近似与 WKB 方法
第七章 量子论的一般形式(A) 数学框架
第八章 量子论的一般形式(B) 物理内容

第二部分 简单体系

第九章 分离变量 中心势
第十章 散射问题 相移
第十一章 库仑相互作用
第十二章 谐振子
附录 A 分布 δ 函数 傅里叶变换
附录 B 特殊函数及有关公式

第 二 卷

第三部分 对称性和不变性

第十三章 量子力学中的角动量
第十四章 全同粒子体系 泡利不相容原理
第十五章 不变性和守恒定律 时间反演

第四部分　近似方法

第十六章　定态微扰

第十七章　运动方程的近似解

第十八章　变分法及有关问题

第十九章　碰撞理论

第五部分　相对论量子力学基础

第二十章　狄拉克方程

第二十一章　场的量子化　辐射理论

附录 C　矢量相加系数和转动矩阵

附录 D　群论基本知识

序　　言

目前，如果对量子力学没有透彻了解，几乎无法认真地探讨物理学的任何一个分支．我希望，本书的陈述方式足够简练，可以为学生理解，同时仍然保持相当完整，可以作为正在工作的物理学家的参考书．

本书是1953年以来在萨克莱(Saclay)的核研究中心所教授的课程发展起来的．我同学生们以及同事们的许多讨论，大大地帮助我改进了本书的陈述方式．我曾把部分手稿送给一些人以征求看法，他们都友好地提出了评述意见；在这些人中间，我应提及 Edmond Bauer 先生和 Jean Ullmo 先生，他们对一些原理的陈述提出了有益的意见，使我感激不尽．我还要特别感激 Roger Balian 先生，他非常认真地审阅了大部分手稿，并且提出了许多改进建议．最后，我希望感谢那些好意地为我核对正文和各章计算、而且帮助我核对校样的学生们．

列在各章末的习题是这样选取的，因为它们不但有教育价值，而且指出了某些值得注意的性质．正因为如此，它们中有一些相对而言难度较大．

引用了几本著作或论文作为参考资料，目的是帮助读者更好地理解某些章节．要列出本书述及的各个课题的全部文献，当然是不可能的．要这样做，一整卷书也是不够的．

阿尔伯特·梅西亚

1985年10月

目　　录

第一部分　公式体系及其解释

第一章　量子论的起源…… 1

1.引言

I. 经典时代的终结 …… 2

2.经典理论物理学　3.对微观现象认识的进展和物理学中量子的出现

II. 光量子即光子 …… 9

4.光电效应　5.康普顿效应　6.光量子和干涉现象　7.结论

III. 物质系统的量子化 ……19

8.原子光谱和卢瑟福经典模型的困难　9.原子能级的量子化　10.其它量子化的例子　空间量子化

IV. 对应原理和旧量子论 ……25

11.经典微粒说的不足　12.对应原理　13.对应原理在里德伯常数计算中的应用　14.经典力学方程的拉格朗日形式和哈密顿形式　15.玻尔-索末菲量子化规则　16.旧量子论的成就和局限性　17.结论

第二章　物质波与薛定谔方程……44

1.历史概观和以后各章的总计划

I. 物质波……48

2.引言　3.自由波包　相速度和群速度　4.慢变场中的波包　5.原子能级的量子化　6.物质波的衍射　7.物质的粒子结构　8.波粒二象性的普遍性

II. 薛定谔方程 ……59

9.物质粒子数守恒定律　10.波动方程的必要性及加于这个方程的条件　11.算符概念　12.自由粒子的波动方程　13.标势中的粒子　14.电磁场中的带电粒子　15.由对应性构造薛定谔方程的普遍规则

III. 不含时间的薛定谔方程 …… 72

16.找稳定解　17.方程的一般性质　能谱的本质

第三章　一维量子化体系 …… 78

1.引言

I. 方形势 …… 79

2.一般评述　3.势阶梯　波的反射和透射　4.无限高势垒　5.无限深方势阱　分立谱　6.有限方势阱的研究　共振　7.方势垒的贯穿　"隧道"效应

II. 一维薛定谔方程的一般性质 …… 101

8.朗斯基式的性质　9.解的渐近行为　10.本征值谱的性质　11.非束缚态　波的反射和透射　12.束缚态的节点数　13.正交关系　14.关于字称的注记

第四章　波粒二象性的统计解释和测不准关系 …… 119

1.引言

I. 波动力学中波函数的统计解释 …… 120

2.粒子位置测量结果的几率和动量测量结果的几率　3.模方的时间守恒　4.流的概念　5. r 函数的平均值或 p 函数的平均值　6.多粒子体系的推广

II. 海森伯测不准关系 …… 134

7.量子化粒子的位置-动量测不准关系　8.位置-动量测不准关系的精确陈述　9.推广共轭变量间的测不准关系　10.时间-能量测不准关系　11.光子的测不准关系

III. 测不准关系和测量过程 …… 144

12.在测量操作期间不可控制的扰动　13.位置测量　14.动量测量

IV. 在量子理论中现象的描述　并协性和因果性 … 154
15.统计解释引起的问题　16.微观现象的描述和并协性　17.并协变量　相容变量　18.波粒二象性和并协性　19.并协性和因果性
第五章　波动力学的发展及其解释 …… 167
1.引言
I. 厄密算符和物理量 …… 168
2.波函数空间　3.平均值定义　4.不存在涨落和本征值问题
II. 分立谱的研究 …… 176
5.厄密算符的本征值和本征函数　6.波函数按正交归一本征函数的级数展开　7.和一个算符相联系的量的测量结果的统计分布
III. 一般情况下测量的统计 …… 184
8.连续谱的困难狄拉克 δ 函数的引入　9.一般情况下本征函数的级数展式　闭合关系　10.一般情况下测量结果的统计分布　11.处理连续谱的其它方式　12.注释和例子
IV. 波函数的确定 …… 201
13.测量过程和波包的"过滤"　理想测量　14.对易的观测算符和相容变量　15.对易观测算符的完备系　16.纯态和混合
V. 对易子代数和它的应用 …… 211
17.对易子代数和基本对易子的性质　18.角动量的对易关系　19.统计分布的时间依赖关系　运动积分　20.运动积分的例子　能量　宇称
第六章　经典近似与 WKB 方法 …… 219
I. 波动力学和经典近似 …… 219
1.一般评述　2.厄任费斯脱定理　3.波包的运动和伸展　4.薛定谔方程的经典极限　5.用于库仑散

射　卢瑟福公式
II. WKB 方法…… 236
6.方法的原理　7.一维 WKB 解　8.WKB 近似成立的条件　9.转折点和联接公式　10.势垒贯穿　11.势阱的能级
第七章　量子论的一般形式(A)　数学框架…… 249
1.叠加原理和动力学态的矢量表示
I. 矢量和算符…… 251
2.矢量空间　"刃"矢量　3.对偶空间　"彐"矢量　4.标积　5.线性算符　6.两个矢量空间的张量积
II. 厄密算符　投影算符和观测算符 …… 261
7.伴算符和共轭关系　8.厄密(或自伴)算符　正定厄密算符幺正算符　9.本征值问题和观测算符　10.投影子(投影算符)　11.投影子代数　12.具有完全分立谱的观测算符　13.一般情况下的观测算符　广义的闭合关系　14.观测算符的函数　15.与观测算符对易的算符　对易观测算符
III. 表象理论…… 282
16.关于有限矩阵的一般评述　17.方阵　18.扩展到无限矩阵　19.矢量和算符的矩阵表象　20.矩阵变换　21.表象的代换　22.算符和矢量的幺正变换
第八章　一般形式(B)　物理现象的描述…… 303
1.引言
I. 动力学态和物理量…… 305
2.几率的定义　关于测量的假设　3.量子化体系的观测算符和它们的对易关系　4.海森伯测不准关系　5.动力学态的定义以及空间$\mathscr{E}$的建造　6.具有经典模拟的一维量子体系　7.由较简单空间的张量积来建造体系的$\mathscr{E}$空间
II. 运动方程 …… 319

8.演变算符和薛定谔方程　9.薛定谔“表象”　10.海森伯“表象”　11.海森伯“表象”和对应原理　12.运动常数　13.平均值的运动方程 时间-能量测不准关系　14.中间“表象”

III. 理论的各种表象 …… 333

15.表象的定义　16.波动力学　17.动量表象（{p}表象）　18.一个例子　自由波包的运动　19.其它表象　能量在其中为对角的表象

IV. 量子统计 …… 342

20.不完全已知的体系和统计混合　21.密度算符　22.统计混合在时间上的演变　23.密度算符的特征性质　24.纯态　25.经典统计和量子统计

第二部分　简单体系

第九章　用分离变量法求解薛定谔方程　中心势 …… 353

1.引言

I. 在中心势中的粒子　一般处理 …… 354

2.哈密顿量在球极坐标中的表示式　3.角度变数的分离　球谐函数　4.径向方程　5.径向方程的本征解　谱的性质　6.结论

II. 中心方阱势　自由粒子 …… 365

7.球贝塞耳函数　8.自由粒子　平面波和自由球面波　9.平面波用球谐函数展开　10.球方阱的研究

III. 两体问题　质心运动的分离 …… 372

11.在经典力学中质心运动的分离　12.量子化的两粒子体系的质心运动的分离　13.扩展到多于两个粒子的体系

第十章　散射问题　中心势和相移方法 …… 381

1.引言

I. 截面和散射振幅 …… 381

2.截面的定义　3.稳定的散射波　4.用一束波包来表示散射现象　5.波包被一个势散射　6.截面的计算　7.两个粒子的碰撞　实验室系和质心系

II. 被一中心势散射　相移 …… 398

8.分解为分波　相移方法　9.碰撞的半经典表示　碰撞参数

III. 有限程的势 …… 403

10.相移同对数微商之间的关系　11.相移在低能区（$k\to\infty$）的行为　12.较高阶的分波　级数的收敛（$l\to\infty$）　13.被一个硬球散射

IV. 散射共振 …… 410

14.被一个深方阱散射　15.散射共振的研究　亚稳态　16.亚稳态寿命的观测

V. 各种公式和性质 …… 419

17.相移的积分表示　18.对势的依赖性　相移的正负号　19.玻恩近似　20.有限程理论　贝推公式

第十一章　库仑相互作用 …… 427

1.引言

I. 氢原子 …… 428

2.氢原子的薛定谔方程　3.基态结合能的数量级　4.薛定谔方程在球坐标中的解　5.能谱　简并性　6.束缚态的本征函数

II. 库仑散射 …… 437

7.库仑散射波　8.卢瑟福公式　9.分解为分波　10.波 ψ_c 的球谐函数展开式　11.用一短程相互作用来修正库仑势

第十二章　谐振子 …… 450

1.引言

I. 哈密顿量的本征态和本征矢 …… 451

2.本征值问题　3.算符 a, $a^\dagger$ 和 N 的引进　4.N 的谱和

基 5.{N}表象 6.产生算符和消灭算符 7.{Q}表象．厄密多项式
II. 应用和各种性质 …… 460
8.本征函数 $u_n(Q)$ 的生成函数 9.海森伯方程的积分 10.经典和量子化的振子 11.极小波包的运动和经典极限 12.处于热力学平衡的谐振子
III. 多维各向同性谐振子 …… 472
13. P 维各向同性振子的一般处理 14.两维各向同性振子 15.三维各向同性振子
附录 A 分布 δ"函数"和傅里叶变换…… 484
附录 B 特殊函数和有关公式…… 503

第一部分　公式体系及其解释

第一章　量子论的起源

1. 引言

直到二十世纪初，物理学家普遍信奉的仍然是经典学说．根据这个学说，他们把一定数目的物理量或者说动力学变量赋予他们想要描述其演变的物理系统．而且，每一个这样的物理量在任一时刻都有一个完全确定的数值．一旦指明了这样一组数值，物理系统在该时刻的动力学状态便被确定．人们还认为，一旦知道了物理系统在某一初始时刻的状态，那么，该系统随时间的演变就能完全确定．这一条基本公理在数学上被表示得更为严格，即这些动力学变量作为时间的函数满足一组一阶微分方程．因此，经典理论物理学的工作程序就是先列举出所研究系统的动力学变量，然后再找出能预言该系统演变的运动方程，这种预言要与实验观测相一致．

从牛顿的理性力学*(Rational Mechanics)的建立直到十九世纪末，这个经典工作程序都运用得非常成功．每一项新的发现，或者是通过引入新的变量和新的方程，或者是通过修改老的方程，都在理论方面找到了自己的归宿，从而使新观测到的事实得以纳入原来的总框架．在这一时期，没有任何实验事实，也没有任何发现引起人们对经典程序的可靠性产生怀疑．相反，经典物理学一直在朝着更加简单和更加统一的方向不

* 指牛顿力学的理论体系．——译者注

8710036

断取得进展．这种情况一直延续到1900年左右．后来，随着我们对微观尺度[1]的现象了解得更精确，经典物理学遇到了越来越多的困难和矛盾．人们不久就意识到，原子和亚原子尺度的现象无法纳入经典学说的框架，它们必须依靠一些全新的原理才能得到解释．这些新原理是在经过千辛万苦的摸索之后才逐步发现的．只是到了1925年前后，随着量子力学的建立，我们才有了一个协调一致的关于微观现象的理论．这个理论的起源，就是本章要讨论的内容．

本章在对经典理论物理学的全貌作过概括介绍之后，将接着讨论那些能说明放弃经典概念的必要性的主要现象．我们假设读者是熟悉这些现象的[2]，所以我们只打算提一些它们的要点，着重强调这些现象与经典物理学之间存在的矛盾．本章结尾部分则专门用来扼要介绍为解释这些现象所作的那些最初尝试，即所谓旧量子论．

I. 经典时代的终结

2. 经典理论物理学

在经典时代结束以前，物理学的各个不同分支已经并合成一个协调一致的总的理论结构，这个结构的一些要点如下．人们在宇宙中已分清有两类客体，即**物质**和**辐射**．物质由遵从理论力学牛顿定律的完全可以定域的微粒构成，而每一个

---

1) 有必要对本书中常要用到的“微观”和“宏观”两个词下一个定义．我们把“微观”尺度定义为原子或亚原子现象的尺度，所涉及的长度最多只有几埃(1埃$=10^{-8}$厘米)数量级．“宏观”尺度则是用肉眼或普通显微镜能观察到的现象的尺度，这里最佳分辨率是1微米(10^{-4}厘米)．

2) 参见论述原子物理学的著作，如 M. Born, *Atomic Physics*, 6th. ed. (Blackie, Glasgow, 1857)。在这些书中可以找到关于这些现象的详细讨论．

微粒在任一时刻的状态则由它的位置和速度(或动量)总共六个动力学变量确定.辐射遵从的是麦克斯韦电磁定律,它的动力学变量是空间中每一点电场和磁场的分量，有无穷多个.与物质不同，辐射不能被分割成可以在空间定域而且在其时间演变过程中可以保持这种定域特性的微粒．相反，辐射表现出具有类似波动的特性，特别在大家熟知的干涉和衍射现象中,这种波动特性尤为明显.

物质的微粒说在整个十九世纪不断发展．起初，这种理论只用来处理天体和具有宏观尺度的固体的力学,随后,就越来越显示出,它也是制约微观尺度物质的演变的基本理论,乃至化学家们提出的原子假说也为它所证实．由于不可能把分子孤立出来，单独研究它们之间的相互作用而直接验证原子假说，人们便通过由组成物体的分子的运动规律可以推导出物体的宏观性质这件事来间接地证实它．在数学上，这样处理的是一个非常复杂的问题．根据这个假说,事实上,宏观量是作为一个具有极大数目自由度[1] 的系统的某些动力学变量的平均值而出现的．准确求解这样一个系统的演变方程是毫无希望的，人们只能求助于统计的研究方法．于是一门新学科,统计力学,便应运而生并发展起来．统计力学的成就，特别是在气体研究方面（气体分子运动论）和热力学研究方面(统计热力学)所取得的成就,使我们能够定性地,而且在几率计算所规定的限度内还能定量地证实物质微粒说的基础.[2]

与此同时，**辐射的波动说**也牢固地建立起来了．十九世

---

1) 我们知道,每摩尔的分子数目为 $N = 6.02 \times 10^{23}$ (阿伏伽德罗数).这个N值是洛喜密脱 (1895) 首先根据全体分子运动论严格确定的.

2) 必须指出，统计力学的所有推理都是以一种统计性质假说即分子的混沌性假说为基础的，只要不放弃统计方法本身，就注定无法摆脱这个假说.虽则这个假说从直觉看似乎是正确的，但它的严格论证（各态历经定理）却非常微妙,而且仍然存在着争议.

纪上半叶，在光学领域中，由于在波的传播问题的处理方面取得了决定性进展(费涅耳)，可以探究波动假说派生出来的所有结论，由来已久的关于光的波动性和微粒性的争论终于暂告结束．所有已知的光学现象，包括几何光学在内，全都可以建立在波动学说的基础之上了．在这期间，电和磁的现象的研究也迅速发展． 1855 年麦克斯韦建立起基本的电磁方程组，是在这方面迈出的决定性的一步．基于这些方程，他预言了电磁波的存在［这个预言最后为无线电波的发现(赫兹)所证实］，并把光波当作一种特定类型的电磁波而完成了光学和电学的统一．

到了十九世纪末，经典方案所取得的成就给人印象极为深刻．所有已知的物理现象似乎都能在一个普遍的物质和辐射的理论中找到它们的解释；倘若遇到无法解释的情况，人们也有理由把失败全都归咎于求解这些问题时出现的数学困难，而不去怪罪基本方程的形式．经典理论的一个引人注目的特点，是它那高度的统一性．把科学的不同分支统一起来一直是物理学家们的迫切愿望，而他们在这方面确实也取得了丰硕成果．事实上，那个时代的物理学家赋予经典理论的统一性已超过了它实际具有的统一性．的确，波的传播并非是电磁学特有的现象．人们研究振动，首先研究的是物质的振动(振动弦，液面波，等等)，而且是在光的波动性之前早就发现了声学现象的波动性．再者，物质内存在着波，这与微粒说也决不矛盾，人们在这里处理的不过是一种不难从包括合适的力的定律在内的某些微观定律导出的宏观现象． 类似地，经典物理学家们也赋予电磁波以一种承载结构，一种他们称之为“以太”的物质流体，尽管它的结构和性质还有待具体化．于是，物质被看成一种由牛顿理性力学原理所制约的基本实体，这种实体遵从一些力的定律，以致在适当条件下能呈现各

种波动现象；而电磁振动就是这些现象之一.

这种观念后来已完全抛弃，但在我们谈及的那个时期，它却促使人们去做了一系列实验. 这些实验未能揭示出能说明以太本性的任何事实，有一个实验反而导致了经典物理学的一场意义深远的危机. 这就是著名的迈克耳孙-莫雷实验(1887). 设计这个实验是要找出光相对于地球的传播速度随传播方向的变化，以便揭示地球相对于以太的运动. 这个实验的否定结果是人所共知的. 经过若干次多少有点牵强附会的解释尝试之后，1905 年，爱因斯坦才对时空概念作了批判性的分析，要求摒弃绝对时间概念和牛顿力学中的某些公理，终于在狭义相对论的框架内明确地解释了这一表面上的佯谬. 事实上，牛顿力学不过是相对论力学的一种近似，它只在粒子的速度与光速 c 相比可以忽略的极限场合才能成立. 我们这里不打算详细阐述相对论原理，在本书末我们学习相对论量子力学时，还有机会来讨论它. 这里我们只指出非常重要的一点，那就是，这个原理绝没有让我们对前面介绍的经典学说和经典程序产生怀疑.

3. 对微观现象认识的进展和物理学中量子的出现

在跨入本世纪的那些年代，实验工作者们朝着两个紧密相关的方向在努力工作：一是对物质的微观结构作精密分析；二是去测定物质微粒间的相互作用以及它们与电磁场之间的相互作用.

第一个涉及物质结构的事实是通过研究稀薄气体中放电发出的射线——阴极射线和极隧射线——而得到的，人们把这些射线正确地解释为运动得非常快的带电粒子束. 由此，人们发现了**电子**(J. J. 汤姆孙，1897)，即阴极射线中的那种粒子. 人们还用实验确定了有电磁场存在时电子的行为，从

而建立起关于电子和电磁波之间相互作用的一整套理论（洛伦兹电子论）[1]。

渐渐地，长时期来只作为工作中行之有效的一个工具的关于存在着原子和分子的假说，终于变成了公认的现实。对布朗运动的研究向人们提供了最令人信服的证据。布朗运动是悬浮在液体或气体中的细小粒子的一种无序运动，它是由周围分子对这些粒子的频繁碰撞引起的。在一定意义上说，布朗运动是分子扰动的一种大尺度的模拟，我们可以把它同分子本身运动的统计规律定量地联系起来。皮兰（Perrin，1908）通过系统的测量证实了这一点，同时还提供了几种彼此相互吻合的用来精确测定阿伏伽德罗数的方法[2]。在取得这些决定性进展之后，物理学家们不再怀疑原子和亚原子粒子的存在了。而且，就是在我们这个世纪，有越来越多的实验技术眼见得完善起来。正是依靠这些技术（1910 年密立根对基本电荷所作的测量，1912 年用威耳孙云室对荷电粒子径迹所作的首次观测；1913 年第一个盖革计数器），我们才能观测到个别微观现象，或者说，能够一个一个地去数出微观粒子。这些"直接"测量技术仍在不断发展，差不多已成为今天装备探索微观现象实验人员的全部武器。

然而，随着原子核性质的头一个表现形式——放射性——的发现（1896），物理学揭开了新的篇章。这一发现本身就非常重要，它还使物理学家手中掌握了一种研究原子结构的有力手段，即高速运动的氦核——α 辐射。卢瑟福（1911）正是用 α 射线来照射各种不同的靶，系统地研究了 α 粒子在原子上的散射，从而成功地提出了第一个近代的原子图象。

---

1) 见 L. Rosenfeld, *Theory of Electrons* (North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1951).

2) 见 J. Perrin, *Les Atomes* (Presses Universitaires, Paris, 1948).

卢瑟福原子由一个线度很小（10^{-13}—10^{-12} 厘米）的中心核和被核吸引的一定数目的 Z 个绕核原子组成．原子的几乎所有质量都集中在核上．原子核带正电荷 Ze，恰好与核外电子所带的总电荷 $-Ze$ 相抵销，因此形成的是一个呈电中性的客体．卢瑟福原子类似一个微型太阳系，但其中由电力代替了万有引力．在电力（即核与电子之间的库仑吸引力和电子之间的库仑斥力）的作用下，电子绕原子核沿稳定的轨道运动，轨道的范围就是原子的线度，即 10^{-8} 厘米数量级．

随着我们对原子现象认识的增进，物质的微粒性似乎已被证实．与此同时，已知的电磁波谱也已接近完全，并随着X射线的发现（伦琴，1895）而扩展到短波．这种X射线的波动性是由晶格衍射实验（冯·劳厄，1912）确立的．为完整起见，我们还应该提到由放射性物体发生的 γ 射线，不过它的电磁性质很久以后才得到确认．图 1.1 给出的是已确认的电磁辐射波长的尺度．在电磁辐射的范围不断扩大的同时，人们对辐射的谱分析也变得越来越精确，从而在物质的光发射以及对光的吸收和散射方面，也就是在微观尺度下辐射与物质相互作用方面，积累起大量知识．上面提到的洛伦兹电子论，即关于带电粒子与电磁场相互作用的一种理论，能对所有这些现象作出明确的预言．正是在把这个理论的预言同这些实验结果作比较时，发现了经典理论同实验之间的第一批分歧．

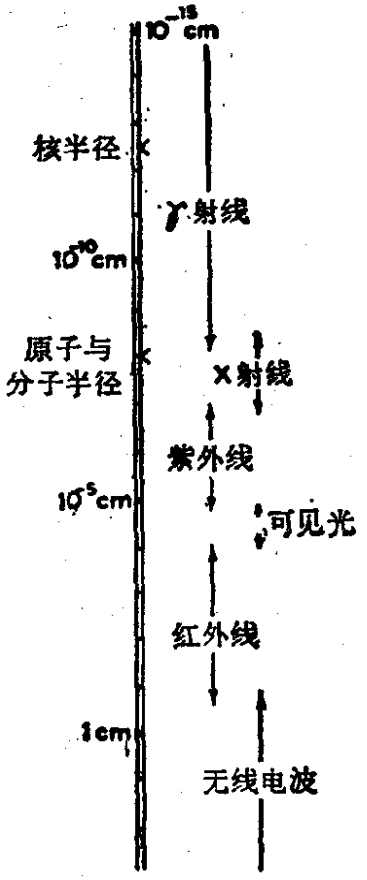

图 1.1 电磁辐射的波长尺度

这第一个困难是在研究同物质处于热力学平衡状态的电磁辐射的谱分布时出现的。最典型的例子是**黑体**的辐射。黑体被定义为能全部吸收掉它所接收的辐射的物体。根据非常普遍的热力学推理可以论证，一个黑体发出的辐射只是温度的函数。因此，黑体发出的辐射的强度的谱分布必然是一个可以用统计热力学方法从物质与辐射的相互作用的普遍规律推导出来的基本表达式。可是，由经典理论导出的这个表达式与实验完全不符。1900 年，普朗克毅然抛弃物质与辐射间相互作用的经典规律，则成功地消除了这个困难[1]。他假定物质与辐射间的能量交换不是以连续方式进行的，而是以一些分立的，不可再分的能量数量即**能量子**来进行的。他还进一步指出，能量子必然与辐射的频率 ν 成正比：

$$\varepsilon_\nu = h\nu.$$

这样，适当调整式中的比例常数，他终于得到了一个同实验分布相一致的谱表达式。从此以后，上式中的常数 h 就被人们称作**普朗克常数**。普朗克常数具有作用量（能量×时间或动量 × 长度）的量纲。以后，我们更常使用的是如下的常数：

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \times 10^{-27} \text{ 尔格} \cdot \text{秒}.$$

普朗克假说刚发表出来时，人们简直无法接受。物理学家几乎一致认为那不过是一种侥幸成功的数学把戏，总有一天，它一定能在经典学说的框架内得到解释。普朗克理论成功的本身不能当作是无可辩驳的证据，认定物质与辐射之间的能量交换在微观尺度上确实是以量子进行的，因为普朗克分布定律只是从这个假说出发用统计方法导出的一个宏观定律，它仅仅是一种间接验证。正如过去在长时期中由于未能

1）关于黑体辐射理论的详细情况，请见前面引用过的 M. Born 的著作。

在微观水平直接验证原子假说，人们对原子假说始终持怀疑态度一样，人们也有理由怀疑量子假说本身．然而，普朗克假说已为整个一组实验事实所证实．凭借这些实验事实，人们可以对一些元过程直接进行分析，从而直接揭示微观尺度下物理系统演变过程存在着不连续性；而在这种场合，经典理论的预言却是一种连续的演变．

II. 光量子即光子

人们最早获得的一批实验事实就迫使他们不得不对麦克斯韦-洛伦兹辐射理论作出带根本性的修正，并部分地回到旧的微粒理论．这主要指的是**光电效应**和**康普顿效应**．

4. 光电效应

1905 年，爱因斯坦发表了他的那篇关于光电效应的著名简报，朝着这个方向迈出了第一步．对于普朗克理论，当时一般的看法，是认为"凡事都表现为好象"辐射与黑体之间的能量交换是通过量子进行的，总想把这个特定的假说与波动理论调和起来．爱因斯坦则持相反的观点，而且比普朗克走得更远．他假定光辐射本身就是一束能量为 $h\nu$、速度为 c(＝真空中光速 $= 3 \times 10^{10}$ 厘米/秒) 的粒子，即光子．他随即证明，根据这个令人惊异的假说可以说明一些迄今尚未解释的现象，特别是光电效应．

顾名思义，光电效应是当真空中的碱金属受到紫外光照射时观察到的发射电子的现象．这时所产生的电流强度与照射到金属表面的辐射的强度成正比．另一方面，发射电子的速率却不依赖于辐射的强度，无论离光源多远，它只依赖于辐射的频率（勒纳，1902)；只有每秒发射的电子数目，才与辐射强

度成正比，即与到光源的距离的平方成反比.

爱因斯坦对这些观测现象的解释十分简单明瞭. 无论光自发射以后走过多少距离，它总是以能量为 $h\nu$ 的微粒形式出现. 当这些光子中有一个遇到一个电子时，它就被整个吸收，电子从而获得能量 $h\nu$. 电子离开金属，还必须做一定的功，其数量等于电子在金属中的结合能 W，所以观测到的电子总是具有完全确定的动能：

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W. \tag{1.1}$$

实验完全证实了这个定量理论. 同预期的一样，常数W是被照射金属的一个特征常数. 至于常数 h，它与黑体辐射表达式中所出现的常数 h 具有相同的数值.

鉴于微粒论获得了成功，人们还有必要考察一下经典的波动理论是否也能解释光电效应. 这并非是先人为主的异想天开.要知道，一个光波就携带有正比于它的强度的一定数量的能量，当它透入金属时，能够全部或部分地失去这些能量.这样的能量在金属中会逐渐积累，最后集中在某些电子上，使它们得以逃离金属. 人们还可以设想出一种有待于具体化的机制，让一个电子在得到数量上等于 $h\nu$ 的能量之前无法逃离金属. 这种解释与微粒理论的本质上不同之处在于，金属中的能量积累是连续的和循序渐进的. 因此，光电发射不应该是瞬时发生的，而是只有在金属获得了能量 $h\nu$ 之后才能有电子发射. 如果我们用足够细的金属颗粒来做实验，那么，就可以让从照射开始到出现电子发射之间相隔的延迟时间足够长，以致能从实验上加以测定.

正是为了这个目的，迈耶尔和革拉赫用金属粉末作了光电效应实验(1914). 已知辐射的强度和粉末颗粒的大小，他们得以算出一个金属颗粒为发射一个电子而吸收能量 $h\nu$ 所

需要的最短照射时间．在他们的实验条件下，这个时间大约是几秒钟．然而，每次做实验，他们都是在一开始用光照射，就立即观察到电子发射．由此必然得出结论，光的波动理论，至少就它的经典形式而言，对于说明光电效应完全无能为力．

5. 康普顿效应

康普顿效应是证实了光子论，而驳斥了波动论的又一个证据．它是在X射线被自由电子(或弱束缚电子)散射的实验中观测到的(康普顿，1924)．散射辐射的波长大于入射辐射的波长．二者之差 $\Delta\lambda$ 是入射辐射传播方向与所观测到的散射光方向之间夹角 θ 的一个函数，由如下康普顿公式决定：

$$\Delta\lambda = 2\frac{h}{mc}\sin^2\frac{\theta}{2}; \tag{1.2}$$

式中 m 是电子的静止质量[1]．值得注意的是，$\Delta\lambda$ 与入射光的波长无关．康普顿和德拜已经证明，康普顿效应是入射光中一个光子与被照射靶中一个电子之间的简单弹性碰撞．

为了便于说明这种微粒论的解释，我们先介绍几个从爱因斯坦假说直接推出的光子性质．光子具有速度 c，因而是零质量的粒子[2]．光子的动量 p 和能量 ε 由关系式

$$\varepsilon = pc \tag{1.3}$$

相联系．我们考虑一列平面单色光波：

$$\exp\left[2\pi i\left(\frac{\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{r}}{\lambda} - \nu t\right)\right];$$

式中 $\boldsymbol{u}$ 是传播方向上的单位矢量，λ 是波长，而 ν 是频率，且

---

1) 长度 $\hbar/mc$ 的大小在原子平均半径和原子核平均半径之间($\hbar/mc = 3.86\times10^{-11}$ 厘米)，在电子的量子理论中有一定作用，被称为康普顿波长．

2) 根据相对论原理，一个粒子的（静止）质量 m、能量 ε 和动量 p 三者由关系式 $\varepsilon^2 - p^2c^2 = m^2c^4$ 相联系，它的速度 $v = \partial\varepsilon/\partial p = pc^2/\varepsilon$．若 $v = c$，则 $\varepsilon = pc$，因而 $m = 0$．

有 $\lambda\nu = c$. 按照爱因斯坦假说，这列波表示的是光子能量为 $h\nu$ 的一束光子流. 这些光子的动量的方向自然是沿着 $\boldsymbol{u}$，而它的绝对值，按(1.3)式应等于

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}.$$

这个关系式是在第二章将要介绍的德布罗意关系的一个特殊情况. 引入平面波的角频率 $\omega = 2\pi\nu$ 和波矢 $\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\boldsymbol{u}$ 常常比较方便. 于是，上面两个关系式就可以改写为

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}. \tag{1.4}$$

康普顿微粒理论的关键，是要写出入射光子与电子发生碰撞时的总能量守恒方程和总动量守恒方程. 设 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{p}'$ 分别代表光子的初动量和末动量，$\boldsymbol{p}'$ 代表电子碰撞后的反冲动量(图1.2)，则写出两个守恒方程为

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}' + \boldsymbol{p}', \\ &mc^2 + pc = \sqrt{p'^2c^2 + m^2c^4} + p'c. \end{aligned} \tag{I}$$

根据这两个方程，一旦已知初始条件和散射光子的发射方向，碰撞就被完全确定. 考虑到关系式(1.4)，立即就能推出康普顿公式. 这样，我们就从理论上解释了这个公式(见习题1.1). 自从康普顿的首次工作以来，这个理论的所有别的预言也都被实验证实了. 反冲电子已经观测到了，而反冲电子

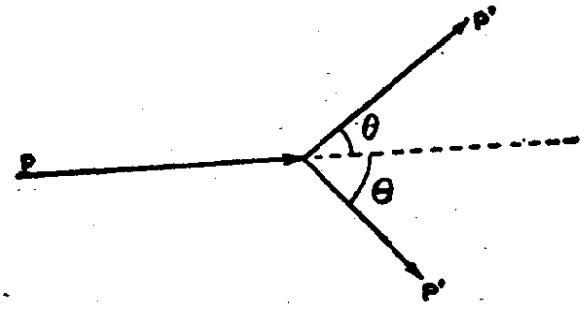

图 1.2 一个光子与一个静止电子的康普顿碰撞

的能量作为发射角Θ函数的变化规律也与从方程（I）推得的完全一致．人们还用实验证实，散射的光子和电子是同时发射的，而且发射角与Θ之间的关系同这个理论也一致．

我们可以把这些结果同经典理论的预言对照一下．按照麦克斯韦-洛伦兹理论的预言，入射的电磁能量应该是被每一个受照射的电子吸收一部分，然后再以相同频率辐射的形式重新发射出来．与被吸收辐射的动量不同，发射辐射的总动量为零．于是，在光的散射过程中伴随有从电磁辐射到受照射电子的动量（辐射压）的连续转移，电子因此会在入射波的传播方向上连续加速．在电子静止的参考系中，发射和吸收倒是具有相同的频率，然而电子一旦运动，由于多普勒效应，在实验室参考系中观测到的这两种频率则不相同．波长的移动$\Delta\lambda$取决于散射辐射的观测角θ．通过简单的计算可以得到

$$\Delta\lambda = 2\lambda \frac{P_{\mathrm{Cl.}}c}{E_{\mathrm{Cl.}} - P_{\mathrm{Cl.}}c} \sin^2 \frac{\theta}{2}, \qquad (1.5)$$

式中λ是入射波长，$P_{\mathrm{Cl.}}$是电子的动量（设电子沿传播方向运动），$E_{\mathrm{Cl.}} = \sqrt{m^2c^4 + P_{\mathrm{Cl.}}^2c^2}$是电子的能量．$\Delta\lambda$是一个随$P_{\mathrm{Cl.}}$增大的函数，而且在照射期间一直有规律地增大．

由此可见，经典预言与实验结果是不相符合的．康普顿效应经典理论的主要问题是，它预言辐射会向暴露在辐射下的**所有**电子**连续地**转移动量和能量，而实验观测到的效应则是向这些电子中的某些电子作**不连续**的、瞬时的转移．这里遇到的是我们在光电效应中同样类型的困难．事实上，这两种效应相互是有联系的：康普顿效应可以看作是紧接着有再发射的光吸收，而光电效应则只有光吸收．

想说明动量和能量向电子的不连续转移，我们就非得引入光量子不可．尽管如此，康普顿效应的经典公式(1.5)却与正确公式(1.2)十分相似，这表明经典理论一定也反映了真实

现象的某些特点. 对此,我们有必要作进一步的考察.

上面计算康普顿效应时曾假定开始时电子是静止的. 当然,即使电子的初速度不为零,这个理论仍然有效. 我们不难把方程(I)和康普顿公式推广到这种普遍情况. 为具体起见,我们假定电子平行于入射光波的方向运动,动量为 P,而能量为 $E=\sqrt{m^2c^4+P^2c^2}$,在这个特定场合我们有(习题 1.1)

$$\Delta\lambda=2\lambda\frac{(P+p)c}{E-P_c}\sin^2\frac{\theta}{2}. \tag{1.6}$$

注意,这个关于 $\Delta\lambda$ 的表达式与经典表达式(1.5)之间非常相似. 我们只要把后者分子中的动量 $P_{\mathrm{Cl.}}$ 换成 $P+p$(具有光子-电子碰撞后动量的数量级),把分母(在此表达式中为 $E_{\mathrm{Cl.}}-P_{\mathrm{Cl.}}c$)中的 $P_{\mathrm{Cl.}}$ 换成碰撞前的动量 P,就能得到前一个表达式. 然而,(1.6)式所反映的机制却与经典机制完全不同. 在持续照射作用下,每一个电子先得到第一次转移来的动量开始运动,接着再得到第二次、第三次转移来的动量,等

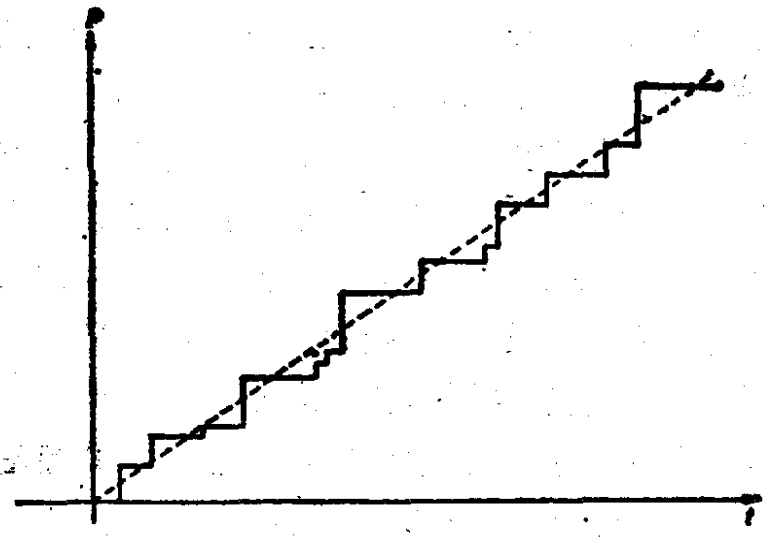

图 1.3 受单色光照射的一个电子,由于接连遭到康普顿碰撞,其动量 P 随时间的变化. 这是这个现象的一个非常粗略的图象,关于这个图象的局限性,将在第四章联系到测不准关系来讨论. 虚线代表经典理论预言的变化 $P_{\mathrm{Cl.}}(t)$.

等. 电子从每一次碰撞得到的转移动量多少不等，但大致是在等于入射光子动量 p 的一个平均值上下变动. 我们可以把这种由数量级为 p 的**不连续**量子所引起的动量变化和因此而导致的波长移动 $\Delta\lambda$ 的变化与经典理论所预言的**连续**变化比较一下(图 1.3).

只有在量子本身能视为无穷小而其数目能视为无穷多的场合，而且我们又只考虑次数非常多的相继碰撞的平均效果时，这样的比较才有意义. 平均说来，电子从每一次碰撞获得一个数量级为 p 的动量，而且在经过大量碰撞之后，这种动量的涨落会相互被抵销，所以最后的净效果实际上相当于电子每一次碰撞时正好获得一个平均动量. 因此，电子的动量 p 是阶跃式增加，而且沿着入射辐射的方向. 这些阶跃的大小与量子 $p = h\nu/c$ 有相同的数量级. 当量 p 可视为无穷小时，这种动量的增加就可以看成是连续的. 于是，在这些近似条件下，我们可以定义一个在时间进程中以连续方式增加的平均动量 $\langle \boldsymbol{P} \rangle$. 有一项仔细的实验研究(这里不作详细介绍) 表明，这个平均动量随时间的变化同经典理论的预言严格一致；换句话说，矢量 $\langle \boldsymbol{P} \rangle$ 与 $\boldsymbol{P}_{\mathrm{Cl.}}$ 始终相等. 此外，经典值 $\boldsymbol{P}_{\mathrm{Cl.}}$ 在相差不大于 p 的意义上每一时刻都等于 $\boldsymbol{P}$ 的平均值，所以经典理论预言的康普顿移动 [(1.5) 式] 在每一时刻都等于实际观测到的康普顿移动[(1.6)式]的平均值.

6. 光量子和干涉现象

如果说有一些事实表明经典波动理论在宏观尺度上是正确，那么在微观尺度上，我们则知道惟有光的微粒论才能够解释光电效应和康普顿效应这一类典型的吸收和散射现象. 不过我们还必须搞清楚，光子假说是否也能解释干涉和衍射这些本质上的波动现象.

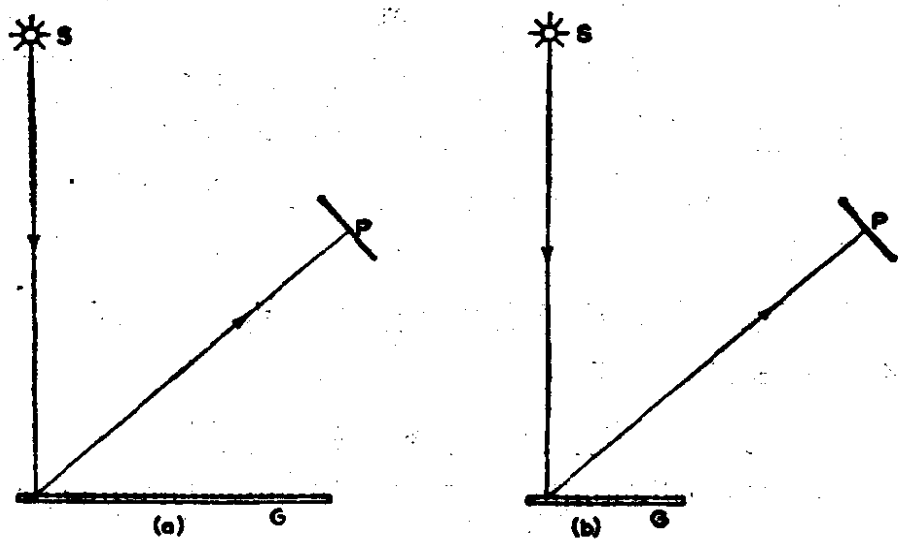

图 1.4　光被光栅的散射：S＝光源，G＝光栅，P＝感光底片．
在（b）的场合，G的右半边被遮住．

为确切起见，我们来考虑一束单色光被一个平行光栅散射的情形（图 1.4）．实验中有一个光屏安放在我们能方便地观测到干涉花样的地方．对这个现象作定量观测的方法很多，例如，可以用照相底片替代光屏，照射一定时间后把它洗印出来．这样得到的是负片，干涉花样的黑白是颠倒的．底片上每一小块的黑度同那里接收到的光量成正比．事实上，底片吸收光是以量子方式进行的．穿入底片中的每一个光子激发一个光敏微晶，后者在显影后表现为一个小黑斑[1]．这些小黑斑肉眼自然无法分辨，所以我们看到的实际上是一大片连续的黑区．黑区内黑度深浅不一，不同的黑度取决于光子击中点的密度．然而，如果用分辨率非常高的显微镜来观察，我们则能清楚地看到一个个受到光子撞击而产生的小黑斑．

1）这种描述已大加简化．实际上，只有光子的能量足够高（远紫外光或X射线）时，单个光子击中才能使微晶感光．即使如此，我们也只有在特殊实验条件（适当大小的微晶，足够厚的感光底片，等等）下才能比较有把握地断言底片接收到的每一个光子都激发了一个而且只激发了一个微晶．不考虑这些复杂情况，对这里给出的论证的本质图象不会有什么影响．

在通常实验条件下，光子接收到的光子数目大得惊人，小黑斑十分接近于连续分布，并形成波动理论所预言的干涉花样。

现在，仅根据实验观测结果我们就敢断言，凡是在纯粹微粒说框架内对干涉现象所作的解释都是错误的。首先，我们知道，光子是相互独立地行进的，它们之间的相互作用完全可以忽略。的确，如果减小光源的强度和增长照射时间，让照射到光栅上的光量保持不变，则干涉花样仍然不发生变化。换句话说，当我们让一定数目N(非常大)的光子打到光栅上时，不管这些光子是不是聚集成一团入射，它们的击中点在照相底片上的分布总是相同的。即使光的强度极其微弱，以致光子是"一个一个地落在光栅上"，情况仍然如此。如果我们只让**单个光子**落到光栅上，只要重复进行N次，仍然会得到同样的分布。

下面我们就来考察一个光子被光栅散射的问题。在实验条件下，这个系统(光子＋光栅)的初态无法准确知道，因而无法按照微粒图象确定出光子的独一无二的轨迹，从而也不能有把握地确定出散射后光子在底片上的独一无二的击中点。我们能够确定的只是许多可能的轨迹的一个统计分布和许多可能的击中点的一个统计分布。在实验中，人们看到的实际上就是光子击中点的这种统计分布，而这种统计分布，除了相差一个常数，恰好就是造成底片上干涉花样的光强度分布的规律。然而我们知道，光栅的分辨本领取决于刻线的数目(假定刻线为等间距)，刻线数目越大，干涉条纹就越拥挤。这样看来，如果去掉光栅的一半，干涉花样的样子就有可能发生显著变化。微粒说在这一点上却与实验明显不相符合。事实上，不管与构成光栅的粒子相作用的每一个光子的运动方程如何，只要光子的大小与光栅的大小不是同一数量级，由光栅的左半边所散射的光子的轨迹的分布总是与光栅的右半边存

在与(图 1.4a)否(图 1.4b)无关. 此外,若光源与感光底片相距足够远,则被左右两半光栅散射的光子的击中点的分布本质上总是相同的. 遮去光栅右半边后,只是底片上每一点接收到的光强度减小了,而干涉花样没有任何变化. 实验同上面所说的预言相矛盾,这使我们不得不认为整个光栅都参与了散射过程.

在涉及干涉和衍射的所有场合,光的微粒假说都遇到了同样一类困难(习题 1、2). 我们能成功地在检测仪器(光屏,感光底片,或其他更复杂的装置)上检测出到达的一个一个光子,却无法认为每一个光子都有一条精确的轨迹而不陷入矛盾之中. 根据经典学说,微粒是以一种作为时间的函数的连续方式在空间中行进的,然而这一切现在却不对了. 在光子通往检测仪器的路途中,一切事情都表明光仿佛象波那样传播,只是在被检测到的一瞬间,它才表现出自己的粒子性来.

7. 结论

根据研究物质和光在微观尺度上的相互作用的实验结果,我们可以引出好几点初步结论.

即使我们观测到的不连续性只能用光的微粒图象加以适当解释,然而抛弃波动概念也是不可思议的. 光以两种方式表现它自己:波和微粒;这两个方面中某一方面有时(与所考察的现象有关)会表现得更为突出. 关系式(1.4)能让我们从一种描述方式过渡到另一种描述方式. 如同讨论光栅散射实验时看到的那样,这两种描述方式由一种**统计解释**结合在一起:光子定域在某一给定点的几率等于用波动光学方法算出的光波在该点的强度. **这种波粒二象性的存在同经典学说是不相容的.** 若要想不与实验事实相矛盾,则无论把光看成是一束经典微粒流或者是经典波动的叠加都是行不通的.

面临着经典学说有待修正的前景，强调一下经典波动理论的一些结果仍然正确是特别重要的．首先，**动量守恒定律和能量守恒定律**仍然严格成立．此外，如同在讨论康普顿效应所看到的那样，经典理论正确地预言了在"宏观极限"下现象的平均演变，在这种宏观极限下，量子的不连续跃变可看成是无穷小。

III. 物质系统的量子化

8. 原子光谱和卢瑟福经典模型的困难

上一节中我们已经看到，物质和辐射相互作用机制中的不连续跃变的存在是怎样推翻了光的经典理论．但是这场动乱并不局限于光，它同样也动摇了物质的经典微粒说．在人们设法让原子光谱的事实与卢瑟福得到的原子结构的有关结论协调起来时，这一点就明朗化了[1]．

人们仔细研究物质的发射光谱和吸收光谱新发现了光的一些突出的特性，其中之一是发现光谱中存在着狭窄的谱线．原子种类不同，它发射或吸收辐射的频率也不同．可是，一种给定原子的发射光谱和吸收光谱却总是相同的；只要操作得当，一条光谱中的任何一根谱线都可以在另一条光谱中找到．每一种原子都可以借助这种光谱来鉴别，因此，光谱是了解原子结构和原子同辐射相互作用机制的一种基本信息资料．

氢原子是所有原子中最简单的原子（一个质子＋一个电

1）历史上，第一个关于物质系统必须加以量子化的论证是爱因斯坦在他的固体比热理论中提出来的（1907）．他的理论中包含有比较粗糙的近似，而在处理象固体那样复杂的物质系统时，这是不可避免的．而且，他的理论中应用统计热力学的结果就同黑体辐射理论中差不多．既然如此，我们这里不作详细介绍．读者可参阅（例如）M. Born, *Atomic Physics*.

子),值得特别提一提. 它的所有观测到的谱线的频率都遵从巴耳末经验公式:

$$\nu = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right),$$

其中 n 和 m 是正整数 $(m > n)$, 而 R 是一个表征氢原子的常数(里德伯常数).

更复杂的原子不存在这样的简单公式, 不过各个频率之间总有一定的联系: 属于同一光谱的两个频率, 它们之和或它们之差的频率也必定出现在这同一光谱中.说得更确切些, 我们可以就每一种原子建立一个数值表,即光谱项表,让光谱中的任何一个频率都等于这个表中两项数值之差. 这个法则称为**里德伯-里兹组合原则**(1905),巴耳末公式只是它的一个特例. 反过来, 两个光谱项之差却未必都是光谱中的一个频率. 我们可以定出几条并不太难的**选择定则**, 根据它们去判断哪些光谱项之差能在光谱中出现,而哪些则不能.

这些实验事实与经典的卢瑟福原子辐射理论明显不符. 的确,如果我们不只限于考虑库仑相互作用,而是严格按照洛伦兹电子论把原子内电子与电磁场的相互作用考虑进来, 那么卢瑟福模型本身就会遇到严重矛盾. 电子沿它们的轨道运动时会发出辐射而不断失去能量, 最终应该沿螺旋线掉入核内. 在每一时刻,我们在发射辐射中观测到的频率,应该等于轨道运动的频率或者它的一个谐波频率, 这个频率将随着轨道运动的减慢而逐渐变化, 因而观测到的本应该是一个连续的发射光谱. 所以, 经典的卢瑟福原子理论既不能说明原子的稳定性, 也不能说明线光谱的存在. 在物质与光的相互作用中我们遇到了不连续性的一种新的表现形式, 而经典理论在这种场合下预言的却是连续变化.

9. 原子能级的量子化

1913 年，玻尔用一个同经典概念不相容的新假定来完善光的量子假说，终于以一种普遍的方式解释了光谱；这个新假定就是原子能级的量子化.

按照玻尔的理论，原子并不象一个能以连续方式交换能量的经典系统，它只能存在于某些**稳定态**即量子态，每一个量子态都有完全确定的能量. 这就是说，原子的能量是量子化的. 原子的能量只能跳跃式变化，每一次跳跃相应于原子从一个态跃迁到另一个态.

这个假设使我们能用量子来详细说明光的发射和吸收机制. 只要总能量是守恒的，在有光照射时，一个能量为 E_i 的原子有可能吸收一个光子 $h\nu$ 而跃迁到一个能量较高的 E_f $(>E_i)$的状态，即有

$$h\nu = E_f - E_i;$$

同样，原子也可能发射一个光子 $h\nu$ 而跃迁到一个能量较低 $E_k(<E_i)$ 的状态，这个光子的频率满足关系式

$$h\nu = E_i - E_k.$$

若原子本来已处于最低能态(基态)，它就不可能辐射而保持稳态.

关于每一种原子都有自己的特征谱线而且它们满足里德伯-里兹组合原则的问题，可以按如下方式来解释：若不计及因子 h，各个光谱项就等于原子的各个量子态的能量. 具体到氢原子的情形，假定各能级的能量由公式

$$E_n = -h\frac{R}{n^2}\ (n = 1, 2, 3, \cdots, \infty) \qquad (1.7)$$

给出，那么立即就能推得巴耳末公式.

原子能级量子化的另一个证据，是夫兰克-赫兹就电子与

原子间的非弹性碰撞所做的实验提供的(1914)。这个实验用单一能量的电子去轰击原子而测量散射电子的动能。这样，借助减法便能推知原子在碰撞中吸收的能量。令 E_0，E_1，E_2，…为原子的一系列量子化能级，T 为入射电子的动能。在实验条件下，靶中的原子实际上全都处于它们的基态。如果 T 小于第一激发态能量与基态能量之差($E_1 - E_0$)，原子则不可能吸收能量，这时所有的碰撞都是弹性碰撞。然而，如果 $T > E_1 - E_0$，则会发生非弹性碰撞，电子在碰撞中将失去等于 $E_1 - E_0$ 的能量，而原子进入它的第一激发态。这一点同实验观测结果完全一致。同样，我们还能观测到在 $T > E_2 - E_0$ 时出现第二激发态的激发，等等。

因此，原子能级的量子化已被视为是实验事实。这个性质并非是原子独有的。随着实验工作的进展，特别是光谱学领域取得的实验成果表明，在分子乃至更复杂的粒子系统中也存在着量子化现象。由此可见，我们面对的是一种无法用经典微粒说加以解释的非常普遍的物质性质。

10. 其它量子化的例子　空间量子化

实验上观测到的另一种量子化是原子系统的取向量子化或者说“空间量子化”。我们发现，只要把原子置于外磁场中，每一次它都会有一个占优势的取向。原子系统的这种取向并不是任意的，而只能取一些分立的数值。

顺磁原子束(或分子束)在非均匀磁场中发生偏转的**斯特恩-革拉赫实验**(1922)为这种空间量子化提供了最直接的证据。按照有关假说，顺磁原子具有一个永磁矩 μ，而且可以看作是其角动量 l 正比于 μ 的一个小的元回转器：

$$\mu = Ml.$$

μ 和 l 的取向就决定了原子本身的取向。在磁场 H 中，这

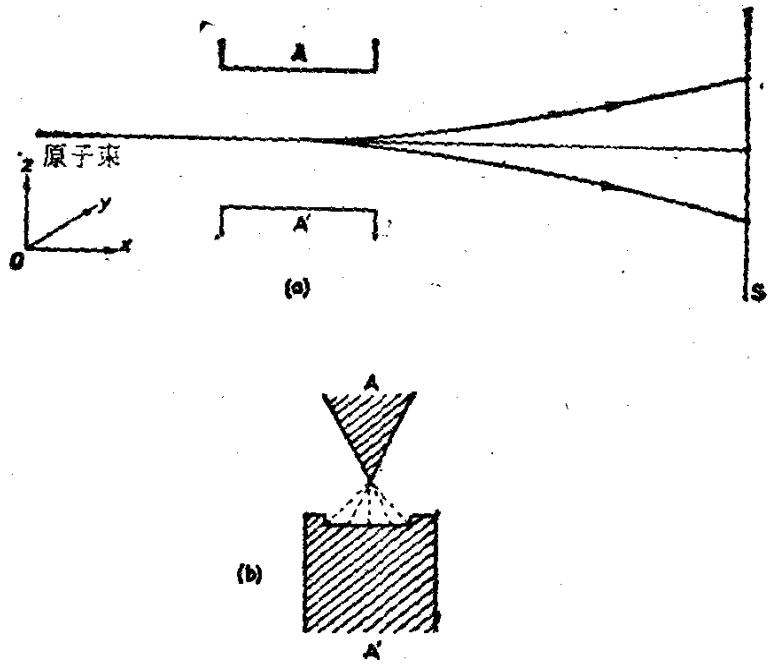

图 1.5 斯特恩-革拉赫实验. (a) 实验总图: 原子束从两个磁极 A 和 A' 之间通过,其中有一个非均匀磁场 (在图中的竖直方向); 在屏 S 上观测原子的撞击点. (b) 极块的横截面, 虚线表示磁力线.

个角动量绕 $\boldsymbol{H}$ 作进动(拉摩进动,见习题 1.3). 若 $\boldsymbol{H}$ 是恒定磁场,磁能 $-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H}$ 也保持恒定,而且与原子的质心位置无关,从而原子质心作匀速直线运动. 若 $\boldsymbol{H}$ 不是恒定的,原子的质心会受到一个力 $\boldsymbol{F}=\mathrm{grad}(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{H})$ 的作用而发生偏转. 这就是我们在斯特恩-革拉赫实验中看到的情形. 图 1.5 给出了这个实验的简图. 由于 $\boldsymbol{\mu}$ 绕磁场作进动,它沿磁场的分量 μ_z 将保持不变,而其余两个分量则在零附近振动. 这情形就好象原子遭受到的是上述力对几种振动求平均后的值: $\mu_z\mathrm{grad}H_z$. 在通常实验安排下,这个平均力沿 Oz 方向,等于 $\mu_z\dfrac{\partial H_z}{\partial z}$. 设原子在磁场中走过的距离为 $2l$,入射束原子的动能为 T,经过简单计算便可以知道,每一个原子的速度相对于

它的初始方向 Ox 偏转了一个角度 $\approx \mu_z\left(\frac{\partial H_z}{\partial z}\right)\left(\frac{l}{T}\right)$. 由此可见，偏转角正比于 μ 在磁场方向的分量. 如果束中原子作无规则取向，μ_z 将取从 $-\mu$ 到 $+\mu$ 之间的一切值，因而偏转角也应取两个相应极值之间的一切值. 这样，原子撞击在屏上应该形成的是一个沿 Oz 方向伸长的大斑块. 然而，人们实际观测到的却是沿 Oz 方向等间距排列的一系列小斑点. 如果改变磁场(从而改变 $\partial H/\partial z$)，这些小斑点之间的间隔距离随之变化，但斑点的分布花样及其他一切均无变化，特别是小斑点的数目 λ 保持不变. 每一个小斑点对应于 μ_z 的一个确定值. 结果，μ_z 是一个取 λ 个不同值的量子化的量. 角动量的分量 l_z 显然也有同样的性质.

人们也许可以对斯特恩-革拉赫实验的这种解释提出非难，因为它是建立在关于原子顺磁性起源的一个非常特别的假说之上，即认为存在一种正比于角动量的永磁矩. 我们这里不打算详细阐述支持这个假说的那些事实和论证（迴转磁效应，郎之万顺磁磁化率理论，等等)，因为后来量子力学的发展已完全证实了这个假说. 即使怀疑上述解释细节的人，他倘若不假定有一些表征内部运动的量是被量子化的，也一定难以解释屏上存在着 λ 个明显分开的小斑点的事实. 事实上，就原子质心运动遵从经典力学运动规律而言，质心的运动轨迹是由磁铁入口处原子的动力学状态完全确定了的. 屏上出现多少伸展开来的撞击点分布表明，原子并非全都处在相同的初始条件下，确定初态的那些动力学变量是按统计规律分布在一个多少扩散开来的数域上. 存在着 λ 个明显分开的小斑点这一事实告诉我们，这种统计分布至少是不连续的，换句话说，原子中有一些动力学变量是量子化的. 由于原子实际上全都处于它们的基态(否则它们将辐射)，这里我们遇到

的不会是能量的量子化；又因为屏上观测到的是带有方向性的效应，所以与之对应的发生量子化的那个动力学变量显然同原子的取向有关。

除斯特恩-革拉赫实验外，还有好几种说明存在着空间量子化的不十分直接的实验现象. 这里我们只特别指出恒定磁场对光谱结构的影响，即塞曼效应(1896)；后面我们还要回过头来讨论这个效应. 所有这些现象都有一个共同的起源，即角动量量子化；后来量子力学的发展把这一点阐述得十分清楚.

IV. 对应原理和旧量子论

11. 经典微粒说的不足

某些物理量的量子化(以及人们不得不这样主张)是与物质的经典微粒说相悖的实验事实. 由经典粒子组成的一个系统的能量实际上是一个连续量；不管我们怎样修改力的定律，即使引入另外的动力学变量，我们也无法改变这样一种状况：一个粒子系统的能量只取一系列分立的容许值，这一事实是经典力学无能为力的一个实验结果. 同样的说法也适用于所有其他的量子化量.

与此相联系，**一个量子化量随时间的演变无法用严格的经典术语来描述.** 我们来看这样一个例子：一个原子开始时处于第一激发态 E_1，发射一个光子后回到基态. 倘若我们打算用经典物理学的语言去确定原子能量随时间的演变，那么我们就不得不认为原子的能量在某个确定时刻发生了一次从 E_1 到 E_0 的不连续跃变，因为这两个能量值之间的任何连续演变都已被排除. 可是，我们却无法预言这次跃变究竟是在什么确切时刻发生的. 事实上，如果在跃变前的所有时间原

子的动力学状态始终保持一模一样，那么就没有理由说，这次跃变应该是发生在某个给定时刻而不是发生在其他时刻．人们充其量只能谈论每单位时间发生跃变的几率．实际情况是，经典物理学无法描述这种情况，用某个时刻发生跃变来描述的这个图象是不正确的．我们必须放弃能量真的作为时间的函数而演变的想法．我们唯一能够确定的，只是在开始时处于激发态的一个原子在后来的某一时刻被发现处于基态的几率．我们后面将会看到，这种去激发的几率同放射性原子核的衰变规律一样，遵循的也是一个指数衰减规律，其中的特征常数是单位时间的去激发几率，换一种说法，亦即激发态平均寿命的倒数．

由此可见，我们必须放弃某些经典概念，以便把这种量子化现象并入到一个前后一贯的物质理论中去．根据这个新理论，人们可以算出量子化量以及同各种可能发生的量子跃迁有关的量的精确数值，如上面提到的平均寿命即是．直到量子力学以它现在的形式建立起来以后，这种做法才得以实现．起初，玻尔和他的学派(克拉默，索末菲)系统地提出量子论的第一个草案，由它可以正确地预言类氢系统的光谱．尽管这个旧量子论存在有原则性的困难，而且具有很大的局限性，但为了正确评价量子理论后来的发展，我们还是有必要知道一些它的主要特点．此外，正是这个比较旧的理论，第一次应用了一种富于启发性的原理，即对应原理，后者在量子力学的发展中起过非常重要的作用．正因为如此，我们要特别介绍一下旧量子论的下面一种表述．至于旧量子论的另一部分，那是关于物质和辐射间相互作用的半经典理论，也是以对应原理为基础，但在本书中不打算进行讨论．

12. 对应原理

对应原理是 1923 年才由玻尔清楚地表述出来[1]，但它对那以前的所有工作都起过促进作用. 对应原理的实质在于，它能精确地指明在何种意义下经典力学的观念和结果可以作为制订和阐明正确理论的指南.

我们曾联系到光量子讨论过经典辐射理论的适用范围. 那里所作的讨论对于经典理论总体也都成立. 经典理论能正确地预言范围广泛的众多现象，从宏观尺度往下直到把微观领域的某些现象也包括在内. 这后一类现象有电子在恒定电场或磁场中的运动，气体中原子或分子的热运动，等等. 经典理论在解释微观尺度上的现象时遇到的困难，主要是因为在这个尺度上出现了不连续性.

所以我们可以断言，**经典理论**"在宏观上是正确的"，这就是说，经典理论说明的是当量子不连续性可视为无穷小时的那些现象；只要是属于这种极限情况，精确理论的预言则必须同经典理论的预言相一致. 这样我们就给量子理论加上了一个限制性很强的条件. 这个限制性条件可以概括为一句话：**在大量子数极限情况下，量子理论必须逐渐逼近经典理论.**

为了让这个条件得到满足，人们在原则上建立起这样一种信念，即量子理论与经典理论之间存在着一种形式上的相似，而且两种理论之间的这种"对应性"能保持到最小的细节，所以必然能用作阐明新理论的结果时的指南.

13. 对应原理在里德伯常数计算中的应用

我们来验证一下，表达式(1.7)同对应原理一致. (1.7)式

---

1) N. Bohr, *Z. Physik* **13**(1923) 117.

给出的是作为量子数 n 的函数的氢原子的能级. 现在我们来证明，应用对应原理可以明确地确定出现在这个表达式中的常数 R 的数值.

按照卢瑟福经典理论，氢原子由相互有库仑作用 $\left(\text{势为}-\frac{e^2}{r}\right)$ 的一个质子和一个电子组成. 根据开普勒定律(我们假定读者已经知道这个定律)，电子应当绕质子作椭圆轨道运动，质子(设为无穷重)则位于这个椭圆的一个焦点上. 每一个轨道对应一定的能量值 $E(<0)$，而且电子沿轨道运动有一定的频率 $\nu_{\text{Cl.}}$. 这两个量实际上只取决于椭圆主轴的长度，并由下式联系起来:

$$\nu_{\text{Cl.}}(E)=\frac{1}{\pi e^2}\left(\frac{2|E|^3}{m}\right)^{1/2} \tag{1.8}$$

式是 m 是电子的质量.

电子在这种运动过程中会发生某种辐射，这种辐射由频率等于 $\nu_{\text{Cl.}}$ 或它的谐波频率的单色波叠加而成. 椭圆轨道越偏心，辐射中的高次谐波就越丰富. 这种辐射以连续方式发射出来，而且伴随有能量 E 的稳定减小.

我们需要把能量的这种减小同玻尔理论中由分立的跃变所引起的能量减小加以比较. 当 n 很大时，由能级 E_n 到它的每一个最近邻能级之间的距离是某一个整数乘上

$$dE/dn=\frac{2Rh}{n^3}.$$

对于量子数相对变化 $\Delta n/n$ 非常小的所有光学跃迁，同经典理论一样，发射频率是某个基本频率

$$\nu_{\text{qu.}}\approx 2\frac{R}{n^2}=2\left(\frac{|E_n|^3}{Rh^3}\right)^{1/2} \tag{1.9}$$

的($n-1$ 级)谐波. 在 n 非常大的极限情况下，能量 E_n 的减

小平均说来是由次第发生的大量非常小的量子跃变引起的. 而按照对应原理，这时的发射频谱严格说来只是频谱中与最低能量的量子相联系的低频部分，它必须同经典频谱完全相同. 换句话说，我们必须有

$$\nu_{\text{qu.}} \underset{n\to\infty}{\sim} \nu_{\text{Cl.}}(E). \tag{1.10}$$

考察表达式(1.8)和(1.9)可以看出，若取

$$R = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3}, \tag{1.11}$$

上述条件就可以满足. R的实验值已经以非常高的精度（$\approx 10^{-6}$）测知，而由(1.11)式求出的理论值同实验值则在10^{-4}的精度内符合得很好[1]. 这是玻尔理论最突出的成就之一.

不难把玻尔理论推广到由一个电子和一个电荷为 Ze 的原子实所组成的类氢原子，例如一次电离的氦原子($Z = 2$). 这时我们只需在公式中用 Ze^2 代替 e^2. 这样得到的 He^+ 的光谱项也同样在非常高的精度(10^{-4})内同实验观测符合得很好.

14. 经典力学方程的拉格朗日形式和哈密顿形式

为了便于在后面讨论量子理论同经典理论之间在形式上的对应性，我们有必要回顾一下经典分析力学的一些要点.

一般说来，一个经典系统的动力学状态是由它的位置和速度确定的. 这其中位置用它的坐标 $q_1, q_2, \cdots, q_R$ 表示，

---

1) 为了肯定R确定到这样的精度，必须注意到质子的质量M实际上是有限的. 为此，只需在公式(1.11)中把电子质量m用约化质量

$$m' = \frac{mM}{m+M}$$

来代替. 在作过这种修正(5×10^{-4})以后，R的理论值略低于实验值. 这个差别实质上来自相对论效应，它使质量 m' 有一点增加.

而速度用它的坐标对时间的导数表示；这里 R 是系统的自由度[1]. 假定我们处理的是一个有 n 个粒子的系统，我们可以把这些粒子的总共 $3n$ 个笛卡儿坐标选作位置坐标. 不过，下面所作的讨论对于其他坐标选择方式也同样成立. 这个系统每一时刻在一个 n 维空间(**位形空间**)中的位置可以用一个点 M 来表示，后者在该空间中的坐标为 $q_1, q_2, \cdots, q_R$. 经典力学的目的就是要找出这个系统的作为时间函数的演变规律，或者说，如果我们愿意的话，找出这个系统在位形空间中的代表点 M 的运动规律.

对于含有大量粒子的一个动力学系统（我们这里要考虑的就是这种系统），我们可以借助引入一个该系统的特征函数来写出这些运动规律；这就是拉格朗日函数：

$$L \equiv L(q_1, q_2, \cdots, q_R; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \cdots, \dot{q}_R; t).$$

坐标 q 应该满足如下 R 个二阶微分方程（拉格朗日方程）：

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r}\right) - \frac{\partial L}{\partial q_r} = 0 \qquad (r = 1, 2, \cdots, R).$$

出现在这些方程中的量

$$p_r \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} \qquad (r = 1, 2, \cdots, R)$$

叫做拉格朗日**共轭动量**. 在 q_r 是一个质量为 m 的粒子的笛卡儿坐标，而力可以由一个稳定势导出的场合，p_r 就是该粒子动量的对应坐标 $p_r = m\dot{q}_r$.

运动规律同样也能用变分原理的形式来表示. 实际上，拉格朗日方程组等价于**最小作用原理**[莫泊丢（Maupertuis）-哈密顿]：

1) 这里我们只考虑没有约束的系统，换句话说，每个 q 都不受限制地独立变化.

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} L\,dt, \qquad \delta M(t_1)=\delta M(t_2)=0. \tag{1.12}$$

这个原理的含义如下：在允许这个系统从时刻 t_1 的位置 M_1 运动到时刻 t_2 的位置 M_2 的所有那些运动规律 $M(t)$ 中，实际实现的只是使积分 $\int_{t_1}^{t_2} L\,dt$ 取稳定值的那个运动规律.

经典力学规律的再一种特别有用的形式是**哈密顿正则形式**. 我们知道，一个经典系统在给定时刻的动力学状态，只要给出它在该时刻的 R 个位置坐标 $q_1, q_2, \cdots, q_R$ 和对应的 R 个共轭动量 $p_1, p_2, \cdots, p_R$ 就能完全确定. 这样，我们引入一个 $2R$ 维的空间（相空间）就会十分方便. 在这个相空间中，系统的动力学状态由一个点 p 代表，而此点以各个 p 和各个 q 为它的坐标. 现在我们先来定义这个系统的哈密顿量：

$$\begin{aligned} H &\equiv H(q_1, \cdots, q_R; p_1, \cdots, p_R; t) \\ &= \sum_{r=1}^{R} \dot{q}_r \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_r} - L. \end{aligned} \tag{1.13}$$

于是，写出这个系统的运动方程的正则形式就是

$$\dot{q}_r \equiv \frac{\partial H}{\partial p_r}, \quad \dot{p}_r \equiv -\frac{\partial H}{\partial q_r} \qquad (r=1, 2, \cdots, R). \tag{1.14}$$

这是些一阶微分方程. 只要知道了初始时刻的坐标和动量，就不难确定它们在以后各时刻的数值. 因此，当 H 不依赖于时间时，通过相空间中的每一点都有且仅有一条轨迹，它代表了该系统的一种可能的运动.

通常在大多数情况下，L 是动能 T 和势能 V 之差，这里 T 是 $\dot{q}$ 的二次齐次函数；而 $H=T+V$ 是系统的表示为各个 q 和 p 的函数的总能量. 但是，拉格朗日形式和哈密顿形式都可以用于更普遍的动力学系统（见习题 1.4）. 在作这种推广时，我们在所有场合都把 H 视作系统的总能量. 从哈密顿方程我们推得 $\dot{H} \equiv (dH/dt) = (\partial H/\partial t)$. 由此可见，若哈密顿量不

显含时间，系统的总能量就是一个常数．这时，我们称这个系统为守恒系统或保守系统．

为了说明这些要点，作为例子，我们来考察在一个质子（假定为无穷重）的库仑场中运动的一个电子．令 $\boldsymbol{r}(x, y, z)$ 为以质子为原点的笛卡儿坐标系中的位置，$\boldsymbol{v} = \dfrac{d\boldsymbol{r}}{dt}$ 是它的速度，而 $\boldsymbol{p}(p_x, p_y, p_z)$ 是它的动量．这时的拉格朗日量是

$$L = \frac{1}{2} mv^2 + \frac{e^2}{r}.$$

位置坐标的共轭动量是动量的各个分量 $\left(p_x = \dfrac{\partial L}{\partial v_x}, \ p_y = \dfrac{\partial L}{\partial v_y}, \ p_z = \dfrac{\partial L}{\partial v_z}\right)$．从哈密顿函数的显式

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

我们求得哈密顿方程为

$$\frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \frac{\boldsymbol{p}}{m},$$

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \operatorname{grad} \frac{e^2}{r} = -e^2 \frac{\boldsymbol{r}}{r^3}.$$

利用这些方程，我们可以直接证明角动量 $\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ 是一个运动常数：$d\boldsymbol{l}/dt = 0$；这是中心势 $-e^2/r$ 的结果．我们还可以证明，电子轨迹完全处在包含原点在内且垂直于恒定矢量 $\boldsymbol{l}$ 的一个平面内．

改用任何别的坐标系，我们也能求得运动方程．设电子轨迹位于 xy 平面上（$z = \dot{z} = 0$），采用极坐标 (r, φ) 得到

$$x = r\cos\varphi, \qquad y = r\sin\varphi,$$

$$L = \frac{1}{2} m[\dot{r}^2 + (r\dot{\varphi})^2] + \frac{e^2}{r},$$

$$p_r = m\dot{r},\quad p_\varphi = mr^2\dot{\varphi},$$

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2}\right) - \frac{e^2}{r},$$

从而哈密顿方程为

$$\dot{p}_\varphi = 0,\qquad \dot{\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2},$$

$$\dot{p}_r = \frac{p_\varphi^2}{mr^3} - \frac{e^2}{r^2},\quad \dot{r} = \frac{p_r}{m}. \tag{1.15}$$

式中 p_φ 是角动量的大小，它的确是一个运动常数.

15. 玻尔-索末菲量子化规则

旧量子论本质上是基于玻尔假说和对应原理来计算量子化量的一种普遍方法. 这种方法的步骤如下. 先假定由物质粒子组成的系统遵循经典力学规律，然后认定，在运动方程的所有解中，只能留下满足某些特定的量子化规则的那些解. 这样我们就挑选出一组分立的运动，也就是说，按照假说，只有这些运动才是真正能实现的运动. 这些可能的运动中每一个都各自对应一个能量值. 这样得到的分立能量序列就是量子化的能级谱. 对所有其他运动常数，同样也可以得到它们的允许值的分立谱.

如何确定"量子化规则"是量子论的中心课题. 这个问题的解决首先要靠直觉：人们先假定一些规则，然后把由这些规则推得的量子化谱与实验结果相比较. 在这样寻找规则时，对应原理是一个有价值的指南.

有一种非常简单的情况，我们可以从对应原理十分自然地导出结果，这就是其经典运动是周期运动，频率仅是能量的函数

$$\nu_{\mathrm{Cl.}} = \nu_{\mathrm{Cl.}}(E).$$

具体说来，氢原子就属于这种情况[见(1.8)式]. 设 E_1, E_2, $\cdots$, E_n, $\cdots$为一系列量子化能量. 我们总可以把这个系统的能量看作量子数 n 的一个连续函数 $E(n)$，而能量的量子化则是由于 n 只能取整数值的结果. 重复在§13 中计算里德伯常数的推理，我们得到经典频率和量子频率之间的对应关系[见(1.10)式]:

$$\frac{1}{h}\frac{dE}{dn} \underset{n\to\infty}{\sim} \nu_{\mathrm{Cl.}}(E).$$

由此我们就得到对大整数值 n 的量子化规则:

$$\int^{E}\frac{dE}{\nu_{\mathrm{Cl.}}(E)} = nh + \text{常数}.$$

这个规则不难推广到所有 n 值，即有

$$\int_{E_{\min}}^{E}\frac{dE}{\nu_{\mathrm{Cl.}}(E)} = nh \qquad (n = 1, 2, \cdots, \infty). \tag{1.16}$$

($E_{\min}$ 是经典系统能量的最小值.)在氢原子场合，这个量子化规则正好给出巴耳末公式中的光谱项.

这个规则适用于只有一个自由度的周期系统. 在那种场合，可以把这个规则写成更便于推广的形式. 设 q 为这个系统的位置坐标，p 为它的正则共轭动量，而 $H(q, p) = E$ 是总能量. 这样，这个周期运动就由二维相空间中的一条闭合曲线 $H(q, p) =$ 常数来表示[1]. 由哈密顿方程可以证明

$$\int_{E_{\min}}^{E}\frac{dE}{\nu(E)} = \oint_{H=E} p\,dq,$$

式中符号 $\oint_{H=E}$ 必须在能量 E 所对应的运动的一个完整周期内

---

1) 如果 q 是一个周期变量(例如角变量)，换句话说，如果相差一个周期 Q 的整数倍的不同 q 值代表的是系统的同一位形，则这个周期运动不能用相空间中的一条闭合曲线表示，而要用一条周期为 Q 的曲线来表示。

进行积分（积分 $\oint p dq$ 称为作用积分）。于是，我们得到与规则(1.16)等价的量子化规则：

$$\oint p dq = nh \qquad (n = 1, 2, \cdots, \infty). \tag{1.17}$$

这个规则决定了相空间中所有容许的轨迹和相应的量子化能量。这就是所谓的**玻尔-索末菲量子化规则**。

威耳孙和索末菲把这个规则推广到了多周期系统。这种系统具有好几个自由度，在适当选择坐标 $q_1, q_2, \cdots, q_R$ 和共轭动量 $p_1, p_2, \cdots, p_R$ 之后，它的运动可以用一系列函数 $p_1(q_1), p_2(q_2), \cdots, p_R(q_R)$ 来代表。换句话说，这种系统在相空间中轨迹的特点是，各个动量 p_r 都仅仅是 q_r 的函数，而与其他变量无关。每一个函数 $p_r(q_r)$ 各代表一个频率为 ν_r 的周期运动，而整个系统的运动则是频率分别为 $\nu_1, \nu_2, \cdots, \nu_R$ 的 R 个周期运动的组合。在这种情况下，量子化规则是 R 个关系式：

$$\oint p_r dq_r = n_r h \qquad (r = 1, 2, \cdots, R). \tag{1.18}$$

这 R 个（整数）量子数 $n_1, n_2, \cdots, n_R$ 确定了系统的量子化轨迹，以及诸如能量、角动量等等各个运动常数的量子化值。这其中，作为变量 $n_1, n_2, \cdots, n_R$ 的函数的能量 $E(n_1, n_2, \cdots, n_R)$ 满足对应条件

$$\frac{\partial E}{\partial n_r} \underset{n_r \to \infty}{\sim} h\nu_r \qquad (r = 1, 2, \cdots, R).$$

作为一个应用，我们扼要考察一下氢原子的量子化。一旦我们选定氢原子中电子轨道的平面，这就是一个二维问题。这个问题在极坐标中的运动方程，我们前面已经写出过[(1.15)式]。角动量和能量在这里都是常数。如果我们分别设这两个量的值为 $L(\geq 0)$和 $E(< 0)$，我们就得到电子经典

运动的一条可能的轨迹，它是一个偏心率为

$$\sqrt{1+\frac{2L^2E}{me^4}}$$

的椭圆.

动量 p_φ 和 p_r 是它们各自共轭坐标的函数. 事实上，

$$p_\varphi = L,\ \frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{L^2}{r^2}\right)-\frac{e^2}{r}=E.$$

于是我们可以利用玻尔-索末菲量子化规则:

$$\oint p_\varphi d\varphi = lh, \qquad \oint p_r dr = kh;$$

式中 l 是角量子数，而 k 是径向量子数，它们都是正整数（或零）. 第一个规则给出了角动量的量子化值:

$$L = l\hbar.$$

根据第二个规则，在作过冗长而不难的计算以后得到

$$\sqrt{\frac{2\pi^2me^4}{-E}}-2\pi L = kh;$$

引入"主量子数" $n = l + k$，立即就得到巴耳末公式:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2n^2},$$

这里的里德伯常数同我们以前算得的数值 [(1.11)式]相同.

这个量子化能量只依赖于两个量子数 l 和 k 之和. 这个性质是库仑势的特点，是角频率和径向频率相等 $\nu_\varphi = \nu_r$ 造成的. 对应于一个能量 E_n，总共有 n 个量子化轨道，它们分别由如下 l 值确定: $l = 1, 2, \cdots, n$（我们这里不讨论扣除 $l = 0$ 的理由）. 这些轨道是偏心率为 $\sqrt{1-(l^2/n^2)}$ 的椭圆. 与数值 $l = n$ 对应的轨道是圆轨道[1].

1) 早在 1913 年，玻尔正是通过圆轨道的这种量子化找到了巴耳末公式. 椭圆轨道的量子化是索末菲完成的，他还把他的理论推广到了相对论的情况(见后面).

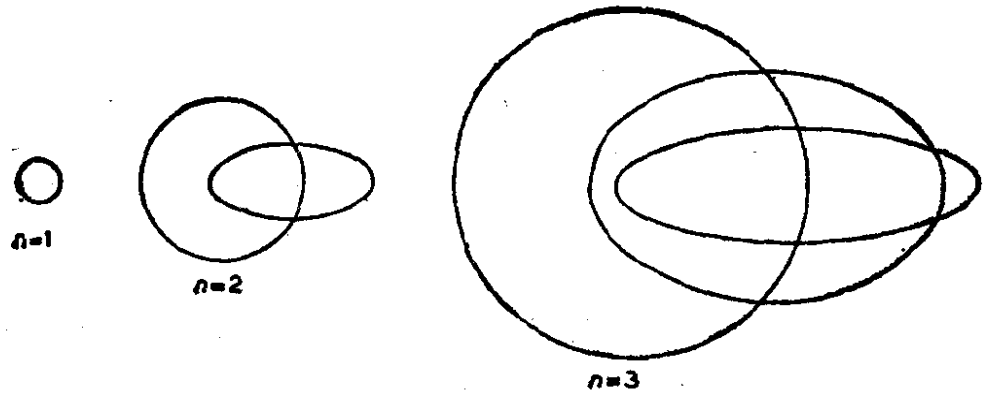

图 1.6　氢原子的基态（$n=1$）和头两个激发态（$n=2$, 3）的玻尔轨道．轨道的相对大小已按比例绘出．

我们可以把这两个量子化规则应用于相对论运动方程，从而对这个氢原子理论作出相对论修正．这样得到的里德伯常数与实验值符合得更好（见本章§ 13 脚注）．此外，解除了能量的"简并度"：对应于每个 n 值存在着 n 个相距很近的数值不同的量子化能量，这每一能量值都各自对应一个确定的角动量值 $l\hbar$．实验上所观测到的氢原子的精细结构，与这个理论预言十分一致．

我们现在来考察空间量子化问题．上面我们在处理位于一个平面上的轨道的量子化时，没有涉及到哪一个方向特别优越的问题，我们能够确定的只是能量或角动量的**大小**（$L=l\hbar$）这样一些标量的量子化谱．然而，对于具有轴对称的系统（例如在恒定磁场中的原子），却存在着一种十分普遍的空间量子化规则．在这种场合，总角动量沿对称轴 Oz 的分量 L_z 是一个运动常数．在经典力学中能够证明，这个分量总可以取作与角度 φ 共轭的动量；这里 φ 是确定系统总体绕对称轴取向的角度．因此

$$\oint L_z d\varphi = mh \qquad (m \text{ 为整数}).$$

因为 L_z 是常数，所以

$$L_z = m\hbar. \tag{1.19}$$

这表明，角动量沿对称轴的分量是 $\hbar$ 的整数（正或负）倍．量子数 m 叫做**磁量子数**.

16. 旧量子论的成就和局限性

我们不打算再继续讨论旧量子论了．这个理论向我们提供过大量原子和分子系统的光谱项的正确形式，从而极大地加深了我们对光谱的认识．这个理论对氢原子的处理，不难推广用于处理类氢原子（He^+, Li^{++}）和碱金属原子．这个理论还适用于分子的转动谱和振动谱、原子的X射线谱，以及正常塞曼效应．加上物质同辐射之间相互作用的半经典理论之后，就可以推出各种可能的量子跃迁的选择定则和几率．除了在量子数非常小时的个别例外，在一切场合，这个理论的预言与实验结果都符合得非常好；而小量子数下的不一致，还能通过在量子化上加上某些经验修正而得到补救（删去角量子数 $l = 0$ 的情形就是这个缘故）.

尽管有这些成就，旧量子论仍然是一个不完善的理论．玻尔-索末菲规则只适用于周期系统或多周期系统．对于非周期运动，则没有什么量子化的方法．象夫兰克和赫兹实验那样的基本实验的机制，仍完全无法解释：玻尔-索末菲理论给出了原子靶的量子化能级，却没有任何理论方法能够指明电子实际走过的轨迹，或者能详细描述电子与靶原子之间的非弹性碰撞．一般说来，这个理论对于所有碰撞现象都无能为力．即使计算光谱项，这个理论也只是对于最简单的那些系统才取得了成功，一旦用它去严格处理复杂原子的量子化问题，就会遇到种种麻烦．此外，也存在着一些例子，暴露了理论与实验的严重不符，例如（非离子化的）氦原子和反常塞曼效应就是这样.

再者，这个理论自身也绝非毫不含糊和没有矛盾．关于空间量子化的处理就是一例．按说，对于 z 轴具有轴对称的系统的角动量的 z 分量 L_z 的量子化规则，对于球对称系统也应该完全适用，因为球对称系统对于通过原点的任何一根轴线都具有轴对称性．这样一来，在球对称情况下我们就导出了一个荒谬的结论：角动量沿通过原点的任何轴线的分量都必须是 $\hbar$ 的整数倍．

然而，比起所有这些缺陷和矛盾来，旧量子论在原理方面遇到的困难则要更严重得多．量子化规则纯粹是外加于经典运动方程所有可能的解上的形式上的限制，它们全凭经验决定．对经典轨迹采取这种量子化全无理论根据．事实上，轨迹概念本身便与量子化现象水火不容．轨迹概念意味着，粒子在每一时刻都具有完全确定的位置和动量，而且这两个量在时间进程中都以连续方式变化．如果真是这样，那么一个粒子，比如在夫兰克和赫兹实验中的一个电子，它的轨迹到底是怎样的呢？如果这个电子真有一条精确的轨迹，它的能量也连续变化，那么我们就必须放弃电子通过量子同靶原子交换能量的概念．换句话说，我们必须放弃靶原能级的量子化．反之，承认这种量子化就等于抛弃电子具有精确轨迹的经典概念，而且按照逻辑推理，甚至要抛弃轨迹概念本身．在第二章和第四章中我们将会看到，这种抛弃是有充分理由的，而且我们还要详细地分析这样做的物理意义及其后果．最后，我们甚至不得不抛弃掉经典运动方程．这样，我们就很需要探究一下导致原子的量子化轨迹的这些运动方程的解的物理意义了．

旧量子论无疑是一个巨大的进步．它只根据少数几条简单的规则就预言了一大堆实验结果．它还给出了一个对光谱能作出唯象解释的普遍适用的方案，并凭着这一点，在近代物

理学史上起到了开拓道路的作用．然而，这个把经典力学和一些硬性规定随意揉合起来的大杂烩，无论如何也不是一个定形的理论．

17. 结论

在本章中，我们分析了经典理论在微观理论范畴遇到的那些主要困难．只要打算对物质与辐射之间的相互作用作详细研究，就一定会出现这些困难．归根到底，这是因为在微观尺度下由于存在着不可分割的作用量子 h 而出现了不连续性．

这种**关于作用量的原子论**很可能是自然现象的一个基本特征．在宏观尺度下，量子 h 可以视为是无穷小量，因而我们可以满足于对现象作经典描述，也就是说，我们同意物理系统的演变可以用在每个时刻都能严格加以确定而且随时间作连续变化的一些动力学变量来代表．但是，在讨论原子和亚原子的物理现象时，h 就不再能被忽略了，在这个尺度下将出现特有的量子效应．

这场骚乱动摇了整个经典学说．

对电磁辐射的经典波动处理，同物质与辐射之间的能量和动量只通过分立的、不可分割的量子而进行的这一实验事实绝对无法相容．特别是，除非我们把光想象为一束微粒流，否则我们就不能理解光电效应和康普顿效应．反过来，光子假说却无法同存在着干涉和衍射现象的事实相容；在这类现象里，光具有波的叠加的特点．我们如果仍旧使用经典语言，就无法以自圆其说的方式说明全部光学现象．我们只好视情况而定求助于两种互相矛盾的表述中的某一个：要么是微粒流，要么是波的叠加．这两种表述之间则由包含有量子 h 在内的一个基本关系式(1.4)联系起来．说明这种波粒二象性的最简单办法是认为波与微粒之间存在着一种统计关联，即波

在某一点的强度给出了在该点找到与这种波相联系的光子的几率.

如果仅考虑物质系统，那么某些量的量子化说明物质是由遵从牛顿力学的微粒组成的这一概念应当有一个适用极限. 原子能级的量子化、处在适当条件下的原子和分子的取向的量子化，全都是与经典微粒说不相容的实验事实.

为了让建立一种协调一致的理论的工作有所遵循，应当看一下经典理论中哪些东西仍然是有效的. 必须举出的第一点就是基本的能量守恒定律和动量守恒定律. 在本章讨论过的实验事实中，还没有任何事实表明这两个定律不成立. 由此看来，在微观现象水平上，这两个定律仍然有效. 第二点，关于作用量的原子论看来是经典理论失败的唯一根源. 因此，经典理论在宏观尺度下，或者更广义地说，只要在量子的不连续性可以忽略的场合，就完全是有效的. 这后一种说法，根据是本章最后部分所介绍的对应原理. 旧量子论的基础尽管十分脆弱，然而它的成就却证明了这个基本的带有启发性的原理的确是一个卓有成效的原理.

练习和问题

1.分析单色光子被自由电子的散射（康普顿效应）. 若假定 a）开始时电子处于静止；b）电子在光子入射方向有一初始动量 P，试求波长移动和电子反冲动量的方向及大小作为光子偏转角函数的表达式. 在这两种情况下，传递给电子的最大动量是多少?

2.结合杨氏狭缝干涉实验讨论光的波动和微粒二重性. 试证明无法认为每个光子都有一条通过两个狭缝之一的精确轨迹.

3.一个迴转子具有正比于其角动量的一个磁矩 μ: $\mu = Ml$. 试由磁能表达式 $-\mu \cdot H$ 导出在恒定磁场 H 中 l 的运动方程，并证明这个迴转子以圆频率 $\omega_L = MH$（拉摩频率）作进动.

4.在非相对论条件下，一个电子在电磁场中的经典运动方程为

$$\frac{d}{dt}(m\boldsymbol{v}) = e\left(\boldsymbol{E} + \frac{\boldsymbol{v}}{c} \times \boldsymbol{H}\right). \qquad (a)$$

设 $\boldsymbol{A}$ 和 φ 分别为此电磁场的矢势和标势，即有

$$\boldsymbol{\varepsilon} = -\operatorname{grad}\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t};\ \boldsymbol{H} = \operatorname{rot}\boldsymbol{A},$$

试证明这些方程可由拉格朗日量

$$L = \frac{1}{2}mv^2 + e\left(\frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}}{c} - \varphi\right)$$

导出。请计算共轭拉格朗日动量，并构成经典哈密顿量。

5.在上一题的 (a) 式中用"相对论性质量"

$$M = m\left[1 - \left(\frac{v^2}{c^2}\right)\right]^{1/2}$$

代替其中的静止质量 m，结果它在相对论领域就仍然是正确的。试验证这时拉格朗日表述和哈密顿表述仍然有效，而运动方程应由如下拉格朗日量导出：

$$L = -mc^2\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + e\left(\frac{\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}}{c} - \varphi\right).$$

再证明此时的哈密顿量应写成

$$H = \left[m^2c^4 + \left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2c^2\right]^{1/2} + e\varphi,$$

其中 $\boldsymbol{p}$ 代表动量，它的三个分量 p_x, p_y, p_z 分别为 x, y, z 的共轭动量。

提示：$\boldsymbol{p} = M\boldsymbol{v} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}$，$H = Mc^2 + e\varphi$。$H$ 和 $\boldsymbol{p}c$ 同 φ 和 $\boldsymbol{A}$ 一样，也构成一个空时四维矢量，且有 $(H - e\varphi)^2 - (\boldsymbol{p}c - e\boldsymbol{A})^2 = m^2c^4$。

6.一个质量为 m 的质点被约束在 x 轴上运动，同时还受到一个同它到原点的距离成正比的恢复力 $(-Kx)$ 的作用(谐振子)。试把玻尔-索末菲量子化规则用于这个系统，计算量子化轨迹的能量、周期和振幅。

7.应用玻尔-索末菲规则使氢原子的圆轨道量子化。确定量子化

轨道的能量、周期和半径．具体算出最低轨道的半径、周期和能量的数值$\left[mc^2 = 0.51 \text{ 兆电子伏}, \frac{\hbar c}{e^2} \approx 137\right]$，并确定在这种特定场合下的相对论修正。试验证在大量子数极限下，玻尔频率逼近经典动力学所预言的频率(对应原理)。

第二章　物质波与薛定谔方程

1. 历史概观和以后各章的总计划

量子力学据认为创立于 1923 年至 1927 年之间，它有两种等价的表述形式：矩阵力学和波动力学.

矩阵力学[1]起源于对旧量子论进行一种批判性的分析. 由海森伯发展的这种观点如下所述. 在任何一种物理理论中，我们都必须把物理上可观测的量和概念同那些不可观测的量和概念区分开来. 前者必须要在这个理论中占有一席之地，而后者则不妨予以修改或干脆扬弃. 在建立一种令人满意的关于微观现象的理论时，我们必须尽可能地从可观测量出发. 旧量子论采用了一整套没有实验基础的观念，如果这些观念有错误，旧量子论就必然会陷入困境.

电子轨道就是一个没有实验基础的概念. 让我们来看一下，是否可以想象用实验方法去跟踪氢原子玻尔轨道上的电子的运动[2]. 为了观测这种运动，我们必须对电子位置进行一连串测量，而且容许误差要小于轨道的平均半径 a. 我们可以想象用波长足够短（$\lambda \ll a$）的 X 射线来完成这样的测量. 然而，按照康普顿效应的规律，每个 X 射线光子同一个电子发生碰撞都会伴随有一次数量级为 $\hbar/\lambda$（$\gg \hbar/a$）的动量转移，

1) W. Heisenberg, Z. Physik **33** (1925) 879; M. Born 和 P. Jordan, Z. *Physik* **34** (1925) 858; M. Born, W. Heisenberg 和 P. Jordan, Z. *Physik* **35** (1926) 557; P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc. London* **A109** (1925) 642.

2) 这里所说的对观测可能性的限制是由事物的本质决定的，并不涉及实现这种观测会遇到的困难.

这样，我们希望观测的那个电子的运动就会受到一定的干扰。不难证明(见习题 2.1)，量子数 n 越小，这个干扰越大；具体说来，当电子处于最低轨道($n = 1$)上时，每次碰撞转移的平均能量至少会等于电离能。测量仪器对被观测系统的这种无法控制的干扰限制了我们测量电子轨道的精确度。在小量子数场合，这种干扰显得非常强，以致对轨道哪怕只作非常粗略的观测也注定要失败。既然没有任何实验能让我们断言氢原子中的电子确实是沿着一条精确的轨道运动，我们自然便可以毫无顾忌地抛弃掉轨道概念本身。换句话说，原子处在完全确定的能态上这一事实，并不一定意味着电子在每一时刻都具有完全确定的位置和动量[1]。

海森伯、玻恩和约当的矩阵力学抛弃了电子轨道的概念。这个理论只从原子发出辐射的频率和强度这些在物理上可观测的量出发，把每一个物理量同一个特定的矩阵联系起来，而且与普通代数中的量不同，这些矩阵遵从的是非对易代数[2]。这正是这种新力学不同于经典力学的关键。因此，一个量子化系统的动力学变量所满足的运动方程是一些矩阵之间的方程。按照对应原理，人们假定这些方程在形式上同对应的经典系统的(普通代数量之间的)方程完全一样。

薛定谔的**波动力学**[3]则从完全不同的另一个角度出发。这个理论开始于德布罗意关于物质波的工作[4]。为探求建立

---

1) 可以把这里的叙述与第一章末对夫兰克-赫兹实验的讨论对照一下。夫兰克-赫兹实验表明：认为轰击电子具有连续轨迹的看法与靶原子能级的量子化是不相容的。为承认这种量子化，我们不得不抛弃轨迹概念。

2) 矩阵的定义及其主要性质将在第七章和第八章中介绍。在那里我们将看到，矩阵与我们在后面(§ 11)将要遇到的线性算符有着密切的联系。

3) E. Schrödinger, *Ann. Physik* (4) **79** (1925) 361 和 489; **80** (1926) 437; **81**(1926)109.

4) L. de Broglie, *Nature* **112** (1923) 540; Thesis, Paris, 1924, *Ann. Physique* (10) **2** (1925).

物质和辐射的统一理论，德布罗意假设波粒二象性是微观客体的一个普遍属性，认为物质同光一样，也表现出波动和微粒两个方面的性质．在建立了微粒的动力学变量与对应的波动的特征量之间的对应关系之后，他用一种半定量的论证导出了玻尔-索末菲量子化定则．几年后，人们终于发现物质也有类似于波动光学中的衍射现象，从而非常直接地证实了德布罗意关于物质波动属性的推测．这一期间，薛定谔继承和推广了物质波的观念，发现了表述一个给定量子系统的波函数的传播方程，而且这个基本方程可以从对应经典系统的哈密顿量根据一条极其简单的对应规则导出．薛定谔方程是组成波动力学的基本要素．

薛定谔曾证明[1]，波动力学与矩阵力学是等价的．它们不过是能以非常普遍的形式加以表述的一种理论的两种特定形式．至于量子理论的这种普遍表述形式，则主要是由狄拉克建立的[2]．这样得到的量子理论是关于物质粒子的一个非相对论理论．这个理论再加上电磁场的量子理论[3]，才构成一个协调一致的完整理论，可以用于处理非相对论物质粒子同电磁场相互作用的一切问题．需要说明的是，对这个理论的诠释以及这个理论的内在协调一致，是在玻恩、海森伯和玻尔的工作出现[4]以后，才完全弄清楚．本书的主要篇幅将用于论述这

1) E. Schrödinger, *Ann, Physik* (4) **79** (1926) 734.

2) P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (Oxford, Charendon Press), *1st ed.* (1930), *4th ed.* (1958). (中译本：量子力学原理，陈咸亨译，喀兴林校，科学出版社，1979年.)

3) P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.* London *A*114 (1927) 243 和 710; P. Jordan 和 W. Pauli, *Z. Physik* **45** (1928) 151.

4) M. Born, *Z. Physik* **38** (1926) 803; W. Heisenberg, *Z. Physik* **43** (1927) 172; N. Bohr, *Naturwiss.* **16** (1928) 245; **17** (1929) 483 及 **18**(1930)73. 我们也可以在下列书中找到对这个理论的物理诠释的透彻讨论：W. Heisenberg, *The Physical Principles of the Quantum Theory* (*Chicago, University of Chicago Press*, 1930) 以及 (New

个理论的框架以及它的应用．在本书最后一部分，我们才会谈到相对论量子力学的问题，但那也只限于勾画一下电子的狄拉克相对论理论的轮廓[1]，和对量子场论作一初步介绍．

在量子理论的各种表述形式中，无疑以这种普遍表述形式最为雅致和最令人满意．然而，这种普遍表述形式要处理一套抽象的符号体系，极容易掩盖住物理实质．波动力学使用的是比较熟悉的波动语言和偏微分方程，因而更适合于初学者．此外，在量子理论的基本应用中，最常使用的也正是这种形式．这就是我们为什么要首先概括介绍波动力学的理由．本章中我们将先讨论物质波的概念，然后建立薛定谔方程并讨论它的一些主要性质．我们特别要说明如何用这个方程去确定稳定态的能级．为了加深对薛定谔方程的了解，我们专门用第三章来处理同一维量子系统有关的简单问题，导出了这类系统的几个重要性质．接着我们讨论量子理论诠释的一般问题，这正是第四章的内容．第五章专门论述波动力学表述形式，并按第四章中确定的那些原则对它作统计诠释．第六章讨论波动力学的经典近似．只是在全面介绍了用波动

(接上页)

York, Dover); N. Bohr, *Atomic Theory and the Description of Nature* (Cambridge University Press, Cambridge, 1934) (译自丹麦文).

这里说的诠释指的是哥本哈根学派的统计诠释，即本书所要讨论的那种诠释．它经过激烈的争论后终于已得到绝大多数物理学家的支持．不过，过去曾有(现在仍然有)一些人始终反对这种诠释，其中著名人物就有爱因斯坦、薛定谔和德布罗意．这场争论最后归结到这样一个深度，再也无法凭借进一步的实验观测来作决断．所以，这场争论其实已属于哲学范畴，不再属于通常的物理科学范畴了．关于这场争论的主要内容，请见 Albert Einslein, *Philosopher-Scientist*, P. A. Schilpp, editor,(New York, Tudor Publishing Company, 1949 *and* 1951)(尤其是玻尔和爱因斯坦的论文)；和 L. de Broglie, *La Théorie de la Mesureen Mécanique Ondulatoire* (Paris, Cauthier-Villars, 1957).

1) P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.* London **A117** (1928) 610 及 **A118** (1928) 351.

力学语言表述的量子理论之后，我们才最后介绍量子理论的普遍表述形式(第七、八章)。

I. 物 质 波

2. 引言

光的二重性——波动性和微粒性——是那些表明物理学中出现了量子这一事实的若干突出特征之一. 我们可以假定物质也具有这种二重性，也就是说，如同电磁波一样，每个物质粒子也都对应着一列波，而且这列波的角频率 ω 与粒子的能量 E 由关系式 $E = \hbar\omega$ 相联系. 如果接受这种观点，那么原子的行为就象它是一个有一系列分立的固有频率的谐振腔，从而也就能够解释原子能级的量子化.

这样一来，我们面前出现了建立一种统一理论的希望. 在这样一种统一理论中，我们可以把物质和辐射看成是同时具有波和微粒特点的同一类客体的两个不同变种. 我们在后面将会看到，德布罗意在他的物质波理论中遵循的这些假定后来全都被加以证实.

物质波的主要性质是在同光学作类比中得到的. 就象光子的情形一样，我们假定与一个粒子相联系的波在每一地点的强度值给出的是在该点找到这个粒子的几率. 粒子波定域得越精确，这种波所占有的区域就越小. 如果在时间进程中物质波始终保持在一个足够小的范围内，以致可以把它近似看成一个点，从而能够赋予粒子一种精确的运动，那么经典力学有效的条件就得到了满足. 在光学中当波长 λ 小到可以忽略时，也遇到类似的情况，这时我们可以采用**几何光学**近似，而觉察不到波动现象. 当光在其中传播的介质的光学性质在好几个波长范围基本上保持恒定不变($|\mathrm{grad}\ \lambda| \ll 1$)时，这种近

似就能成立. 这告诉我们,在没有电磁场,或者在变化非常慢的电磁场中,当我们不打算精确确定粒子的位置时,经典粒子理论就是正确的. 这种预言与关于原子及亚原子粒子在准静态场和近均匀场中运动的最常见的观测结果相一致; 这些观测结果是带电粒子在静电磁场中的轨迹,顺磁原子在斯特恩-盖拉赫磁铁中的偏转,等等. 在这些极限场合,物质波理论必须等价于经典理论(对应原理).

3. 自由波包　相速度和群速度

我们来考察物质波在一种均匀的、各向同性的介质中的传播. 最简单的物质波是平面单色波

$$e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)}, \tag{2.1}$$

它代表的是以恒定速度沿波矢 $\boldsymbol{k}$ 方向传播的波长为 $\lambda=\frac{2\pi}{k}$ 的振动. 这里所说的速度是等相面的传播速度,亦即相速度:

$$v_\varphi=\frac{\omega}{k}.$$

频率 ω 与 $\boldsymbol{k}$ 的方向无关,但可能最终依赖于这个矢量的长度. 因为任何波都可以视作平面单色波的叠加,借助关于"色散定律" $\omega(k)$ 的知识,我们足以确定任何一种波在时间进程中的行为.

按照假说,每一种频率 ω 都对应于粒子的一个确定能量:

$$E=\hbar\omega. \tag{2.2}$$

因此,把波(2.1)与具有能量 E 的平行于 $\boldsymbol{k}$ 方向的匀速直线运动联系起来便十分自然.

通过分析经典近似,我们可以把 $\boldsymbol{k}$ 与粒子的动量 $\boldsymbol{p}$ 联系起来. 而为了理解这种近似,则必须把这个粒子同一个局限

在有限范围内的波相联系。波（2.1）显然不满足这个条件。但是，我们可以把具有相邻波矢的若干平面波叠加起来而满足这个条件。这样就形成一个**波包**：

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \int f(\boldsymbol{k}') e^{i(\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}-\omega' t)} d\boldsymbol{k}'.$$

我们分别以 A 和 α 代表 f 的绝对值和位相。按照假说，A 只在 $\boldsymbol{k}$ 周围的一个小区域内有明显的数值。我们现在要考察一下，在什么意义上以及在什么条件下，我们可以把这个波包的“运动”比拟为一个经典粒子的运动。

为简单起见，我们首先处理一维波包的问题：

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(k') e^{i(k'x-\omega' t)} dk'.$$

我们设

$$\varphi = k'x - \omega' t + \alpha,$$

则 $\psi(x, t)$ 是函数 A 与一个振荡函数 $\exp(i\varphi)$ 乘积的积分；这里 A 在点 $k' = k$ 周围宽度为 Δk 的一个区域 S 内有一个显著的峰值。如果 $\exp(i\varphi)$ 在这个区域内的振荡数很大，则区域不同部分对积分的贡献相互干涉而抵消，ψ 可以忽略不计。当位相 φ 在 S 内实际上保持不变，即 $d\varphi/dk \approx 0$ 时（记号 d/dk 表示函数对 k' 的导数当 $k' = k$ 时的值），ψ 将有最大（绝对）值。大致说来，仅在 $\exp(i\varphi)$ 只振荡一次或振荡不到一次的地方，也就是说，在

$$\Delta k \left|\frac{d\varphi}{dk}\right| \leqslant 1$$

的地点，ψ 才有明显的数值。又因为

$$\frac{d\varphi}{dk} = x - t\frac{d\omega}{dk} + \frac{d\alpha}{dk},$$

所以波 $\psi(x, t)$ 实际上集中在一个称为“波包中心”周围宽度为

$$\Delta x \simeq \frac{1}{\Delta k}$$

的区域内，而这个波包中心则由条件 $d\varphi/dk = 0$，即由

$$x = t\frac{d\omega}{dk} - \frac{d\alpha}{dk}$$

确定．这个波包中心以匀速行进，其速度

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \tag{2.3}$$

称为波 $\exp[i(kx - \omega t)]$ 的群速度．在波包大小可以忽略的经典近似下，不是相速度 v_φ，而正是这个群速度 v_g 必须等同于粒子的速度

$$v = \frac{dE}{dp}\left(\text{在非相对论近似下} \approx \frac{p}{m}\right).$$

由条件 $v = v_g$ 和关系式 (2.2) 我们能得到德布罗意关系[1]：

$$p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}. \tag{2.4}$$

上面的处理不难推广到三维波包．这时，波包中心以速度

$$\boldsymbol{v}_g = \mathrm{grad}_{\boldsymbol{k}}\omega$$

作匀速运动．群速度必须等于粒子的速度：

$$\boldsymbol{v} = \mathrm{grad}_{\boldsymbol{p}}E.$$

结合关系式 (2.2)，根据这个条件就推出了粒子的动力学变量与相应的波的特征量之间的下述关系[2]：

---

1) 严格说来，由这两个条件确定的 k 与 p 的函数关系还留下一个相加常数未确定．但是我们可以根据这个关系与行进方向无关的事实，把行进方向选为坐标轴来定这个常数．

2) 我们也是在相差一个常矢量的意义上导出了(2.5)式中第二个关系式的．把坐标轴转动下的不变性条件加于这个关系式，就可以选定这个常矢量等于零(见上条脚注)．

$$E = \hbar\omega,\ \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}. \tag{2.5}$$

这两个关系式同光子场合的关系式(1.4)完全一样.

在结束本节前，我们再来从相对论原理的观点考察一下上面的结果.

在非相对论近似下，能量 E 只能确定到允许相差一个常数. 改变能量标度的零点，结果会给频率 $\omega(k)$ 加上一个常数频率 ω_0 [(2.2)式]，以及在函数 $\phi(\boldsymbol{r}, t)$ 上乘上一个相因子 $\exp(-i\omega_0 t)$. 这绝不会影响上面关于波包运动的结果和所导出的关系式 (2.5).

然而，上面的处理方式却同非相对论近似毫无关系. 相对论原理允许我们肯定地确定能量 $E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$ 以及与之对应的频率 ω. 能量 E 和动量 $\boldsymbol{p}$ 分别是同一个四维矢量的时间分量和空间分量 (约定 $c = 1$)；频率 ω 和波矢 $\boldsymbol{k}$ 也是如此. 关系式 (2.5) 的确是满足相对论原理的：四维矢量 $(E, \boldsymbol{p})$ 与 $(\omega, \boldsymbol{k})$ 成正比.

4. 慢变场中的波包

上面的结果，特别是关系式 (2.5)，可以推广到粒子在慢变场中运动的情形. 当场的变化在波长尺度内可以忽略时，经典近似条件可以得到满足.

这时的传播规律是几何光学的规律. 具体说来，一个如我们在上一节中研究过的范围有限的波包，将以等于群速度的速度沿着光线的轨迹行进. 为了把这个波包的运动与一个经典粒子的运动联系起来，我们必须要求：

(a) 与(角)频率 ω 对应的光线同具有能量 $E = \hbar\omega$ 的经典轨迹完全一样；

(b) 沿每一条光线的群速度等于对应的经典粒子的速度.

经典粒子的轨迹由最小作用量原理(1.12)给出. 对于固定能量 E,按照(1.13)式,拉格朗日量为 $\boldsymbol{p}\cdot\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}-E$,于是最小作用量原理可写为

$$\delta I_{12}\equiv\delta\int_{M_1}^{M_2}\boldsymbol{p}\cdot d\boldsymbol{r}=0.$$

这个式子表示这样一个事实,即沿连结点 M_1 和 M_2 的一条曲线算出的积分,只有当这条曲线是粒子从 M_1 到 M_2 的真正轨迹时,才是稳定的. 在最普遍的情况下,动量 $\boldsymbol{p}$ 是位置 $\boldsymbol{r}$ 和速度 $\boldsymbol{v}=\frac{d\boldsymbol{r}}{dt}$ 的函数,换句话说,它是粒子在这条曲线上位置以及曲线在该点切线方向的函数. 在一个非相对论粒子处于标势 $V(\boldsymbol{r})$ 中的情形,

$$E=\frac{p^2}{2m}+V(\boldsymbol{r})\ \text{和}\ \boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v},\qquad(2.6)$$

这里动量与速度平行($\boldsymbol{p}/\!/d\boldsymbol{r}$). 然而在更普遍的情形,比如粒子处于磁场中时,尽管不存在这个条件[1],最小作用量原理也仍然成立.

对于一个给定的固定频率,几何光学的光线是由另一个变分原理即费马原理确定的. 费马原理可写作

$$\delta J_{12}\equiv\delta\int_{M_1}^{M_2}\boldsymbol{k}\cdot d\boldsymbol{r}=0;$$

其中$\boldsymbol{k}$是波矢. 沿着连结点 M_1 和 M_2 的一条曲线算得的积分 J_{12} 代表的是沿那条曲线的光程. 费马原理表示的是这样一个事实: 连结点 M_1 和 M_2 的光线是其光程为最短的那条曲线. 一般说来,$\boldsymbol{k}$(垂直于等相面)是这条曲线上位置和曲线

1) 我们知道,一个粒子的动量(即线性动量)是一个矢量,它的三个分量是三个位置坐标的拉格朗日共轭动量. 动量有时但并不总是等于粒子的速度与质量的乘积.

在该点斜率的函数. 在各向同性介质中，相速度与方向无关，波矢 $\boldsymbol{k}$ 沿着曲线的切线方向，它的长度 $k=\frac{2\pi}{\lambda}$ 只依赖于曲线上的位置而不依赖于传播方向. 不过，费马原理对于各向异性介质也同样适用.

值得注意的是，这两个变分原理在形式上完全相似. 为了让与频率 ω 相联系的光线同具有能量 E 的经典轨迹重合一致 [条件 (a)]，只需要求 $\boldsymbol{k}$ 与 $\boldsymbol{p}$ 成正比:

$$\boldsymbol{p}=\alpha\boldsymbol{k}.$$

比例常数 α 由条件 (b) 确定. 群速度 $\boldsymbol{v}_g$ 是频率 ω 对 $\boldsymbol{k}$ 的梯度，因此

$$\boldsymbol{v}_g=\frac{1}{\hbar}\operatorname{grad}_{\boldsymbol{k}}E=\frac{\alpha}{\hbar}\operatorname{grad}_{\boldsymbol{p}}E.$$

至于粒子的速度，它由公式

$$\boldsymbol{v}=\operatorname{grad}_{\boldsymbol{p}}E$$

给出. 若 $\alpha=\hbar$，这两个速度就彼此相等.

在一个非相对论粒子处于慢变标势 $V(\boldsymbol{r})$ 中的情形，物质波是在一种各向同性介质中行进，其波长 λ 由关系式

$$\lambda=\frac{h}{p}=\frac{h}{\sqrt{2m(E-V(r))}} \tag{2.7}$$

给出[见等式 (2.6)].

5. 原子能级的量子化

利用物质波理论能够非常直接地导出原子能级的量子化.

为明确起见，我们仍考虑氢原子. 考察能量为 E 的一个椭圆轨道. 波矢 $\boldsymbol{k}$ 在轨道上每一点的值都由关系式 (2.5)给出. 物质波在轨道上某一点的位相则是每转一周增加

$$\oint \boldsymbol{k} \cdot d\boldsymbol{r}.$$

为能建立起驻波，这个位相必须是 2π 的整数倍. 这样就导出了量子化条件：

$$\oint \boldsymbol{p} \cdot d\boldsymbol{r} = \hbar \oint \boldsymbol{k} \cdot d\boldsymbol{r} = nh. \quad (n \text{ 为大于零的整数})$$

使用第一章中的记号，这个条件也可写为

$$\oint p_r dr + \int p_\varphi d\varphi = nh.$$

作同样的论证，便可以导出所有周期运动的和多周期运动的玻尔-索末菲量子化规则.

当然，上面的结果只在几何光学近似下才成立，这时波长和波矢的概念才有意义. 尤其是，我们不能断言，在小量子数时仍然有这种样子的量子化条件. 唯一能肯定的只是能量的量子化，因为它是与建立驻波的要求密不可分的.

为处理更普遍的情况，我们必须象在经典光学里从几何光学过渡到波动光学那样[1] 来把这个近似理论加以推广：在假定物质波存在以后，我们还必须找到它们的传播方程. 在讨论这个问题之前，我们先来考察一下怎样才能——事实上已经做到——用实验揭示出物质的波动性，尽管物质的微粒概念也绝不能抛弃.

6. 物质波的衍射

观测物质波衍射能否实现，这显然取决于所研究对象的波长. 当采用宏观客体时，相应的波长通常都非常小，以致实际上探测不到典型的波动效应. 但是，如果观测的是原子尺度的客体，那就有可能得到波长同 X 射线差不多的波束，用它

1) 所以这个理论叫做波动力学.

来产生类似晶格衍射那样的效应[1].

物质波的第一批衍射实验是戴维孙-革末(1927)、汤姆孙(1928)和鲁普(1928)等人利用电子进行的.

戴维孙和革末利用在单晶上的反射来做这项工作，观测到了劳厄斑. 汤姆孙和鲁普则利用一块薄的多晶靶所产生的衍射得到了德拜-谢乐环，并对这些衍射环进行了研究.

在这些实验中，入射束是在一个电势中加速电子得到的. 若 E 是以电子伏为单位的电子能量，则以埃为单位的德布罗意波长就是

$$\lambda = \frac{12.2}{\sqrt{E\,(\text{电子伏})}}\ \text{埃},$$

人们发现，当能量处在 1 到 100 千电子伏范围时，相应的波长就正好在通常的晶格谱学范围内. 若已知晶格点阵参数，我们就能从干涉图样推出电子波长的实验值. 德布罗意的理论值同实验值符合得相当好.

利用具有单一能量的氦原子束和氢分子束也完成了类似的晶格衍射实验(斯特恩，1932)，再一次验证了德布罗意关系. 这里的波长是与束中每个原子或分子的重心运动相联系的波长. 利用由核反应堆得到的慢中子束同样能作这样的观测. 所有这些实验都清楚地表明，不只是电子才有类似的波结构，实际上，我们遇到的是物质客体的一个十分普遍的性

---

1) 为明确起见，让我们考虑一个用以显示布朗运动的粒子. 这类粒子直径最小是 1 微米左右，质量最小是

$$M = 10^{-12}\ \text{克}.$$

在通常温度的热平衡状态下，这些粒子的平均动能约为 0.4×10^{-13} 尔格，由此可求得平均波长

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3MKT}} \simeq 5 \times 10^{-6}\ \text{埃}.$$

而当能量相同时，一个氦原子对应的波长 $\lambda \approx 0.9$ 埃，对于中子是 $\lambda \approx 1.9$ 埃，对于电子是 $\lambda \approx 77$ 埃.

质.

7. 物质的粒子结构

物质波与经典波动光学之间既然有这种相似性，人们不竟要问，我们是否可以干脆抛弃物质的微粒观念，而用一种波动理论来代替这种经典理论呢？在这种波动理论中，物质波 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 将扮演在辐射理论中电磁辐射所扮演的角色.

如果能够这样做，物质的微粒图象，即能量和动量的局域化颗粒的图象，就会被一种能量和动量都具有连续分布的连续波图象所代替. 经典力学中的粒子于是就是具有有限大小、但又可以忽略的波包. 正如上面证明的，这些波包在一定条件下服从经典粒子的运动规律，而这些条件恰好就是经典力学表明是正确的那些条件. 尽管如此，即使没有场存在，一个波包也无法永远维持这种粒子外貌，因为它在移动过程中会逐渐扩展开来，最后，经过足够长时间后，它将会占据任意大的空间区域(见习题 2.6)[1]. 由此可见，在纯粹波动图象下，我们难以解释物质为什么经常会以局域性很好的粒子形式出现.

不过，这样一种纯粹波动理论站不住脚，只要仔细分析物质波的衍射实验便能明白. 例如我们考察一束穿过多晶箔的单能电子，在箔的另一侧适当位置安放一个屏. 这时我们在屏上能观测到由透射波产生的一个中心斑，以及它周围由衍射波产生的一些同心环. 为明确起见，我们假定入射波是一个在空间上受到限制的波包 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$，这可以在光阑 D 后面放一个单能量的强阴极射线源 S 而得到（图 2.1）. 光阑 D 是用一个一直打开的快门做成的. 当波穿过箔 C 时，它分成透射波

1) 波包会无限扩展这条极其普遍的规则的一个例外是谐振子(见第六章).

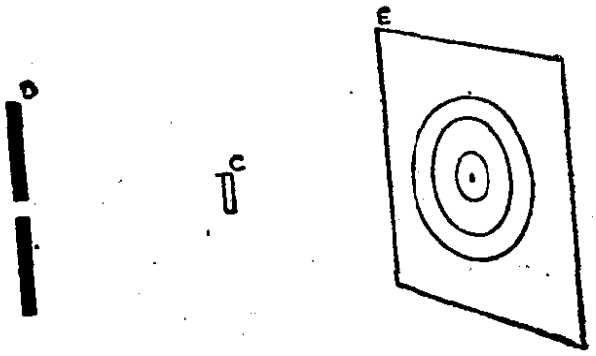

图 2.1　多晶箔对电子的衍射．从电子源 S 发生的电子束经光阑 D 准直后被多晶箔 C 衍射．在屏 E 上能观测到衍射图样．

和衍射波两部分，并在屏上形成上述干涉图样．由于假定了电子束是一列连续的经典波，因此观测到的干涉图样也必须是连续的．如果降低入射波的强度（例如增加电子源 S 与光阑 D 之间的距离），则应当观测到干涉斑点强度随之减小，而干涉图样仍然是连续的．然而实验表明情况并非如此．我们观测到的图样实际上是由一个一个局域很小的撞击点组成．减小波的强度会成比例地减小这些撞击点的数目．在强度非常小时，我们甚至会观测到单个的撞击点，它们要么打在中心斑点处，要么打在一个衍射环上．对这种现象的最简单解释，是认为每一个撞击点都是由穿过来的一个物质微粒（电子）击中造成的．

值得注意的是，这里描述的情况与第一章中讨论光被光栅衍射的实验完全对应．把这种对应性坚持到底我们就能得出结论：对波粒二象性的最简单的解释是统计解释，即物质波在屏上每一点的强度给出了粒子撞击在该点处的几率．

8. 波粒二象性的普遍性

从以上所有说明我们可以引出一条结论：微观客体有一种十分普遍的性质，也就是，它们能以两种显然彼此不相容的面貌出现．它们要么表现为波动性，显示出波动特有的叠加

性质；要么表现为粒子性，就象是能量和动量都被局域的微粒．这两个方面之间存在着一个普适关系式，即由(2.5)式给出的那个关系式．此外，把微粒和相应的波联系起来的是一种统计联结，这个问题以后还要作更详细的讨论．

II. 薛定谔方程

9. 物质粒子数守恒定律

到此为止我们所讲的一切，全都说明物质和光之间存在着明显的相似．然而，物质和光还有一点重要的区别．即使在最简单的情况下，光子的数目在时间进程中也有可能通过发射或吸收而发生变化．可是，电子的数目，或者更普遍些，基本的物质粒子的数目，却始终保持不变．只要分析一下原子物理中那些最常见的现象，便不难理解这一点；而量子力学处理粒子系统非常成功这一事实，也会证实粒子数守恒这条重要定律的正确性．

其实，我们这里谈的并不是一条绝对成立的守恒定律，物质和光之间的差异并不象我们刚才说过的那样绝对．在正电子(一种与电子质量相同，但带相反电荷的粒子)发现以后(安德森，1932)，人们知道在某些情况下有可能产生出电子-正电子对(发射物质)；反过来，当一个电子和一个正电子发生碰撞时，则能够发生湮灭(吸收物质)，并以辐射形式放出能量．按照质量和能量等效定律，产生电子-正电子对所需要的能量至少必须等于 $2mc^2$(≈ 1 兆电子伏)．原子核的 β 衰变是又一种发射电子(或正电子)的方式．如果只限于讨论原子物理现象，这时不出现正电子，原子核是稳定的，而能量交换总是在产生电子-正电子对的阈能以下，上述粒子数守恒定律就总是成立的．下面我们只讨论这种情况．

粒子数守恒定律极大地促进了物质量子理论的发展和诠释。我们讨论的各种各样量子系统都是由数目确定的物质粒子组成的。最简单的系统是只有一个粒子的系统，例如在外力场中的一个电子。在每一时刻 t 与这个粒子相联系的物质波是这个粒子的位置坐标的一个函数 $\Psi(r, t)$。氢原子是有一个电子和一个质子的二粒子系统，电子和质子之间存在着相互作用。相应的物质波 $\Psi(r_e, r_p, t)$ 依赖于这两个粒子的位置坐标 r_e 和 r_p。更复杂的原子由电荷为 Ze 的一个原子核和 Z 个电子组成，前者的位置由 R 确定，后者的位置分别由矢量 $r_1, r_2, \cdots, r_Z$ 确定。相应的波是某个函数 $\Psi(R, r_1, r_2, \cdots, r_Z, t)$。我们还能类似地确定更复杂系统的波函数。

10. 波动方程的必要性及加于这个方程的条件

我们曾经看到，与一个粒子相联系的波在一个给定地点和一个给定时刻的强度给出了在该地点找到该粒子的几率。按更普遍的说法，我们认为一个量子系统的波函数 Ψ 完全决定了该系统的动力学状态；我们就一个系统在给定时刻 t 的性质所能作出的所有预言，全都可以由该时刻的 Ψ 的知识推得。因此，这个理论的核心问题如下：已知某一初始时刻 t_0 的波函数，设法确定以后各时刻的波函数。为了做到这一点，我们必须要知道波 Ψ 的传播方程。

十分显然，这个方程无法靠演绎推理导出。象数学物理中的所有方程一样，这个方程只能靠假定得到，而它的正确性又只能靠把它的预言同实验结果相比较获得成功而加以验证。尽管如此，倘若我们希望维持前面对 Ψ 所作的诠释，那么选择波动方程也要遵循一些先决条件：

（A）波动方程必须是线性齐次方程。只有这样，物质波

才具有作为一般波的特征的叠加性质：若 Ψ_1 和 Ψ_2 是方程的解，则这两个函数的任何线性组合 $\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2$ 也必是方程的一个解。

（B）波动方程必须是**对时间的一阶**微分方程。只有这样，一旦指明了初始时刻的 Ψ，Ψ 在以后时间的变化才被唯一确定。加上这个条件是为了同我们的假定一致：一旦 Ψ 被给定，有关物理系统的动力学状态就被完全确定。

此外，这个理论的预言在经典力学有效的领域还必须同经典力学的预言相一致。换句话说，在几何光学近似成立的条件下，由波动方程必须能导出德布罗意理论中那样的波包运动规律。这暗示我们，这个波动方程在形式上应该同经典力学的某些方程相似(对应原理)。

在考虑到这些限制以后，我们十分自然地得到的就是薛定谔方程。在作这样的论证之前，我们先引入一个以后非常有用的数学概念，即算符。

11. 算符概念

我们来考虑函数 $\partial\Psi/\partial t$，它是 Ψ 对时间的导数。我们可以说，算符 $\partial/\partial t$ 作用在函数 Ψ 上产生了函数 $\partial\Psi/\partial t$。在普遍情况下，如果对于一个函数空间中的每一个函数 Ψ，某一个算符都能让我们在该空间中找出一个且只有一个确定的函数 Ψ' 与之相对应，我们则说 Ψ' 是这个算符 A 作用在函数 Ψ 上得到的，并写成

$$\Psi' = A\Psi.$$

按照定义，如果算符 A 作用在这个函数空间中两个函数的一个常系数(复数)线性组合上而得到

$$A(\lambda_1\Psi_1 + \lambda_2\Psi_2) = \lambda_1(A\Psi_1) + \lambda_2(A\Psi_2),$$

则称 A 是线性算符。

关于作用在单粒子波函数

$$\Psi \equiv \Psi(\boldsymbol{r}, t) = \Psi(x, y, z, t)$$

上的那些线性算符，我们可以举出：

1）微分算符 $\partial/\partial x$，$\partial/\partial y$，$\partial/\partial z$，$\partial/\partial t$，上面已经谈到过它们的作用。

2）形如 $f(\boldsymbol{r}, t)$ 的算符，它的作用是使函数 Ψ 乘上函数 $f(\boldsymbol{r}, t)$。

从一定数目的线性算符出发，通过下列代数运算可以构成新的线性算符：

a）常数 c 乘算符 A：

$$(cA)\Psi \equiv c(A\Psi);$$

b）两个算符 A 与 B 之和 $S = A + B$：

$$S\Psi \equiv A\Psi + B\Psi;$$

c）算符 B 被算符 A 相乘的乘积 $P = AB$：

$$P\Psi \equiv AB\Psi \equiv A(B\Psi).$$

需要注意的是，与两算符之和不同，**两个算符之积不是可对易的**。这里体现了线性算符代数与普通代数之间的一个非常重要的差别。乘积 AB 不一定与乘积 BA 相同。在第一种场合，B 先作用在函数 Ψ 上，然后 A 再作用在函数 $(B\Psi)$ 上，这样得到最后结果；在第二种场合，A 和 B 调换作用顺序。这两个量之差 $AB - BA$ 称为 A 和 B 的**对易子**，用记号 $[A, B]$ 来表示：

$$[A, B] \equiv AB - BA. \tag{2.8}$$

如果这个差等于零，则称这两个算符对易：

$$AB = BA.$$

作为一对不对易算符的例子，我们举出算符 $f(x)$（即乘以函数 $f(x)$）和微分算符 $\partial/\partial x$。的确，对于任意 Ψ，我们有

$$\frac{\partial}{\partial x} f(x)\Psi = \frac{\partial}{\partial x}(f\Psi) = \frac{\partial f}{\partial x}\Psi + f\frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

$$= \left(\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi.$$

换句话说，

$$\left[\frac{\partial}{\partial x},\ f(x)\right] = \partial f/\partial x. \tag{2.9}$$

特别是，我们有

$$\left[\frac{\partial}{\partial x},\ x\right] = 1. \tag{2.10}$$

然而，象 $\partial/\partial x$，$\partial/\partial y$，$\partial/\partial z$，$\partial/\partial t$ 这样一些微分算符，它们之中的任何一对都是对易的.

由线性算符的和与积构成一个线性算符的典型例子是拉普拉斯算符：

$$\Delta \equiv \text{div grad} \equiv \nabla \cdot \nabla \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

我们可以把它看作一个矢量算符即梯度

$$\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x},\ \partial/\partial y,\ \partial/\partial z\right)$$

与自身的标积.

12. 自由粒子的波动方程

由物质波理论能确切地导出自由粒子的波动方程（在非相对论近似下）. 确实，自由粒子的物质波 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ 是许多频率为 $E/\hbar$、波矢为 $\boldsymbol{p}/\hbar$ 的单色平面波的叠加：

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \int F(\boldsymbol{p}) e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)/\hbar} d\boldsymbol{p}, \tag{2.11}$$

而这些平面单色波的频率与波矢则满足如下把一个质量为 m

的粒子的能量和动量联系起来的关系式:

$$E = p^2/2m. \tag{2.12}$$

对(2.11)式两边取偏导数(我们不讨论收敛性问题，因为在这里我们无须关心数学上的严格性)，我们便依次得到

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\boldsymbol{r}, t) = \int E F(\boldsymbol{p}) e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)/\hbar} d\boldsymbol{p}, \tag{2.13}$$

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(\boldsymbol{r}, t) = \int \boldsymbol{p} F(\boldsymbol{p}) e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)/\hbar} d\boldsymbol{p}, \tag{2.14}$$

$$-\hbar^2 \Delta \Psi(\boldsymbol{r}, t) = \int p^2 F(\boldsymbol{p}) e^{i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - Et)/\hbar} d\boldsymbol{p}. \tag{2.15}$$

根据关系式(2.12)，(2.13)式积分号下的表达式与(2.15)式积分号下的表达式成比例，因此，两个积分本身也只相差同样的比例因子;结果得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\boldsymbol{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\boldsymbol{r}, t). \tag{2.16}$$

这就是一个自由粒子的薛定谔方程，它满足条件(A)和(B)．从得出这个方程的过程可以知道，它也满足对应原理的要求．的确，同经典力学在形式上的相似已经体现出来了：在一定意义上说，方程(2.16)是经典方程(2.12)过渡到量子力学的形式;在量子语言中，能量和动量是按对应规则

$$E \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \qquad \boldsymbol{p} \to \frac{\hbar}{i} \nabla \tag{2.17}$$

由作用在波函数上的微分算符表示的．于是，量 $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ 就由算符

$$-\hbar^2 \Delta \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

表示．

方程(2.16)与导出它的关系式(2.12)一样，显然不满足相

对论原理．然而，德布罗意理论却不受这个限制．为了得到自由粒子的相对论方程，我们可以用符合相对论的能量和动量之间的关系式代替(2.12)式，再重复以上的论证．看看关系式 $E=\sqrt{p^2c^2+mc^2}$，它显然不适用，因为其中出现了平方根．为避免这个困难，我们可以改用关系式

$$E^2=p^2c^2+m^2c^4. \tag{2.18}$$

由此得到如下方程：

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi=-\hbar^2c^2\Delta\Psi+m^2c^4\Psi.$$

使用达朗伯算符

$$\Box\equiv\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}-\Delta,$$

这个方程可以写成

$$\left[\Box+\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\Psi(r,t)=0. \tag{2.19}$$

同(2.16)式与方程(2.16)之间存在着对应关系一样，(2.18)式与方程(2.19)之间也存在着同样形式的对应关系．

方程(2.19)称为克莱因-戈登方程，它在相对论量子理论中起着重要作用．这个方程不满足判据(B)，所以，如果不对Ψ重新作出物理解释，就无法把它当作波动方程接受下来．实际上，一列波能够代表一个且仅代表一个粒子的动力学状态这件事，只有在非相对论极限下，亦即只有在满足粒子数守恒定律的前提下，才是充分证实了的．因此，从现在起，我们后面只限于寻找非相对论波动方程．

13. 标势中的粒子

为了构造一个位于势 $V(r)$ 中的粒子的波动方程，我们先在“几何光学近似”条件下进行论证，寻找一个按德布罗意

理论运动的波包 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ 的传播方程。

这个波包中心行进的方式类似一个经典粒子，它的位置、动量和能量分别记为 $\boldsymbol{r}_{\mathrm{Cl.}}$，$\boldsymbol{p}_{\mathrm{Cl.}}$ 和 $E_{\mathrm{Cl.}}$。这三个量之间满足关系式

$$E_{\mathrm{Cl.}} = H(\boldsymbol{r}_{\mathrm{Cl.}}, \boldsymbol{p}_{\mathrm{Cl.}}) = \frac{p_{\mathrm{Cl.}}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}_{\mathrm{Cl.}}), \tag{2.20}$$

式中 $H(\boldsymbol{r}_{\mathrm{Cl.}}, \boldsymbol{p}_{\mathrm{Cl.}})$ 是经典哈密顿量。我们假定 $V(\boldsymbol{r})$ 不显含时间（守恒系统），虽然这个条件对目前的论证并非绝对必要。这样，$E_{\mathrm{Cl.}}$ 在时间上就保持不变，而 $\boldsymbol{r}_{\mathrm{Cl.}}$ 和 $\boldsymbol{p}_{\mathrm{Cl.}}$ 是 t 的完全确定的函数。在这里所考虑的近似条件下，$V(\boldsymbol{r})$ 在波包大小数量级的区域内实际上保持不变，因此有

$$V(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r}, t) \approx V(\boldsymbol{r}_{\mathrm{Cl.}})\Psi(\boldsymbol{r}, t). \tag{2.21}$$

另一方面，如果我们只涉及足够短的时间间隔，让 $\boldsymbol{p}_{\mathrm{Cl.}}$ 的相对变化可以忽略，那么就可以认为 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ 是(2.11)类型的平面波的叠加，而且这些平面波的频率都在 $E_{\mathrm{Cl.}}/\hbar$ 邻近，波矢量都接近 $\boldsymbol{p}_{\mathrm{Cl.}}/\hbar$。因而

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r}, t) &\approx E_{\mathrm{Cl.}}\,\Psi(\boldsymbol{r}, t), \\ \frac{\hbar}{i}\nabla\Psi(\boldsymbol{r}, t) &\approx \boldsymbol{p}_{\mathrm{Cl.}}(t)\Psi(\boldsymbol{r}, t). \end{aligned} \tag{2.22}$$

取后一式的散度，得

$$-\hbar^2\Delta\Psi(\boldsymbol{r}, t) \approx p_{\mathrm{Cl.}}^2\Psi(\boldsymbol{r}, t). \tag{2.23}$$

结合关系式(2.21)，(2.22)和(2.23)，并利用(2.20)式，我们得到

$$\begin{aligned} &i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi + \frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi - V\Psi \\ &\approx \left(E_{\mathrm{Cl.}} - \frac{p_{\mathrm{Cl.}}^2}{2m} - V(\boldsymbol{r}_{\mathrm{Cl.}})\right)\Psi \approx 0. \end{aligned}$$

波包 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ 必须满足(至少近似地)我们正在寻找的那个波动方程。这样，我们自然就把这个方程当作是一个在势场中的粒子的波动方程。我们还认定在普遍情况下，甚至在"几何光学"近似条件不成立时，波 Ψ 也满足这个方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r}, t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})\right)\Psi(\boldsymbol{r}, t). \quad (2.24)$$

这就是一个在势 $V(\boldsymbol{r})$ 中的粒子的薛定谔方程。

14. 电磁场中的带电粒子

在更普遍的情形，或者标势 $V(\boldsymbol{r})$ 是时间的显函数，或者一个带有电荷 e 的粒子在一个矢势为 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$、标势为 $\varphi(\boldsymbol{r}, t)$ 的电磁场中运动的情形，我们也可以重复上面的论证。在后一种场合，我们必须用关系式

$$E=\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)\right)^2+e\varphi(\boldsymbol{r}, t) \quad (2.25)$$

代替关系式(2.20)(见习题 1.4)。在"几何光学"近似下考察波包的行为，我们能得到如下的波动方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r}, t)$$

$$=\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+e\varphi\right]\Psi(\boldsymbol{r}, t). \quad (2.26)$$

这就是一个在电磁场中的带电粒子的薛定谔方程[1]。

---

1) 在方程(2.26)的右边，算符 $\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2$ 是矢量算符 $\left(\frac{\hbar}{i}\nabla-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)$ 与它自身的标积，换句话说，它作用在 Ψ 上得到的函数是表达式

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{e}{c}A_x\right)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}-\frac{e}{c}A_x\right)\Psi$$

$$\equiv-\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-\frac{e\hbar}{ic}\left(A_x\frac{\partial\Psi}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial x}(A_x\Psi)\right)+\frac{e^2}{c^2}A_x^2\Psi$$

与另两个分别用 y 和 z 代替上式中 x 而得到的表达式之和，即

方程(2.24)和(2.26)是方程(2.16)的推广，对方程(2.16)所作的那些说明全都适用于这两个方程．这两个方程的确是线性、齐次、对时间的一阶偏微分方程[条件(A)和(B)]．此外，它们也可以分别从(2.20)和(2.25)式按照(2.17)式规定的对应关系推出。

15. 由对应性构造薛定谔方程的普遍规则

推广前面介绍的对应操作，我们可以拟出构造薛定谔方程的一套系统的方法，让它适用于最普遍的系统.

考虑一个经典动力学系统，它的哈密顿量为 $H(q_1,\cdots,q_R;\ p_1,\cdots,p_R;\ t)$．这个函数依赖于该系统在位形空间中的坐标 $q_1,\cdots,q_R$，这些坐标各自对应的动量 $p_1,\cdots,p_R$，以及时间 t．这个系统的总能量 E 是

$$E = H(q_1,\cdots,q_R;\ p_1,\cdots,p_R;\ t). \qquad (2.27)$$

与这个经典系统相对应有一个量子系统，它的动力学状态由**在位形空间中定义**的一个波函数 $\Psi(q_1,\cdots,q_R;\ t)$ 来表示．这个系统的波动方程可以用如下方法得到：在(2.27)式两边作替换

$$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t},\quad p_r \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_r}\quad (r=1,\ 2,\cdots,\ R),$$

然后把等号两边的量当作算符写下来，让它们分别作用在 Ψ 上给出完全相同的结果．这样得到的方程就是对应的量子系统的薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(q_1,\cdots,q_R;\ t)$$

(接上页) $-\hbar^2\triangle\Psi - 2\frac{e\hbar}{ic}(\boldsymbol{A}\cdot\nabla\Psi) + \left(-\frac{e\hbar}{ic}\mathrm{div}\boldsymbol{A} + \frac{e^2}{c^2}\boldsymbol{A}^2\right)\Psi.$

在运用算符时我们必须注意，算符 ∇ 的分量与算符 $\boldsymbol{A}$ 的分量一般不能彼此对易.

$$= H\left(q_1, \cdots, q_R; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_1}, \cdots, \right.$$

$$\left.\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_R}; t\right)\Psi(q_1, \cdots, q_R; t). \qquad (2.29)$$

算符 $H\left(q_1, \cdots, q_R; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_1}, \cdots, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_R}; t\right)$称为所考虑系统的哈密顿算符.

值得注意的是，上述对应规则并未能唯一地确定薛定谔方程. 这里尚有两个不确定因素.

第一个不确定因素在于，这种对应规则在位形空间中作坐标变换时不是不变的. 为说明这一点，我们考虑在二维空间中一个自由粒子的简单情况. 根据笛卡儿坐标中的经典哈密顿量

$$\frac{p_x^2 + p_y^2}{2m},$$

我们导出的是方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, y; t)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\Psi(x, y; t).$$

我们作坐标变换过渡到极坐标 (r, φ)，通过直接计算能得到把波函数表示为这些新坐标的函数所满足的下述方程:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r, \varphi; t)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right)\Psi(r, \varphi; t).$$

可是，如果我们直接把对应规则 (2.28) 用于极坐标下的哈密顿量

$$\frac{1}{2m}\left(p_r^2+\frac{p_\varphi^2}{r^2}\right),$$

则得到的是另一个不同的微分方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,\varphi;t)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\Psi(r,\varphi;t).$$

为了避免这种不确定性，我们约定：如果坐标 q 不是笛卡儿坐标，就不使用规则 (2.28)[1]。

第二个不确定因素在于，规则 (2.28) 是让服从普通代数规则的量用并非全都彼此对易的算符来代替。结果，经典哈密顿量的不同的等价形式可能会对应于不同的哈密顿算符。例如，相应于动能的两种等价表示(在一维问题中)

$$\frac{p^2}{2m}\text{ 和 }\frac{1}{2m}\frac{1}{\sqrt{q}}pqp\frac{1}{\sqrt{q}},$$

分别存在着两个对应的算符：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}\text{ 和 }-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\sqrt{q}}\frac{\partial}{\partial q}q\frac{\partial}{\partial q}\frac{1}{\sqrt{q}}\right)$$

$$\equiv-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial q^2}+\frac{1}{4q^2}\right),$$

两者之间相差一个量 $\hbar^2/8mq^2$。

根据与经典力学的对应关系而建立的任何规则都无法解决这种不确定性，因为后者来自算符的不对易性，而这种不对

---

1) 这个约定并不是随意设想出来的。它能自动保证在坐标轴转动下薛定谔方程形式的不变性。事实上，我们可以通过在位形空间中采用适当度规和把(2.28)式中的算符 $\partial/\partial q$ 用协变导数代替的办法来除去这个限制，从而把对应规则用协变形式来表述。关于这方面的论述请见 Brillouin, L., *Les Tenseurs en Mêchanique et en Elasticité* (Paris, Masson, 2*nd. ed*, 1949)第 200 页;亦见 (*New York, Dover*, 1946)。

易性又是同 $\hbar$ 的有限性和非零特征联系着的。因此，人们必须凭经验去确定能够适用规则(2.28)的那个哈密顿函数的严格形式。有所有具有实际意义的场合我们必须遵守如下规定：

在**笛卡儿**坐标中，经典哈密顿量是一个同 q 完全无关的 p 的二次表达式、一个唯一依赖于 q 的函数，或许还有一个形式为 $\sum_i p_i f_i(q_1, \cdots, q_R)$ 的 p 的线性函数三者之和。把哈密顿函数写成这种形式后，还必须把求和式中的最后一项用“对称”表达式

$$\frac{1}{2}\sum_i [p_i f_i(q_1, \cdots, q_R) + f_i(q_1, \cdots, q_R) p_i]$$

代替。对应规则(2.28)只适用于这样的表达式。

在第四章中我们将会看到，把 p 的线性项“对称化”是使波函数的统计诠释具有一致性的必要条件。电磁场中的一个粒子[方程(2.25)和(2.26)]就是必须进行这种处理的系统的例子。

在结束本节前，我们再讨论一个应用实例。假定我们要构造一个复杂原子的薛定谔方程，而这个复杂原子由一个质量为 M、电荷为 Ze 的原子核和 Z 个质量为 m、电荷为 $-e$ 的电子组成。这时哈密顿函数包含有 $Z+1$ 个动能项、Z 个电子被核吸引的 Z 个库仑项，以及 $\frac{1}{2}Z(Z+1)$ 个电子对之间的库仑排斥项。采用§9中的记号，这个哈密顿函数可写作

$$\frac{P^2}{2M} + \sum_{i=1}^{Z}\frac{p_i^2}{2m} - \sum_{i=1}^{Z}\frac{Ze^2}{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}|} + \sum_{i<j}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}.$$

由此导出薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{R},\ \boldsymbol{r}_1,\cdots,\ \boldsymbol{r}_2;\ t)$$

$$=\left[-\hbar^2\left(\frac{\Delta_R}{2M}+\sum_{i=1}^{Z}\frac{\Delta_i}{2m}\right)\right.$$

$$\left.-\sum_{i=1}^{Z}\frac{Ze^2}{|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_i|}+\sum_{i<j}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}\right]\Psi;\quad(2.30)$$

式中算符 Δ_R 代表对位置矢量 $\boldsymbol{R}$ 的拉普拉斯算符，即

$$\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{\partial^2}{\partial Y^2}+\frac{\partial^2}{\partial Z^2};$$

算符 Δ_i 代表对第 i 个电子位置矢量 $\boldsymbol{r}_i$ 的拉普拉斯算符.

在氢原子场合($Z=1$)，上述薛定谔方程变为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r}_p,\ \boldsymbol{r}_e;\ t)$$

$$=\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_p-\frac{\hbar}{2m}\Delta_e-\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_p-\boldsymbol{r}_e|}\right)\Psi(\boldsymbol{r}_p,\boldsymbol{r}_e;\ t);$$

(2.31)

式中M是质子的质量，$\boldsymbol{r}_p$ 是质子的位置，$\boldsymbol{r}_e$ 是电子的位置.作为一级近似，我们可以认为质子无穷重，并把氢原子当作在吸引库仑场$-e^2/r$ 中的一个电子来处理；这里 $\boldsymbol{r}$ 代表电子在原点固定在质子(假定处于静止)上的坐标系中的位置. 这种情况下，这个电子的波函数 $\Psi(\boldsymbol{r},\ t)$ 满足的薛定谔方程就是

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-\frac{e^2}{r}\right)\Psi(\boldsymbol{r},t).\qquad(2.32)$$

III. 不含时间的薛定谔方程

16. 找稳定解

一个量子系统的薛定谔方程在形式上可以写为

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=H\Psi. \tag{2.33}$$

让我们假定哈密顿量H不明显地依赖于时间. 这属于保守系统的情况，其对应的经典系统的能量是一个运动常数. 现在我们要寻找的，就是代表这个量子系统具有完全确定能量E的一种动力学状态的一个解Ψ.

这样的波函数Ψ必须具有一个完全确定的(角)频率ω，它应由爱因斯坦关系式$E=\hbar\omega$给出. 我们知道，这个波的频率与之对应系统能量之间的这个关系式正是物质波理论的基本假设，于是我们可以把Ψ写成如下形式:

$$\Psi=\psi e^{-iEt/\hbar}, \tag{2.34}$$

其中ψ依赖于位形空间的坐标，但不依赖于时间. 把这个表达式代入方程(2.33)，得到

$$H\psi=E\psi, \tag{2.35}$$

这称为**不含时间的薛定谔方程.**

当这个系统处在由(2.34)形式的波所表示的一个状态时，我们称它处在一个能量为E的**定态**；这里与时间无关的波函数ψ常称为定态波函数，真正的波函数与它相差一个相因子$\exp(-iEt/\hbar)$.

17. 方程的一般性质　能谱的本质

为简化讨论起见，我们来讨论在标势$V(r)$中的一个质量为m的粒子这种特殊情况. 我们还假定随着$r\to\infty$，$V(r)\to 0$. 这时的函数ψ是确定粒子位置的矢量$r(x,y,z)$的一个函数，而不含时间的薛定谔方程应为

$$H\psi(r)\equiv\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(r)\right]\psi(r)=E\psi(r). \tag{2.36}$$

在偏微分方程理论中，(2.36)类型的这种方程叫做**本征值方**

程。这个方程的一个解 $\psi_E(r)$ 叫做对应于算符 H 的本征值 E 的一个**本征函数**(固有函数)。

事实上，如果不具体给出函数 ψ 必须满足的"正则性"条件和边界条件，这个本征值问题还是不能完全确定。加在 $\psi(r)$ 上的这些条件当然必须与对波函数的解释相一致。在第四章中我们还要讨论这个问题。我们这里姑且认为 $\psi(r)$ 和它的一阶偏导数在整个空间中都是**连续**、**单值**和**有界**的函数。

这样我们就可以引出下面这些结果。我们虽然打算不加证明就把这些结果接受下来，但在后面将用一些数值例子来加以验证。

a) 若 $E<0$，方程(2.36)只对某些特殊的 E 值才有解，而这些 E 值形成了一个分立谱。对应于一个 E 值的本征函数(如果对应的本征函数有若干个，则是它们之中的每一个)在无穷远处都为零。更严格些说，在整个空间上的积分

$$\int|\psi(r)|^2dr$$

是收敛的。按照统计解释，在无穷远处找到粒子的几率应为零，这个粒子实际上局域在有限区域内；我说它处在一个**束缚态**。

b) 若 $\varepsilon>0$，方程(2.36)对于任何正的 E 值都可以求解，即正能量的 E 值形成一个连续谱。可是，这时对应的本征函数在无穷远处不为零；它们的渐近行为与平面波 $\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$ 相似。更严格些说，随着 $r\to0$，绝对值 $|\psi(r)|$ 趋近于一个非零常数，或者在两个极限(其中至少有一个不为零)之间振荡而不能确定。这时粒子并不局域在有限区域。在碰撞问题中就会用到这种类型的波函数，我们说粒子处于一个**束缚态**或者说**碰撞定态**。

于是我们得到第一个基本结果：束缚态能量的量子化：在导致抛弃经典理论的许多事实中，这是最为引人注目的一个事实。确定量子化能量的问题，在这里成为一个求本征值的问题。波动力学的核心问题之一，就是尽可能精确地求解出这个问题。对于一些形式特别简单的哈密顿量，这个问题可以严格地求解。氢原子的情况尤其如此（我们将在第十一章详细阐述），它的能级是算符

$$[-(\hbar^2/2m)\Delta-(e^2/r)]$$

的本征值。我们在第十一章中将会看到，得到的本征值谱同旧量子论所预言的能谱完全一样；而后者，我们已经强调过，与实验十分一致。对于更复杂的场合，我们则不得不求助于适当的近似方法。在能够以合理的精确度计算出能谱的所有场合，计算结果在非相对论近似下都与实验结果符合得非常好。

本征解 ψ_E 本身在一定程度上也可以用实验来检验。事实上，在计算好些可观测量（例如跃迁几率）时，都会要用到分立谱的本征函数。至于连续谱的本征函数，它们的渐近形式则直接与截面（碰撞现象的特征参数）相联系。关于截面的严格定义，将在后面（第十章）给出。

练 习 和 问 题

1.让我们用足够硬的X射线来接连测量电子的几个位置，借此观测氢原子中电子沿圆形玻尔轨道的运动。

当电子受到一个X射线光子碰撞时，有一部分动能 ΔT 传递给了电子；试估计作为光子波长 λ 函数的 ΔT 的数量级。为观测沿轨道的运动，λ 必须小于轨道的半径。试把这种情况下的扰动 ΔT 与相邻能级之间的距离作一比较。根据这种比较，你能就玻尔轨道的可观测性得出什么结论？

2.在相对论量子力学中，一个（静止）质量为 m、速度为 v 的自由粒

子的总能量 E 和动量 p 分别等于

$$\frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \quad 和 \quad \frac{mv}{\sqrt{1-v^2/c^2}}.$$

试验证，这时取 $H=E=\sqrt{m^2c^4+p^2c^2}$ 为哈密顿函数，可以把运动方程写成哈密顿形式.

由此出发，导出这个粒子的速度和相应的德布罗意波的群速度 v_g 之间的等式. 再计算这个波的相速度 v_φ，并证明它比光速 c 要大，且有 $v_g v_\varphi = c^2$.

3.试检查对双原子分子中一个原子的运动作经典描述的合理性. 为此，假定这个原子以角频率 ω 作简谐振动，平均动能为 $\frac{1}{2}kT$ 的数量级；再把这个原子的平均波长与这些振动的振幅作比较. 首先处理常温下的氢分子：$T=300\text{K}$，$kT=0.025$ 电子伏，$\hbar\omega=0.5$ 电子伏；然后再考察原子质量为氢原子 200 倍的双原子分子，假定其中恢复力与氢分子情况一样，而温度是在 300K 时和 10K 时.

4.一个电子在恒定磁场 H 中沿一个圆轨道运动. 把德布罗意共振条件用于这个圆周运动. 试证明在这种场合电子的动能是量子化的，能级是等间距的，而且能级之间距离为 $\frac{e\hbar}{mc}H$. [这个结果与严格的量子理论结果的差别仅是所有的能级整体平移了一个量 $\left(\frac{e\hbar}{2mc}\right)H$.]

设磁场为 10^4 高斯，试计算量子化轨道的半径、动量和动能. 把这种情况下量子数等于一的轨道半径与氢原子基态的玻尔轨道半径作一比较.

[提示：在这个问题中务必把动量 p 和 mv 区分开来. 若 A 是由 i 导出磁场的势矢，则有 $p=mv+(e/c)A$.]

5.根据任何一个波都可视为平面波的叠加这一事实，试证明在时刻 t_2 和点 r_2 处的物质波 $\psi(r_2, t_2)$ 可以通过下列运算由它在 t_1 时刻所具有的值推导出来：

$$\psi(r_2, t_2)=\int K(r_2-r_1, t_2-t_1)\psi(r_1, t_1)dr_1, \qquad (1)$$

其中

$$K(\rho;\tau)=(2\pi\hbar)^{-3}\int\exp\left[\frac{i}{\hbar}(p\cdot\rho-E\tau)\right]dp,$$

而这个表达式中的 E 是 p 的函数，等于粒子的与动量 p 相应的能量. 请证明对于质量为 m 的一个非相对论性粒子，有

$$K(\rho;\tau)=e^{-\frac{3}{4}\pi i}\left(\frac{m}{2\pi\hbar c}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left(i\frac{mp^2}{2\hbar\tau}\right).$$

由这个表达式出发，试通过推导验证，对于给出在时刻 t_2 和点 r_2 处的波函数的那个积分(1)的主要贡献，是来自点 r_1 周围的一个半径数量级为

$$\left[\frac{2\hbar(t_2-t_1)}{m}\right]^{\frac{1}{2}}$$

的区域.

6. 为了把上题中的方法用于一个作一维运动的粒子，需要对它作些什么修改？设有一个质量为 m 的非相对论性一维自由粒子在 $t=0$ 时刻的波函数为

$$\psi(x,0)=(\pi\xi_0^2)^{-\frac{1}{2}}\exp(ip_0x/\hbar)\exp(-x^2/2\xi_0^2);$$

于是这个物质波在 $t=0$ 时刻的强度(模的平方)就是宽度为 ξ_0 的一个高斯分布. 试用修改后的方法确定这个粒子在以后时刻 t 的波函数. 并证明这个粒子对应的物质波在以后所有时刻的强度仍然是高斯分布，但其宽度按如下规律增加:

$$\xi=\xi_0\left(1+\frac{\hbar^2t^2}{m^2\xi_0^4}\right)^{\frac{1}{2}}$$

(波包扩展，见第六章).

第三章　一维量子化体系

1. 引言

为了使我们在用量子理论的解释问题之前，能得到一些处理薛定谔方程的实践，我们将研究一维体系的波动力学. 对一维问题之所以有兴趣，不仅因为它是一些能让我们展示某些性质的简单模型，这些性质我们在更复杂的情况下还会碰到，而且因为不少问题，在经过一些适当的变换后，会导致和一维薛定谔方程相同类型的方程.

让我们考虑在某个势 $V(x)$ 约束下一质量为 m 的粒子沿 x 轴上的运动. 它的薛定谔方程是

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right)\Psi(x,t). \tag{3.1}$$

我们将特别关心定态的研究. 若 E 是定态的能量，有

$$\Psi(x,t)=\phi(x)e^{-iEt/\hbar}, \tag{3.2}$$

函数 $\phi(x)$ 是与时间无关的薛定谔方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right)\phi=E\phi \tag{3.3}$$

的一个解. 在整个这一章中我们采用记号

$$V(x)=\frac{\hbar^2}{2m}U(x),\qquad E=\frac{\hbar^2}{2m}\varepsilon. \tag{3.4}$$

它使我们能改写上一方程为

$$\phi''+[\varepsilon-U(x)]\phi=0 \tag{3.5}$$

的形式. 这是一个斯图姆（Sturm）-刘维型的微分方程，我们想找出它在整个区间$(-\infty,+\infty)$中有限、连续，可微的解.

如果存在这样的一个解，则这个解的任何倍数也是解；我们将不认为这两个解有什么区别，如果它们只差一常数乘子的话。若两个线性无关的解是容许的解，则它们的任何线性组合也是一个解，并称本征值为二度**简并**。简并度按定义是线性无关的本征函数的数目。

方程 (3.5) 是实的[$V(x)$是 x 的实函数]。若 ψ 是本征函数，则其实部和虚部也是本征函数(若本征函数不简并，实部和虚部之间彼此必然差个倍数)。结果，只要知道实的本征函数，就可构成属于一给定本征值的所有本征函数。这个注记大大地简化了计算。

在第一节中，我们精确求解一些简单的方形势的本征值问题。我们将详细研究经典运动和量子化运动之间的主要的不同点，特别是束缚态能量量子化，以及在非束缚"粒子"运动中，波的反射、共振和势垒贯穿现象。在第二节中，我们将对任意势 $U(x)$ 的方程 (3.5) 作系统的研究，并指明从方形势得出的一些结果是十分普遍的。

I. 方 形 势

2. 一般评述

为了使典型的量子效应得以出现，势 $V(x)$ 在一个波长数量级的距离内必须具有明显的相对变化。满足这些条件的最简单的势是方形势，这是在某些点上出现第一类不连续性(这就是说，突然跳跃一有限量)，而其它地方保持为常数的势。这样，x 轴被分为几个间隔，在每个间隔中势保持为常数。

势 $U(x)$ 中第一类不连续性的存在并不改变加于函数 ψ 上的正则条件。事实上，按薛定谔方程

$$\psi'' = (U - \varepsilon)\psi,$$

在势的每一个不连续点，U 出现一有限量的突然跳跃，ψ'' 也如此，但 ψ'' 的积分在这些点上保持连续：因此 ψ' 以及 ψ（理由更充足）处处连续。

现在，令 U_i 为第 i 个区域中（$i = 1, 2, \cdots, n$）$U(x)$ 的（常数）值。在这个区域中的通解是指数函数的线性组合。它的行为实际上按（$\varepsilon - U_i$）是正或负而十分不同。

若 $\varepsilon > U_i$，它是虚指数

$$e^{ik_ix} \text{ 和 } e^{-ik_ix} \qquad (k_i = \sqrt{\varepsilon - U_i})$$

的一个线性组合，或等价地是正弦和余弦的一个组合：它具有“振荡”行为。

若 $\varepsilon < U_i$，我们有实指数

$$e^{\kappa_ix} \text{ 和 } e^{-\kappa_ix} \qquad (\kappa_i = \sqrt{U_i - \varepsilon})$$

的一个组合。在这种情况下，我们说解具有“指数”行为。

为了得到微分方程的通解，对势为常数的几个区域中的每一个，人们可把解写成指数（实或虚）函数线性组合的形式。这些组合的参数（数目为 $2n$ 个）由在势的间断点处函数及其微商的连续条件决定。由于有（$n - 1$）个间断点，这给出 $2(n - 1)$ 个条件。因此，如所预期的，这样得出的通解依赖于两个任意参数。为了使它能被采纳为本征函数，这个解还必须保持处处有界，亦即对 $x = +\infty$ 及 $x = -\infty$ 两个极限均有界。注意若在整个区间（$-\infty$，$+\infty$）中，均能保持能量低于势，则通解处处均有指数行为；它的二级微商总是和函数本身同号。由此我们立刻得出，在两个极限 $-\infty$ 或 $+\infty$ 之一处，也可能同时在两个极限处，函数是指数增加的。因而，本征值问题无解。在经典力学中也一样，只有能量至少超过部分区间中的势时，运动才是可能的。

若 ε 至少超过量 U_i 中的一个时，本征函数的存在及其数目本质上依赖于通解在 x 轴两端 $-\infty$ 和 $+\infty$ 处指数或振荡的

特征.

3. 势阶梯　波的反射和透射

方形势中最简单的例子是势只有一个突然的跳跃 ($n = 2$)，如图 3.1 所示:

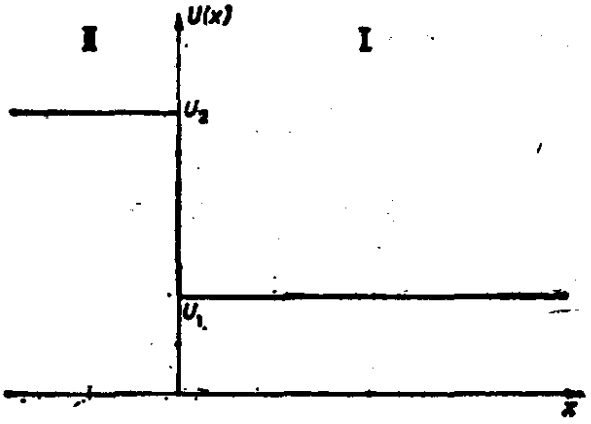

图 3.1　势阶梯

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & \text{若 } x > 0 \quad (\text{区域 I}) \\ U_2 & \text{若 } x < 0. \quad (\text{区域 II}) \end{cases}$$

为确定起见，我们将假定 $U_2 > U_1$.

可以出现两种情况:

a) $U_2 > \varepsilon > U_1$，通解在区域 I($x > 0$) 中有振荡行为，而在区域 II($x < 0$) 中有指数行为. 要采纳它为本征函数，它必须在区域 II 中指数减小. 通常有一个且只有一个解满足这个条件. 因而在这个区间中的各个 ε 值是无简并本征值. 能谱是连续的和无简并的. 在两个区域中的每一个，这个函数取一般形式

$$y = \begin{cases} A_1 \sin(k_1 x + \varphi) & x > 0 \\ A_2 e^{\kappa_2 x} & x < 0, \end{cases} \tag{3.6}$$

连续性条件把 y 确定到最多差个常数. 不用函数及其微商的

连续性条件，而用函数和它的**对数微商** y'/y 的连续性条件，是更方便的．对数微商连续条件固定了位相 φ：

$$k_1 \cot \varphi = \kappa_2.$$

φ 被决定到差一个 π 的倍数，因为从 φ 到 $\varphi + \pi$ 的变化等价于改变 A_1 的符号．我们取 φ 的值为

$$\varphi = \tan^{-1} \frac{k_1}{\kappa_2}, \tag{3.6a}$$

其中 $\tan^{-1}$ 表示局限在区间

$$\left(-\frac{\pi}{2}, +\frac{\pi}{2}\right)$$

中反正切函数的值．函数连续条件决定了比值 A_2/A_1，即

$$\frac{A_2}{A_1} = \sin\varphi = \frac{k_1}{\sqrt{k_1^2 + \kappa_2^2}} = \sqrt{\frac{\varepsilon - U_1}{U_2 - U_1}}. \tag{3.6b}$$

b) $\varepsilon > U_2$，通解在整个空间有振荡行为，因而表示一容许的本征函数． 每一个 ε 值对应两个线性无关的本征函数：本征值谱是**连续**的，且**为二度简并**.

我们将构成一个本征函数，它在区域 II 的特征为 $\exp(-ik_2x)$．这个本征函数被确定到差别一个相乘常数，而这个常数可通过取区域 I 中函数表达式 $\exp(-ik_1x)$ 的系数为一来固定.

换句话说

$$\chi = \begin{cases} e^{-ik_1x} + Re^{ik_1x} & x > 0 \\ Se^{-ik_2x} & x < 0, \end{cases} \tag{3.7}$$

常数 R 和 S（先验地是复数）由 $x = 0$ 处的连续条件决定．由对数微商连续给出

$$R = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}, \tag{3.7a}$$

由函数本身连续得

$$S = 1 + R = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}. \tag{3.7b}$$

函数 χ^* 是一个和 χ 线性无关的本征函数. 所有对应于本征值 ε 的本征函数都能写成 χ 和 χ^* 线性组合的形式.

我们把现在的情况和如果体系是经典体系时得到的情况比较一下. 在这个势中经典粒子的运动是和情况 (a)、情况 (b)很不相同的.

在情况(a)中,经典运动是一个能量为$(\hbar^2/2m)\varepsilon$ 的粒子,从 $+\infty$ 处在正半轴沿 x 减小的方向以匀速 $\hbar k_1/m$ 进来,在 $x = 0$ 点弹性地反弹回来,再开始在相反的方向以同样的速度走到无穷远处. 为了在波动力学中获得类似现象,人们必须构造一个由形式为 $y\exp(-iE_1/\hbar)$ 的波和具有邻近能量的波叠加而成的波包. 除了(3.6)式给出的函数外,更方便的是用 y 除以 $\frac{1}{2}iA_1\exp(-i\varphi)$ 得来的波

$$\psi_\varepsilon(x) = \begin{cases} e^{-ik_1x} - e^{i(k_1x+2\varphi)} & x > 0 \\ \dfrac{2A_2}{iA_1}e^{i\varphi}e^{\kappa_2 x} & x < 0, \end{cases} \tag{3.8}$$

在写下它时,我们用了指标 ε,这是为了让我们记住它是一个对应于本征值 ε 的本征函数. 考虑波包

$$\Psi(x, t) = \int_0^\infty f(k_1' - k_1)\psi_\varepsilon'(x)e^{-iE't/\hbar}dk_1'. \tag{3.9}$$

函数 $f(k_1' - k_1)$ 是一个实函数,基本上是 k_1' 的正则函数,在点 $k_1' = k_1$ 有一十分显著的峰值 ("一撇"暂时不再表示对 x 的微商,量 k_1', ε', E' 的意义及它们的联系是显然的). 为简单起见,我们进一步假定当 $k_1'^2 > U_2 - U_1$ 时 $f(k_1' - k_1)$ 为零. 从而 $\Psi(x, t)$ 是一个情况 (a) 的本征函数乘上指数

$\exp(-iE't/\hbar)$ 后的叠加，$\exp(-iE't/\hbar)$ 相应于它们各自对时间的依赖关系。由于它的这个结构，Ψ 显然是含时间薛定谔方程的解。如果我们参考一下第二章中自由波包的研究，是易于把它的运动显现出来的。

在区域 I，$\Psi(x,t)$ 是两个量的叠加：一个是“入射波包”

$$\Psi_i(x,t)=\int_0^\infty f(k_1'-k_1)e^{-ik_1'x}e^{-iE'1/\hbar}dk_1', \quad (3.10a)$$

它的中心 $x=-(1/\hbar)(dE/dk_1)t=-v_1t$ 在负方向以速度 $v_1=\hbar k_1/m$ 行进，并在 $t=0$ 时刻到达点 $x=0$；另一个是“反射波包”

$$\Psi_r(x,t)=-\int_0^\infty f(k_1'-k_1)e^{i[k_1'x+2\varphi'-(E'1/\hbar)]}dk_1', \quad (3.10b)$$

它的中心 $x=v_1t-2^{d\varphi/dk_1}$ 在相反方向以速度 v_1 行进，且在比 $t=0$ 晚

$$\tau=\frac{1}{v_1}\frac{d\varphi}{dk_1}=2\hbar\frac{d\varphi}{dE} \quad (3.11)$$

的时刻离开原点（“入射波包”中心在 $t=0$ 时刻到达那里）。从而波包中心的运动几乎全同于经典粒子的运动。唯一不同在于，波包中心在间断点 $x=0$ 处由于反射受到**延缓** τ，而经典粒子的反弹则是即时的。注意在这个联系中，只有波包形状在它的运动过程中变形不是太猛烈时，波包中心运动的考虑才有意义。对于入射波包，当它中心离原点的距离比它的宽度 Δx 大时，情况确实如此。对于反射波包，这同样也要满足。此外，还要求函数 f 的峰宽度 Δk 足够小，以致 φ 在对积分(3.9)起主要贡献的整个区域内无显著变化，即 $\Delta k\left(\frac{d\varphi}{dk_1}\right)\ll 1$。当波包的空间广延 Δx 是 $1/\Delta k$ 量级时，这个条件也可写成

$$\Delta x\gg d\varphi/dk_1, \quad (3.12)$$

从而 $\Delta x/v_1\gg\tau$。这时波包是如此之宽以致它花在通过轴上

一点的时间明显地大于由反射引起的延缓 τ.

除延缓 τ 外，经典粒子的运动和量子力学波包的反射之间还存在另一个不同. 在区域 II，波 Ψ 常常不为零. 和上面相似的研究表明，Ψ 等于 $2A_2\exp(\kappa_2 x)/A_1$ 和另一个量的乘积，这个量在时刻 $t=\frac{1}{2}\tau$ 邻近的某个时间间隔有可观的值，$t=\frac{1}{2}\tau$ 这个时间可解释为和置于点 $x=0$ 处的势"墙"的碰撞时间. 因此在那一瞬间，在区域 II 中存在不为零的找到粒子的几率，而经典粒子是永远不能穿透到这个区域的.

现在让我们考察情况 (b). 相应于同一能量值有两种可能的经典运动[1]. 一种是粒子沿整个 x 轴的从 $+\infty$ 到 $-\infty$ 的运动，它的速度是常数且在区域 I 等于 $v_1=\hbar k_1/m$，在势的间断点突然从 v_1 跳到 $v_2=\hbar k_2/m$，然后以速度 v_2 继续运动，一直到 $-\infty$. 另一种是严格反演过来的运动，即一个粒子沿 x 轴正方向在区域 II 以速度 v_2，在区域 I 以速度 v_1 行进.

我们来比较一下这些经典运动和具有同样初始条件的那些波包的运动. 我们对其中的第一种(在负方向移动)作出这种比较. 照情况(a)的办法，把能量 ε 的邻近值对应的本征函数叠加起来，我们构造出一个类似于(3.9)式的波包. 我们对(3.7)类型的本征函数 χ 加上指标 ε 以便让我们记住它依赖于能量. 先验地，波包可由函数 χ_ε 和 χ_ε^* 的叠加构成. 但为了获得所要求的初始条件，如这个研究将要表明的那样，它必须只含函数 χ_ε. 因此让我们写出

$$\Psi(x,t)=\int_0^\infty f(k_1'-k_1)\chi_\varepsilon'(x)e^{-iE't/\hbar}dk_1',$$

---

1) 可以把这事实和对应的量子力学问题中存在二度简并的情况相比较.

此式与表达式(3.9)唯一的不同是函数 f 的峰值

$$k_1 = \sqrt{\varepsilon - U_1}$$

处在能量区域(b)中，而不是处在能量区域(a)中．上述波包的运动可用类似于波包(3.9)的方式找出．人们容易证实它确实满足所要求的初始条件，即当 $t \ll 0$ 时，$\Psi(x, t)$实际上在区域 II 保持为零，在区域 I 唯一可观的贡献来自项$\exp(-ik_1x)$．这就产生一个波包，它的中心 $x = -v_1t$ 的运动像一个速度为 v_1，在 x 减小的方向运动，并在 $t = 0$ 时刻到达原点的经典粒子；到达原点后，$\Psi(x, t)$ 分裂为两个波包，一个是"透射波包"

$$\Psi_t(x, t) = \int_0^\infty f(k_1' - k_1) S' e^{-ik_2'x} e^{-iE't/\hbar} dk_1'$$

其中心 $x = -v_2t$ 严格地继续经典粒子的运动；另一个是"反射波包"

$$\Psi_r(x, t) = \int_0^\infty f(k_1' - k_1) R' e^{-ik_1'x} e^{-iE't/\hbar} dk_1'$$

其中心 $x = v_1t$ 的运动像一个在 $x = 0$ 处受到弹性碰撞后的经典粒子的运动．于是存在一个和经典运动十分重要的区别：**量子"粒子"有一不"为零"的在势的间断点处被反射的几率．**

为了进行这种分析，人们必须以严格的方式定义几率，这将在第四章中作出．这里我们只是不加证明地指出，在反射波中找到粒子的几率是 $|R|^2$，在透射波中找到粒子的几率是 $(k_2/k_1)|S|^2$(见习题 4.2)．由于这两个量之和为 1：

$$|R|^2 + \frac{k_2}{k_1}|S|^2 = 1, \qquad (3.13)$$

这些结果是十分协调一致的．只要在等式(3.13)中代入由等式(3.7a)和(3.7b)给出的值，就易于证实上式．

量

$$T = \frac{k_2}{k_1}|S|^2 = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2} \tag{3.14}$$

称为**透射系数**，是透射现象相对重要性的量度．它随着能量的增加而增加，当 $\varepsilon \to \infty$ 时趋于一．人们可以说在这极限下经典力学的结果是对的．

注意 T 是 k_1 和 k_2 的对称函数．因此，具有相同能量但在相反方向传播的波(从 II 向 I)有相同的透射系数：透射系数与行进的方向无关．

当我们认识到这些问题和光波传播问题之间是极相似的时，所有这些结果就是毫不奇怪的．这里处理的问题和光信号在一无吸收、折射率可变的介质中的传播完全相同．在情况(a)，折射率在点 $x=0$ 由实数值(介质 I)突然变为虚数值(介质 II)：发生了全反射．在情况(b)，折射率保持为实数，介质 I 和 II 有不同的折射率：折射率这一突然变化引起信号部分反射．

4. 无限高势垒

上一节的一个极限情况是一个碰到无限高势垒的粒子的情况．为确定起见，让我们假定当 $x<0$ 时 $U(x)=+\infty$．我们遇到一种类似于上一问题的情况(a)当 $U_2 \to +\infty$ 时的情况．检查一下由 (3.6)、(3.6a)、(3.6b) 式给出的波函数 y，就可知在这一极限情况下 ($\kappa_2 \to \infty$)，它在点 $x=0$ 处为零．

我们这里正在处理的是一个不管在区域 $x>0$ 中函数 $V(x)$ 形式如何都成立的普遍结果．确实，在区域 $x<0$ 中，波函数必须取 $A\exp(\kappa_2 x)$ 形式，它的对数微商为 κ_2．在势 V_2 趋于无穷时，κ_2 也变为无限大．从而，在点 $x=0$，函数必然有一个无限大的对数微商，因此，函数本身在此处必为零．

总结一下：在无限高势垒的边界处波函数必为零．

5. 无限深方势阱　分立谱

作为第二个简单例子，考虑一无限深方势阱．取阱的底部势能的值为能量标度的原点．这个势能为零的区域占据了 x 轴上的某一个区间 $(-L/2, +L/2)$，两边被无限势所束缚(图 3.2)．

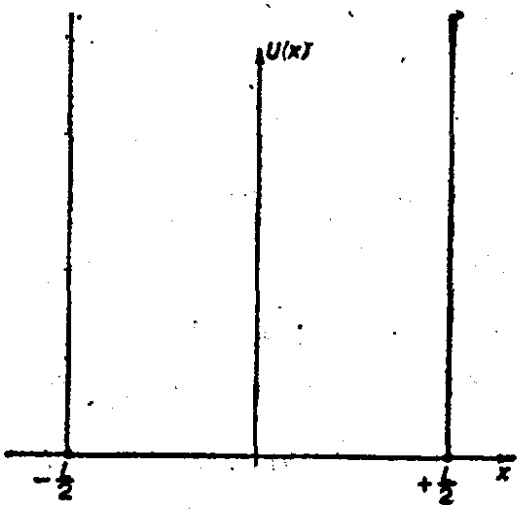

图 3.2　无限深势阱

本征值问题简化为找一个波函数 ψ，它在点 $+L/2$ 和 $-L/2$ 处为零，在区间$(-L/2, +L/2)$中满足薛定谔方程

$$\psi'' + \varepsilon\psi = 0$$

通解是 $\sin kx$ 和 $\cos kx(k = \sqrt{\varepsilon})$ 的线性组合．对 ε 的某些分立值，即

$$\varepsilon_n = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \qquad (n = 1, 2, \cdots, \infty) \qquad (3.15)$$

存在同时满足两个边界条件的解 (对 $kL = n\pi$ 的解)．这些本征值中的每一个都对应一个且只有一个本征函数 (无简并)，即

$$\text{若 } n \text{ 为奇数} \qquad \psi_n = \cos\frac{n\pi}{L}x, \qquad (3.16a)$$

若 n 为偶数　　$\psi_n = \sin\frac{n\pi}{L}x$.　　(3.16$b$)

这个非常简单的结果要求对一个普遍性质作某些说明.

首先，现在的结果和处理经典体系得到的结果有深刻的不同. 在同样的势场下，一个经典粒子实际上能作任何只要是正能量的运动;这是一种局限在区间两端$(-L/2, +L/2)$的两个势墙之间的来来回回的(周期)运动.在波动力学里,运动只对某些分立的能量值才能发生[1]: 能量是量子化的.

第二个说明涉及本征函数的**宇称**[2]. 若 n 为奇数,宇称就是偶的[(3.16a)式],若 n 是偶数,宇称就是奇的[(3.16b)式]. 本征函数有确定宇称这事实是由于势 $U(x)$ 对原点的反演是不变的:

$$U(x) = U(-x).$$

在§ 14 中我们将对宇称问题作普遍的研究.

最后一个注释涉及本征函数的**节点数**. 按定义，节点是本征函数的零点 (处于 $x = L/2$ 和 $x = -L/2$ 两端的那些除外). 节点数随能量的本征值而有规则地增加,当从一个本征值到它最邻近的上面一个时，节点数增加一个: 基态的本征函数 ψ_1 无节点,…第$(n-1)$个激发态 ψ_n 有 $n-1$ 个节点，其余类推. 强调一下这个结果和振动弦的定态节点数之间的类似是颇有教益的. 事实上，由于这两个问题在数学上全同,这种类比总是可行的.

6. 有限方势阱的研究　共振

我们用势阶梯和无限深方势阱得到的结果在更复杂的情

---

1) 按对应原理，经典运动的周期实际上等于 $h/\Delta E$，其中 ΔE 是相邻能级间的距离.

2) 若 $f(x) = f(-x)$，函数 $f(x)$ 是偶的; 若 $f(x) = -f(-x)$，函数 $f(x)$ 是奇的.

况下也会再次出现。我们把图 3.3 的势作为一个新的例子。这里函数 $U(x)$取如下形式:

$$U(x)=\begin{cases}U_1 & x>a \quad (\text{区域 I})\\ U_2 & a>x>b \quad (\text{区域 II})\\ U_3 & b>x. \quad (\text{区域 III})\end{cases}$$

$$(U_2<U_1<U_3)$$

本征值问题会以不同方式出现，这依赖于 ε 的值和常数 U_1，U_2，U_3 的比值而定。

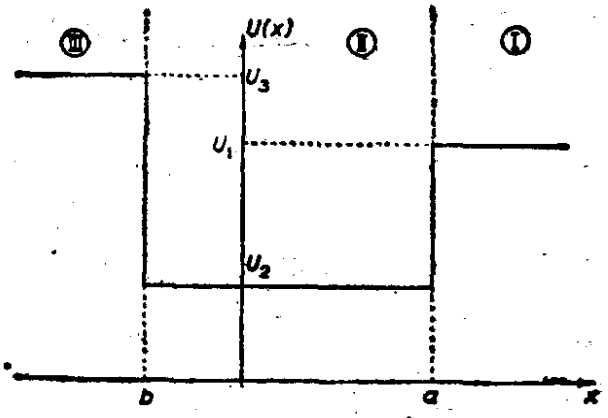

图 3.3　有限方势阱

a) $U_2<\varepsilon<U_1$、分立谱和束缚态

通解在两个外面的区域 I 和 III 中有指数行为，在里面的区域有振荡行为。为了能被采纳为一个本征函数，它必须在外面两个区域按指数衰减。在区域 I 中存在一个且只有一个指数衰减解，在区域III中也存在一个且只有一个指数衰减解。只有某些分立的 ε 值，使这两个解能光滑连接。由此我们得出能谱一定分立并且无简并。

假定函数 ψ 为实数（见第三章§ 1），而且在三个区域中的每一个有下述形式

$$\psi = \begin{cases} A_1 e^{-\kappa_1 x} & x > a \\ A_2 \sin(k_2 x + \varphi) & a > x > b \\ A_3 e^{\kappa_2 x} & b > x. \end{cases} \tag{3.17}$$

若位相 φ 已知，波函数的两个连续条件就决定常数 A_1，A_2，A_3（到一个因子）。而对 φ，它必须同时满足两个对数微商连续条件

$$k_2 \cot(k_2 a + \varphi) = -\kappa_1 \quad k_2 \cot(k_2 b + \varphi) = \kappa_3, \tag{3.18}$$

也可以写成

$$\varphi = -k_2 a - \tan^{-1}\frac{k_2}{\kappa_1} + n\pi \quad (n \text{ 正整数})$$

$$\varphi = -k_2 b - \tan^{-1}\frac{k_2}{\kappa_3}. \tag{3.19}$$

（φ 必然被决定到差 π 的某个倍数）我们使 $k_2 b + \varphi$ 处在区间 $(-\pi/2, +\pi/2)$ 中，从而可以固定这种任意性。当且仅当最后这两个方程右边相等时，这才可能。只有某些 ε 的分立值 ε_n，能适合这个等式，ε_n 满足方程

$$n\pi - k_2(a-b) = \tan^{-1}\frac{-1k_2}{\kappa_1} + \tan^{-1}\frac{k_2}{\kappa_3}. \tag{3.20}$$

让我们引入下述记号：

$$K = \sqrt{U_1 - U_2}, \quad L = b - a,$$

$$\cos\gamma = \sqrt{\frac{U_1 - U_2}{U_3 - U_2}} \quad (0 < \gamma < \pi/2)$$

及新变数

$$\xi = \frac{k_2}{K} = \sqrt{\frac{\varepsilon - U_2}{U_1 - U_2}},$$

方程(3.20)也可以写成关于 ξ 的条件的形式：

$$n\pi - \xi K L = \sin^{-1}\xi + \sin^{-1}(\xi\cos\gamma),$$

最后的方程已在图 3.4 中用图解法解出。当 ε 从 U_2 增到 U_1

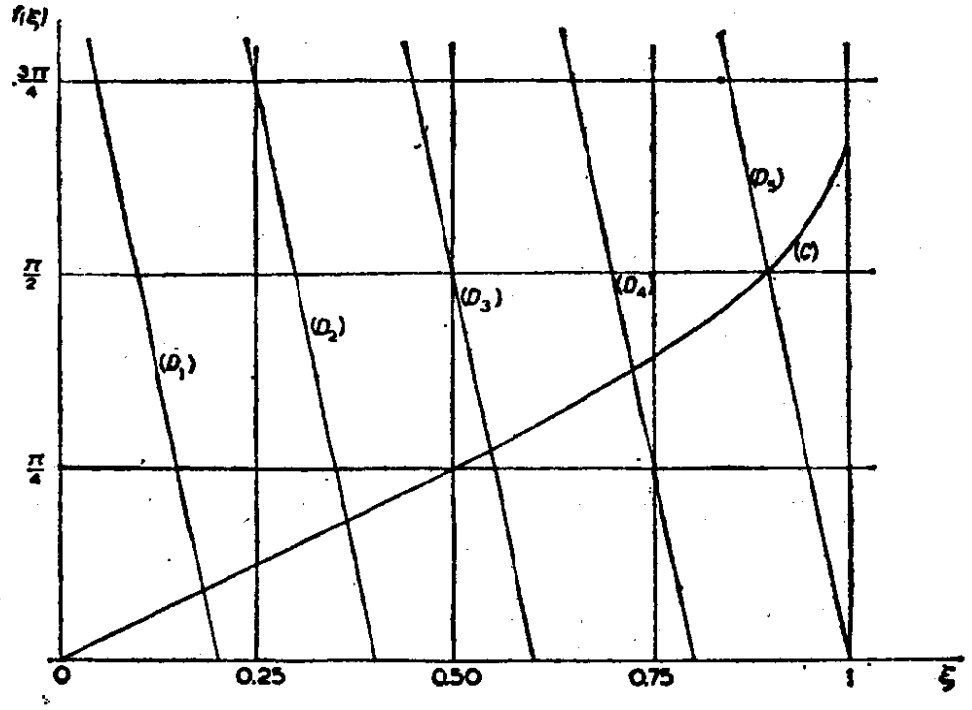

图 3.4 分立本征值的图解:

$\xi = [(\varepsilon - U_2)/(U_1 - U_2)]^{1/2}$, 本征值是满足方程

$$f(\xi) = \sin^{-1}\xi + \sin^{-1}(\xi\cos\gamma)$$

的曲线 (c) 和每根满足方程 $y(\xi) = n\pi - \xi KL$ 的直线 (D_n) 的交点(我们已取 $\gamma = \pi/3$, $KL/\pi = 5$).

时, ξ 由 0 增至 1, 方程右边沿曲线 (c) 由 0 增至 $\pi - \gamma$ (它只依赖于参数 γ), 而左边沿直线段 (D_n) 从 $n\pi$ 减小到 $n\pi - KL$. 为了使 (c) 和 (D_n) 相交, 充分和必要的条件是整数 n 足够小:

$$KL \geqslant (n-1)\pi + \gamma.$$

若 $KL < \gamma$, 就无本征值; 若 $\gamma \leqslant KL \leqslant \pi + \gamma$, 刚好有一个本征值 ε_1; 若 $\pi + \gamma \leqslant KL < 2\pi + \gamma$, 有两个本征值 ε_1和 $\varepsilon_2(\varepsilon_1 < \varepsilon_2)$; 等等. 易见本征值总是按 n 增加的次序而排列. 它们构成一**分立和有限**的序列: 从基态本征值 ε_1 到极大的本征值, 极大本征值对应于数 $1 + (KL - \gamma)/\pi$ 中的最大整数.

量子数 n 有十分明确的数学意义. 考察 (3.19) 式表明，当 x 横过区间 (a, b) 时，$\sin(k_2x + \varphi)$ 有 $(n-1)$ 次为零. 但，根据 (3.17) 式，该函数的零点是函数 ψ 的零点. 从而，对应于第 n 个本征值 ε_n 的本征函数的节点数是 $n-1$.

作为结束，让我们像对无限深势阱作过的那样，和经典情况作一对比. 在现在情况下，除能量量子化外，还存在一个进一步的不同点：由于波函数在区域 I 和 III 有不为零的值，在这些区域中找到粒子的几率不为零，但这些区域的通道对相应的经典粒子是禁戒的.

b) $U_1 < \varepsilon < U_3$. 连续的，无简并谱，波反射

这里的情况类似于势阶梯问题中的情况 (*a*). 每一个 ε 值对应一个且只有一个处处束缚的解：它在区域 III 是指数衰减的. 在区间 (U_1, U_3) 中本征值谱是连续和无简并的.

我们找一个形式为

$$\psi = \begin{cases} e^{-ik_1x} + e^{i(k_1x+2\varphi_1)} & x > a \\ 2Ae^{i\varphi_1}\sin(k_2x + \varphi_2) & a > x > b \\ 2Be^{i\varphi_1}e^{\kappa_3 x} & b > x \end{cases} \tag{3.21}$$

的解. 像上面的问题一样，对数微商的连续条件决定位相 φ_1 和 φ_2，得到

$$\varphi_2 = -k_2b + \tan^{-1}\frac{k_2}{\kappa_3},$$

$$\varphi_1 = -k_1a - \frac{\pi}{2} + \tan^{-1}\left[\frac{k_1}{k_2}\tan\left(k_2L + \tan^{-1}\frac{k_2}{\kappa_3}\right)\right].$$

A 和 B 的值由函数连续得出.

我们下面假定 $U_3 - \varepsilon \gg \varepsilon - U_2$；因此 $k_2 \ll \kappa_3$，而且理由更充分地有 $k_1 \ll \kappa_3$. 各种行为就像区域 III 被一无穷排斥势占据，以致 $B = 0$ 一样. 这里所感兴趣的量是 φ_1 和 A^2.

让我们取 $a = 0$，$b = -L$，并令

$$\eta = \frac{k_1}{K} = \sqrt{\xi^2 - 1}\,.$$

直接计算后得

$$\varphi_1 = \tan^{-1}\left(\frac{\eta}{\xi}\tan\xi KL\right) - \frac{\pi}{2}$$

$$A^2 = \frac{\eta^2}{\eta^2 + \cos^2\xi KL},$$

当能量增加时，位相 φ 以多少有些规则的方式增加，而量度波在区域 II 中的相对强度的量 A^2 在极值 $\eta^2/(1+\eta^2)$ 和 1 之间振荡。KL 越大，η 越小，这些振荡就越明显。让我们假定

$$KL \gg \pi \qquad \eta \ll 1,$$

作为 η^2（即能量）函数的 A^2 出现一系列宽度为 $4\eta/KL$。彼此分开 $2\pi/KL$ 的尖锐峰值。图 3.5 画出了 A^2 以及 φ_1 的显著的行为。

我们面对着一种典型的波动现象，即**共振**现象。越过某个局限的能量区域（宽度为 $4\eta/KL$），波在内部区域的强度是 1 的数量级：共振能量是使 $\varphi_2 = \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi$ 的那些能量，因此区域 II 含 $\left(n + \frac{1}{2}\right)$ 个“半波长”。在这些共振区域之外，强度相对十分弱。

如同在势阶梯问题中的那样，我们可以比较一下（3.9）式给出的那类波包的运动和在同样势场下一个经典粒子的运动。经典粒子从 $+\infty$ 处以恒定速度 $v_1 = (\hbar K/m)\eta$ 进来，在 $x = 0$ 处受到突然加速，以速度 $v_2 = (\hbar K/m)\sqrt{1+\eta^2}$ 横过区域 II，在 $x = -L$ 反跳回来；然后开始沿相反方向反回，在区域 II 的速度是 v_2，在区域 I 的速度是 v_1。在区域 II 所花的时间是 $\tau_{\text{Cl.}} = 2L/v_2$。波包中心作类似的运动，至少在 x 很

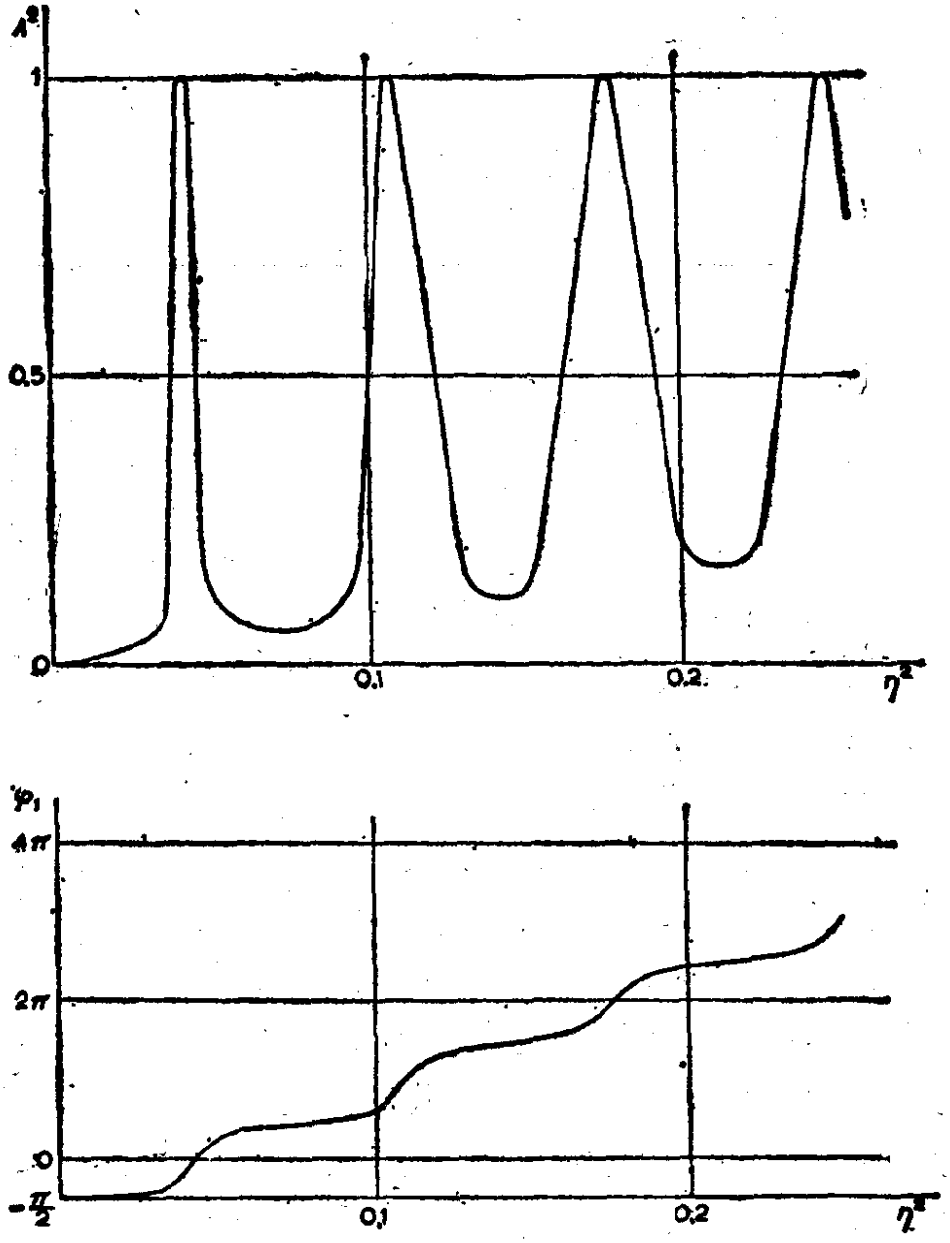

图 3.5　反射共振，A^2 和 φ_1 作为能量函数[见式 (3.21)]的变化. 曲线对应于 $KL=(b-a)\sqrt{U_1-U_2}=100$. 能量标度以变数

$$\eta^2=(\varepsilon-U_1)/(U_1-U_2)$$

为单位来表示.

大的区域，波包的形状实际上保持不变，所以波包中心的运动仍有意义. 除了下面的小小不同之外："在区域 II 中所花的时间"不再是 $\tau_{Cl.}$，而是

$$\tau = \left(\frac{2}{v_1}\right) d\varphi_1/dk_1 = \left(\frac{2}{v_1 K}\right) d\varphi_1/d\eta,$$

各种行为都和经典运动一样。 我们将不详细探求这些细节，它在一切方面都和 §3 类似。这里所讨论的各个量的特性综合在下表内：

入 射 能	φ_1	$\frac{d\varphi_1}{dk_1}$	$\tau/\tau_{Cl.}$	A^2
共振点	$n\pi$	L	$1/\eta$	1
两个共振之间的中间点	$\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi$	$L\eta^2$	η	η^2

在这些共振之间，A^2 总是非常小，经过区域 II 的时间 τ 比 $\tau_{Cl.}$ 短得很多： 波包实际上并不贯穿到区域 II。 在到达点 $x = 0$ 时波几乎全部反射。在光学中我们遇到过完全一样的情况： 折射率的一个突然而可观的变化几乎总是发生全反射。另一方面在共振点，$A^2 = 1$，波完全贯穿到区域 II，在一个相对长的时间，实际上远长于 $\tau_{Cl.}$ 的时间间隔内，波仍然集中在那里。与条件(3.12)一致，这里得到的图象只对波列的范围显著地大于区域 II 本身（在共振点 $d\varphi_1/dk_1 = L$）的情况才能用。从而，在波完全通过在 $x = 0$ 点的势阶梯之前，波包的波前已达到反射点 $x = -L$ 很久了。这种效应是波的典型的效应，也就是区域 II 中入射波和反射波之间干涉的一种。

c) $\varepsilon > U_3$，连续和简并谱，波的反射和透射

这种情况和势阶梯问题中的情况 (*b*) 相似。每个 ε 值对应两个线性无关的本征函数：在区间(U_3, ∞)中本征值谱是连续的并且是二度简并。

像势阶梯问题那样，我们建立形式为

$$\chi = \begin{cases} e^{-ik_1 x} + Re^{ik_1 x} & x > a \\ Pe^{-ik_2 x} + Qe^{ik_2 x} & a > x > b \\ Se^{-ik_3 x} & b > x \end{cases} \qquad (3.22)$$

的本征函数。在点 a、b 的连续条件给出 R、Q、P 和 S 的值。我们简单地列出关于量 R 和 S 的结果，不记入详细的计算。用下面的记号和惯例

$$a=0,\quad b=-L,\quad K=\sqrt{U_1-U_2},$$

$$\xi=\frac{k_2}{K},\quad \eta=\frac{k_1}{K},\quad \zeta=\frac{k_3}{K},$$

得

$$R=\frac{\xi(\eta-\zeta)\cos\xi KL+i(\xi^2-\eta\zeta)\sin\xi KL}{\xi(\eta+\zeta)\cos\xi KL-i(\xi^2+\eta\zeta)\sin\xi KL},$$

$$S=e^{-i\zeta KL}\frac{2\eta\xi}{\xi(\eta+\zeta)\cos\xi KL-i(\xi^2+\eta\xi)\sin\xi KL}.$$

借助于这些表达式，人们能比较一下两种运动：由(3.22)型的波和邻近能量的波构成的波包运动，以及同样能量的经典粒子在同样势能下的运动。

入射波包(由区域 I 中的波 $\exp(-ik_1x)$ 组成)在区域 I 中以恒定的速度 $v_1=\hbar k_1/m$ 运动，并进入区域 II；一旦发生碰撞以后，它分裂为一个以速度 v_1 朝 $+\infty$ 运动的反射波包[由区域 I 中的波 $R\exp(ik_1x)$ 构成]以及一个以速度 v_3 朝 $-\infty$ 行进的透射波包[由区域 III 中的波 $S\exp(-ik_3x)$ 构成]。和经典粒子相反，**波一般只部分透射**，我们能够定义一个透射系数

$$T=\frac{k_3}{k_1}|S|^2$$

$$=\frac{4\eta\zeta\xi^2}{\xi^2(\eta+\zeta)^2\cos^2\xi KL+(\xi^2+\eta\zeta)^2\sin^2\xi KL},\quad(3.23)$$

就像我们在势阶梯情况中所做的那样。

我们这里也要指出，在一给定能量下的透射系数与行进的方向无关(在 T 中 η 和 ζ 对称地出现)。

人们进一步可证实等式

$$|R|^2+\frac{k_3}{k_1}|S|^2=1. \tag{3.24}$$

反射波和透射波振幅之比随能量而变化，我们能观测到和情况(b)同种类型的共振现象．当

$$KL\gg\pi \qquad \zeta<\eta\ll 1 \qquad (\text{因此 } \xi=1)$$

时，后者特别尖锐。考察方程(3.23)表明：作为 η^2（即能量）函数的透射系数仍然很小，几乎处处都是 $4\eta\zeta$ 量级，但出现一系列等于 $4\eta\zeta/(\eta+\zeta)^2$ 的尖锐极大值；这些峰值的宽度约为 $4(\eta+\zeta)/KL$．它们的位置对应的能量，在区域II中含有“半波长”的整数 n 倍，即 $\xi KL=n\pi$（它们的距离近似为 $2\pi/KL$）．

人们可以继续进行这种研究：考虑振幅 R 和 S 的位相，确定透射波的“透过时间”，或反射波的“反射时间”，然后比较这些时间和经典粒子穿过区域II所需的时间．这导致下述定性图象：在共振时，波在分裂为透射波和反射波之前，在远远大于经典时间（大 $(\eta+\zeta)^{-1}$ 倍）的时间内，波仍然集中在区域II内；在远离共振时，波实际上并不穿入区域 II．在区域 I 和 II 的边界处，以近乎瞬时的方式，几乎全部被反射(见习题3.1)．

7. 方势垒的贯穿 “隧道”效应

作为最后一个例子，我们来研究方势垒的贯穿问题（图3.6）．

$$U(x)=\begin{cases}0 & x>L & (\text{区域 I})\\ U_0\,(>0) & 0<x<L & (\text{区域 II})\\ 0 & x<0 & (\text{区域 III}),\end{cases}$$

在这种情况下，所有正的 ε 值都是二度简并本征值．按照 ε

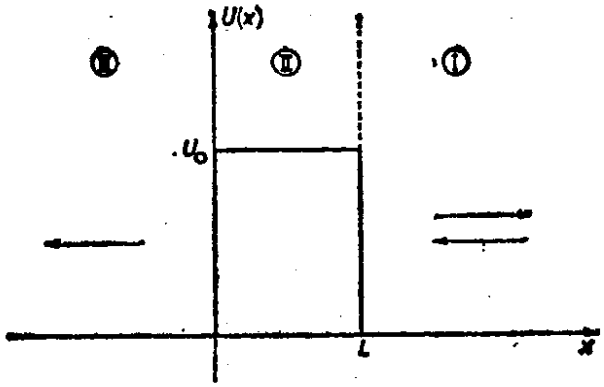

图 3.6　方势垒

是大于还是小于 U_0 而出现两种情况．在两种情况里，我们都构造一个表示波在区域 III 以负方向行进的解，即形式为

$$\begin{cases} e^{-i\sqrt{\varepsilon}x} + Re^{+i\sqrt{\varepsilon}x} & \text{对 } x > L \\ Se^{-i\sqrt{\varepsilon}x} & \text{对 } x < 0 \end{cases}$$

的解．

在区域 II 它的行为是

指数的 $Ae^{\kappa x} + Be^{-\kappa x}$ 若 $\varepsilon < U_0$ $(\kappa = \sqrt{U_0 - \varepsilon})$

正弦的 $Ce^{ikx} + De^{-ikx}$ 若 $\varepsilon > U_0$ $(k = \sqrt{\varepsilon - U_0})$．

我们只给出透射系数的计算结果(图 3.7)：

$$T = |S|^2 = \begin{cases} \dfrac{4\varepsilon(\varepsilon - U_0)}{4\varepsilon(\varepsilon - U_0) + U_0^2 \sin^2 kL}, & \text{若 } \varepsilon > U_0 \\ \dfrac{4\varepsilon(U_0 - \varepsilon)}{4\varepsilon(U_0 - \varepsilon) + U_0^2 \sin h^2 \kappa L}, & \text{若 } \varepsilon < U_0. \end{cases}$$

和上节一样，人们可以对这种形式的波函数构成的 (3.9) 型波包的运动以及来自 $+\infty$ 的同样能量经典粒子的运动作一比较．

当 $\varepsilon < U_0$ 时，出现最引人注目的差别．经典粒子又被势垒束缚住，不能贯穿进去．而波包则分裂为一个反射波包和

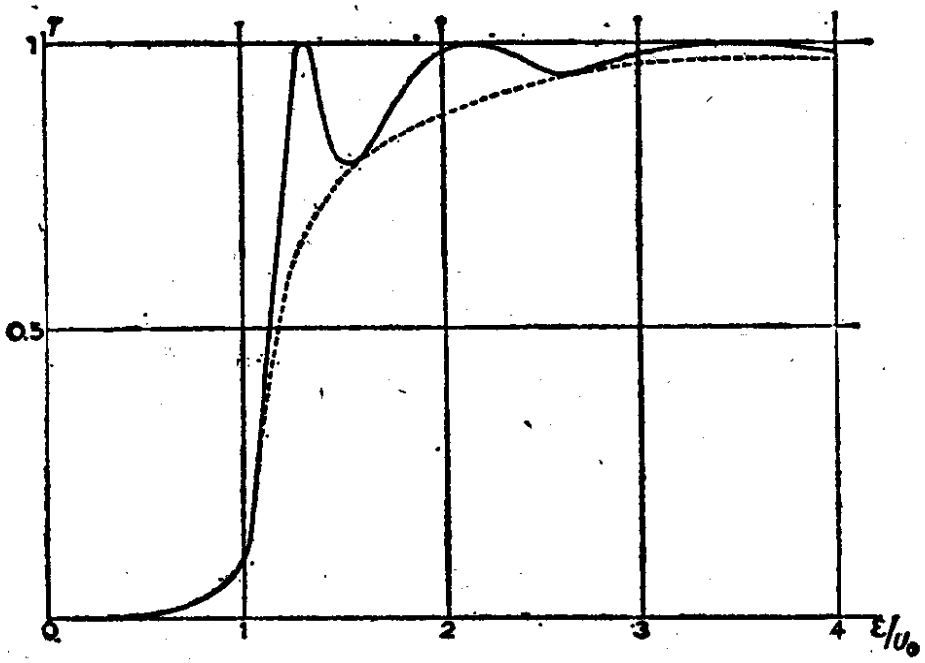

图 3.7　通过方势垒的透射系数作为能量的函数变化（图 3.6 势垒）．我们已用$U_0L^2 = 40$

一个它的强度永不为零的透射波包：当 ε 从 0 增到 U_0，透射系数有规则地从零增到数值 $[1 + U_0L^2/4]^{-1}$．这一效应是众所周知的**隧道效应**，在 α 放射性理论中它起重要作用．势垒越低、越薄，它就越重要．

当 $\varepsilon > U_0$ 时，经典粒子在区域 II 中减慢，但尽管如此它还是能穿过，并在区域 III 中朝$-\infty$ 继续它的行程．另一方面，波包则几乎总是部分地被反射．只对某些能量值，即 kL 是 π 的倍数的那些值，才能发生全透射 $(T = 1)$．当能量增加时，透射系数在这一极大值和 $4\varepsilon(\varepsilon - U_0)/(2\varepsilon - U_0)^2$ 量级的极小值之间振荡．当势垒非常高或非常厚时，以及当在区域 II 中动能 $\varepsilon - U_0$ 很小时，这种效应特别显著．注意和上节讨论的共振现象间的类似性（见习题 3.2）．

II. 一维薛定谔方程的一般性质

8. 朗斯基式的性质

让我们转到方程

$$y'' + [\varepsilon - U(x)]y = 0, \qquad (3.25)$$

我们要证明这一本征值方程的一些十分普遍的性质. 唯一加于实函数 $U(x)$ 上的限制是: 有下界, 在整个区间 $(-\infty, +\infty)$ 分段连续.

这些性质中的大部分可直接从两个解的朗斯基式的重要定理推出,这个定理我们以后将称为**朗斯基定理**.

按定义,两函数 y_1, y_2 的朗斯基式是

$$W(y_1, y_2) \equiv y_1y_2' - y_2y_1',$$

它是 y_1 和 y_2 的一个双线性表达式, 在两个函数交换时反对称. 如果它在 x 轴的某点为零,函数 y_1 和 y_2 就在该点有相同的对数微商;如果它在整个区间$(-\infty, +\infty)$为零,这两个函数互为倍数.

朗斯基定理——若 z_1 和 z_2 分别是方程

$$z_1'' + F_1(x)z_1 = 0 \qquad (3.25')$$

$$z_2'' + F_2(x)z_2 = 0 \qquad (3.25'')$$

的解,而且在区间(a, b)中函数 $F_1(x)$ 和 $F_2(x)$ 分段连续,则它们的朗斯基式在这个区间中的整个变化由表达式

$$W(z_1, z_2)\Big|_a^b = \int_a^b [F_1(x) - F_2(x)]z_1z_2dx \qquad (3.26)$$

给出.

为了证明这个定理,我们以 z_2 乘(3.25′),以 z_1 乘(3.25″),然后逐项相减,得

$$[z_2z_1'' - z_1z_2''] + (F_1 - F_2)z_1z_2 = 0,$$

除了差个符号外，第一项是朗斯基式 $W(z_1, z_2)$ 对 x 的微商。对整个区间(a, b)逐项积分后即得(3.26)式，证毕.

当方程 (3.25′) 和 (3.25″) 是具有同样势能 $U(x)$ 的 (3.25) 类型的方程时，我们对这个定理特别有兴趣. 人们得出下面三个重要推论:

推论 I.——若 y_1 和 y_2 分别是方程 (3.25) 对应于常数 ε 的值 ε_1 和 ε_2 的解，而且对于变数 x 的任一双数值 a 和 b，这些解被定义在这区间 $[a, b]$ 中，则有:

$$W(y_1, y_2)\Big|_a^b = (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)\int_a^b y_1 y_2 dx. \qquad (3.27)$$

推论 II——若 y 和 z 是方程(3.25)对应于同一 ε 值的两个解，则它们的朗斯基式与 x 无关:

$$W(y, z) = 常数.$$

推论 III——令 $Y(x; \varepsilon)$ 是方程 (3.25) 的解，它对 x 的对数微商在 x 轴的点 a 有固定值 f_a，再令 $f(x; \varepsilon)$ 是它在轴上点 x 的对数微商. 当把 $f(x; \varepsilon)$ 考虑为 ε 的一个函数时，它是这个变数的单调函数，若 $x < a$，它是增函数；若 $x > a$，它是减函数. 它的微商是

$$\frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = -\frac{1}{Y^2(x, \varepsilon)}\int_a^x Y^2(\xi, \varepsilon)d\xi. \qquad (3.28)$$

[考虑为 ε 的函数时，$f(x; \varepsilon)$ 有类似于正切或余切的特性，在 $Y(x)$ 为零的各点有垂直渐近线.]

推论 I 和 II 是朗斯基定理的直接应用. 推论 III 的证明如下. 固定 ε，若给出 x 轴上一给定点 $x = a$ 处解的值和它的微商的值，就完全决定了方程(3.25)的一个解. 令 $Y(x; \varepsilon)$ 是这个特解

$$Y(a; \varepsilon) = y_a, \qquad Y'(a; \varepsilon) = y'_a.$$

如果改变 ε 但保留这些边界条件不变，$Y(x; \varepsilon)$ 是 ε (也是 x)

的连续函数. 两个无限接近的值 ε, $\varepsilon+\delta\varepsilon$ 对应两个无限接近的表达式 Y, $Y+\delta Y$. 在区间 (a,b) 把推论 I 用于后者:

$$W(Y, Y+\delta Y)\Big|_a^b = -\delta\varepsilon\int_a^b Y^2dx,$$

对 $x=a$, 按假说 $W(Y, Y+\delta Y)=0$. 对所有其它 x 值,

$$W(Y, Y+\delta Y) = W(Y, \delta Y)$$

$$= Y\delta Y' - Y'\delta Y = Y^2\delta\left(\frac{Y'}{Y}\right) = Y^2\delta f.$$

我们已引入 $f=Y'/Y$. 像 Y 一样,对数微商 f 是 ε 和 x 的连续函数. 有

$$-Y^2\delta f|_{x=b} = \delta\varepsilon\int_a^b Y^2dx.$$

换言之

$$\frac{\partial f}{\partial\varepsilon}\Big|_{x=b} = -\frac{1}{Y^2(b)}\int_a^b Y^2(x)dx. \qquad \text{证毕.}$$

包含在这三个推论中的薛定谔方程解的性质与势 $U(x)$ 的特殊形状无关,这就是对它们有兴趣的原因所在.

9. 解的渐近行为

方程(3.25)的通解在区间$(-\infty, +\infty)$的边界处的渐近形式依 x 趋于这些极限时 $\varepsilon-U$ 的符号而很不相同. 我们来找在极限 $x=+\infty$ 时的渐近形式. 类似的结论可用在极限 $x=-\infty$ 处. 假定当 x 超过某个值 x_0 时, $\varepsilon-U(x)$保持同号. 于是会发生两种情况:

第一种情况: 当 $x>x_0$ 时 $\varepsilon>U(x)$

我们将假定——实际情况经常是这种情况——当 $x\to\infty$ 时 $U(x)$ 单调趋于一个有限的极限 U_+. 令

$$k=\sqrt{\varepsilon-U_+}$$

我们将证明：当 $x \to \infty$，

（a）方程(3.25)的实数解保持有界，且在两个相反的值之间无限振荡；

（b）此外，若 $U(x)$ 趋于 U_+ 比 $\frac{1}{x}$ 快，则

$$y \underset{x\to\infty}{\sim} A_+ \sin(kx + \varphi_+), \tag{3.29}$$

其中 A_+ 和 φ_+ 是两个适当的实数。

为此目的，注意到方程"渐近地趋于"方程 $z'' + k^2 z = 0$，此方程的通解是 $A\sin(kx + \varphi)$，依赖于两个任意常数 A 和 φ。为了决定 y 的渐近形式，引入由

$$y = A\sin(kx + \varphi) \qquad y' = Ak\cos(kx + \varphi) \tag{3.30}$$

定义的函数 $A(x)$ 和 $\varphi(x)$（常数变化法）。方程(3.25)等价于两个一阶微分方程

$$\frac{A'}{A} = \frac{U - U_\pm}{2k}\sin 2(kx + \varphi),$$

$$\varphi' = -\frac{U - U_\pm}{k}\sin^2(kx + \varphi).$$

积分后得

$$A(x) = A(x_0)\exp\left\{\int_{x_0}^{x} \frac{U(\xi) - U_\pm}{2k}\sin 2[k\xi + \varphi(\xi)]\,d\xi\right\}, \tag{3.31}$$

$$\varphi(x) = \varphi(x_0) - \int_{x_0}^{x} \frac{U(\xi) - U_\pm}{k}\sin^2[k\xi + \varphi(\xi)]d\xi. \tag{3.32}$$

(3.31)式右边的积分当然收敛：当 $x \to \infty$ 时，$A(x)$趋于一有限的极限 A_+；此外，由于 $\varphi' \to 0$，在 y 的表达式(3.30)中，函数 $\sin(kx + \varphi)$ 作周期振荡，其周期渐近地趋于 $2\pi/k$.

这就证明了已经说过的第一个结果. 此外若 $U(x)$ 趋于 U_+ 比 $\frac{1}{x}$ 快,(3.32)式右边的积分也收敛: 在渐近形式(3.29)中, A 和 φ 分别趋于有限的极限 A_+ 和 φ_+. 证毕.

第二种情况: 当 $x > x_0$ 时 $\varepsilon < U(x)$.

我们将要得到的结果与 $U(x)$ 在无穷远处的行为无关. 我们只假定

$$U(x) - \varepsilon \geqslant M^2 > 0 \qquad 当\ x > x_0,$$

这种情况对应于方势阱问题中的指数解.

我们将证明: 当 $x \to \infty$ 时,

(a) 方程 (3.25) 有一个特解 (确定到一个常数), 它至少和 $\exp(-Mx)$ 一样快地趋于 0.

(b) 所有其它的解, 至少和 $\exp(Mx)$ 一样快地趋于 ∞.

由于解被确定到一个常数, 让我们用条件 $y(x_0) = 1$ 来固定这个常数, 并注意满足这个归一条件的解 $y(x)$ 的行为. 其中一些表示在图 3.8 中.

若我们用 $Y(x)$ 和 $Z(x)$ 分别代表由边界条件

$$Y(x_0) = 1,\ Y'(x_0) = 0 \text{ 及 } Z(x_0) = 0,\ Z'(x_0) = 1$$

定义的特解 .上面考虑的解就是形式为

$$y(x) = Y(x) + fZ(x) \tag{3.33}$$

的解. 参数 $f = y'(x_0)$ 可以取 $-\infty$ 至 $+\infty$ 中的所有值.

$Y(x)$ 和 $Z(x)$ 在整个区间 (x_0, ∞) 中保持为正数, 且至少和 $\exp(Mx)$ 一样快地趋于无穷. 确实, 和方程 (3.25) 中所有解类似, 这些函数和它的二级微商保持同号. 对它们的边界条件作简单考察, 人们就得出这些函数必然是无限增加的, 因为它们是朝上凹的. 为了估算它们增长的迅速程度, 我们注意到 $Y'' \geqslant M^2Y$ 及 $Z'' \geqslant M^2Z$, 并且把这些函数和微分方程 $u'' - M^2u = 0$ 在 x_0 点有同样初始条件的解比较一

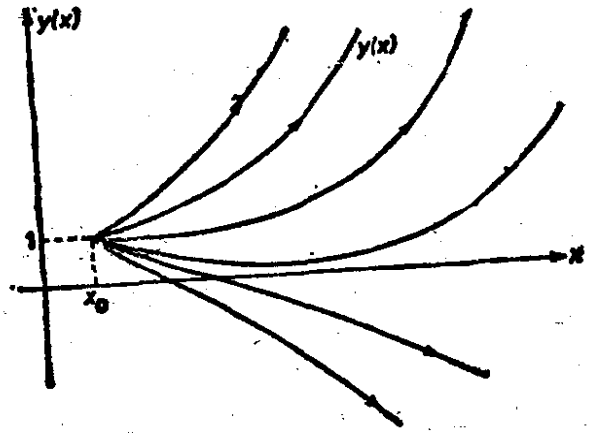

图 3.8　对 $x > x_0$ 时 $U(x) - e \geqslant M^2 > 0$ 的情况，图形表示满足归一条件 $y(x_0) = 1$ 的方程(3.25)的几个解.

下，这些解分别是 $\cosh M(x - x_0)$ 和 $\sinh M(x - x_0)$。 Y 和 Z 保持处处高于(或等于)这些作比较的函数.

实际上，利用朗斯基定理，有

$$W[Y, \cosh M(x - x_0)] \leqslant 0,$$

因此

$$Y'/Y \geqslant M \tanh M(x - x_0),$$

积分后得

$$Y \geqslant \cosh M(x - x_0);$$

类似地可证明 $Z \geqslant \sinh M(x - x_0)$. 注意到

$$Y' \geqslant MY \tanh M(x - x_0),$$

因此在无穷远处，$Y' \geqslant MY$；类似地，在无穷远处，

$$Z' \geqslant MZ.$$

另一方面(推论 II)

$$Z'Y - Y'Z = 1 \qquad \text{对任何 } x. \tag{3.34}$$

引入函数

$$u(x) \equiv \frac{Y}{Z}, \qquad v(x) \equiv \frac{Y'}{Z'}.$$

由性质(3.34)以及由 Y 和 Z 是方程(3.25)解的事实得

$$u - v \equiv \frac{Y}{Z} - \frac{Y'}{Z'} = \frac{1}{ZZ'},$$

$$u' = \frac{Y'Z - YZ'}{Z^2} = -\frac{1}{Z^2}, \tag{3.35}$$

$$v' = \frac{Y''Z' - Y'Z''}{Z'^2} = \frac{U - \varepsilon}{Z'^2}.$$

在区间(x_0, ∞)，u是递减函数，v是递增函数，它们之差在无穷远处为零. 当$x \to \infty$时，它们有一个共同(正的)极限C，我们得到不等式，

$$v(x) < C < u(x).$$

它可借助于等式(3.35)再改写为

$$-\frac{1}{ZZ'} < v - C < 0 < u - C < \frac{1}{ZZ'}. \tag{3.36}$$

特解

$$\vartheta(x) \equiv Y - CZ = [u(x) - C]Z(x)$$

和它的微商

$$\vartheta'(x) \equiv Y' - CZ' = [v(x) - C]Z'(x)$$

恒满足不等式

$$-\frac{1}{Z} < \vartheta' < 0 < \vartheta < \frac{1}{Z'}.$$

因此ϑ处处为正，而且至少和$1/Z'$同样快地趋于零，从而理由更充分地至少和$\exp(-Mx)$同样快地趋于零. 类似地，ϑ'是一个处处为负的函数，至少和$\exp(-Mx)$同样快地趋于零. ϑ就是我们正要找的在无穷远处为零的解.

显然，不存在其它解，因为若$f \neq -C$，解$y(x)$也能写成

$$y = \vartheta + (f + C)Z,$$

准确到一个非零因子$f + C$，它们的渐近行为与Z相同. 证毕.

10. 本征值谱的性质

令 U_+ 和 U_- 分别是 x 趋于 $+\infty$ 和 $-\infty$ 时 $U(x)$ 的极限. (这些极限中的任何一个换成 $+\infty$ 时，下述结论仍然成立.) U_+ 和 U_- 把 ε 的变化范围分成三个区域，在这些区域中的本征值谱有不同的性质. 为具体起见，假定 $U_+ < U_-$.

当 $\varepsilon > U_-$ 时，在区间 $(-\infty, +\infty)$ 的两端，$\varepsilon - U(x)$ 保持为正数；因为方程 (3.25) 的任何一个解要被采纳为本征函数，则当 $x \to \pm\infty$ 时，它应保持有界. ε 是二度简并本征值. 本征值谱是**连续**和**简并**的. 另一方面，在两个渐近区域，本征函数在两个有限而相反的极限之间无限振荡：它们表示**非束缚态**.

当 $U_- > \varepsilon > U_+$ 时，由于在极限 $x = -\infty$ 处，$\varepsilon - U(x)$ 为负，在这个渐近区只有一个解保持有界(指数衰减). 在另一个渐近区中，由于在那里 $\varepsilon - U(x)$ 为正，这个解保持有界且无限振荡；因此，它是一个容许的本征函数且表示一非束缚态. 本征值谱是**连续**和**无简并**的.

当 $U_+ > \varepsilon$ 时，$\varepsilon - U(x)$ 在两个渐近区均为负. 束缚解(如果存在)在区间的两个端点为零(指数下降)并表示一束缚态. 然而，它只对分立的 ε 值存在. 事实上，若令 ϑ_- 是在 $-\infty$ 极限处为零的解，ϑ_+ 是在 $+\infty$ 极限处为零的解，f_- 和 f_+ 分别是它们在 x 轴某一有限点处的对数微商，则当且仅当 ϑ_- 和 ϑ_+ 相等 (准到一常数因子)，即 $f_+ = f_-$ 时，ε 才是一个本征值. 作为 ε 的函数来考虑时，f_- 是一个单调减小函数，f_+ 是一个单调增加函数(推论 III[1])). 因此，这两个函数

1) 实际上，我们正在论述的是推论 III 对 $a = +\infty$ 或 $a = -\infty$ 情况的推广. 易见，这个推论在函数 $Y(x;\ \varepsilon)$ 的定义有小小改变时仍然成立. $Y(x;\ \varepsilon)$ 是方程(3.5)的解，它在点 $a(=\pm\infty)$ 处为零 (它的微商也为零). 注意对某些 ε 值，f_- 和 f_+ 表现为垂直渐近线.

相等时的 ε 值必然是彼此隔开的. 谱是分立和无简并的.

分立谱的本征值数目依赖于所考虑的 $U(x)$ 函数的具体形式. 它可以从 0 到∞. 若 $U(x)$ 处处超过它的两个渐近值中较小的一个，比方 U_+，则它当然是零. 否则，就可证明——我们这里只叙述一下而不加证明——它是

$$\frac{1}{\pi}\int\sqrt{U_+ - U(x)}dx = \frac{1}{\pi}\int\frac{\sqrt{2m[V_+ - V(x)]}}{\hbar}dx$$

的数量级. 这个积分扩展到 x 轴中 $U(x) < U_+$ 的整个区域. 特别是，如果这个积分发散，则本征值数目为无限大.

11. 非束缚态 波的反射和透射

用谱的连续的，二度简并部分的本征函数，人们可以构造一个波包，它被势 $U(x)$ 部分反射，部分透射. 为简单起见，我们假定 $U(x)$比 $1/|x|$更快地趋于它的两个渐近极限 U_+ 和 U_-；于是我们可用方程(3.20)给出的渐近表达式.

为构成所要考虑的波包，可用两种类型的本征函数. 第一种类型的本征函数是函数 $u(x)$，它在两个渐近区中的行为是

$$u \underset{x\to-\infty}{\longrightarrow} e^{ik_-x} + R_u e^{-ik_-x}$$
$$\underset{x\to+\infty}{\longrightarrow} S_u e^{ik_+x} \qquad (k_\pm = \sqrt{\varepsilon - U_\pm}).$$

由相邻能量的函数以类似于式 (3.9) 的方式叠加得来的波包表示一个在正方向从$-\infty$进来的入射波 $\exp(ik_-x)$；它进入势 $U(x)$ 后分解为一个在相反方向运动的反射波 $R_u\exp(-ikx)$ 和一个向$+\infty$ 传播的透射波 $S_u\exp(ik_+x)$ (图 3.9a).

第二种类型的函数是函数 $v(x)$，它的渐近行为是

$$v \underset{x\to-\infty}{\longrightarrow} S_v e^{-ikx}$$

$$\xrightarrow[x\to+\infty]{} e^{-ik_+x} + R_v e^{ik_+x}.$$

它表示一个在相反意义下行进的类似的波包(图 3.9*b*)。

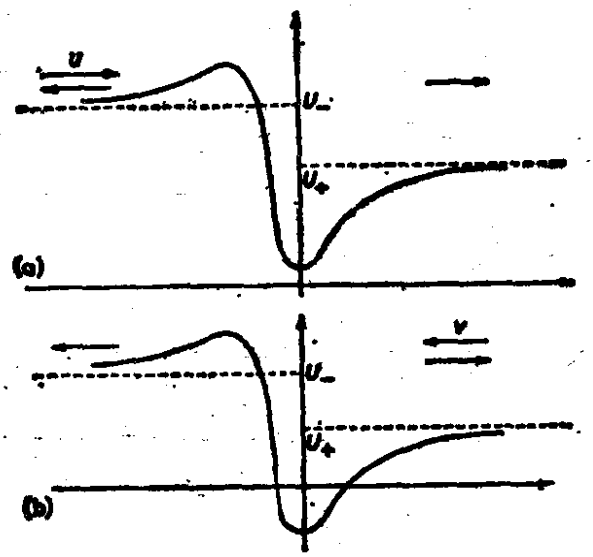

图 3.9 在一势场下波的反射和透射:
(a) 类型 u 的解: 从负 x 来的波;
(b) 类型 v 的解: 从正 x 来的波.

函数 u 和 v 以及它们的复数共轭 u^* 和 v^* 是同一个薛定谔方程的解. 任何两个这种函数的朗斯基式与 x 无关 (推论 II); 特别是在两个渐近区中它取同样的值;让这两个值相等, 我们就得到系数 R_u, S_u, R_v 和 S_v 或者它们的复数共轭之间的一个关系式. 用四个函数 u, v, u^* 和 v^* 可以构成六个这种关系式. 它们是十分普遍的关系式, 不管势函数 $U(x)$ 的形状如何,它们都成立.

我们得到[1]

$$\frac{i}{2} W(u, u^*) = k_-[1 - |R_u|^2] = k_+|S_u|^2, \qquad (3.37)$$

1) 如果我们利用两个函数的朗斯基式是双线性和反对称的事实, 以及注意到
$W(e^{ikx}, e^{ikx}) = W(e^{-ikx}, e^{-ikx}) = 0$ 及 $W(e^{-ikx}, e^{ikx}) = 2ik$,
则这个计算是十分简单的.

$$\frac{i}{2}W(v,v^*)=-k_-|S_v|^2=-k_+[1-|R_v|^2],\quad(3.38)$$

$$\frac{i}{2}W(u,v)=k_-S_v=k_+S_u,\quad(3.39)$$

$$\frac{i}{2}W(u,v^*)=-k_-R_uS_v^*=k_+S_uR_v^*.\quad(3.40)$$

以及由最后两个式子的复数共轭导出的另两个关系式.

(3.37)式和(3.38)式称为**通量守恒关系**.我们已经在特殊情况下验证过它们[(3.13)和(3.24)式].这个名字的根源来自在渐近区中非束缚态波函数ψ的下述解释. 我们将在讨论碰撞问题时(第十章)再来检查这种解释的正确性.令$A\exp(ikx)+B\exp(-ikx)$是波函数ψ在渐近区之一(例如$-\infty$)中的表达式. 如果人们用这个波函数来建立一个类似于表达式(3.9)给出的波包,则它由两项构成,第一项由$A\exp(ikx)$构成,是一个相对强度为$|A|^2$的项,以速度$\hbar k/m$在x增加的方向行进;另一项,由$B\exp(-ikx)$构成,强度为$|B|^2$,以同样的速度但在相反方向行进. 在渐近区足够远处,这两项不干涉,在第二项到达以前,第一项已经离开这个区域很久了. 然而,不用这波函数构成一个表示粒子运动的波包,人们也可以完全等效地考虑——在上面指出的解释下这是严格的——波本身表示粒子数目极大极大的一个统计系综. 这波由两个波束组成: 一个是在所考虑的渐近区中,以强度为$|A|^2$,在x增加的方向以速度$\hbar k/m$行进的波束;另一个是强度为$|B|^2$,以同样速度但反方向运动的波束. 粒子通过一给定点的总通量(在x增加的方向为正)是正向行进的粒子通量$(\hbar k/m)|A|^2$和负向行进的粒子通量$(\hbar k/m)|B|^2$之差. 通量等于(准到一个常数)朗斯基式$W(\psi,\psi^*)$:

$$\frac{\hbar k}{m}[|A|^2-|B|^2]=\frac{i}{2}\frac{\hbar k}{m}W(\psi,\psi^*).$$

在区间$(-\infty, +\infty)$两端朗斯基式 $W(\psi, \psi^*)$ 相等意味着每单位时间进入作用区的粒子数等于离开的粒子数.

按照这个解释,(3.37)式和(3.38)式中的一个或者另一个正好可以写为

$$\text{入射通量} - \text{反射通量} = \text{透射通量}.$$

遵照同样的解释,**透射系数** T 可定义如下:

$$T \equiv \frac{\text{透射通量}}{\text{入射通量}}.$$

特别有

$$T_u = \frac{k_+}{k_-}|S_u|^2,$$

$$T_v = \frac{k_-}{k_+}|S_v|^2.$$

等式(3.39)两边的绝对值是相等的,我们得到等式

$$T_u = T_v. \tag{3.41}$$

对于一个给定的能量,波的透射系数与行进方向无关. 这是透射系数的倒易性,它们已经在§ 3 和§ 6 的特殊情况下被指出过了. 势垒在一个方向穿过和在另一个方向穿过一样困难.

等式 (3.40) 两边绝对值相等,并和守恒关系 (3.37) 及 (3.38) 合起来,再一次得出倒易关系 (3.41).

从(3.39) 式和 (3.40)式我们也得到了反射振幅和透射振幅的位相之间的关系:

$$\text{位相}\ (S_u) = \text{位相}\ (S_v),$$

$$\text{位相}\left(\frac{R_u}{S_u}\right) = \pi - \text{位相}\left(\frac{R_v}{S_v}\right).$$

对这些关系式的兴趣在于这一事实: 位相是和波包传播中的"推迟"效应相联系的. 在第 I 节 (§§ 3 和 9)中我们已经见

到过几次，量 $\hbar\partial$ (位相)$/\partial E$，即 $\hbar$ 和反射或透射振幅的位相对能量微商的乘积，是一个具有时间量纲的量，可以解释为在反射或透射过程中波的“推迟”. 这个解释被证明是十分普遍的.

12. 束缚态的节点数

我们现在来考虑分立谱的本征函数(如果它们存在). 在这种情况下无简并，从而，这些函数准到一个位相内当然是实函数.

让我们回到§ 8 的记号. 假定函数 y_1 和 y_2 是实的，$\varepsilon_2 > \varepsilon_1$. 我们利用关系式 (3.27)，并取 y_1 的两个顺着次序的零点为积分限，得

$$y_2 y_1' \Big|_a^b = (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \int_a^b y_1 y_2 dx.$$

在区间(a, b)中，y_1 保持同号. 让我们再假定，比方 $y_1 > 0$. 在这种情况下 $y_1'(a) > 0$，$y_1'(b) < 0$. 因而 y_2 在区间(a, b)中肯定变号；如若不然，方程右边将和 y_2 有相同符号，而左边将有相反符号. 于是 y_2 在区间(a, b)中至少必有一个零点. 在 y_1 的两个节点当中，y_2 至少总有一个节点.

现在假定 y_1 和 y_2 是分立谱本征函数. 它们在区间$(-\infty, +\infty)$的两个边界上为零(“指数地”). y_1 的 n_1 个节点把区间细分为 $n_1 + 1$ 个分区间，在每一个分区间，y_2 至少有一个零点：这样，函数 y_2 至少有 $(n_1 + 1)$ 个节点. 从而，它的本征值越高，本征函数的节点越多.

重复在§ 10 中用过的论证可以建立相继的本征函数，把函数 ϑ_- 和 ϑ_+ 节点数看作随能量 ε 不断增加而增加，人们就得到如下更严格的说法 (习题 3.4 和 3.5)：

如果人们按能量增加的顺序 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_n, \cdots$排列本征

态，本征函数也同样和节点数增加的顺序同步；第 n 个本征函数有 $(n-1)$ 个节点，在各节点之间，后面的本征函数全都至少有一个节点。

13. 正交关系

令(3.27)式中积分限 a、b 分别趋向$-\infty$和$+\infty$，人们得到朗斯基定理(推论 I)的另一个十分重要的结果。

设 y_1 和 y_2 为属于分立谱中两个分立本征值的本征函数。它们在无穷远处均为零，因而它们的朗斯基式亦为零；又因 $\varepsilon_2-\varepsilon_1\neq 0$，

$$\int_{-\infty}^{+\infty} y_1 y_2 dx = 0. \tag{3.42}$$

当两个(实)函数的乘积 y_1y_2 对整个空间的积分为零时，则称这两个函数正交。更普遍地，两个复函数 y_1 和 y_2，若

$$\int_{-\infty}^{\infty} y_1^* y_2 dx = 0,$$

则称它们**正交**。因此，分立谱的本征函数是正交的。

很清楚，如果两个本征函数中只有一个属于分立谱，这个结果仍然正确。

当两个本征函数都属于连续谱时，极限手续是比较难处理的。朗斯基式 $W(y_1, y_2)$ 至少在积分限中的一个出现无限振荡；因而积分 $\int y_1y_2dx$ 也有同样性质。但是，如果我们至少把积分中的一个本征函数，如 y_2，用环绕 ε_2 的一个小能量区域 $\delta\varepsilon$ 的本征函数组成的波包代替，在 $\delta\varepsilon \ll |\varepsilon_1-\varepsilon_2|$ 的极限下，仍可证实这正交关系。确实，让我们把 y_2 写成 $y(x, \varepsilon)$ 的形式，以便提醒我们，它是能量 ε 的函数[1]。波包也写为

1) 已知 ε 并不足以决定解 $y(x;\varepsilon)$，因为后者还依赖于一个或两个任意常数，这依本征值是简单的还是简并的而定。人们在积分限之一，即$-\infty$ 或 $+\infty$ 处，对 $y(x, \varepsilon)$ 的渐近形式加上适当的条件来消除这种任意性。

$$Y_2(x;\delta\varepsilon)=\frac{1}{\sqrt{\delta\varepsilon}}\int_{\varepsilon_2}^{\varepsilon_2+\delta\varepsilon}y(x;\varepsilon)d\varepsilon. \qquad (3.43)$$

由于朗斯基式线性地依赖于函数 y_2，对 (3.27) 式逐项积分后得

$$W(Y_2,y_1)\Big|_a^b=(\varepsilon_2-\varepsilon_1)\int_a^b y_1Y_2dx$$
$$+\int_a^b y_1\left[\frac{1}{\sqrt{\delta\varepsilon}}\int_{\varepsilon_2}^{\varepsilon_2+\delta\varepsilon}(\varepsilon-\varepsilon_2)y(x;\varepsilon)d\varepsilon\right]dx$$

对这个手续的兴趣在于这一事实：在 y_2 有振荡行为的渐近区中，Y_2 趋向零 $\left(\text{如}\frac{1}{x}\right)$. 当令 a 和 b 分别趋向 $-\infty$ 和 $+\infty$ 时，左边为零；从而右边两个收敛的积分加起来为零. 在 $\delta\varepsilon\ll(\varepsilon_2-\varepsilon_1)$的极限下，第二个积分变得可以忽略. 因此我们能写成

$$\lim_{\delta\varepsilon\to0}\int_{-\infty}^{+\infty}y_1(x)Y_2(x;\delta\varepsilon)dx=0. \qquad (3.42')$$

(3.43) 式定义的波包 $Y_2(x;\delta\varepsilon)$ 称为函数 $y_2(x)$ 的本征微分，式中 $\delta\varepsilon$ 是个很小的量，在计算结束时最后把它取为零.

最后，属于两个分立本征值的本征函数正交，当两个本征函数属于连续谱时，按惯例：在正交关系[式(3.42′)]中，至少本征函数中的一个必须由它的本征微分代替.

我们已经用一种比较综合的方式提出了本征微分的概念. 实际上是从来不用它的. 我们以后将描述一种比较优美的数学工具，它使我们能以十分普遍的方式表述正交关系，而无须用这个概念.

14. 关于宇称的注记

让我们回到宇称概念上来，在涉及无限深方势阱时，我们

第一次碰到它. 这个性质是完全普遍的.

如果势是偶的,这就是说

$$U(x) = U(-x).$$

当我们将 x 换成 $-x$ 时，薛定谔哈密顿量不变：它对原点的反演是不变的. 从而，若 $\psi(x)$ 是一个本征值为 E 的本征函数

$$H\psi(x) = E\psi(x),$$

则把 x 换成 $-x$ 时,方程继续保持正确

$$H\psi(-x) = E\psi(-x).$$

此外,偶函数 $\psi(x) + \psi(-x)$ 和奇函数 $\psi(x) - \psi(-x)$ 也是同一个本征值 E 的本征函数；当然这两个函数中至少有一个不恒等于零. 于是可以出现两种情况:

1. 本征值 E 不简并. 上面的四个函数彼此差常数因子：$\psi(x)$ 是两个函数 $\psi(x) + \psi(-x)$ 或 $\psi(x) - \psi(-x)$ 中不全为零的那一个(另一个必然全为零)的倍数. 换言之，能谱中无简并部分的本征函数有完全确定的宇称： 一些是偶的,其它是奇的. 事实上,偶函数有偶数个节点，奇函数有奇数个节点。因此,若本征函数按能量本征值增加的顺序排列,则这些函数是奇偶交替的,基态的本征函数总是偶的. §5 的结果和这些预言完全符合.

2. 本征值 E 简并. 在这种情况下所有函数可归入 $\lambda\psi + \mu\varphi$ 形式,其中 ψ 和 φ 是两个线性无关的本征函数. 让我们假定这两个函数中至少有一个,比如 ψ,无完全确定的宇称：在这些条件下,函数 $\psi_+ = \psi(x) + \psi(-x)$ 和 $\psi_- = \psi(x) - \psi(-x)$ 中没有一个恒等于零. 这两个函数是宇称相反的,必然是线性无关的;如上面所指出,它们是同一本征值 E 的本征函数. 因此,人们可以把 ψ，φ，从而也把 $\lambda\psi + \mu\varphi$ 表示为这两个函数线性组合的形式.所以,一个简并本征值的本征函

数可以写为两个函数的线性组合，这两个函数中每个都有完全确定的宇称.

人们通过检查即可看到连续谱的本征值全是二度简并的，它们中的每一个对应一个偶本征函数(它的微商在原点为零)和一个奇函数(它在原点为零).

量子力学中经常出现所研究的体系的哈密顿量在某些特殊变换下是不变的. 从这些不变性质能得出薛定谔方程的本征解具有某些对称特性. 宇称就是这种情况的一个十分简单的例子.

练习和问题

1.在§6的方势阱问题中，计算在解 x 作为阱参数函数的表达式(3.22)中出现的常数 P, Q, R, S; 验证给出透射系数的表达式(3.23)及守恒关系(3.24)。假定 $KL \gg \pi$ 及 $\xi < \eta \ll 1$，定义和计算透射波的"透过时间"和反射波的"反射时间". 证明共振的存在，并比较透射波和对应的经典粒子的运动.

2.计算§7定义的方势垒的透射系数. 计算透射波的"透过时间"，并比较这个波的运动和经典粒子的运动.

3.研究一粒子在如下方形势中的运动: 对 $x<0$，它是一无限势垒;在正 x 区它是

$$\begin{cases} V(x) = V_{\mathrm{I}} & 0 < x < a \\ V(x) = V_{\mathrm{II}} & a < x < b \\ V(x) = 0 & x > b. \end{cases}$$

假定 $V_{\mathrm{I}} < 0 < V_{\mathrm{II}}$. 比较在 $x = 0$ 点反射的波包和对应的经典粒子的运动. 研究当入射能量 E 小于 V_{II} 时的反射延缓.

证明共振的存在，且讨论当 $E \ll V_{\mathrm{II}}$ 和 $(b-a)\sqrt{2mV_{\mathrm{II}}} \gg \hbar$ 时，这些共振的宽度和反射延缓之间的关系.

4.在一维任意势下的粒子能谱有时也可以包含分立的部分. 证明若人们按能量增加的顺序排列分立谱的本征态，则本征函数也按节点数增加的顺序放置，第 n 个本征函数有 $(n-1)$ 个节点，在这些节点的

任何两个中间，后面的本征函数全都至少有一个节点．

5.一个粒子在一维区间$(0, \infty)$中，势$V(x)$是渐近趋于零的，且在$x=0$处是一无限排斥势．证明束缚态数目等于薛定谔方程某一解的节点数，这个解与无穷小负能量对应，且在原点为零．

第四章　波粒二象性的统计解释和测不准关系

1. 引言

如果人们试图找出微观现象的实验事实和经典理论的预言之间不相符合的根本原因，人们就会得出两个完全普遍适用的结论.

第一个我们曾称它为**作用量的原子性**；它是微观物理中出现不连续性的原因，也就是这样一个事实：一个物理体系作用量的变化，以及物理体系之间作用量的交换都只能以**分立的**和**单个的**量子来进行. 我们在第一章中曾经详细地讨论过这个新概念，我们已经看到，只有在作用量子 $\hbar$ 小到可以忽略的极限下，才能把现象置于经典理论的框架内来描述.

第二个结论是波粒二象性，这是微观客体的十分普遍的性质：在波粒这样两个相互矛盾的方面中，视情况而定，它们表现出或是波或是粒子. 如同常数 $\hbar$ 出现在波和粒子之间的普遍的对应式(2.5)中所表明的那样，实际上这种二象性的特征是和作用量的原子性非常紧密地联系在一起的. 我们曾经看到，二象性这种非常普遍的特征是如何在相当晚的时候才得到承认，以及承认这个事实曾在自然体系量子理论的发展中起过多么重要的作用.

系统地考察衍射实验的实际过程(见第一章 §§5 和 6，第二章 §§7 和 8) 为微观客体的波粒二象性提供了一种非常简单的解释，即在它们的波动方面和它们的粒子方面之间存在

着一种统计联系．波在空间一区域中的强度给出在这个区域中找到粒子的几率． 我们将在本章中详细阐述这种统计解释，并且检查一下它的内在一致性和它同实验事实的相容性．

在第 I 节中，我们将对物质体系逐步发展波动力学的波函数的统计解释．这一节的讨论和结果使我们能在第 II 节中把波粒二象性的统计解释表述为一个非常普遍的结果：海森堡的测不准关系． 在第 III 节中，我们证明不管测不准关系会怎么表现出来，只要我们考虑到测量仪器本身就是遵从同样关系的量子客体，测不准关系就绝不可能被实验否定． 结果，当对一体系作一给定测量时，在体系的演变中，由于测量装置的干预而引起的微扰不可能是任意小的或者是完全可控制的．

事实上，在量子的精确度水平上，不可能把被测量的客体同测量仪器区分开来． 现在，在人们用通常的语言描述测量操作时，已经含蓄地假定了在被测量客体和用来实现这个测量的每样东西之间，界限是截然分明的．然后，测量仪器的干预表现为一种不可控制的微扰，由于作用量的量子性，它们不能取为零． 事实上，这种不可控制的扰动的存在为主体和客体间必要的区别设置了一个极限，并需要修正关于现象描述的经典观念．这个问题将在本章第 IV 节中论述．

I. 波动力学中波函数的统计解释

2. 粒子位置测量结果的几率和动量测量结果的几率

让我们首先处理由单个粒子组成的量子体系．记它的波函数为 $\psi(r, t)$． 它服从薛定谔方程，且若已知它在初始时刻 t_0 时的值 $\psi(r, t_0)$，那么它在每个时刻就都被完全确定．我们暂时先分析在给定时刻 t 的情况，在时刻 t 粒子的波

函数简单记为 $\Psi(\boldsymbol{r})$.

一个经典粒子的动力学状态由每个时刻严格指定它的位置 $\boldsymbol{r}(x, y, z)$ 和它的动量 $\boldsymbol{p}(p_x, p_y, p_z)$ 来决定. 另一方面，由于波函数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 有一定的空间延伸，因此不能把一个量子的粒子归结为处在一个严格的位置上；当人们进行位置测量时，人们只能确定在空间一给定区域找到粒子的几率. 记在体积元 $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}+d\boldsymbol{r})$ 中找到粒子的几率为 $P(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}$. 在一有限体积 V 中找到粒子的几率 $P(V)$ 可由“几率密度” $P(\boldsymbol{r})$ 对体积积分得出:

$$P(V)=\int_V P(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}.$$

类似地，人们一般也不能把一个量子粒子归结为有一个精确的动量. 如果涉及的波是个平面波 $\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$，按德布罗意对应定律，它确实表示一个具有动量 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ 的粒子；然而，Ψ 一般是一个波矢 $\boldsymbol{k}$ 可变的平面波的叠加. 当人们进行动量测量时，人们只能确定动量在动量空间一给定区域中的几率;我们记找到粒子动量在区间 $(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}+d\boldsymbol{p})$ 中的几率为 $\Pi(\boldsymbol{p})d\boldsymbol{p}$. 找到动量在动量空间的有限区域 D 中的几率 $\Pi(D)$ 由它的积分 $\Pi(D)=\int_D \Pi(\boldsymbol{p})d\boldsymbol{p}$ 导出.几率密度 $P(\boldsymbol{r})$ 和 $\Pi(\boldsymbol{p})$ 必须是正的量,满足条件

$$\int P(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}=1,\quad \int \Pi(\boldsymbol{p})d\boldsymbol{p}=1, \tag{4.1}$$

左边的积分分别对整个位形空间和整个动量空间进行.

一旦波函数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 已知,分布 $P(\boldsymbol{r})$ 和 $\Pi(\boldsymbol{p})$ 就完全确定了. 用关系式

$$P(\boldsymbol{r})=\Psi^*(\boldsymbol{r})\Psi(\boldsymbol{r})=|\Psi(\boldsymbol{r})|^2 \tag{4.2}$$

来定义 $P(\boldsymbol{r})$. 这个定义是和粒子在那点出现的几率越大，波在那点的强度就越强的概念完全符合. 关系式 (4.1) 导

至归一化条件

$$N \equiv \int |\Psi(\boldsymbol{r})|^2 d\boldsymbol{r} = 1. \tag{4.3}$$

因此，波函数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 必须是平方可积的；此外，它的归一化在时间过程中必须保持不变。在 §3 中我们将证明：统计解释一致性的这第二个条件确实是完全可满足的。

为决定 $\Pi(\boldsymbol{p})$，让我们考虑和波 Ψ 相联系的粒子的动量测量过程。它和混合光波的光谱分析很类似。当动量测量是借助于衍射装置来实现时，这种类似特别明显，而现在的讨论是和所用的测量装置的特殊性质无关的。引入如下定义[1]的波函数的傅里叶变换 $\Phi(p)$

$$\Phi(\boldsymbol{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \Psi(\boldsymbol{r}) e^{-i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar} d\boldsymbol{r}, \tag{4.4}$$

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int \Phi(\boldsymbol{p}) e^{+i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar} d\boldsymbol{p}, \tag{4.5}$$

按 (4.5) 式，$\Psi(\boldsymbol{r})$ 可视为是具有完全确定的动量 $\boldsymbol{p}$ 的元波 $\exp(i\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$ 的线性组合，每一个元波具有系数

$$(2\pi\hbar)^{-3/2}\Phi(\boldsymbol{p}).$$

如果仅有一项 $\exp(i\boldsymbol{p}_0\cdot\boldsymbol{r}/\hbar)$，测量的结果将肯定是 $\boldsymbol{p}_0$。若 $\Phi(\boldsymbol{p})$只在环绕 $\boldsymbol{p}_0$ 的一个小区域中有显著的数值，像在第二章中研究过的波包那样，实验证明：所找到的数值几乎一定是 $\boldsymbol{p}_0$ 邻域的值。更普遍地说，当 $|\Phi(\boldsymbol{p})|$ 大时，找到动量值在体积元 $(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}+d\boldsymbol{p})$ 中的几率 $\Pi(\boldsymbol{p})d\boldsymbol{p}$ 也大。于是我们定义

$$\Pi(\boldsymbol{p}) = \Phi^*(\boldsymbol{p})\Phi(\boldsymbol{p}) = |\Phi(\boldsymbol{p})|^2. \tag{4.6}$$

---

1) 若(4.4)式和 (4.5) 式右边的积分不收敛，那么这些积分就必须依照附录 A 定理 I 的规定(§ 16)作修正(记住函数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 是平方可积的)。作了这个小修正后，下面的结果仍然成立。下面将不考虑这些问题的数学严格性。

由于在傅里叶变换下标积守恒（§A.16 定理 IV）

$$\int |\Phi(\boldsymbol{p})|^2 d\boldsymbol{p} = \int |\Psi(\boldsymbol{r})|^2 d\boldsymbol{r},$$

若函数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 归一，则归一条件(4.1)自动成立。

傅里叶变换建立了平方可积函数 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 和 $\Phi(\boldsymbol{p})$ 间一对一的对应关系。 如同 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 的知识可确定粒子的动力学状态一样，$\Phi(\boldsymbol{p})$ 的知识也足够确定这个状态；因此人们称 $\Phi(\boldsymbol{p})$ 是动量空间中的波函数，因为函数 Ψ 和 Φ 在定义 (4.2) 和(4.6)中扮演完全对称的角色，这个术语是很有道理的。函数 Φ 和 Ψ 也称为同一动力学状态的等价**表示**。

应该清楚地理解量 $P(\boldsymbol{r})$ 和 $\Pi(\boldsymbol{p})$ 的物理意义。 和波相联系的粒子一般既不具有精确的位置，又不具有精确的动量。对 Ψ 表示的单个体系，要对这些动力学变数中的这个或那个作测量时，不能对测量结果作确定的预言。这里所规定的预言适用于 N 个大量数目、彼此独立的等价体系，每个体系都由同一个波函数 Ψ 表示。如果人们对它们中的每一个作位置测量，那末 $P(\boldsymbol{r})$ 给出的是这个统计系综成员数 N 趋于无限大的极限下，N 个测量结果的分布。类似地，如果测量动量，$\Pi(\boldsymbol{p})$ 给出动量测量结果的分布。

$P(\boldsymbol{r})$ 和 $\Pi(\boldsymbol{p})$ 的上述定义建立在似乎是合理和自洽论证的基础上。 但表达式(4.2)和(4.6)显然并非能唯一地根据这种论证建立起来。事实上，量 $P(\boldsymbol{r})$ 和 $\Pi(\boldsymbol{p})$ 原则上可以直接和实验结果相比较；定义(4.2)和(4.6)的合理性肯定地依赖于这种比较是否成功。

3. 模方的时间守恒

为了使上节的几率定义前后一致，波函数的模方 N 必须在时间上保持不变。 函数 Ψ 和 Ψ^* 分别满足薛定谔方程

(2.33)和它的复数共轭方程，也就是

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = H\psi$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^* = -(H\psi)^*.$$

因

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2 = \psi^*\left(\frac{\partial}{\partial t}\psi\right) + \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)\psi$$

$$= \frac{1}{i\hbar}[\psi^*(H\psi) - (H\psi)^*\psi], \qquad (4.7)$$

方程(4.7)的两边对整个位形空间积分后得

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\int[\psi^*(H\psi) - (H\psi)^*\psi]dr.$$

为使模方在时间中保持不变，充要条件是

$$\int\psi^*(H\psi)dr = \int(H\psi)^*\psi dr, \qquad (4.8)$$

不管粒子的动力学态是什么，对任何位形空间中的平方可积函数 ψ，必须保持这个性质.

在算符的语言里，在这个算符有定义的函数空间中，若对所有的函数 ψ，算符都满足性质(4.8)，则称这个算符，比方 H，**是厄密的**. 厄密算符的主要性质将在第五章中研究.

薛定谔哈密顿量确实具有这种厄密性. 我们用标势中的一个粒子这种简单情况来验证它（习题 4.1 的对象是一个在电磁场中的荷电粒子）:

$$H \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r).$$

由于 $V(r)$ 是实的量，在这种情况下可将方程(4.8)写为

$$\int[\psi^*(\Delta\psi) - (\Delta\psi)^*\psi]dr = 0.$$

若左边的积分延伸到整个以曲面 S 为边界的给定体积内，按

格林定理，它等于面积分

$$\int_S \left(\Psi^* \frac{d\Psi}{dn} - \frac{d\Psi^*}{dn}\Psi\right) dS,$$

其中 $\frac{d}{dn}$ 是外法线微商．令积分的体积扩展到整个空间，就得到左边的积分．在这个极限下，曲面 S 的所有面元都被移到无穷远处．然而，因为波 Ψ 表示物理体系的动力学态，它必须平方可积，结果总面积分为零．证毕．

因此，在初始时刻满足归一条件 (4.3)，就足以保证此后所有时刻都满足这条件．由于薛定谔方程是齐次的，它的解被确定到差一个常数．初始时刻的归一常数给定了这个常数的绝对值；它的位相仍然是任意的．

4. 流的概念

如果人们引入流的观念，模方守恒的性质就有一个简单的解释．方程 (4.7) 的右边总可以纳入一个适当定义的矢量的散度形式，这矢量就是矢量几率流密度或**矢量流**．我们这里只限于一个处于标势下的粒子的情况 (见习题 4.1)．定义在时刻 t，点 r 处的流 $j(r, t)$ 为

$$j(r, t) = \mathrm{Re}\left[\Psi^* \frac{\hbar}{im} \nabla\Psi\right]. \tag{4.9}$$

易证

$$\mathrm{div}\, j = \frac{i}{\hbar}\left[\Psi(H\Psi) - (H\Psi)^*\Psi\right]; \tag{4.10}$$

因此，我们可将方程(4.7)写成

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \mathrm{div}\, j = 0 \tag{4.11}$$

的形式．

关系式(4.11)常在流体动力学中出现．它是在无源或无

整的介质中密度为 P，流为 j 的流体的守恒定律. 因此它使我们把量子粒子的运动比喻为经典流体的运动[1]. 包含在给定体积 V 中的流体质量等于密度 P 对这个体积的积分. 从方程(4.11)导出熟知的结果，对于包含在 V 中的流体有

$$-\int_V \operatorname{div} j dr = -\int_S j \cdot dS,$$

亦即等于通过这个体积边界面 S 的矢量流的通量. 在 V 扩展到整个空间的极限下，若通过 S 的通量为零，则总质量保持不变(模方守恒).

j 的定义有一些本来就有的任意性: 当对矢量 j 加上一个散度为零的矢量时，性质(4.11)仍然成立. 然而，定义(4.9)有简单性的优点. 除此之外，它能够从流的经典定义的对应中导出. 确实，根据对应原理，算符 $(\hbar/im)\nabla$ 表示量 p/m，即粒子的速度；量 j 对应速度和密度的乘积，即对应流. 特别是，若 Ψ 是平面波

$$A\exp[(i/\hbar)(p\cdot r - Et)],$$

$$j(r,t) = A^2(p/m)$$

确实等于(几率)密度和速度的乘积.

性质(4.11)远比模方守恒更普遍. 若函数 Ψ 是薛定谔方程的一个定态解

$$\Psi(r,t) = \Psi(r)e^{-iEt/\hbar}.$$

模方守恒将或是显然的，或是无意义的. 如果态是束缚态，它是显然的，如果态是非束缚态，它是无意义的，因为在这种情况下 Ψ 不是平方可积的. 然而这两种情况下，方程(4.11)仍然成立，因为 $|\Psi|^2$ 与时间无关，它可以写为

$$\operatorname{div} j = 0. \qquad (4.12)$$

---

1) 当然，不应把这种几率流体和经典流体间的类比推得太远. 所有建立在这种类比上的图象所包含的东西不多于性质(4.11)(见第六章).

本征函数ψ的这个性质是有意义的，因为它不依赖于哈密顿量中势能项的具体形式[1]。

5. r 函数的平均值或 p 函数的平均值

检查了我们对几率密度 P 和 Π 定义的一致性后，我们可以用它们来计算 r 的函数或 p 的函数的平均值。

在一给定时刻，已知位置测量结果的分布 $P(r)$，人们就可以确定在该时刻粒子坐标的任意函数

$$F(r) \equiv F(x, y, z)$$

的平均值。这个平均值具有的物理意义和我们在 $P(r)$ 的定义中曾说过的一样：它是对 N 个大量数目的、等价的、彼此独立且由同一波函数 Ψ 表示的体系作 $F(r)$ 测量的平均值。

我们用符号 $\langle F(r)\rangle$ 表示这个量。显然

$$\langle F(r)\rangle = \int P(r)F(r)dr,$$

类似地，我们得到动量函数 $G(p) \equiv G(p_x, p_y, p_z)$ 的平均值

$$\langle G(p)\rangle = \int \Pi(p)G(p)dp.$$

用 § 2 中几率密度的定义，我们得到表达式（假定积分收敛）

$$\langle F(r)\rangle = \int \Psi^*(r)F(r)\Psi(r)dr, \qquad (4.13)$$

$$\langle G(p)\rangle = \int \Phi^*(p)G(p)\Phi(p)dp. \qquad (4.14)$$

因此粒子坐标 x 的平均值是

$$\langle x\rangle = \int \Psi^*(r)x\Psi(r)dr, \qquad (4.15)$$

动量分量 p_x 的平均值是

1) 它在三维问题中的作用类似于一维问题中朗斯基式 $W(y^*, y)$ 的守恒性质（见第三章，§ 11）。

$$\langle p_x\rangle = \int \Phi^*(\boldsymbol{p})p_x\Phi(\boldsymbol{p})d\boldsymbol{p}. \tag{4.16}$$

用附录A中所叙述的傅里叶变换性质，我们将得到表达式(4.16)的另一种形式。若函数 $p_x\Phi(\boldsymbol{p})$ 是平方可积——我们将总是假定这条件成立——它的傅里叶变换是

$$\left(\frac{\hbar}{i}\right)\frac{\partial}{\partial x}\Psi(\boldsymbol{r})$$

(定理 A. III)。利用函数 Φ 和 $P_x\Phi$ 的标积守恒的性质(定理A.IV)，有

$$\langle p_x\rangle = \int \Psi^*(\boldsymbol{r})\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}. \tag{4.17}$$

注意(4.16)右边和(4.17)右边在形式上类似：将对 $\boldsymbol{p}$ 的积分用对 $\boldsymbol{r}$ 的积分代替，$\Phi(\boldsymbol{p})$ 用它的傅里叶变换代替，$\Phi^*(\boldsymbol{p})$ 用它的傅里叶变换的复共厄函数代替，p_x 用 $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ 代替，其中 $\partial/\partial x$ 表示它右边的函数对 x 作偏微商，就从一个公式过渡到另一个公式。

用类似方法，人们可从式(4.15)过渡到表达式

$$\langle x\rangle = \int \Phi^*(\boldsymbol{p})\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\right)\Phi(\boldsymbol{p})d\boldsymbol{p}. \tag{4.18}$$

这些结果可以推广到更复杂的函数类型。从 $p_x^2\Phi(\boldsymbol{p})$(假定平方可积)是

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2\Psi(\boldsymbol{r}) = -\hbar^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

的傅里叶变换这事实(重复应用定理 A. III)，得

$$\langle p_x^2\rangle = \int \Phi^* p_x^2\Phi d\boldsymbol{p} = -\hbar^2\int \Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}d\boldsymbol{r}. \tag{4.19}$$

更普遍地，若 $G(\boldsymbol{p})$ 是个多项式或是 p_x，p_y，p_z 的一个绝对收敛的级数，在某些直接的收敛条件成立的前提下，我们有

$$\langle G(\boldsymbol{p})\rangle = \int \Psi^*(\boldsymbol{r})G\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\Psi(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}. \tag{4.20}$$

在同样条件下人们也找到了 $F(r)$ 的平均值

$$\langle F(r)\rangle = \int \Phi^*(p)F(i\hbar\nabla_p)\Phi(p)dp. \qquad (4.21)$$

由于上面得到的结果已足够着手从事本章的主要讨论，我们将不再进一步研究波函数Ψ统计解释的发展. 除了位置测量和动量测量的统计，以及导出的比如 $F(r)$ 和 $G(p)$ 这些量的平均值的结果外，Ψ的详细说明必然给出任何可测量的物理量的测量统计. 这个问题将在第五章中论述. 这里我们将只限于给出几个对这个问题的研究有引导作用的注记.

由它们的定义得出量 $\langle x\rangle$ 和 $\langle p_x\rangle$ 是实的. (4.15) 式和(4.17)式右边也是实的. 换句话说——精确地说这是厄密性的定义[见(4.8)式]——算符 x 和 $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ 是厄密的. 类似地，r 的其它两个分量，$-i\hbar\nabla$ 的其它两个分量也是厄密算符. 若函数 F 和 G 是实函数，算符 $F(r)$, $G(-i\hbar\nabla)$ 也是厄密算符.

考虑由函数Ψ形成的平均值表达式 [(4.13), (4.20), (4.15)和(4.17)式]. 他们全都是同一形式的. 要取平均值的量和某个线性(厄密)算符 A 相联系，所求的值由表达式

$$\int \Psi^* A\Psi dr \qquad (4.22)$$

给出，式中，按通常惯例，算符作用在它右边的 r 的函数上. 算符 A 由一个非常简单的对应规则得出：如果我们处理的是一个位置坐标的函数 $F(r)$，对应的算符就是这个函数本身. 如果是一个函数 $G(p)$，对应的算符由在 G 中分别以 $-i\hbar\nabla$ 的分量代替 p 的分量得出. 这正好就是曾导出过薛定谔方程的动量 p 和算符 $-i\hbar\nabla$ 之间的对应规则.

这些平均值中的每一个都可以用波函数Ψ或Φ中的任一个算出：由函数 Φ 构成的表示式 (4.21), (4.14), (4.18) 和

(4.16)分别与由函数Ψ构成的表示式(4.13),(4.20),(4.15)和(4.17)等价. 它们甚至形式上也很相似. 要作平均值的量对应于某个线性(厄密)算符 B——这时候作用在 $\boldsymbol{p}$ 的函数上——所求的值由表示式

$$\int \Phi^* B \Phi d\boldsymbol{p} \tag{4.23}$$

给出. 算符 B 由类似于导出 A 的对应规则找得: 如果人们处理的是函数 $G(\boldsymbol{p})$, 算符就是函数本身; 如果是函数 $F(\boldsymbol{r})$, 它由在 F 中分别用 $i\hbar\nabla_p[\nabla_p \equiv (\partial/\partial p_x, \partial/\partial p_y, \partial/\partial p_z)]$ 的分量代替 $\boldsymbol{r}$ 的分量得出.

如同波函数 Φ 和 Ψ 是同一动力学态的等价**表象**一样, 算符 B 和 A 是同一个物理实体的等价表象. 物理上的测量量, 比方这里所考虑的平均值的计算可以用形式上全同的方式在这些表象中的任一个内作出. 这表明量子理论可以用一种普遍的方式表述, 它与任何表象无关. 这种普遍形式将在第七章和第八章给出.

6. 多粒子体系的推广

易将上面的定义和结论推广到多粒子的量子体系.

更普遍地,令 $\Psi(q_1, \cdots, q_R; t)$ 是一个 R 维量子体系的波函数,其动力学变数是它的 R 个坐标 $q_1, \cdots, q_R$ 和 R 个共轭动量 $p_1, \cdots, p_R$. 我们假定坐标是笛卡儿坐标,记

$$d\tau \equiv dq_1 \cdots dq_R$$

及 $d\omega \equiv dp_1 \cdots dp_R$ 分别为 q 空间及 p 空间中的体积元. 在 p 空间中的波函数是

$$\Phi(p_1, \cdots, p_R; t) = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}R} \times \int \Psi(q_1, \cdots, q_R; t) e^{-(i/\hbar)\sum_i p_i q_i} d\tau$$

$|\psi|^2 d\tau$ 是找到坐标 q 在区域 $(\tau, \tau + d\tau)$ 的几率，$|\Phi|^2 d\omega$ 是找到动量 p 在区域 $(\omega, \omega + d\omega)$ 中的几率. 以此为出发点，我们可以重复上一节的全部手续.

例如，考虑一个两粒子体系，以 $r_1(x_1, y_1, z_1)$，$r_2(x_2, y_2, z_2)$ 分别记它们的坐标，以 $p_1(p_{x_1}, p_{y_1}, p_{z_1})$，$p_2(p_{x_2}, p_{y_2}, p_{z_2})$ 分别记它们的动量. $P(r_1, r_2)dr_1dr_2$ 是在体积元 $(r_1, r_1 + dr_1)$ 中找到粒子 1 及在体积元 $(r_2, r_2 + dr_2)$ 中找到粒子 2 的几率；$\Pi(p_1, p_2)dp_1dp_2$ 是找到粒子 1 的动量在区间 $(p_1, p_1 + dp_1)$ 及找到粒子 2 的动量在区间 $(p_2, p_2 + dp_2)$ 的几率. 人们也可以引入粒子 1 在点 r_1 而粒子 2 的位置不作具体规定的几率密度 $P_1(r_1)$. 这个量是测量粒子 1 的位置而不测量粒子 2 的位置得出的统计分布. 显然

$$P_1(r_1) = \int P(r_1, r_2)dr_2,$$

类似地人们还可引入几率密度 $P_2(r_2)$，$\Pi_1(p_1)$ 和 $\Pi_2(p_2)$. 所有这些统计分布实质上都是满足归一条件

$$\iint P(r_1, r_2)dr_1dr_2 = 1, \cdots,$$

$$\int \Pi_2(p_2)dp_2 = 1$$

的正量. [符号 $\iint dr_1dr_2$ 表示遍及整个位形空间的六重积分，符号 $\int dp_2$ 表示遍及粒子 2 的整个动量空间的三重积分，等等.]

在一给定时刻，两粒子体系的动力学态由在该时刻的波函数 $\psi(r_1, r_2)$ 确定. 它的傅里叶变换是在动量空间中的波函数

$$\Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) = (2\pi\hbar)^{-3}\iint e^{-i(\boldsymbol{p}_1\cdot\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{p}_2\cdot\boldsymbol{r}_2)/\hbar}\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_1d\boldsymbol{r}_2,$$

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = (2\pi\hbar)^{-3}\iint e^{i(\boldsymbol{p}_1\boldsymbol{r}_1+\boldsymbol{p}_2\boldsymbol{r}_2)/\hbar}\Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)d\boldsymbol{p}_1d\boldsymbol{p}_2.$$

定义(4.2)和(4.6)的推广是清楚的

$$P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|^2,$$
$$\Pi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) = |\Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)|^2, \qquad (4.24)$$

而几率的归一条件暗示着波函数的归一条件:

$$\iint |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|^2d\boldsymbol{r}_1d\boldsymbol{r}_2$$
$$= \iint |\Phi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)|^2d\boldsymbol{p}_1d\boldsymbol{p}_2 = 1.$$

若在体系的薛定谔方程中哈密顿量是一个厄密算符，则在任何时刻都确实满足这个归一条件. 厄密性质是易于证明的. 于是波函数Ψ和Φ被决定到差一个任意位相因子.

从前面的定义人们可以导出上面引入的其它不同分布的定义. 有

$$P_1(\boldsymbol{r}_1) = \int |\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)|^2d\boldsymbol{r}_2$$

类似地，人们也可得出位置函数 $F(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ 和动量函数 $G(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2)$ 的平均值. 例如

$$\langle x_1\rangle = \iint \Psi^* x_1\Psi d\boldsymbol{r}_1d\boldsymbol{r}_2$$
$$= -\frac{\hbar}{i}\iint \Phi^*\frac{\partial\Phi}{\partial p_{x_1}}d\boldsymbol{p}_1d\boldsymbol{p}_2,$$

$$\langle p_{x_2}\rangle = \iint \Phi^* p_{x_2}\Phi d\boldsymbol{p}_1d\boldsymbol{p}_2$$
$$= \frac{\hbar}{i}\iint \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x_2}d\boldsymbol{r}_1d\boldsymbol{r}_2.$$

在§5结尾处所作的所有注记现在也全部成立. 若波函数$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$可分解因子为

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \Psi_1(\boldsymbol{r}_1)\Psi_2(\boldsymbol{r}_2),$$

[假定 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ 和 $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2)$ 归一],则对动量空间的波函数，以及对分布 P 和 Π，同样的结果也成立，

$$P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = P_1(\boldsymbol{r}_1)P_2(\boldsymbol{r}_2)$$

$$\Pi(\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2) = \Pi_1(\boldsymbol{p}_1)\Pi_2(\boldsymbol{p}_2),$$

这是易从这些量的定义中看出的. 换言之，在对这些粒子中的每一个所作的测量的统计分布没有关连. 对它们中的一个，比方说粒子 1，测量结果的统计预言和就像它处在用波函数 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ 表示的动力学态中完全一样. 事实上，人们易证 $P_1(\boldsymbol{r}_1) = |\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)|^2$ 及 $\Pi_1(\boldsymbol{p}_1) = |\Phi_1(\boldsymbol{p}_1)|^2$，其中 $\Phi_1(\boldsymbol{p}_1)$ 记和 Ψ_1 相联系的动量空间的波函数. 对这个粒子所作的测量有关的所有计算中(平均值，涨落，等等)，人们可以简单地略去其它粒子，而把这个问题看成是其波函数为 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1)$ 的单个粒子一样.

若两个粒子无相互作用或者由于某种原因可以忽略它们的相互作用，则在时间进程中波函数可分离变量的性质恒保持. 事实上，体系哈密顿量可纳入两项和的形式

$$H = H_1 + H_2,$$

其中的一个，H_1，只作用在变数 $\boldsymbol{r}_1$ 的函数上，而另一个，H_2，只作用在变数 $\boldsymbol{r}_2$ 上. 假定在初始时刻

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; t_0) = \Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t_0)\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t_0),$$

令 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t)$ 及 $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t)$ 是薛定谔方程

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_1\right]\Psi_1 = 0, \quad \left[i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_2\right]\Psi_2 = 0$$

在初始条件分别为 $\Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t_0)$ 及 $\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t_0)$ 的解. 分离变量后的波函数

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; t) = \Psi_1(\boldsymbol{r}_1, t)\Psi_2(\boldsymbol{r}_2, t)$$

满足薛定谔方程，因为

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = i\hbar\left(\frac{\partial\Psi_1}{\partial t}\Psi_2 + \Psi_1\frac{\partial\Psi_2}{\partial t}\right)$$

$$= (H_1\Psi_1)\Psi_2 + \Psi_1(H_2\Psi_2)$$
$$= H_1\Psi_1\Psi_2 + H_2\Psi_1\Psi_2$$
$$= (H_1 + H_2)\Psi_1\Psi_2 = H\Psi.$$

每个粒子的运动保持完全独立，就像逻辑上所要求的那样；在任何瞬间，对它们当中的任一个作测量统计之间没有关连。

II. 海森伯测不准关系

7. 量子化粒子的位置-动量测不准关系

让我们转到§2的几率定义. 分布 $P(r)$ 和 $\Pi(p)$ 是由同一个波函数 $\Psi(r)$ 确定的，它们彼此之间并不独立，虽则 $\Psi(r)$ 先验地可以是任何平方可积函数. 它们中的一个总能由适当选择 Ψ 而任意地选定，例如，人们可选 $P(r)$ 为使它的绝对值 $\sqrt{P}$ 满足 $\Psi(r) = \sqrt{P(r)}\exp[i\alpha(r)]$ 的函数，位相 $\alpha(r)$ 仍然是完全不确定的. 然而，不可能通过适当选择 $\alpha(r)$ 来得到任何事前规定的分布 $\Pi(p)$，虽则当把分布 $\Pi(p)$ 考虑为 $\alpha(r)$ 的函数时，它能够在颇大的范围内变化. 分布 $P(r)$ 和 $\Pi(p)$ 之间总是存在某种关连的事实是量子理论的特征[1]. 它由海森伯测不准关系定量地表示.

---

1) 以统计分布 $P(r)$ 和 $\Pi(p)$ 为一方，以人们企图用它来作比较的经典统计力学的对应分布 $P_{cl.}(r)$ 和 $\Pi_{cl.}(r)$ 为另一方，二者之间有本质差别. 后者由相空间中的密度 $\rho(r, p)$ 得出

$$P_{cl.}(r) = \int \rho(r, p)dp, \quad \Pi_{cl.}(p) = \int \rho(r, p)dr;$$

$\rho(r, p)$ 是个正函数，受条件

$$\iint \rho(r, p)drdp = 1$$

限制，其它任意. 现在人们可以任意地和同时地固定 $P_{cl.}(r)$ 和 $\Pi_{cl.}(p)$；事实上在相空间中至少存在一个密度 $\rho(r, p) = P_{cl.}(r)\Pi_{cl.}(p)$，这些分布就是由它导出的.

首先考虑一个一维粒子. 记它的位置为 x, 动量为 p; 令 $\Psi(x)$ 和

$$\varphi(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi(x)e^{-(ipx)/\hbar}dx$$

分别为在 x 空间和 p 空间中表示它的动力学态的波函数.

海森伯的结果本质上表示波 Ψ 的范围和它的傅里叶变换 φ 的范围不能同时取为任意小这个数学事实. 若波 Ψ 在 x 空间占据 Δx 量级的区域, 而波 φ 在 p 空间占据 Δp 量级的区域, 乘积 $\Delta x \cdot \Delta p$ 总要保持大于一个数量级为 $\hbar$ 的量:

$$\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar. \tag{4.25}$$

我们曾经在物质波理论中有关波包结构处碰到过这个结果. 它也涉及(虽然不是直接地)第三章的由非束缚态叠加而成波包的运动的讨论.

下面这个半定量的论证可使人们信服它的正确性 (这个论证只是用不同的术语重作第二章 § 3 中的分析). 任意波 $\Psi(x)$ 是波长为 $2\pi/k$ 的平面波的叠加. 令 Δk 为参数 k 的变化范围. 为了使波 $\psi(x)$ 局限在某一区域 Δx 内, 必须使这些不同的波之间只在这个区域相长干涉, 而在其它地方相消干涉. 包含在 Δx 中的波长 $2\pi/k$ 的数目是 $k\Delta x/2\pi$. 为了使构成 $\psi(x)$ 的不同平面波可在区间 Δx 的界限内相消干涉, 当 k 超过它的变化范围时: $\Delta x \cdot \Delta k \gtrsim 2\pi$, 这个数目至少必须改变一单位. 我们这里作了一个数量级的论证; 我们将不费心考虑因子 2π 而简单地写为

$$\Delta x \cdot \Delta k \gtrsim 1.$$

由于动量 p 和 k 满足关系 $p = \hbar k$, 我们马上得到关系式 (4.25).

人们常称量 Δx 和 Δp 分别为位置和动量的不确定度, 并常以下述方式叙述海森伯的结论:

位置不确定度和动量不确定度的乘积必然大于一个量级为 $\hbar$ 的量。

我们用一些例子来说明这个结论。

高斯波包(不归一)

$$\psi(x) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}p_0 x - \frac{(x-x_0)^2}{2\xi^2}\right]$$

占有点 x_0 附近线度为 ξ 的区域。对应于它的动量空间的波（见附录A结尾处的表）

$$\varphi(p) = \frac{\xi}{\sqrt{\hbar}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}x_0(p_0-p) - \frac{1}{2}\frac{\xi^2}{\hbar^2}(p-p_0)^2\right]$$

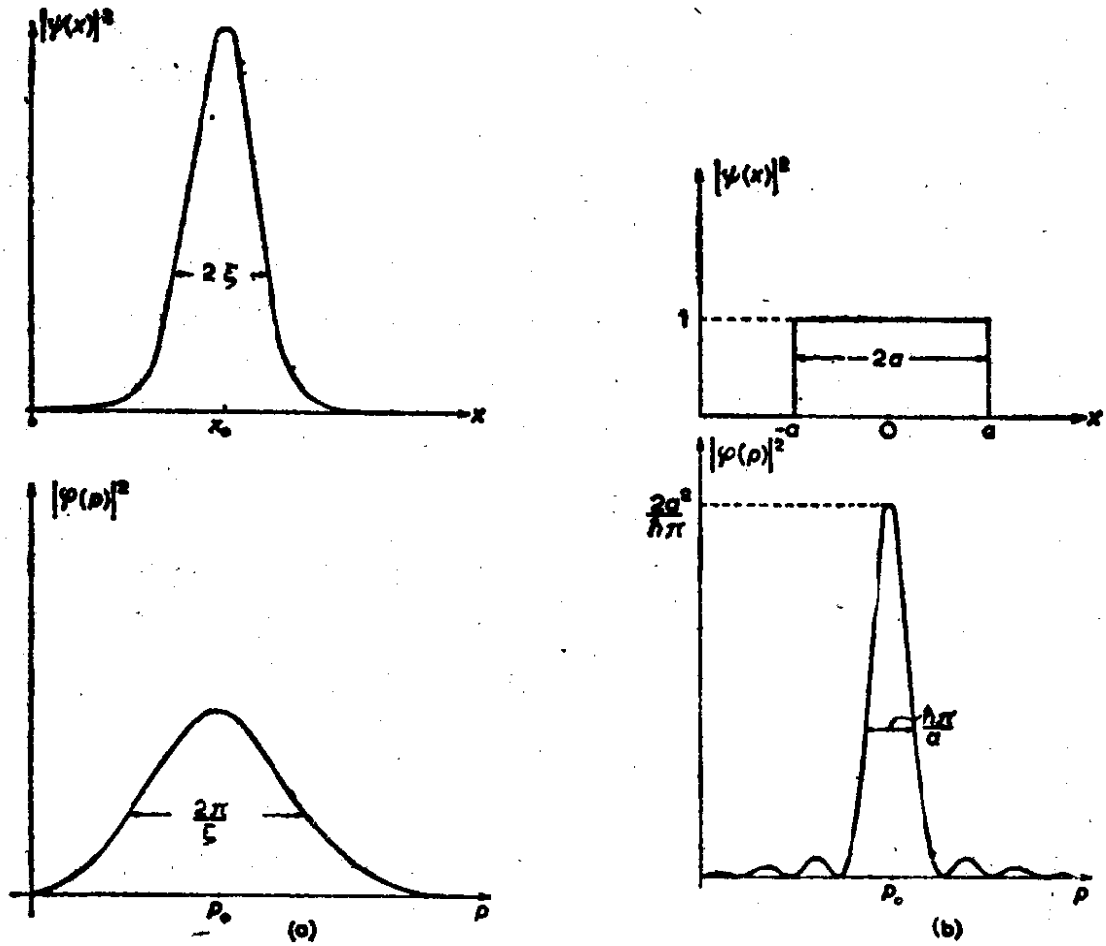

图 4.1 在 (*a*) 高斯波包；(*b*) 方脉冲情况下，波包 $\psi(x)$ 和 $\varphi(p)$ 的模的平方。

占据这个空间中点 p_0 附近广延为 $\hbar/\xi$ 的区域. 缩小 ξ，就减小了 Δx，但 Δp 增加一个相应的量以使它们的积保持 $\hbar$ 量级.

我们考虑"方脉冲"作为另一个例子

$$\psi(x)=\begin{cases}e^{ip_0x/\hbar} & \text{对 } |x|<a\\ 0 & \text{对 } |x|>a,\end{cases}$$

它延伸到在点 $x=0$ 周围的一个 $2a$ 的区域. 在这种情况下，有(见附录 A)

$$\varphi(p)=\frac{\sqrt{(2\hbar/\pi)}}{p-p_0}\sin\frac{(p-p_0)a}{\hbar}.$$

函数 $|\varphi(p)|^2$ 在点 p_0 出现十分尖锐的峰值，p_0 的两边围绕着一些相继减小的极小值（在 $p=p_0+(n\pi\hbar/a)$ 时达到），极小值被一些极大值分开，极大值高度按 $[1/(p-p_0)]^2$ 减小. 人们可以说波 $\varphi(p)$ 主要地集中在主峰值两边的 $|\varphi(p)|$ 的第一对零点之间，亦即广延于 $\Delta p\approx 2\pi\hbar/a$ 之间. $\Delta x\approx 2a$ 的广延越小，Δp 越大：

$$\Delta x\Delta p\approx 4\pi\hbar.$$

图 4.1 表示这两个波包的 $|\psi(x)|^2$ 作为 x 的函数以及 $|\varphi(p)|^2$ 作为 p 的函数的曲线.

关于波 ψ 的广延及其傅里叶变换的比较的所有这些考虑，可以容易地推广到三维空间中粒子的情况. 以 Δx，Δy，Δz 分别记三个位置坐标的不确定度；Δp_x，Δp_y，Δp_z 记动量的相应的量. 统计分布 $P(\boldsymbol{r})=|\Psi(\boldsymbol{r})|^2$ 和

$$\Pi(\boldsymbol{p})=|\Phi(\boldsymbol{p})|^2$$

之间的关连由测不准关系表示

$$\Delta x\cdot\Delta p_x\gtrsim\hbar,\quad \Delta y\cdot\Delta p_y\gtrsim\hbar,\quad \Delta z\cdot\Delta p_z\gtrsim\hbar. \tag{4.26}$$

迄今为止，测不准关系是作为数量级的关系表示出来的. 当然，在我们还没有对量度各种不确定度的量 Δx，Δp_x，等等

采用一种精确的定义之前，这是不可避免的. 对这些量采用适当的定义以后，我们将得到一种精确的陈述. 但是，人们必须坚持这一事实，即测不准关系的根本意义已经包含在数量级的结果之中，这并未低估严格陈述可能有的优点：在任何情况下，都不能认为量子粒子同时有严格精确的位置和严格精确的动量. 赋予粒子以精确位置和动量的想法只在作用量子 $\hbar$ 可忽略的程度内，也就是在经典理论成立的范围内，才是正确的.

8. 位置-动量测不准关系的精确陈述

我们首先详细论述一维粒子的情况. 取下述 x 和 p 不确定度的精确定义[1]：Δx 和 Δp 是分布 $|\psi(x)|^2$ 和 $|\varphi(p)|^2$ 的方均根偏差. 采用第四章 § 5 的记号，有

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}, \quad \Delta p \equiv \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}. \tag{4.27}$$

量 Δx 是直接和位置测量相联系的：它是绕平均值 $\langle x\rangle$ 的测量结果的统计涨落；同样的说明亦适用于和动量测量相联系的 Δp. 我们来证明下述非常普遍的结论：

$$\Delta x \cdot \Delta p \geqslant \frac{1}{2}\hbar. \tag{4.28}$$

考虑正定的表示式

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| x\psi + \lambda\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|^2 dx .$$

[对任何 λ, $I(\lambda) \geqslant 0$].

作分部积分，我们相继得出

---

1) 这可能是人们能想象出来的最合适的定义. 在绝大多数情况下，这样定义的量 Δx 和 Δp 给 x 和 p 的不确定度以一个良好的概念. 尽管如此，有时也会发生这种不确定度的数学定义和人们所作的粗糙估计在本质上颇为不同的情况. “方脉冲”就是一个这类不安全事件的例子：由 (4.27) 式定义的量 Δp 是无穷大，而这个量的粗糙估计给出的是 $2\pi\hbar/a$.

$$I(\lambda)=\int_{-\infty}^{\infty}|x\psi|^2dx+\lambda\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}x\psi+x\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dx+\lambda^2\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|^2dx$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*x^2\psi dx-\lambda\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi dx-\lambda^2\hbar^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}dx.$$

假定 ψ 归一并用 §5 的结果，得

$$I(\lambda)=\langle x^2\rangle-\lambda\hbar+\lambda^2\langle p^2\rangle. \tag{4.29}$$

因为 λ 的二次多项式 $I(\lambda)$ 是正定（或零）的，它的判别式 $\hbar^2-4\langle p^2\rangle\langle x^2\rangle$ 必须为负(或零)，于是

$$\langle x^2\rangle\langle p^2\rangle\geqslant\frac{1}{4}\hbar^2 \tag{4.30}$$

条件(4.30)比条件(4.28)少一些限制。但人们可以从稍有不同的表示式 $I(\lambda)$ 出发作同样的计算：即在 $I(\lambda)$ 的定义中，以 $x-\langle x\rangle$ 代替 x；$\hbar(\partial/\partial x)-i\langle p\rangle$ 代替 $\hbar(\partial/\partial x)$[或者，同样地以 $\exp(-i\langle p\rangle x/\hbar)\psi(x+\langle x\rangle)$ 代替 $\psi(x)$]。结果和方程(4.29)类似：

$$I(\lambda)=(\Delta x)^2-\lambda\hbar+\lambda^2(\Delta p)^2\geqslant 0.$$

条件（4.28）表示 λ 的这个二次表示式的判别式永不为正的事实。证毕。

上述证明同样可以很好地用于三维空间中的粒子。波函数 $\psi(r)$ 是一个三维空间的函数，在证明中引进的积分扩展到三维位形空间，以代替只沿 x 轴作积分。读者易于证实在作这些积分时的所有运算仍然成立。类似地，很容易推广方均根偏差的定义(4.27)并得到海森伯测不准关系

$$\Delta x\cdot\Delta p_x\geqslant\frac{1}{2}\hbar,$$

$$\Delta y \cdot \Delta p_y \geqslant \frac{1}{2}\hbar,$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \geqslant \frac{1}{2}\hbar. \tag{4.31}$$

9. 推广共轭变量间的测不准关系

在R维量子体系的一般情况下，人们也找到了同样的关系. 用§6的记号. 推广定义(4.27)，我们分别以q_i和p_i统计分布的均方根偏差来量度它们的不确定度:

$$\Delta q_i = \sqrt{\langle q_i^2\rangle - \langle q_i\rangle^2},\ \Delta p_i = \sqrt{\langle p_i^2\rangle - \langle p_i\rangle^2}. \tag{4.32}$$

上节的证明可以不加修正地重复一遍，导出共轭(笛卡儿)变数间的测不准关系

$$\Delta q_i \Delta p_i \geqslant \frac{1}{2}\hbar.\ (i = 1, 2, \cdots, R).$$

10. 时间-能量测不准关系

位置-动量测不准关系来自这个事实: 人们把动量定义为一个平面波的特征波数(准确到一个常数)，而严格说来，一个平面波是扩展于整个空间的，因此，把动量局域在空间一精确点上，同把平面波局域在空间一精确点上一样没有意义.

正如动量是波数，不能局域在空间中一样，能量是频率，也不能在时间上加以局域. 因此，如同相对论原理所指明的那样，和前面讨论的位置-动量测不准关系相似，存在一个时间-能量测不准关系:

$$\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \hbar. \tag{4.33}$$

然而，它的物理解释是完全不同的. 在位置-动量测不准关系中，位置变数和动量变数精确地扮演着对称的角色，它们二者都能在一给定时间t测量. 测量结果的统计分布，从而不确

定度 Δq_i，Δp_i 全都可以从该时刻的波函数的值推出。另一方面，在关系式(4.33)中，能量和时间扮演着根本不同的角色：能量是体系的动力学变量，而时间 t 是参数。关系式(4.33)把能量这个动力学变量取值的不确定度 ΔE 和表征体系改变率的时间间隔 Δt 联系了起来。

首先，让我们来考虑自由粒子情况。单色平面波

$$\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)]$$

表示一个具有完全确定动量 $\hbar\boldsymbol{k}$ 和能量 $\hbar\omega$ 的粒子。人们可以用平面波叠加构成一个比如(2.11)式那样的波包。为简单起见，我们考虑一个一维波包，就采用上面研究过的方脉冲波列。记它的长度为 Δx，群速度为 v。它以速度 v 沿 x 轴行进；然而，它经过轴上一给定点的时刻不是精确地决定的，而是有一不确定度

$$\Delta t \approx \frac{\Delta x}{v},$$

此外，波列在动量空间有一定伸展，因此粒子能量值有一不确定度 ΔE

$$\Delta E \approx \frac{\partial E}{\partial p}\Delta p = v\Delta p.$$

从上面两个方程，我们推得

$$\Delta t\cdot\Delta E \approx \Delta x\cdot\Delta p.$$

用动量-位置测不准关系，我们得到关系式(4.33)，它对粒子能谱的展开 ΔE 和预计粒子经过一给定点的时刻的精度 Δt 的乘积，设置了一个下限。

上面的证明可以毫无困难地推广到慢变场中的波包这情形，但对更普遍的情况不再正确。在更普遍情况下，为了得到一个像(4.33)那样的关系式，必须考虑波函数和时间的依赖关系。

当量子体系有一完全确定的能量时，情况是最简单的。我们知道(见第二章§16)，一个给定能量 $E = \hbar\omega$ 的量子体系的波函数随时间的变化正比于指数因子 $\exp(-i\omega t)$。例如，考虑一个在一力场中的粒子。若它的量子态对应一完全确定的能量值 $E = \hbar\omega$，它的波函数写为

$$\Psi(r, t) = \psi(r)\exp(-i\omega t).$$

从而，这个粒子的位置分布 $P(r) = |\psi(r)|^2$ 与时间无关。易见动量分布亦有同样性质。从而，对这体系所作的测量(位置或动量)的结果与作测量的时刻无关。我们简短地说这一体系的物理性质与时间无关，或体系处在一个**定态**，就能把这种性质表示出来。

现在假定粒子的量子态是两个能量分别为 E_1 和 E_2 的定态的叠加。它的波函数的形式是

$$\psi_1(r)e^{-iE_1t/\hbar} + \psi_2(r)e^{-iE_2t/\hbar},$$

而分布

$$P(r, t) = |\psi_1(r)|^2 + |\psi_2(r)|^2 + 2\mathrm{Re}\psi_1^*\psi_2 e^{i(E_1-E_2)t/\hbar}$$

随时间[在两个极值 $(|\psi_1| - |\psi_2|)^2$ 和 $(|\psi_1| + |\psi_2|)^2$ 之间]振荡，周期是

$$\tau = \frac{\hbar}{|E_1 - E_2|}.$$

动量分布也有同样性质。

于是，τ 作为一个特征时间出现，它度量体系的物理性质的改变率。在两个不同时间 t_1 和 t_2 所作的测量结果——更精确地说是测量结果的统计分布(若差 $\Delta t = |t_1 - t_2|$ 比 τ 小时)，实际上将完全相同。换句话说，为使体系的物理性质在时间间隔 Δt 后有显著的变化，Δt 和能量不确定度

$$\Delta E = |E_1 - E_2|$$

的乘积至少必须等于一个 $\hbar$ 的量级：$\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \hbar$。按这种

方式表示，当体系的态是任意数目的定态的任意叠加时，这个结论仍然正确. 这是完全普遍的. 其严格证明将在以后(第八章 § 13) 给出.

关系式(4.33)的一个重要应用是放射性体系 (放射性核，原子的激发态，不稳定的基本粒子，等等) 的寿命一宽度关系式. 放射性体系是不稳定的，它不对应一个完全确定的能量值，而对应一个有某种伸展 ΔE 的能谱，ΔE 常称为能级宽度. 这里平均寿命 τ 扮演上述特征时间的角色. 人们必须等待一个 τ 数量级的时间，才能观察体系性质的显著变化. 从而

$$\tau \cdot \Delta E \approx \hbar.$$

一般地说 (4.33) 的另一个结果和所作的能量测量有关. 测量的精确度 ΔE 和测量所需的时间 Δt 由关系式 (4.33) 联系. 人们可以通过用单能量电子轰击氢原子，并测量相应的非弹性碰撞中电子的能量损耗来测量氢原子第一激发态的激发能. 测量的间隔至少等于碰撞时间，这就是说，等于电子波包走过氢原子范围所花的时间 Δt. 测量误差至少等于入射电子能量的不确定度 ΔE. 我们确实有 $\Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \hbar$.

11. 光子的测不准关系

物质粒子体系的测不准关系是由物质的波粒二象性得出的. 由于同一原因，光子也存在类似的关系. 但在表述它们时，人们必须注意到物理体系包含的光子数一般不是一个完全确定的量，严格说来，不能考虑特定光子的运动，除非它是不受任何作用的自由光子.

记住这些限制后，我们仍然可以用波包表示自由光子[1]，

1) 为简单起见我们省去了光的极化. 要考虑它的话，人们必须给光子一个内部自由度.

而这波包是用传播速度为 C 的平面单色波叠加而成.

于是，利用一个装配有光阑的屏，让光阑在某一段时间 Δt，开启，人们可以得到只含一个光量子的光信号. 这个光子由一波包表示，它在三个轴方向的广延 Δx，Δy，Δz 依赖于光阑的线度以及它的开启时间. 这个波包是一个单色波的叠加. 它具有所有我们以前研究过的波包性质. 它并不表示一个具有完全确定动量和能量的光子，它的动量分量和能量覆盖一个有限的区域，即分别为 Δp_x，Δp_y，Δp_z 和 ΔE.

所有这些量满足关系

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim \hbar, \quad \Delta y \cdot \Delta p_y \gtrsim \hbar,$$

$$\Delta z \cdot \Delta p_z \gtrsim \hbar, \quad \Delta t \cdot \Delta E \gtrsim \hbar.$$

从这些关系式，可以得出一个光子和物质之间相互作用机制的一些有趣结果. 在光子被原子吸收时（光电效应），传递给原子的能量不确定度 ΔE 和传递这个能量的时间不确定度 Δt 的乘积至少是 $\hbar$ 量级. 相反地，如果原子开始处在激发态，由于发射一个光子而衰变到基态，发生跃迁的瞬间不能用定得比这个激发态的平均寿命 τ 还精确. 发射的光子用一空间范围为 $c\tau$ 的波包表示，它在能量上的伸展 ΔE 满足 $\tau \cdot \Delta E \approx \hbar$. 这个结果和实验符合得很好. 从前面讨论的平均寿命和宽度间的关系式出发也可以得到它. 注意，由于能量守恒，发射光子能量的伸展（末态）必须等于激发原子能量的伸展（初态）.

III. 测不准关系和测量过程

12. 在测量操作期间不可控制的扰动

下面我们特别集中注意位置-动量测不准关系. 这些关系式中的伸展量 Δx，Δp 涉及到在前面我们定义几率时说过

的条件下所作的测量. 一定不要把它们和通常的测量误差混淆起来,后者是由测量仪器不可能理想,不允许无限精确地测定待测量而引起的. 在前面所有的论证中都假定这类误差可以忽略.

我们要进一步讨论测量机制以及它和上面勾画的统计解释的一致性. 例如,考虑量子体系中一粒子位置坐标的测量,这个量子体系的动力学态由波函数Ψ表示(我们以后将更简洁地称体系处在态Ψ中). 假定在我们的安排中测量装置是无限精确的. 从而,测量结果的不可能性并不是由于测量装置的任何不完善. 态Ψ一般并不对应于一个精确的x值,而是动力学状态的叠加,每个动力学状态对应一个给定的x值. 一经测量操作后,我们能断言体系处在一个动力学态,其x坐标具有测量仪器指示的精确值x'. 这样一个态一定不能用波函数Ψ表示: **测量装置的干预已经修改了被测量体系的动力学态. 再者,在测量操作期间,体系的这种微扰在某种程度内是不可控制的.** 在这个意义下,人们不能精确地预言经过测量后体系的态是什么,而只能给出它处于某一动力学态的几率,而这态对应于x坐标的几个值之一的x'.

在测量过程中,体系应该有个扰动,这并不是太奇怪的. 为了作一次测量,必须让体系以某种方式和适当的测量仪器相互作用,后者在这个过程中经历某些变化. 这样一种变化是必须的,因为它决定了仪器的响应,也就是说,决定了人们希望测量的物理量所取的值. 相反地,人们不能避免体系本身在测量过程中的某种微扰.

在宏观现象的尺度内,人们总可以用这样一种方式进行,以使得测量装置对体系的扰动作用可以忽略,或者至少以良好的精度被了解. 让我们举一个例子来说明这一点. 人们可以借助于一组透镜在照相板上形成宏观客体的像来确定宏观

客体的位置．在测量期间由于它要暴露在光线下这事实（辐射压力），客体的动力学态不可避免地要被修正．在经典近似下，能把入射光作为连续波处理（存在无数光子），只要照相板足够灵敏，这个修正原则上可被精确地计算出来：事实上人们能无限减小客体的照明，从而使修正任意小．

上面的论证显然只在经典近似极限内正确．事实上，由于相互作用以分立量子的形式发生，测量仪器对客体的作用不能无限减小．光量子被客体偏转的偏角不能以精确的方式决定，换句话说，在偏转期间的动量转移可以考虑为不可控制的．位置的测量总是伴随着客体动量的不可控制的变化（这个效应的半定量分析将在下节中给出）．由于这种修正在宏观尺度上被完全忽略，经典理论假定物理体系的所有动力学变量能同时以任意小的误差来测量；在任何给定时间，体系的动力学状态由所有这些变量在该时刻所取的精确值来确定．在微观现象精确度的水平上，这个假定缺乏实验支持而必须被抛弃．量子理论假定物理体系在测量期间遭受的不可预言和不可控制的扰动总是足够强的，以致测不准关系总是保持正确．于是，在上面打算作的 x 测量中，体系已经从态 Ψ 转到态 Ψ'．已经指出过，态 Ψ 一般既不对应精确的 x 值，又不对应精确的 p 值，当对 x 这个量作精确测量时，它只对应找到某个 x 值的几率分布 $P(x)$，或者在精确测量 p 的情况下，它只对应找到某个 p 值的几率分布 $\Pi(p)$．新的分布 $P'(x)$ 和 $\Pi'(p)$ 对应新的态 Ψ'；特别是这些分布的方均根偏差 $\Delta'x$ 和 $\Delta'p$ 必须满足关系式 $\Delta'x \cdot \Delta'p \geqslant \frac{1}{2}\hbar$．特别是，若 x 的测量无限精确 $(\Delta'x = 0)$，量 $\Delta'p$ 必须无限大．常把这个结果表示为：人们不能任意减小位置变数 x 的不确定度，除非至少把动量变数 p 的不确定度增大一个相应的数量，反之亦然．

我们将考察几个测量的具体例子，并说明被测量体系受到的微扰实际上总是足够大，以致绝不会同海森伯测不准关系发生矛盾[1]。

13. 位置测量

a) 利用光阑.——考虑一平行于 Oz 运动的单能量电子束.我们来测量电子位置沿垂直于 Oz 的某个方向 Ox 的分量. 为此,在电子束的路径中插入一个带有一个缝的屏(图4.2).

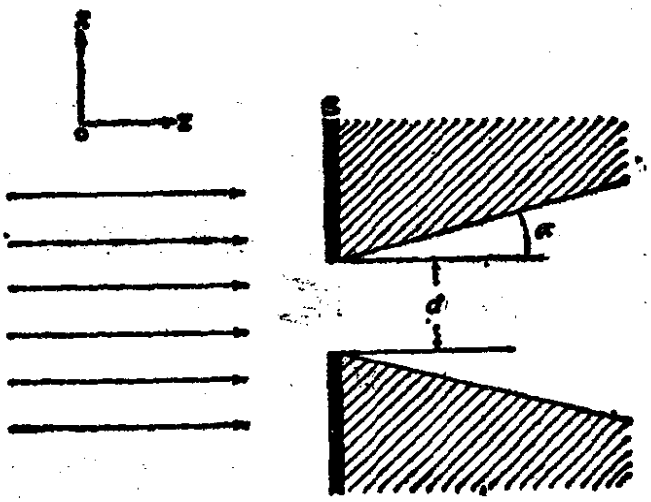

图 4.2 用光阑作位置测量

若 d 为缝的宽度，任何电子穿过光阑时位置的 x 分量被确定到精确度 $\Delta x = d$ 内. 然而,这电子由一波长 $\lambda = \hbar/p$ 的德布罗意波表示. 在光阑的交叉处伴随着衍射效应；因此光束

1) 这尤其发生在允许显示粒子"轨迹"的所有实验装置中,比方在照相底板或观察荷电粒子的威尔孙云室等情况里. 在云室中，粒子沿它的路径电离了一定数目的原子，这些离子变成形成可见微滴的凝聚中心. 粒子的位置不确定度是 Δq，Δq 至少等于离化原子的半径（实际上比它大得多）. 然而，在与测量装置的相互作用中，也就是说粒子引起原子电离的过程中，后者受到了一个不可预言和不可控制的 $\hbar/\Delta q$ 量级的动量转移. 粒子的轨迹只能在精确度极限 $\Delta q \cdot \Delta p \approx \hbar$ 内观察.

散开一定的角度 α，其数量级为

$$\sin\alpha \approx \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{p \cdot \Delta x}.$$

总计得到电子动量在 Ox 方向的伸展为 $\Delta p_x = p\sin\alpha$，我们有

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h.$$

电子动量的 x 分量，在测量操作以前，假定是完全已知的（$p_x = 0$），在测量过程中（穿过光阑），它已经移动了一个不可控制的数量级为 $h/\Delta x$ 的量.

重要的是使人信服这一点：在测量期间，从光阑转移给电子的动量实际上不能决定到比 $h/\Delta x$ 还精确；否则上述论据将失效.确实，要作位置测量，光阑必须保持稳定，它的位置（沿 Ox）必须被了解到 δx 范围内，而 δx 远小于缝的宽度：$\delta x \ll \Delta x$. 但正像电子一样，光阑是量子客体. 因而它的动量不能决定到比 δp 更好，我们有

$$\delta p \approx \frac{h}{\delta x} \gg \frac{h}{\Delta x}.$$

尽管如此，只要它足够重，在测量过程中实际上它是保持不动的；因此，这个限制并不妨碍测量操作本身. 但显然，不能以大于 δp 的精确度，以及理由更充足地以大于 $h/\Delta x$ 的精确度决定光阑的动量变化.

这个讨论强调了一个重要之点. 人们必须要求测量仪器是一个也遵从测不准关系的量子客体. 这假定了测不准关系是一种完全普适的性质. 否则，量子理论的物理解释要作根本的修改.

b）利用显微镜.——毫无疑问用光阑是测量客体位置的最直接的方式. 一个不那么直接但同样正确的方式是照明客体，并通过显微镜观察像. 那就是，我们通过显微镜观察电子

来决定它的位置 x（图 4.3）。测量的精确度受这一事实限制：各点的像是个有限广延的衍射点。从点的广延人们能导出测量精确度 Δx 的极限

$$\Delta x \approx \frac{\lambda}{\sin\theta},$$

其中 λ 是光的波长，θ 是被电子散射并聚焦于显微镜的光束的发散半角。然而，光的散射由分立的量子进行，并且伴随有部分不可控制的动量交换(康普顿效应)。当散射光只包含一个单光子时，这个效应处在极小值：光子动量有一完全确定的量 $p = \hbar/\lambda$；它的传播方向也只确定义到角 θ 之内。因此，转移给电子的动量并不是精确知道的，它有一个固有的不确定度

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\lambda}\sin\theta.$$

位置测量得越精确，这个效应越重要，总是有 $\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$。

人们可以反对说，x 的精确度不是由衍射点的大小给出，而是由能决定衍射点中心的精确度给出。参与形成衍射点的光子数 N 越大，这个精确度就越高。按照统计规律，按这种方

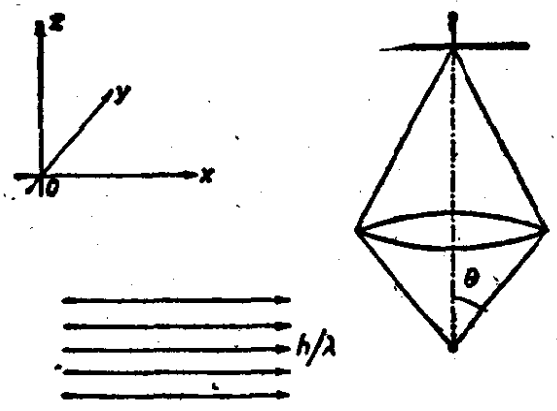

图 4.3　用显微镜作位置测量

式算出的 x 的误差比上面算得的误差小 $\frac{1}{\sqrt{N}}$ 倍：

$$\Delta x \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\lambda}{\sin\theta}.$$

然而，若每个光子转移的动量有一固有的不确定度 $(h\sin\theta)/\lambda$，在 N 个光子转移的动量中，不确定度将大 $\sqrt{N}$ 倍(加上误差的平方)，从而

$$\Delta p \approx \sqrt{N}\,\frac{h}{\lambda}\,\sin\theta$$

结果还是：$\Delta x \cdot \Delta p \approx h$。

14. 动量测量

对动量测量也有同样结果。一个粒子的动量**先验地**可以用任意精确度测量，但测量过程中必然伴随有一个微扰，它增加了在相应位置坐标中的不确定度，就是以这样方式使测不准关系继续满足。这将在下面两个例子中说明。

a) 磁场中的偏转——荷电粒子的动量通常用恒定磁场中的偏转来测量。动量 p 和粒子轨迹的曲率半径 R 由熟知的关系式

$$p = \frac{e}{c}\mathscr{H}R$$

联系，其中 $\mathscr{H}$ 是磁场的大小，e 是粒子的电荷。

我们将用这种方法来考察对电子动量的测量。图 4.4 表示测量装置的草图。电子穿过光阑 A 后进入磁铁，经过 180 度偏转后(为简单起见，选这个特殊角)通过光阑 B 离开。在刚开始测量前的一瞬间(即刚好在与光阑 A 的交叉点前面)，我们假定传播方向完全确定(方向 Oy)，在这个方向上，电子的 y 坐标完全已知($\Delta y = 0$)。这些初始条件 ($p_x = p_z = 0$,

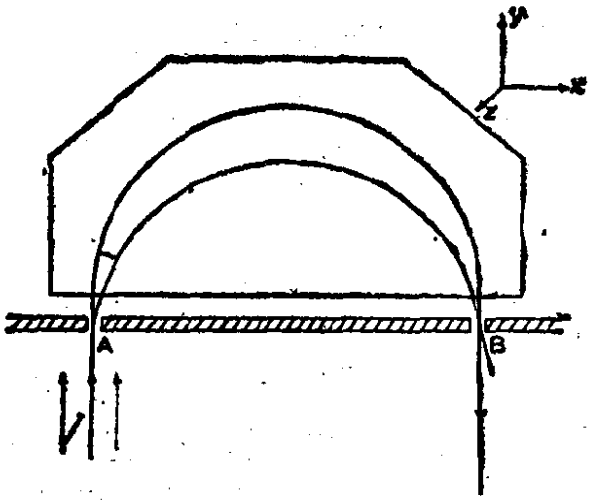

图 4.4　用磁场中的偏转作动量测量

$y = y_A$）原则上总可以用装备有光闸且其"曝光时间"足够短的准直仪实现．曲率半径 R 等于两光阑间距离的一半；若以 $2d$ 和 $2d'$ 分别表示这些光阑的宽度，R 被测量得准到 $d + d'$ 内．因此，电子的动量被了解到精确度

$$\Delta p = \frac{e}{c}\mathscr{H}(d + d') = \frac{p}{R}(d + d').$$

这里要测量的量是动量沿 Oy 轴的分量．我们来证明：一旦实现这些测量后，电子的 y 坐标有一不确定度 Δy，使得 $\Delta y \cdot \Delta p \gtrsim \hbar$．这里的量子效应是电子波跨过光阑 A 时的散射．（读者可自行证明在这个问题中，光阑 B 的衍射无论如何总归不起作用．）如果这个影响不存在，当进入磁铁时，动量将准确地平行于 Oy，电子将非常精确地沿从 A 到 B 的半圆运行，从 A 到 B 的飞行时间与 p 的值无关，且等于

$$\pi mc/e\mathscr{H}\ (m = \text{电子质量}).$$

由于这个影响，在磁铁入口处动量和 Oy 轴之间的夹角有一个固有的不确定性 $\alpha \approx \lambda/d = h/pd$；电子的轨道（即几何光学意义下的射线）是一个决定到 2α 内的圆形线段．当电子到达 B 的瞬间，有一个测不准度 $\Delta t = 2\alpha mc/e\mathscr{H}$，而不是在严

格意义下被决定，不确定度 Δy 比 Δt 大 p/m 倍，即

$$\Delta y \approx 2a\frac{pc}{e\mathscr{H}} \approx 2h\frac{c}{e\mathscr{H}d}.$$

故有

$$\Delta y \cdot \Delta p \approx 2h\left(1+\frac{d'}{d}\right).$$

b）和光子碰撞——另外一种测量动量的方法是让所考虑的粒子与另外的粒子（比方说，一个光子）碰撞．光子的初始动量完全已知，然后测量在碰撞中转移给第二个粒子的动量．让我们再一次取上一个问题中由初始条件

$$p_x = p_z = 0, \quad y = y_A$$

表征的电子．我们用传播方向平行于 y 轴，频率为 ν 的理想单色光照它，以测量它的动量 p_y．这种辐射的一个光子可以受到康普顿碰撞，人们可以测量它的末动量．为简单起见，我们假定后者沿着 Oy 的反方向（图 4.5）．令 ν' 为碰撞后光子的频率；从康普顿效应的理论得出电子初动量 p 和末动量 p' 作为频率 ν 和 ν' 的函数关系．我们将假定非相对论近似条件成立（$p, p' \ll mc$，及 $\nu, \nu' \ll mc^2/h$）．经过一些计算后得出

$$p = mc\frac{\nu'-\nu}{\nu'+\nu} + \frac{h}{2c}(\nu'+\nu),$$

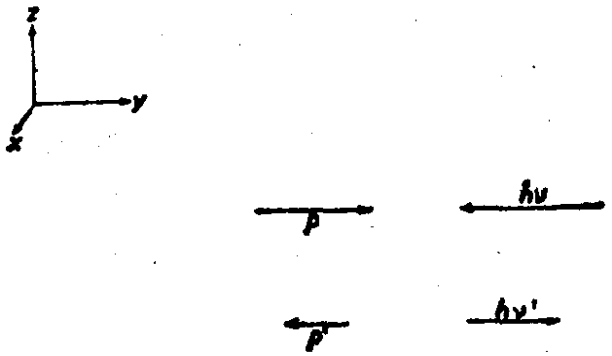

图 4.5　用和光子的康普顿碰撞作电子动量测量．碰撞图解．

$$p' = mc\frac{\nu' - \nu}{\nu' + \nu} - \frac{h}{2c}(\nu' + \nu),$$

在这些量的测定中的精确度和在 ν 的测定中的精确度由关系式

$$\Delta p \approx \Delta p' \approx mc\frac{\Delta\nu'}{\nu' + \nu}$$

联系起来。

已知电子的初值 y_A。电子在康普顿碰撞前的速度 p/m 以及后来的速度 p'/m，可以算出测量后电子的位置 y。若散射光子的动量和位置能同时极精确地测量，则碰撞发生的时刻就能在精确的意义下被决定，p 和 y 的测不准度可以同时取得非常小，读者易于证实这个事实。确实，ν' 的测量是频率的测量，它越精确，光子经过一给定点的时刻的不准确度就越大，特别是碰撞时刻的不确定度 Δt 就越大：$\Delta\nu' \cdot \Delta t \gtrsim 1$。碰撞后电子位置的不确定度 Δy 至少等于 Δt 和速度变化的乘积，

$$\Delta y \gtrsim \frac{|p - p'|}{m\Delta\nu'} = \frac{h}{mc}\frac{\nu + \nu'}{\Delta\nu'},$$

由此得

$$\Delta y \cdot \Delta p \quad 和 \quad \Delta y \cdot \Delta p' \gtrsim h.$$

和前面的一样，在这个测量操作中，被测量的量 p_y 本身是在测量过程中修正的。一定不要把这个修正和在测量期间体系受到的不能预言和不可控制的微扰相混淆。确实，这个修正是准确知道的，或者，总而言之，碰前和碰后 p_y 的值 p 和 p' 是同样精确知道的；这个精确度可以做到要多大就有多大。另一方面，不能预言和控制在测量操作期间粒子受到的微扰（在转移动量和能量的时间中的不确定度），人们就不能在一旦测量实现后，不带任何不确定度 Δy 地知道 y；Δy 越大，p 的测量越精确。

让我们再一次强调测不准关系一定是一种普遍特征. 为了便于论证,我们假定,光子的作用量子是一个远远小于 $\hbar$ 的量 $\hbar'$. 很清楚,所有我们关于测量 (b) 的论证,只要在所有公式中用 $\hbar'$ 代替 $\hbar$,就都可以照搬; 不确定度的乘积 $\Delta y \cdot \Delta p'$ 将是一个 $\hbar'$ 量级的值,从而 $\Delta y \cdot \Delta p' \approx \hbar' \ll \hbar$. 测不准关系将被破坏,我们发展起来的整个统计解释将和实验相矛盾.

这里讨论的两种动量测量要求一定的延迟. 这种延迟实际上可以减小到某种程度(第一种情况下通过增加 $\mathscr{H}$,第二种情况下通过增加 v; 见习题 4.7) 而不影响 p_y 测量的精确度. 在 §§ 2 和 5 中定义的几率可从某一给定时间 t 的波函数算出,t 应该是确定的. 如果测量是瞬时的,t 就是完成测量时的时间. 如果测量要求某些延迟,t 就是当测量开始时的时间,也就是当体系开始和测量装置相互作用时的时间. § 2 中定义的几率定律[(4.6)式]涉及到动量 p_y,即涉及测量前的动量.

IV. 在量子理论中现象的描述 并协性和因果性

15. 统计解释引起的问题

很清楚,量子体系用它的波函数来表示是人们所不熟悉的,因为它很抽象,上面讨论的统计解释是很难直观理解的. 然而,当人们探求以更具体的方式去描写微观现象时,人们总要陷入矛盾之中.

例如,考虑一氦原子; 为简单计,假定氦核无限重而且是不动的,我们把它作为一个用波函数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; t)$ 表示的二电子体系来处理. 人们能够描画的最简单的图象是两个微粒(即两个电子)在核的周围作有点复杂的运动. 这暗含着它们中的每一个都有一条完全确定的轨迹,但是函数 Ψ 在位置测量

情况中并不给出比位置的统计更多的东西；在动量测量情况中并不给出比动量的统计更多的东西．由于我们假定原子的动力学态被波函数Ψ完全决定，这种微粒的表示部分地是不正确的．在另一个极端情形下，人们可以把这两个电子想像为核周围空间中的连续电荷分布，或者更好点，想像为带电的连续波．但这个图象也发生困难．首先，波函数Ψ是在位形空间而不是在普通空间定义的；因此它不同于我们正在讨论的具体的波；确实，到目前为止，这样具体的波的满意定义还没有提出．其次，连续波的图象不能和电离这类现象相互协调，这类现象在某种程度内表现出存在单个局域粒子．

当然，不存在这样一种证明：说微观现象的自洽和具体的表示是不可能的．但事实是从来没有一个人成功过．确实，逻辑上并不一定要求物理理论中多少有些抽象的概念要用具体的语言表示．所有我们的直觉，所有我们关于具体性的感觉，都建筑在日常经验的基础上，用以具体描述现象的术语必须是从经验中引伸出来的．没有迹象表明，这种语言能无矛盾地运用于像微观物理现象那样的离开日常经验很远的现象．这并不是这类困难的头一个例子．相对论的一些结果也是类似地违反了常识[1]，例如当参考系的速度接近c时的长度收缩和时间延缓就是如此．所以，人们企图描画的微观现象的具体图象不能一直推演下去而不引起某些矛盾或佯谬，这一点几乎是不足为奇的．

在这种联系中，量子理论中常数h所扮演的角色和相对论中常数c所扮演的角色间是平行的，指出这一点是有教益的．c是有限的而不是无限这事实对同时性概念强加了一个修正，从此为牛顿力学的正确范围设置了一个极限．同样h

1）人类的常识和物理发现之间导致冲突的场面决不是从相对论开始的．

是有限的而不是零这事实对同时测量概念强加了一个修正，限定了经典理论正确的范围。我们日常经验表明的具体图象是 c 似乎无限大，$\hbar$ 似乎是零的世界。不能把它们整个地带到这些近似中的一个或另一个不再正确的领域。

因此决不能把量子理论中不存在现象的具体的和易懂的表示视为理论的缺陷。尽管如此，它容易受到另一种观点的批评。

问题是由量子理论中现象的描述是否真正满足人们在一个完备而满意的理论中所能期望的所有要求引起的。当然，对理论的第一个要求是它的预言能和实验观测相符合。量子理论满足这个条件的至少在原子和分子物理领域内满足，这是确凿无疑的。如果一个物理理论不能讲出比作某个给定实验时观测到的东西来得多的话，就不能宣称它是完备的。在任何科学努力的开头，作为一个基本假设，人们建立起这样的信念：自然界是独立于我们感觉之外或者独立于我们研究手段之外的，物理理论的目的在于给这种客观实在一种可以理解的说明。

现在，量子理论的所有结论总可以纳入下述形式："若人们作这样或那样的测量，就得到这样或那样的结果"。因此，人们可以问，量子理论是否真正提供了一个客观实在的完备描述。

由于理论的预言是一种统计性质的预言，这个问题就显得更合法了。在经典理论中，当所研究的物理体系的信息不完备时，人们曾借助过统计的语言和方法。经典统计引入的概念不能导致对客观实在的完备描述，它们只允许我们得到关于所要研究的物理体系的某些平均性质和结果。这些结果不能用于一个特殊的体系，而只能用于 N 个大量数目的全同的独立体系。同样，量子理论一般不能确切地预告对个别选

定的体系所作的给定测量的结果，而只能得出对N个大量数目的，以同一个波函数表示的独立体系，重复同样测量而得到的结果的统计分布。

于是人们可以试着得出结论：量子理论提供了一个微观客体体系统计分布的正确描述，但并不意味着，当把它们一个个地取出来时，能完备地描述每一个体系。按照这个观点，波函数的知识不足以完全决定单个物理体系的动力学态。为作出完备描述，人们还应该有一定数目的附加数据，但由于我们的观测手段不充分，这些附加数据是不能得到的。换句话说，物理体系的动力学态在每一时刻应由一定数目的**隐变量**决定，**隐变量**的演变受某些特殊规律制约。确定地预言给定测量结果的不可能性，简单地来自我们无法了解这些隐变量的精确值。波函数不表示所研究体系的客观状态，而只是一种数学对象，它包含着人们对不完全了解的体系所能具有的全部信息。

虽则这种意见是完全站得住脚的，但现在流行的观点坚持认为量子理论提供了自然现象的一种完备的描述[1]。这建立在玻尔(1927)对微观尺度上的非常特殊的观测条件所作的分析上，也建立在从玻尔的分析演变出来的一个普遍原理——并协原理上。

16. 微观现象的描述和并协性

任何自然现象的描述——这里完全不问它的客观实在性——照例必须在某个阶段上包含我们对这些现象的观测结果。现在——这是玻尔分析的第一点——无论现象超越经典物理范围多远，它们的解释总可以用经典术语表示。事实上，

---

1) 见第二章§1末的脚注。

要说明一个实验意味着要对实验环境和观测结果作毫不含糊的描述：例如，这意味着要阐述清楚“在那个瞬间指到已经停在转盘的那一点上”.我们这里希望强调的一点是使用毫不含糊语言的必要性，这些语言中没有观察者部分可能加入的不确定因素．这是绝对不可缺少的，因为实验必须是可重复的，它的进行必须保持和作实验的观测者完全独立．

然而，在微观水平上，人们不能在自然现象和用来观测的仪器之间，作通常观测概念所要求的截然的分割.只在可以考虑忽略量子$\hbar$的程度内，把客体和观测仪器作为分开的实体来描述才是正确的．这对用经典语言作现象分析设置了一个极限，任何推广这个分析以超越这个极限的尝试都要求对实验安排作出修正，以引入客体和测量装置间新的可能的相互作用．

结果，不同实验条件下得到的资料不能综合在一个图象内．只有在观测结果的总体能穷尽微观物理客体的可能信息的意义下，才必须认为它们是并协的．这就是并协性原理的内容．

17. 并协变量　相容变量

在微观物理学中现象的描述是由并协元素构成的：这些并协元素按相互排斥的实验装置分别予以定义，在任何建立经典图象的企图中，总是同时需要这些元素的．

位置的给定分量 x 和对应的动量分量 p 组成一对上述意义下的并协元素．对 x 和对 p 的精确测量要求不相容的实验装置，以致于这两个量的同时测量不能在超出 $\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$ 的精确度极限之外实现.这是由 §§13 和 14 的讨论中得出的．当用光阑观测电子时(§13a)，为测量 x 和 p 而设计的实验装置的相互排斥的特征就极简明地显示了出来．在位置测量中

使用的光阑同样也能很好地用于测量动量. 后者由测量通过它和电子的相互作用转移给屏的动量得出. 但由于电子＋屏构成单个量子体系，而且由于不可能在这两部分之间作截然的分割，因此除非人们假定它们间的相互作用在某种程度上是不可控制的，人们就不能使用通常的经典语言，也不能谈论电子(被测量体系)和屏(测量仪器)分别的演变. 如果人们希望以精确度 Δx 了解 x，人们就不能用大于 $h/\Delta x$ 的精确度来控制转移给屏的动量. 如果人们要求以精确度 δp 了解 p，对动量转移的精确测量所需的所有实验装置施加于屏上的动量，就不能用大于 $h/\delta p$ 的精确度来控制屏的位置，这就相应地限制了我们关于 x 的知识(见习题 4.10).

称变量 x 和 p 构成一对并协变量. 我们常以下述限制更强的方式来叙述并协原理:

用经典语言描述微观客体的物理性质要求一些并协变量对;不相应地失去一对变量中的一个成员的精度，就不能改进另一个成员的精度.

这个说法强调了经典力学和量子力学间的本质不同，即量子体系的动力学变量不能全都同时以无限的精度决定.

按定义，若两变量能同时用无限的精确度决定，则称它们是相容的. 第五章将证明，两相容变量由对易线性算符表示. 粒子的坐标 x 和 y 是相容变量. 特别重要的是由彼此成对的相容变量组成的相容变量 $a, b, c, \cdots$ 的完备系，和它们当中的每一个都相容的任何其它变量是这些变量的函数 $f(a, b, c, \cdots)$. 例如考虑一单粒子量子体系. 三个坐标变量 x, y, z 构成一个相容变量的完备系. 确实，所有这三个量都能同时以无限的精确度决定. 另一方面，任何动力学变量是 x, y, z 和 p_x, p_y, p_z 的函数，唯一能和 x, y 和 z 相容的量是那些和 p_x, p_y 和 p_z 无关的量，因为后面几个量中的每一个分别和

x, y 和 z 不相容，因而它们是函数 $F(x, y, z)$. 同样 p_x, p_y 和 p_z 构成一个完备系，类似地，p_x, y, p_z 也构成完备系(在 § 14 的例子中，这三个变量的详情完全决定了测量前体系的动力学状态). 对体系相容变量的完备系所作的精确测量表示人们对该体系能得到的**最大信息**. 因此，它完全确定了动力学状态，以及对应于它的一个确定的波函数. 我们将在第五章中再来讨论这一点 (§§ 15 和 16).

18. 波粒二象性和并协性

如果人们接受并协性，波粒二象性就不再是佯谬：波方面和粒子方面是两个只在相互排斥的实验装置中出现的并协的方面. 任何揭露两方面中的一面的尝试都要求修正实验装备，它破坏了观测另一方面的任何可能性.

例如考虑杨氏衍射实验. 来自源 S 的单色辐射穿过屏 Y 上相距为 d 的两个开口，在屏 E 上形成干涉花样，屏 E 放在距离 Y 为 D 的地方(图 4.6). 条纹间的距离是 $\lambda D/d$，其中 λ 是辐射的波长. 在这个实验中，源 S，屏 Y 和 E 牢固地固定在普通支座上. 确实，如果不把 Y 相对于 S 和 E 的位置控制到公

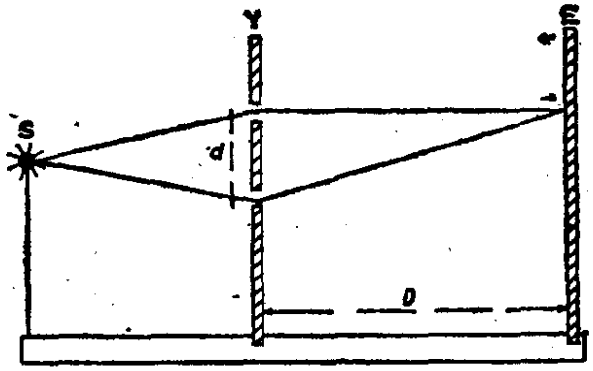

图 4.6 在杨氏双缝实验中粒子方面和波动方面之间的并协性. S = 源; Y = 开缝的屏; E = 探测屏. 图中 S、Y 和 E 牢固地缚在普通支座上;实验装置允许显示干涉条纹; 但所有关于各个光子遵循轨道的信息由于同样原因从探测中逃脱了.

差 δx 小于条纹间距

$$\delta x < \frac{\lambda D}{d},$$

就观测不到条纹.（为简单起见设源 S 在无穷远处）. 如果人们能找出粒子穿过屏 Y 中的那一个孔，辐射的粒子方面就显示出来了. 这可以极其简单地通过测量转移给屏 Y 的动量作到，按粒子通过这个或那个开口，它相差 $\approx ph/D$，$p = h/\lambda$ 代表粒子的动量. 因此，测量必须作到这样一种精度，以使得

$$\delta p < \frac{hd}{\lambda D}.$$

为了同时显示波动方面和粒子方面，这两个不等式必须同时满足，亦即必须有

$$\delta x \cdot \delta p < h,$$

鉴于观测仪器是个量子客体并满足测不准关系，这显然是不可能的. 任何其它揭示粒子方面的企图，结果都将类似地导致干涉条纹的压缩（见习题 4.11）.

19. 并协性和因果性

在量子理论框架中，现象的讨论暗含着对寻常因果性原理的某些限制.

严格说来，因果性只能用于孤立体系. 这样一个体系的动力学态在每一给定时刻由它在该时刻的波函数表示. 在初始时间 t_0 的波函数 $\psi(t_0)$ 和以后任何时间的波函数 $\psi(t)$ 之间的因果联系通过薛定谔方程表示. 然而，一旦它受观测限制，体系就受到某种来自观测仪器的反作用. 再者，由于被观测体系和观测仪器之间没有截然的分界，在某种程度上，上述反作用是不能预言和不可控制的. 它们必须作为单个量子体系处理，它的波函数 $\Psi(t)$ 依赖于测量装置的坐标以及被观测体系的坐标. 在观测过程中，不再能把被测量体系分开考

虑，而以较简单的波函数 $\psi(t)$ 确定动力学态的这种观念将失去它的意义。因此测量仪器的干预破坏了测量前和测量后体系状态间的所有因果联系；这就解释了为什么人们一般不能确定地预言在测量后能找到体系处在什么态；人们只能作统计性质的预言[1]。

为了表明为什么现象描述中的观念不能和观测它的方式分开，以及由此强加于因果性上的限制，我们将取通过发射一个光子而退激的一个原子为例。这个例子将同时说明波动方面和粒子方面二者之间的并协性。

设在 $t=0$ 时原子处在它的激发态，τ 为它的平均寿命，$\hbar\omega$ 为发射光子的能量。我们希望作光子发射时间的精确测量。为此，我们在原子周围摆满了探测器，光子最后总要击中这些探测器中的一个。已知发生计数的时间，探测器和原子间的距离，以及光的传播速度 c，人们就易于算出发射发生的瞬间。然而，量子理论的预言只是统计性的。确实，考虑时间 $t \gg \tau$ 时的体系（原子＋光子）：于是原子确实接近处于它的基态，而光子，在极好的近似下——我们这里将不给证明——由一依赖于 t 和 r 的波包 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ 表示，形式为

$$\psi(\boldsymbol{r}, t)=\begin{cases}0 & \text{当 } r > ct \\ \dfrac{1}{r}\exp\left[-\left(i\omega+\dfrac{1}{2\tau}\right)\left(t-\dfrac{r}{c}\right)\right] & \text{当 } r < ct\end{cases} \tag{4.34}$$

1) 关于测量结果的统计预言可以非常自然地从测量算符本身机制的研究中导出。在这种研究中，测量仪器被作为量子化客体处理，而其复合物（体系＋测量仪器）以因果方式按薛定谔方程演化。F. London 和 E. Bauer 的书 *La Théorie de l'Observation en Mécanique Quantique* (Paris, Hermann, 1939) 对量子力学测量过程给出了一个非常简明扼要的陈述。这个问题的更详细的讨论可在 J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* (Princeton, Princeton University Press, 1955)，及在 D. Bohm, *Quantum Theory* (New York, Prentice-Hall, 1951) 中找到。

(r 是光子和原子间的距离).

在与原子的距离为 R 处，在 $t < R/c$ 时探测到光子的几率为零；在以后任何时间，正比于 $\exp[-(t-R/c)/\tau]$；从而我们有给出衰变时间统计分布的熟知的指数规律.

这个规律确实和大量数目的衰变原子的实验观测相符合. 但是，量子理论不能预言每个单个原子的衰变时间. 因此，人们尝试得出结论：量子理论正确地描述激发原子统计系综的退激现象，但它不能完备地描述单个原子的退激现象.

对这种反对意见可答复如下. 衰变时间的观念不能和揭示它的实验装置分隔开来，不能把它认为是和这些装置无关的，只表征所考虑原子演变的性质. 确实，存在其它的实验装置，它和我们刚才讨论的并协，由它揭示出来的衰变现象的方面与存在精确的衰变时间是完全不相容的. 这就是为观测发射光的干涉效应而设计的所有装置. 通过这些装置，波(4.34)分裂为两个波包，它们在沿不同光程行进后又重新结合起来. 显然，除非两光程差小于波(4.34)的空间广延，否则上述波包不能干涉[1]. 在这种现象里，清楚地显示了波包的空间广延，而衰变时间的概念是毫无意义的.

就因果性而论，它实际上适用于体系(原子+光子)，只要后者还未和观测仪器相互作用. 在这整个期间内，用服从薛定谔方程的波函数描述体系的动力学态仍然是可能的；特别是，光子由出射波包(4.34)表示，它的波前 $(r = ct)$ 以速度 c 从原子缩回. 然而，一旦体系(原子+光子)开始和观测装置相互作用，因果描述就不再成立. 人们不再能把体系考虑

---

1) 发射可见光的激发态寿命通常是 10^{-8} 秒量级. 从而，发射波列的长度 $c\tau$ 是 3 米量级. 对应于光程差为 1 米量级的干涉花样确实已经观测到. 这证实了我们这里引用的波列空间广延的结论，以及衰变时间观念模糊不清的结论.

为单独的实体，因为系综（体系＋测量仪器）形成一个单独的整体．体系具有的性质一般确实是复合体的性质．因此，测量前体系的状态和测量后的状态之间不存在严格的因果联系．

这种情况和经典理论中严格的因果性有非常根本的不同；经典体系的动力学变量全都能在每一个时刻以精确的方式确定，它们随时间的演变是严格决定的．而量子体系中的所有这些量只能在测不准关系要求的近似极限内确定，它们随时间的演变也只是部分地决定的．值得惊讶的是，这个因果性原理的限制不会冒和任何实验事实矛盾的风险；因为体系的动力学变量的系综的时间演化只能在测不准关系要求的近似极限内在实验上予以观测．

练习和问题

1．证明一粒子在电磁场中的哈密顿量[(2.25)式]是厄密的，从而，薛定谔方程的任意解的归一条件在时间过程保持不变．证明若取和经典力学对应的流的定义，即

$$j = \mathrm{Re}\left[\Psi^*\left(\frac{\hbar}{im}\nabla - \frac{e}{mc}A\right)\Psi\right]$$

（A = 电磁场的矢势），可写出在这种情况下全同于方程(4.11)的连续性方程．

2．一个质量为 m 的粒子在一维势 $V(x)$ 中运动，当 x 分别趋于 $+\infty$ 和 $-\infty$ 时，$V(x)$ 渐近地（比 $1/|x|$ 更快）趋于 V_+ 和 V_-．引入波数 $k_\pm = \sqrt{2m(E-V_\pm)}/\hbar$，并考虑解 $u_E(x)$，它在 x 轴两端的渐近行为是

$$u_E \underset{x\to-\infty}{\sim} e^{ik_-x} + Re^{-ik_-x} \qquad u_E \underset{x\to+\infty}{\sim} Se^{ik_+x}.$$

由这种类型解的叠加，形成一个表示粒子在 x 增加方向运动的波包（归一）．证明经过足够长时间后，这个波包分裂为一个透射波包和一个反射波包，在这些波包的这个或那个中找到粒子的几率分别等于

$$(k_+/k_-)|S|^2 \quad 和 \quad |R|^2.$$

3.和约束在沿 x 轴运动的粒子相联系的波函数为

$$\psi(x) = (2\pi\xi^2)^{-1/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{x^2}{4\xi^2}\right).$$

计算动量空间的波函数 $\varphi(p)$. 验证 $\psi(x)$ 和 $\varphi(p)$ 都是归一的. 相继运用表示式(4.13)和(4.21),计算 x 和 x^2 的平均值，并比较这些结果.相继运用表示式(4.14)和(4.20),计算 p, p^2 和 $\exp(ipX/\hbar)$(X 是一给定实常数)的平均值,并比较这些结果.

4.证明: 满足 $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$ 的波包(最小波包)形式必然是

$$(2\pi\xi^2)^{-1/4} \exp\left[\frac{i}{\hbar} p_0 x - \frac{(x - x_0)^2}{4\xi^2}\right]$$

且有 $\langle x\rangle = x_0$, $\langle p\rangle = p_0$, $\Delta x = \xi$, $\Delta p = \hbar/2\xi$.

5.令 $\langle x\rangle$ 和 $\langle p\rangle$ 为体系处在动力学态 $\psi(x)$ 时 x 和它的共厄动量 p 的平均值. 证明对动力学态

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\langle p\rangle x\right)\psi(x + \langle x\rangle)$$

x 的平均值和 p 的平均值为零.

6.证明: 在§13b 的位置测量中,测量装置(光束+显微镜)的量子性质起根本的作用,且若光不是量子化的,测不准关系就将被破坏. 证明: 在这个例子中,对电子来说,出现在测不准关系中的常数 $\hbar$ 必然不大于在光量子定义中出现的常数.

7.在用磁场的偏转作动量的测量时(第四章 §14a),证明人们能减小测量的持续时间 $\tau = \pi mc/e\mathscr{H}$ 到某种程度,而不改变测量的精确度,但这种测量的持续时间的精确度 $\Delta\tau$ 是决定的,保持不变. 讨论这个例子中的时间-能量测不准关系. 详细阐述与持续时间 $\frac{1}{\Delta\nu}$ 有关,用光子的碰撞作动量测量的同一问题. (§14b).

8.§14b 的动量测量可以用任何类型的粒子代替光子. 它实质在于令电子和该粒子碰撞,并测量在碰撞中转移给后者的动量. 在非相对论近似下,讨论这种情况的动量-位置测不准关系. 证明由电子位置测量引起的不确定度依赖于所用粒子的测不准关系中出现的常数 $\hbar$.

9.一量子化的粒子穿过一直径为 d 的开口,开口处装有一个光闸,光闸在时间 τ 开启. 证明这个粒子必然和这个装置(光阑+光闸)交换

一数量级为 $\hbar/d$ 的动量以及一数量级为 $\hbar/\tau$ 的能量.

10.在用显微镜作电子的位置测量时，人们企图在操作过程中，对转移给显微镜的动量作精确测量，以此来决定分给电子的动量. 证明人们只能按测不准关系，以减小位置测量的精确度为代价来增加动量测量的精确度.

11.以荷电粒子的单能量束作杨氏双缝实验，并企图以云室为探测器以显示干涉条纹. 在云室距离杨氏屏足够远的条件下，这是可能的. 证明在云室中对每个粒子遵循的“轨迹”的观测，无法精确到能让我们决定粒子前进时通过的是那一条缝.（见本章§12末脚注.）

第五章　波动力学的发展及其解释

1. 引言

上一章我们给出了量子理论统计解释的基本要素；我们用非常普遍的观点，考察了这种解释的内在一致性，它和实验事实的相容性以及为描述自然现象而暗含的非常特殊的条件.今后我们限于在粒子系波动力学这一较窄的框架内(在非相对论近似下)，根据以前建立的普遍原理来完成和改善这种解释.

我们假定波函数完全决定了所考虑的体系的动力学态.和经典理论出现的情况相反，一般不能在各个时刻以无限的精确度确定体系的动力学变量.然而，如果人们完成一给定动力学变量的测量，测量结果就遵从某一几率规律，这个规律必然完全由波函数的详细情况决定.

在第四章第 I 节中已明显地给出了位置和动量测量的几率规律；还导出了任何位置坐标函数的平均值和任何动量坐标函数的平均值的普遍公式. 然而，在最一般情况下，即在被测量的动力学变量同时是位置坐标和动量坐标函数的情况下，还没有给出从波动力学导出几率规律的法则. 在本章的前三节中，我们将弥补这个缺陷.在第 I 节中，表述基本假设.人们将每一个动力学变量 $\mathscr{A}$ 和作用在波函数上的某个厄密算符 A 联系起来，$\mathscr{A}$ 的测量结果的平均值是一个用 A 构成的表示式——这是第四章(§ 5) 的那些表示式的推广.假定这个假设对任何动力学变量及这些变量的任何函数均成立，要找的统计分布就是完全确定的. 它的明确的决定是和解 A 的

本征值问题密切联系的. 在第II节中,我们在能谱分立,本征函数平方可积的特殊情况下，研究A的本征值和本征函数的性质. 后来发现几率规律是和波函数按A的本征函数的级数展开式中的系数密切联系的. 在第 III 节中，在本征值谱部分连续的普遍情况下,论述了同一问题.

在第 IV 节中,我们从形式上论述了,从相容变量完备系同时测量得出的结果导出量子体系波函数的问题. 当这些"最大观测"没有实现时，关于体系动力学态的信息是不完备的;体系的研究仍然由统计方法进行,这里所用的术语"统计"是按通常意义理解的.

对于两个相容变量，存在有相应的对易算符. 若所有算符对的对易子为零，则体系的所有动力学变量都能同时以任意精确度决定. 与经典理论表征的情况相反，某些变量对是不相容的，相应的对易子不为零. 因此在量子理论中对易子起本质的作用. 第V节研究对易子，讨论最一般的对易子的计算,建立和讨论一些方程，后来发现在这些方程中，对易子概念是特别有用的.

I. 厄密算符和物理量

下面所有为说明而引用的例子均取自一维体系(第三章)或三维体系(这就是单粒子体系)的波动力学. 但是人们永远不要忘记这个事实: 这些考虑可以非常普遍地用到任何维数的量子体系.

2. 波函数空间

用来表示量子体系的波函数属于一个应该精确规定的函数空间. 为使第四章§2中定义的分布 $P(r)$ 和 $\Pi(p)$ 有

意义，必要和充分条件是归一条件（4.3）能适用于波函数 $\psi(r)$。从而，导致波函数空间的下述定义：

波动力学中的波函数是位形空间中的平方可积函数，这就是说函数 $\psi(q_1, \cdots, q_R)$ 应使

$$\int |\psi(q_1, \cdots, q_R)|^2 d\tau$$

收敛[1] [$d\tau$ 代表体积元 $dq_1 \cdots dq_R$]。

我们能给函数空间稍为多一点的限制，要求波函数归一[(4.3)式]。然而，放松归一条件，结果会更方便，我们下面将看到，以略微修改一下几率和统计分布的定义为代价，这是能办到的。

在数学语言中，上面定义的函数空间是**希耳伯特空间**。下面将证明，它确实具有这样一种空间的特性。

首先，它是个**线性空间**。若 ψ_1 和 ψ_2 是两个平方可积函数，则它们的和，它们中的每一个与复数的乘积，更一般地，任何线性组合

$$\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2$$

其中 λ_1 和 λ_2 是任意选定的复数，也是平方可积函数。

其次，人们能定义这个空间中的**标积**。按定义，函数 ψ 和函数 φ 的标积为

$$\langle \varphi, \psi \rangle \equiv \int \varphi^*(q_1, \cdots, q_R)\psi(q_1, \cdots, q_R)d\tau \qquad (5.1)$$

若它为零，则称函数 φ 和 ψ **正交**。函数 ψ 的**模方** N_ψ 是这个函数和它自身的标积

$$N_\psi \equiv \langle \psi, \psi \rangle.$$

标积的基本性质如下：

---

1) 这样一个函数的傅里叶变换 $\varphi(p_1, \cdots, p_R)$ 恒存在：它是一个平方可积函数且与 $\psi(q_1, \cdots, q_R)$ 有相同的归一条件。确实（见附录 A），φ 和 ψ 之间是一一对应的。如果我们沿用惯例不把只差一个零测度集合的两个函数考虑为截然不同的，这总是办得到的。

a) ψ 对 φ 的标积是 φ 对 ψ 的标积的复数共厄，即

$$\langle\psi, \varphi\rangle = \langle\varphi, \psi\rangle^*; \tag{5.2}$$

b) φ 与 ψ 的标积对 ψ 是线性的，换言之

$$\langle\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2\rangle = \lambda_1\langle\varphi, \psi_1\rangle + \lambda_2\langle\varphi, \psi_2\rangle; \tag{5.3}$$

c) 函数 ψ 的模方是实的，非负的数：

$$\langle\psi, \psi\rangle \geqslant 0, \tag{5.4}$$

而且若 $\langle\psi, \psi\rangle = 0$，必有 $\psi = 0$[1]。

容易从标积本身的定义导出所有上述性质。人们易从性质 (*a*) 和 (*b*) 证明标积 $\langle\varphi, \psi\rangle$ 并不线性地依赖于 φ，而是反线性地依赖于 φ

$$\langle\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi\rangle = \lambda_1^*\langle\varphi_1, \psi\rangle + \lambda_2^*\langle\varphi_2, \psi\rangle. \tag{5.3'}$$

从性质 (*a*)，(*b*) 和 (*c*) 得出标积的一个非常重要的性质，薛华兹不等式(见习题 5.1)：

$$|\langle\varphi, \psi\rangle| \leqslant \sqrt{\langle\varphi, \varphi\rangle\langle\psi, \psi\rangle}. \tag{5.5}$$

当函数 φ 和 ψ 彼此互成倍数时，也只有在这种情况下，等式成立。当函数 φ 和 ψ 是平方可积函数时，薛华兹不等式保证了定义标积的积分(5.1)收敛。

除了它是线性的且人们能定义标积的事实外，平方可积函数空间具有**完备性**；这是能让我们证实它是希耳伯特空间的道理。完备意味着满足科希判据的任何平方可积函数的集合，收敛(均方)到一个平方可积函数。反之，能把任何平方可积函数考虑为平方可积函数的收敛级数(科希意义下)的极限(均方收敛)(可分离性)[2]。

---

1) 严格说来，在测度为零的集合中，ψ 可取非零值。按上一脚注中的惯例，这个函数与零并无不同。

2) 希耳伯特空间的严谨而详尽的研究见 M. H. Stone, *Linear Transformations in Hilbert Space* (New York, Amer. Math. Soc. 1932)。主要性质及其证明在 J. Von Neumann 的上述引文中给出，均方收敛的定义见附录 *A* § 16 脚注。

3. 平均值定义

在第四章§5中曾导出：对任何型如 $F(\boldsymbol{r})$或$G(\boldsymbol{p})$ 的动力学变量，有某线性算符 A和它相联系，它等于表示式 $F(\boldsymbol{r})$ 或 $G(-i\hbar\nabla)$；再者——这来自 $P(\boldsymbol{r})$ 和 $\Pi(\boldsymbol{p})$ 所采用的定义——这些动力学变量的平均值由表示式(4.22)给出，用我们现在的记号，它能恰好写成 $\langle\Psi, A\Psi\rangle$。若波函数不归一，$P(\boldsymbol{r})$ 和 $\Pi(\boldsymbol{p})$ 的表示式(4.2)和(4.6)必须除以波函数的模方 $\langle\Psi, \Psi\rangle$，上述平均值的表示式必须由表示式 $\langle\Psi, A\Psi\rangle/\langle\Psi, \Psi\rangle$ 代替。

推广这个结果到任意动力学变量，我们引进假定：

(a) 和动力学变量 $\mathscr{A} = A(q_1, \cdots, q_R; p_1, \cdots p_R)$ 相联系的有线性算符

$$A\left(q_1, \cdots, q_R; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_1}, \cdots, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_R}\right).$$

(b) 当体系处在由函数 $\Psi(q_1, \cdots, q_R)$ 确定的动力学态时，这些动力学变量的平均值是

$$\langle A\rangle = \frac{\langle\Psi, A\Psi\rangle}{\langle\Psi, \Psi\rangle} \tag{5.6}$$

经典哈密顿函数和薛定谔哈密顿量之间的对应是动力学变量和线性算符之间的对应 (a) 的一种特殊情况。在第二章§15中，关于这种对应所作的限制同样适用于普遍情况。我们记住，q 必须是笛卡儿坐标。再者，人们在相应的运算中，用不可对易的算符代替普通代数的量这个事实，使得在算符 A的定义中存在某种含糊不清之处。在实用上，这种含混是通过确认第二章§15的经验规则而消除的。

此外，若动力学变量 $\mathscr{A}$ 表示一物理量，它是 p 和 q 的实函数，则 $\mathscr{A}$ 的测量结果是实量，平均值 $\langle A\rangle$ 就理由更充分

地是实量. 因而 $\langle \Psi, A\Psi \rangle$ 为实数,

$$\langle \Psi, A\Psi \rangle = \langle A\Psi, \Psi \rangle. \tag{5.7}$$

对进行测量的体系的任何动力学态,因而对任何函数 ψ, 上式这都成立. 一种不同的说法是 (见第四章, § 3): 算符 A 必须是厄密的. 易见——马上可通过所有后面的例子加以证实——一旦算符 q_i 和 $(\hbar/i)\partial/\partial q_i$ 是厄密的, 总可按对应规则 (a), 使任何动力学变量和厄密算符联系起来. 但思想上必须明确,要作第二章 § 15 指出的"对称化"规定.

厄密算符的性质将在 § 5 及以后各节中系统地研究. 这里我们先来阐明这些算符的一个重要性质. 若 A 厄密, 则用 Φ 和 Ψ 的线性组合 $\Phi + \lambda\Psi$ 算得的 $\mathscr{A}$ 的平均值是一个实量,其中 Φ 和 Ψ 是适用于 A 的函数空间中的函数,从而量

$$\langle \Phi + \lambda\Psi, A(\Phi + \lambda\Psi) \rangle = \langle \Phi, A\Phi \rangle + \lambda\langle \Phi, A\Psi \rangle + \lambda^*\langle \Psi, A\Phi \rangle + |\lambda|^2\langle \Psi, A\Psi \rangle$$

为实, 对任何复数值 λ, 这都成立. 由于 $\langle \Phi, A\Phi \rangle$ 及 $\langle \Psi, A\Psi \rangle$ 是实量,记 λ 的位相为 α, 由此得出

$$e^{i\alpha}\langle \Phi, A\Psi \rangle + e^{-i\alpha}\langle \Psi, A\Phi \rangle$$

为实,或换一种说法是

$$e^{i\alpha}(\langle \Phi, A\Psi \rangle - \langle A\Phi, \Psi \rangle) = e^{-i\alpha}(\langle A\Psi, \Phi \rangle - \langle \Psi, A\Phi \rangle).$$

由于这些方程对任何 α 值都必然成立, 方程两边括号中的量必为零. 换句话说, 若 Ψ 和 Φ 是厄密算符 A 起作用的函数空间中的两任意函数,就有

$$\langle \Phi, A\Psi \rangle = \langle A\Phi, \Psi \rangle, \tag{5.8}$$

或等价地

$$\langle \Phi, A\Psi \rangle = \langle \Psi, A\Phi \rangle^*, \tag{5.8}'$$

常用(5.8)′作为厄密性的定义.

从假设 (a) 和 (b) 人们能导出物理量 $\mathscr{A}$ 的统计分布.

本节之末和后面两节用于研究这个问题.

4. 不存在涨落和本征值问题

我们要找的统计分布的涨落由方均根偏差 ΔA 表示:

$$(\Delta A)^2 = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (\geqslant 0),$$

A^2 是一个和 A 一样的动力学变量，它的平均值由假设 (b) 给出. 当偏差 ΔA 为零时，涨落不存在，人们可以确定地断言 $\mathscr{A}$ 取完全确定值;而这个值显然等于 $\langle A \rangle$.

让我们来看看关系式 $\Delta A = 0$ 施加于函数 Ψ 上的条件是什么. 对算符 A 和 A^2 的平均值用定义 (5.6) 后，可将这关系式写成

$$\langle \Psi, A^2\Psi \rangle \langle \Psi, \Psi \rangle = \langle \Psi, A\Psi \rangle^2.$$

把厄密算符 A 的性质(5.8)用于函数 Ψ 和 $A\Psi$，易证量

$$\langle \Psi, A^2\Psi \rangle \equiv \langle \Psi, A(A\Psi) \rangle$$

等于 $\langle A\Psi, A\Psi \rangle$. 于是有

$$\langle \Psi, A\Psi \rangle^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle \langle A\Psi, A\Psi \rangle.$$

我们得出薛华兹不等式约化为等式的情况. 因而 Ψ 和 $A\Psi$ 成正比. 对满足

$$A\Psi_a = a\Psi_a \tag{5.9}$$

的动力学态 Ψ_a(其中 a 为常数)，$\mathscr{A}$ 的统计分布的涨落为零.

方程 (5.9) 是一个本征值方程. 和时间无关的薛定谔方程已提供了一个这类方程的例子. 因此我们得出第一个结论:

当且只当物理体系的动力学态由和物理量 $\mathscr{A}$ 相联系的厄密算符的本征函数 Ψ_a 表示时，物理量 $\mathscr{A}$ 才肯定地(这就是说几率为 1) 具有完全确定值;且这个量 $\mathscr{A}$ 所取的值就是和函数 Ψ_a 相联系的本征值 a.

特别对体系的能量 $H(q_i; p_i)$，我们刚刚讲的必然完全

成立。相应的算符就是薛定谔哈密顿量，在我们建立和时间无关的薛定谔方程时，实际上是和体系的能量相联系的。（第二章，第 III 节）。当体系处在定态时，我们假定体系的能量取完全确定值 E；它的波函数是算符 H 对应于本征值 E 的本征函数。这些假定是和上节中引入的普遍假设 (a) 和 (b) 一致的。

导出方程 (5.9) 的论证中假定了出现在不同标积中的函数 Ψ，$A\Psi$，$A^2\Psi$ 属于希耳伯特空间。除非另作说明，方程 (5.9) 本身是一个其中未知函数 Ψ_a 必是平方可积函数的方程式。

用这种方式表述的话，本征值问题完全可以无解。比如 q_i 和 $(\hbar/i)\partial/\partial q_i$ 这些普通算符就是如此。我们更仔细地考虑一维情况下这两个算符的本征值问题。对 q，我们写出

$$(q - q')\Psi(q) = 0,$$

除 $q = q'$ 外，只有 $\psi(q)$ 处处为零时才是可能的。不但没有平方可积的解满足这个条件，而且唯一可能解是一个特别奇异的函数，即除一点外处处为零。我们将在 § 8 更完整地讨论这个问题。$(\hbar/i)d/dq$ 的本征值问题可写成

$$\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dq}\psi(q) = p'\psi(q).$$

对任何 p' 值，决定到一个常数，它有一个解：函数

$$\exp(ip'q/\hbar).$$

这个本征函数不是平方可积的。

对上面两个算符，前面所讲的结果不适用。很清楚，为了得到一个普遍感兴趣的说法，还必须考虑本征值问题(5.9)的不是平方可积的解。我们已经处理过一个特殊的本征值问题，即一维体系的薛定谔方程(见第三章)，我们要在那个研究结果的指引下得到一个普遍的说法。薛定谔哈密顿量的本征值谱

一般包括两部分:分立本征值,其本征函数有一有限的模方;以及连续本征值,其本征函数在全空间有界,但有无限的模方.直观上这是很清楚的，由能量邻近的连续谱的本征函数*叠加，人们总能构成能量是确定的平方可积函数，至于构成方式如果不是精确的,也总可以使它的方均根偏差希望多小就多小.

让我们用第三章§13的记号来详细阐述这一点. 从H的连续本征值ε对应的本征函数$y(x;\varepsilon)$出发

$$Hy(x;\varepsilon)=\varepsilon y(x;\varepsilon) \tag{5.10}$$

构造"本征微分"[1]:

$$Y_\varepsilon(x;\delta\varepsilon)=(\delta\varepsilon)^{-1/2}\int_\varepsilon^{\varepsilon+\delta\varepsilon} y(x;\varepsilon')d\varepsilon', \tag{5.11}$$

后者是平方可积函数，用这样一个波函数算出的量$\langle H\rangle$和ΔH有完全确定的意义. 用(5.10)和(5.11)式,易见

$$\langle H\rangle=\frac{\langle Y_\varepsilon, HY_\varepsilon\rangle}{\langle Y_\varepsilon, Y_\varepsilon\rangle}\underset{\delta\varepsilon\to 0}{\sim}\varepsilon+0(\delta\varepsilon).$$

$$\langle H^2\rangle=\frac{\langle Y_\varepsilon, H^2Y_\varepsilon\rangle}{\langle Y_\varepsilon, Y_\varepsilon\rangle}\underset{\delta\varepsilon\to 0}{\sim}\varepsilon^2+\varepsilon 0(\delta\varepsilon).$$

因而,当$\delta\varepsilon$趋于零时,方均根偏差

$$\Delta H\equiv\sqrt{\langle H^2\rangle-\langle H\rangle^2}$$

像$(\varepsilon\delta\varepsilon)^{\frac{1}{2}}$那样趋于零. 它能够做得任意小. 这个结果可用下述方式表示: 把A的连续谱(如果它存在)中有限区域内的本征值相对应的本征函数叠加起来，人们可以构成平方可积函数，再通过把这个区域的大小$\delta\alpha$选得足够小,可使A的值对它的平均值[$\approx\alpha+0(\delta\alpha)$]的分布的均方根偏差要多小就有多小.

最后,很清楚,由方程(5.9)定义的本征值问题，不仅在分

---

* 原文为本征值,有错. ——译者注

1) 在"本征微分"定义中引入因子$(\delta\varepsilon)^{-1/2}$是为了在$\delta\varepsilon\to 0$的极限下使它的归一化保持有限.

立谱领域内，而且在连续谱领域内(这里的本征函数不再属于希耳伯特空间)将起根本的作用. 现在我们将对这个本征值问题作系统研究.

II. 分立谱的研究

5. 厄密算符的本征值和本征函数

考虑本征值方程

$$A\psi_a = a\psi_a. \tag{5.9}$$

整个这一节，我们将只考虑局域在希耳伯特空间中的本征解. 这把我们局限在分立谱内. 包含连续谱(如果它存在)在内的一般研究，将在第 III 节中作出.

因为 A 是线性算符，所以

1. 若 ψ_a 是本征函数，则 $c\psi_a$ (c 为任意常数) 也是一个同一本征值的本征函数. 为固定这个常数，通常把这本征函数归一化:

$$\langle \psi_a, \psi_a \rangle = 1.$$

这样做了以后，ψ_a 被决定到一个任意位相.

2. 若两个线性无关的函数 $\psi_a^{(1)}$ 和 $\psi_a^{(2)}$ 对应同一本征值[1]，则这些函数的任何线性组合也对应同一本征值. 我们称这种情况为**有简并**. 一给定本征值的线性无关函数的最大个数称为**简并度**(在第三章研究连续谱时，我们碰到过简并度为 2 的例子).

由厄密的定义及由它导出的性质 (5.8)，得到两个基本性质.

1. **每个本征值 a 是实数.** 事实上，用 ψ_a 从左边对方程

1) 如果不能找到两个非零的常数 λ_1, λ_2，使得 $\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 = 0$，$\psi_1$ 和 ψ_2 两个函数就线性无关.

(5.9) 两边取标积，人们证实 a 等于 A 对动力学态 φ_a 的平均值

$$a = \frac{\langle \psi_a, A\psi_a \rangle}{\langle \psi_a, \psi_a \rangle}.$$

由于 A 厄密，所以它是实数.

2. **两个对应不同本征值的本征函数正交**(见第三章§13). 事实上，让我们假定

$$A\psi_1 = a_1\psi_1, \quad A\psi_2 = a_2\psi_2.$$

用 ψ_2 从左边对第一个方程取标积，ψ_1 从右边对第二个方程取标积，然后逐项相减，计及性质(5.8)，人们得出

$$0 = \langle \psi_2, A\psi_1 \rangle - \langle A\psi_2, \psi_1 \rangle = (a_1 - a_2)\langle \psi_2, \psi_1 \rangle.$$

因此，若 $a_1 \neq a_2$，必然得出

$$\langle \psi_2, \psi_1 \rangle = 0.$$

从而，两个属于不同本征值的本征函数 ψ_1 和 ψ_2 线性无关. 事实上，让我们假定人们能找到两个数 λ_1，λ_2，使得

$$\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 = 0.$$

用 ψ_1 从左边对每项取标积，计及正交性，我们有

$$\lambda_1\langle \psi_1, \psi_1 \rangle = 0,$$

因而 λ_1 必须为零. 以同种方式可证明 $\lambda_2 = 0$.

若 a 是 n 度简并本征值，它的本征函数* 中的每一个总可纳入 n 个特殊的、线性无关本征函数 $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \cdots, \psi^{(n)}$ 的线性组合的形式. 这 n 个基函数的选择有很大的任意性. 但人们总可这样选择，使它归一，且各对均正交. 从不具有这些性质的系列 $\psi^{(1)}, \cdots, \psi^{(n)}$ 出发，例如人们能作下述变换(**施密特正交化过程**). 由

$$c_1\varphi^{(1)} = \psi^{(1)}$$

定义 $\varphi^{(1)}$，调节常数 c_1 使 $\langle \varphi^{(1)}, \varphi^{(1)} \rangle = 1$，即

---

* 原文为本征值，有错. ——译者注

$$|c_1|^2 = \langle \psi^{(1)}, \psi^{(1)} \rangle .$$

由

$$c_2\varphi^{(2)} = \psi^{(2)} - \varphi^{(1)}\langle \varphi^{(1)}, \psi^{(2)} \rangle ,$$

定义 $\varphi^{(2)}$. 因为 $\psi^{(1)}$ 和 $\psi^{(2)}$ 线性无关，左边必不为零. 很清楚，$\langle \varphi^{(2)}, \varphi^{(1)} \rangle = 0$. c_2 由 $\langle \varphi^{(2)}, \varphi^{(2)} \rangle = 1$ 的这种方式来调节. $\varphi^{(3)}$ 定义为

$$c_3\varphi^{(3)} = \psi^{(3)} - \varphi^{(1)}\langle \varphi^{(1)}, \psi^{(3)} \rangle - \varphi^{(2)}\langle \varphi^{(2)}, \psi^{(3)} \rangle .$$

这个函数必不为零；它显然与 $\varphi^{(1)}$, $\varphi^{(2)}$ 正交且可适当选择 c_3 使它归一. 继续这种方式. 这样构成的 n 个函数 $\varphi^{(1)}, \cdots, \varphi^{(n)}$ 满足 $n(n+1)/2$ 个关系式

$$\langle \varphi^{(l)}, \varphi^{(m)} \rangle = \delta_{lm} \quad (l, m = 1, 2, \cdots, n),$$

其中 δ_{lm} 是克朗内克符号：

$$\delta_{lm} = \begin{cases} 1 & \text{若 } l = m \\ 0 & \text{若 } l \neq m . \end{cases}$$

我们称它们构成一正交归一函数系.

简并本征值的研究必须用下述性质使它完整起来，我们将其不加证明地叙述如下：（见本章 § 2 末脚注）若简并度是无穷大，即如果我们能找到任意大量数目的线性无关本征函数，则人们总能构成一正交归一本征函数系（可数的无穷大）$\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \cdots, \varphi^{(r)}, \cdots$，使得任何对应于本征值 a 的本征函数能展开为这些函数的级数.

人们也能证明（见本章 § 2 末脚注）本征值构成一**分立系列**（有限或可数的无限大）$a_1, a_2, \cdots, a_p, \cdots$. 这个性质是局域在希耳伯特空间中的本征函数的本征值的特征.

6. 波函数按正交归一本征函数的级数展开

上面已证实，人们能把 A 的每个本征值 a_p 和一正交归一本征函数系列

$$\varphi_p^{(1)}, \varphi_p^{(2)}, \cdots, \varphi_p^{(r)}, \cdots$$

联系起来. 按照 a_p 是非简并的，有限简并的，无限简并的等不同情况，这系列可含有一个元素，有限数目的元素，无限数目的元素. 我们将用 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ 代表所有这些函数构成的系列. 系列中的任何函数满足关系

$$A\varphi_p^{(r)} = a_p\varphi_p^{(r)}, \tag{5.12}$$

$$\langle \varphi_p^{(r)}, \varphi_q^{(s)} \rangle = \delta_{pq}\delta_{rs}. \tag{5.13}$$

现在的问题是：属于希耳伯特空间的任何波函数 ψ 是否都能用 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ 的函数级数表示. 若 ψ 是 A 的本征函数，这个级数当然存在；在那种情况下，展式中唯一不等于零的就是对应于同一本征值的函数 φ 的系数. 若任何 ψ 都能展开为本征函数的级数，则称系 $\{\varphi_p^r\}$ 是完备的.

我们将不加证明地指出（见本章 § 2 末脚注）正交归一函数级数展式的一些性质.

令 $u_1, u_2, \cdots, u_n, \cdots$ 为一正交归一函数系：

〈i〉 若 ψ 按这些函数作级数展开：

$$\psi = \sum_n c_n u_n,$$

其展开系数

$$c_n = \langle u_n, \psi \rangle$$

满足帕色伐关系

$$\sum_n |c_n|^2 = \langle \psi, \psi \rangle.$$

〈ii〉 反之，若数项级数 $\sum_n |c_n|^2$ 收敛到一个有限值，比方 N，则展式 $\sum_n c_n u_n$ 收敛（均方）到一个模方为 N 的函数 ψ.

〈iii〉 若展式 $\sum_n c_n u_n$ 和 $\sum_n d_n u_n$ 分别收敛到 ψ 和 φ，

则级数 $\sum_n d_n^* c_n$ 收敛到 φ 对 ψ 的标积：

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \sum_n d_n^* c_n.$$

〈iv〉 对任何平方可积函数 ψ，级数

$$\hat{\psi} = \sum_n u_n \langle u_n, \psi \rangle$$

恒收敛. 若 $\psi - \hat{\psi}$ 与所有函数 u_n 正交，它的模方等于 $\langle \psi, \psi \rangle - \langle \hat{\psi}, \hat{\psi} \rangle$. 因而总有

$$\langle \psi, \psi \rangle \geqslant \langle \hat{\psi}, \hat{\psi} \rangle,$$

而且当等号成立时，$\psi = \hat{\psi}$。

若函数 u 不是由一个而是由几个分立指标表征时，所有这些性质仍然正确. 因此它们可用于系 $\{\varphi_p^{(r)}\}$. 特别是，若系 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ 是完备的，则任何波函数 Ψ 能表示为级数

$$\Psi = \sum_{p,r} c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}, \tag{5.14}$$

其系数由

$$c_p^{(r)} = \langle \varphi_p^{(r)}, \Psi \rangle \tag{5.15}$$

给出，而且满足帕色伐关系式

$$\sum_{p,r} |c_p^{(r)}|^2 = \langle \Psi, \Psi \rangle. \tag{5.16}$$

再者，两个波函数 Ψ_1 和 Ψ_2 的标积是

$$\langle \Psi_1, \Psi_2 \rangle = \sum_{p,r} \langle \Psi_1, \varphi_p^{(r)} \rangle \langle \varphi_p^{(r)}, \Psi_2 \rangle. \tag{5.17}$$

事实上，如果我们不太关心数学严格性，方程(5.15)和(5.16)是容易证明的：在这些方程的右边代入 Ψ 的表示式(5.14)再用正交归一关系(5.13)即得. 方程(5.17)可由类似的手续得出.

这与普通的矢量空间惊人地相似. 正交归一函数的完备系扮演着长度为一单位而且两两正交的基矢系的角色. 函数

Ψ 是这个空间（具有无穷维数）中的一个矢量，系数 $\langle\varphi_p^{(r)}, \Psi\rangle$ 是它沿这些基矢的分量［(5.15) 式］，矢量的模方，也就是说它的长度的平方，等于它的分量的绝对值的平方和［(5.16) 式］. Ψ_1 对 Ψ_2 的标积等于 Ψ_2 的每个分量与 Ψ_1 的相应分量的复数共厄的乘积之和.

7. 和一个算符相联系的量的测量结果的统计分布（这个算符具有有限模方的本征函数完备系）

把任何波函数 Ψ 表示为(5.14)型展式的可能性大大地促进了涉及 A 的所有问题的研究. 让我们假定算符具有一正交归一本征函数完备系［谐振子的哈密顿量（第十二章）是一个例子］. 这个系当然不是唯一的，人们总能改变波函数的位相，或是把对应于同一本征值的正交归一函数代之以这些函数的正交归一线性组合. 然而，下述性质与函数系的选择无关.

先验地，一个诸如 $A\Psi$ 那样的函数并非必须是平方可积的. 但按(5.14)，

$$A\Psi = \sum_{pr} c_p^{(r)} A\varphi_p^{(r)} = \sum_{p,r} a_p c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}.$$

当且只当 $\sum_{p,r} a_p^2 |c_p^{(r)}|^2$ 收敛时，这个展式才收敛［§ 6，性质 (i) 和 (ii)］，且在那种情况下，数项级数的和等于 $A\Psi$ 的模方. 用这种方法我们得到了一个决定 $A\Psi$ 是否属于希耳伯特空间的判据.

对函数 $A^2\Psi$ 我们得到类似结果. 更普遍地，从函数 $F(x)$ 出发，人们能用展式(5.14)定义算符 $F(A)$，它是算符 A 的一个函数. 它作用在 Ψ 上给出

$$F(A)\Psi = \sum_{p,r} F(a_p) c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)}.$$

若级数收敛，即对所有函数 Ψ 总使得数项级数

$$\sum_{p,r} |F(a_p)|^2 |c_p^{(r)}|^2$$

收敛，则算符是完全确定的. 在这种情况下——读者易证明——不管系 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ 如何，只要适合它的定义，这样定义的函数 $F(A)\Psi$ 是相同的.

特别是，对希耳伯特空间的所有函数，定义了算符

$$\exp(i\xi A),$$

ξ 是一给定参数. 确实

$$e^{i\xi A}\psi = \sum_{p,r} e^{i\xi a_p} c_p^{(r)} \varphi_p^{(r)} \tag{5.18}$$

及这个级数的收敛判据，即数项级数 $\sum_{p,r} |c_p^{(r)}|^2$ 收敛，总是可以满足的.

现在我们有能力建立量 $\mathscr{A}$ 对体系任何动力学状态的统计分布. 确实，分布的特征函数 $f(\xi)$[1] 的信息足以完全确定分布，按定义它是量 $\exp(i\xi A)$ 在这态里的平均值. 对 §3 的假设 (b) 作一非常自然的推广后，我们用表示式

$$f(\xi) = \frac{\langle \Psi, e^{i\xi A}\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle} \tag{5.19}$$

---

1) 准确到一个常数内，它是这个分布的傅里叶变换. 令 X 为能取区间 $(-\infty, +\infty)$ 中所有值的无规变数，并令 $P(x)$ 为在区间 $(x, x+dx)$ 中找到 X 的几率；它的统计分布的特征函数 $f(\xi)$ 是 $\exp(i\xi x)$ 的平均值，这就是说

$$f(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi x} P(x) dx.$$

若 X 只能取某些分立值 $x_1, \cdots, x_n, \cdots$ 且若 $\omega_1, \cdots, \omega_n, \cdots$ 分别是这些值的几率，

$$f(\xi) = \sum_n \omega_n e^{i\xi x_n}.$$

更普遍地，若 $F(x)$ 是 $X \leqslant x$ 的几率，引入斯蒂尔吉斯 (Stieltjes) 积分，我们有

$$f(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\xi x} dF(x).$$

定义这个平均值(它总是有意义的,即使 A 的平均值无定义).

令 Ψ 为表示所考虑的动力学态的波函数. 用展式(5.14),(5.18)以及标积的表示式(5.17)得到

$$f(\xi)=\sum_p \omega_p e^{i\xi a_p}.$$

其中

$$\omega_p=\frac{\sum_r |c_p^{(r)}|^2}{\langle\Psi,\Psi\rangle}=\frac{\sum_r |\langle\varphi_p^{(r)},\Psi\rangle|^2}{\langle\Psi,\Psi\rangle}.$$

由特征函数的考察,我们得出:

1. 量 $\mathscr{A}$ 的值只能取与它相联系的算符的本征值

$$a_1, a_2;\cdots, a_p,\cdots;$$

2. $\mathscr{A}$ 取这些值之一,比方取 a_p 的几率等于 ω_p.

易证 $\sum_p \omega_p=1$ (帕色伐关系),且只要它收敛,$\mathscr{A}$ 的平均值为

$$\langle A\rangle=\sum_p \omega_p a_p,$$

更普遍地,函数 $f(\mathscr{A})$ 的平均值为(如果它存在)

$$\langle f(A)\rangle=\sum_p \omega_p f(a_p).$$

特别是,为使 $\mathscr{A}$ 确定地取给定值,根据 § 4 的推论,充要条件为 Ψ 是相应于该本征值的本征函数.

人们能用另一方式来表示上述普遍结果,这更清楚地揭示出它不依赖于 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ 系的选取. 用

$$\Psi_p=\sum_r \varphi_p^{(r)}\langle\varphi_p^{(r)},\Psi\rangle$$

定义的函数 Ψ_p 确实与这种选取无关 (见习题 5.4). 展式(5.14)也可写成

$$\Psi=\sum_p \Psi_p. \tag{5.20}$$

换一种不同的说法，人们能用唯一的方式将Ψ纳入A本征函数之和的形式，它们中的每一个都对应不同本征值. 找出特殊值a_p的几率ω_p等于Ψ_p模方与Ψ模方之比:

$$\omega_p = \frac{\langle \Psi_p, \Psi_p \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \tag{5.21}$$

III. 一般情况下测量的统计

8. 连续谱的困难　狄拉克 δ 函数的引入

若系 $\{\varphi_p^{(r)}\}$ 不完备，我们已经得到的所有结论全都失效. 这种情况并不是没有的. 然而，§ 4 的讨论暗示可能推广前面的理论，使得人们仍从方程 (5.9) 出发，但加于本征解上的条件不再规定它属于希耳伯特空间. 这些更普遍的本征解可以有无限的模方. 我们的第一步是推广在整个理论中如此重要的正交归一概念.

为确定起见，考虑和一维体系有关的两个例子，即位置和动量的统计分布. 在这种情况下，统计分布已知，上节结果的形式推广是简单的. 位置坐标 q 可在区间 $(-\infty, +\infty)$ 中取所有可能值，在区间 $(q', q'+dq')$ 中找到 q 的几率等于

$$P(q')dq' = |\psi(q')|^2 dq', \tag{5.22}$$

其中 $\psi(q)$ 是表示体系动力学状态的波函数——假定归一. 同样，以算符 $(\hbar/i)d/dq$ 表示的动量可以取区间$(-\infty, +\infty)$中的所有可能值，而在区间 $(p', p'+dp')$ 中找到 p 的几率等于

$$\Pi(p')dp' = |\varphi(p')|^2 dp' \tag{5.23}$$

其中 $\varphi(p)$ 是波函数 $\psi(q)$ 的傅里叶变换，已适当地归一.

在两种情况下，所考虑的量的可能值构成连续谱. 这和前面的情况存在原则不同，前面情况的特征是分立谱以及任

何波函数 ψ 都可以表示为一个级数，级数中的每一项都和谱中的一个可能值相联系［见(5.14)式或(5.20)式］。对连续谱情况的自然推广是不再以级数而是以积分表示 ψ。

让我们简单地回忆一下整个分立谱理论。

厄密算符 A 具有一分立本征值集合，为简单起见设它无简并。它们中的每一个 a_n 对应一本征函数 φ_n（决定到一个位相内），且我们有

$$A\varphi_n = a_n\varphi_n, \tag{5.24}$$

$$\langle \varphi_n, \varphi_{n'} \rangle = \delta_{nn'}, \tag{5.25}$$

正交归一系 $\{\varphi_n\}$ 是完备的，任何假定已归一的函数能用级数

$$\psi = \sum_n c_n\varphi_n \tag{5.26}$$

表示，从正交归一关系式(5.25)，我们有

$$\langle \varphi_n, \psi \rangle = \sum_{n'} c_{n'}\langle \varphi_n, \varphi_{n'} \rangle = c_n, \tag{5.27}$$

用同一关系，我们得到特征函数的表示式

$$\begin{aligned}\langle \psi, e^{i\xi A}\psi \rangle &= \sum_{n,n'} c_n^* c_{n'} e^{i\xi a_{n'}}\langle \varphi_n, \varphi_{n'} \rangle \\ &= \sum_n |c_n|^2 e^{i\xi a_n},\end{aligned} \tag{5.28}$$

从这里我们导出：A 取 a_n 值的几率等于展式(5.26)中 φ_n 系数的模方 $|c_n|^2$。

类似地，让我们记算符 $p = (\hbar/i)d/dq$ 与本征值 p' 相联系的本征解为 $u(p'; q)$，

$$pu(p'; q) \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dq}u(p'; q) = p'u(p'; q). \tag{5.24'}$$

继续进行形式上的发展，我们把波函数 $\psi(q)$ 表示为积分形式

$$\psi(q)=\int_{-\infty}^{+\infty}c(p')u(p';q)dp'.$$

如果形式上的类比能进行到最后，$|c(p')|^2dp'$ 就是在区间 $(p', p'+dp')$ 中找到 p 的几率. 因而必有

$$|c(p')|^2=|\varphi(p')|^2,$$

换句话说，准到一个相因子，$c(p')$ 等于 $\varphi(p')$. 由于本征解 $u(p';q)$ 本身决定到一个常数，人们总可以用这种方式选择常数，使得和(5.26)式类似的式子可写为

$$\psi(q)=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')u(p';q)dp'. \qquad (5.26')$$

推广(5.27)式后，对应于每个本征值 p' 的系数 $\varphi(p')$ 必然等于

$$\varphi(p')=\langle u(p';q),\psi(q)\rangle. \qquad (5.27')$$

把标积中的 $\psi(q)$ 用它的积分表示(5.26′)代入，得

$$\varphi(p')=\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')\langle u_{p'},u_{p''}\rangle dp''. \qquad (5.29)$$

在这表示式中我们已经用了缩写记号 $u_{p'}$ 代表对应于本征值 p' 的本征解. 对任何动量空间中的波函数 $\varphi(p')$（加在 φ 上的唯一条件是平方可积），标积 $\langle u_{p'},u_{p''}\rangle$ 的这个性质必须保持；因此这个性质推广了正交归一关系(5.25).

事实上，没有一种 p' 和 p'' 的函数具有所希望的这种性质. 但无论如何，如果人们不过于为数学严格性[1]费脑筋，遵照狄拉克的办法，人们可用“奇异函数” $\delta(x)$. 它由性质

$$\int_a^b f(x)\delta(x-x_0)dx=\begin{cases}f(x_0) & \text{当 } x_0 \text{ 在区间 } (a,b) \text{ 内}\\ 0 & \text{当 } x_0 \text{ 在区间 } (a,b) \text{ 外}\end{cases} \qquad (5.30)$$

1) 在写下(5.29)式时，我们已经放松了数学严格性. 唯一正确的方程是

$$\varphi(p')=\left\langle u_{p'},\int\varphi(p'')u_{p''}dp''\right\rangle$$

交换对 p' 和 p'' 的积分次序，得(5.29)式. 由于标积 $\langle u_{p'},u_{p''}\rangle$ 发散，这种操作当然是不合理的.

加于定义，$f(x)$ 是在点 $x = x_0$ 处连续的任意函数。

若

$$\langle u_{p'}, u_{p''} \rangle = \delta(p' - p''), \qquad (5.25')$$

则(5.29)式满足。这个关系式是正交归一关系 (5.25) 对连续谱的推广。

我们可把"狄拉克函数" $\delta(x)$ 想像为某个函数的极限，这个函数除了在点 $x = 0$ 周围的非常小的区间外，处处为零，而在这小区间里它有一很窄和很高的峰，使得它对整个区间的积分等于 1。在峰的宽度趋于零的极限下，有

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{当 } x \neq 0 \\ +\infty & \text{当 } x = 0 \end{cases} \text{ 和 } \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx = 1. \qquad (5.31)$$

$\delta(x)$ 当然不是寻常意义下的函数，因为除一点外处处为零的函数的积分，如果存在，也必为零。我们这里不来详细研究使用"狄拉克函数"的数学合理性。它要求引入一种新概念，即分布的概念，通常的函数（更严格说是局域可积函数）是它的特殊情况。数学家们不讲函数 $\delta(x - x_0)$ 而讲分布 $\delta_{x_0}[f]$，定义 $f(x)$ 的泛函等于 $f(x_0)$。换句话说，必须用定义

$$\delta_{x_0}[f] = f(x_0)$$

代替定义(5.30)。由于读者对分布的概念可能并不熟悉，我们将尽量少涉及它，并继续用(不正确的)记号 $\delta(x - x_0)$，它确实有一些无可争辩的形式上的优越性。它的主要计算法则列于附录 A 中，在那里我们还可找到分布理论的简单概要。

我们现在开始研究 p 的测量问题。方程(5.24′)的本征解 $u(p'; q)$ 是函数 $c\exp(ip'q/\hbar)$。若取 $c = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$，即

$$u(p'; q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'q/\hbar},$$

就满足广义的正交归一关系 (5.25′)。利用此式和 (A. 22) 式，有

$$\langle u_{p'}, u_{p''}\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p''-p')q/\hbar}dq = \delta(p'-p'').$$

此外，本征函数 $u_{p'}$ 构成一完备系，因为任何平方可积函数 $\psi(q)$ 总能归入如下形式(傅里叶积分性质)

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p')\frac{e^{ip'q/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}dp'.$$

这个"本征函数级数展开式"中的系数 $\varphi(p')$ 实际上等于标积 $\langle u_{p'}, \psi\rangle$. 确实

$$\begin{aligned}\langle u_{p'}, \psi\rangle &= \left\langle u_{p'}, \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')u_{p''}dp''\right\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')\langle u_{p'}, u_{p''}\rangle dp'' \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p'')\delta(p'-p'')dp'' = \varphi(p').\end{aligned}$$

在用广义的正交归一关系时，我们承认傅里叶积分的互易性.

我们进一步和分立谱情况作类比. 引入算符 $\exp(i\xi p)$，我们有

$$e^{\xi ip}u(p';q) = e^{i\xi p'}u(p';q),$$

从而

$$e^{i\xi p}\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')e^{i\xi p'}u(p';q)dp';$$

由此，特征函数为

$$\begin{aligned}f(\xi) = \langle\psi, e^{i\xi p}\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(p'')dp''\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\xi p'}\varphi(p')dp' \\ &\times\langle u_{p''}, u_{p'}\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi^*(p'')dp'' \\ &\times\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\xi p'}\varphi(p')dp'\times\delta(p'-p'') \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(p')|^2e^{i\xi p'}dp'.\end{aligned}$$

对应于它的统计分布(见本章 § 7 的脚注)正好是预期的分布

(5.23).

位置测量的研究可用同样的方案做出. 适当地归一了的,与算符 q 的本征值 q' 对应的本征解为 $\delta(q'-q)$. 确实,按方程 (A.19)

$$q\delta(q'-q)=q'\delta(q'-q),$$

函数 $\delta(q'-q)$ 的全体 (这里 q' 能取从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 中的所有可能值)构成一正交归一系,因为 [(A.21) 式]

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(q-q')\delta(q-q'')dq=\delta(q'-q'').$$

这个系又是完备的,因为任何波函数 $\psi(q)$ 都有积分表示

$$\psi(q)=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(q')\delta(q'-q)dq. \tag{5.32}$$

我们易证系数 $\psi(q')$ 等于标积 $\langle\delta(q'-q),\psi(q)\rangle$. 遵循对 p 的测量那样的叙述,根据(5.22)式,人们得出结论: 系数的模方 $|\psi(q')|^2$ 是 $q=q'$ 的几率密度.

9. 一般情况下本征函数的级数展式 闭合关系

让我们转向本征值问题

$$A\psi=a\psi. \tag{5.9}$$

我们不再要求本征解有一有限模方, 而只要求任何波函数(即任何有限模方的函数)的标积收敛.

更普遍地,本征值谱包括:

1. 一个分立部分,即本征值 a_n 的一有限的或无限可数的集合, a_n 用整数脚标 n 标记;

2. 一个连续部分,即本征值 $a(\nu)$ 的一个集合, $a(\nu)$ 可方便地定义为指标 ν 的单值、连续、单调函数的取值.

分立谱部分的本征函数有有限的模方. 所有分立谱的性质已在 §5 中研究过了, 这里不必重复.

令 $\psi(\nu;q_1,\cdots,q_R)$ 为对应于本征值 $a(\nu)$ 的连续谱

本征函数. 它是一个参数 ν 的连续函数，它的归一积分必然发散(它是一个函数空间中"无限长度的向量"). 然而，假定本征微分

$$(\Delta\nu)^{-1/2}\int_{\nu}^{\nu+\Delta\nu}\psi(\nu';\,q_1,\cdots,q_R)d\nu'$$

是一个模方为有限的函数，且当 $\Delta\nu$ 趋于零时趋于一常数值. 我们知道一维体系哈密顿量的连续谱本征函数具有这种性质(见第三章)；易证，对上节的算符 q 和 $(\hbar/i)d/dq$，这同样也是对的.

人们常说，一个函数是**可归一的**，当它的模方有限时. 对这个术语作十分自然的推广后，我们同样可把这个术语用到无限模方的函数，这些函数的本征微分有一有限模方. 因而在这种意义下，和分立谱一样，连续谱本征函数是可归一化的，虽则它们并不属于希耳伯特空间.

把性质(5.8)适当地(它只对平方可积函数 Φ 和 Ψ 有意义)用于本征微分而不用于本征函数，人们得到关于连续谱的基本性质，它是在第五章 § 5 中证明过的分立谱性质的对应性质：

1. 每个本征值 $a(\nu)$ 为实；

2. 对应于不同本征值的两本征函数正交. 精确地说，正交性是(3.42′)式的推广. 写成

$$\langle\psi_\nu,\,\psi_{\nu'}\rangle=0$$

是不正确的，因为标积 $\langle\psi_\nu,\,\psi_{\nu'}\rangle$ 一般发散. 但是当 ν 处在区间 $(\nu',\,\nu'+\Delta\nu')$ 外时，人们有

$$\left\langle\psi_\nu,\,(\Delta\nu')^{-\frac{1}{2}}\int_{\nu'}^{\nu'+\Delta\nu'}\psi_{\nu''}d\nu''\right\rangle=0,$$

这个性质的证明并不困难，留给读者.

若连续谱的本征值不简并，则我们总可以用下述方式把它们归一化

$$\langle \psi_\nu, \psi_{\nu'} \rangle = \delta(\nu - \nu').$$

对简并本征值的推广是直截了当的。我们将只引用结果。依赖于简并的性质，一给定的本征值对应或是有限个，或是无限个线性独立的本征函数(可数的或不可数的)。人们可以这样来标记这些函数：或是借助于取有限个值的指标，或是由一个或多个取无限个分立值的指标，再不然就由一个或多个连续变化的指标，或甚至由一些分立指标和一些连续指标。为确定起见，假定这个标记由一分立指标 r 和一连续指标 ρ 作出。

我们总可以用这样一种方式来安排，以使得本征函数 $\varphi^{(r)}(\nu, \rho)$ 在广义的术语下是正交的，这就是说，使得

$$\langle \varphi^{(r)}(\nu, \rho)\varphi^{(r')}(\nu', \rho') \rangle = \delta_{rr'}\delta(\rho - \rho')\delta(\nu - \nu') \quad (5.33)$$

和分立谱的正交归一本征函数 $\varphi_n^{(r)}$ 一起，这些函数构成厄密算符 A 的正交归一本征函数系；A 的任何本征函数都可写成这系中函数的线性组合。

让我们假定波函数 ψ 能展开为这些函数的级数，即

$$\Psi = \sum_{nr} c_n^{(r)}\varphi_n^{(r)} + \sum_r \int \gamma^{(r)}(\nu,\rho)\varphi^{(r)}(\nu,\rho)d\nu d\rho \quad (5.34)$$

展式中每个本征函数的系数可由这本征函数从左边乘方程的两边，然后取标积得出。计及正交归一关系，我们得到

$$c_n^{(r)} = \langle \varphi_n^{(r)}, \Psi \rangle, \quad (5.35a)$$

$$\gamma^{(r)}(\nu, \rho) = \langle \varphi^{(r)}(\nu, \rho), \Psi \rangle. \quad (5.35b)$$

从这些关系，我们得出广义帕色伐关系

$$\langle \Psi, \Psi \rangle = \sum_{n,r} |c_n^{(r)}|^2 + \sum_r \int |\gamma^{(r)}(\nu, \rho)|^2 d\nu d\rho. \quad (5.36)$$

如果每个波函数(即每个平方可积函数)都能展开为一个(5.34)型的级数，则按定义，系 $\{\varphi\}$ 是正交归一**完备**系.

有一种很简单的写下一个正交归一系是完备的方式：它

的实质在于对函数

$$\delta(q-q')\equiv\delta(q_1-q_1')\delta(q_2-q_2')\cdots\delta(q_R-q_R')$$

写出展式 (5.34). 展式中的系数由表示式 (5.35) 和(5.36)中将函数 $\Psi(q)\equiv\Psi(q_1, q_2, \cdots, q_R)$ 代以函数 $\delta(q-q')$ 得出. 这导至,闭合关系

$$\delta(q-q')=\sum_{n_r}\varphi_n^{*(r)}(q')\varphi_n^{(r)}(q)+\sum_r\int\varphi^{*(r)}(\nu,\rho;q')\varphi^{(r)}(\nu,\rho;q)d\nu d\rho \qquad (5.37)$$

和正交归一关系

$$\langle\varphi_n^{(r)},\varphi_{n'}^{(r')}\rangle=\delta_{nn'}\delta_{rr'}, \qquad (5.38a)$$

$$\langle\varphi_n^{(r)},\varphi^{(r')}(\nu,\rho)\rangle=0, \qquad (5.38b)$$

$$\langle\varphi^{(r)}(\nu,\rho),\varphi^{(r')}(\nu',\rho')\rangle=\delta_{rr'}\delta(\rho-\rho')\delta(\nu-\nu') \qquad (5.38c)$$

一起构成了系 $\{\varphi\}$ 是正交归一和完备的充分必要条件.

用系数的正确值(5.35),写出

$$\Psi(q)=\int\delta(q-q')\Psi(q')d\tau',$$

并用(5.37)式的右边代替 $\delta(q-q')$,就得出展式(5.34).

注意完备,正交归一系如果存在,必然不唯一. 事实上,正如谱是完全分立的情况一样,我们能够:

1) 任意改变每一个本征函数的位相;

2) 以无限多种不同的方式选择相应于同一简并本征值的正交归一函数系.

此外,

3) 在连续谱本征函数的归一化中有某种任意性. 事实上,我们总可以用指标 $\mu\equiv\mu(\nu)$ 来代替任意的连续指标 ν,其中 $\mu(\nu)$ 是 ν 的连续、可微、单值函数,其它方面则是任意的. 归一条件 (5.38c) 用一个带指标 μ 而不是 ν 的类似条件

代替；如果我们取一新本征函数

$$\varphi^{(r)}(\mu, \rho; q) = \left|\frac{d\mu}{d\nu}\right|^{-\frac{1}{2}} \varphi^{(r)}(\nu, \rho; q), \quad (5.39)$$

后者是可以满足的.

并非所有厄密算符都具有一个完备、正交归一本征函数系[1]. 然而，能表示物理量的厄密算符就有这样的系. 为此，我们给这种算符一个名字：观测算符. 要证明一个特殊的厄密算符是观测算符往往是个困难的数学问题. 实际上只对简单的情况，例如，位置坐标或动量坐标，一维量子体系的哈密顿量，角动量，等等作过证明. 下面我们总是认为所有与物理量相联系的算符都具有一完备正交归一本征函数系. 事实上，完备性和这些算符的物理解释的联系是这样密切，以致如果它不成立，整个理论就必须作根本修改.

10. 一般情况下测量结果的统计分布

我们设 A 为一观测算符. 由于对任何平方可积的 Ψ 存在展式(5.34)，除了级数可能发散外，总可以定义形式为 $F(A)$ 的算符对任何这种函数的作用.

为简单起见，假定 A 的谱无简并. 于是

$$\Psi = \sum_n c_n\varphi_n + \int \gamma(\nu)\varphi(\nu)d\nu, \quad (5.40)$$

我们可以证明，右边展式收敛的充分必要条件是级数

---

1) 让我们考虑作用在平方可积函数 $\psi(x)$ 上的算符 $i\frac{d}{dx}$，$\psi(x)$ 定义在半轴 $(0, +\infty)$ 上. 如果把它限制为 $x = 0$ 时它也为零的函数，这个算符就是厄密的. 确实，在这些条件下有

$$\int_0^\infty \psi_1^*\left(i\frac{d}{dx}\psi_2\right)dx - \int_0^\infty\left(i\frac{d}{dx}\psi_1\right)^*\psi_2 dx = i\psi_1^*\psi_2\Big|_0^\infty = 0.$$

但是，它完全没有本征解. 唯一可能的本征解实际上是 $\exp(-ikx)$ 形式(本征值 k)，它在 $x = 0$ 处不为零.

$$\sum_n |c_n|^2$$

和积分 $\int |\gamma(\nu)|^2 d\nu$ 收敛。

在绝大多数情况下

$$F(A)\Psi = \sum_n c_n F(a_n)\varphi_n + \int \gamma(\nu)F(a_\nu)\varphi(\nu)d\nu,$$

而且若

$$\sum |c_n|^2 |F(a_n)|^2 \quad 及 \quad \int |\gamma(\nu)|^2 |F(a_\nu)|^2 d\nu$$

收敛，这个定义就有意义。特别是，由于表示式

$$e^{i\xi A}\Psi = \sum_n c_n e^{i\xi a_n}\varphi_n + \int \gamma(\nu)e^{i\xi a_\nu}\varphi(\nu)d\nu \qquad (5.41)$$

总归收敛，算符 $\exp(i\xi A)$ 的作用总有确切定义。

为了得到 A 分布的特征函数，我们可以用展式 (5.40)、(5.41)和正交归一关系式得到的关系式

$$\langle \Psi, e^{i\xi A}\Psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 e^{i\xi a_n} + \int |\gamma(\nu)|^2 e^{i\xi a_\nu}d\nu.$$

特征函数 $f(\xi)$ 可纳入形式

$$f(\xi) = \frac{\langle \Psi, e^{i\xi A}\Psi \rangle}{\langle \Psi, \Psi \rangle}$$

$$= \sum_n \omega_n e^{i\xi a_n} + \int \tilde{\omega}(\nu)e^{i\xi a_\nu}d\nu,$$

其中记号

$$\omega_n = \frac{|c_n|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}, \quad \tilde{\omega}(\nu) = \frac{|\gamma(\nu)|^2}{\langle \Psi, \Psi \rangle}. \qquad (5.42)$$

考察这一特征函数(见本章§7的脚注)导致下述结论：

1) **量 $\mathscr{A}$ 所取的值只能是与它相联系的算符的本征值；**

2) **$\mathscr{A}$ 取分立谱中的一个值 a_n 的几率等于 ω_n；**

3) **$\mathscr{A}$ 取连续谱中在区间 $[a(\nu), a(\nu + d\nu)]$ 内某一**

值的几率等于 $\tilde{\omega}(\nu)d\nu$.

所有这些几率之和 $\sum\omega_n+\int\tilde{\omega}(\nu)d\nu$ 确实等于 1（帕色伐关系）。我们也能验证 A 的平均值如果存在，就确实等于 $\langle\Psi, A\Psi\rangle/\langle\Psi,\Psi\rangle$，与我们作为出发点的基本假设一致。

若谱简并，我们也得到同样的结果，但量 ω_n 和 $\tilde{\omega}(\nu)$ 要经过适当修正。为确定起见，让我们假定用展式 (5.34) 代替展式(5.40)，ω_n 和 $\tilde{\omega}(\nu)$ 的新定义是

$$\omega_n=\frac{\sum_r|c_n^{(r)}|^2}{\langle\Psi,\Psi\rangle},\tag{5.43}$$

$$\tilde{\omega}(\nu)=\frac{\sum_r\int d\rho|\gamma^{(r)}(\nu,\rho)|^2}{\langle\Psi,\Psi\rangle}.\tag{5.44}$$

如所得出的，要求的几率规律明显地涉及 A 的一个特殊的本征函数系。在系的选取上有高度任意性。然而，很清楚，几率规律，正如它的特征函数那样，必然与这种选择无关。这个性质易从表示式(5.43)和(5.44)直接证实（习题 5.5）。

11. 处理连续谱的其它方式

上述处理的主要优点是它形式上极为简单。这个优点在很大程度上和用 δ 函数时缺乏数学严格性的缺点抵消了。实际上，所有用 δ 函数实现的运算都能严格地借助分布理论进行（见附录 A）。

然而，借助更经典的数学手续，也有可能克服连续谱的困难。与其把这整个分析建立在本征值问题上并用不属于希耳伯特空间的本征解，毋宁遵循冯·诺埃曼创造的方法，严格地不离开希耳伯特空间处理问题。这种方法的实质是在希耳伯特空间中找数学家所说的一元分解，并证明波动力学中每一

个观测算符，总有一个特殊的一元分解和它相联系. 这种处理和上面给出的处理严格等价. 我们这里提到它，只是为了更完全些[1].

另一种处理和连续谱相联系的问题的方式是，把本征值问题(5.9)用另一个有完全分立的本征值序列的问题来代替，且把其中的初值问题考虑为条件作适当修改后的极限情况. 虽然不能宣称这样一种手续是严格的，但它有极容易掌握，直观的优点. 我们将用这种方法处理算符 q 和 $(\hbar/i)d/dq$. 应该把这个处理和 § 8 的作比较.

处理位置测量问题，我们把区间 $(-\infty, +\infty)$ 分为相等的、长度为 η 的小段，并以近似波函数 $\psi^{\times}(q)$ 代替波函数 $\psi(q)$，$\psi^{\times}(q)$ 在每小段中为常数，且由条件

$$\psi^{\times}(q) = \psi(n_q\eta)$$

定义，这里 n_q 是包含在 q/η 中的最大整数，换言之：

$$q - \eta < n_q\eta \leqslant q.$$

类似地，我们用算符

$$q^{\times} = n_q\eta \text{ 倍数}$$

代替算符 q. 在 $\eta \to 0$ 极限下，$q^{\times} \to q$ 和 $\psi^{\times}(q) \to \psi(q)$.

$\psi^{\times}$ 函数系构成一希耳伯特空间，其中算符 $q^{\times}$ 有完全确定的定义且具有一分立本征值谱

$$n\eta \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots, \pm\infty).$$

每个本征值 $n\eta$ 联系一个归一的本征函数 u_n

$$u_n = \begin{cases} \eta^{-1/2} & \text{当 } n\eta \leqslant q < (n+1)\eta \\ 0 & \text{相反情况,} \end{cases}$$

本征函数 u_n 满足正交归一关系

$$\langle u_n, u_{n'} \rangle = \delta_{nn'}.$$

---

1) 对量子理论的数学方面有兴趣的读者，可在 J. von. Neumann 上述引文中(见本章 § 2 末的脚注)找到完全的表述.

此外，它们构成一个完备系，因为任何函数都能表示为一个 u_n 的级数展式：

$$\psi^{\times} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \eta^{1/2}\psi(n\eta)u_n, \qquad (5.45)$$

这样，注意到 $q^{\times} = n\eta$ 的几率等于 $\eta|\psi(n\eta)|^2$，我们就能应用 §5 和 §6 的理论。

在 $\eta \to 0$ 极限下，相邻本征值间的间距变为零；谱变为连续。对应于给定非零 $q' = n\eta$ 的值，n 变为无限大；但是，找到这个位置精确值的几率正比于 η，因而趋于零。事实上，这个几率是没有意思的，因为位置谱连续。人们实际上找的是在区间 $(q', q' + \delta q')$ 中找到粒子的几率 $P(q')\delta q'$，即

$$P(q')\delta q' = \sum^{(q',q'+\delta q')} \eta|\psi(n\eta)|^2,$$

求和遍及使得 $n\eta$ 包含在区间 $(q', q' + \delta q')$ 内的所有 n。当 $\delta q'$ 保持不变但足够小时，求和中的项，总数为 $\delta q'/\eta$，实际上全都等于 $\eta|\psi(q')|^2$。因而，在 $\eta \to 0$ 的极限下

$$P(q')\delta q' = |\psi(q')|^2\delta q'.$$

注意到展式(5.45)亦能写成

$$\psi^{\times} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \psi(n\eta)\frac{u_n}{\sqrt{\eta}}\eta = \sum_{q'} \psi(q')v_\eta(q')\eta,$$

其中 $\sum_{q'}$ 表示对值 $q' = n\eta$ 的分立序列的求和，而

$$v_n(q') = \eta^{-\frac{1}{2}}u_n = \begin{cases} \eta^{-1} & \text{若 } q - \eta < q' \leqslant q \\ 0 & \text{其它.} \end{cases}$$

当 $\eta \to 0$ 时，级数趋于 $\psi(q')$ 和函数 $v_\eta(q')$ 极限的乘积的积分；这个极限精确地就是 $\delta(q' - q)$。人们又看到了展式(5.32)。

通过把 q 的变化区间限制在 $(-L/2, +L/2)$ 范围内，

其中 L 是一个最后让它趋于无穷大的量，动量测量也可以用类似的方式处理。为使算符 $p=(\hbar/i)d/dq$ 在有限空间中厄密，我们必须在区间的边界上对函数 $\psi(q)$ 加上适当的条件。对任何函数 $\varphi(q)$ 和 $\psi(q)$，厄密条件是

$$\int_{-L/2}^{+L/2}\varphi^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d\psi}{dq}\right)dq-\int_{-L/2}^{+L/2}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d\varphi}{dq}\right)^*\psi dq$$

$$=\frac{\hbar}{i}\varphi^*\psi\Big|_{-L/2}^{+L/2}=0$$

或

$$\frac{\psi(L/2)}{\psi(-L/2)}=\frac{\varphi^*(-L/2)}{\varphi^*(L/2)}=\text{常数，与}\psi\text{和}\varphi\text{无关。}$$

也就是说，对任何函数 $\psi(q)$，必须：

$$\psi(L/2)=e^{i\alpha}\psi(-L/2),$$

其中 $\exp(i\alpha)$ 是一个只能一次选定的相因子。我们取它为 1，于是得**周期条件**

$$\psi(L/2)=\psi(-L/2).$$

算符 $(\hbar/i)d/dq$ 的本征值问题是容易求解的。本征值谱是分立的：

$$p_n=\frac{2\pi\hbar}{L}n\quad(n=0,\pm1,\pm2,\cdots,\pm\infty),$$

本征值 p_n 对应一个归一的本征函数

$$u_n=L^{-1/2}\cdot e^{ip_nq/\hbar},$$

函数 u_n 间彼此相互正交；此外，它们构成一完备系，因为按傅里叶级数理论，任何在区间 $(-L/2,+L/2)$ 的平方可积函数都能表示为级数

$$\psi(q)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}c_nu_n,\tag{5.46}$$

其中

$$c_n = \langle u_n, \psi(q)\rangle = L^{-1/2}\int_{-L/2}^{L/2} e^{-ip_n q/\hbar}\psi(q)dq.$$

用 § 5 和 § 6 的理论可得到 $p = p_n$ 的几率等于 $|c_n|^2$.

在 $L \to \infty$ 极限下，相邻本征值间的间距

$$\varepsilon = \frac{2\pi\hbar}{L}$$

变为零，动量谱 $p_n = n\varepsilon$ 变为连续. 极限过程的研究和对 q 所作的完全类似. 当 $\varepsilon \to 0$ 时，$p' = n\varepsilon$ 保持不变，$\varepsilon^{-1/2}c_n$ 趋向傅里叶变换

$$\varphi(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ip'q/\hbar}\psi(q)dq.$$

用这个极限过程，我们留给读者去找动量测量的几率分布，并表明用傅里叶级数 (5.46)表示的 $\psi(q)$ 如何趋于傅里叶积分

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(p')u(p'; q)dp',$$

其中 $u(p'; q)$ 是 $\varepsilon^{-1/2}u_n$ 的极限，这就是说

$$u(p'; q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip'q/\hbar}.$$

12. 注释和例子

总结一下，我们已经表明如何从波函数的知识导出动力学变量测量结果的统计分布. 特别满意的是这个结果能用十分普遍的形式叙述. 每一个动力学变量都和一个具有正交归一完备系的厄密算符相联系. 从一个非常自然而且形式上又非常简单的关于平均值的假设出发，我们曾证实唯一可能的测量结果是观测算符 A 的本征值，而预期的几率规律是直接和波函数按 A 的本征函数的级数展式中展开系数的模方联系着的.

除位置坐标和动量坐标外，最常被考虑的动力学变量有：薛定谔哈密顿量表示的能量和角动量。

能谱视所考虑的情况，既可能是完全分立的（见第三章§5），或完全连续的（见第三章§3），也可能是二者混合起来的（见第三章§6）。哈密顿量H的本征值问题在量子力学中的重要性不仅在于它和能量的决定相联系着，而且因为它在薛定谔方程的解中所起的作用。当H与时间无关时，是能量概念有真正意义的唯一情况，时间t的波函数$\Psi(t)$可由初始时间t_0的波函数$\Psi(t_0)$经过运算

$$\Psi(t) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}\Psi(t_0)$$

推出。将$\Psi(t_0)$展开为H本征函数的一个级数[这是方程(5.41)的一个特殊情况]，我们知道怎么计算方程的右边；使用这个展式后，容易证明

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = -\frac{i}{\hbar}He^{-iH(t-t_0)/\hbar}\Psi(t_0)$$

$$= -\frac{i}{\hbar}H\Psi(t),$$

从而$\Psi(t)$满足薛定谔方程，此外，也确实满足$t = t_0$时的初始条件。

为简单起见，假定H的谱完全分立且无简并；记H的本征值为$E_n(n = 1, 2, \cdots)$以及相应的本征函数为ψ_n。$\Psi(t_0)$的展式可写成

$$\Psi(t_0) = \sum_n c_n\psi_n, \quad c_n = \langle\psi_n, \Psi(t_0)\rangle.$$

函数$\Psi(t)$由

$$\Psi(t) = \sum_n c_n e^{-iE(t-t_0)/\hbar}\psi_n \tag{5.47}$$

给出。注意在这展式中，ψ_n系数的绝对值与t无关。因此有一个有趣的性质：体系能量的统计分布(它的哈密顿量和时

间无关)与时间无关.

在经典力学中粒子的**角动量**是 $\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$. 在量子理论，和它相应的是矢量算符

$$\boldsymbol{l}\equiv\frac{\hbar}{i}(\boldsymbol{r}\times\nabla). \tag{5.48}$$

让我们来明显地写出它的一个分量

$$l_z=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right),$$

取 Oz 为极轴并记粒子的极坐标为 (r,θ,φ)，我们容易验证 $\partial/\partial\varphi=x\partial/\partial y-y\partial/\partial x$，因而有

$$l_z=\frac{\hbar}{i}\partial/\partial\varphi. \tag{5.49}$$

若将本征函数在极坐标中表示出来，l_z 的本征值问题表现得特别简单

$$l_z\psi(r,\theta,\varphi)\equiv\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\psi(r,\theta,\varphi)=l'_z\psi(r,\theta,\varphi),$$

我们有

$$\psi(r,\theta,\varphi)=F(r,\theta)e^{il'_z\varphi/\hbar},$$

其中 $F(r,\theta)$ 是 r 和 θ 的任意函数. 由于本征函数是一个 $\boldsymbol{r}$ 的单值函数，当 φ 变为 $\varphi+2\pi$ 时，$\psi(r,\theta,\varphi)$ 必取同样数值，故

$$l'_z=m\hbar\quad(m:\text{整数}). \tag{5.50}$$

从而，粒子角动量任意分量的本征值谱是一个完全分立谱. 这个结果很容易被推广到多粒子体系总角动量的分量，它和空间量子化的实验事实是完全符合的.

IV. 波函数的确定

13. 测量过程和波包的"过滤" 理想测量

前面几节定义的统计分布是直接经得起实验检验的. 和

一给定的动力学变量 $\mathscr{A}$ 相联系的分布是这样的测量结果的分布，这种测量是对彼此独立的，且在测量时刻处在同一动力学态的 N 个大量数目的全同体系作 A 的测量。在该时刻[1]各体系由同一波函数 Ψ 表示（准到一个常数），Ψ 对应一个完全确定的理论分布。后者可和实验观测到的分布相比较。

为使理论的物理解释完全，人们还必须进一步规定：

〈i〉上面说的对一个体系所作的观测是如何能使我们了解它的动力学态的，特别是，人们怎么能相信上面所考虑的 N 个体系确实全都处在以 Ψ 表示的动力学态内；

〈ii〉一旦测量完成后，这些体系中的每一个将变成什么样子。

这两个问题是密切联系着的，我们将首先论述第二个问题。

与测量过程中发生的情况相反[2]，一俟测量完成后，体系又可以作为和测量仪器完全分开来的实体考虑。又可能用只涉及它本身动力学变量的波函数来描写它。除非测量前的波函数或许是和待测量相联系的观测算符 A 的本征函数，否则测量后体系的波函数当然和测量前的波函数肯定不相同。我们把这种测量过程中波函数的（非因果）变化称为波包的过滤。

我们知道这种非因果变化是由于体系与测量装置相互作用，而在运动过程中以不可控制的微扰表现出来；粗糙点说，它的效果是，若使测量越精确，则和待测量变量并协的变量就越不完全确定。不要把这种不可控制的微扰和任何体系在测

1) 这里所说的时刻是测量开始的时刻。事实上，一俟测量开始后，体系和测量仪器相互作用，只用它的波函数对它的演化作任何描述都变成不可能了。

2) 本书不作测量机制的详尽研究。这个课题，见本章 § 19 前一脚注中开列的文献。

量过程中所作的修正——原则上能准确计算——相混淆. 特别是,被测量变量在测量过程中被修正的情况会常常出现. 第四章中两个动量的测量就是这种情况的例子. 被测量量的修正显然依赖于所用的测量仪器的类型. 在第四章 § 14 考虑的用康普顿碰撞作动量测量中,光子的频率 ν 越低,差 $p'-p$ 就越小;若选 ν 为无限小,则这差为零. 很清楚,关于体系动力学状态在测量操作过程中的修正不能作一般说明,因为在每种情况下修正依赖于实现测量的具体条件. 然而,人们可以想象理想的测量条件. 在其中,我们刚刚指出的所有可以准确计算的修正,都直接地互相抵消,只有量子现象中的特殊的不可控制的微扰出现. 我们将假定这种理想测量确实能实现,或者,最低限度,它们是真正能实现的测量的极限情况(例如:在测量持续期间为零的极限下,在第四章中讨论的位置测量;在 $\nu=0$ 极限下用康普顿碰撞所作的动量测量).

考虑量 $\mathscr{A}$ 的一个理想测量. 假定在开始时找到的值 a_i 是一非简并本征值. 根据我们的假说,一旦测量完成后,我们确切地知道 $\mathscr{A}=a_i$,因而体系的波函数是对应于本征值 a_i 的本征函数 ψ_i(准到一个常数). 这个任意常数没有物理含义,因为以后的任何测量结果的统计分布都与这个常数的选择无关. 因而测量后体系的波函数被毫不含糊地知道了. 在某种意义下,测量仪器的工作就像是一个"理想滤波器"一样. 测量前的波函数是函数 $\Psi=\sum_n c_n\psi_n$. 测量结果为 a_i 的几率是 $|c_i|^2$. 假定测量给出 a_i,测量过程的净效果是"过渡"到(不失真地)Ψ 按 A 的本征函数的级数展式中唯一的一项 $c_i\psi_i$.

在观测算符 A 的本征值(特别是 a_i)是简并的更普遍情况下,测量前的波函数(假定归一)可纳入形式[见(5.20)式]

$$\Psi = \sum_p \Psi_p \quad \Psi_p = \sum_r c_p^{(r)} \phi_p^{(r)} \tag{5.51}$$

得到的结果为 a_i 的几率是

$$\langle \Psi_i, \Psi_i \rangle = \sum_r |c_p^{(r)}|^2.$$

在理想测量的情况下，测量后的波函数是对应于本征值 a_i 的 A 的本征函数： 它是函数 $\phi_i^{(r)}$（r 是变量）的一个线性组合. 然而，这个信息不足以完全规定它；简并度越高，就越不够. 理想测量是这样的一种测量，其中测量装置的作用就像一个“理想滤波器”，并且不失真地“过渡”到 Ψ 展式 (5.51) 中属于本征值 a_i 的部分，即函数

$$\Psi_i = \sum_r c_i^{(r)} \phi_i^{(r)},$$

而排斥其它所有剩下的部分. 当测量是非理想时，这些项的“过渡”伴随有某种失真. 这种失真原则上可以准确计算并且依赖于所用的测量装置.

在本章的所有其余部分，将假定所有要考虑的测量是理想测量. 因此大大地简化了所有讨论. 事实上，对于论证说来，这种限制并不是本质的，人们可以放宽限制而不会在理论的物理解释中带来根本的变化.

14. 对易的观测算符和相容变量

考虑两个观测算符 A 和 B. 为简单起见，假定本征值谱完全分立，虽则下面所讲的性质是十分普遍的. 我们假定它们有一个共同本征函数 Ψ_0

$$A\Psi_0 = a\Psi_0, \quad B\Psi_0 = b\Psi_0.$$

这两个方程的物理意义如下：如果在给定时间 t 物理体系处在态 Ψ_0，量 $\mathscr{A}$ 和 B 的精确测量将分别给出确定的结果 a 和 b. 同时满足这两个方程的必要条件是

$$(AB - BA)\Psi_0 = [A, B]\Psi_0 = 0. \tag{5.52}$$

这就是说，Ψ_0 是 A 和 B 的对易子的本征函数，对应的本征值为 0.

这个条件永远不成立的一个例子是观测算符 x 和 p_x，因为它们的对易子是个非零常数. 更精确地[见(2.10)式]

$$[x, p_x] = \frac{\hbar}{i}\left[x, \frac{\partial}{\partial x}\right] = i\hbar \neq 0, \tag{5.53}$$

这两个量永远不能同时无限精确地决定，这确实是众所周知的.

另一方面，当观测算符 A 和 B 对易时，方程(5.52)自动满足. 在这种情况下，我们有重要定理:

若两个观测算符对易，它们有一个完备正交归一的共同本征函数系，反之亦然.

物理上，这意味着表示这两个观测算符的动力学变量可以同时以精确的方式决定: 它们是**相容变量**. 特别是，可能同时实现一个对变量 $\mathscr{A}$ 和 $\mathscr{B}$ 的理想测量，在此情况下，测量后的波函数是 A 和 B 的共同本征函数.

正定理的证明如下. 设观测算符 A 和 B 对易:

$$[A, B] = 0.$$

令 ψ_a 为 A 的本征函数，a 为其本征值. ψ_a 能按 B 的正交归一完备本征函数系展开. 它可写成

$$\psi_a = \sum_m \varphi(a; b_m)$$

的形式，其中 $\varphi(a; b_m)$ 是对应于本征值 b_m 的 B 的本征函数. 我们总可以按这样的方式重新排列: 使得在求和号中出现的每个函数对应一不同的本征值[见(5.20)式]. 让我们来证明

$$\hat{\varphi}_m \equiv (A - a)\varphi(a; b_m) = 0.$$

因为 A 和 B 对易，我们有

$$B\hat{\varphi}_m = (A-a)B\varphi(a;\ b_m)$$
$$= (A-a)b_m\varphi(a;\ b_m) = b_m\hat{\varphi}_m,$$

因此函数 $\hat{\varphi}_m$ 是 B 的本征函数；由于对应的本征值全都不同，这些函数是线性无关的．从而有

$$\sum_m \hat{\varphi}_m = (A-a)\psi_a = 0.$$

这只在函数 φ_m 中的每一个都为零时才是可能的．换句话说，函数 $\varphi(a;\ b_m)$ 同时是 A 和 B 的本征函数．

现在考虑 A 的一个正交归一完备本征函数系 $\{\psi_n^{(r)}\}$：

$$A\psi_n^{(r)} = a_n\psi_n^{(r)}.$$

根据上述论证，这些函数可纳入形式

$$\psi_n^{(r)} = \sum_m \varphi^{(r)}(a_n;\ b_m). \qquad (5.54)$$

函数 $\varphi^{(r)}(a_n;\ b_m)$ 是 A 和 B 的共同本征函数．对应于同一对本征值 a_n，b_m 的函数 $\varphi^{(r)}(a_n;\ b_m)$ 的全体可以不是线性无关的．但总可以选择一正交归一函数系 $\chi^{(s)}(a_n;\ b_m)$（例如，用施密特的正交归一过程），它们对应于同一对本征值，使得函数 $\varphi^{(r)}(a_n;\ b_m)$ 是这些函数的线性组合

$$\varphi^{(r)}(a_n;\ b_m) = \sum_s c_{rs}\chi^{(s)}(a_n;\ b_m). \qquad (5.55)$$

所有这些函数的全体 $\{\chi\}$ 构成 A 和 B 的一个正交归一共同本征函数系．再者，它是个完备系，因为任何波函数 Ψ 能展开为 χ 的一个级数；为了构成这个展式，只要把 Ψ 展开为完备系 $\{\psi_n^{(r)}\}$ 函数的级数，然后再在这个展式中代入函数 $\psi_n^{(r)}$，借助于(5.54)和(5.55)式，得出它们作为 $\chi^{(s)}(a_n;\ b_m)$ 函数的表示式，就够了．证毕．

逆定理，若 A 和 B 有一个共同本征函数 $\chi^{(s)}(a_n;\ b_m)$ 的正交归一完备系，则我们有

$$AB\chi^{(s)}(a_n;\ b_m) = a_n b_m \chi^{(s)}(a_n;\ b_m) = BA\chi^{(s)}(a_n;\ b_m),$$

故

$$[A,\ B]\chi^{(s)}(a_n;\ b_m) = 0.$$

对易子 $[A,\ B]$ 作用在系 $\{\chi\}$ 中所有函数上均得零. 由于按假说所有波函数 Ψ 都能表成 χ 的一个级数,因而对任何 Ψ,有 $[A,\ B]\Psi = 0$. 从而

$$[A,\ B] = 0.$$

用对易观测算符 A, B, 我们能建立新的形式为 $f(A,\ B)$ 的观测算符, $f(x,\ y)$ 是任意选择的实函数. 按定义, $f(A,\ B)$ 作用在 A 和 B 的共同本征函数 $\chi(a;\ b)$ 上得

$$f(A,\ B)\chi(a;\ b) = f(a,\ b)\chi(a;\ b).$$

它对任意波函数 Ψ 的作用,可通过把 Ψ 展开为 χ 的级数,并将算符 $f(A,\ B)$ 作用到展式中的每一项得出. 只要级数收敛,这手续是正确的,否则函数 $f(A,\ B)\Psi$ 不存在. 从它定义的方式显见, $f(A,\ B)$ 和 A, B 一道具有完备正交归一的共同本征函数系,即系 $\{\chi\}$, 从而 $f(A,\ B)$ 和 A, B 对易.

易把所有这些结果推广到两两对易的任意数目 R 的观测算符中去. 若 R 个观测算符两两对易,它们就具有(至少)一个正交归一完备的共同本征函数系,反之亦然. 此外,任何这些观测算符的(实)函数也是一个观测算符, 它和它们中的每一个对易,且具有同一本征函数系.

15. 对易观测算符的完备系

考虑一观测算符 A. 我们用它的本征函数可建立一正交归一完备本征函数系,我们将从此称它为 A 的**基**. 一般说来,这基不唯一. 在这组基的选择中,其任意性已部分在 §9 中讨论了. 按惯例,我们将认为两个基相等,如果它们的函数只在位相或(在连续谱情况下)模上有差别. 沿用这个惯例, 如果

它的本征值没有一个简并，则 A 的基唯一．另一方面，为具体计，假定本征值 a 二度简并，并令 ψ_1，ψ_2 为对应于该本征值的两个正交归一本征函数．容易验证，函数

$$\varphi_1 = \psi_1 \cos\alpha + \psi_2 \sin\alpha$$

$$\varphi_2 = -\psi_1 \sin\alpha + \psi_2 \cos\alpha$$

也有这个性质．因此，利用对儿（φ_1，φ_2）正如利用对儿（ψ_1，ψ_2）一样，也能同样好地构成 A 的基．现在，设 A 的基不唯一．令 B 是一个和 A 对易的观测算符．A 和 B 可以有共同的基，我们已在 §14 中证明它存在，而且是唯一的．我们称观测算符 A 和 B 构成了一个对易观测算符的完备系．

若 A 和 B 不能共有一组唯一的共同基，它们就还要和第三个观测算符 C 相联系，C 和 A，B 二者对易，余类推．

更普遍地，**若观测算符 A，B，$\cdots$，L 具有一组且只有一组共同基时**，则称**它们构成一对易观测算符完备系**．在那种情况下，任何和系中每个观测算符都对易的观测算符，必然地以这个系作为它的基．因此它的本征值是观测算符 A，B，$\cdots$，L 的本征值 a，b，$\cdots$，l 的完全确定的函数．换句话说，可以把这个观测算符考虑为系中观测算符的函数．

用对易观测算符完备系中的观测算符表示的各个动力学变量，总能同时且精确地决定；再者，它们构成**一相容变量的完备系**（第四章 §17）．如果人们同时实现这些变量取值的精确测量，人们就可以相信体系的波函数是观测算符 A，B，$\cdots$，L 对应于测量操作中找到的本征值 a，b，$\cdots$，l 的本征函数．由于存在但只有一个本征函数具有这种性质，这些测量的详尽信息完全决定了物理体系的波函数．我们称体系的动力学态完全由给出的量子数 a，b，$\cdots$，l 规定．事实上，这个函数只决定到一个常数．由于唯一的一个物理测量量，也就是说各种可能测量结果的统计分布，和这个常数的选

择无关，人们可以按他们的希望固定这个常数而不改变波函数的物理意义．若使波函数归一，常常这样做，则还留下一个没有物理意义的任意位相．

在物理学中，一个实验的时间顺序可以采用下述观点．在初始时间 t_0，人们对它作相容变量完备系的同时测量，以此来准备体系．因而在时间 t_0，它的动力学态是完全决定的．

一旦准备完成后，体系的波函数由薛定谔方程准确决定的方式随时间演变．在以后所有时刻，体系的动力学态是完全清楚的，至少在它不受测量装置干预扰动时是如此．最后，在稍后的一个时间 t，人们实现了一个给定的测量．由于我们知道在测量完成时刻的波函数 $\psi(t)$，因此人们能准确地预言测量结果的统计分布．对 N 个大量数目的全同体系重复这个实验，就得出能和理论分布比较的实验分布．

16. 纯态和混合

实际上，体系像上面所讲的完全的“准备”，是难以作到的．最常见的是，在准备过程中被测量的动力学变量不构成一完备系．结果，对体系动力学状态的了解是不完全的，必须借助于统计方法．人们涉及的是一个统计状态混合，而不是一个给定的动力学态；人们指定的是每个波函数都有适当统计权重的波函数统计混合，而不是指定体系的一个完全确定的波函数．如同存在经典统计力学一样，也存在一种量子统计力学．

当准备完全时，从而体系的动力学态准确已知时，我们称我们在论述一种纯态，反之则是一种统计混合，它表征不完全的准备．

在对混合作测量结果的预言中，统计以两种方式涉及我们的讨论：第一种是特殊的量子原因，它与测量操作中体系

受不可控制的微扰相联系；第二种是因为体系的动力学态不完全清楚。

假定在准备时间 t_0，体系能用分别带统计权重

$$p_1, \cdots, p_k, \cdots \left(\sum_k p_k = 1\right)$$

的一组波函数 $\Psi^{(1)}(t_0), \cdots, \Psi^{(k)}(t_0), \cdots$ 表示。令 $\Psi^{(1)}(t)$，$\cdots, \Psi^{(k)}(t), \cdots$ 分别为对应于初始条件

$$\Psi^{(1)}(t_0), \cdots, \Psi^{(k)}(t_0), \cdots$$

的薛定谔方程的解。在时间 t，体系由这些函数

$$\Psi^{(1)}(t), \cdots, \Psi^{(k)}(t), \cdots$$

表示，具有同样的统计权重 $p_1, \cdots, p_k, \cdots$。令 $\langle A\rangle_k$ 为体系处于动力学态 $\Psi^{(k)}(t)$ 时，对一给定量 $\mathscr{A}$ 作测量而得到的测量结果的平均值：

$$\langle A\rangle_k = \frac{\langle \Psi^{(k)}(t), A\Psi^{(k)}(t)\rangle}{\langle \Psi^{(k)}(t), \Psi^{(k)}(t)\rangle}.$$

在时间 t，对统计混合作 $\mathscr{A}$ 的测量，测量结果的平均值为

$$\langle A\rangle = \sum_k p_k \langle A\rangle_k.$$

类似地，若 $\omega_i^{(k)}$ 是当体系的动力学态由 $\Psi^{(k)}(t)$ 表示时，找到结果 a_i 的几率，则在时间 t 对混合态作同一测量时找到这个结果的几率是

$$\omega_i = \sum_k p_k \omega_i^{(k)}. \tag{5.56}$$

量子统计混合的一个非常重要的情况是和温度为 T 的热源处在热平衡中的体系。各种可能的动力学态是体系哈密顿量 H 的本征态。一给定本征态的统计权重只依赖于相应的 H 的本征值，它和玻耳兹曼因子 $\exp(-E/kT)$ 成正比，其中 E 是 H 的本征值，k 是玻耳兹曼常数。

V. 对易子代数和它的应用

17. 对易子代数和基本对易子的性质

当我们只论述对易的观测算符时，可以毫无限制地应用普通代数规则. 然而，一个给定的量子体系的观测算符并非全是对易的. 更精确地说，一个 R 维量子体系的观测算符是位置观测算符 $q_i(i=1,2,\cdots,R)$ 和动量观测算符

$$p_i(i=1,2,\cdots,R)^{1)}$$

的函数，它们中的所有各对都是不对易的. q 和 p 的对易子在理论中起根本作用. 我们有

$$[q_i,q_j]=0,\quad [p_i,p_j]=0, \tag{5.57}$$

$$[q_i,p_j]=i\hbar\delta_{ij}. \tag{5.58}$$

关系式 (5.57) 是显然的，特别第二个也只是说微商算符彼此对易. 关系式(5.58)是(5.53)式的推广，直接利用算符 p 的显式

$$p_i=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q_i},$$

马上就得到它.

从 p 和 q 互不对易的事实知道，要精确定义动力学变量 $\mathscr{A}=A(q_1,\cdots,q_R;p_1,\cdots p_R)$，就要求在函数

$$A(q_1,\cdots q_R;p_1,\cdots,p_R)$$

的显式中严格规定 q 和 p 的次序. 特别是把 A 写成 p 的多项式形式，或可能是 p 的幂级数形式，其系数是 q 的函数时. 每一项都是按某一次序排列的分量 p_i 和 q_i 的函数的乘积. 当把函数 A 作为一个算符考虑时，只在其中各项的次序都规定

---

1) 事实上，这只在量子体系有经典类比时才是正确的. 以后我们将引入附加变量，即自旋变量，它没有经典类比.

了以后，它才有完全确定的定义.

了解 q 和 p 与一给定函数 A 之间的对易子是有意义的事情. 对单独 q 的函数，或单独 p 的函数，我们得到关系式

$$[q_i, F(q_1, \cdots, q_R)] = 0, \tag{5.59}$$

$$[p_i, G(p_1, \cdots, p_R)] = 0, \tag{5.60}$$

$$[p_i, F(q_1, \cdots, q_R)] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial F}{\partial q_i}, \tag{5.61}$$

$$[q_i, G(p_1, \cdots, p_R)] = i\hbar\frac{\partial G}{\partial p_i}. \tag{5.62}$$

关系式(5.59)和(5.60)是 § 14 最后讲的性质的特殊情况. 要证实方程(5.61)，只要明显地写下算符 p_i，并证明方程两边作用在任意波函数上给出相同结果就够了(见(2.9)式). 方程(5.62)可由在动量空间中作类似的论证来证明；让我们回忆一下，若动量空间中对应于 $\Psi(q_1, \cdots, q_R)$ 的波函数为

$$\Phi(p_1, \cdots, p_R);$$

则对应于 $q_i\Psi(q_1, \cdots, q_R)$ 的动量空间的函数是

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p_i}\Phi(p_1, \cdots, p_R).$$

用对易子代数的规则我们也得到同样结果. 让我们在这里给出四个主要规则. 这些规则是对易子定义的直接结果. 它们的证明留给读者. 若以 A, B 和 C 记三个任意线性算符，就有

$$[A, B] = -[B, A], \tag{5.63}$$

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C], \tag{5.64}$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C], \tag{5.65}$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0. \tag{5.66}$$

重复利用规则(5.65)，有

$$[A, B^n] = \sum_{s=0}^{n-1} B^s [A, B] B^{n-s-1}.$$

特别是，对一维体系有

$$[q, p^n] = ni\hbar p^{n-1}.$$

于是，当 G^* 是 p 的任意次幂时，(5.62) 式就被证实；当 G 是多项式，或是 p 的收敛幂级数时，(5.62) 式也被证实 [规则 (5.64)]。

对一般的 q 和 p 的函数，我们亦可写出

$$[p_i, A] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial A}{\partial q_i}, \tag{5.67}$$

$$[q_i, A] = i\hbar \frac{\partial A}{\partial p_i}, \tag{5.68}$$

$\partial A/\partial q_i$，$\partial A/\partial p_i$ 由 A 的偏微商定义。按照它们的显式中已适当选定了 p 和 q 的次序来理解。

让我们用一个一维量子体系的例子来说明这一点。令 $f(q)$ 是 q 的函数。q 和函数 $p^2f(q)$，q 和 $pf(q)p$，q 和 $f(q)p^2$ 等三个对易子全都可以恒等于这些函数对 p 的微分（准到因子 $i\hbar$），但它们不是同样的算符。事实上，重复使用规则 (5.62)，

$$[q, p^2 f(q)] = 2i\hbar p f(q),$$
$$[q, pfp] = i\hbar(fp + pf),$$
$$[q, fp^2] = 2i\hbar fp.$$

同理

$$[p, p^2 f] = \frac{\hbar}{i} p^2 f',$$

$$[p, pfp] = \frac{\hbar}{i} pf'p,$$

---

* 原文为 F，显然有错，下同。——译者注

$$[p, fp^2] = \frac{\hbar}{i} f' p^2.$$

18. 角动量的对易关系

作为对易子代数规则(5.63)和(5.65)的一个应用，我们来计算粒子角动量分量的对易子：

$$\boldsymbol{l} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p},$$

有

$$\begin{aligned}[l_x, l_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] + [zp_y, xp_z] \quad [\text{规则 (5.64)}] \\ &= y[p_z, z]p_x + p_y[z, p_z]x \quad [\text{规则 (5.65)}] \\ &= i\hbar(xp_x - yp_x) = i\hbar l_z.\end{aligned}$$

由循环置换可算得其它两个对易子。有

$$[l_x, l_y] = i\hbar l_z, \quad [l_y, l_z] = i\hbar l_x, \quad [l_z, l_x] = i\hbar l_y. \tag{5.69}$$

角动量的三个分量并不成对对易。它们中的任意两个都没有共同的正交归一完备系。换句话说，角动量的两个分量一般地[1]不能同时无限精确地决定。

注意到[规则(5.65)]

$$\begin{aligned}[l_z, l_x^2] &= i\hbar(l_y l_x + l_x l_y), \\ [l_z, l_y^2] &= -i\hbar(l_y l_x + l_x l_y), \\ [l_z, l_z^2] &= 0,\end{aligned}$$

并逐项相加[规则(5.64)]，得

$$[l_z, \boldsymbol{l}^2] = 0, \tag{5.70}$$

其中算符

$$\boldsymbol{l}^2 = l_x^2 + l_y^2 + l_z^2 \tag{5.71}$$

---

1) “一般地”这个词是重要的。这三个分量没有共同的基，但有共同的本征函数，也就是 $l_x = l_y = l_z = 0$ 的那些函数。这是一些只依赖于矢量 r 的长度 $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$，而不依赖于它的方向的函数。

是矢量 l 长度的平方.

算符 l^2 和 l_z 对易: 因此它们可以同时无限精确地决定. 显然 (l^2, l_x) 和 (l^2, l_y) 具有同样性质.

19. 统计分布的时间依赖关系　运动积分

考虑薛定谔方程及其复数共轭方程

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=H\Psi,\quad i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}=-(H\Psi)^*,$$

若 Ψ 在初始时刻归一, 则在以后的任何时间保持归一. 在每个时刻一给定观测算符的平均值等于标积

$$\langle A\rangle=\langle\Psi,\ A\Psi\rangle=\int\Psi^*A\Psi d\tau,$$

还有

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\left\langle\frac{\partial\Psi}{\partial t},\ A\Psi\right\rangle+\left\langle\Psi,\ A\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right\rangle+\left\langle\Psi,\ \frac{\partial A}{\partial t}\Psi\right\rangle.$$

若 A 不明显地依赖于时间, 则右边最后一项, $\langle\partial A/\partial t\rangle$, 变为零.

计及薛定谔方程及哈密顿量的厄密性, 有

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle=-\frac{1}{i\hbar}\langle H\Psi,\ A\Psi\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi,\ AH\Psi\rangle+\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi,\ [A,\ H]\Psi\rangle+\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle.$$

于是我们得到给出 A 的平均值的时间依赖关系的普遍方程:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle A\rangle=\langle[A,\ H]\rangle+i\hbar\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle.\qquad(5.72)$$

当用算符 $\exp(i\xi A)$ 代替 A 时, 我们得到一个 A 统计分布的特征函数的时间依赖关系的类似方程.

特别是，对任何和哈密顿量对易的变量 C

$$[C, H] = 0,$$

若它不明显地依赖于时间，我们得到结果

$$\frac{d}{dt}\langle C\rangle = 0.$$

C 的平均值在时间上保持不变. 更普遍地，若 C 与 H 对易，函数 $\exp(i\xi C)$ 也与 H 对易，从而有

$$\frac{d}{dt}\langle e^{i\xi C}\rangle = 0.$$

观测算符 C 的特征函数，从而它的统计分布，在时间上保持不变.

与经典分析力学类似，称 C 为**运动积分**. 特别是，若在初始时刻波函数是对应一给定本征值 c 的算符 C 的本征函数，则在时间进程中这个性质连续保持. 人们称 c 为一个“好量子数”. 特别是，若 H 不明显地依赖于时间，且若在时间 t_0 体系的动力学态由 H 和 C 的一个共同本征函数表示，则准到一个相因子内，波函数在时间进程中保持不变. 能量和变量 C 完全确定，且在时间上保持不变.

20. 运动积分的例子　能量　宇称

有一个和哈密顿量总是对易的观测算符，这就是哈密顿量自己. 因而所有体系，其能量不明显地依赖于时间时，能量都是它们的运动积分. 在 § 12 中已经证明过这个结果.

作为另一个可能的运动积分，让我们来指出**宇称**(见第三章 § 14). 我们记宇称观测算符为 P，定义为

$$P\psi(q) = \psi(-q),$$

易证 P 厄密. 再者 $P^2 = 1$，从而 P 的唯一可能的本征值是 $+1$ 和 -1; 和 $+1$ 联系的是偶函数，-1 的是奇函数.

当哈密顿量在用 $-q$ 代替 q 的代换下不变时，我们显然有

$$[P, H] = 0.$$

确实，若

$$H\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dq}, q\right) = H\left(\frac{-\hbar}{i}\frac{d}{dq}, -q\right),$$

则对任何 ψ，都有

$$PH\psi = H\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dq}, -q\right)\psi(-q)$$

$$= H\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dq}, q\right)\psi(-q) = HP\psi.$$

在这些条件下，若波函数在一给定初始时刻有一确定的宇称，则在时间进程中它保持同样的宇称。

容易把这个性质推广到有任意维数的体系；特别是，它能用到在其中宇称操作等于空间反演 $(r_i \to -r_i)$ 的粒子系，这种体系的宇称观测算符定义为

$$P\Psi(r_1, r_2, \cdots) = \Psi(-r_1, -r_2, \cdots).$$

练 习 和 问 题

1.由 §2 中标积的性质 (a)，(b) 和 (c)，证明薛华兹不等式

$$|\langle\varphi, \psi\rangle| \leqslant \sqrt{\langle\varphi, \varphi\rangle\langle\psi, \psi\rangle}.$$

[写下 φ 和 ψ 的任意线性组合的模方必须为正或零]. 证明当且仅当函数 φ 和 ψ 彼此互为倍数时，两边相等。

2.考虑算符 $p = (\hbar/i)d/dq$ 作用在函数 $\psi(q)$ 上的本征值问题，$\psi(q)$ 定义在区间 $(-\infty, +\infty)$ 内. 证明谱连续且本征函数有无限的模方. 证明由相邻本征值对应的本征函数的叠加，能建立一个有限模方的函数(本征微分)，其方均根偏差 Δp 能做得希望多小就有多小。对算符

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2}$$

考虑同一问题。

3.考虑作用在函数 $\psi(q)$ 上的算符 q，$\psi(q)$ 定义在区间 $(-\infty,$

$+\infty$）中、是有限模方的.（a）构成一个依赖于参数 η 的连续函数的序列，使得它们的模方和平均值$\langle q\rangle$保持与 η 无关，并在极限 $\eta\to 0$ 下，其方均根偏差 Δq 为零.（存在大量的这种类型的序列）. 注意这个序列并不收敛到希耳伯特空间中的一个函数.（b）同理，建立一个本征微分的序列(它们是有限模方的函数，但不连续)，它依赖于参数 δq，且由本征值 q_0 对应的本征“函数” $\delta(q-q_0)$ 的叠加得出，q_0 局域在区间 δq 内;证实：在 $\delta q\to 0$ 的极限下，对应于这些本征微分的方均根偏差 Δq 也为零.

4.证明一给定量的测量的统计分布是唯一决定的，尽管与表示这个物理量的算符相联系的完备正交归一本征函数系的选择有高度任意性(本征函数位相选择上的任意性;同一简并本征值中本征函数选择上的任意性;连续谱函数归一化上的任意性).

5.怎样推广本章的方程(5.20)和(5.21)到连续谱情况?

6.在极坐标 (r,θ,φ) 中，粒子角动量分量 l_z 取 $(\hbar/i)\partial/\partial\varphi$ 形式. 这表明 l_z 和 φ 组成一对并协变量. 然而，测不准关系 $\Delta l_z\cdot\Delta\varphi\geqslant\hbar$ 无意义. 解释一下为什么. 证明当 $\Delta l_z=0$ 时，角 φ 完全不决定. 展开波包

$$\psi(\varphi)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\exp[-\sigma(\varphi-\varphi_0+2n\pi)^2]$$

为 l_z 本征函数的级数. 比较在这个例子中 φ 的不确定度和 l_z 的不确定度，并讨论这两个变量的并协特征.

第六章　经典近似与 WKB 方法

I. 波动力学和经典近似

1. 一般评述

在 $\hbar \to 0$ 的极限下，量子力学规律必然化为经典力学规律。在理论的确立中起过如此重要作用的对应原理，就是以满足这个基本要求作为它的准确目标的。

在所有那些可把作用量子考虑为无穷小的情况下，经典力学必然提供一种对现象的良好的描述。本章的目的在于说明，在何种情况下和在何种程度内，经典近似是合理的。

$\hbar$ 的有限特征的一种表现形式是对某些观测算符存在一个分立的本征值谱；相邻本征值间的间隔是 $\hbar$ 量级[1]。为使经典近似合理，必须认为这个间隔可以忽略；这就是只涉及大量子数的情况。这个建立在对应原理上的条件，在旧量子论中，在计算里德伯常数和在确立玻尔-索末菲量子化规则时就已经用过了（第一章 §§ 13 和 15）。当然这个条件不是充分的，因而，某些纯粹的量子力学效应比如测不准关系并不和某些

---

1) 在氢原子中，

$$E_n = -\frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{mc^2}{n^2},$$

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = -\frac{2n+1}{(n+1)^2} E_n.$$

在 $\hbar \to 0$ 的极限下，从一给定能级 $E_n = E$ 到和它最紧邻的能级之间的间距是 $\frac{2n+1}{(n+1)^2}E$；在这个极限过程中，$n^2\hbar^2 =$ 常数，因此 n 以 $1/\hbar$ 方式趋于 ∞，$\Delta E \approx 0(1/n) = 0(\hbar)$。

谱的分立性相联系。更普遍地，经典近似正确的条件是几何光学正确的条件。

经典近似能以两种不同的方式表述。

第一种是最易被直观了解的，它的实质在于：每个粒子在一给定时刻的动力学态由它的位置和速度来确定。若 $\hbar$ 为零，这样处理是严格成立的，因为每个粒子的位置分量和动量分量将由对易的观测算符表示。确实，非零对易子

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \tag{6.1}$$

的存在给位置和动量能同时决定的精确度设置了一个极限，即一个由测不准关系给出的极限。体系的动力学态严格由它的波函数表示，人们能作的最佳方案是构造一个最小的、

$$\Delta q_i \cdot \Delta p_i = \frac{1}{2}\hbar$$

的波包。经典图象的实质在于给每个粒子以一个位置和一个动量，它们分别等于这些量在相应的量子态中的平均值。它系统地略去了任何对这些平均值的涨落。为满足这个图象，必须：

（a）在一良好的近似内，平均值遵循经典运动规律；

（b）波包的线度比问题中的特征线度小，而且在时间的进程中它仍然保持足够小。

在后面两节中，我们将考虑这两点。特别是，我们将会看到，除了在非常特殊的情况外，在时间进程中，只要等待足够长时间，任何波包都要无限“伸展”，并占据一个想要多大就有多大的空间部分。因此上述的经典图象只能保持在有限的时间间隔内。

第二种表述经典近似的方式在于把体系比喻为一种经典体系的统计混合。更精确地说，我们用波函数定义一种经典统计混合，它在位形空间中每点的密度等于量子体系在该点

出现的几率密度；我们可以证明：在 $\hbar \to 0$ 的极限下，这个混合的演变正好和经典力学预期的一样．这将在 §4 中作出．从数学观点来看，这种形式[1]比第一种更满意，因为它把经典力学的方程考虑为薛定谔方程的极限．这一经典近似成立的条件精确地和几何光学的条件相同．

这个近似是和薛定谔方程的一种以 WKB 方法[2]命名的近似方法紧密地联系在一起的．当薛定谔方程能被它的经典极限代替时，除了对奇点周围的有限空间区域外，这近似都适用．在本章的第二部分概述 WKB 方法．

2. 厄任费斯脱定理

厄任费斯脱定理给出一量子体系坐标 q 的平均值及共厄动量 p 的平均值的运动规律．这些平均值的运动方程形式上全同于经典力学的哈密顿方程，除了出现在经典方程两边的量必须被它们的平均值代替外．

将普遍的方程 (5.72) 用到位置坐标和动量坐标，可直接推得这个定理．令 $q_1, \cdots, q_R$ 为位置的(笛卡儿)坐标，$p_1, \cdots, p_R$ 为它们的共厄动量，$H(q_1, \cdots, q_R; p_1, \cdots, p_R)$ 为体系的哈密顿量．

按照(5.72)式，

$$i\hbar \frac{d}{dt}\langle q_i \rangle = \langle [q_i, H] \rangle,$$

$$i\hbar \frac{d}{dt}\langle p_i \rangle = \langle [p_i, H] \rangle.$$

---

1) 确实，存在几种变形，因为从波函数给出的经典统计混合物不唯一(见习题 6.4)．在下面 § 4 中给出最简单的一种．

2) WKB 技巧是瑞利勋爵 (1912) 在求解波传播问题时引进的．杰弗里 (Jeffreys) (1923) 第一个把它用于量子力学；然后同时被温采 (G. Wentzel)，克拉玛斯 (H. A. Kramers) 和布里渊 (L. Brillouin) 发展了．

右边对易子的计算已在第五章中作出[方程(5.67)和(5.68)]。从已知的结果[1]得

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle q_i\rangle &= \left\langle\frac{\partial H}{\partial p_i}\right\rangle, \quad (i=1,2,\cdots,R),\\ \frac{d}{dt}\langle p_i\rangle &= -\left\langle\frac{\partial H}{\partial q_i}\right\rangle, \quad (i=1,2,\cdots,R).\end{aligned} \tag{I}$$

我们必须清楚地了解方程组(I)和哈密顿正则方程之间的联系。一般地说平均值 $\langle q_i\rangle$ 和 $\langle p_i\rangle$ 遵循经典力学规律是不正确的。经典量 q_i 和 p_i 对时间的微商是这些量的完全确定的函数 $\partial H/\partial p_i$，$-\partial H/\partial q_i$。在时间进程中这些量所取的值能精确地由它们的初值导出。另一方面按照方程组(I)，微商 $d\langle q_i\rangle/dt$，$d\langle p_i\rangle/dt$ 等于某些确定的平均值，它们的计算一般必须用到波函数 $\psi(x)$ 的知识。除非人们能在(I)式中，把右边函数的平均值用平均值的函数来代替，即以

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial p_i}H(\langle q_i\rangle\cdots\langle q_R\rangle;\ \langle p_1\rangle\cdots\langle p_R\rangle)\\ &\text{代替}\\ &\left\langle\frac{\partial}{\partial p_i}H(q_1,\cdots,q_R;\ p_1,\cdots p_R)\right\rangle,\end{aligned}\right\} \tag{6.2a}$$

$$\left.\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial q_i}H(\langle q_1\rangle\cdots\langle q_R\rangle;\langle p_1\rangle\cdots\langle p_R\rangle)\\ &\text{代替}\\ &\left\langle\frac{\partial}{\partial q_i}H(q_1,\cdots,q_R;\ p_1,\cdots,p_R)\right\rangle,\end{aligned}\right\} \tag{6.2b}$$

否则平均值 $\langle q_i\rangle$，$\langle p_i\rangle$ 不遵从经典运动规律。这种代替严格说来只在哈密顿量是对 q 和对 p 的二阶多项式时才是合理的(自由粒子，谐振子，在恒定电场或磁场中的荷电粒子，见习题

1) 如果人们用算符 $\partial H/\partial p_i$，$\partial H/\partial q_i$ 的定义小心推演的话(见第五章§17)。

6.1 和 6.2)。除了这些特殊情况外，这只在 q、p 对它们平均值的涨落可忽略时才能发生。

作为一个例子，让我们考虑一个粒子在势场中的情况

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r).$$

让我们引入力

$$F = -\operatorname{grad} V(r).$$

在此情况下厄任费斯脱方程为

$$\frac{d}{dt}\langle r\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt}\langle p\rangle = \langle F\rangle,$$

或者

$$\langle F\rangle = m\frac{d^2}{dt^2}\langle r\rangle, \tag{6.3}$$

这是牛顿定律的量子模拟。

为使平均位置

$$\langle r\rangle \equiv \int \Psi^*(r, t) r \Psi(r, t) dr$$

确实遵循牛顿经典方程，我们必须在方程(6.3)中将力的平均值

$$\langle F\rangle = \int \Psi^*(r, t) F(r) \Psi(r, t) dr$$

用它在点 r 的值 $F(\langle r\rangle)$ 来代替。当力为零(自由粒子)或线性依赖于 r 坐标(谐振子)时，我们严格地有 $F = F(\langle r\rangle)$。在其它情况下，只在波函数局域在一个足够小的空间区域中，使得力在这整个区域内实际上有常数值时，这种代替才是合理的。

3. 波包的运动和伸展

为使波包的运动可比喻为一经典粒子的运动，首先它的

位置和动量必须服从经典力学规律；而且这个波包的线度在所有时间内都必须保持足够小. 事实上，如厄任费斯脱定理所指明的那样，没有第二个的话，第一个要求是很难满足的. 我们将特别注意第二个要求.

为了看清本质的特色，研究一维波包 $\phi(q,t)$ 的运动就足够了. 令H为哈密顿量:

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(q).$$

我们希望研究的那些随时间演化的量是平均值$\langle q\rangle$和$\langle p\rangle$以及方均偏差

$$\chi\equiv(\Delta q)^2=\langle q^2\rangle-\langle q\rangle^2,$$
$$\tilde{\omega}\equiv(\Delta p)^2=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2.$$

在经典极限下，波包表示一个位置和动量分别为

$$q_{\mathrm{Cl.}}=\langle q\rangle,\quad \langle p\rangle_{\mathrm{Cl.}}=\langle p\rangle$$

的粒子[1]. 注意这个经典粒子的能量

$$E_{\mathrm{Cl.}}=\frac{\langle p\rangle^2}{2m}+V(\langle q\rangle)$$

不等于平均值$\langle H\rangle$. 确实，若经典近似合理，$E_{\mathrm{Cl.}}$以及差

$$\varepsilon=\langle H\rangle-E_{\mathrm{Cl.}} \tag{6.4}$$

是时间常数.

由于波包的广延$\sqrt{\chi}$保持很小，自然可以把诸如$V(q)$，$V'(q)$等函数用它们对$\langle q\rangle$的泰勒展式来代替，即

$$V(q)=V_{\mathrm{Cl.}}+(q-\langle q\rangle)V'_{\mathrm{Cl.}}+\frac{1}{2}(q-\langle q\rangle)^2V''_{\mathrm{Cl.}}+\cdots, \tag{6.5}$$

$$V'(q)=V'_{\mathrm{Cl.}}+(q-\langle q\rangle)V''_{\mathrm{Cl.}}$$

1) 在第二章的一维波包的研究中，波包中心由稳定位相条件定义，而这里采用的定义是平均值$\langle q\rangle$. 在经典近似下，这两个定义之间的不同可以略去.

$$+\frac{1}{2}(q-\langle q\rangle)^2V'''_{\mathrm{Cl.}}+\cdots. \tag{6.6}$$

在这些表示式中，$V_{\mathrm{Cl.}}, V'_{\mathrm{Cl.}}, \cdots$ 记函数 $V, V', \cdots$ 在点 $q=\langle q\rangle$ 处的取值. 取这些量的平均值，我们得到它们按 χ 的级数展式，即

$$\langle V\rangle = V_{\mathrm{Cl.}}+\frac{1}{2}\chi V''_{\mathrm{Cl.}}+\cdots, \tag{6.7}$$

$$\langle V'\rangle = V'_{\mathrm{Cl.}}+\frac{1}{2}\chi V'''_{\mathrm{Cl.}}+\cdots. \tag{6.8}$$

借助于这些展式，我们有能力得到对任何 $V(q)$ 都正确的，完全普遍的结果.

量 $\langle q\rangle$ 和 $\langle p\rangle$ 遵从厄任费斯脱方程

$$\frac{d}{dt}\langle q\rangle = \frac{\langle p\rangle}{m}, \tag{6.9a}$$

$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\langle V'\rangle. \tag{6.9b}$$

若方程(6.9b)右边用它的展式(6.8)的第一项代替，它们就化为经典方程. 若项 $\frac{1}{2}\chi V'''_{\mathrm{Cl.}}$ 及高阶项可忽略，这个代替是合理的. 当 $V'''(q)$ 处处为零，即当 $V(q)$ 最多是 q 的二阶多项式时，特别是当 $V(q)=cq^2$（谐振子）和当 $V(q)=0$（自由粒子）时，它严格保持正确. 否则，$V(q)$ 必须在波包的广延 $\chi^{\frac{1}{2}}$ 量级的距离内变化得足够慢，使得在展式(6.8)中 V''' 和高阶微商项的影响足够小.

假定这些条件被满足[等于假定展式(6.7)和(6.8)迅速收敛]，我们得出常数 ε（见方程(6.4)）的表示式

$$\varepsilon \equiv \frac{\tilde{\omega}}{2m}+\langle V\rangle - V_{\mathrm{Cl.}} \simeq \frac{1}{2m}(\tilde{\omega}+mV''_{\mathrm{Cl.}}\chi) = \text{常数}, \tag{6.10}$$

它与方均偏差 $\tilde{\omega}$ 和 χ 相联系.

我们将只限于研究 χ 是时间函数的情况. χ 是算符 $q^2-\langle q\rangle^2$ 的平均值(由于 $\langle q\rangle$ 是时间的函数,它明显地依赖于时间). 把关系式(5.72)用到这个算符,经过一些计算后得

$$\frac{d}{dt}\chi=\frac{1}{m}(\langle pq+qp\rangle-2\langle p\rangle\langle q\rangle).$$

对 $d\chi/dt$ 用类似的手续,有

$$\frac{d^2\chi}{dt^2}=\frac{2\tilde{\omega}}{m^2}-\frac{1}{m}(\langle V'q+qV'\rangle-2\langle q\rangle\langle V'\rangle).$$

用展开式(6.6)中的头两项代替右边括号中的算符 V',我们得到近似方程

$$\frac{d^2\chi}{dt^2}\simeq\frac{2}{m^2}(\tilde{\omega}-mV''_{\mathrm{Cl.}}\chi). \tag{6.11}$$

计及方程(6.10),我们可把它写为

$$\frac{d^2\chi}{dt^2}\approx\frac{4}{m}(\varepsilon-V''_{\mathrm{Cl.}}\chi). \tag{6.12}$$

已知在时间 t_0 的偏差 χ_0, $\tilde{\omega}_0$ 和 $\dot{\chi}_0\equiv\frac{d\chi_0}{dt}$,通过求解方程(6.12)可得到以后任何时间的 χ——小心注意 $V''_{\mathrm{Cl.}}$ 可以和时间有关——以及用方程(6.10)得出 $\tilde{\omega}$. 鉴于这一事实,在(6.9b)式中,用 $V'_{\mathrm{Cl.}}$ 代替 $\langle V'\rangle$ 引起的误差可以算出来. 于是,决定波包和经典粒子相似是否合理的所有因素都有了.

谐振子和自由粒子是两个最有趣的情况. 在这些情况下,波包中心的运动严格和经典粒子的运动相同. 在谐振子情况 $\left(V=\frac{1}{2}m\omega^2q^2\right)$, $\langle q\rangle$ 以频率 $\omega/2\pi$ 绕零点振荡,χ 以这个频率的两倍绕 $\varepsilon/m\omega^2$ 振荡(见习题 6.1.).

若我们是在论述一自由粒子 $(V=0)$, 则 $\langle q\rangle$ 作速度为 $\langle p\rangle/m$ 的匀速直线运动,偏差 $\tilde{\omega}$ 严格保持为常数

$$(\tilde{\omega}=\tilde{\omega}_0=2m\varepsilon),$$

因而严格有 $d^2\chi/dt^2 = 2\bar{\omega}_0/m^2$ [在这种情况下方程(6.11)和(6.12)是精确的],所以

$$\chi = \chi_0 + \dot{\chi}_0 t + \frac{\bar{\omega}_0}{m^2} t^2. \tag{6.13}$$

于是,经过足够长时间后,χ 变得要多大就有多大;自由波包无限地"扩展".

无限扩展的出现是一个重要的事实,因为它对时间间隔设置了一个限制,在这个时间间隔中波包可以比喻为一个经典粒子.确实,除了非常特殊的(比如简谐振动)情况外,波包总是要扩展的,特别在碰撞问题里,当碰撞粒子离散射中心足够远时,波包的运动规律趋于自由波包的规律.

若在时间 t_0 波包被取为极小,即 $\bar{\omega}_0\chi_0 = \frac{1}{2}\hbar^2$(在此情况下 $\dot{\chi}_0 = 0$),则自由波包的扩展规律是十分简单的(见习题4.4);于是我们有

$$\chi = \chi_0 + \frac{\bar{\omega}_0}{m^2} t^2,$$

或

$$\Delta q = \left[(\Delta q_0)^2 + \left(\frac{\Delta p_0}{m} t\right)^2\right]^{1/2}. \tag{6.14}$$

对这种自由波包,"扩展项" $\Delta p_0 t/m$ 的这种形式指明了一种简单的经典图象,一群炮弹开始时聚集在平均值 $\langle q_0\rangle$ 附近的间隔 Δq_0 内,这些炮弹分布在波包群速度 $v = \langle p_0\rangle/m$ 附近一个间隔

$$\Delta v = \Delta p_0/m$$

内.由于它们速度上的色散,开始局域在同一点的炮弹,在时间 t,它们均匀分布在 $\Delta v t$ 带内,从而,炮弹不再维持它们原来的集团,炮弹群的宽度按规律(6.14)显著地增加.

这个相同的规律能纳入其它形式.特别是,它可写成

$$\Delta q = \Delta q_0 \left[1 + \frac{1}{4}\left(\frac{D\lambda}{(\Delta q_0)^2}\right)^2\right]^{1/2},$$

其中 $D = vt$ 是时刻 t 波包走过的距离，$\lambda = \hbar/mv$ 是平均波长. 只要

$$\sqrt{D\lambda} \ll \Delta q_0, \tag{6.15}$$

自由波包的伸展可忽略. 事实上，易证明广延 Δq 总是超过长度 $\sqrt{D\lambda}$. (注意: $D\lambda = \hbar t/m$.)

4. 薛定谔方程的经典极限

现在我们来研究在本章引言中指出过的经典近似的第二种表述，

为确定起见，我们讨论势 $V(r)$ 中的一个粒子. 让我们在它的波函数中分离模和位相:

$$\psi(r) = A(r)\exp\left(\frac{i}{\hbar}S(r)\right), \tag{6.16}$$

将表示式 (6.16) 代入薛定谔方程中，并分离实部和虚部，我们得到两个方程

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta A}{A}, \tag{6.17}$$

$$m\frac{\partial A}{\partial t} + (\nabla A \cdot \nabla S) + \frac{A}{2}\Delta S = 0. \tag{6.18}$$

这两个方程严格等价于薛定谔方程. 确实，方程 (6.18) 刚好就是连续性方程(6.11). 事实上，出现的几率流密度 $P(r)$ 和流密度 $J(r)$ (见第四章 §§ 2 和 4) 分别由

$$P = A^2 \quad J = A^2\frac{\nabla S}{m}$$

给出. 对每一项乘 $2A$ 后，方程(6.18)可写成形式

$$m\frac{\partial}{\partial t}A^2 + \operatorname{div}(A^2\nabla S) = 0. \tag{6.19}$$

经典近似就在于在方程(6.17)中令 $\hbar$ 等于零,即

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{(\nabla S)^2}{2m}+V=0. \tag{6.20}$$

我们得出下述结论:

在经典近似下,Ψ 描述一质量为 m,处于势 $V(r)$ 下的无相互作用的经典粒子的流体(统计混合):这个流体在空间各点的密度和流密度在全部时间内都分别等于该点的量子粒子的几率密度 P 和流密度 J[1].

事实上,由于这个流体满足连续性方程[方程(6.19)],只要证明流体的速度场

$$v=\frac{J}{P}=\frac{\nabla S}{m} \tag{6.21}$$

确实满足问题中经典流体的运动规律就足够了. 现在,由定义(6.21),可将(6.20)写为

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{mv^2}{2}+V=0.$$

写下左边的梯度为零,计及(4.21)式,我们有

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+(v\cdot\operatorname{grad})\right)mv+\operatorname{grad}V=0,$$

由此可得流体的粒子服从运动方程

$$m\frac{dv}{dt}=-\operatorname{grad}V$$

证毕.

强调这个结果的极端普遍性是重要的,它对任意维数的体系都成立. 密度 $P=|\psi|^2$ 是位形空间的一个完全确定的函数;类似地,流 J 是这个空间的一个完全确定的矢量. 普遍

1) 在这经典统计混合的相空间中的密度有点特别,因为位形空间中每一点对应一个完全确定的动量$\triangle S$. 方程(6.20)的解 S 是经典力学的哈密顿-雅可伸形式中的哈密顿量的"主函数".

情况下的证明留给读者作出.

当 Ψ 表示一能量为 E 的定态时，

$$\frac{\partial A}{\partial t}=0,\quad \frac{\partial S}{\partial t}=-E.$$

方程(6.17)和(6.18)化为

$$(\nabla S)^2-2m(E-V)=\hbar^2\frac{\Delta A}{A},\tag{6.22}$$

$$\operatorname{div}(A^2\nabla S)=0.\tag{6.23}$$

在经典极限下，(6.22)的右边可忽略，上面证明的结果仍然保留. 于是 Ψ 表示一种经典粒子流体的稳恒流动.

光学的模拟比流体力学的模拟甚至更有启发性，特别对定态的结果更是如此. 由于粒子的速度正比于 S 的梯度，这些粒子的轨迹垂直于等相面 $S=$ 常数. 用光学语言来说，后者是波前而粒子的轨迹是光线[1]. 因而，经典近似等价于几何光学近似：作为薛定谔方程的一个后果，我们又再次找到物质波理论的基本假设.

每当人们希望决定经典近似成立的条件是否确实满足时，光学的模拟总是十分有用的. 令 λ 为约化波长：

$$\lambda=\frac{\hbar}{\sqrt{2m[E-V(r)]}}.$$

它是 r 的一个完全确定的函数. 方程(6.22)可写成形式

$$(\nabla S)^2=\frac{\hbar^2}{\lambda^2}\left(1+\lambda^2\frac{\Delta A}{A}\right).\tag{6.22'}$$

在经典近似下，对整个空间都有

---

1) 存在矢势 $\boldsymbol{A}$ 时，经典速度的定义(6.21)必须改为

$$v=\frac{1}{m}\left(\nabla S-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right).$$

用这个新定义，上面的定理保持正确. 波前和光线的观念保持正确，但光线不再垂直于波前，这种情况和几何光学中各向异性介质的情况类似.

$$\lambda^2 \frac{\Delta A}{A} \ll 1, \tag{6.24}$$

更精确地说，不满足这个条件的区域足够小以致方程 (6.22′) 能被近似方程

$$(\nabla S)^2 = \frac{\hbar^2}{\lambda^2} \tag{6.25}$$

代替. 这就是几何光学的波前方程.

当整个空间内 $V = 0$ 时，λ 是常数，函数 $S = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{r} +$ 常数(其中 $\boldsymbol{p}$ 是一给定的长度为 $\hbar/\lambda$ 的矢量)是方程(6.25)的一个特解 [全体这种类型的函数组成这个一阶偏微分方程的一个完全积分]；对应于这个解的波前是个垂直于 $\boldsymbol{p}$ 的平面，光线是平行于 $\boldsymbol{p}$ 的直线. 在一般情况下，波前和光线是弯曲的.

一旦能量 E 被固定，波前 $S(x, y, z) = S_0$ 的详细信息决定了方程 (6.25) 的一个且只一个解. 这个解能从下述方式得出. 面 (S_0) 和一族经典粒子的轨迹(两参数)相联系；这些轨迹对应于能量 E 且垂直于 (S_0)；其它的波前是垂直于这些轨迹的表面 (图 6.1). 为了找出 S 在这些波前的各点上的取值，考虑轨迹中的一根 (T). (T) 的每一点由它的曲线坐标 s 来标记；我们把原点 $S = 0$ 定在 (T) 和 (S_0) 的交点上. 按

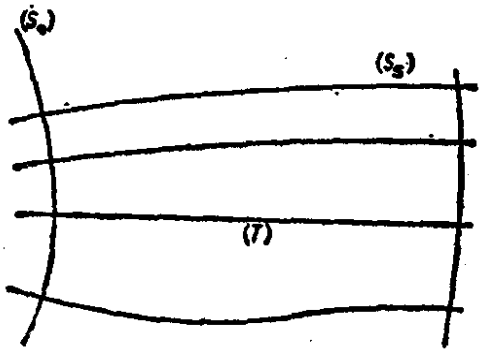

图 6.1 在几何光学近似下：$(\nabla S)^2 = \hbar^2/\lambda^2$，与波前 S_0 相联系的(给定能量 E 的)轨迹族.

照方程(6.25),我们有

$$S(s) = S_0 + \int_0^s \frac{\hbar}{\lambda} ds;$$

于是 S 就在整个空间中被决定，具体给定在面 (S_0) 上的 A 就唯一决定了整个空间的函数 A. 事实上方程(6.23)只和沿同一轨迹 A 所取的值 $A(s)$ 相联系. 确实，它可写为

$$\frac{\hbar}{\lambda} \frac{d}{ds}(A^2) + A^2 \Delta S = 0.$$

由于函数 λ 和 ΔS 是在轨迹上 S 的完全确定的函数，当已知 (T) 和 (S_0) 的交点处 A 的值 $A(0)$ 时，这个方程就以唯一的方式决定 $A(s)$.

已知在经典近似下的解 A 和 S，就能算出在严格的方程(6.22′)中由项 $\lambda^2 \Delta A/A$ 产生的微扰. 这个影响不仅依赖于波在其中通过的介质的“光学性质”，也依赖于波动方程的特解. 作为一个普遍的法则，若波的“横向”线度处 ε 远大于 λ，又若

$$|\operatorname{grad} \lambda| \ll 1 \tag{6.26}$$

即使不在整个空间，至少也在密度 A^2 取非负值的部分空间得到满足的话，那末经典近似是合理的.

这些适用条件可由下述半定量的论证推出. 如同在光学模拟中所指明的那样，光线的曲率，即粒子的轨迹的曲率，必须远小于波长. 现在，曲率半径 R 和粒子速度 v 相联系，而且通过关系式

$$\frac{mv^2}{R} = |(\operatorname{grad} V)_\perp|$$

又与力 $-(\operatorname{grad} V)_\perp$ 的横向分量相联系. 因而必须有

$$\frac{\lambda}{R} = \frac{\lambda |(\operatorname{grad} V)_\perp|}{mv^2} = \frac{m\lambda^3}{\hbar^2} |(\operatorname{grad} V)_\perp| \ll 1,$$

计及 λ 作为势 V 的函数的表示式，这条件可写为

$$|(\text{grad}\,\lambda)_\perp| \ll 1.$$

现在，波前的曲率可以比 $1/\lambda$ 小(除了可能在空间某些有限制的区域，特别是在近焦面的区域外)，这一般是可以实现的，只要适当选择曲面 (S_0)，使轨迹也有小的曲率. 类似地，在 λ 数量级的区域内，A 对每个波前的相对变化必须可忽略；换句话说，波的"横向"线度必须比 λ 大. 如果解的这些条件被满足，则沿轨迹 (T) 的函数 $A(s)$ 近似地由

$$A(s) \approx A(0)\sqrt{\frac{\lambda(s)}{\lambda(0)}}$$

给出，经过简短的计算后，得

$$\lambda^2 \frac{\Delta A}{A} \approx \frac{\lambda^2}{A}\frac{d^2A}{dS^2} \approx \frac{1}{4}\left[2\lambda\frac{d^2\lambda}{ds^2} - \left(\frac{d\lambda}{ds}\right)^2\right].$$

为使这项小，$d\lambda/ds$ 和 $\lambda d^2\lambda/ds^2$ 必须远小于 1. 事实上，如果第一个条件成立，第二个条件总是满足的；这就是说，$\text{grad}\,\lambda$ 沿轨迹的分量是远远小于 1 的，即

$$|(\text{grad}\,\lambda)_{//}| \ll 1.$$

5. 用于库仑散射　卢瑟福公式

作为一个应用，我们将简短地描绘一下库仑散射的经典理论和它成立的条件.

考虑一质量为 m 的粒子被库仑势

$$V = \frac{ze^2}{r}$$

散射，其中 r 是粒子和力心 c 的距离. 例如，这个粒子就是电荷为 e 的质子被电荷为 ze 的原子核的库仑场排斥. 如果电荷有相反符号(吸引势)，理论同样适用. 我们将把常数 ze^2 作为一个能够取正号或负号的代数量处理.

由于粒子的能量 E 由关系式

$$E = \frac{p_0^2}{2m} = \frac{1}{2} m v_0^2$$

固定，而入射粒子的传播方向也给定，因此碰撞参数 b 完全决定了运动的初始条件．令

$$a = \frac{1}{2} \frac{\varkappa e^2}{E}, \tag{6.27}$$

如所周知，轨迹是双曲线的一支(图 6.2)，双曲线的焦点为 C，半轴 $OA = |a|$，焦距 $OC = \sqrt{a^2 + b^2}$．偏转角由关系式

$$b = |a| \cot \frac{\theta}{2} \tag{6.28}$$

给出．(偏转的方向依赖于势的符号，但角度的绝对值对两个绝对值相等的势来说是相同的)．

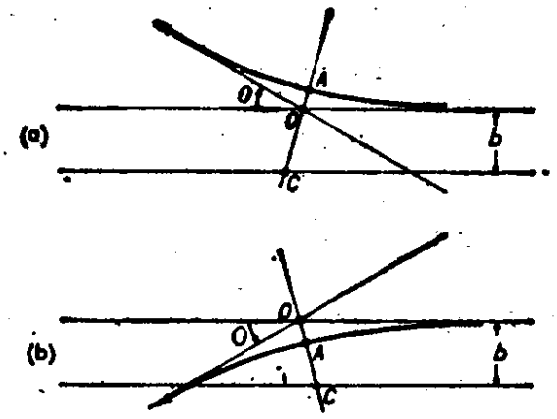

图 6.2　一粒子在 (a) 排斥；(b) 吸引库仑场中的轨迹(粗黑线)．

微分截面 $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ 是我们在实践中必须知道的一个重要物理量．考虑一对准力心的单能平行粒子束．我们观测散射到给定立体角$(\Omega, \Omega + d\Omega)$的粒子数．当入射束的粒子分布是均匀的，而通量与时间无关并且等于单位通量时，按定义，$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ 就是单位时间内散射到单位立体角中的粒子数目．这里所说的

单位通量是指：在离 c 很远并与入射方向垂直的任何表面上，单位时间单位面积上有一个粒子穿过。

取入射方向为极轴，并称 θ 和 φ 为散射粒子传播方向的极角。θ 是上面引入的偏转角，它和碰撞参数 b 的关系由式(6.28)联系。在 (θ, φ) 方向的立体角 $d\Omega$ 等于

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi,$$

单位时间散射到这个立体角内的粒子数 $d\sigma$ 等于单位时间穿过表面 $bdbd\varphi$ 的入射粒子数；由于入射通量等于 1，有

$$d\sigma = bdbd\varphi = b\frac{db}{d\theta}d\theta d\varphi = \frac{b}{\sin\theta}\frac{db}{d\theta}d\Omega,$$

将这个方程中的 b 和 $db/d\theta$ 用它们按关系式(6.28)算得的用 θ 表示的式子代替，我们就得出**卢瑟福公式**[1]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a^2}{4\sin^4\frac{\theta}{2}} = \frac{(ze^2)^2}{16E^2\sin^4\frac{\theta}{2}}. \tag{6.29}$$

我们现在来讨论经典近似的正确性。首先注意 $|a|$ 是这个碰撞问题的特征长度。此外，粒子的波长

$$\lambda\!\!\!^{-} = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{p_0}\left(1 - \frac{\partial a}{r}\right)^{-1/2}$$

是它的初值 $\lambda\!\!\!^{-}_0 = \hbar/mv_0$ 的数量级。因而 $|a|$ 和 $\lambda\!\!\!^{-}$ 两个量之比是

$$\gamma = \frac{|a|}{\lambda\!\!\!^{-}_0} = \frac{|ze^2|}{\hbar v_0} \tag{6.30}$$

的量级。我们预期在

$$\gamma \gg 1 \tag{6.31}$$

的极限下经典近似合理。

---

1) 由卢瑟福给出的这个公式，有巨大的历史重要性，卢瑟福关于 α 粒子散射的著名实验的全部解释就是靠它作出的。

让我们来研究一下在何种程度内条件(6.26)满足. 我们有

$$|\mathrm{grad}\,\hat{\lambda}| = \left|\frac{d\hat{\lambda}}{dr}\right| = \frac{1}{\gamma}\frac{a^2}{\sqrt{r(r-2a)^3}} \ll 1;$$

r 越小 $|\mathrm{grad}\,\hat{\lambda}|$ 越大. 由于经典轨迹离散射中心越近,偏转角越大,我们断定: 经典近似对小偏转角(就是说对大碰撞参数)成立,而对大角不再正确. 为了得到一个更加定量的结论,考虑 $|\mathrm{grad}\,\hat{\lambda}|$ 作为 θ 函数的极大值的表示式,经过一些计算后

$$|\mathrm{grad}\,\hat{\lambda}|_{\max} = \frac{F(\theta)}{\gamma},$$

$$F(\theta) = \tan\frac{1}{2}\theta \cdot \frac{\sin\frac{1}{2}\theta}{1-(\mathrm{sgn}\,a)\sin\frac{1}{2}\theta}.$$

[按定义, $\mathrm{sgn}\,a \equiv |a|/a$.] 当 θ 从 0 转到 π 时, $F(\theta)$ 从 0 增到 $+\infty$. 令 θ_c 为满足

$$F(\theta_c) = \gamma$$

的一个角度. 当 $\theta < \theta_c$ 时,经典近似合理,当 $\theta > \theta_c$ 时,经典近似不再成立. 注意 γ 越大, θ_c 越接近于 π, 与前面所作的粗糙的预言相符.

II. WKB 方法[1)]

6. 方法的原理

这个方法的实质在于引入一个按 $\hbar$ 的级数展式并略去高

1) 见本章 § 1 的最后一脚注. 更详尽地, 见 R. E. Langer, *Phys. Rer.* **51** (1937) 669; W. H. Furry, *Phys. Rex.* **71**(1947) 360. 亦见 P. M. Morse 和 H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics* (New York, McGraw-Hill, 1953) pp. 1092 *ff*.

于 $\hbar^2$ 级的项. 于是我们就把薛定谔方程用它的经典极限来代替了(至少在某些空间区域内). 不过，这个方法具有比经典近似本身更广的适用范围，因为这个手续甚至能在经典解释没有意义的空间区域中实现. ($E < V$ 的区域，这是经典粒子进不去的). 为了在我们的处理中包含这些区域，我们必须略微修改一下 § 4 中 A 和 S 的定义并写出

$$\psi(r) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} W(r)\right), \tag{6.32}$$

$$W(r) = S(r) + \frac{\hbar}{i} T(r), \tag{6.33}$$

$$A(r) = \exp[T(r)], \tag{6.34}$$

要求 S 和 T 是 $\hbar$ 的偶函数就以唯一的方式决定了 A 和 S. 用这些新定义，虽则不再要求 A 和 S 是实数，但方程 (6.17)、(6.18)以及(6.22),(6.23)仍成立. WKB 近似在于将 $W(r)$ 展开为 $\hbar$ 的级数，并在薛定谔方程中略去等于或高于 $\hbar^2$ 级的项.

7. 一维 WKB 解

只对一维问题，能容易地应用 WKB 方法. 因此我们只限于论述一维问题. 我们将找不含时间的薛定谔方程[方程(6.22)和(6.23)]的定态解. 这里发展的方法最终能用于求解三维薛定谔方程，因为在许多实际情况下，通过分离角变数和矢径变数，三维问题可以化为一维问题来求解(见第九章).

令 $y(x)$ 为满足薛定谔方程的波函数

$$y'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]y = 0.$$

令

$$y = e^{iw/\hbar}, \quad w = S + \frac{\hbar}{i}\ln A.$$

(S 和 $\ln A$ 是 $\hbar$ 的偶函数) 我们得到等价的方程组

$$S'^2 - 2m(E - V) = \hbar^2 \frac{A''}{A}, \tag{6.35}$$

$$2A'S' + AS'' = 0. \tag{6.36}$$

对连续性方程(6.36)积分,得

$$A = \text{常数} \quad (S')^{-1/2}, \tag{6.37}$$

将 A 的这个表示式代入方程(6.35)中,我们得到方程

$$S'^2 = 2m(E - V) + \hbar^2\left[\frac{3}{4}\left(\frac{S''}{S'}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{S'''}{S'}\right], \tag{6.38}$$

这个 S 的三阶微分方程**严格**等价于原来的薛定谔方程.

在 WKB **近似**中我们将 S 展开为 $\hbar^2$ 的幂级数:

$$S = S_0 + \hbar^2 S_1 + \cdots, \tag{6.39}$$

然后将这个展式代入方程(6.38)中,且只保留零级项,得

$$S'^2 \approx S_0'^2 = 2m[E - V(x)], \tag{6.40}$$

这个近似方程是容易积分的.

我们必须按 $E \gtrless V(x)$ 来区别两种情况.

第一种情况: $E > V(x)$.

我们定义波长

$$\lambda(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m[E - V(x)]}}, \tag{6.41}$$

若 $S' \approx \pm \hbar/\lambda$, 则方程(6.40)满足. WKB 解是振荡函数的一个线性组合

$$y(x) = \alpha\sqrt{\lambda}\cos\left(\int^x \frac{dx}{\lambda} + \varphi\right) \tag{6.42}$$

(α 和 φ 是任意常数).

第二种情况: $E < V(x)$ (经典粒子的禁戒区域)

$$l(x) = \frac{\hbar}{\sqrt{2m[V(x) - E]}}, \tag{6.43}$$

若 $S' \approx \pm i\hbar/l$，则方程(6.40)满足. WKB 解是一个实指数的线性组合

$$y(x) = \sqrt{l}\left[\gamma \exp\left(+\int^x \frac{dx}{l}\right) + \delta \exp\left(-\int^x \frac{dx}{l}\right)\right]. \tag{6.44}$$

8. WKB 近似成立的条件

WKB 近似的理论是比较难于理解的. 我们这里只不加证明地指出按 $\hbar^2$ 的级数展式(6.39)一般不收敛，但它是个渐近的展式，若取有限项数后切断，而 $\hbar$ 又足够小，它就以好的近似给出 S.

为了找 WKB 近似成立的一个判据，我们可以算展式(6.39)中的第二项 $\hbar^2 S_1$. $\hbar^2$ 级的修正在于以因子 $\exp(i\hbar S_1)$ 乘 WKB 解. 若 $\hbar S_1 \ll 1$，其影响可以忽略.

将展式(6.39)代入方程(6.38)，并令两边 $\hbar^2$ 的系数相等，我们得出 S_1 的微分方程

$$2S_0'S_1' = \frac{[(S_0')^{-1/2}]''}{(S_0')^{-1/2}} \equiv \frac{3}{4}\left(\frac{S_0''}{S_0'}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{S_0'''}{S_0'},$$

当 $E > V$ 时，$S_0' = \pm \hbar/\lambda$. 经过一些计算后得

$$\hbar S_1' = \pm \frac{1}{2}\sqrt{\lambda}(\sqrt{\lambda})'' = \pm\left(\frac{1}{4}\lambda'' - \frac{1}{8}\frac{\lambda'^2}{\lambda}\right),$$

由此可得

$$\hbar S_1 = \pm\left(\frac{1}{4}\lambda' - \frac{1}{8}\int^x \frac{\lambda'^2}{\lambda}dx\right), \tag{6.45}$$

当 $E < V$ 时*，我们得到一个用 $l(x)$ 代替 $\lambda(x)$ 的全同的表

* 原文为 $E > V$，显然有误. ——译者注

示式．若

$$\begin{aligned} \lambda'(x) &\ll 1 \quad \text{当 } E > V(x), \\ l'(x) &\ll 1 \quad \text{当 } E < V(x), \end{aligned} \tag{6.46}$$

则条件 $\hbar S_1 \ll 1$ 满足．我们可以把判据(6.46)和经典近似成立的普遍条件(6.26)对照一下．

这个判据完全可以用下述不等式表示

$$\frac{|m\hbar V'|}{|2m(E-V)|^{3/2}} \ll 1, \tag{6.47}$$

式中含有势 $V(x)$ 及其一阶微商．

9. 转折点和联接公式

在绝大多数 WKB 近似的应用中，除了在点

$$E = V(x)$$

的邻域外，条件(6.47)处处被满足．这是经典运动的**转折点**，在这些点处粒子的速度为零并变号．

从数学观点来看，WKB 近似在于用方程

$$y'' + \left(\frac{1}{\lambda^2} - \frac{(\sqrt{\lambda})''}{\sqrt{\lambda}}\right) y = 0 \tag{6.48}$$

代替薛定谔方程

$$y'' + \frac{y}{\lambda^2} = 0$$

[在区域 $E > V$ 及区域 $E < V$ 二种情况中，这里 $\lambda = il$]．事实上我们容易验证表示式(6.42)和(6.44)确实是方程(6.48)的通解．这个方程在点 a 处有一个奇点——奇性为 $(x-a)^{-2}$——，在奇点处，波长变为无穷大，即在每一个转折点处有奇点．在这些点的邻域，用方程(6.48)代替薛定谔方程当然是不合理的．为了得到全部解，必须在转折点周围适当大小的区域内求解薛定谔方程，并把这个解和解(6.42)或(6.44)

光滑联接，解(6.42)和(6.44)是邻域的波函数，这邻域由 WKB 近似成立。

在实用上，对转折点区域中解的特殊形式的了解是不大重要的，只要我们知道怎么把转折点的每一边的 WKB 解联接在一起就可以了。联接问题是个困难的数学问题，它的彻底的而又易于理解的说明可在朗格 (Langer) 的文章中找到(见第II节题注)。朗格提出的解决方案在于不是以方程(6.48)代替薛定谔方程，而是以另外一个在转折点正则，且在每一边都渐近地趋于(6.48)的方程来代替。这个方程的通解在转折点的每一边都渐近地趋于解(6.42)和(6.44)中的一个或另一个。我们将只给出在转折点每一边振荡的 WKB 解和指数的 WKB 解之间的联接公式。

为确定起见，假定：按 $x \gtrless a$，有 $E \gtrless V$（势垒在左边）。通解是两个解 y_1 和 y_2 的线性组合，其渐近形式为

$$x \ll a \qquad\qquad x \gg a$$

$$y_1 \sim \sqrt{l}\,\exp\left(+\int_x^a \frac{dx}{l}\right) \qquad y_1 \sim -\lambda^{1/2}\sin\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right), \tag{6.49}$$

$$y_2 \sim \frac{\sqrt{l}}{2}\exp\left(-\int_x^a \frac{dx}{l}\right) \qquad y_2 \sim -\lambda^{1/2}\cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right). \tag{6.50}$$

让我们按照我们是处在转折点的右边还是左边，用积分

$$(1/2\pi)\int_{x_1}^{x_2}(dx/\lambda)$$

或

$$(1/2\pi)\int_{x_1}^{x_2}(dx/l)$$

来定义包含在一给定间隔 (x_1, x_2) 中的“波长数”。联接公式成立的条件如下：

〈i〉 在转折点，动能 $E-V$ 以 $(x-a)$ 趋于零，并且在一边扩展到至少一个“波长”，最好是几个“波长”的区域内，$E-V$ 在一个好的近似下仍正比于 $(x-a)$。

〈ii〉 在转折点每一边，每一个转折区都和扩展到几个“波长”外的渐近区域相联结，在渐近区中，WKB 近似在严格意义下成立。

用公式(6.49)和(6.50)时必须小心。困难来自这样的事实：除 $A=0$ 这个非常特殊的情况外，在区域 $x \ll a$，解 Ay_1+By_2 有和 Ay_1 一样的渐近形式；不管 A 比 B 小多少，只要 A 不为零，指数增加项 Ay_1 总是比指数减小项 By_2 主要。从而，渐近形式的知识并不足以具体说明解，除非这种形式是指数减小型 (y_2 型)；反之，若系数 A 和 B 只是近似地知道，且若 $|A| \ll |B|$，则任何渐近形式的决定，即使是近似的，也是不可能的。

现在假定在这个渐近区中 $(x \ll a)$ 的 WKB 解已知，问它和那种特殊的振荡 WKB 解联结。这个问题是不能回答的，除非这个解是指数衰减型

$$\frac{1}{2}Bl^{1/2}\exp\left[-\int_x^a (dx/l)\right];$$

在那种情况下，在转折点区域中解当然是 By_2 形式，它在区域 $x \gg a$ 中的行为由公式(6.50)给出。结果可写成

$$\frac{1}{2}\sqrt{l}\exp\left(-\int_x^a \frac{dx}{l}\right) \rightarrow \sqrt{\lambda}\cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda}-\frac{\pi}{4}\right), \quad (6.51)$$

箭头指明联结的方向。

另一方面，假定在振荡区 $(x \gg a)$ 中的 WKB 解已知。这个解是(6.42)的形式，即

$$C\sqrt{\lambda}\cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda}-\frac{\pi}{4}+\varphi\right)$$

(C 和 φ 是复常数). 根据公式(6.49)和(6.50),这是由

$$A \approx C\sin\varphi \quad B \approx C\cos\varphi$$

定义的解的渐近形式. 这里我们必须坚持常数 A 和 B 只能近似地由渐近形式算出. 由于这一事实,若 $|\tan\varphi| \ll 1$,则在 $x \ll a$ 区域中,这个解的渐近形式的任何决定都是不可能的. 若 $|\tan\varphi|$ 不小,它由公式(6.49)给出. 这个结果可写成

$$\sqrt{\lambda}\cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4} + \varphi\right)$$

$$\rightarrow \sin\varphi\sqrt{l}\exp\left(\int_x^a \frac{dx}{l}\right), \tag{6.52}$$

箭头指明联结的方向.

对势垒在右边,即按照 $a \gtrless x$, $E \gtrless V$ 的情况,联接公式(6.51)和(6.52)仍然成立,只需在不等式和在积分限中交换 x 和 a;特别是,箭头的方向必须保持.

10. 势垒贯穿

作为一个例证,我们将用 WKB 方法计算穿过如图 6.3 所示的势垒的透射系数. 在区域 $x < a$ (区域 I) 中,

$$V(x) = V_0 = \text{常数};$$

当 $x > a$, $V(x)$ 是个正的,从正值 $V_a = V(a)$ 单调减小到

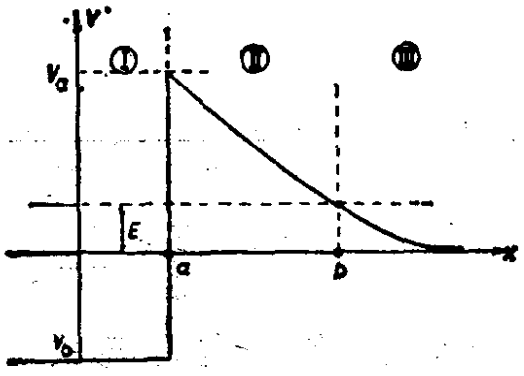

图 6.3 势垒 $V(x)$

$V(\infty)=0$ 的函数.

令 E 是粒子的能量，$b(>a)$ 是 x 轴上使得 $E=V(b)$ 的点. 间断点 a 和转折点 b 将 x 轴分为三个区域 I, II 和 III. 我们假定 WKB 方法可用于区域 II 和 III.

为找透射系数，人们必须构造薛定谔方程的解，它在区域 III 中的渐近形式表示一个纯粹的透射波(沿 x 增加的方向传播). 在该区域中 WKB 解是(6.42)的形式. 我们加于它的渐近形式中的条件决定了这个解（到一个常数内），即

$$y_{\mathrm{III}}=\sqrt{\lambda}\exp\left(i\int_b^x\frac{dx}{\lambda}-i\frac{\pi}{4}\right)\quad(x\gg b)$$

(加上位相 $\pi/4$ 是为了简化以后的计算)，或写成

$$y_{\mathrm{III}}=\sqrt{\lambda}\left[\cos\left(\int_b^x\frac{dx}{\lambda}-\frac{\pi}{4}\right)+i\sin\left(\int_b^x\frac{dx}{\lambda}-\frac{\pi}{4}\right)\right].$$

根据联接公式(6.49)和(6.50)，这个特解以形式

$$y_{\mathrm{II}}=-i\sqrt{l}\exp\left(\int_x^b\frac{dx}{l}\right)\quad(a<x\ll b)$$

$$=-i\sqrt{l}\,e^{\tau}\exp\left(-\int_a^x\frac{dx}{l}\right)$$

扩充到区域 II，其中表达式

$$\tau=\int_a^b\frac{dx}{l}=\int_a^b\frac{\sqrt{2m[V(x)-E]}}{\hbar}dx.$$

令

$$l_a=l(a)=\frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_a-E)}},$$

$$k=\frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}.$$

在区域 I，薛定谔方程的解是(严格地)形式

$$y_{\mathrm{I}}=A\sin[k(x-a)+\delta].$$

常数 A 和 δ 可由波函数及其对数微商在点 a 的连续条件得出，即

$$k\cot\delta = -\frac{1}{l_a},\quad A\sin\delta = -i\sqrt{l_a}\,e^{\tau},\qquad (6.53)$$

y_{I} 是一个入射波和一个反射波之和. 因为 δ 是实数，入射波 $-\frac{i}{2}A\exp[i(k(x-a)+\delta)]$ 有一个等于 $\frac{1}{4}|A|^2\hbar k/m$ 的通量. 根据等式(6.53)

$$\frac{k|A|^2}{4} = \frac{kl_a}{4}\frac{e^{2\tau}}{\sin^2\delta} = \frac{kl_a}{4}e^{2\tau}(1+\cot^2\delta)$$

$$= e^{2\tau}\frac{1+k^2l_a^2}{4kl_a}.$$

由于透射波 y_{III} 的通量等于 $\hbar/m$，透射系数是

$$T = \frac{4kl_a}{1+k^2l_a^2}e^{-2\tau} = 4\frac{\sqrt{(V_a-E)(E-V_0)}}{V_a-V_0}e^{-2\tau}.$$

若 $V(x)$ 在作 WKB 近似的区域 II 和 III 变化足够缓慢[条件(6.47)]，这个计算方法是合理的. 此外，在转折点附近几个“波长”的区域内，$V(x)$ 必须正确地近似于 x 的一个线性函数. 这特别要求势垒至少有几个“波长”的“厚度”，从而 $\tau \gg 2\pi$，结果 T 非常小($\lesssim 10^{-5}$).

11. 势阱的能级

作为第二个应用，我们考虑图 6.4 的势阱，并计算分立谱的能级.

对一给定能量 E，有两个经典运动的转折点 a 和 b. 它们把 x 轴分成三个区域 I、II 和 III. 我们寻找在区域 I 和 III 按指数衰减的 WKB 解，即

$$y_{\mathrm{I}} = \frac{1}{2}c\sqrt{l}\exp\left(-\int_x^a\frac{dx}{l}\right)\quad (x \ll a)$$

$$y_{III} = \frac{1}{2} c' \sqrt{l}\, \exp\left(-\int_b^x \frac{dx}{l}\right) \quad (x \gg b)$$

(c 和 c' 是可调常数)。根据联接公式(6.50)及相应于势垒在右的类似公式，这些函数分别由函数

$$y_a = c\sqrt{\lambda}\, \cos\left(\int_a^x \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right) \quad (a \ll x \ll b)$$

$$y_b(x) = c'\sqrt{\lambda}\, \cos\left(\int_x^b \frac{dx}{\lambda} - \frac{\pi}{4}\right)$$

延续到区域 II 内。若

$$I \equiv \int_a^b \frac{dx}{\lambda} \equiv \int_a^b \frac{\sqrt{2m[E-V(x)]}}{\hbar} dx$$

$$= \left(N + \frac{1}{2}\right)\pi, \qquad (6.54)$$

其中 N 是整数($\geqslant 0$)，则这些函数相等，

$$y_a(x) = y_b(x) = y_{II}.$$

规则(6 54)固定了分立谱的能级。在此情况下，有

$$c' = (-1)^N c.$$

由于 y_I，y_{II} 和 y_{III} 是薛定谔方程的近似解，除了一个易算出的常数外，它们分别是在区域 I，II 和 III 中本征解的良好近似。因而，这个方法同时给出能级以及对应的本征解的渐近

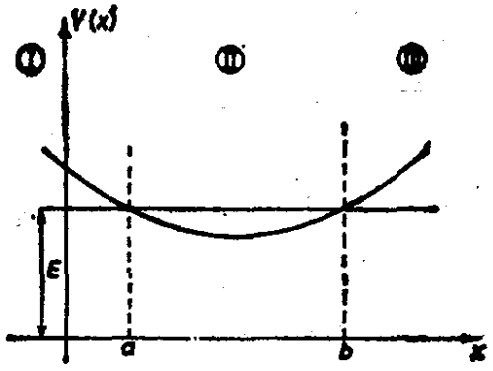

图 6.4 势阱 $V(x)$

表示式，除了在两个转折点 a 和 b 周围的小区域外，这些表示式是处处成立的.

方法成立的条件要求两个转折区扩展到几个波长，在其中 $V(x)$ 是 x 的一个适当的线性函数. 因此这个方法只能对很大的量子数

$$N \gg 1$$

适用.

在某些特许的情况，比方谐振子，这个方法给出所有能级(包括基态)的准确值(见习题 6.6). 必须认为这是偶然的.

可以把量子化规则(6.54)看成是一个驻波条件，区间 (a, b) 必须包括"半整数" $\left(\text{即}\ \frac{1}{2}+\text{整数}\right)$ 个半波长. 事实上，它和玻尔-索末菲量子化规则的不同仅在于"半整数"量子数代替整数量子数. 积分 I 恰好等于对应的经典相空间的作用量积分 $\oint pdq$ 的 $2\hbar$ 倍. 另一方面，作用量积分等于能量小于 E 的点的同相广延 $\omega(E) \equiv \iint\limits_{H<E} dpdq$. 因此规则(6.54)能用

$$\omega(E) \equiv \oint_{H=E} pdq = \left(N+\frac{1}{2}\right)h \qquad (6.55)$$

的形式陈述.

遵照公式 (6.55)，当我们从一个能级到最靠近的上一能级时，相空间的广延 $\omega(E)$ 增加 h. 我们由此导出关于能级分布的重要结果:

以 h 为单位量度的能带 $(E, E+\delta E)$ 的同相广延等于对应的量子体系的局限在该能带内的束缚态数目.

这个结果成立的条件实际上比 WKB 方法的限制小；在实用上，"在大量子数极限下"它总成立. 人们通常假定——在最简单情况下确实已被证明——这个结果也可以用到维数 R 大于 1 的体系，只要取 h^R 作为相广延的单位.

练 习 和 问 题

1. 谐振子的哈密顿量为 $H=(p^2+m^2\omega^2q^2)/2m$. 证明平均值 $\langle q\rangle$, $\langle p\rangle$ 在原点附近作频率为 $\omega/2\pi$ 的正弦振荡; 证明平方偏差 $\bar{\omega}$, χ(§ 3 的记号)在某些(正的)平均值附近以这个周期之半作正弦振荡, 并计算这些值. 在何种条件下 $\bar{\omega}$ 和 χ 保持不变?

2. 证明下述两种情况下: (a)恒定电场; (b)恒定磁场, 表示电磁场中的一个带电粒子的波包中心的运动严格地和经典粒子的运动相同.

3. 证明: 表示恒定电场中的一个带电粒子的波包的"伸展"服从自由波包一样的规律 ($\bar{\omega}=$ 常数, $\chi=$ 时间的二次函数).

4. 用粒子的波函数 $\psi(r)$ 构造函数

$$D(\boldsymbol{R},\boldsymbol{P})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right)\psi^*\times\left(\boldsymbol{R}-\frac{\boldsymbol{r}}{2}\right)\psi\left(\boldsymbol{R}+\frac{\boldsymbol{r}}{2}\right)d\boldsymbol{r},$$

我们把它解释为(维格纳)与波函数有关的经典统计混合的相密度[1]. 证明:

〈i〉 这混合的位置和动量的分布与态 $\psi(r)$ 中量子粒子的相同:

$$\int D(\boldsymbol{R},\boldsymbol{p})d\boldsymbol{p}=|\psi(\boldsymbol{R})|^2,\quad\int D(\boldsymbol{R},\boldsymbol{p})d\boldsymbol{R}=|\varphi(\boldsymbol{p})|^2$$

[$\varphi(p)$ 是动量空间中的波函数];

〈ii〉 若粒子自由, 混合物的时间演变严格地就是同质量的自由经典粒子的统计混合的时间演变.

〈iii〉 找出自由波包的"伸展"规律.

5. 一质量为 m 而能量为 E 的粒子通过慢变势垒 $V(x)$, 用 WKB 方法计算透射系数 T, 假定只存在两个转折点 a 和 b, 且在区间 $(-\infty,+\infty)$的两个边界处 $V(x)$ 趋于小于 E 的极限. 证明

$$T=\exp\left(-2\int_a^b\frac{\sqrt{2m[V(x)-E]}}{\hbar}dx\right).$$

6. 用 WKB 方法计算谐振子的能级(习题 6.1 的哈密顿量). 讨论这方法成立的条件.

---

1) 与真正的经典统计混合的相密度不同, $D(\boldsymbol{R},\boldsymbol{p})$ 可取负值.

第七章　量子论的一般形式

(A) 数 学 框 架

1. 叠加原理和动力学态的矢量表示

在第四和第五章中逐步展开的有关波动力学的整个解释，是以波函数Ψ和Φ作出的位置和动量的几率密度定义作为出发点的，这些波函数分别属于位形空间和动量空间. 我们早已指出这两个函数在量子论中所扮演的对称角色. 这种平行性可以一直推演下去. 的确，关于平均值的基本假设(第五章§3)一样可用动量空间中的运算来表示. 我们能够同样好地在用函数Φ建造的相应表式(4.21)和(4.14)中进行同样的推广，而不是象我们已经做过的那样，分别地推广$F(\boldsymbol{r})$和$G(\boldsymbol{p})$函数形式的平均值表示式(4.13)和(4.20). 对于第五章§3的假设(a)和(b)，我们可以用两个等价的假设来代替它们:

(a') 同任何动力学变量

$$\mathscr{A} = A(q_1, \cdots, q_R; p_1, \cdots, p_R)$$

相联系，有线性算符

$$A\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p_1}, \cdots, i\hbar\frac{\partial}{\partial p_R}; p_1, \cdots, p_R\right).$$

(b') 当体系处在由函数$\Phi(p_1, \cdots, p_R)$定义的动力学态时，这一动力学变量所取的平均值是

$$\langle A\rangle = \frac{\langle \Phi, A\Phi\rangle}{\langle \Phi, \Phi\rangle},$$

表示式右边的两个括号是动量空间的标积：

$$\langle \Phi, A\Phi \rangle = \int \cdots \int \Phi^*(A\Phi) dp_1 \cdots dp_R,$$

$$\langle \Phi, \Phi \rangle = \int \cdots \int \Phi^* \Phi dp_1 \cdots dp_R.$$

假设 (a)，(b) 和假设 (a')，(b') 的等价性建立在傅里叶变换的性质上（参见附录 A）。这一等价性的证明是不困难的；这里我们不做了。

正如函数 Φ 和 Ψ 是同一个动力学态的等价**表示**一样，观测量算符

$$A\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p_1}, \cdots, i\hbar \frac{\partial}{\partial p_R}; p_1, \cdots, p_R\right)$$

和

$$A\left(q_1, \cdots, q_R; \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_1}, \cdots, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_R}\right)$$

是同一个动力学变量的等价**表示**（参见第四章 §5 末的注释）。观测量算符的整个理论能够独立地在这些表象的一个或另一个中发展。我们因而得到量子论的两种等价表述。

如果人们想象波函数 Φ 和 Ψ 代表的是无限维空间中的同一个矢量，这些考虑就变得更加清楚了。因而在第五章中引进的所有概念，诸如函数空间，标积，模方和正交性等等都有了一种非常简单的几何解释。按照这种图象，函数

$$\Psi(q_1, \cdots, q_R)$$

在位形空间各点所取的那些数值是这一矢量沿着某一个正交轴系的分量。类似地，函数 $\Phi(p_1, \cdots, p_R)$ 在动量空间各点所取的数值则是这同一个矢量沿着另一个轴系的分量。再者，在 Ψ 以一个给定的完全正交归一系的本征函数级数展开的表示式(5.14)中的系数 $Cp^{(r)}$ 则是这一矢量沿着第三个轴系的分量。

这就使得我们直接从矢量概念出发来建立整个量子论，而不牵涉到能够作出的特定表象。在这样一种表述的精神上，我们把**动力学态的叠加原理**作为理论的基本原理来阐述；按照这个原理，一个给定的量子化体系的可能动力学态具有任何波动一般具有的下列性质：它们可以线性叠加，因而可以用某个有待定义的线性空间中的一些矢量来表示。所以，各个动力学态都有这一抽象空间中的一个矢量同它相联系。同样，各个动力学变量都有这一空间中的一个线性算符同它相联系。在这种陈述中，理论在形式上比波动力学简单但更为精致；同时也更为一般，因为它对于没有经典模拟的量子体系也能同样好地适用。

现在我们就来陈述量子论的这种一般表述。我们基本上仿效狄拉克的陈述法，利用他为此目的而引入的那种特别方便的记号[1]。这一章专门用来讨论线性代数的概念[2]，它们构成理论的数学框架。用这种形式描述物理现象就构成了第八章的主题。

I. 矢量和算符

2. 矢量空间"刃"矢量

遵循前一节的假说，我们把每个动力学态和一个某种型式的矢量联系起来；仿效狄拉克，我们把这种矢量称为**刃矢量或刃**，并用符号 $|\rangle$ 表示。为了相互区分这些刃，我们把每个符号写全，即在其间或者插入一个特定的字母，或者插入一个或甚至几个能够根据情况取分立或连续值的指标。因此刃

1) P. A. M. Dirac, «量子力学原理».

2) 读者可在 M. H. Stone, 第五章 § 2 最末一注释引文中找到这些问题的严格而又完整的处理. 也见 Paul R. Halmos, *Finite Dimensional Vector Spaces* (Princeton, Princeton University Press 1948.)

u 用符号 $|u\rangle$ 表示.

这些刃组成一个线性的矢量空间：几个刃矢量的任何线性组合也是一个刃矢量. 譬如，让我们取两个刃 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$，以及两个任意的复数 λ_1 和 λ_2. 线性组合

$$|v\rangle = \lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle \qquad (7.1)$$

是刃空间的一个矢量.

类似地，如果 $|\xi\rangle$ 依赖于连续指标 ξ，而 $\lambda(\xi)$ 是 ξ 的一个任意的复函数，则积分

$$|w\rangle = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \lambda(\xi)|\xi\rangle d\xi \qquad (7.2)$$

是刃空间的一个矢量. 我们说，$|w\rangle$ 是刃 $|\xi\rangle$ 的线性组合(或线性叠加)，这显然只是把术语扩展一下.

根据定义，一个给定系综的刃是**线性地独立的**，如果它们中没有一个能够表示成其它刃的线性组合的形式［这种线性组合具有(7.1)型式，或(7.2)型式，或两者的混合］.

如果某个矢量空间至多包含 n 个线性独立的矢量，它就是一个有限维数的空间，维数根据定义等于 n. 在那个空间中选取 n 个特定的、线性独立的矢量；所有其它的矢量都等于这 n 个特定矢量的线性组合.

如果所考虑的矢量空间的线性独立矢量的数目是没有限制的，这个空间就有无限的维数. 这就是希耳伯特空间的情况，正如我们已经见到的那样，这也是波动力学的波函数的情况. 不过我们总是能够这样地选择一套(可数地或非可数地无限的) 线性独立矢量，使得那个空间的任何矢量等于这些"基矢"的线性组合(可能是一个无穷级数或是一个积分).

考虑一套属于某个给定空间 $\mathscr{S}$ 的刃矢量. 由这套刃和这些刃的所有线性组合构成的系综组成矢量空间 $\mathscr{S}'$. $\mathscr{S}'$ 根据定义是这套刃所对应的空间. $\mathscr{S}'$ 的任何刃都属于 $\mathscr{S}$. 人

们说，$\mathscr{S}'$ 是 $\mathscr{S}$ 的一个**子空间**. 如果 $\mathscr{S}$ 空间具有有限的维数 n，$\mathscr{S}'$ 的维数当然是有限的并且小于 n. 如果 $\mathscr{S}$ 具有无限的维数，则对于 $\mathscr{S}'$ 的维数就不存在什么限制了.

3. 对偶空间 "刁"矢量

每一个矢量空间能够和一个对偶矢量空间联系起来，这在线性代数中是众所周知的. 的确，刃 $|u\rangle$ 的任何线性函数 $\chi(|u\rangle)$ 具有表征矢量的叠加性质[1]，因而定义一种新类型的矢量，仿效狄拉克，我们将称之为**刁矢量**或**刁**，并以符号 $\langle|$ 记之. 因此，函数 $\chi(|u\rangle)$ 定义刁 $\langle\chi|$；这一函数对一特定刃 $|u\rangle$ 所取的值是一个数(一般是复数)，我们用符号 $\langle\chi|u\rangle$ 来表示它.

根据定义，如果函数 $\Phi(|u\rangle)$ 对任何 $|u\rangle$ 都等于零，则刁 $\langle\Phi|$ 等于零：

$$\langle\Phi| = 0, \text{ 如 } \langle\Phi|u\rangle = 0, \text{ 对任何 } |u\rangle. \qquad (7.3)$$

类似地，两个刁是相等的，

$$\langle\Phi_1| = \langle\Phi_2|, \text{ 如 } \langle\Phi_1|u\rangle = \langle\Phi_2|u\rangle, \text{ 对任何 } |u\rangle.$$

如果刃空间具有有限的维数，对偶空间就有相同的维数. 如果刃空间的维数无限，对偶空间也有同样的性质.

为了在我们刚才定义的矢量空间中引进度规，我们提出一个假说：在这个空间的矢量和对偶空间的矢量之间存在有一一对应性. 由这个一一对应性联系起来的刁和刃互称为是对方的共轭，并用同一个字母(或相同的指标)来标记. 因此，与刃 $|u\rangle$ 相共轭的刁由记号 $\langle u|$ 表示.

---

1) χ 是刃 $|u\rangle$ 的线性函数，这个性质意味着

$$\chi(\lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle) = \lambda_1\chi(|1\rangle) + \lambda_2\chi(|2\rangle).$$

显然，如果两个函数 χ_1, χ_2 具有这一性质，则这两个函数的任何线性组合 $\mu_1\chi_1 + \mu_2\chi_2$ 也具有这一性质.

我们还假设这一对应性是**反线性的**. 换句话说，与刃

$$|v\rangle = \lambda_1|1\rangle + \lambda_2|2\rangle \tag{7.4}$$

相共轭的刁是

$$\langle v| = \lambda_1^*\langle 1| + \lambda_2^*\langle 2|. \tag{7.5}$$

同样，与刃

$$|w\rangle = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \lambda(\xi)|\xi\rangle d\xi \tag{7.6}$$

相共轭的刁是

$$\langle w| = \int_{\xi_1}^{\xi_2} \lambda^*(\xi)\langle\xi| d\xi. \tag{7.7}$$

因此，刃同刁之间的对应性类似于波动力学的波函数同它们的复共轭之间的对应性. 让我们顺便指出，如果一个刃等于零，则它的共轭刁也是零，反之亦然.

与空间$\mathscr{E}$的子空间$\mathscr{E}'$的刃相共轭的刁的系综组成$\mathscr{E}'$的对偶子空间.

4. 标积

根据定义，刃$|u\rangle$同刃$|v\rangle$的**标积**是一个数（一般是复数）$\langle v|u\rangle$，它也就是与$|v\rangle$**的共轭刁相联系的线性函数**所取的值 $v(|u\rangle)$.

作为这个定义的直接结果，标积$\langle v|u\rangle$关于$|u\rangle$是线性的，关于$|v\rangle$是反线性的.

我们采用下述假说：这个标积具有波动力学的波函数标积的所具有的其它特征性质(第五章§2)，也就是

1) $|v\rangle$同$|u\rangle$的标积是$|u\rangle$同$|v\rangle$的标积的复共轭

$$\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*. \tag{7.8}$$

2) 任何矢量u具有一个实的非负的模方 $N_u \equiv \langle u|u\rangle$

$$\langle u|u\rangle \geq 0. \tag{7.9}$$

当且仅当矢量u等于零时，它才等于零.

从这些性质得出**薛华兹不等式**：对于任何 $|u\rangle$ 和 $|v\rangle$

$$|\langle u|v\rangle|^2 \leqslant \langle u|u\rangle\langle v|v\rangle. \qquad (7.10)$$

当且仅当矢量 $|u\rangle$ 和 $|v\rangle$ 是共线的(即成正比的)时，这个式子才取等号。

前面几个公理必须补充一个假设：刃矢量的空间 $\mathscr{E}$（它的对偶空间，刁空间也是一样）是完全的和可分离的(参见第五章§2)；**它是一个希耳伯特空间。**

根据定义，两个矢量是**正交的**，如果它们的标积等于零。$\mathscr{E}$ 的两个子空间 $\mathscr{E}_1$ 和 $\mathscr{E}_2$ 是正交的，如果在一个空间中的各个矢量正交于另一个空间中的各个矢量。显然，$\mathscr{E}_1$ 和 $\mathscr{E}_2$ 没有共同的矢量；的确，$\mathscr{E}_1$ 和 $\mathscr{E}_2$ 的任何共同矢量只能是零，因为它同自己正交，就有一个等于零的模方。

正交于 $\mathscr{E}_1$ 的矢量的系综组成一个正交于 $\mathscr{E}_1$ 的子空间 $\mathscr{E}_1^{\times}$，$\mathscr{E}_1$ 的**互补子空间**。$\mathscr{E}_1^{\times}$ 简化为零，如果子空间 $\mathscr{E}_1$ 与空间 $\mathscr{E}$ 本身相重合。我们能够证明（参见本章§1末一注释），**$\mathscr{E}$ 的任何矢量可以用一种唯一的方式写作一个位于 $\mathscr{E}_1$ 的矢量和一个位于它的互补空间的矢量之和：**

$$|u\rangle = |u_1\rangle + |u_1^{\times}\rangle.$$

根据定义 $|u_1\rangle$ 是 $|u\rangle$ 在子空间 $\mathscr{E}_1$ 中的**投影**。在第II节中，我们将有机会再来详细地讨论这个投影概念。

在我们关于标积的所有考虑中，不言自明地假设矢量(刃或刁)具有有限的模方，免得关于矢量模方的公理失却全部意义。只要认识到这一点，所考虑的刃矢量空间 $\mathscr{E}$ 就是一个希耳伯特空间。我们已经在第五章中见到，能够代表动力学态的矢量必须实际上具有有限的模方，但是在本征值问题中，连续谱的处理需要引进无限长度的本征矢。所以，我们必须在我们的矢量空间中把无限模方的、(至少)依赖于一个连续指标的矢量 $|\xi\rangle$ 也包括进来，并把标积的概念扩展于这一类矢

量.

我们假设 $|\xi\rangle$ 同任何有限模方的矢量 $|u\rangle$ 的标积:

$$\langle u|\xi\rangle$$

是有限的; 再者, 这一标积关于 $|\xi\rangle$ 是线性的, 关于 $|u\rangle$ 是反线性的. 我们还类似地定义标积 $\langle\xi|u\rangle$, 而作为公理规定

$$\langle\xi|u\rangle = \langle u|\xi\rangle^*.$$

另一方面, 两个 $|\xi\rangle$ 型矢量的标积可能不收敛. 特别是, $|\xi\rangle$ 的模方是无限的. 但是我们假设, 本征微分

$$|\xi, \delta\xi\rangle \equiv (\delta\xi)^{-\frac{1}{2}} \int_{\xi}^{\xi+d\xi} |\xi'\rangle d\xi' \qquad (7.11)$$

具有正定的模方; 当 $\delta\xi \to 0$ 时, 它趋向于一个有限的极限. 严格地说来, 矢量 $|\xi\rangle$ 不属于空间 $\mathscr{E}$; 但是它的本征微分, 以及更为一般地, 型如 (7.2) 的线性组合确实属于这一空间, 并且满足希耳伯特空间矢量的所有有关公理.

5. 线性算符

一旦我们定义了刃矢量的空间, 我们就能够定义这个空间的线性算符(参见第二章 § 11).

让我们假定, 对于矢量空间的各个刃 $|u\rangle$, 各有某一个刃 $|v\rangle$ 同它相对应: 人们说 $|v\rangle$ 是由某一个算符作用在刃 $|u\rangle$ 上而产生的. 如果这一对应性还是线性的, 则如此定义的这个算符就是一个**线性算符** A. 我们写出

$$|v\rangle = A|u\rangle.$$

如果刃 $|v\rangle$ 对于任何 $|u\rangle$ 都是零, 则这样一个算符等于零.

一个算符 A 为零的必要和充分条件是, 对于任何 $|u\rangle$ 有

$$\langle u|A|u\rangle = 0.$$

这一性质的证明没有特别大的困难, 不在这里给出. 我们立刻由此得出推论:

两个算符 A 和 B 相等的必要和充分条件是：对于任何 $|u\rangle$ 有

$$\langle u|A|u\rangle = \langle u|B|u\rangle. \tag{7.12}$$

关于算符的一些主要代数运算，例如用一个常数相乘，求和以及求积，早已经定义过了（第二章 § 11）。线性算符的和是结合的和交换的。它们的积是结合的，关于和是分配的，但它不是交换的——线性算符的代数同普通代数的根本差别正是在这一点上。让我们记住，两个线性算符 A 和 B 的对易子是用符号

$$[A, B] \equiv AB - BA$$

表示的。对易子代数的主要性质已在第五章 § 17 研究过了[方程(5.63)至(5.66)]；它们在此全部有效，现在不再重新检查。

注意刃和一个给定常数 C 相乘同样定义一个线性算符。这个算符 C 与所有的线性算符对易：$[A, C] = 0$。

特别是，用 1 相乘所定义的是"恒等"算符。

如果上面所定义的 $|u\rangle$ 和 $|v\rangle$ 之间的对应性是倒易的，则它定义两个线性算符 A 和 B：

$$|v\rangle = A|u\rangle, \quad |u\rangle = B|v\rangle. \tag{7.13}$$

根据定义这些算符互为**逆算符**。我们也可以说，算符 A 和 B 互为逆算符，如果它们同时满足方程

$$AB = 1, \quad BA = 1. \tag{7.14}$$

这两个定义是等价的。

一个给定算符 A 的逆算符并不总是存在的。当它存在时，我们通常用符号 A^{-1} 来表示。利用定义方程 (7.14)，我们能够容易地证明下面这个性质：

如果两个算符 P 和 Q 各自具有一个逆算符，则积 PQ 有一个逆算符，而且有

$$(PQ)^{-1} = Q^{-1}P^{-1} \tag{7.15}$$

[注意(7.15)右边两个因子次序颠倒了].

一旦我们知道了线性算符 A 在刃矢量空间中的作用，它在对偶矢量空间中的作用可以明确地定义如下：刁 $\langle\chi|$ 被给定以后，标积 $\langle\chi|(A|u\rangle)$ 显然是 $|u\rangle$ 的线性函数，因为算符 A 是线性的. 设 $\langle\eta|$ 是由这个函数定义的刁；对于各个刁 $\langle\chi|$，各相应地有一个刁 $\langle\eta|$. 显而易见，这一对应性是线性的(标积的性质). 我们说，$\langle\eta|$ 是由 A 对 $\langle\chi|$ 的运算产生的，并且写出

$$\langle\eta| = \langle\chi|A. \tag{7.16}$$

遵循这一定义，我们得出标积之间的重要恒等式

$$(\langle\chi|A)|u\rangle \equiv \langle\chi|(A|u\rangle). \tag{7.17}$$

因而在这两个表示式中的括号是不必要的. 从此以后，我们将用 $\langle\chi|A|u\rangle$ 来不加区别地表示这两个相等的标积中的一个或另一个.

借助于恒等式(7.17)，我们能够定义作用于刁的线性算符的各种代数运算. 特别是，对于三种基本运算，我们有：

(*a*) **用一复常数 C 乘 A**：

$(CA)|u\rangle = C(A|u\rangle)$，因此 $\langle\chi|(CA) = C(\langle\chi|A)$；

(*b*) 算符的**和** $S = A + B$：

$S|u\rangle = A|u\rangle + B|u\rangle$，因此 $\langle\chi|S = \langle\chi|A + \langle\chi|B$；

(*c*) 算符的**积** $P = AB$：

$P|u\rangle = A(B|u\rangle)$，因此 $\langle\chi|P = (\langle\chi|A)B$.

我们总是沿用惯例，把刁放在算符的左面，刃放在算符的右面；关于线性算符的代数操作在这两种情况下是一样的.

当使用前述记号时，某些算符特别容易操纵：它们是一些 $|u\rangle\langle v|$ 型的算符，它们对任何刃 $|w\rangle$ 的作用产生一个正比于 $|u\rangle$ 的刃，也就是刃 $|u\rangle\langle v|w\rangle$ (比例常数 $\langle v|w\rangle$)，

而它们对任何刁 $\langle w|$ 的作用产生一个正比于 $\langle v|$ 的刁，也就是刁 $\langle w|u\rangle\langle v|$. 算符 $|u\rangle\langle v|$ 是没有逆算符的。

6. 两个矢量空间的张量积[1)]

为了完成矢量代数的这一引言，我们还必须定义一种常用的运算，也就是两个矢量空间的张量积。

这种运算的目的和意义将由下面这个例子阐明。

让我们考虑一个两粒子的量子体系。与粒子 1 有关的波函数 $\psi_1(r_1)$ 同与粒子 2 有关的波函数 $\psi_2(r_2)$ 的积 $\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)$ 代表这一体系的一种非常特殊的动力学态(第四章 §6)。最为一般的波函数 $\psi(r_1, r_2)$ 不具有这一形式，但总是能够写成这一形式的一些波函数的线性组合。许多做法中的一个是，把 ψ 用一个完全正交归一的、r_1 的函数级数系展开；既然展开系数是 r_2 的函数，这个级数的各项实际上具有所需的形式。总体系的波函数的空间因而是由与各个部分体系有关的波函数 $\psi_1(r_1)$ 和 $\psi_2(r_2)$ 的积的线性组合组成的。我们说，函数 $\psi(r_1, r_2)$ 的空间是函数 $\psi_1(r_1)$ 的空间和函数 $\psi_2(r_2)$ 的空间的张量积。

事实上，积 $\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)$ 在总体系的研究中占据非常特殊的地位。的确，粒子 1 的动力学变量是由作用在看作是 r_1 的函数的波函数 $\psi(r_1, r_2)$ 上的观测算符 A_1 表示的；粒子 2 的动力学变量则由作用在看作是 r_2 的函数的、这同一个波函数上的观测算符 A_2 表示。显然，观测算符 A_1 中的各个都与观测算符 A_2 中的各个对易。当 ψ 有 $\psi_1(r_1)\psi_2(r_2)$ 的形式时，这种型式的观测算符的作用特别简单；因此 $A_1(\psi_1\psi_2)$ 等于 $(A_1\psi_1)$ 同 ψ_2 的积。

---

1) 这一型式的积通常称为克朗内克积。

上述评述最为一般地适用于任何能够被剖析为两个较简单体系的量子化体系.

用我们在这一章中正在展开的抽象语言来说，张量积是以下述方式定义的. 设 $\mathscr{S}_1$, $\mathscr{S}_2$ 是两个矢量空间. 在一个空间取刃 $|u\rangle^{(1)}$，在另一个空间取刃 $|u\rangle^{(2)}$，我们能够组成刃积 $|u\rangle^{(1)}|u\rangle^{(2)}$. 这一相乘是交换的，我们使用记号

$$|u^{(1)}u^{(2)}\rangle \equiv |u\rangle^{(1)}|u\rangle^{(2)}. \tag{7.18}$$

再者，我们假设它关于和是分配的. 如果

$$|u\rangle^{(1)} = \lambda|v\rangle^{(1)} + \mu|w\rangle^{(1)},$$

则

$$|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = \lambda|v^{(1)}u^{(2)}\rangle + \mu|w^{(1)}u^{(2)}\rangle.$$

类似地，如果

$$|u\rangle^{(2)} = \lambda|v\rangle^{(2)} + \mu|w\rangle^{(2)},$$

则

$$|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = \lambda|u^{(1)}v^{(2)}\rangle + \mu|u^{(1)}w^{(2)}\rangle.$$

刃 $|u^{(1)}u^{(2)}\rangle$ 张成一个新的矢量空间，即空间 $\mathscr{S}^{(1)}\otimes\mathscr{S}^{(2)}$，我们称之为**矢量空间 $\mathscr{S}^{(1)}$ 和 $\mathscr{S}^{(2)}$ 的张量积**. 如果后者分别具有 N_1 和 N_2 维，积空间的维数是 N_1N_2. 然而，张量积也可以在那些具有无限维数的空间进行，如由本节开始所给的那个例子所示.

对于空间 $\mathscr{S}^{(1)}$ 的各个线性算符 $A^{(1)}$，有一个积空间的线性算符同它相对应，我们就用同样的符号来记它. $A^{(1)}$ 对任何刃 $|u\rangle^{(1)}$ 的作用是已知的，也就是

$$A^{(1)}|u\rangle^{(1)} = |v\rangle^{(1)},$$

它对积空间的特定刃 $|u^{(1)}u^{(2)}\rangle$ 的作用由

$$A^{(1)}|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = |v^{(1)}u^{(2)}\rangle \tag{7.19}$$

定义，而它对积空间的一般刃的作用则根据线性叠加从它推演出来. 同样，空间 $\mathscr{S}^{(2)}$ 的每个线性算符 $A^{(2)}$ 也允许在积空

间定义一个线性算符.

各个算符 $A^{(1)}$ 与算符 $A^{(2)}$ 中的各个对易:

$$[A^{(1)},\ A^{(2)}] = 0.$$

利用算符 $A^{(1)}$ 和 $A^{(2)}$ 本身的定义,人们的确证实,$[A^{(1)}, A^{(2)}]$ 对张成积空间的各个矢量 $|u^{(1)}u^{(2)}\rangle$ 的作用产生出一个等于零的结果:

$$A^{(1)}A^{(2)}|u^{(1)}u^{(2)}\rangle = |v^{(1)}v^{(2)}\rangle = A^{(2)}A^{(1)}|u^{(1)}u^{(2)}\rangle.$$

在积空间中,人们能够定义刃同刁之间的对应性,线性算符对刁的作用,等等. 上面阐述的那些代数规则对积空间中的所有代数运算都保持有效. 这些结果的证明是不困难的,这里就不做了.

II. 厄密算符 投影算符和观测算符

7. 伴算符和共轭关系

从刁和共轭刃之间的一一对应性,我们能够导出线性算符之间的一个类似的共轭关系.

设 A 是一个线性算符. 设 $|v\rangle$ 是与刁 $\langle u|A$ 相共轭的刃. $|v\rangle$ 反线性地依赖于刁 $\langle u|$; 所以它是 $|u\rangle$ 的一个线性函数. 这一线性的对应性定义一个线性算符,名为 A 的**厄密共轭**算符,或 A 的**伴算符**,人们用符号 $A^\dagger$ 来表示它:

$$|v\rangle = A^\dagger|u\rangle.$$

显而易见,如 $A = 0$,则 $A^\dagger = 0$,反之亦然.

由于 $A^\dagger|u\rangle$ 是与刁 $\langle u|A$ 相共轭的刃,这个刃同一个任意给定的刁 $\langle t|$ 的标积是 $|t\rangle$ 同 $\langle u|A$ 的标积的复共轭(性质(7.8)). 所以我们有非常重要的共轭关系

$$\langle t|A^\dagger|u\rangle = \langle u|A|t\rangle^*. \qquad (7.20)$$

既然这一关系对任何 $|u\rangle$ 和 $|t\rangle$ 都成立,与 $\langle t|A^\dagger$ 相

共轭的刃必然等于 $A|t\rangle$. 结果，$A^\dagger$ 的厄密共轭就是算符 A 本身. 厄密共轭是一种**倒易**运算:

$$(A^\dagger)^\dagger = A. \tag{7.21}$$

以一种相似的方式,我们得到下述基本关系:

$$(CA)^\dagger = C^*A^\dagger \tag{7.22}$$

$$(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \tag{7.23}$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \tag{7.24}$$

注意在积 AB 的伴的表示式 (7.24) 中的两个算符次序颠倒了. 再者,算符 $|u\rangle\langle v|$ 的伴算符是

$$(|u\rangle\langle v|)^\dagger = |v\rangle\langle u|. \tag{7.25}$$

算符的厄密共轭犹如矢量的刁同刃的共轭，或是普通数的复共轭. 所有这些共轭运算在量子论的形式中都起着重要的作用. 狄拉克记号使得我们有可能容易对任何代数表示式进行这些运算. 我们只须遵从下面这个非常简单的规则: **把每处的数代之以它们的复共轭,每处的刁代之以其共轭刃,**反之亦然,**再把每处的算符代之以它们的厄密共轭,并颠倒出现在各项中的各种符号的次序,也就是说,颠倒那些刁,刃和算符的次序.**

这一规则是性质(7.20),(7.24)和(7.25)的明显推广. 让我们给出它的几个应用例子. 算符 $AB|u\rangle\langle v|C$ 的厄密共轭是 $C^\dagger|v\rangle\langle u|B^\dagger A^\dagger$; 刃 $AB|u\rangle\langle v|C|w\rangle$ 以

$$\langle w|C^\dagger|v\rangle\langle u|B^\dagger A^\dagger$$

作为它的共轭刁; $\langle t|AB|u\rangle\langle v|C|w\rangle$ 的复共轭是

$$\langle w|C^\dagger|v\rangle\langle u|B^\dagger A^\dagger|t\rangle,$$

等等.

8. 厄密(或自伴)算符　正定厄密算符么正算符

根据定义,一个线性算符 H **是厄密的,**如果它是它自己的

伴：

$$H = H^\dagger.$$

一个算符 I 是**反厄密的**，如果它同它的伴的符号相反：

$$I = -I^\dagger.$$

从这些定义，人们容易推导出下述性质.

任何线性算符能够唯一地表成两个算符之和的形式，一个是厄密的，另一个是反厄密的

$$A = H_A + I_A \tag{7.26}$$

而且有

$$H_A = \frac{A + A^\dagger}{2}, \quad I_A = \frac{A - A^\dagger}{2}. \tag{7.27}$$

带**实**系数的厄密算符的任何线性组合是**厄密的**. **两个厄密算符 H 和 K 的积 HK 并非必然是厄密的**，因为按照方程 (7.24)

$$(HK)^\dagger = KH, \tag{7.28}$$

当且仅当 H 和 K 对易时，HK 才是厄密的. 再者，对易子 $[H, K]$ 是反厄密的，而积 HK 按(7.26)的分解写成

$$HK = \frac{HK + KH}{2} + \frac{1}{2}[H, K]. \tag{7.29}$$

算符 $|a\rangle\langle a|$ 是一个特殊的厄密算符. 用两个截然不同的刃 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$，我们能够组成两个厄密算符 $|a\rangle\langle a|$ 和 $|b\rangle\langle b|$，但是这两个算符的积 $|a\rangle\langle a|b\rangle\langle b|$ 正比于 $|a\rangle\langle b|$，后者不是厄密的；所以这个积不是厄密的(除非 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$ 是正交的，在这种情况下，这个积等于零).

根据定义，**厄密算符 H 是正定的**，如果

$$\langle u|H|u\rangle \geqslant 0, \quad \text{对任何 } |u\rangle.$$

算符 $|a\rangle\langle a|$ 是一个特殊的正定厄密算符.

这一型式的算符具有一些值得注意的性质(参见习题 7.7

和 7.8). 特别是，如果H是正定厄密的，我们有广义的薛华兹不等式：

$$|\langle u|H|v\rangle|^2 \leqslant \langle u|H|u\rangle\langle v|H|v\rangle,$$

它对任何 $|u\rangle$ 和 $|v\rangle$ 都成立；当且仅当 $H|u\rangle$ 和 $H|v\rangle$ 成正比时，上式才取等号. 此外，等式

$$\langle u|H|u\rangle = 0$$

必然意味着：$H|u\rangle = 0$.

一个算符U是**么正的**，如果它是它自己的伴的逆算符：

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1.$$

两个么正算符U和V的积 $W = UV$ 是一个么正算符. 事实上[性质(7.15)和(7.24)]，

$$W^{-1} = V^{-1}U^{-1} = V^\dagger U^\dagger = W^\dagger.$$

9. 本征值问题和观测算符

设A是一个线性算符. 根据定义如果

$$A|u\rangle = a|u\rangle,$$

则复数a是A的一个本征值，而刃 $|u\rangle$ 是联系于a的一个本征刃. 类似地，如果

$$\langle u'|A = a'\langle u'|.$$

则$\langle u'|$是联系于本征值a'的一个本征刁.

如果 $|u\rangle$ 是A的一个本征刃，这一刃矢量的任何倍数 $c|u\rangle$ 是A的一个具有相同本征值的本征刃；如果存在有几个线性独立的本征值同为a的本征刃，则这些刃的任何线性组合也是A的一个具有这一本征值的本征刃. 换句话说，A的一些具有给定本征值a的本征刃的系综组成一个矢量空间；我们将称之为**本征值a的子空间**. 如果这一子空间只有一维，就说本征值是单的或不简并的. 如果不是，我们就有简并，简并度根据定义是这一子空间的维数；简并度可以是无限的.

类似的评论适用于A的本征刃。如果A是任意的，在刃的本征值问题同刁的本征值问题之间没有简单的联系。然而，如果A是厄密的——这是唯一有实际兴趣的情况，这两类问题就是密切相关的。

如果A是**厄密的**，我们事实上有下述性质：

(i) 这两个本征值谱是全同的；

(ii) 所有的本征值都是实数；

(iii) 与A的一个本征刃相共轭的任何刁是一个具有相同本征值的本征刁，**反之亦然**；换句话说，一个给定本征值的本征刁的子空间是同一本征值的本征刃的子空间的对偶空间。

性质 (ii) 的证明，除了记号以外，同第五章 § 5 中所给的证明一样。如果 $A = A^\dagger$，又如果 $A|u\rangle = a|u\rangle$，则

$$\langle u|A|u\rangle = a\langle u|u\rangle,$$

而且既然

$$\langle u|A|u\rangle^* = \langle u|A^\dagger|u\rangle = \langle u|A|u\rangle,$$

可见 $\langle u|A|u\rangle$ 是实的，同 $\langle u|u\rangle$ 一样；因此 a 是实的。对于一个属于刁的本征值也能给出类似证明。

再者，因为任何本征值是实的，$A|u\rangle = a|u\rangle$ 必然意味着 $\langle u|A = a\langle u|$，反之亦然；我们容易由此推导出性质 (i)和 (iii)。

厄密算符的本征矢的另一个重要性质是具有不同本征值的一些本征矢的**正交**性质。这里的证明同样仿照第五章 § 5 的做法。如果 $|u\rangle$ 和 $|v\rangle$ 分别是本征值为 a 和 b 的两个本征刃，

$$A|u\rangle = a|u\rangle, \quad \langle v|A = b\langle v|.$$

把第一个方程用 $\langle v|$ 左乘（标积），第二个方程用 $|u\rangle$ 右乘，再逐项相减，我们得到

$$0 = (a - b)\langle v|u\rangle.$$

结果，如果 $a \neq b$，

$$\langle v|u\rangle = 0.$$

在所有这些论证中，不言自明地假设这些本征矢属于希耳伯特空间．用这种方法阐述时，本征值问题受到太多限制，不能满足量子论的所有需要．我们必须把受制于第七章§4末所述条件的那些无限模方的矢量也看作是可以接受的本征解．这些矢量是同**连续谱**的本征值相联系的．

连续谱的困难已在第五章中详细讨论过，我们不再重新讨论．这一讨论的主要结果容易翻译为我们的新语言．性质(i)，(ii)和(iii)在连续谱的情况下保持正确．至于正交性质，它是便于用狄拉克 δ "函数"来表达的．

作为一个例子，让我们回到第五章§9的厄密算符，它的本征值谱是由一个分立本征值 a_n 的系列和一个连续部分 $a(\nu)$ 构成的．本征值为 a_n 的本征函数 $\varphi_n^{(r)}$ 表示一些正交归一刃，我们分别用符号 $|nr\rangle$ 来表示它们．同样，本征函数 $\varphi^{(r)}(\nu,\rho)$ 表示刃 $|\nu\rho r\rangle$．这些不同的刃之间的正交归一关系写成[方程(5.38)]：

$$\langle nr|n'r'\rangle = \delta_{nn'}\delta_{rr'}, \tag{7.30a}$$

$$\langle nr|\nu'\rho'r'\rangle = 0, \tag{7.30b}$$

$$\langle \nu\rho r|\nu'\rho'r'\rangle = \delta(\nu-\nu')\delta(\rho-\rho')\delta_{rr'}. \tag{7.30c}$$

如果这些矢量的系综张成整个空间，换句话说，如果任何有限模方的矢量能够用这些矢量的级数(或积分)展开，就说这些矢量组成一个**完全**系，而这个厄密算符被称为是一个**观测算符**．只有观测算符是 $\mathscr{E}$ 空间中能够有物理解释的厄密算符．

识别一个给定的厄密算符是不是一个观测算符，这样一个重要问题在大多数情况下是一个困难的数学问题．然而，对于一类非常重要的算符，也就是对于那些投影算符(或简称

为投影子)，这个问题是容易解决的。

10. 投影子(投影算符)

设 $\mathscr{S}$ 是希耳伯特空间 $\mathscr{E}$ 的一个子空间，而 $\mathscr{S}^\times$ 是它的互补子空间。任何刃 $|u\rangle$ 在 $\mathscr{S}$ 中有一个投影，在 $\mathscr{S}^\times$ 中有一个投影；这两个矢量，$|u_S\rangle$ 和 $|u_S^\times\rangle$，是唯一地定义的，而我们有

$$|u\rangle = |u_S\rangle + |u_S^\times\rangle. \tag{7.31}$$

对于各个刃 $|u\rangle$，有且仅有一个刃 $|u_S\rangle$ 同它相对应。容易看出这一对应是线性的。如此定义的线性算符 P_S 称为**在子空间 $\mathscr{S}$ 的投影子(或投影算符)**

$$P_S|u\rangle = |u_S\rangle.$$

它是一个厄密算符。的确，我们对任何 $|v\rangle$ 都有

$$\langle u|P_S|v\rangle = \langle u|v_S\rangle = \langle u_S|v_S\rangle = \langle u_S|v\rangle,$$

因此

$$\langle u|P_S = \langle u_S|.$$

P_S 显然是一个总共具有两个本征值 0 和 1 的观测算符，它们的子空间分别是 $\mathscr{S}^\times$ 和 $\mathscr{S}$。

再者，既然对任何 $|u\rangle$，都有

$$P_S^2|u\rangle = P_S(P_S|u\rangle) = P_S|u_S\rangle = |u_S\rangle = P_S|u\rangle,$$

可见 P_S 满足算符方程

$$P_S^2 = P_S.$$

反之，**任何满足方程**

$$P^2 = P \tag{7.32}$$

的厄密算符 P 是一个投影子。这个算符所投影的子空间 $\mathscr{S}$ 是它的本征值 1 的子空间。

的确，如果 p 是这个算符的一个本征值，而 $|p\rangle$ 是相应本征矢中的一个，

$$P|p\rangle = p|p\rangle.$$

按照方程(7.32)

$$0 = (P^2 - P)|p\rangle = (p^2 - p)|p\rangle,$$

既然刃 $|p\rangle$ 不等于零，那么 $p^2 - p = 0$. 换句话说，P 的可能的本征值只能等于 0 或 1.

此外，P 是一个观测算符，因为任何矢量 $|u\rangle$ 能够写成 P 的一些本征矢之和的形式. 的确，我们有

$$|u\rangle = P|u\rangle + (1 - P)|u\rangle. \tag{7.33}$$

矢量 $P|u\rangle$ 是 P 的一个本征值为 1 的本征刃，因为根据方程(7.32)，

$$P^2|u\rangle \equiv P(P|u\rangle) = P|u\rangle.$$

矢量 $(1 - P)|u\rangle$ 是 P 的一个本征值为 0 的本征矢，因为同样有

$$P(1 - P)|u\rangle = (P - P^2)|u\rangle = 0.$$

我们能够容易地证实，矢量 $P|u\rangle$ 和 $(1 - P)|u\rangle$ 是正交的，所以它们的模方之和等于 $|u\rangle$ 的模方. 这两个矢量因而当然具有有限的模方：它们属于希耳伯特空间.

设 $\mathscr{S}$ 是 P 的本征值为 1 的那些本征矢的子空间. 与 $\mathscr{S}$ 互补的子空间 $\mathscr{S}^\times$，即与子空间 $\mathscr{S}$ 的矢量正交的那些矢量的子空间，是由 P 的本征值为 0 的那些本征矢的总数构成的. 根据分解式(7.33)，P 对任意矢量 $|u\rangle$ 的作用给出这一矢量在 $\mathscr{S}$ 上的投影. 所以 P 正是在 $\mathscr{S}$ 上的投影子. 显而易见，$(1 - P)$ 是在 $\mathscr{S}^\times$ 上的投影子.

以前已述及的、与 $P|u\rangle$ 的模方有关的那个性质能够重写为

$$0 \leqslant \langle u|P|u\rangle \leqslant \langle u|u\rangle. \tag{7.34}$$

如 $\langle u|P|u\rangle = 0$，则 $|u\rangle$ 完全落在 $\mathscr{S}^\times$ 内.

如 $\langle u|P|u\rangle = \langle u|u\rangle$，则 $|u\rangle$ 完全落在 $\mathscr{S}$ 内.

两种极端情况值得提及. 当投影空间 $\mathscr{S}$ 就是空间 $\mathscr{E}$ 本身时，任何刃 $|u\rangle$ 是它自己的投影：人们对任何 $|u\rangle$，有

$$\langle u|P|u\rangle = \langle u|u\rangle;$$

互补空间 $\mathscr{S}^{\times}$ 为零. 这是 $P = 1$ 的情况.

另一种极端情况是空间 $\mathscr{S}$ 等于零的情况(互补空间 $\mathscr{S}^{\times}$ 因而是空间 $\mathscr{E}$ 本身)：对任何 $|u\rangle$，$\langle u|P|u\rangle = 0$. 这是 $P = 0$ 的情况.

为了说明这一点，我们给出投影子的几个典型例子.

设 $|a\rangle$ 是一个归一的刃. 它张成一个一维子空间. 让我们用 $|u_a\rangle$ 来表示一个任意矢量 $|u\rangle$ 在这个子空间的投影：

$$|u\rangle = |u_a\rangle + |u_a^{\times}\rangle. \tag{7.35}$$

根据假说

$$\langle a|u_a^{\times}\rangle = 0 \quad |u_a\rangle = c|a\rangle.$$

用 $\langle a|$ 左乘(标积)方程(7.35)的两边，我们有 $c = \langle a|u\rangle$. 因此

$$|u_a\rangle = |a\rangle\langle a|u\rangle.$$

结果，在 $|a\rangle$ 上的投影子是算符

$$P_a \equiv |a\rangle\langle a| \quad (\langle a|a\rangle = 1). \tag{7.36}$$

这一型式的投影算符将被称为是**基本的**.

现在考虑一套正交归一矢量 $|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |N\rangle$

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn} \quad (m, n = 1, 2, \cdots, N).$$

这些矢量张成其所属刃矢量空间的某一个子空间 $\mathscr{E}_1$(N 维). 我们容易证实，算符

$$P_1 \equiv \sum_{m=1}^{N} |m\rangle\langle m| \tag{7.37}$$

是在 $\mathscr{E}_1$ 上的投影子.

迄今所考虑的所有矢量都具有有限的模方. 但是人们也可以构思一套刃矢量 $|\xi\rangle$，它依赖于在某个域 (ξ_1, ξ_2) 变化

的连续指标 ξ. 我们假设由这些刃组成的本征微分具有有限的模方，并且属于所考虑的希耳伯特空间. 所以，这些矢量的任何线性组合也属于希耳伯特空间. 这些线性组合的系综组成总希耳伯特空间的某一个子空间 $\mathscr{S}_2$: $\mathscr{S}_2$ 是矢量 $|\xi\rangle$ 所张成的子空间. 让我们进一步假定这些矢量满足"正交归一"条件

$$\langle\xi'|\xi\rangle = \delta(\xi' - \xi). \tag{7.38}$$

显然

$$P_2 = \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\xi\rangle d\xi\langle\xi| \tag{7.39}$$

是在 $\mathscr{S}_2$ 上的投影子. 的确，由 P_2 作用在一个任意选择的矢量 $|u\rangle$ 上而得到的

$$P_2|u\rangle = \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\xi\rangle d\xi\langle\xi|u\rangle$$

是一定属于 $\mathscr{S}_2$ 内的，因为它是矢量 $|\xi\rangle$ 的线性组合；差 $(1-P_2)|u\rangle$ 是与这套 $|\xi\rangle$ 的所有矢量正交的：

$$\langle\xi'|(1 - P_2)|u\rangle = \langle\xi'|u\rangle - \int_{\xi_1}^{\xi_2}\langle\xi'|\xi\rangle d\xi\langle\xi|u\rangle$$

$$= \langle\xi'|u\rangle - \int_{\xi_1}^{\xi_2}\delta(\xi' - \xi)d\xi\langle\xi|u\rangle = 0,$$

因而与 $\mathscr{S}_2$ 正交.

11. 投影子代数

希耳伯特空间的投影子由于它们的非常简单的几何解释而引起人们巨大的兴趣[1]. 我们将在这里给出这些算符的主要代数性质. 鉴于这些证明的极大部分是基本的，我们将只阐述这些证明的原理而把完成证明的任务留给读者.

---

1) 用 Von Neumann 方法对连续谱的处理是基于对希耳伯特空间的投影子性质的系统研究；人们用这种方法成功地克服了连续谱的所有困难，甚至不必离开希耳伯特空间；参见 Von Neumann，第五章 § 19 第一个注释.

设 P_i, P_j 是在希耳伯特空间 $\mathscr{S}$ 的子空间 $\mathscr{S}_i$, $\mathscr{S}_j$ 上的投影子. 为了使得**积**

$$P_{[ij]} \equiv P_iP_j$$

也是一个投影子，必要和充分的条件是 P_i 和 P_j 对易.

这个条件是必要的，否则 $P_{[ij]}$ 将不是厄密的；也是充分的，因为在这种情况下，$P_{[ij]}$ 是厄密的，而

$$P^2_{[ij]} = P_iP_jP_iP_j = P_i^2P_j^2 = P_iP_j = P_{[ij]}.$$

与此相对应的子空间 $\mathscr{S}_{[ij]}$ 是子空间 $\mathscr{S}_i$ 和 $\mathscr{S}_j$ 的**交空间**，也就是说，它是 $\mathscr{S}_i$ 和 $\mathscr{S}_j$ 共有的那些矢量组成的子空间. 两种极端情况可能出现，一种情况是 $\mathscr{S}_{[ij]}$ 与我们作为出发点的两个子空间中的一个，譬如说 $\mathscr{S}_j$，完全相同；另一种情况是 $\mathscr{S}_{[ij]}$ 等于零. 在第一种情况下，$\mathscr{S}_j$ 是 $\mathscr{S}_i$ 的一个子空间；在第二种情况下，$\mathscr{S}_i$ 和 $\mathscr{S}_j$ 是正交的.

我们容易导出下面这样两个性质.

为了使 $\mathscr{S}_j$ 是 $\mathscr{S}_i$ 的一个子空间（即为了使得子空间 $\mathscr{S}_j$ 的任何矢量是子空间 $\mathscr{S}_i$ 的一个矢量），必要和充分条件是

$$P_iP_j = P_j.$$

为了使 $\mathscr{S}_i$ 和 $\mathscr{S}_j$ 正交，必要和充分条件是

$$P_iP_j = 0. \tag{7.40}$$

在这种情况下，我们把这个术语的含义扩展一下，说**这些投影子是正交的.**

关于**投影子的和**，我们有一个重要定理：

设 P_i, P_j, P_k, $\cdots$ 分别是在子空间 $\mathscr{S}_i$, $\mathscr{S}_j$, $\mathscr{S}_k$, $\cdots$ 上的投影子. 为了使它们的和 $P_i + P_j + P_k + \cdots$ 同样是一个投影子，必要和充分条件是这些算符互相正交. 作投影的子空间是子空间 $\mathscr{S}_i$, $\mathscr{S}_j$, $\mathscr{S}_k$, $\cdots$ 的**直和**（即由这些部分子空间中的任何一个的线性叠加组成的那些矢量的系综）.

正交条件显然是充分的.

为了证明它是必要的，需要证明：如果算符之和

$$S = P_i + P_j + P_k + \cdots$$

是一个投影子，则 P_iP_i 对 ξ_i 的每个刃矢量 $|u\rangle$ 的作用给出零．为此目的，我们把性质(7.34)应用于投影子 S 和 P_i，P_j，P_k，$\cdots$．这个和

$$\langle u|S|u\rangle = \langle u|P_i|u\rangle + \langle u|P_j|u\rangle + \langle u|P_k|u\rangle + \cdots$$

的上限是 $\langle u|u\rangle$，而且它所有的项都是正的．如果

$$P_i|u\rangle = |u\rangle,$$

第一项等于这个上限，而所有其它的项等于零．此外，鉴于 $\langle u|P_j|u\rangle = 0$ 意味着 $P_j|u\rangle = 0$，我们有

$$P_jP_i|u\rangle = P_i|u\rangle = 0.$$

由方程(7.37)定义的算符 P_1 是一些正交投影子之和．特别是，出现在这个和中的投影子 $|m\rangle\langle m|$ 是一些基本投影子．显而易见，作投影的那个空间 $\mathscr{E}_1$ 是某些空间的直和，同这个和的各项有关的投影就是在这些空间上进行的．作为 N 个一维空间的直和，$\mathscr{E}_1$ 是一个 N 维空间，而算符 P_1 是 N 个正交的基本投影子之和．

如果 $N \neq 1$，能够以无限多种方法把 P_1 表成这一形式．的确，把 $\mathscr{E}_1$ 的一套 N 个正交归一矢量 $|1\rangle, |2\rangle, \cdots |N\rangle$ 记为 $\{n\}$．由于 $\mathscr{E}_1$ 的任何矢量都能表成这 N 个矢量的一个线性函数，在这个意义上说，这套 $\{n\}$ 组成 $\mathscr{E}_1$ 中的一个基．我们沿用惯例，不把仅仅相差一个相因子，或是它们出现的相对次序不一样的两个基认为是截然不同的．现在，显而易见

$$P_1 = \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n|,$$

而且有多少种不同的基，就有多少种这一型式的 P_1 表示式．

只要稍微作些改变就能把这些考虑扩展到下列情况：在

它上面进行投影的那个子空间 $\mathscr{S}$ 具有无限的维数。人们在希耳伯特空间的理论中证明，总是有可能在 $\mathscr{S}$ 中，以无限多的方法，选择一个基 $\{n\}=\{|1\rangle,|2\rangle,\cdots,|n\rangle,\cdots\}$，它包含着一套可数地无限的正交归一矢量。在 $\mathscr{S}$ 上的投影子 P 因而能够表成**一个正交的基本投影子的级数形式**：

$$P=\sum_{n=1}^{\infty}|u\rangle\langle u|.$$

然而，人们也可以在 $\mathscr{S}$ 中组成一个基，它所包含的是依赖于连续指标的刃。让我们假定，譬如说，存在一套(非可数地无限的)无限模方的矢量 $|\xi\rangle$，它们依赖于连续指标 ξ，且满足"正交归一"关系 (7.38)；让我们进一步假定，子空间 $\mathscr{S}$ 是由某个域 $(\xi_1,\ \xi_2)$ 的刃 $|\xi\rangle$ 的线性叠加组成的全部有限模方的矢量构成的。在这种情况下，我们也能够把 P 写成型式 (7.39)，

$$P=\int_{\xi_1}^{\xi_2}|\xi\rangle d\xi\langle\xi|.$$

这种形式的 P 仍然能够看作是一些正交投影子之和。让我们把积分域 $(\xi_1,\ \xi_2)$ 细分为许多部分域。P 是对各个部分域积分 $|\xi\rangle d\xi\langle\xi|$ 而得的那些投影子之和。后者实际上能够是任意小的。用 δP 来表示对无限小域 $(\xi,\ \xi+d\xi)$ 积分而得的算符：

$$\delta P=\int_{\xi}^{\xi+d\xi}|\xi'\rangle d\xi\langle\xi'|.$$

P 是无限多个 δP 型式的算符之和。我们将称 δP 型式的算符为**微分投影子**；相应于这一型式的投影空间是无限维的。

12. 具有完全分立谱的观测算符

设 A 是一个厄密算符。在本节中，我们将要研究本征值问题，但是只限于讨论属于希耳伯特空间内的本征矢。本征

值因而组成一个分立系 $a_1, a_2, \cdots, a_n, \cdots$。我们把属于本征值 a_n 的子空间记为 $\mathscr{E}_n$，把这个子空间上的投影子记为 P_n。如果本征值 a_n 是不简并的，$\mathscr{E}_n$ 只有一维，而 P_n 是一个基本投影子。如果它是简并的，人们总是能够以无限多种方法在 $\mathscr{E}_n$ 中选择一个基，$|n1\rangle, |n2\rangle, \cdots, |nr\rangle, \cdots$，而且有

$$P_n = \sum_r |nr\rangle\langle nr|. \tag{7.41}$$

两个不同本征值 $a_n, a_{n'}$ 的子空间 $\mathscr{E}_n, \mathscr{E}_{n'}$ 是正交的，

$$P_n P_{n'} = 0 \quad (n \neq n'). \tag{7.42}$$

把相应于分立谱的所有本征值的投影子 P_n 加起来，我们得到投影子

$$P_A \equiv \sum_n P_n, \tag{7.43}$$

它的投影子空间 $\mathscr{E}_A$ 是由所有 $\mathscr{E}_n$ 的直和组成的；$\mathscr{E}_A$ 是由 A 的属于希耳伯特空间的本征刃的线性叠加组成的矢量空间。

如果 A 是一个观测算符，而且如果它的谱是完全分立的，根据定义 $\mathscr{E}_A$ 与总空间 $\mathscr{E}$ 恰好重合，换句话说

$$P_A \equiv \sum_n P_n = 1. \tag{7.44}$$

我们有时称(7.44)的左边为对 A 的本征值**的单位分解**。显而易见，这一分解是唯一的，因此任何刃 $|u\rangle$ 能够以一种唯一的方法写作 A 的一些本征刃的和，它们中的各个具有不同的本征值。为了写下这个和，我们只要用方程(7.44)的两边对 $|u\rangle$ 作运算，并使这样得到的两个刃相等，也就是

$$|u\rangle = \sum_n P_n|u\rangle. \tag{7.45}$$

按照 P_n 的定义，对于任何 $|u\rangle$，$P_n|u\rangle$ 或是零，或是 A 的

一个本征值为 a_n 的本征刃。所以

$$(A - a_n)P_n = 0. \tag{7.46}$$

把方程(7.44)逐项用 A 相乘，并考虑到方程(7.46)，我们得到

$$A = \sum_n a_n P_n. \tag{7.47}$$

按照这一方程，观测算符 A 的那些本征值和它们各自的子空间一旦给定，A 就完全被确定了。此外，从表示式(7.47)显见，算符 A 是与所有的投影子 P_n 对易的。

关系式(7.44)，(7.45)和(7.47)表征的是一些具有完全分立谱的观测算符，不论它们的本征值的数目是有限还是无限。我们将不在此处推敲级数的收敛问题。实际上这种收敛总是得到公认的。

用表示式(7.41)来替换出现在各处的 P_n，导致一些特别方便的表示式。方程(7.44)的左边因而写成基本投影子之和的形式，而且我们得到**闭合关系**

$$P_A \equiv \sum_{n,r} |nr\rangle\langle nr| = 1. \tag{7.48}$$

它同正交关系

$$\langle nr|n'r'\rangle = \delta_{nn'}\delta_{rr'} \tag{7.49}$$

一起，表达了矢量 $|nr\rangle$ 的系集组成一个完全正交归一系的事实。

把闭合关系应用于任何矢量 $|u\rangle$，我们得到 $|u\rangle$ 的一个以本征矢 $|nr\rangle$ 的级数展开的表示式

$$|u\rangle = \sum_{n,r} |nr\rangle\langle nr|u\rangle. \tag{7.50}$$

展开式的系数等于标积 $\langle nr|u\rangle$ [参见方程(5.14)和(5.15)]。再者

$$\langle u|u\rangle = \langle u|P_A|u\rangle = \sum_{n,r} \langle u|nr\rangle\langle nr|u\rangle$$

$$= \sum_{n,r} |\langle nr|u\rangle|^2. \tag{7.51}$$

$|u\rangle$的模方等于展开系数的绝对值的平方之和：这就是帕色伐关系[参见方程(5.16)]。

观测算符A能够写成正交的基本投影子的级数形式。通过一个同给出方程(7.47)的类似程序，我们实际上得到

$$A = AP_A = \sum_{n,r} |nr\rangle a_n \langle nr| . \qquad (7.52)$$

13. 一般情况下的观测算符　广义的闭合关系

如果所有有限模方矢量的空间$\mathscr{E}_A$(把A的本征矢叠加起来就能得到它们)与总的希耳伯特空间$\mathscr{E}$恰相一致，也就是如果在$\mathscr{E}_A$上的投影算符P_A等于一，则厄密算符A是一个观测算符。

当谱是完全分立时，P_A能够写成以正交的基本投影子的级数展开的形式，这些投影子是由A的本征矢组成的。A是一个观测算符的条件可由闭合关系(7.48)方便地表达。把这一关系扩展到一般情况需要引进微分投影子；它们在处理连续谱中所起的作用就犹如基本投影子在处理分立谱中所起的作用。

让我们首先论述A的谱不具有简并的情况。我们假设这个谱包含一个由连续指标ν标记的连续部分和一个由整数指标n标记的分立部分。于是a_n是分立谱的一个本征值，$a(\nu)$是连续谱的一个本征值；$a(\nu)$是ν的单调函数，它可以取某个区间$[a(\nu_1), a(\nu_2)]$上的所有值。我们把本征值为a_n和$a(\nu)$的本征刃分别表为$|n\rangle$和$|\nu\rangle$。这些刃是正交归一的；特别是

$$\langle \nu|\nu'\rangle = \delta(\nu - \nu').$$

算符

$$\delta P = \int_{\nu}^{\nu+\delta\nu} |\nu'\rangle d\nu' \langle \nu'|$$

是在区间$(v, v+dv)$的刃$|v'\rangle$所张成的子空间上的投影子。把这种型式的投影子加起来，我们构成在连续谱的本征刃所张成的子空间$\mathscr{E}_c$上的投影子

$$P_c = \int_{v_1}^{v_2} |v\rangle dv\langle v|.$$

这一子空间是与分立谱的本征刃所张成的子空间$\mathscr{E}_d$正交的，$\mathscr{E}_d$的投影子是

$$P_d = \sum_n |n\rangle\langle n|.$$

A是一个观测算符的条件能够写作

$$P_A \equiv P_c + P_d = 1,$$

或者

$$P_A \equiv \sum_n |n\rangle\langle n| + \int_{v_1}^{v_2} |v\rangle dv\langle v| = 1. \quad (7.53)$$

闭合关系(7.53)是正交归一矢量$|n\rangle$，$|v\rangle$的系综能构成一个完全系的必要和充分条件。

把它扩展到最为一般的情况——即A的全部或一部分谱是简并的——是相当直截了当的。作为一个示例，让我们再一次继续在第七章§9未提及的那个例子。A的本征刃$|nr\rangle$和$|v\rho r\rangle$满足正交归一关系(7.30)。此外，如果A是一个观测算符，换句话说，如果这些刃组成一个完全系，则它们满足**闭合关系**

$$P_A \equiv \sum_{n,r} |nr\rangle\langle nr| + \sum_r \iint |v\rho r\rangle dvd\rho\langle v\rho r| = 1. \quad (7.54)$$

同谱是完全分立的情况一样，用闭合关系构成的希耳伯特空间的任何矢量$|u\rangle$写成以观测算符A的基刃的级数展开的表示式是非常方便的。为了易于书写，假定A的谱是非简并的[关系式(7.53)]。我们得到

$$|u\rangle = P_A|u\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|u\rangle + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle d\nu\langle\nu|u\rangle. \tag{7.55}$$

类似地，我们找到广义的帕色伐关系

$$\langle u|u\rangle = \langle u|P_A|u\rangle = \sum_n |\langle n|u\rangle|^2 + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\langle\nu|u\rangle|^2 d\nu \tag{7.56}$$

以及 A 以投影子的级数展开的表示式

$$A = AP_A = \sum_n |n\rangle a_n\langle n| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} |\nu\rangle a(\nu)d\nu\langle\nu|. \tag{7.57}$$

最后，把连续谱的本征矢的归一条件可用更为一般的条件

$$\langle\nu|\nu'\rangle = f(\nu)\delta(\nu - \nu')$$

来代替，这样做有时候是方便的；此处 $f(\nu)$ 是 ν 的一个正的实函数．这相当于用一个模数常数 $\sqrt{f}$ 来乘各个矢量 $|\nu\rangle$．在这种情况下，以上所述全部有效，只要我们在所有公式中把微分元

$$|\nu\rangle d\nu\langle\nu| \quad 用 \quad |\nu\rangle \frac{d\nu}{f(\nu)}\langle\nu|$$

来代替．同样，如果我们把归一条件 (7.30c) 用

$$\langle\nu\rho r|\nu'\rho' r'\rangle = F_r(\nu, \rho)\delta(\nu - \nu')\delta(\rho - \rho')\delta_{rr'}$$

来代替，P_A 在闭合关系 (7.54) 中的表示式仍有效，只要我们把那里的被积函数除以函数 $F_r(\nu, \rho)$．

14. 观测算符的函数

一个线性算符完全由它对一个正交归一完全本征矢量系

的各个矢量的作用而确定. 它对这些矢量的任何线性叠加的作用能够立刻由此导出，只要它是收敛的，如果我们正在论述的是一个无限级数的话(收敛的条件早已在第五章中提出). 特别是，观测算符 A 的本征值的任何函数 $f(a)$ 使我们能够定义一个线性算符 $f(A)$，它是这个观测算符的函数. 根据定义，$f(A)$ 对 A 的一个本征值为 a 的本征矢 $|a\rangle$ 的作用是

$$f(A)|a\rangle = f(a)|a\rangle. \tag{7.58}$$

当函数 f 是一个多项式时，这一定义同简单地应用算符代数规则而得的那个定义恰相一致；但是它在更为一般的情况下仍然有意义.

就从它的这个定义得知，A 的任何本征矢是 $f(A)$ 的一个本征矢.

反之，如果观测算符 A 的每个本征矢是线性算符 F 的一个本征矢，则后者是 A 的函数.

这一点是相当明显的，如果 A 的本征值中没有一个是简并. 所以，让我们考虑一个简并的本征值，并设 $|a_1\rangle$、$|a_2\rangle$ 是具有这一本征值的两个线性独立的本征矢.

根据假说，它们是 F 的本征矢

$$F|a1\rangle = f_a^{(1)}|a1\rangle \quad F|a2\rangle = f_a^{(2)}|a2\rangle.$$

再者，这两个矢量的任何线性组合是 F 的一个本征矢

$$F(\lambda_1|a1\rangle + \lambda_2|a2\rangle) = f_a^{(\lambda)}(\lambda_1|a1\rangle + \lambda_2|a2\rangle);$$

结果

$$\lambda_1(f_a^{(\lambda)} - f_a^{(1)})|a1\rangle + \lambda_2(f_a^{(\lambda)} - f_a^{(2)})|a2\rangle = 0,$$

而且鉴于 $|a1\rangle$ 和 $|a2\rangle$ 是线性独立的，有

$$f_a^{(1)} = f_a^{(\lambda)} = f_a^{(2)}.$$

因此 A 的所有那些具有相同本征值 a 的本征函数是 F 的具有相同本征值 f 的本征函数；f 是 a 的某一个函数，也就是 $f(a)$，而我们实际上有 $F = f(A)$.

观测算符 A 的任何函数 $f(A)$ 可以象 A 本身一样，表示成为基本或微分投影子的线性组合的形式. 为了确定起见，假定 A 满足方程(7.57). 我们同样有

$$f(A) = f(A)p_A = \sum_n |n\rangle f(a_n)\langle n| + \int_{v_1}^{v_2} |v\rangle f[a(v)]dv\langle v|. \quad (7.59)$$

举几个观测算符 A 的函数的例子. 让我们提及在一特定本征值的子空间上的那个投影子，也就是其本征值位于一个给定区域内的那些本征矢所张成的空间上的那个投影算符. 让我们再提及指数 $\exp(i\xi A)$(ξ = 给定常数) 和逆算符 A^{-1}. 函数 $\exp(i\xi A)$ 总是有定义的；逆算符 A^{-1} 则仅当 A 的本征值没有一个等于零时才是完全确定的.

15. 与观测算符对易的算符　对易观测算符

观测算符 A 的函数属于一类更为一般的算符——**与 A 对易的算符**. 这样一些算符对于 A 的本征矢具有特别简单的效果. 的确，如果 $|a\rangle$ 是一个本征矢，

$$A|a\rangle = a|a\rangle,$$

又如果

$$[A, X] = 0,$$

就会有

$$0 = (AX - XA)|a\rangle = (A - a)X|a\rangle.$$

$X|a\rangle$ 是 A 的一个具有相同本征值(除非它等于零)**的本征矢.**

反之，为了使算符 X 与观测算符 A 对易，只要让它对 A 的本征矢的一个完全正交归一系中各个矢量的作用产生出 A 的一个具有相同本征值的本征矢，这样就足够了.

的确，按照我们早些时候的假说，对易子 $[A, X]$ 对这一

完全系的各个矢量的作用给出零. 所以,我们有

$$[A, X] = 0.$$

所有这些特别适用于**对易观测算符**. 再者,在第五章§§ 14 和 15 中发展的、关于对易观测算符这个主题的所有考虑这里都可以再一次继续,只要不牵涉到术语的某些细节. 我们将只阐述结果.

我们把一个观测算符的本征矢的任何完全正交归一系称为这个观测算符的**基**,这里我们已经沿用惯例,把两个基看作是全同的,如果它们的本征矢仅仅是相因子不同,或分立谱矢量的排列次序不同,对于连续谱的本征矢来说则仅仅是连续指标的选择不同.

我们有下述重要定理:

如果两个观测算符 A 和 B 对易,则它们至少有一个共同的基,反之,如果两个观测算符具有共同的基,则它们对易.

两个对易观测算符 A 和 B 的本征值的任何函数 $f(a, b)$ 使得定义一个线性算符 $f(A, B)$ 成为可能;通过观测算符的函数概念的明显推广,它是这两个观测算符的函数. 我们容易证明,如果观测算符 A 和 B 的每个共同本征矢是线性算符 F 的一个本征矢,则后者是 A 和 B 的某个函数.

所有这些容易推广到任意数目的配对的对易观测算符.

最后,我们说,一组观测算符 $A, B, C, \cdots$ 组成**对易观测算符的一个完全系**,如果这些观测算符全部成对地对易,且如果它们的共同基是唯一地确定的. 对于每一组本征值 $a, b, c, \cdots$,有且仅有一个共同本征矢(确定到差别一个常数)与之相对应. 这一矢量可以看作是本征值 $a, b, c, \cdots$ 的函数. 我们通常用符号 $|a, b, c, \cdots\rangle$ 来表示它.

III. 表 象 理 论

16. 关于有限矩阵的一般评述

根据定义，一个 $M \times N$ 型的矩阵 A 是 MN 个量 A_{mn} $(m = 1, 2, \cdots, M; n = 1, 2, \cdots, N)$ 的一个集，我们通常把它排成一个 M 行 N 列的矩形阵列

$$(A) \equiv \begin{pmatrix} A_{11} A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & \cdots & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ A_{M1} & \cdots & A_{MN} \end{pmatrix},$$

A_{mn} 是第 m 行第 n 列的矩阵元.

如果 $M = N$，它被称为**方阵**；它的行和列的数目是这个矩阵的维数或**阶**. 如果两个整数 M 或 N 中有一个等于 1，矩阵元能够比拟为矢量的分量. 我们将把具有一列的矩阵称为**列矢量**（M = 矢量的维数；$N = 1$），把具有一行的矩阵称为**行矢量**（$M = 1$；N = 矢量的维数）. **标量**是一个特殊矩阵，它的 $M = N = 1$.

从一个 $M \times N$ 型的矩阵 A，我们由某些**共轭运算**可导得一些新的矩阵，也就是：

(i) **复共轭**矩阵 A^*，$M \times N$ 型的矩阵，它的元是 A 的元的复共轭：$(A^*)_{kl} = A^*_{kl}$；

(ii) **转置**矩阵 $\tilde{A}$，$N \times M$ 型的矩阵，由相互交换行和列而从 A 导得：$(\tilde{A})_{kl} = A_{lk}$；

(iii) **厄密共轭**矩阵 $A^\dagger$，$N \times M$ 型的矩阵，对 A 履行前面两种运算而得：$(A^\dagger)_{kl} = A^*_{lk}$.

一个列矢量的复共轭是列矢量. 一个列矢量的转置和厄

密共轭矩阵是行矢量，**反之亦然**。N阶方阵的复共轭，转置和厄密共轭都是N阶方阵。

我们定义下列关于矩阵的**代数运算**：

(a) 矩阵 A **被一常数 c 相乘**；积 cA 是一个与 A 同型的矩阵：$(cA)_{mn} = cA_{mn}$；

(b) 两个同型矩阵的**和** $S = A + B$；S 是一个与 A 和 B 同型的矩阵：

$$S_{mn} = A_{mn} + B_{mn};$$

(c) 一个 $M_B \times N_B$ 型的矩阵 B 被一个 $M_A \times N_A$ 型的矩阵 A(从左边)相乘的**积** $P = AB$，A的列数等于 B 的行数：$N_A = M_B = K$。这是一个 $M_A \times N_B$ 型的矩阵，它的元是

$$P_{mn} = \sum_{k=1}^{K} A_{mK} B_{Kn}.$$

B 被 A 从右边相乘的积(如果它存在)等于 A 被 B 从左边相乘的积，写作 BA。

显然

$$(A + B)^* = A^* + B^*, \quad \widetilde{(A + B)} = \tilde{A} + \tilde{B},$$

$$(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger, \quad (AB)^* = A^*B^*,$$

$$\widetilde{(AB)} = \tilde{B}\tilde{A}, \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger.$$

注意在最后两个方程中因子次序的颠倒。

一个N维列矢量被一个N维行矢量从左面相乘的积是一个标量。一个N维行矢量被一个N维列矢量从左边相乘的积是一个N阶方阵。

另一种重要运算是两个矩阵的**张量积**。用一个 $M_1 \times N_1$ 型的矩阵 $A^{(1)}$ 和一个 $M_2 \times N_2$ 型的矩阵 $A^{(2)}$，我们能够根据张量积组成一个 $M_1M_2 \times N_1N_2$ 型的矩阵 $A^{(12)} \equiv A^{(1)} \otimes A^{(2)}$。这一矩阵的 M_1M_2 行用两个指标 m_1 和 m_2 标记

$$(m_1 = 1, 2, \cdots, M_1;\ m_2 = 1, 2, \cdots, M_2),$$

它的 N_1N_2 列用两个指标 n_1 和 n_2 标记 ($n_1 = 1, 2, \cdots, N_1$; $n_2 = 1, 2, \cdots, N_2$):

$$A^{(12)}_{m_1m_2,n_1n_2} = A^{(1)}_{m_1n_1}A^{(2)}_{m_2n_2}.$$

17. 方阵

在这一节中，我们将要阐述方阵所独具的一些定义和性质.

在一个N阶方阵A中，我们把对角元

$$A_{nn}(n = 1, 2, \cdots, N)$$

同非对角元 $A_{kl}(k \neq l)$ 区分开来. A的**迹**是它的对角元之和:

$$\mathrm{Tr}\, A \equiv \sum_n A_{nn}. \tag{7.60}$$

A的**行列式**，$\det A$，是它的元素阵列的行列式.

单位矩阵 I 是这样一个矩阵，它的对角元全部等于 1，它的非对角元全部等于零.

$$I_{mn} = \delta_{mn}.$$

单位矩阵与一个常数的积，根据定义，是一个**常数矩阵**. 一个**对角矩阵**是这样一个矩阵，它的非对角元全部等于零.

一个方阵，按照它等于它的复共轭，它的转置或它的厄密共轭而被称为是实的，对称的或厄密的.

两个N阶矩阵的和以及积总是有定义的；它们是N阶的矩阵. 它们的和是结合的和交换的. 它们的积是结合的，关于和是分配的，但并非必然是交换的. N阶矩阵的代数是一**种非对易代数**.

为了使得一个N阶的矩阵与所有N阶的矩阵对易，必要和充分的条件是，它是常数(习题 7.4). 特别是，单位矩阵 I 就是这样的矩阵，以致对于任何 A

$$IA = AI = A. \tag{7.61}$$

两个对角矩阵必然对易. 为了使得一个N阶矩阵与所有N阶的对角矩阵对易，必要和充分条件是它是对角的（习题7.4）.

矩阵积的**迹**在这些矩阵的循环置换下是不变的

$$\mathrm{Tr}\, ABC = \mathrm{Tr}\, CAB. \tag{7.62}$$

矩阵积的行列式等于它们的行列式的积:

$$\det ABC = \det A \cdot \det B \cdot \det C. \tag{7.63}$$

根据定义,矩阵B是矩阵A的**逆矩阵**,如果我们有

$$AB = 1 \quad 和 \quad BA = 1. \tag{7.64}$$

的确，如果它们中有一个成为不等式，则另一个也成为不等式. 我们写下:

$$B = A^{-1}.$$

矩阵A具有一个逆矩阵的必要和充分条件是它的行列式不为零: $\det A \neq 0$. 如果行列式等于零，人们就说矩阵是**奇异的**.

我们容易证实

$$(\tilde{A})^{-1} = (\tilde{A^{-1}}) \quad (A^*)^{-1} = (A^{-1})^* \quad (A^\dagger)^{-1} = (A^{-1})^\dagger$$

以及

$$(PQ)^{-1} = Q^{-1}P^{-1}.$$

一个矩阵O是**正交的**，如果它的转置$\tilde{O}$等于它的逆矩阵:

$$O\tilde{O} = \tilde{O}O = I.$$

一个矩阵U是**幺正的**，如果它的厄密共轭等于它的逆矩阵:

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I.$$

一个N维列矢量被一个N阶矩阵从左边相乘的积是一个N维列矢量. 一个N维行矢量被一个N阶矩阵从右边相乘的

积是一个N维行矢量.

对角矩阵对这样一些矢量的作用特别简单. 设

$$D_{mn} = d_m\delta_{mn}$$

是这样一个矩阵的元,而u_n是一个列矢量u的分量,则

$$(Du)_n = d_nu_n.$$

同样,如果v_n是一个行矢量v的分量,则

$$(vD)_n = v_nd_n.$$

如果一个矩阵是奇异的,则至少存在这样一个列矢量u,以致我们有 $Au = 0$, 反之亦然.

从这个结果,我们得到一个重要定理:

A和B是两个N阶的矩阵, 为了使得存在有这样一个列矢量u(N维),以致

$$Au = \lambda Bu$$

的必要和充分条件是: 常数λ是方程

$$\det(A - \lambda B) = 0$$

的一个解.

特别是:

A是一个N阶矩阵, 为了使得存在着这样一个列矢量u, 以致

$$Au = \lambda u,$$

必要和充分条件是: 常数λ是方程

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

的一个解.

这个代数方程,至多N次,称为A的**久期方程.**

对于行矢量,也有类似的性质.

两个分别是N_1和N_2阶的矩阵的张量积是一个 N_1N_2 阶的矩阵. 特别是, 单位矩阵$I^{(1)}$, $I^{(2)}$的张量积是一个N_1N_2阶的单位矩阵$I^{(12)}$.

作为一个例子，让我们提及由两阶矩阵与两阶矩阵的张量积而得到的四阶矩阵。惯常的做法是引进下列两维矩阵（泡利矩阵）：

$$1^{(\sigma)}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad \sigma_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},$$

$$\sigma_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}. \tag{7.65}$$

所有两维的矩阵都能写成这四个厄密矩阵的线性组合的形式。另一方面，让我们考虑另一组两维空间的矩阵

$$1^{(\rho)}=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad \rho_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},$$

$$\rho_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\quad \rho_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}. \tag{7.66}$$

一个（σ）型矩阵与一个（ρ）型矩阵的张量积是一个具有四行和四列的矩阵。让我们给出几个这样组成的（$\rho\sigma$）型矩阵的明显例子：

$$\rho_1\otimes\sigma_1=\begin{pmatrix}0&\sigma_1\\\sigma_1&0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{pmatrix},$$

$$\rho_1\otimes\sigma_2=\begin{pmatrix}0&\sigma_2\\\sigma_2&0\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{pmatrix},$$

$$\rho_3\otimes l^{(\sigma)}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}+1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & +1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix}.$$

我们可以把这些张量积矩阵看作是其中某一个空间（譬如说(ρ)空间)的矩阵，它的各个矩阵元是另一个空间的矩阵.这就是上面各个方程的中间所作出的. 方程右边给出矩阵的显示式;如果人们约定用两个指标 $m_\rho m_\sigma$ 来标记行 (和列)，它们中的第一个指 (ρ) 空间的分量，而第二个指 (σ) 空间的分量，这些行(和列)将依 11, 12, 21, 22 的次序排列.

由张量积矩阵的线性组合，我们构成有两个指标和有 N_1N_2 维的方阵.

$$A_{m_1m_2,n_1n_2}(m_1,\ n_1=1,2,\cdots,N_1;\ m_2n_2=1,2,\cdots,N_2)$$

正如前面那个例子所示，它们可被看作是(1)型的矩阵，其元又是(2)型的矩阵. 作出这样一个矩阵的对角元之和，我们就在普通术语意义上得到一个(2)型的矩阵. 根据定义，它是这个矩阵在空间(1)中的部分迹

$$(\mathrm{Tr}_1 A)_{m_2n_2}\equiv\sum_{n=1}^{N_1}A_{nm_2,nn_2}. \tag{7.67}$$

同样，人们定义空间(2)中的部分迹. 显然

$$\mathrm{Tr}\,A=\mathrm{Tr}_2(\mathrm{Tr}_1 A)=\mathrm{Tr}_1(\mathrm{Tr}_2 A), \tag{7.68}$$

而且，如果 A 等于张量积 $A^{(1)}\otimes A^{(2)}$，则有

$$\mathrm{Tr}(A^{(1)}\otimes A^{(2)})=(\mathrm{Tr}_1 A^{(1)})(\mathrm{Tr}_2 A^{(2)}). \tag{7.69}$$

18. 扩展到无限矩阵

关于有限矩阵的大多数评论可以扩展到无限矩阵，用来

标记无限矩阵的行和列的是一个或几个分立指标，或更为一般地，是若干能够取有限数目或可数地无限数目的分立指标，以及若干能在一个给定区间上取所有值的连续指标．一个无限矩阵是方的，如果它的行和列是用相同的指标体系标记的．它是一个列矢量，如果它仅有一列；或是一个行矢量，如果它仅有一行．

复共轭，转置和厄密共轭的运算扩展到无限矩阵时毋须改变．乘上一个常数以及求和的运算也是这样．至于谈到 A 乘 B（从左边相乘）的乘积，不言自明，B 的行和 A 的列必须用相同的指标体系标记．再者，如果某几个指标是连续的，求和就必须用积分代替．为了确定起见，让我们假定，B 和 A 都是依赖于一个连续指标 q 的方阵，q 能够取区间 (q_1, q_2) 上的任何值．积 $P = AB$ 的矩阵元 $P(q; q')$ 是

$$P(q; q') = \int_{q_1}^{q_2} A(q; q'')B(q''; q')dq''.$$

仅当出现在它的矩阵元的定义式中的那些求和或积分收敛时，乘积才是完全确定的．

除了收敛性的诸问题以外，§ 17 关于方阵的考虑可以扩展到无限阶的矩阵，只是行列式的记号例外．需要立论的只有：在指标是连续的情况下，对角矩阵如何定义，以及在什么条件下存在逆矩阵．

根据定义，一个连续矩阵 $D(q; q')$ **是对角的**，如果它具有形式

$$D(q; q') = d(q)\delta(q - q'), \qquad (7.70)$$

此处 $d(q)$ 是指标 q 的一个任意函数．用这种方式，对角矩阵的两个特征性质是留存下来的，也就是说：两个对角矩阵对易；对角矩阵对一个矢量的作用在于用相应的对角元来乘它的各个分量．因此，用表示式 (7.70) 定义的对角矩阵对具

有分量 $g(q)$ 的列矢量 g 的作用产生矢量 $h = Dg$，它有分量

$$h(q) = \int D(q, q')g(q')dq' = d(q)g(q).$$

注意连续矩阵 $\delta'(q - q')$ **不是对角的.**

至于谈到一个给定的矩阵是否存在逆矩阵，同有限矩阵的情况相反，

$$AB = I \tag{7.71a}$$

的事实并非必然意味着

$$BA = I. \tag{7.71b}$$

为了使我们可以断定 A 和 B 互为逆矩阵，两个方程(7.71a)和(7.71b)必须同时满足.

实际上，A 并非一定要是一个方阵，才能有逆矩阵；譬如说，可能发生的情况是：一个矩阵 A，它的行是用分立指标标记的，而它的列则用连续指标标记，它具有一个逆矩阵. 这时，逆矩阵 A^{-1} 有分立的列指标和连续的行指标. 特别是，在一个**幺正矩阵** U 中，即在一个满足如下两个方程

$$UU^{\dagger} = 1 \quad U^{\dagger}U = 1 \tag{7.72}$$

的矩阵中，行指标和列指标并非必然属于同一种类的. 然而，两个定义方程(7.72)右边的单位矩阵必定要是方阵. 如果矩阵 U 不是方阵，这些单位矩阵中的各个指标体系是不相同的.

19. 矢量和算符的矩阵表象

考虑一个矢量空间 $\mathscr{E}$，并在这个空间中选择一个基. 后者可能是对易观测算符的一个完全系的本征矢. 为了简化书写，我们将在一个其矢量是用分立指标 n 标记的基上作出我们的论证. 譬如说，我们假设它们是某个观测算符 Q 的本征矢

$$Q|n\rangle = q_n|n\rangle.$$

我们说，它们是表象 $\{Q\}$ 的基矢. 这些矢量组成一个完全正

交归一系

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \tag{7.73}$$

$$P_Q \equiv \sum_n |n\rangle\langle n| = 1. \tag{7.74}$$

方程(7.73)和(7.74)是表象 $\{Q\}$ 的基本方程.

对于任何刃矢量 $|u\rangle$,

$$|u\rangle = P_Q|u\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|u\rangle.$$

量 $u_n = \langle n|u\rangle$ 能够看作是一个具有一列的矩阵的元，它的行指标是 n. 这个列矢量完全确定 $|u\rangle$: 它是在表象 $\{Q\}$ 中代表 $|u\rangle$ 的矩阵.

对于任何刁矢量 $\langle v|$,

$$\langle v| = \langle v|P_Q = \sum_n \langle v|n\rangle\langle n|.$$

量 $\langle v|n\rangle$ 是在表象 $\{Q\}$ 中代表刃 $|v\rangle$ 的列矢量的分量 v_n 的复共轭. 它们可被看作是一个行矢量的元; 这个行矢量完全确定 $\langle v|$; 它是在表象 $\{Q\}$ 中代表 $\langle v|$ 的矢量. 依照这个惯例，与一个给定刃相共轭的刁是由代表那个刃的矢量的厄密共轭表示的.

任何线性算符 A 能够以一种唯一的方式展成基算符 $|m\rangle\langle n|$ 的二重级数

$$A = P_Q A P_Q = \sum_{mn} |m\rangle\langle m|A|n\rangle\langle n|.$$

展开系数 $A_{mn} = \langle m|A|n\rangle$ 完全确定 A，且能够看作是一个方阵的元,这个方阵的行指标是 m，列指标是 n: 它是在表象 $\{Q\}$ 中代表 A 的矩阵.

在一方面是矢量和算符，另一方面是矩阵之间建立了一一对应性以后，我们将要检查，关于 $\mathscr{E}$ 空间的算符和矢量的各种运算是如何翻译成为代表它们的那些矩阵的语言的.

对于矢量之间或算符之间的共轭关系，有矩阵之间的厄

密共轭的关系与之相对应. 我们早已注意到关于刁同刃之间的共轭这一事实了. 同样,代表两个厄密共轭算符 A 和 $A^\dagger$ 的矩阵是厄密共轭的; 它们的元实际上满足厄密共轭的特征关系:

$$A^\dagger_{mn} \equiv \langle m|A^\dagger|n\rangle = \langle n|A|m\rangle^* = A^*_{nm}.$$

矢量同算符之间的不同代数运算用它们的表示矩阵的相同的代数运算翻译成为矩阵语言. 只要检查前面两节中定义的各种基本运算就能相信这一点.

对于乘一个常数以及求和来说,这一点是明显的;因此对于两个算符的任何线性组合 $\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2$, 有它们的表示矩阵的相同的线性组合与之相对应,

$$\langle m|(\lambda_1 A_1 + \lambda_2 A_2)|n\rangle = \lambda_1\langle m|A_1|n\rangle + \lambda_2\langle m|A_2|n\rangle.$$

同样, 对于矢量和算符定义的不同乘积是由相应的矩阵积表示的,也就是

(i) $|u\rangle$ 同 $\langle v|$ 的标积:

$$\langle v|u\rangle = \langle v|P_Q|u\rangle = \sum_n \langle v|n\rangle\langle n|u\rangle = \sum_n v^*_n u_n;$$

$\langle v|u\rangle$ 等于代表 $|u\rangle$ 的矩阵(列矢量)与代表 $|v\rangle$ 的矩阵的厄密共轭(从左边相乘)的乘积;

(ii) 算符 A 对刃 $|u\rangle$ 或刁 $\langle v|$ 的作用

$$\langle n|A|u\rangle = \langle n|AP_Q|u\rangle = \sum_k \langle n|A|k\rangle\langle k|u\rangle,$$

$$\langle v|A|n\rangle = \langle v|P_Q A|n\rangle = \sum_l \langle v|l\rangle\langle l|A|n\rangle.$$

代表 $A|u\rangle$ 的矩阵(列矢量)是代表 $|u\rangle$ 的矩阵与代表 A 的矩阵(从左边相乘)的乘积. 代表 $\langle v|A|$ 的矩阵(行矢量)是代表 $\langle v|$ 的矩阵与代表 A 的矩阵(从右边相乘)的乘积;

(iii) 算符 B 同算符 A 的积 AB:

$$\langle m|AB|n\rangle = \langle m|AP_Q B|n\rangle = \sum_k \langle m|A|k\rangle\langle k|B|n\rangle$$

代表 AB 的矩阵是代表 B 的矩阵被代表 A 的矩阵(从左边)相乘的积;

(iv) 算符 $|u\rangle\langle v|$; 它的表示矩阵的元 (m, n) 是

$$\langle m|u\rangle\langle v|n\rangle;$$

所以后者是由代表 $\langle v|$ 的矩阵 (行矢量) 与代表 $|u\rangle$ 的矩阵 (列矢量) (从左边相乘) 的乘积产生的(它实际上产生一个方阵).

总而言之,我们已经成功地以这样一种方法用矩阵定义了 $\mathscr{E}$ 空间的矢量和算符的表象,以致矢量和算符的各种运算和矩阵的运算之间存在有非常简单的对应规则. $\mathscr{E}$ 空间中的任何几何问题可以或者直接运算出现在其中的矢量和算符的纯几何方法处理,或者在一个合适的表象中对于那些代表它们的矩阵作代数或分析运算而处理.

在后面这种情况下,明智地选择表象将会或多或少地简化问题的解,简化的方式同巧妙地选择坐标使得解析几何问题的解或多或少地变得简单是一样的. 实际上,我们将选择的表象是: 在这个表象中,要研究的矢量和算符是由尽可能简单的矩阵来表示.

在这一点上我们注意,观测算符 Q 在表象 $\{Q\}$ 中是由一个特别简单的矩阵表示的: 它是一个对角矩阵. 更为一般地,任何函数 $f(Q)$ 是由对角矩阵表示的,

$$\langle m|f(Q)|n\rangle = f(q_n)\delta_{mn}.$$

与 Q 对易的算符也由非常简单的矩阵表示. 事实上,如果 $[X, Q] = 0$, 则

$$(q_n - q_m)\langle m| \times |n\rangle = 0,$$

结果,对于任何 $q_m \neq q_n$ 的 (m, n) 对, $\langle m| \times |n\rangle = 0$. 换句话说,行和列指标涉及 Q 的不同本征值的所有的矩阵元必然是零(参见第七章 §15).

所有前面的考虑能够容易地扩展到由两个空间 $\mathscr{E}_1$ 和 $\mathscr{E}_2$ 的张量积产生的整个空间 $\mathscr{E}_1 \otimes \mathscr{E}_2$. 由张量积构成的矢量和算符能够用代表空间 $\mathscr{E}_1$ 和 $\mathscr{E}_2$ 的矢量和算符的那些矩阵的张量积矩阵来表示.

20. 矩阵变换

再一次考虑有限阶的矩阵. 下面我们将用一大写字母来记 N 阶的方阵,用一小写字母来记 N 维的列或行矢量. 设 T 是一个非奇异的矩阵 (T^{-1} 存在). 这一矩阵使我们能够定义一个变换,在这个变换中,矩阵 A' (A 的变换)由

$$A' = TAT^{-1} \tag{7.75}$$

定义. A 同 A' 之间有一一对应, A 是从 A' 由逆变换

$$A = T^{-1}AT \tag{7.76}$$

推得的.

在这样一个变换中,迹和行列式守恒

$$\mathrm{Tr}\, A = \mathrm{Tr}\, A', \quad \det A = \det A' \tag{7.77}$$

(这是矩阵积的迹和行列式的性质). 同样显而易见的是,矩阵之间的任何代数方程守恒. 譬如说,如果

$$A = \lambda BC + \mu DEF,$$

于是,逐项用 T 从左边乘,用 T^{-1} 从右边乘,并把表示式 $T^{-1}T$ 按照需要多次插进各个单项,得

$$TAT^{-1} = \lambda TBT^{-1}TCT^{-1} + \mu TDT^{-1}TET^{-1}TFT^{-1},$$

这就是

$$A' = \lambda B'C' + \mu D'E'F'.$$

我们同样定义列矢量 u 的变换 u':

$$u' = Tu, \quad u = T^{-1}u' \tag{7.78}$$

和行矢量 v 的变换 v':

$$v' = vT^{-1}, \quad v = v'T. \tag{7.79}$$

容易地证实，包含方阵和一种或另一种型式的矢量的**代数方程非常一般地在变换中守恒**. 另一方面，如果 c 是一个任意常数，方阵的变换在用 cT 代替 T 时不变；然而，列矢量是乘上 c 的，而行矢量是乘上 $1/c$ 的.

矩阵之间的各种共轭关系在刚才描述的这种变换中一般不守恒(习题 7.5). 特别是，让我们来寻找为了使厄密共轭在变换中守恒而 T 必须满足的条件. 为了使 $A' = TAT^{-1}$，这意味着，

$$A'^{\dagger} = TA^{\dagger}T^{-1},$$

对任一 A，我们必须有

$$TAT^{-1} = (TA^{\dagger}T^{-1})^{\dagger} = (T^{-1})^{\dagger}AT^{\dagger},$$

或者，逐项用 $T^{\dagger}$ 从左边乘，用 T 从右边乘，得

$$T^{\dagger}TA = AT^{\dagger}T.$$

所以必要的是，$T^{\dagger}T$ 与所有的矩阵 A 对易，因此，$T^{\dagger}T$ 是单位矩阵的倍数:

$$T^{\dagger}T = cI.$$

再者，为了使 $u' = Tu$，这意味着，对任何 u，有 $u'^{\dagger} = u^{\dagger}T^{-1}$；对任何 u，我们必须有 $u = T^{\dagger}Tu$，因此 $c = 1$. 最后，矩阵 T 必须是**幺正的**. 显而易见，这一条件是厄密共轭关系守恒的必要条件，同时也是充分的.

我们把变换矩阵 U 是幺正的变换称为**幺正变换**. 在这种情况下，鉴于 $U^{-1} = U^{\dagger}$，矩阵 A，列矢量 u 和行矢量 v 的变换定义分别为

$$\begin{aligned} &A' = UAU^{\dagger}, \quad A = U^{\dagger}A'U, \\ &u' = Uu, \qquad u = U^{\dagger}u', \\ &v' = vU^{\dagger}, \qquad v = v'U. \end{aligned} \tag{7.80}$$

象所有的变换一样，**矩阵的迹和行列式**以及**矩阵同矢量之间的代数方程在一个幺正变换下是守恒的**. 另外，**厄密共轭关**

系也是守恒的.

此外，我们有下面两个基本定理. 我们在这里不加证明地阐述如下：

A) **任一厄密矩阵 H 可以用一个幺正变换对角化**

$$H' = UHU^{\dagger}, \quad H' \text{ 是对角的.}$$

H' 的对角元是 H 的“本征值”. 它们全都是实的 (H' 是厄密的)，且是久期方程

$$\det(H - xI) = 0$$

的解.

B) **为了使得两个厄密矩阵 H、K 可以用同一个幺正变换对角化，必要和充分的是它们对易.**

有限阶矩阵有关的所有定义和性质扩展到无限阶矩阵时都没有困难. 任一个具有逆矩阵的无限矩阵 T 定义方阵或(列或行)矢量的一个变换，只要出现在这些定义中的求和或积分收敛. 与有限矩阵的变换相反，T 并非一定是一个方阵. 当然待变换的那些(方)阵的行和列是用与 T 的列相同的指标体系标记的；对于列和行矢量的分量，情况也是一样. 至于被变换的矩阵的行和列，以及被变换的矢量的分量，它们用的是 T 的行指标体系.

迹(以它收敛作为条件)，代数方程以及厄密共轭(在幺正变换情况下) 的守恒性质在无限矩阵的变换中是保持的. 然而，关于厄密矩阵用一幺正变换对角化的这两个基本定理并非对所有的厄密矩阵都成立；我们将假设，它们对于所有我们将要碰到的那些厄密矩阵是适用的.

21. 表象的代换

让我们再来讨论矢量空间 $\mathscr{S}$ 的矢量和算符的矩阵表象问题. 对于这个空间中的各个基，有一给定的表象与之相对应.

在各个表象中代表同一个算符或矢量的那些矩阵之间存在着联系，如果知道怎样去找到这种联系，那是方便的．我们即将看到，用**幺正变换**可实现从一个表象到另一个的表象的过渡．

考虑两个基，一个由§19的观测算符Q的本征矢$|n\rangle$($n=1,2,\cdots,\infty$)组成，另外一个由另一个观测算符Ξ的本征矢$|\xi\rangle$组成；我们假定Ξ的谱是连续的．这两个基定义表象$\{Q\}$和$\{\Xi\}$．表象$\{Q\}$的基本方程早已写下[方程(7.73)和(7.74)]．表象$\{\Xi\}$的基本方程是

$$\langle\xi|\xi'\rangle=\delta(\xi-\xi'),\tag{7.81}$$

$$P_{\Xi}\equiv\int|\xi\rangle d\xi\langle\xi|=1.\tag{7.82}$$

各个表象的基矢可表成另一个表象的基矢的级数展开：

$$|n\rangle=\int|\xi\rangle d\xi\langle\xi|n\rangle,$$

$$|\xi\rangle=\sum_{n}|n\rangle\langle n|\xi\rangle.\tag{7.83}$$

在$|n\rangle$的展开式中以系数形式出现的标积$\langle\xi|n\rangle$可以看作是矩阵S的元$S(\xi;n)$，S的行指标是ξ，列指标是n．在$|\xi\rangle$的展开式中以系数形式出现的标积$\langle n|\xi\rangle$可以看作是矩阵T的元$T(n;\xi)$，T的行指标是n，列指标是ξ．再者，因

$$\langle\xi|n\rangle=\langle n|\xi\rangle^{*},$$

故有

$$T=S^{\dagger}.$$

此外，

$$\sum_{n}\langle\xi|n\rangle\langle n|\xi'\rangle=\langle\xi|\xi'\rangle=\delta(\xi-\xi'),$$

$$\int\langle n|\xi\rangle d\xi\langle\xi|n'\rangle=\langle n|n'\rangle=\delta_{nn'}.$$

换句话说

$$SS^{\dagger}=I,\tag{7.84a}$$

$$TT^{\dagger} \equiv S^{\dagger}S = I. \qquad (7.84b)$$

矩阵 S 是幺正的。

现在把在表象 $\{Q\}$ 中代表刃 $|u\rangle$、具有分量

$$\langle 1|u\rangle, \langle 2|u\rangle, \cdots$$

的列矢量记为 $(u)_Q$，把在表象 $\{Q\}$ 中代表这同一刃、具有分量 $\langle\xi|u\rangle$ 的列矢量记为 $(u)_\Xi$。应用关系式(7.74)，

$$\langle\xi|u\rangle = \sum_k \langle\xi|k\rangle\langle k|u\rangle,$$

也就是

$$(u)_\Xi = S(u)_Q. \qquad (7.85)$$

同样，把在表象 $\{Q\}$ 和 $\{\Xi\}$ 中代表一个给定算符 A 的矩阵分别记为 $(A)_Q$ 和 $(A)_\Xi$。我们有

$$\langle\xi|A\xi'\rangle = \sum_{kl} \langle\xi|k\rangle\langle k|Al\rangle\langle l|\xi'\rangle$$

或者

$$(A)_\Xi = S(A)_Q S^{\dagger}. \qquad (7.86)$$

我们对代表同一个刃 $\langle v|$ 的行矢量 $(v)_Q$ 和 $(v)_\Xi$ 得到同样的关系

$$(v)_\Xi = (v)_Q S^{\dagger}. \qquad (7.87)$$

方程 (7.85)，(7.86) 和 (7.87) 是幺正变换 S 的特征变换方程 [方程(7.80)]。

这一矩阵的元具有下列值得注意的性质：

——作为列指标 n 的函数来考虑，第 ξ 行的元 $\langle\xi|n\rangle$ 是在表象 $\{Q\}$ 中代表 Ξ 的本征刃 $\langle\xi|$ 的行矢量 $(\xi)_Q$ 的分量；

——作为行指标 ξ 的函数来考虑，第 n 列的元 $\langle\xi|n\rangle$ 是在表象 $\{\Xi\}$ 中代表 Q 的本征刃 $|n\rangle$ 的列矢量 $(n)_\Xi$ 的分量。

特别是，在表象 $\{Q\}$ 中，算符 Ξ 的本征值问题的解在数学上是等价于如何确定变换 S，使矩阵 $(\Xi)_Q$ 对角化。同样，在表象 $\{\Xi\}$ 中，算符 Q 的本征值问题的解等价于如何确定变换

S，使矩阵 $(Q)_E$ 对角化。

认出那些可以独立于任何表象而定义的量和关系式是重要的。直接用矢量和算符定义的所有量和所有的关系式显然具有这一性质。因此两个矢量的**标积**在表象的代换下是协变的。**厄密共轭关系**以及矢量之间和算符之间的**代数方程**同样具有这一协变性质。

让我们也提及**迹的守恒**：不论使用什么表象，代表同一个算符的矩阵的迹（如果它收敛）保持相同的值；它是一个表征算符本身的量。特别是，容易证明（习题 7.6）

$$\mathrm{Tr}|u\rangle\langle u| = \langle u|u\rangle, \tag{7.88}$$

$$\mathrm{Tr}|u\rangle\langle v| = \langle v|u\rangle. \tag{7.89}$$

22. 算符和矢量的幺正变换

前一节的矩阵 S 不表示算符。因为算符的矩阵表示是在一个给定表象中定义的，而变换矩阵却可以说是跨于两个表象的。在早些时候考查过的那个特定例子中，这一点特别明显，因为矩阵 S 不是一个方阵。

然而，这里我们有一个重要的特殊情况。可能发生的是，第一个表象的基矢同第二个表象的基矢之间存在着一一对应。在那种情况下，这两个基的矢量是用同一套指标标记的。为了确定起见，让我们考虑一个表象 $\{Q\}$，它的基矢 $|n\rangle$ 是用分立指标 n 标记的；另一个表象 $\{\bar{Q}\}$，它的基矢 $|\bar{n}\rangle$ 是用同一个指标标记的。用同一个指标标记的两个刃 $|n\rangle$，$|\bar{n}\rangle$ 互相对应。设 U 是由这一对应定义的线性算符：

$$|n\rangle = U|\bar{n}\rangle.$$

我们有

$$U = U\left(\sum_n |\bar{n}\rangle\langle\bar{n}|\right) = \sum_n |n\rangle\langle\bar{n}| \tag{7.90}$$

和

$$U^\dagger = \sum_n |\bar{n}\rangle\langle n|,$$

考虑到 $|n\rangle$ 和 $|\bar{n}\rangle$ 的正交归一关系，

$$UU^\dagger = U^\dagger U = 1. \tag{7.91}$$

因此，U 是一个**幺正算符**. 事实上，定义从 $\{Q\}$ 到 $\{\bar{Q}\}$ 的表象代换的幺正矩阵 $\langle\bar{m}|n\rangle$ 是在表象 $\{\bar{Q}\}$ 中代表 U 的矩阵.

在能够构成一个幺正算符 U 的情况下，我们能够定义一种操作，它在某种程度上是对表象代换的补充. 我们能够对空间 $\mathscr{S}$ 的矢量和算符本身进行变换，并把矢量 $|\hat{u}\rangle = U|u\rangle$ 与各个矢量 $|u\rangle$ 相联系，把算符 $\hat{A} = UAU^\dagger$ 与各个算符 A 相联系，而不是把基 $\{Q\}$ 变换为一个新基 $\{\bar{Q}\}$，后者的矢量由方程

$$|\bar{n}\rangle = U^\dagger|n\rangle \tag{7.92}$$

给出.

考虑到 U 是幺正的这个事实，显而易见，共轭关系以及矢量和算符之间的方程在 U 变换中是守恒的. 特别是，

(i) 标积是守恒的：$\langle\hat{u}|\hat{A}|\hat{v}\rangle = \langle u|A|v\rangle$；

(ii)厄密性是守恒的.

事实上，如果 A 是一个观测算符，它的变换 $\hat{A}$ 是一个具有相同本征值谱的观测算符，因为 A 的本征值方程

$$A|a\rangle = a|a\rangle$$

变换为方程

$$\hat{A}|\hat{a}\rangle = a|\hat{a}\rangle. \tag{7.93}$$

$\hat{A}$ 的相应于一个给定本征值 a 的本征刃是 A 的相应于同一个本征值的本征刃的变换. 注意在表象 $\{Q\}$ 中代表 $\hat{A}$ 的矩阵和在表象 $\{\bar{Q}\}$ 中代表 A 的矩阵是一样的. 同样，矢量 $|\hat{a}\rangle$ 在 $\{Q\}$ 中的分量和 $|a\rangle$ 在 $\{\bar{Q}\}$ 中的分量是一样的.

相继进行两次分别由算符U和V定义的变换等效于由算符 $W = VU$ 定义的变换. 既然W是幺正的，合成的变换就是幺正的. 换句话说，**两个幺正变换的积是一个幺正变换.**

如果定义幺正变换的算符U无限地接近于1，变换称为**是无限小变换.** U取形式

$$U \equiv 1 + i\varepsilon F, \tag{7.94}$$

此处ε是一个实的无限小量. 幺正条件(7.91)变为

$$(1 - i\varepsilon F^{\dagger})(1 + i\varepsilon F) = (1 + i\varepsilon F)(1 - i\varepsilon F^{\dagger}) = 1,$$

或者，仅仅保留ε的一阶项，就有

$$F = F^{\dagger}.$$

这算符F是**厄密的.**

在这样一种无限小的变换中，被变换的矢量和算符由下列表式给出

$$|\hat{u}\rangle \equiv |u\rangle + \delta|u\rangle = (1 + i\varepsilon F)|u\rangle,$$

$$\hat{A} \equiv A + \delta A = (1 + i\varepsilon F)A(1 - i\varepsilon F)$$

$$= A + i\varepsilon[F, A],$$

或者

$$\delta|u\rangle = i\varepsilon F|u\rangle \tag{7.95}$$

$$\delta A = i\varepsilon[F, A]. \tag{7.96}$$

练 习 和 问 题

1. 根据定义，如果 $P_iP_j = P_i$，就说投影子 P_i 小于或等于另一个投影子 P_j；于是我们使用记号 $P_i \leqslant P_j$. 求证如果 $P_i \leqslant P_j$，则我们对任何 $|u\rangle$ 必然有 $\langle u|P_i|u\rangle \leqslant \langle u|P_j|u\rangle$，反之亦然. 再直接证明或是利用最后这个性质证明，如此定义的这个不等式实际上满足一个不等式的特征公理，也就是 (i) $P_i \leqslant P_j$ 和 $P_j \leqslant P_i$ 意味着 $P_i = P_j$；(ii) $P_i \leqslant P_j$ 和 $P_j \leqslant P_k$ 意味着 $P_i \leqslant P_k$.

2. $P_1, P_2, \cdots, P_k$ 是一些投影子，求证：对于希耳伯特空间的任何矢量 $|u\rangle$，当且仅当

$$\sum_{i=1}^{k} \langle u|P_i|u\rangle \leqslant \langle u|u\rangle$$

时，它们的和才同样是一个投影子。

3.(i) 观测算符 A 具有 N 个有限数目的本征值。我们用 $a_1, a_2\cdots, a_N$ 和方程系

$$f(A) \equiv (A-a_1)(A-a_2)\cdots(A-a_N) \equiv (A-a_n)g_n(A)$$

来表示它们。证明 $f(A)=0$，而在第 n 个本征值的子空间上的投影子 P_n 由表示式

$$P_n = g_n(A)g_n(a_n)$$

给出。

(ii) 推导其逆性质，也就是：

如果 A 是一个满足 N 次代数方程

$$f(A) \equiv (A-a_1)(A-a_2)\cdots(A-a_N) = 0$$

的厄密算符，且如果它不再满足其他小于 N 次的代数方程，则它是一个具有 N 个本征值的观测算符，而且这些本征值必然是方程 $f(x)=0$ 的 N 个不同的实数根。

4.求证：一个 N 阶的矩阵，

(i) 必然是一个常数，如果它与所有 N 阶的矩阵对易；

(ii) 必然是对角的，如果它与所有 N 阶的对角矩阵对易。

5.求证：(a) 为了使矩阵之间的复共轭在变换中守恒，必要和充分的条件是：这个变换矩阵是实的；(b) 为了使矩阵之间的转置关系在变换中守恒，必要和充分的条件是：这个变换矩阵是正交的。

6.设 $|u\rangle$ 和 $|v\rangle$ 是两个有限模方的矢量。证明

$$\mathrm{Tr}|u\rangle\langle u| = \langle u|u\rangle, \qquad \mathrm{Tr}|u\rangle\langle v| = \langle v|u\rangle.$$

7.设 H 是一个正定厄密算符。证明对任何 $|u\rangle$ 和 $|v\rangle$，有

$$|\langle u|H|v\rangle|^2 \leqslant \langle u|H|u\rangle\langle v|H|v\rangle,$$

再证明等式 $\langle u|H|u\rangle = 0$ 必然意味着 $H|u\rangle = 0$。还要证明 $\mathrm{Tr}\,H \geqslant 0$，而等式意味着 $H=0$。

8.证明如果 H 和 K 是两个正定观测算符，则 $\mathrm{Tr}\,HK \geqslant 0$，而等式意味着 $HK=0$。

9. A 是一个线性算符，证明 $A^\dagger A$ 是一个正定厄密算符，再证明它的迹等于在一个任意选择的表象中代表 A 的矩阵元的模数平方和。由此推断 $\mathrm{Tr}\,A^\dagger A \geqslant 0$，且等式 $\mathrm{Tr}\,A^\dagger A = 0$ 意味着 $A=0$。

第八章 一般形式

(B) 物理现象的描述

1. 引言

在经典物理中，一个给定体系的动力学态在每个瞬间都是有定义的，如果体系的各有关量（或称动力学变量）的系集所取的值在那个瞬间是已知的话. 这些数值原则上全部可以用无限的精度同时测定. 经典理论的目的在于列举这些动力学变量，然后发现和研究它们的运动方程.

在量子论中，动力学态同动力学变量之间的关系远没有这样直接.在对一个给定的动力学变量的测量过程中，这个被测量的体系的动力学态一般将因测量装置的干扰而受到修正. 这种修正，在经典物理中通常是可忽略的，在微观的尺度上不再可以忽略了；它是作为体系的不可预测和不可控制的扰动出现的，并且对于能够用什么精度来同时测量全部动力学变量设置了一个极限. 所以我们放弃了经典物理的基本假设，按照这个假设，属于体系的所有各种量在各个瞬间所取的值都是完全确定的. 现在，对于各个变量，我们只能测定其数值的**统计分布**，它是作这种测量时，各种可能事件的测量结果的几率定律.

按照通常的术语（第六章§17），一个量子体系的所有动力学变量并非都是彼此相容的. 然而我们假设，总是能够把一定数目的其它变量加于体系的每个动力学变量上，从而组成**相容变量的一个完全系**；根据定义，这个完全系的所有变量

都是彼此相容的，而且除了这些变量本身的函数以外，不存在其它可与它们中的各个变量相容的变量．一个完全系的变量的精确测定构成我们对一个量子体系的动力学态所能得到的最大可能的信息量．结果，一个量子体系的动力学态，不再象在经典理论中那样，由精确指明体系的所有有关动力学变量来定义，而是由指明出现在我们能够建造的各种相容变量的某一完全系中的那些变量来定义．

我们先确立一个原理：一个量子体系的动力学态是**可以线性地叠加的**．按照这个原理(第七章§1)，我们能把某个矢量空间 $\mathscr{E}$ 同一个体系这样地联系起来，以致体系的各个动力学态由这个空间的一个矢量来表示．我们进一步假定 $\mathscr{E}$ 是一个希耳伯特空间．从此以后，我们将要使用第七章讲过的希耳伯特空间的记号和性质．因此，**对于各个动力学态，有空间 $\mathscr{E}$[1] 的某个刃 $|u\rangle$ 与之相对应**．同样，**对于各个动力学变量，有空间 $\mathscr{E}$ 的一个观测算符附属于它**．依两个变量相容或不相容，相应于它们的观测算符就是对易或不对易的．

量子论的一般形式就基于一方面是动力学态同物理量之间，另一方面是矢量同算符之间的这种对应性．在第 I 节中，我们将以精确的方式定义这一对应性，我们还要指出建造希耳伯特空间 $\mathscr{E}$ 的一种实用方法，以及它所属的那些矢量和算符的物理意义．在第 II 节中，这个一般的理论纲要由给出的**运动方程**来加以补充．在第 III 节中，我们证明，在 $\mathscr{E}$ 空间中有多少种矢量和算符的特定矩阵表象，理论就有多少种特定表述．波动力学是这些特定表述中的一种．当一个量子体系

1) 空间 $\mathscr{E}$ 在量子论中所起的作用类似于相空间在经典理论中的作用．相空间各点表示一个经典的动力学态；同样，$\mathscr{E}$ 空间各矢量表示一个动力学的量子态．然而在后一种情况下，它不是一种一对一的对应，因为 $\mathscr{E}$ 空间的两个互成倍数的矢量表示同一个态；参见以下§2．

的动力学态不完全已知时，人们能够仿效通常的统计方法，用矢量的统计混合来表示它．一种等效的做法在于用一个特殊型式的算符，即**密度算符**，来表示这个态；密度算符的形式概括在本章的第四和最后一节中．

I. 动力学态和物理量

2. 几率的定义　关于测量的假设

在一个给定的动力学态中，一个确定的数值的统计分布与体系的各个动力学变量相联系．为了确定这些几率，我们从下述基本假设出发：

一个给定的物理量 A 的任何函数 $F(A)$ 的平均值是

$$\langle F(A)\rangle = \langle u|F(A)|u\rangle, \tag{8.1}$$

式中的刃 $|u\rangle$ 表示体系的动力学态，观测算符 A 表示该物理量．

特别是，A的统计分布的特征函数 $f(\xi)$ 是函数$\exp(i\xi A)$的平均值：

$$f(\xi) = \langle u|e^{i\xi A}|u\rangle. \tag{8.2}$$

既然一个统计分布完全由指明它的特征函数确定，我们刚才阐述的那个基本假设就完全确定了体系所有的动力学变量的统计分布．

让我们看看这个假设如何影响动力学态同刃矢量之间的对应性．不管什么样的算符 $F(A)$，当用一个任意的相因子 $\exp(i\alpha)$ (α 是任意的实数) 乘矢量 $|u\rangle$ 时，表示式(8.1)保持不变．因此对仅仅相差一个相因子的两个矢量算得的统计分布是严格全同的：这样两个矢量表示同一个动力学态．换句话说，**对于各个动力学态，都有一个被确定差别一个相因子的矢量与之相对应．** 另一方面，我们必然有 $f(0) = 1$ (1 的平

均值等于 1)；所以矢量 $|u\rangle$ 必须是**归一的**

$$\langle u|u\rangle = 1. \tag{8.3}$$

放宽最后这个条件有时是方便的. 为此目的，我们用更为一般的定义

$$\langle F(A)\rangle = \frac{\langle u|F(A)|u\rangle}{\langle u|u\rangle} \tag{8.4}$$

来代替平均值的定义(8.1). 用这个定义，两个互成倍数的矢量表示同一个动力学态(不言自明，我们正在论述的矢量具有有限的模方).

为了明晰地得到 A 的统计分布，我们在一个 A 是对角的表象中计算特征函数 $f(\xi)$ 的表示式(8.2)[或表示式(8.4)，如果 $|u\rangle$ 不是归一的]. 除了术语上有细微差别外，这一方法早已概括在第五章中，不准备在这里重复. 我们只阐述结果：

1) **量 A 可能取得的精确值只能是与 A 相联系的观测算符的本征值谱中的值.**

2) **设 $\mathscr{E}_D$ 是 A 的这样一些本征矢所张成的子空间，它们的本征值位于 A 的谱的某个域 D 中；用 $|u\rangle \equiv P_D|u\rangle$ 来表示刃 $|u\rangle$ 在 $\mathscr{E}_D$ 上的投影. A 的测量结果属于域 D 的几率 w_D 为**[1]

$$w_D = \langle P_D\rangle = \frac{\langle u_D|u_D\rangle}{\langle u|u\rangle}. \tag{8.5}$$

关系式(8.5)概括了在第五章中所研究的、在各种特定情况下所得到的结果(习题 8.1). 的确，D 可能简单地就是分立谱的一个本征值，在这种情况下关系式(8.5)与关系式(5.21)全同. 但是 D 能够同样好地由好几个分立本征值的系集组

---

1) w_D 是投影子 P_D 的平均值，也就是说，对于 A 的所有位于 $\mathscr{E}_D$ 内的本征矢，A 的函数的平均值等于 1，对于 A 的所有与 $\mathscr{E}_D$ 正交的本征矢，它等于 0.

成，或由连续谱的一部分组成，或甚至由两者的组合组成。特别是，象在第五章末(§ 10)的那个例子一样，当D是连续谱的一个无限小的部分 $[a(v), a(v+dv)]$ 时，$w_D = \omega(v)dv$，而用关系式(8.5)计算的几率密度 $\omega(v)$ 正好就是由方程(5.44)给出的那个结果。

下一点要考虑的是，一旦测量完成以后，如何定义体系的动力学态。这个问题的回答有赖于测量是在什么特定条件下进行的；只在**理想测量**(参见第五章 § 13)的情况下，它才是简单的。由于理想测量的假说，如果对体系进行的观测表明，它正处在A的一个属于上面定义的域D的本征态，**则它的动力学态在测量以后将由矢量 $|u\rangle$ 在空间 $\mathscr{E}_D$ 上的投影表示。**换句话说，态矢量在测量进程中的(非因果的)演变相应于纲图

$$|u\rangle \rightarrow \text{理想测量产生结果 } D \rightarrow P_D|u\rangle$$

波包过滤的这一假设可以看作是理想测量的真正定义。

沿用惯例，动力学态总是用归一的矢量表示的(因而假设 $|u\rangle$ 是归一的)；体系的态矢量在测量以后应是 $P_D|u\rangle$ 再乘上一个归一因子(确定到差别一个相位)，它的模方等于 $1/w_D$，亦即 $1/\langle u|P_D|u\rangle$.

3. 量子化体系的观测算符和它们的对易关系

研究量子化体系的第一步在于列举体系的动力学变量和定义联系于这些变量的观测算符的代数学。事实上，各种观测算符都能够表成某一套“基本观测算符”的函数；我们给出这些基本观测算符的对易关系也就是完成了它们的代数学的定义。

当所考虑的量子体系具有经典模拟时，我们迄今所提及的所有体系就是这样的，我们可以采用一种基于对应原理的

一般程序.

在一个N维的经典体系中，最一般的动力学变量是 $2N$ 个独立变量（N 个坐标 $q_1, q_2, \cdots\cdots q_N$ 和 N 个动量 $p_1, p_2 \cdots p_N$）的一个函数. 我们就把这样一些动力学变量指派给那个相应的量子体系. 因而我们引进N个位置变量和N个动量变量. 这些变量相应于一些观测算符，我们用同动力学变量本身相同的符号 $q_1, q_2, \cdots\cdots, q_N, p_1, p_2, \cdots\cdots p_N$ 来表示它们. 我们进一步假设，只有由各个坐标和它的共轭动量组成的那N对观测算符是不对易的，对这些对，我们有

$$[q_r, p_r] = i\hbar.$$

换句话说，

$$[q_r, q_s] = 0, \quad [p_r, p_s] = 0, \tag{8.6}$$

$$[q_r, p_s] = i\hbar\delta_{rs} (r, s = 1, 2, \cdots\cdots, N). \tag{8.7}$$

鉴于最一般的观测算符是 q 和 p 的函数，任何两个观测算符的对易子是由基本的对易子关系式 (8.6) 和(8.7)而明确地确定的；我们实际上能够利用对易子代数的规则（第五章 § 17）来明晰地计算它. 量子体系的观测算符同经典模拟体系的量之间的这一对应性已经讨论过多次（第二章 § 15 和第五章 § 3）. 为了消除所有的含混不清之处，我们总是从位形空间的笛卡儿坐标出发，并且遵守第二章 § 15 的经验规则. 特别是，在该节中给出的“对称化”规则保证了对于体系的每个实量都有一个厄密算符与之相联系.

并非所有的量子体系都是能够用这一对应方法来处理的. 常常发生的是，通过一个适当的经典模拟而按对应性引进的动力学变量不足以详尽地描述我们所研究的量子体系的所有物理性质. 因而有必要引进一些附加的变量. 如何选择这些新变量和联系于它们的对易关系纯粹是一个直觉问题.

在属于量子体系的那些物理量中间，必须特别提及它的

能量．代表它的观测算符H称为体系的哈密顿量．当体系具有经典模拟时，H是由对应性从经典力学的哈密顿函数推导的．

4. 海森伯测不准关系

海森伯的位置-动量测不准关系直接产生于对易关系(8.7)．

的确，让我们非常一般地证明，如果两个观测算符A和B满足方程

$$[A, B] = i\hbar, \tag{8.8}$$

则它们的均方根偏差的积将总是大于或等于$\hbar/2$：

$$\Delta A \cdot \Delta B \geqslant \frac{1}{2}\hbar. \tag{8.9}$$

我们将要给出的证明本质上同第四章§18的一样．

根据定义，

$$\Delta A = (\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2)^{\frac{1}{2}}, \quad \Delta B = (\langle B^2\rangle - \langle B\rangle^2)^{\frac{1}{2}}.$$

让我们引进观测算符

$$\hat{A} = A - \langle A\rangle, \quad \hat{B} = B - \langle B\rangle.$$

显然，

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar,$$

而且

$$\Delta A = \Delta\hat{A} = \langle\hat{A}^2\rangle^{\frac{1}{2}}, \quad \Delta B = \Delta\hat{B} = \langle\hat{B}^2\rangle^{\frac{1}{2}}.$$

假设体系的动力学态由归一的刃$|u\rangle$表示，再把薛华兹不等式应用于矢量$\hat{A}|u\rangle$和$\hat{B}|u\rangle$，得

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 = \langle u|\hat{A}^2|u\rangle\langle u|\hat{B}^2|u\rangle \geqslant |\langle u|\hat{A}\hat{B}|u\rangle|^2.$$

把$\hat{A}\hat{B}$中的厄密部分同反厄密部分分开[参见方程(7.29)]：

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} + \frac{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}{2} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} + \frac{i\hbar}{2},$$

我们能够把 $\langle u|\hat{A}\hat{B}|u\rangle$ 中的实部同虚部分开：

$$\langle u|\hat{A}\hat{B}|u\rangle = \left\langle \frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2} \right\rangle + \frac{i\hbar}{2},$$

并且重写薛华兹不等式

$$(\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 \geqslant \left\langle \frac{\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}}{2} \right\rangle^2 + \frac{\hbar^2}{4}.$$

理由更为充足地

$$\Delta A \cdot \Delta B \geqslant \frac{1}{2}\hbar. \qquad \text{证毕}$$

为了使得积 $\Delta A \cdot \Delta B$ 等于它的极小值 $\frac{1}{2}\hbar$，一方面有必要让薛华兹不等式简化为一个等式，因此 $\hat{A}|u\rangle = c\hat{B}|u\rangle$ (c 是一个任意常数)，另一方面，$\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$ 的平均值必定是零，亦即

$$\langle u|\hat{A}\hat{B}|u\rangle + \langle u|\hat{B}\hat{A}|u\rangle = (c^* + C)\langle u|\hat{B}^2|u\rangle = 0,$$

或 $\mathrm{Re}\, c = 0$. 总而言之，为了让不等式(8.9)简化为等式，必要和充分的是 $|u\rangle$ 满足方程

$$(A-\alpha)|u\rangle = i\gamma(B-\beta)|u\rangle, \qquad (8.10)$$

其中 α, β 和 γ 是一些任意的实常数.

把这个一般结果应用于前节的位置-动量对 (q_r, p_r)，就得出测不准关系

$$\Delta q_r \cdot \Delta p_r \geqslant \frac{1}{2}\hbar \quad (r = 1, 2, \cdots\cdots, N), \qquad (8.11)$$

如果 $|u\rangle$ 是方程

$$(p_r - i\gamma q_r)|u\rangle = (\alpha - i\gamma\beta)|u\rangle$$

的解，等式就实际上成立 (α, β, γ 是一些任意的实常数).

5. 动力学态的定义以及空间 $\mathscr{E}$ 的建造

一旦列出了量子体系的观测算符，确立了它们的对易关

系，我们接下来必须精确地确定各种可能的量子态. 我们必须建造一个让这些观测算符在其中起作用的希耳伯特空间. 为此，选择这一空间的一个基，然后由各个观测算符对这些基矢量的作用来定义这些算符，这样就足够了. 这个作用必须用这样一种方法来定义，以致代表物理量的所有算符实际上都是观测算符，而且它们实际上遵守观测算符的代数规则.

为了定义这个基，我们从观测算符的整个集合中选出对易观测算符 $A, B, C, \cdots$ 的一个完全系. 它们所代表的那些动力学变量的同时测量构成我们对体系的态所能得到的最大信息；所以它完全确定了体系的一个特定的动力学态. 结果，这些观测算符的各套本征值 $a, b, c, \cdots$ 确定 $\mathscr{E}$ 的一个矢量(可能相差一个常数): 任意地固定这个常数，我们得到某个表示的矢量 $|abc\cdots\rangle$. 让各本征值 $a, b, c, \cdots$ 在 $A, B, C, \cdots$ 的各别谱的整个范围上变化而得到的矢量 $|abc\cdots\rangle$ 的系综在 $\mathscr{E}$ 空间内组成一个完全正交系. 事实上，如果我们以适当的方式固定矢量 $|abc\cdots\rangle$ 的归一——把有限模方的所有矢量归一，把无限模方的矢量用狄拉克 δ 函数来归一——它将是 $\mathscr{E}$ 中的一个完全**正交**归一系. 因而我们由指明观测算符 $A, B, C, \cdots$ 的各别谱而得到了 $\mathscr{E}$ 的一个基.

基本观测算符 $A, B, C, \cdots$ 对这些矢量的作用是明显的. 能够代表物理量的其它各种观测算符的作用则尚待确定.

仅仅这些对易关系的知识一般说来足以——

(i) 证明 $A, B, C, \cdots$ 组成对易观测算符的一个完全系；

(ii) 推断它们各别的谱；

(iii) 推断其它观测算符对于它们的基矢量的作用.

换句话说，体系的观测算符的代数知识一般足以明确确

定它们在其中起作用的这个空间 $\mathscr{E}$[1].

剩下来还要检验如此定义的这个结构的内在一致性；换句话说，我们必须证实，代表物理量的算符实际上是观测算符。

注意这个理论眼下已经适宜于实验检验. 物理量原则上是由一些完全确定的测量操作定义的，而它们的谱直接受到实验的影响. 理论谱，也就是说，联系于各物理量的观测算符的本征值谱，当然有必要同这个实验谱恰相符合.

6. 具有经典模拟的一维量子体系

让我们把 §5 的建造方法应用于一个具有经典模拟的一维量子体系. 它的观测算符是 q 和 p 这两个观测算符的函数，它们服从对易关系

$$[q, p] = i\hbar. \tag{8.12}$$

位置 q 独自构成对易观测算符的一个完全系. 的确，q 同 p 和 q 的任何给定函数 $A(q, p)$ 的对易子是[方程(5.68)]

$$[q, A] = i\hbar \frac{\partial A}{\partial p}; \tag{8.13}$$

当且仅当 A 与 p 无关时，q 与 A 对易；换句话说，与 q 对易的那些观测算符都只是 q 的函数.

内在一致性的这些简单考虑对于 q 的本征函数和本征值谱加了很强的约束条件. 的确，设 $|q_0\rangle$ 是 q 的一个本征刃

$$q|q_0\rangle = q_0|q_0\rangle.$$

让我们写出，全同算符 $[q, p]$ 和 $i\hbar$ 对应于 $|q_0\rangle$ 具有相同的对角元:

---

1) 这一点仅当 $\mathscr{E}$ 关于该可观测算符是不可约的时才是正确的；这一条件，只是为了备案而在这里指出，在下面所有的论证中都是不言自明地假设了的. 我们将在第十五章 (§6) 中更为充分地讨论不可约性的记号和它的物理意义.

$$i\hbar\langle q_0|q_0\rangle = \langle q_0|qp|q_0\rangle - \langle q_0|pq|q_0\rangle.$$

$|q_0\rangle$ 必定不具有有限的模方；否则右边将恒等于零，而左边则是有限和不等于零的。

另一方面，考虑算符

$$S(\xi) = e^{-ip\xi/\hbar}. \tag{8.14}$$

它是观测算符 p 的一个依赖于参数 ξ 的函数。显然，它是一个幺正算符：

$$S^\dagger S = SS^\dagger = 1,$$

因为它的厄密共轭是

$$S^\dagger(\xi) = S(-\xi) = e^{-ip\xi/\hbar}.$$

应用方程(8.12)，得出

$$[q, S] = i\hbar\frac{\partial S}{\partial p} = \xi S.$$

换句话说

$$qS = S(q + \xi), \tag{8.15}$$

结果

$$qS|q_0\rangle = S(q + \xi)|q_0\rangle = (q_0 + \xi)S|q_0\rangle. \tag{8.16}$$

因此 $S|q_0\rangle$ 是 q 的一个本征值为 $(q_0 + \xi)$ 的本征矢。这个矢量当然不是零(否则 S 将不具有逆算符)；事实上，它的(无限的)模方与 $|q_0\rangle$ 的模方是相同的，因为 S 是幺正的：

$$\langle q_0|S^\dagger S|q_0\rangle = \langle q_0|q_0\rangle.$$

不论 ξ 在整个区间 $(-\infty, +\infty)$ 上取什么值，这一运算都能够履行。因此，通过对 $|q_0\rangle$ 的一次适当的幺正变换，我们能够组成 q 的一个在区间 $(-\infty, +\infty)$ 上具有任何给定本征值的本征矢。

最后，q 的谱必然是连续的，非简并的，并从 $-\infty$ 扩展到 $+\infty$；它的本征矢必然具有无限的模方。

用 $|q'\rangle$ 表示 q 的某一个本征值为 q' 的本征刃：

$$q|q'\rangle = q'|q'\rangle;$$

$|q'\rangle$ 确定到差别一个常数，它的模是由归一条件

$$\langle q'|q''\rangle = \delta(q' - q'') \tag{8.17}$$

来固定的。根据定义，空间 $\mathscr{E}$ 是由矢量 $|q'\rangle$ 的线性叠加组成的空间。

q 显然是这个空间的一个观测算符。实际上，矢量 $|q'\rangle$ 组成 $\mathscr{E}$ 的矢量和算符的某个表象（表象 $\{q\}$）的基，q 在这个表象中是对角的：

$$\langle q'|q|q''\rangle = q'\delta(q' - q''). \tag{8.18}$$

让我们证明，p 是空间 $\mathscr{E}$ 中的一个完全确定的厄密算符；为此目的，我们只须在表象 $\{q\}$ 中确定它的矩阵。

首先考虑由方程(8.14)定义的幺正算符 $S(\xi)$。既然这个算符满足方程（8.15），$S(\xi)|q'\rangle$ 就是 q 的一个本征值为 $(q' + \xi)$ 的本征矢：

$$S(\xi)|q'\rangle = c|q' + \xi\rangle,$$

c 是一个相因子[1]，它可能依赖于 ξ 和 q'。我们以这样一种方法来选择这个基的矢量的相位，以致

$$|q'\rangle = S(q')|0\rangle.$$

这样一来，不管什么 ξ 和 q'，相因子 c 总是等于 1。的确

$$\begin{aligned} S(\xi)|q'\rangle &= S(\xi)S(q')|0\rangle = e^{-ip\xi/\hbar}e^{-ipq'/\hbar}|0\rangle \\ &= e^{ip(\xi+q')/\hbar}|0\rangle = S(q' + \xi)|0\rangle \\ &= |q' + \xi\rangle, \end{aligned} \tag{8.19}$$

或者

$$\langle q'|S(\xi)|q''\rangle = \langle q'|q'' + \xi\rangle = \delta(q' - q'' - \xi).$$

我们从上面计算的 $S(\xi)$ 的矩阵元出发来推演 p 的表示

---

1) 鉴于 S 是幺正的，我们有

$$\begin{aligned} \langle q''|S^\dagger(\xi)S(\xi)|q'\rangle &= c^*(\xi, q'')c(\xi, q')\delta(q'' - q') \\ &= \delta(q'' - q'), \end{aligned}$$

由此式，$|c(\xi, q')| = 1$。

矩阵，注意到在 ξ 等于无限小量 ε 的极限下，

$$S(\varepsilon) \sim 1 - \frac{i}{\hbar} p\varepsilon,$$

结果

$$\delta(q' - q'' - \varepsilon) = \langle q'|S(\varepsilon)|q''\rangle \sim \delta(q' - q'') - \frac{i}{\hbar}\varepsilon\langle q'|p|q''\rangle,$$

由此

$$\langle q'|p|q''\rangle = \frac{\hbar}{i}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\delta(q' - q'') - \delta(q' - q'' - \varepsilon)}{\varepsilon}$$

$$= \frac{\hbar}{i}\delta'(q' - q''). \tag{8.20}$$

因为“函数” $\delta'(x)$ 是奇的，显而易见，

$$\langle q''|p|q'\rangle = \langle q'|p|q''\rangle^*,$$

因此算符 p 是厄密的.

我们同样可证实，q 和 p 实际上满足对易关系(8.12)

$$\langle q'|(qp - pq)|q''\rangle = (q' - q'')\langle q'|p|q''\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{i}(q' - q'')\delta'(q' - q'') = i\hbar\delta(q' - q'')$$

[我们已经用了附录 A 的恒等式 $(A.30)$].

剩下还要证明 p 是一个观测算符. 为了看出这一点，我们在表象 $\{q\}$ 中求解 p 的本征值问题. 设 $|p'\rangle$ 是本征值为 p' 的本征刃. 把方程

$$p|p'\rangle = p'|p'\rangle$$

在表象 $\{q\}$ 中写出，同时考虑到方程(8.20)，得

$$p'\langle q'|p'\rangle = \langle q'|p|p'\rangle = \int\langle q'|p|q''\rangle dq''\langle q''|p'\rangle$$

$$= \frac{\hbar}{i}\int\delta(q' - q'')\langle q''|p'\rangle dq''$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dq'}(\langle q'|p'\rangle).$$

这是变量 q' 的函数 $\langle q'|p\rangle$ 的微分方程，它的一般解是

$$\langle q'|p'\rangle = ae^{ip'q'/\hbar},$$

此处 a 是一个任意常数. 因而我们证实，p 的本征值 p' 具有一个从 $-\infty$ 扩展到 $+\infty$ 的连续谱.这些本征矢具有无限的模方. 如果我们把常数的值取为：$a = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}}$，它们将满足正交归一条件

$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p' - p'').$$

现在，p 显然是一个观测算符，因为矢量 $|p'\rangle$ 满足闭合关系·的确，投影算符

$$P_p \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} |p'\rangle dp'\langle p'|$$

在表象 $\{q'\}$ 中的矩阵元为

$$\begin{aligned}\langle q'|P_p|q''\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\langle q'|p'\rangle dp'\langle p'|q''\rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip'(q'-q'')/\hbar}dp' \\ &= \delta(q' - q'');\end{aligned}$$

由此，闭合关系：

$$P_p = 1.$$

用基本观测算符 p 和 q，我们能够建立表述体系的各种动力学变量的各个算符 $F(p, q)$. 我们容易保证这些算符是厄密的. 为了完全起见，人们必须进一步证明，它们实际上是观测算符. 但是，忽略这些严格性，不加证明地承认所有代表物理量的厄密算符都是观测算符，这在量子论中是有传统的.

7.由较简单空间的张量积来建造体系的 $\mathscr{E}$ 空间

对一个具有一维经典模拟的体系，知道了如何建立 $\mathscr{E}$ 空

间;那末对一个N维的具有经典模拟的体系,求解这同一个问题就是简单的.

在后一种情况下,动力学变量是 $2N$ 个位置和动量的基本变量的函数.代表这些变量的观测算符服从对易关系(8.6)和(8.7).它们可以组分为N对 $(q_1, p_1), (q_2, p_2), \cdots, (q_N, p_N)$,各由一个位置分量和它的共轭动量组成.一对中的每个观测算符与其它对中的所有观测算符对易.

一个给定对中的观测算符,譬如说 (q_i, p_i),可以看作是上节中研究的那种型式的一维体系的基本观测算符.人们知道如何建立这样一个体系的刃空间 $\mathscr{E}_i$.按照 § 6 的结果,$\mathscr{E}_i$ 由正交归一刃 $|q_i'\rangle$ 张成,$|q_i'\rangle$ 的指标 q_i' 是连续的,且可以取区间 $(-\infty, +\infty)$ 上的所有数值.

N维体系的动力学态的空间 $\mathscr{E}$ 是空间 $\mathscr{E}_1, \mathscr{E}_2, \cdots, \mathscr{E}_N$ 的张量积(参见第七章 § 6),

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}_1 \otimes \mathscr{E}_2 \otimes \cdots \otimes \mathscr{E}_N$$

也就是说,$\mathscr{E}$ 是刃

$$|q_1' q_2' \cdots q_N'\rangle \equiv |q_1'\rangle |q_2'\rangle \cdots |q_N'\rangle \tag{8.21}$$

所张的空间.对于空间 $\mathscr{E}_i$ 的各个算符 q_i, p_i,积空间 $\mathscr{E}$ 有一个完全确定的算符 q_i, p_i 与之相对应.因而我们在 $\mathscr{E}$ 中得到 $2N$ 个完全确定的算符,用来代表这 $2N$ 个基本变量.事实上,按照张量乘法的规则,对于部分空间的每个观测算符,有一个积空间的观测算符与之相对应;来自不同的部分空间的两个观测算符对易;来自同一个部分空间 $\mathscr{E}_i$ 的两个观测算符在 $\mathscr{E}$ 中服从同在 $\mathscr{E}_i$ 中一样的对易关系.所以,我们在 $\mathscr{E}$ 中确立的这 $2N$ 个算符 $q_1, \cdots, q_N, p_1, \cdots, p_N$ 是观测算符,并且实际上服从对易关系(8.6)和(8.7).

把各个本征值 $q_1', \cdots, q_N'$ 从 $-\infty$ 变到 $+\infty$ 而得到的矢量 $|q_1', \cdots, q_N'\rangle$ 的系综在 $\mathscr{E}$ 空间中组成一个基,并且定

义某个表象（表象 $\{q\}$）. 在这个表象中明晰地写下代表 q 和 p 的那些矩阵元是有启发性的. 为此目的，我们利用缩写记号

$$|q'\rangle \equiv |q'_1 q'_2 \cdots q'_N\rangle \tag{8.22}$$

$$\left.\begin{aligned}\delta(q'-q'') &\equiv \prod_{i=1}^{N}\delta(q'_i-q''_i)\\ &\equiv \delta(q'_1-q''_1)\delta(q'_2-q''_2)\cdots\delta(q'_N-q''_N)\end{aligned}\right\} \tag{8.23}$$

$$\frac{\partial}{\partial q'_n}[\delta(q'-q'')] \equiv \delta'(q'_n-q''_n)\prod_{i\neq n}\delta(q'_i-q''_i). \tag{8.24}$$

在最后的表示式中，用 $\Pi_{i\neq n}$ 来记一个让指标 i 取从 1 到 N 的所有整数值（只是值 n 除外）而得到的 $(N-1)$ 项的积.

应用 §6 的关系式(8.17)，(8.18)和(8.20)，我们相继地得到正交归一关系

$$\langle q'|q''\rangle = \prod_{i=1}^{N}\langle q'_i|q''_i\rangle = \delta(q'-q''), \tag{8.25}$$

代表坐标的（对角）矩阵元是

$$\begin{aligned}\langle q'|q_n|q''\rangle &= \langle q'_n|q_n|q''_n\rangle\prod_{i\neq n}\langle q'_i|q_i\rangle\\ &= q'_n\delta(q'-q''),\end{aligned} \tag{8.26}$$

而代表动量的（非对角）矩阵元为

$$\begin{aligned}\langle q'|p_n|q''\rangle &= \langle q'_n|P_n|q''_n\rangle\prod_{i\neq n}\langle q'_i|q''_i\rangle\\ &= \frac{\hbar}{i}\delta'(q'_n-q''_n)\prod_{i\neq n}\delta(q'_i-q''_i)\\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'_n}[\delta(q'-q'')].\end{aligned} \tag{8.27}$$

利用这些代表 p 和 q 的矩阵的显示式，我们容易证实对易关系(8.6)和(8.7).

体系的任何动力学变量是 p 和 q 的函数；所以 $\mathscr{S}$ 空间有

一个完全确定的算符与之相对应. 我们必须证实这个算符是一个观测算符. 但与上面提及的传统相协调，这一点在大多数情况下是不加证明地承认的.

从较简单空间的张量积来建造体系的刃空间是一种非常一般的程序.实际上,我们总是能够把体系的动力学变量表成一定数目的"基"变量的函数;现在,后者通常能够按类别分为若干套，以致属于某一套的任何变量能与其它各套的所有变量相容. 为了确定起见,假定这些"基"变量已经分组为两套 $(A_1, B_1, \cdots)$ 和 $(A_2, B_2, \cdots)$，而且型式(1)的各个变量是与型式(2)的每个变量相容的.每一套分别确定一个部分体系,它的刃空间是我们知道如何建造的. 设 $\mathscr{E}_1$, $\mathscr{E}_2$ 分别是部分体系(1)和(2)的空间. 显然,总体系的刃空间 $\mathscr{E}$ 是这两个部分空间的张量积

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}_1 \otimes \mathscr{E}_2.$$

II. 运 动 方 程

8. 演变算符和薛定谔方程

在量子现象的精密性尺度上，体系本身和观测仪器之间不存在纯净的分离. 根据这个事实,量子体系一旦受到观测,它的演变就不再是严格符合因果律.然而,一个同任何外界影响隔离的量子体系是以一种可以精确地预测的方式演变的. 设 $|\psi(t_0)\rangle$ 是一个代表它在时刻 t_0 的动力学态的刃矢量;代表它在以后的时刻 t 的态的刃矢量 $|\psi(t)\rangle$ 是由指明的 $|\psi(t_0)\rangle$ 而完全确定的,如果,正如我们今后将要假设的那样,这个体系在时间间隔 (t_0, t) 内不受到任何观测. 这个基本的演变定律将在这一节中讨论.

首先,我们假设**态的线性叠加在时间的进程上是保持的.**

结果，$|\psi(t_0)\rangle$ 同 $|\psi(t)\rangle$ 之间的这种对应性是线性的，而且由此可定义一个称为**演变算符**的线性算符 $U(t, t_0)$：

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle. \tag{8.28}$$

如果体系是**保守的**，也就是说它的能量由不是明显地依赖于时间的哈密顿量H表示，则 $U(t, t_0)$ 能够根据下述要求算得：一个能量为E的体系的运动是周期性的，而且它的(角)频率ω由爱因斯坦定律

$$E = \hbar\omega \tag{8.29}$$

给出。

的确，既然H的本征值张成空间$\mathscr{E}$，为了确定U，知道它对这些矢量中的各个的作用就足够了。设 $|u_E(t_0)\rangle$ 是H的一个相应于能量E的本征矢

$$H|u_E(t_0)\rangle = E|u_E(t_0)\rangle. \tag{8.30}$$

按照爱因斯坦定律，我们假设这一矢量在时间的进程中按照规律

$$|u_E(t)\rangle = e^{-i\omega(t-t_0)}|u_E(t_0)\rangle = e^{-iE(t-t_0)/\hbar}|u_E(t_0)\rangle$$

演变。或者，计及方程(8.30)，有

$$|u_E(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}|u_E(t_0)\rangle.$$

结果

$$U(t,t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}. \tag{8.31}$$

把这一方程的两边关于 t 求微分[1]，我们得到微分方程

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t, t_0) = HU(t, t_0). \tag{8.32}$$

$U(t, t_0)$ 是这一方程满足初始条件

---

1) 依赖于连续参数 t 的算符 $X(t)$ 关于 t 的微商是与函数的微商一样定义的：

$$\frac{dX}{dt} = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{X(t+\varepsilon) - X(t)}{\varepsilon}.$$

(参见习题8.3)

$$U(t, t_0) = 1 \tag{8.33}$$

的解.

我们假设,**即便当**量子体系不是保守的时,算符 $U(t, t_0)$ 也是微分方程(8.32)满足初始条件 (8.33) 的解. 作这样一次扩展是非常自然的. 在后一种情况下,H 明显地依赖于时间,关系式(8.29)失去所有的意义,算符 U 也不再由方程(8.31)给出.

注意 U 同样是由积分方程

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} HU(t', t_0')dt' \tag{8.34}$$

定义的.

方程(8.32)和(8.33),或积分方程(8.34)表达了量子体系的基本演变定律. 这一定律的等价表示是**薛定谔方程**,即是体系的动力学态的微分运动方程. 我们对方程(8.28)逐项求微分

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \left(\frac{d}{dt}U(t, t_0)\right)|\psi(t_0)\rangle,$$

并把 $\frac{d}{dt}U(t, t_0)$ 用它的表示式 (8.32) 替换. 最后有

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle. \tag{8.35}$$

为了使矢量 $|\psi(t)\rangle$ 的模方在时间的进程中保持不变,必要和充分的条件为 H 是厄密的; 这从薛定谔方程出发就可以证明. 我们总是假设哈密顿量保持它的厄密性质.

事实上,如果 H 是厄密的, $U(t, t_0)$ 就是一个**幺正算符**. 当 H 不依赖于时间时, 这一点能够立刻在 U 的显示式 (8.31) 中加以证实. 然而,即使 H 依赖于时间,按照薛定谔方程,我们有

$$|\psi(t + dt)\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar}Hdt\right)|\psi(t)\rangle.$$

鉴于H是厄密的，算符

$$U(t+dt, t) \equiv 1 - \frac{i}{\hbar} H dt$$

是一个无限小的幺正算符(参见第七章§22)：我们从时刻t的刃矢量通过一次无限小的幺正变换过渡到时刻$t+dt$的刃矢量．使我们能够从$|\psi; t_0\rangle$过渡到$|\psi; t\rangle$的这个变换$U(t, t_0)$因而是一些无限小幺正变换的持续；而$U(t, t_0)$，作为一些无限小幺正算符的积，是幺正的．

9. 薛定谔"表象"

薛定谔方程构成了描述量子现象的普遍框架，这是我们原来打算要在这一章中陈述的．如果我们只限于列出要点，这一框架可以用下述方式概括如下．

1）动力学态的定义

量子体系的动力学态是由一些有确切定义的量的集合来确定的，它们是相容变量的一个完全系的那些动力学变量所取的特定值．进行这套变量的同时测量，我们就明确地确定了体系在履行测量的时刻t的态．

2）体系的刃空间的定义

各个态能够用某个矢量空间$\mathscr{E}$内的一个刃矢量$|\chi\rangle$(归一，且确定到差别一个相因子)来表示(叠加原理)．各个动力学变量则由这一空间的一个观测算符表示；由这个观测算符的本征矢所代表的态都是这个变量具有完全确定值的态，这个变量的值因而就是属于该本征矢的本征值．观测算符满足某些代数规则，给出一些对易关系就能完全指明这些规则了．相容变量是由对易观测算符表示的．

3）几率的定义

如果人们对量子体系履行属于一个完全系的那些相容动

力学变量的同时测量，发现这个体系处在态 $|\chi\rangle$（即发现这些变量的一套特定值，$|\chi\rangle$ 所代表的动力学态就是由这些变量确定的）的几率等于矢量 $|\chi\rangle$（归一）同 $|\phi\rangle$ 的标积的模方，即

$$|\langle\chi|\phi\rangle|^2,$$

其中 $|\phi\rangle$ 代表体系在进行测量的瞬间的动力学态. 更为一般地，发现体系处在子空间 $\mathscr{E}_D$（即发现体系处在那个子空间的任何一个态）的几率等于投影子 P_D 在那个子空间的平均值，亦即

$$\langle P_D\rangle = \langle\phi|P_D|\phi\rangle.$$

4）运动方程

不存在任何外界干扰时，体系的动力学态在时间的进程中以一种严格因果的方式演变. 在空间 $\mathscr{E}$ 中代表它的矢量 $|\phi(t)\rangle$ 按照薛定谔方程(8.35)连续地运动. 换句话说，我们通过幺正变换(8.28)从 $|\phi(t_0)\rangle$ 转换到 $|\phi(t)\rangle$，其中的 $U(t, t_0)$ 是由方程(8.32)和(8.33)定义的一个幺正算符.

知道了体系在一给定初始时刻 t_0 的动力学态 $|\phi\rangle$，我们就能够由此预告在一给定的后来时刻 t_1 对体系所履行的任何测量的结果的统计分布. 的确，体系的动力学态在测量刚开始的那个瞬间是

$$|\phi(t_1)\rangle = U(t_1, t_0)|\phi\rangle,$$

结果，发现体系处在给定态 $|\chi\rangle$ 的几率是

$$|\langle\chi|\phi(t_1)\rangle|^2 = |\langle\chi|U(t_1, t_0)|\phi\rangle|^2. \qquad (8.36)$$

在对现象的上述描述中，体系的态是由一个运动的刃矢量 $|\phi(t)\rangle$ 表示的. 另一方面，物理量，或至少是那些不明显地依赖于时间的物理量，是由 $\mathscr{E}$ 空间的一些稳定的观测算符表示的；同样，这些观测算符的本征矢是 $\mathscr{E}$ 空间的稳定矢量，对于表示式(8.36)的矢量 $|\chi\rangle$ 和 $|\phi\rangle$，情况就是这样. 量子现

象的这一描述方式称为**薛定谔"表象"**[1].

10. 海森伯"表象"

对薛定谔"表象"的刃和观测算符做一次幺正变换，并给予那些变换后的量和变换前的那些量相同的物理意义，我们得到一种严格地等效于前述方式的现象描述方式. 在这样一次变换中，观测算符变换为一些具有相同本征值谱的观测算符；本征矢变换为本征矢；代数关系，对易关系，以及标积等都保持守恒. 既然可以测量的量都是标积的模数[参见方程(8.36)]，显而易见，用新的量所作的预告同用原有的量所作的预告是完全一样的.

特别是，我们通过对薛定谔"表象"的刃和观测算符进行幺正的、与时间有关的变换 $U^{\dagger}(t, t_0)$ 而定义海森伯"表象". 让我们把下标 S 加于原有的量，下标 H 加于新的量. 代表体系在时刻 t 的动力学态的刃

$$|\psi_S(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi_S(t_0)\rangle$$

被变换为一个稳定刃

$$|\psi_H\rangle = U^{\dagger}(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle. \tag{8.37}$$

反之，薛定谔"表象"的观测算符 A_S 变换为

$$A_H(t) = U^{\dagger}(t, t_0)A_S U(t, t_0). \tag{8.38}$$

一般说来，即便当 A_S 不是明显地依赖于时间时，A_H 也不是稳定的. 的确，如果我们考虑微分方程 (8.32) 和它的厄

---

1) 我们一定不要把这一"表象"概念同矢量空间的矢量和算符的矩阵表示记号相混淆. 我们这里论述的"表象"是量子体系的运动表象. 为了避免混淆，更为可取的是在此处把它说成是薛定谔"描述方式". 不幸"表象"这个术语已经由于惯用而根深蒂固. 为了区别这两个概念，我们商定每当在现在这个意义下使用它时，就把"表象"这个词放在引号中间. 这里所做的区分类似于矩阵的幺正变换同矢量和算符的幺正变换之间的区分(参见第七章第 III 节).

密共轭方程，我们对最后那个方程逐项求微分，得到

$$i\hbar\frac{dA_H}{dt} = -U^\dagger HA_SU + i\hbar U^\dagger\frac{\partial A_S}{\partial t}U + U^\dagger A_S HU$$

$$= U^\dagger[A_S, H]U + i\hbar U^\dagger\frac{\partial A_S}{\partial t}U. \qquad (8.39)$$

在这个方程中，H是薛定谔"表象"的哈密顿量. 引进海森伯"表象"的哈密顿量：

$$H_H = U^\dagger HU,$$

我们有

$$U^\dagger[A_S, H]U = [A_H, H_H].$$

另一方面，薛定谔"表象"的基本观测算符的函数 A_S 可能明显地依赖于时间；(8.39) 的右边考虑了这一事实. $\frac{\partial A_S}{\partial t}$ 是薛定谔"表象"的观测算符的某个函数. 如果 $\frac{\partial A_H}{\partial t}$ 是把后面的那些观测算符用海森伯"表象"的相应观测算符来代替而得到的那个函数，则显而易见

$$\frac{\partial A_H}{\partial t} = U^\dagger\frac{\partial A_S}{\partial t}U.$$

因而方程(8.39)写为

$$i\hbar\frac{dA_H}{dt} = [A_H, H_H] + i\hbar\frac{\partial A_H}{\partial t}. \qquad (8.40)$$

这一方程称为**海森伯方程**.

最后，海森伯"表象"是由给薛定谔"表象"的矢量空间强加一个总体运动而得到的，这个运动以这样一种方法选择，以致量子体系的动力学态由一稳定刃 $|\psi_H\rangle$ 表示. 换句话说，**海森伯"表象"的任何稳定刃表示量子体系的一种可能的运动.** 反之，各种物理量是由在时间的进程中按照定律(8.38)演变，或者完全是一回事，说成是在初始条件 $A_H(t_0) = A_S(t_0)$ 下按照海森伯方程(8.40)演变的那些观测算符表示的.

方程(8.38)和(8.40)同样好地适用于海森伯表象的观测算符的任何函数，特别是适用于表示式 $\exp(i\xi A_H)$，或其本征值位于 A_H 的谱的某个给定域 D 的这样一些本征矢所张成的子空间上的投影子 $P_D^{(H)}$。

同样，代表相容变量的系综的刃 $|\chi_H\rangle$ 一般依赖于时间，而且是由它的薛定谔"表象"的同系物 $|\chi_S\rangle$ 由公式

$$|\chi_H(t)\rangle = U^\dagger(t, t_0)|\chi_S\rangle \tag{8.41}$$

推演的。

让我们假定，量子体系的运动在时刻 t_0 以后由(稳定的)刃 $|\psi_H\rangle$ 表示。在后来的时刻 t_1 履行一次测量而发现它处在态 $|\chi_H\rangle$ 的几率是

$$|\langle\chi_H(t_1)|\psi_H\rangle|^2,$$

它显然等于用薛定谔"表象"的相应刃所得到的量[方程(8.36)]，因为标积在幺正变换 $U^\dagger(t, t_0)$ 下是不变的。

11. 海森伯"表象"和对应原理

如上所示，薛定谔的"表象"同海森伯的"表象"是严格地等价的。实际上，薛定谔"表象"用得更为经常，因为它更适宜于计算。事实上，薛定谔方程(矢量之间的方程)**先验地**比海森伯方程(算符之间的方程)较易于求解。然而，量子体系的某些一般性质在海森伯"表象"中更为显而易见。

经典理论同量子论之间的形式上的相似在海森伯"表象"中尤其显著。事实上，量子体系的运动，正如经典体系的运动一样，在海森伯"表象"中是作为一种与之相联系的动力学变量的运动出现的。

让我们考虑一个具有经典模拟的量子体系，并让我们比较这两个体系的运动。对于经典体系的每一个物理量，有一个量子体系的物理量与之相对应。唯一的差别在于，经典体

系的物理量是一些服从普通代数规则的量，而它们的量子模拟则是一些服从非对易代数规则的算符.但是,只要我们能够认为非对易代数的表示式与普通代数的表示式一致，量子化的物理量的运动方程同它们的经典模拟的运动方程就是全同的。的确,变数 $q_1, \cdots, q_N$ 和 $p_1, \cdots, p_N$ 的海森伯方程写为

$$\begin{aligned}\frac{dq_i}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[q_i, H] = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (i = 1, 2, \cdots, N)\\ \frac{dp_i}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[p_i, H] = \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1, 2, \cdots, N).\end{aligned} \tag{I}$$

为了得到这些表示式,不但是 q 同 p 之间的基本对易关系,而且还有由它们引出的性质(5.67)和(5.68)，都已经被考虑了。方程组 (I) 在形式上同经典力学的哈密顿正则方程全同。

更为一般地,一个经典的动力学变量

$$A_{\mathrm{Cl.}} = A(q_1, \cdots, q_N; p_1, \cdots, p_N; t)$$

服从运动方程

$$\frac{dA_{\mathrm{Cl.}}}{dt} = \{A_{\mathrm{Cl.}}, H_{\mathrm{Cl.}}\} + \frac{\partial A_{\mathrm{Cl.}}}{\partial t}, \tag{8.42}$$

此处 $\{A_{\mathrm{Cl.}}, H_{\mathrm{Cl.}}\}$ 按照定义

$$\{A, H\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial H}{\partial q_i}\right)$$

标示 $A_{\mathrm{Cl.}}$ 和 $H_{\mathrm{Cl.}}$ 的泊松括号。

我们看到,经典方程(8.42)同相应的海森伯方程全同，只要人们能够认为泊松括号 $\{A, H\}$ 与对易子 $[A_H, H_H]/i\hbar$ 一致。利用基本的对易关系，以及对易代数的规则同泊松括号代数的规则之间的相似性，只要在泊松括号的显示式中合适地选择 q 和 p 的阶数，我们就能实际上证明这两个表示式的同一性。

12. 运动常数

运动常数的概念在海森伯"表象"中特别容易掌握. 一个**不明显地依赖于时间**的动力学变量是一个运动常数，如果在海森伯"表象"中代表它的观测算符 C_H 在时间上保持恒定的话. 结果，它的本征矢系保持稳定，而这个量的可能测量的结果的统计分布总是与从事测量的时刻无关的.

按照运动常数的上述定义

$$i\hbar\frac{d}{dt}C_H = [C_H, H_H] = 0.$$

这些运动常数因而由一些**与哈密顿量对易的观测算符**表示. 这个结果在薛定谔"表象"和在海森伯"表象"中同样好地保持正确，因为对易关系从一个"表象"过渡到另一个时是守恒的.

再者，鉴于 C_H 与时间无关，它等于其初始值 C_S

$$C_H(t) = C_H(t_0) = C_S = C.$$

特别是，如果体系的动力学态在海森伯"表象"中用 C 的一个本征矢表示，

$$C|\psi_H\rangle = C|\psi_H\rangle,$$

变量 C 在时间的进程中始终保持一个完全确定的值 c；因而说本征值 c 是一个**好量子数**. 正如能够容易看出的，C 与演变算符 $U(t, t_0)$ 对易；因此，薛定谔"表象"的刃 $|\psi_S(t)\rangle$ 在本征值 c 的子空间中总存在，

$$C|\psi_S(t)\rangle = c|\psi_S(t)\rangle.$$

13. 平均值的运动方程　时间-能量测不准关系

从海森伯"表象"出发，对一个给定的观测算符 A_H 的平均值写下微分方程是特别简单的. 的确，既然 $|\psi_H\rangle$ 与时间无关，有

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\frac{d}{dt}\langle\psi_H|A_H|\psi_H\rangle$$
$$=\left\langle\psi_H\left|\frac{dA_H}{dt}\right|\psi_H\right\rangle.$$

利用海森伯方程，我们又一次得出方程(5.72)：

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle+\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle. \tag{8.43}$$

特别是，我们对方程组 (I) 进行这一运算就得到厄任费斯脱方程(第六章 § 2).

作为方程(8.43)的应用，我们给时间-能量不确定性关系(参见第四章 § 10) 一个确切的陈述. 考虑一个体系，它的哈密顿量H不明显地依赖于时间，并设A是这个体系的另一个观测算符，它也不明显地依赖于时间. 我们在一个给定的时刻t考虑体系的动力学态. 设$|\psi\rangle$是代表这个态的矢量. 把ΔA，ΔE 分别称为A和H的均方根偏差. 把薛华兹不等式应用于矢量 $(A-\langle A\rangle)|\psi\rangle$ 和 $(H-\langle H\rangle)|\psi\rangle$，并进行一些与 § 4 中一样的运算，经过一些计算以后，我们发现

$$\Delta A\cdot\Delta E\geqslant\frac{1}{2}|\langle[A,H]\rangle|, \tag{8.44}$$

等式是当$|\psi\rangle$满足方程

$$(A-\alpha)|\psi\rangle=i\gamma(H-\varepsilon)|\psi\rangle$$

时实现的，此处 α，γ 和 ε 是一些任意的实常数 [参见方程(8.10)]. 然而，按照方程(8.43)，

$$\langle[A,H]\rangle=i\hbar\frac{d\langle A\rangle}{dt};$$

不等式(8.44)可以同样好地写成

$$\frac{\Delta A}{\left|\frac{d\langle A\rangle}{dt}\right|}\cdot\Delta E\geqslant\frac{1}{2}\hbar,$$

或者

$$\tau_A \cdot \Delta E \geqslant \frac{1}{2}\hbar, \tag{8.45}$$

如果我们设

$$\tau_A = \frac{\Delta A}{|d\langle A\rangle|dt|}; \tag{8.46}$$

τ_A是作为 A 的统计分布演变的一个时间特征量而出现的. 它是这一分布的中心 $\langle A\rangle$ 被移位一个等于它的宽度 ΔA 的数量所需的时间. 换句话说，它是这个统计分布受到明显修正所必需的时间. 用这种方式，我们能够对体系的各个动力学变量定义一个特征的演变时间.

设 τ 是如此定义的那些时间中最短的. 可以认为 τ 是体系演变本身的特征时间：不论在一个瞬时 t' 对体系进行什么样的测量，测量结果的统计分布同在时刻 t 将要得到的分布本质上相同，只要差值 $|t-t'|$ 小于 τ.

按照不等式 (8.45)，这一时间 τ 和能量展开 ΔE 满足时间-能量测不准关系

$$\tau \cdot \Delta E \geqslant \frac{1}{2}\hbar. \tag{8.47}$$

特别是，如果体系处在定态，不论什么 A，$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = 0$，结果 τ 是无限大；然而，$\Delta E = 0$，与关系式(8.47)相一致.

14. 中间“表象”

薛定谔“表象”和海森伯“表象”不是仅有的可能“表象”. 薛定谔(或海森伯)“表象”的矢量和观测算符的任何幺正变换定义一个新的“表象”. 所有这些“表象”严格地提供量子现象的等价描述. 所以实际上，人们采用的总是那种最为适宜于各个特定问题的解的“表象”.

量子力学的任何问题本质在于或多或少完全地和或多或

少精确地测定幺正算符 $U(t, t_0)$ 的性质；的确，所有的理论预告都是由 $U(t, t_0)$ 的矩阵元（例如出现在方程(8.36)中的那一个）给出的。 因而方程(8.32)的解是理论的中心问题。当我们知道这个方程的一个近似解 $U^{(0)}(t, t_0)$ 时，通常方便的是让

$$U = U^{(0)}U'. \tag{8.48}$$

把这一表示式代入方程 (8.32)，并用幺正算符 $U^{(0)\dagger}$ 左乘两边，我们得到微分方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} U' = U^{(0)\dagger} \left(HU^{(0)} - i\hbar \frac{dU^{(0)}}{dt} \right) U'; \tag{8.49}$$

U' 是这个方程满足初始条件

$$U'(t_0, t_0) = 1$$

的解。如果这个近似确实有理，U' 就是一个随时间缓慢变化的算符；实际上从方程 (8.49) 来看，这一点是相当明显的，因为在这种情况下，算符 $HU^{(0)} - i\hbar(dU^{(0)}/dt)$ 几乎等于零。所以，方程(8.49)比方程(8.32)更加适宜于作为近似解[1]。

鉴于 $U^{(0)}$ 是幺正的，算符

$$H^{(0)}(t) = i\hbar \left[\frac{d}{dt} U^{(0)}(t, t_0) \right] U^{(0)\dagger}(t, t_0)$$

是厄密的（习题 8.6）。所以 $U^{(0)}(t, t_0)$ 是薛定谔方程的严格解：

$$i\hbar \frac{d}{dt} U^{(0)} = H^{(0)}U^{(0)}, \quad U^{(0)}(t_0, t_0) = 1. \tag{8.50}$$

因而哈密顿量 H 是两个厄密算符之和

$$H = H^{(0)} + H',$$

其中的一个，即 H'，在此处所考虑的假设下，可以看作是一

1) 此处讨论的这个方法是微分方程基本理论中的变易常数法对于算符之间的微分方程的推广。

个小的微扰，而另一个，即 $H^{(0)}$，是一个其解为已知的薛定谔方程的哈密顿量．用这个记号，方程(8.49)于是能够简单地写成

$$i\hbar\frac{d}{dt}U' = H'_I U', \tag{8.51}$$

表示式中的 H'_I 是用与时间有关的幺正变换从 H' 推演出来的，

$$H'_I = U^{(0)\dagger}H'U^{(0)} \tag{8.52}$$

因此，方便的是在整个讨论中采用一个介于薛定谔和海森伯"表象"之间的"表象"；也就是把幺正变换 $U^{(0)\dagger}(t, t_0)$ 应用于薛定谔"表象"的矢量和观测算符而得到的那个"表象"．让我们用附标 I 来标记这个新表象的矢量和观测算符：

$$|\psi_I(t)\rangle = U^{(0)\dagger}|\psi_S(t)\rangle. \tag{8.53}$$

$$A_I(t) = U^{(0)\dagger}A_S U^{(0)}. \tag{8.54}$$

在这个中间"表象"中，代表量子体系的一种可能运动的矢量 $|\psi_I(t)\rangle$ 等于 $U'|\psi_S(t_0)\rangle$．按照方程 (8.51)，这个矢量随时间(缓慢)运动时满足薛定谔方程

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_I(t)\rangle = H'_I|\psi_I(t)\rangle, \tag{8.55}$$

方程的哈密顿量是微扰能量 H'_I．另一方面，物理量是由运动的观测算符表示的；这些观测算符事实上受制于用"未受扰动"的哈密顿量 $H_I^{(0)}$ 写下的海森伯运动方程

$$i\hbar\frac{d}{dt}A_I = [A_I H_I^{(0)}] + i\hbar\frac{\partial A_I}{\partial t}, \tag{8.56}$$

只要对方程(8.54)进行一种类似于为了确定海森伯方程而应用于方程(8.38)的方法，就容易证明这一点．

III. 理论的各种表象

15. 表象的定义

按照前面两节中逐步展开的理论，当我们定义了体系的基本动力学变量，典型的观测算符所服从的对易关系，以及支配体系运动的哈密顿量的显示式（作为这些基本观测算符的函数）以后，描述量子体系的所有要素都已经呈现。于是，能够建立代表体系的各种可能动力学态的那些矢量的 $\mathscr{E}$ 空间；对联系于体系的各种观测算符求解其本征值问题，并定义 $\mathscr{E}$ 的矢量的物理意义，确立并求解基本的运动方程，以至最后，计算现在理论已经能够精确预告的、测量结果的统计分布。

为了在 $\mathscr{E}$ 空间中求解所有这些分析或代数问题，我们总是能够，而且以无限多种方法，在那个空间中选择矢量的一个完全、正交归一系，并在以这一套矢量作为基的表象中把 $\mathscr{E}$ 的算符和矢量用它们的矩阵来表示。

体系的任何动力学变量就这样由一个厄密方阵表示，任何动力学态则由一个确定到差别一个常数的列矢量表示（或同样好地由厄密共轭行矢量表示）。

有多少种不同的基，理论就有多少个可能表象。我们用幺正变换从一个过渡到另一个。矩阵的这些幺正变换一定不要与算符和矢量的幺正变换相混淆，按照第 II 节的讨论，后者是用来改变量子体系本身的运动“表象”的。

最为经常地，表象是由给定的对易观测算符的一个完全系来定义的；它们的共同本征矢就是这个表象的基。表象的基本观测算符以及这些观测算符的所有函数都由对角矩阵表示。

16. 波动力学

波动力学是由在薛定谔"表象"和在一个位置变量为对角的表象中表述量子论而得到的.

让我们再来讨论在§7中研究的、具有一个N维经典模拟的量子体系. 位置坐标 $q_1, q_2, \cdots, q_N$ 组成对易观测算符的一个完全系，且定义某个表象——$\{q\}$ 表象. 这个表象早已被用来建造空间本身了. 合适地选择基矢量的相位和归一，我们对 q 和 p 的矩阵元得到过一些非常简单的表示式[方程(8.26)和(8.27)].

$\{q\}$ 表象的基本方程是正交归一关系 (8.25) 和那个闭合关系，仿效§7的缩写记号 $(dq \equiv dq_1 dq_2 \cdots dq_N)$，可以把它写成

$$P_q \equiv \int |q'\rangle dq' \langle q'| = 1. \qquad (8.57)$$

任何刃 $|\psi\rangle$ 是由具有分量 $\langle q'|\psi\rangle$ 的单列矩阵表示的. 用波动力学的语言来说，位形空间坐标 $q'_1, q'_2, \cdots q'_N$ 的这个函数[它能够同样好地写成 $\psi(q'_1, q'_2 \cdots, q'_N)$] 是代表体系动力学态的一个波函数:

$$\langle q'|\psi\rangle \equiv \langle q'_1 q'_2 \cdots q'_N\rangle \equiv \psi(q'_1, q'_2, \cdots, q'_N). \qquad (8.58)$$

正如在波动力学中定义的，$|\psi\rangle$ 同 $|\varphi\rangle$ 的标积等于相应的那些波函数的标积:

$$\langle \varphi|\psi\rangle = \langle \varphi|P_q|\psi\rangle = \int \langle \varphi|q'\rangle dq' \langle q'|\psi\rangle$$

$$= \int \varphi^*(q')\psi(q')dq'. \qquad (8.59)$$

让我们证实波动力学的算符同在 $\{q\}$ 表象中代表观测算符的矩阵之间的同一性.

利用代表观测算符 q_n 的矩阵的表示式 (8.26)，我们证实

$q_n|\psi\rangle$ 是由波函数

$$\langle q'|q_n|\psi\rangle = q'_n\langle q'|\psi\rangle = q'_n\psi(q')$$

表示的. 更为一般地,位形空间坐标的任意函数

$$V(q) \equiv V(q_1, q_2, \cdots, q_N)$$

对刃 $|\psi\rangle$ 的作用是用 $V(q')$ 与 $\psi(q')$ 相乘而得到的函数来表示的,

$$\langle q'|V(q)|\psi\rangle = V(q')\psi(q'). \tag{8.60}$$

利用代表观测算符 p_n 的矩阵的显示式(8.27),我们证实 $p_n|\psi\rangle$ 由波函数

$$\begin{aligned}\langle q'|p_n|\psi\rangle &= \int\langle q'|p_n|q''\rangle dq''\langle q''|\psi\rangle \\ &= \frac{\hbar}{i}\int\frac{\partial}{\partial q'_n}[\delta(q'-q'')]\psi(q'')dq'' \\ &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'_n}\psi(q')\end{aligned} \tag{8.61}$$

表示. 所以,p_n 是用从左边作用于波函数的偏微分运算 $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial q_n}$ 表示的.

因而,我们原来打算要做的验证,对位置坐标的函数[方程(8.60)]和对动量分量[方程(8.61)]来说,实际上已经得到证实. 现在,既然任何观测算符是 p 的、和 q 的函数的代数函数,这一验证对于任何观测算符都保持正确;因此,任何物理量 $A(q;p)$ 在波动力学中由算符

$$A\left(q;\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)$$

表示.

作为一个例证,让我们考虑体系的能量 H. 假设势能是纯静态的,H 写为

$$H(q;p) = \sum_i\frac{p^2}{2m_i} + V(q_1, \cdots, q_N).$$

在 $\{q\}$ 表象中代表能量的矩阵具有形式

$$\langle q'|H|q''\rangle = H\left(q'; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\delta(q'-q'')$$

$$= \left[\sum_i \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\right)\frac{\partial^2}{\partial q_i'^2} + V(q')\right]\delta(q'-q'').$$

在最后一行中，括号中的表示式必须看作是作用在作为 q' 的函数的 $\delta(q'-q'')$ 上的一个算符。所以，矢量 $H|\psi\rangle$ 由波函数

$$\langle q'|H|\psi\rangle \equiv H\psi(q') = \left[\sum_i -\frac{\hbar^2}{2m_i}\frac{\partial}{\partial q_i'^2} + V(q')\right]\psi(q')$$

表示。

最后，如果我们在薛定谔“表象”的框架中写出 $\{q\}$ 表象中的基本运动方程 (8.35)，我们又一次得出常见形式的薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q;t) = H\psi(q;t).$$

这样就完成了波动力学同量子论在 $\{q\}$ 表象和在薛定谔“表象”中的表述之间的同一性的证明。

17. 动量表象 ($\{p\}$ 表象)

作为表象的另一个例子，我们来谈谈 $\{p\}$ 表象，在这个表象中动量的分量是对角的。让我们用

$$|p_1'\rangle \equiv |p_1'\rangle|p_2'\rangle\cdots|p_N'\rangle$$

来表示这个表象的基矢。它们是 $p_1, p_2, \cdots p_N$ 的具有本征值 $p_1', p_2', \cdots p_N'$ 的共同本征矢。假设这些矢量是正交归一的：

$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'').$$

它们满足闭合关系

$$P_p \equiv \int |p'\rangle dp' \langle p'| = 1,$$

(我们在整个这一节中使用与§7和§16中引进的记号相类似的缩写记号).

与§6中的结果相一致，矢量 $|p'\rangle$ 在 $\{q\}$ 表象中的波函数是

$$\langle p'|q'\rangle \equiv \prod_{i=1}^{N} \langle q_i'|p_i'\rangle$$

$$= (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}N} e^{i(p_1'q_1'+\cdots+p_N'q_N')/\hbar}.$$

作为 q' 和 p' 的函数来考虑，$\langle p'|q'\rangle (= \langle q'|p'\rangle^*)$ 是把 $\{q\}$ 表象的矩阵变换为 $\{p\}$ 表象的矩阵的幺正矩阵 S. 在后一个表象中，刃矢量 $|\psi\rangle$ 是由它的"在动量空间中的波函数"表示的

$$\Phi(p') \equiv \langle p'|\psi\rangle.$$

显然，$\Phi(p')$ 是位形空间的波函数 $\Psi(q') \equiv \langle q'|\psi\rangle$ 的傅里叶变换(合适地归一):

$$\Phi(p') = \langle p'|\psi\rangle = \int \langle p'|q'\rangle dq' \langle q'|\psi\rangle$$

$$= (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}N} \int \Psi(q') e^{-i(p_1'q_1'+\cdots+p_N'q_N')/\hbar} dq'.$$

容易看出（事实上我们能够直接证明)，算符 p_n 对函数 $\Phi(p')$ 的作用简化为同 p_n' 相乘，而 q_n 的作用则由偏微分运算 $i\hbar \dfrac{\partial}{\partial p_n'}$ 表示.

作为一个例子，让我们在 $\{p\}$ 表象中写下一个质量为 m 的粒子在一静态势 $V(r)$ 中的薛定谔方程. 体系的能量由观测算符

$$H(r, p) \equiv \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

表示. 基矢 $|\boldsymbol{p}'\rangle$ 依赖于三个动量坐标 p'_x, p'_y, p'_z, 且满足正交归一和闭合关系:

$$\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'')\equiv\delta(p'_x-p''_x)\delta(p'_y-p''_y)\delta(p'_z-p''_z)$$
$$=\langle\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{p}''\rangle$$
$$P_p\equiv\int|\boldsymbol{p}'\rangle d\boldsymbol{p}'\langle\boldsymbol{p}'|=1.$$

把 $\{\boldsymbol{r}\}$ 表象的矩阵变换为 $\{\boldsymbol{p}\}$ 表象的矩阵的幺正变换矩阵 S 是

$$\langle\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{r}'\rangle=(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}e^{-i(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}')/\hbar}.$$

所以, $V(\boldsymbol{r})$ 在 $\{\boldsymbol{p}\}$ 表象中的矩阵元明显地写成

$$\langle\boldsymbol{p}'|V|\boldsymbol{p}''\rangle=\iint\langle\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{r}'\rangle d\boldsymbol{r}'\langle\boldsymbol{r}'|V(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}''\rangle d\boldsymbol{r}''\langle\boldsymbol{r}''|\boldsymbol{p}''\rangle$$
$$=(2\pi\hbar)^{-3}\iint e^{-i(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}')/\hbar}d\boldsymbol{r}'V(\boldsymbol{r}')\delta$$
$$\times(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')d\boldsymbol{r}''e^{i(\boldsymbol{p}''\cdot\boldsymbol{r}'')/\hbar}$$
$$=(2\pi\hbar)^{-3}\int V(\boldsymbol{r}')e^{-i(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'')\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}d\boldsymbol{r}'.$$

让我们设

$$\mathscr{V}(\boldsymbol{k})=(2\pi\hbar)^{-3}\int V(\boldsymbol{r})e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}d\boldsymbol{r}.$$

于是我们有

$$\langle\boldsymbol{p}'|V|\boldsymbol{p}''\rangle=\mathscr{V}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}''),$$

而算符 H 在 $\{p\}$ 表象中的矩阵元是:

$$\langle\boldsymbol{p}'|H|\boldsymbol{p}''\rangle=\frac{p'^2}{2m}\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'')+\mathscr{V}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'').$$

让我们用 $\Phi(\boldsymbol{p}')$ 来表示动力学态 $|\phi\rangle$ 在动量空间中的波函数,在通常的术语意义上,它的波函数是 $\Psi(\boldsymbol{r}')$:

$$\Phi(\boldsymbol{p}')=\langle\boldsymbol{p}'|\phi\rangle=\int\langle\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{r}'\rangle d\boldsymbol{r}'\langle\boldsymbol{r}'|\phi\rangle$$
$$=(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\int e^{-i(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}')/\hbar}\Psi(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'.$$

在波动力学中写作

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r};t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+V(\boldsymbol{r})\right]\Psi(\boldsymbol{r};t)$$

的薛定谔方程在 $\{\boldsymbol{p}\}$ 表象中取一个积分-微分方程的形式:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Phi(\boldsymbol{p};t)=\frac{p^2}{2m}\Phi(\boldsymbol{p};t)$$
$$+\int\mathscr{V}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\Phi(\boldsymbol{p}';t)d\boldsymbol{p}'.$$

18. 一个例子　自由波包的运动

作为前面那些考虑的应用，考虑自由波包($V=0$)的运动.

用 $|\psi\rangle$ 表示时刻 $t=0$ 的态矢量，用 $\psi(\boldsymbol{r})$ 和 $\varphi(\boldsymbol{p})$ 分别表示这一矢量在 $\{\boldsymbol{r}\}$ 和 $\{\boldsymbol{p}\}$ 表象中的波函数. 在以后的某个时刻 t，体系的动力学态由矢量

$$|\Psi\rangle=e^{-iHt/\hbar}|\psi\rangle$$

给出，此处 $H=\boldsymbol{p}^2/2m$ 是自由粒子的哈密顿量. 动量是一个运动常数，它的平均值在时间上保持恒定；这一点对于群速度

$$\boldsymbol{v}=\frac{\langle\boldsymbol{p}\rangle}{m}$$

也保持正确.

我们知道(第六章 § 3)，如果 t 足够小，波包的展开始终是可以忽略的. 我们打算把这个陈述作得更为贴切，还打算证明，当展开可以忽略的这些条件得到满足时，波包实际上是没有畸变地传播的，而且在一个非常好的近似下，可以把它写成

$$\psi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t).$$

这个近似的波函数表示矢量

$$|\overline{\Psi}\rangle=e^{-i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v})t/\hbar}|\psi\rangle,$$

这是或者利用和推广性质(8.16)，或者在{$\boldsymbol{p}$}表象中审视一下相应的波函数就能容易看出的。体系处在态$|\Psi\rangle$的几率越接近于1，这个近似就越好；换句话说，我们必须有

$$1-|\langle\Psi|\bar{\Psi}\rangle|^2 \ll 1.$$

用上面所给的那些表示式代替$|\Psi\rangle$和$|\bar{\Psi}\rangle$，我们发现

$$|\langle\Psi|\bar{\Psi}\rangle| = \left|\langle\phi|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{(\boldsymbol{p}-m\boldsymbol{v})^2}{2m}t\right)|\phi\rangle\right|.$$

右边的矩阵元在{$\boldsymbol{p}$}表象中估算特别简单；我们有

$$\langle\phi|\exp\left(\frac{i}{\hbar}\frac{(\boldsymbol{p}-m\boldsymbol{v})^2}{2m}t\right)|\phi\rangle$$

$$=\int|\varphi(\boldsymbol{p})|^2 e^{i(\boldsymbol{p}-m\boldsymbol{v})^2 t/2m\hbar}d\boldsymbol{p}.$$

如果我们假设，波包$\varphi(\boldsymbol{p})$是图4.1中所描述的那种型式，它是这样一个函数：围绕平均值$\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}$呈现有一个非常明显的、线度为$\Delta p$的峰，此处$\Delta p$是代表粒子动量的均方根偏差的矢量$\Delta\boldsymbol{p}$的大小。在这一假设下，右边的指数在这个峰的整个区域上非常接近于一，只要

$$(\Delta p)^2 t/2m\hbar \ll 1$$

或者

$$\frac{\Delta p}{m}t \ll \frac{2\hbar}{\Delta p}.$$

所以当这一条件满足时，这个近似是相当有理的。现在这一有效性条件正好就是条件

$$\text{展开} \ll \text{宽度}.$$

在第六章§3研究波包的展开时，我们已经确定过这个条件了[条件(6.15)]。

19. 其它表象　能量在其中为对角的表象

前面这些例子告诉我们，量子论的各种方程按照采用哪

一个表象而呈现出非常不同的形式。因此计算的程序从一个表象到另一个表象能够很不一样。

在量子论的各个表象中间，有一些表象在保守系的处理中是特别有用的，原因是薛定谔方程所取的形式非常简单：它们是一些能量在其中为对角的表象[1]。这样一个表象的基矢 $|E\alpha\rangle$ 可用能量的本征值 E，以及同 H 一起组成观测算符的基的其它一些运动常数的本征值的系集 α 来标记。在薛定谔"表象"中代表体系动力学态的矢量 $|\psi(t)\rangle$ 由"波函数"

$$\psi(E, \alpha; t) \equiv \langle E\alpha|\psi(t)\rangle$$

表示。后者满足薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(E, \alpha; t) = \langle E\alpha|H|\psi(t)\rangle$$

$$= E\psi(E, \alpha; t).$$

所以我们就有

$$\psi(E\alpha; t) = \psi(E\alpha: t_0)e^{-iE(t-t_0)/\hbar}.$$

因而，非常容易发现代表量子体系的动力学态的矢量的运动，要是我们知道它在初始瞬间的表象 $\{E\alpha\}$ 的话。实际上，这一矢量的初始位置常常由它在某个其它表象(例如 $\{q\}$ 表象)中的分量给出。因此如果我们知道如何从 $\{q\}$ 表象转换到一个 H 在其中为对角的表象，很快就能得到它的运动方程的解。数学上，这一表象转换的幺正矩阵的建造是同 H 在 $\{q\}$ 表象中的本征值问题等价的，换句话说，是同与时间无关的薛定谔方程在这个表象中的解等价的。

---

1) 在一个能量为对角的表象中表达时，玻恩、海森伯和约当的原始形式的矩阵力学是量子论在海森伯"表象"中的特定表述。

IV. 量子统计

20. 不完全已知的体系和统计混合

当量子体系的动力学态不完全已知时，如果我们求助于通常的统计方法，仍然能够作出关于它的行为的某些预告。关于这个问题的讨论（始自第五章§16）可以容易地翻译成我们的新语言。

如果我们精确测定了体系的相容变量完全系中某一个的变量，量子体系的动力学态就是完全已知的。于是能够用某个矢量$|1\rangle$来表示它。当体系的信息不完全时，我们只是陈述体系有某些几率 $p_1, p_2, \cdots, p_m, \cdots$ 处在分别用刃矢量 $|1\rangle$, $|2\rangle, \cdots, |m\rangle, \cdots$ 代表的动力学态。换句话说，体系的动力学态必定不再由一个唯一的矢量、而是由一个矢量的统计混合来表示了。

假定我们对体系履行某个给定量 A 的测量。测量结果的平均值 $\langle A\rangle$ 等于 $\langle A\rangle_m = \langle m|A|m\rangle/\langle m|m\rangle$ 的几率为 p_m。所以我们能够写下（假设矢量 $|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |m\rangle, \cdots$ 是归一的）

$$\langle A\rangle = \sum_m p_m \langle m|A|m\rangle. \tag{8.62}$$

对任意函数 $F(A)$ 的平均值，可把这个公式中的 A 用 $F(A)$ 代替而类似地得到；我们容易由此推导出 A 的测量结果的统计分布。

21. 密度算符[1]

特别方便的是用算符

1) 关于密度算符的性质的更为完全的陈述，见 U. Fano, *Description of States in Quantum Mechanics by Density Matrix and Operator Techniques*, *Rev. Mod. Phys.* **29**(1957) 74.

$$\rho = \sum_m |m\rangle p_m \langle m| \tag{8.63}$$

来描述刚刚描写过的这种统计混合. 在这个表示式中，矢量 $|m\rangle$ 是归一的(但是不一定正交)，而量 p_m 具有统计权重的特征性质，也就是

$$p_m \geqslant 0, \quad \sum_m p_m = 1. \tag{8.64}$$

计算 ρ 称为**密度算符**或**统计算符**.

观测算符 A 的平均值是 ρA 的迹:

$$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\, \rho A. \tag{8.65}$$

的确

$$\mathrm{Tr}\, \rho A = \sum_m p_m \mathrm{Tr}(|m\rangle\langle m|A).$$

为了证明方程(8.62)和(8.65)的等价性，只需要证明

$$\mathrm{Tr}(|m\rangle\langle m|A) = \langle m|A|m\rangle.$$

现在，鉴于算符 $P_m \equiv |m\rangle\langle m|$ 是一个迹为一的投影子 [方程 (7.88)]，

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}\, P_m A &= \mathrm{Tr}\, P_m{}^2 A = \mathrm{Tr}\, P_m A P_m \\ &= \mathrm{Tr}|m\rangle\langle m|A|m\rangle\langle m| = \langle m|A|m\rangle \mathrm{Tr}\, P_m \\ &= \langle m|A|m\rangle.\end{aligned}$$

同样的证明应用于特殊情况 $A = 1$ 时产生出归一条件

$$\mathrm{Tr}\, \rho = 1.$$

这一论证同样好地适用于观测算符 A 的任何函数，并且给出

$$\langle F(A) \rangle = \mathrm{Tr}\, \rho F(A).$$

因而，知道了 ρ 以后，可以推导出 A 的测量结果的统计分布.

非常一般地，如果 P_D 是 A 的这样一些本征矢所张成的子空间上的投影子，它们的本征值位于 A 的谱的某个域 D 上，则测量的结果属于域 D 的几率 w_D 是 $\Sigma_m p_m \langle m|P_D|m\rangle$ [参见

方程(8.5)]，那就是

$$w_D = \mathrm{Tr}\,\rho P_D. \tag{8.66}$$

特别是，发现体系处在由(模方为一的)矢量 $|\chi\rangle$ 代表的量子态的几率是

$$w_\chi = \mathrm{Tr}(\rho|\chi\rangle\langle\chi|) = \langle\chi|\rho|\chi\rangle. \tag{8.67}$$

既然给出 ρ 就足以计算所有能够测量的物理量，平均值，和测量的统计分布，**从此以后我们将把两个具有相同密度算符的统计混合视为全同**：每个量子化的统计混合是精确地和完全地由它的密度算符确定的.

为了把§2的那些假设推广于统计混合，一旦测量完成以后，我们仍然必须确定是哪个密度算符代表体系的动力学态的. 象在§2中一样，我们只限于讨论理想测量的情况. 如果在体系上进行的观测表明，它处在 A 的一个属于上面定义的域 D 的本征态上，则测量以后的密度算符是测量以前代表统计混合的算符 ρ 的投影 $P_D\rho P_D$(最多差别一个归一常数). 此常数由这算符的迹等于一这条件来确定. 所以它等于量

$$\mathrm{Tr}\,P_D\rho P_D = \mathrm{Tr}\rho P_D = w_D$$

的倒数. 因而密度算符在测量进程中的(非因果)演变最终相应于纲图[1]

$$\rho \to \frac{\text{理想测量}}{\text{产生结果 } D} \to \frac{P_D\rho P_D}{\mathrm{Tr}\,\rho P_D}.$$

22. 统计混合在时间上的演变

我们在薛定谔"表象"中着手进行. 假定在时刻 t_0，体系的动力学态由(模方为1的)矢量混合 $|1\rangle_0, |2\rangle_0, \cdots, |m\rangle_0, \cdots$

1) 为了证明推广波包过滤假设的合理性，我们必须求助于量子力学中的测量机制的详尽研究. 关于这个主题，见第四章§19头一注中所引的参考资料；也见 U. Fano 的上述引文.

表示，它们各自的统计权重为 $p_1, p_2, \cdots, p_m, \cdots$. 这个混合的每个分量在时间上的演变是按照定律

$$|m\rangle_t = U(t, t_0)|m\rangle_0$$

进行的，而体系在时刻 t 将由矢量混合

$$|1\rangle_t, |2\rangle_t, \cdots, |m\rangle_t, \cdots$$

表示，它们各自的统计权重 $p_1, p_2, \cdots, p_m, \cdots$ 与出现在初始混合中的那些矢量一样. $U(t, t_0)$ 是在 § 8 中定义的幺正演变算符.

我们由此写出密度算符的因果运动定律

$$\begin{aligned}\rho t &= \sum_m |m\rangle_t p_{mt}\langle m| \\ &= \sum_m U(t, t_0)|m\rangle_0 p m_0\langle m|U^\dagger(t, t_0) \\ &= U(t, t_0)\left(\sum_m |m\rangle_0 p_{m0}\langle m|\right)U^\dagger(t, t_0) \\ &= U(t, t_0)\rho_0 U^\dagger(t, t_0).\end{aligned}$$

在时刻 t 的密度算符是从初始密度算符通过幺正变换 $U(t, t_0)$ 产生的.

考虑到算符 U 的运动方程 [方程 (8.32)] 和它的厄密共轭，我们有

$$i\hbar\frac{d}{dt}\rho t = [H, \rho t]. \tag{8.68}$$

这是密度算符的薛定谔方程. 虽然它在形式上与海森伯方程 (8.40)相似，差别仅仅是对易子的正负号不同，可不要把它们相混淆了. 出现在这个方程中的量都是薛定谔“表象”的算符.

我们用幺正变换 $U^\dagger(t, t_0)$ 从薛定谔“表象”转换到海森伯“表象”. 结果，密度算符在海森伯“表象”中保持稳定 ($\rho_H = \rho_0$)，而物理量则由按照海森伯方程(8.40)运动的观测

算符表示.

23. 密度算符的特征性质

密度算符 ρ 是一个**迹等于 1 的、正定的厄密算符**(参见第七章 § 8).

的确,按照 ρ 的定义[方程(8.63)],对于任何 $|u\rangle$, 有

$$\langle u|\rho|u\rangle = \sum_m p_m |\langle u|m\rangle|^2 \geqslant 0, \tag{8.69}$$

$$\mathrm{Tr}\,\rho = \sum_m p_m \mathrm{Tr}(|m\rangle\langle m|) = \sum_m p_m = 1. \tag{8.70}$$

事实上, 鉴于所有的 p_m 都是正的, 又鉴于(薛华兹不等式)

$$|\langle u|m\rangle|^2 \leqslant \langle u|u\rangle,$$

我们有

$$\langle u|\rho|u\rangle \leqslant \langle u|u\rangle. \tag{8.71}$$

换句话说,算符 $(1-\rho)$ 同样是正定的.

在希耳伯特空间的一般理论中, 人们证明, 迹为有限的、正定的厄密算符是一个观测算符, 而且它的本征值谱是完全分立的. ρ 的本征值事实上全部落在 0 和 1 之间.

反之,迹为 1 的、任何正定的厄密算符 ρ 可以看作是一个密度算符. 的确,它是一个观测算符,可以写成

$$\rho = \sum_n \tilde{\omega}_n P_n, \tag{8.72}$$

表示式中 $\tilde{\omega}_1, \tilde{\omega}_2, \cdots, \tilde{\omega}_n, \cdots$ 标示非零的本征值; $P_1, P_2, \cdots, P_n, \cdots$ 标示在它们各自的子空间上的投影子. 如果本征值中没有一个是简并的,则各个 P_n 都是基本投影子

$$P_n = |\bar{n}\rangle\langle\bar{n}|,$$

而

$$\rho = \sum_n \tilde{\omega}_n |\bar{n}\rangle\langle\bar{n}|. \tag{8.73}$$

鉴于 $\Sigma_n\tilde{\omega}_n = \mathrm{Tr}\,\rho$，和 $\tilde{\omega}_n = \langle\bar{n}|\rho|\bar{n}\rangle \geqslant 0$，$\tilde{\omega}_n$ 具有统计权重的性质：

$$\tilde{\omega}_n \geqslant 0, \quad \sum_n \tilde{\omega}_n = 1.$$

因而 ρ 是由矢量 $|\bar{n}\rangle$ 组成的统计混合的密度算符，各个矢量分别具有统计权重 $\tilde{\omega}_n$[1]. 这个论证很快就能够扩展于 ρ 的本征值中有几个是简并的情况.

24. 纯态

密度算符形式上允许把纯态作为统计混合的特殊情况来处理.

如果我们肯定地知道体系是处在纯态 $|\chi\rangle$，就能够用一个以 $|\chi\rangle$（假设是模方为一的）作为它的独一元的统计混合来表示它；它的密度算符是投影子

$$\rho_\chi = |\chi\rangle\langle\chi|, \tag{8.74}$$

我们还有

$$\rho_\chi^2 = \rho_\chi. \tag{8.75}$$

反之，如果一个密度算符是投影子，则它代表一个纯态；后者就是在它上面进行投影的那个态.

我们还能给出另外两个准则，用来辨认一个密度算符 ρ 究竟是否代表纯态：

1）一个密度算符 ρ 能够用几种不同的方法写成投影子的线性组合的形式：表示式(8.63)不是唯一的. 但是为了使方程(8.63)定义的算符 ρ 表示一个纯态，**必要**（而且充分）的

1) 在表示式(8.73)中，$|n\rangle$ 是互相正交的. 另一方面，出现在定义(8.63)中的 $|m\rangle$ 不一定具有这一性质.

条件是所有的$|m\rangle$彼此相等(最多差别一个相位). 因而它们表示一个相同的动力学态,它就是所需的纯态(习题 8.7).

2) 任何密度算符 ρ, 亦即迹为 1 的、正定的任一厄密算符, 具有性质 $\mathrm{Tr}\,\rho^2 \leqslant 1$. 为了使它表示一个纯态, (必要而且)**充分**的条件是(习题 8.8)

$$\mathrm{Tr}\,\rho^2 = 1. \tag{8.76}$$

最后,**体系的动力学态总是可用它的密度算符来表示,不管那个态是完全还是不完全地已知的.** 事实上,指明这一算符就足以确定量子论所能提供的、所有物理上可以测量的量; 方程 (8.66) 起着当我们用矢量表示态时方程 (8.5) 所起的作用. 这一做法的好处是它对纯态和混合提供一致的处理. 再者, **代表体系状态的密度算符是以一种唯一的方式定义的,** 而代表纯态的矢量定义得再准也还可能差别一个相因子. 此外, 代表一个不完全已知的动力学态的矢量混合的定义就有更大的任意性.

25. 经典统计和量子统计

在经典力学中,一个动力学态由相空间中的一点定义;态的统计混合则由相空间中的流体表示, 流体在某一点上的密度 $\rho_{\mathrm{Cl.}}$ 等于发现体系处在由那个点确定的态上的几率.

相空间的经典密度 $\rho_{\mathrm{Cl.}}$ 同量子论的密度算符 ρ 之间存在着值得注意的平行性. $\rho_{\mathrm{Cl.}}$ 是一个实的正量,它对全部相空间的积分等于一:

$$\iint \rho_{\mathrm{Cl.}}\, dq\, dp = 1, \tag{8.77}$$

而 ρ 是一个厄密算符,它的本征值全部是正的(正定算符),它的迹等于 1.

知道了在一个给定瞬时的 $\rho_{\mathrm{Cl.}}$, 我们可以推算动力学变

量 q 和 p 的任何函数 $A_{\mathrm{Cl.}}$ 的平均值 $\langle A\rangle_{\mathrm{Cl.}}$，方法是把 $\rho_{\mathrm{Cl.}}A_{\mathrm{Cl.}}$ 对全部相空间求积分

$$\langle A\rangle_{\mathrm{Cl.}}=\iint \rho_{\mathrm{Cl.}}A_{\mathrm{Cl.}}dqdp. \tag{8.78}$$

ρ_{Cl} 在时间上的演变是由方程

$$\frac{\partial\rho_{\mathrm{Cl.}}}{\partial t}=\{H_{\mathrm{Cl.}},\rho_{\mathrm{Cl.}}\} \tag{8.79}$$

给出的[不要把这个方程同方程(8.42)相混淆]。

方程(8.78)和(8.79)分别是方程(8.65)和(8.68)的经典模拟。把普通的量用观测算符代替，泊松括号用对易子(最多差别系数 $i\hbar$) 代替，**对全部相空间的积分用迹代替**，我们就从经典理论的表示式转换到了量子论的表示式。

当我们探索把经典统计热力学的基本结果扩展到量子领域时，结果发现对应原理的这一新表述是极其有价值的。大多数经典论证能够不加变更地移用过来。这里我们将只指出一些主要的结果。

量子体系的、**在温度 T 时处于热力学平衡**的态由算符

$$\rho=Ne^{-H/kT} \tag{8.80}$$

表示；H 是体系的哈密顿量，k 是玻耳兹曼常数。N 是一个归一常数，由 $\mathrm{Tr}\,\rho=1$ 来定。这样一个体系的各种热力学函数就象经典理论中一样，用配分函数

$$Z(\mu)=\mathrm{Tr}\,e^{-\mu H} \tag{8.81}$$

来计算。因此自由能 $\mathscr{F}$，熵 S，和能量 E 分别由下述表示式给出：

$$\mathscr{F}=-kT\ln Z, \tag{8.82}$$

$$S=k\left(\ln Z-\mu\frac{\partial}{\partial\mu}\ln Z\right), \tag{8.83}$$

$$E\equiv\langle H\rangle=-\frac{\partial}{\partial\mu}\ln Z. \tag{8.84}$$

其中 $\mu = 1/kT$.

更为一般地，按照对应原理，体系的熵是由算符 $-k\ln\rho$ 的平均值给出的，那就是

$$S = -k\,\mathrm{Tr}(\rho\ln\rho). \tag{8.85}$$

由此容易推导出平衡分布 (8.80)：它是相应于能量的一个给定平均值的分布；对于这个分布，熵极大。

练 习 和 问 题

1. 从关于平均值的基本假设出发，推导表示式 (8.5)，它给出的是对于一个给定量的测量结果的几率定律.

2. 考虑一个具有一维经典模拟的量子体系. 从对易关系

$$[q, p] = i\hbar$$

导出 p 的谱是完全非简并和连续的，并从 $+\infty$ 扩展到 $-\infty$. p 的适当地归一的本征矢组成 $\mathscr{E}$ 中的一个完全正交归一系. 求证：适当地选择这个体系的矢量 $|p'\rangle$ 的位相，么正算符 $\exp(i\tilde{\omega}q/\hbar)$($\tilde{\omega}$ 是一个任意常数)对这些矢量的作用产生出

$$\exp(i\tilde{\omega}q/\hbar)|p'\rangle = |p' + \tilde{\omega}\rangle,$$

而且，算符 q 的矩阵元为

$$\langle p'|q|p''\rangle = i\hbar\delta'(p' - p'').$$

在这个表象中求解 q 的本征值问题.

3. 明显地依赖于连续参数 ξ 的算符 $A(\xi)$ 的微商根据定义是

$$\frac{dA}{d\xi} = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{A(\xi+\varepsilon) - A(\xi)}{\varepsilon}.$$

求证：

1) 如果 $A(\xi)$ 是一个观测算符的或几个对易观测算符的函数，则它的微商是用普通的微分规则得到的. 特别是，如果 O 是一个观测算符，就有

$$\frac{d}{d\xi}(e^{iO\xi}) = iOe^{iO\xi};$$

2) 如果两个算符是可微的，则

$$\frac{d}{d\xi}(AB) = \frac{dA}{d\xi}B + A\frac{dA}{d\xi}.$$

特别是：

$$\frac{d}{d\xi}A^2 = \frac{dA}{d\xi}A + A\frac{dA}{d\xi};$$

3）如果 A 是可微的，且具有逆算符，我们有

$$\frac{d}{d\xi}A^{-1} = -A^{-1}\frac{dA}{d\xi}A^{-1}.$$

4.证明由表示式

$$B(t) = e^{iAt}B_0e^{-iAt}$$

定义的算符 $B(t)$ 是积分方程

$$B(t) = B_0 + i\left[A, \int_0^t B(\tau)d\tau\right]$$

的一个解，此处 A 和 B_0 是与 t 无关的两个算符.

用迭代法求解这个方程，我们得到 $B(t)$ 作为 t 的幂级数的展开式. 由此，推导算符之间的恒等式

$$e^{iA}Be^{-iA} = B + i[A, B] + \frac{i^2}{2!}[A, [A, B]] + \cdots$$

$$+ \frac{i^n}{n!}[A, [A, \cdots[A, [A, B]]\cdots]]$$

（n 个括号）

注意：我们约定把 $[A, B]$ 看作为由 A 对 B 的作用产生的算符，并用 $A\{B\}$ 来表示这个算符；于是 $A^n\{B\}$ 表示 A 的重复 n 次的作用；仿效这一记号

$A^0\{B\} \equiv B$，　$A\{B\} \equiv [A, B]$，　$A^2\{B\} \equiv [A, [A, B]]$，等等

而这个恒等式就简单地写作

$$e^{iA}Be^{-iA} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{i^n}{n!}A^n\{B\}.$$

5.设 $A(\xi)$ 是一个依赖于连续参数 ξ 的算符，$\frac{dA}{d\xi}$ 是它的关于 ξ 的微商. 证明算符之间的恒等式：

$$e^{-iA}\frac{d}{d\xi}(e^{iA}) = i\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i)^n}{(n+1)!}A^n\left\{\frac{dA}{d\xi}\right\}$$

(记号同习题 4 的注)

6.如果关于 t 可微的算符 $U(t)$ 是么正的,算符

$$H(t) \equiv i\hbar \frac{dU}{dt} U^{\dagger}$$

必然是厄密的.

反之,如果 $U(t)$ 满足方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = HU,$$

此处 H 是一个可能依赖于 t 的厄密算符,则 $U^{\dagger}U$ 是与 t 无关的,而 $UU^{\dagger}$ 是方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} UU^{\dagger} = [H, UU^{\dagger}]$$

的解. 特别是,如果 $t = t_0$ 时 U 是么正的,则它对所有的 t 值都保持么正.

7.设 $|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |M\rangle$ 是模方为 1、但不一定正交的矢量序列. 求证: 密度算符 $\rho = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} |i\rangle\langle i|$ 表示一个纯态的必要和充分条件是这 M 个矢量相等(最多差别一个相位).

8.求证: 为了使算符 ρ (迹确定为 1 的厄密算符) 表示一个纯态,必要和充分的条件是 $\mathrm{Tr}\rho^2 = 1$.

第二部分　简单体系

第九章　用分离变量法求解薛定谔方程　中心势

1. 引言

一个物理体系的研究本质上在于求解它的与时间无关的薛定谔方程．特别是，这一本征值方程直接涉及两类在量子物理中最常碰到的问题，也就是

(i) 束缚态能级的决定：它们是哈密顿量的分立谱的本征值；

(ii) 碰撞截面的决定：如同我们将在第十章中进一步证明的，它们是从非束缚态本征函数的渐近形式导出的．

在波动力学中，薛定谔方程是一个二阶偏微分方程．对于一维体系，后者简化为一个微分方程；在这个简单情况下，本征值问题的研究已经作过(第三章)．当体系具有较大的维数时，问题一般要困难得多．然而，哈密顿量可能具有的对称性质使方程便于求解．特别是可能发生这样的情况：适当的变数代换导致一个变数可以分离的偏微分方程．因而这个本征值问题变成几个较简单的、包含较小维数的本征值问题．

一个粒子在中心势中，也就是说，在一个仅依赖于粒子到力心的距离 r、而不依赖于连接那个中心和粒子的矢量 $\boldsymbol{r}$ 的取向的势中时，情况便是这样．既然这个哈密顿量具有球对称，当我们在球极坐标中处理这个问题时，变数就完全分离了．薛定谔方程的解，在把角度的变数分离以后，简化为一个

仅包含径向变数的微分方程，这是一个总是能够数值积分的方程.

本章的主要部分专门用来讨论一个粒子在中心势中的薛定谔方程的求解. 一般处理在第 I 节中给出，第 II 节论述自由粒子和在一"方形"中心势中的粒子的情况.

另一个非常简单的分离变数的例子组成第 III 节的主题，也就是粒子体系的质心运动. 同在经典力学中的一样，每当相互作用仅依赖于粒子之间的相对位置时，质心运动就能同相对运动分离开来.

I. 在中心势中的粒子　一般处理

2. 哈密顿量在球极坐标中的表示式

在这一节中，我们打算研究一个质量为 m 的粒子在一中心势 $V(r)$ 中的薛定谔方程. 如果 $\boldsymbol{p}$ 是粒子的动量，r 是它的位置矢量，则哈密顿量为

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r), \tag{9.1}$$

而与时间无关的薛定谔方程写为

$$H\psi(\boldsymbol{r}) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}). \tag{9.2}$$

既然这个哈密顿量具有球对称，我们就在球极坐标中研究这个问题.

按照习惯，我们所选的极轴是 z 轴，而笛卡儿坐标 (x, y, z) 由下列公式表为极坐标 (r, θ, φ) 的函数(参见图 9.1)

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi, \\ y &= r\sin\theta\sin\varphi, \\ z &= r\cos\theta. \end{aligned} \tag{I}$$

势能 V 作为极坐标的函数的表示式已经给了；我们要找的是动能 $\boldsymbol{p}^2/2m$ 的表示式，换句话说，要在极坐标中表示出微分算符

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right).$$

这可以直接借助于变换公式(I)，用通常的微分学技术来完成。运算是冗长的，但不特别困难；不在这里给出了。然而，为了较好地理解结果的物理意义，我们试图不把动能 $\boldsymbol{p}^2/2m$ 表成微分算符 $\frac{\partial}{\partial r}$，$\frac{\partial}{\partial\theta}$，$\frac{\partial}{\partial\varphi}$ 本身的函数，而是表成由这些算符建造的一些厄密算符的函数，它们的物理解释更为明显。

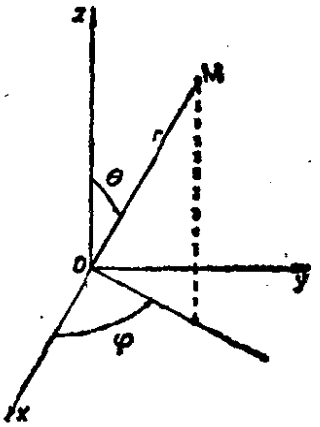

图 9.1 极坐标和笛卡儿坐标.

因此，与其直接使用微分算符 $\frac{\partial}{\partial\varphi}$，不如使用角动量沿 z 轴的分量更为可取，按照方程(5.49)，它具有显示形式：

$$l_z \equiv xp_y - yp_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{9.3}$$

由于 $V(r)$ 不依赖于 φ，容易看出 l_z 与势能对易。然而，l_z 也与动能 $\boldsymbol{p}^2/2m$ 对易，利用 l_z 的定义本身，以及一些基本的对易关系(习题 9.4)[1]

$$[r_i,p_i] = i\hbar\delta_{ij}. \tag{9.4}$$

就能够证明这点，因此 l_z 与哈密顿量 H 对易。把 Ox，Oy 取作极轴，人们对 l_x，l_y 得出相同的结论。因而角动量

1) 从此以后，我们将用指标 $i,j=1,2$ 或 3 分别标记矢量沿 Ox，Oy 或 Oz 轴的分量；因此 $r_1\equiv x$，$p_1\equiv p_x$，等等.

$$\boldsymbol{l} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} = \frac{\hbar}{i}(\boldsymbol{r} \times \nabla) \tag{9.5}$$

的三个分量 l_x, l_y, l_z **与哈密顿量对易**. 由于这个理由，我们将使用这些算符而不是微分算符$\frac{\partial}{\partial\theta}$, $\frac{\partial}{\partial\varphi}$本身.

按照同样的精神，我们使用径向动量

$$p_r \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right) \tag{9.6}$$

而不使用算符$\left(\frac{\hbar}{i}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}\right)$, 这个算符是非厄密的（参见习题 9.1).

为了确立 p_r 的厄密性质，让我们检查在什么条件下，表示式 $\langle\psi, p_r\psi\rangle$ 是实的，其中的 $\psi(r)$ 是任何平方可积函数. 必须有

$$0 = \langle\psi, p_r\psi\rangle - \langle\psi, p_r\psi\rangle^* \equiv \int[\psi^*(p_r\psi) - (p_r\psi)^*\psi]d\tau$$

$$= \frac{\hbar}{i}\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi$$

$$\times\int_0^{\infty}\left[\frac{\partial}{\partial r}|r\psi|^2\right]dr.$$

由于当 $r \to \infty$ 时，$r\psi$ 等于零，这个对 r 的积分等于它在原点所取的值. 所以仅当我们限于讨论满足条件[1]:

$$\lim_{r\to 0} r\psi(r) = 0 \tag{9.7}$$

的平方可积函数时，算符 p_r 才是厄密的. 从定义得知，p_r 不

---

1) p_r 是厄密的但不是一个观测算符. 不管常数 $\tilde{\omega}$ 怎样，微分方程

$$p_r f(r) \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{1}{r}\frac{d}{dr}[rf(r)] = \tilde{\omega}f(r)$$

的解等于 $\exp(i\tilde{\omega}r/\hbar)/r$（最多差别一个常数）；它决不满足条件(9.7)；$p_r$ 的本征值问题因而无解.

但与 $\boldsymbol{l}$ 的三个分量对易，而且与 θ 和 φ 的任何函数对易，但是另一方面，也是根据定义，

$$[r, p_r] = i\hbar. \tag{9.8}$$

我们有算符恒等式

$$\boldsymbol{p}^2 = p_r^2 + \frac{\boldsymbol{l}^2}{r^2} \quad (r \neq 0). \tag{9.9}$$

按照这个式子，对于 r 的所有的非零值，算符 p^2 和 $p_r^2 + (\boldsymbol{l}^2/r^2)$ 对一个函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 的作用都产生相同的结果.

为了证明这个式子，我们把恒等式

$$(\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})^2 = A^2B^2 - (\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B})^2$$

用于 $\boldsymbol{l}^2$ 的计算，即用算符 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 来代替矢量 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$. 然而，鉴于 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的分量不一定互相对易，上述恒等式仅当我们保持这些算符的次序时才能成立，也就是说

$$\boldsymbol{l}^2 \equiv (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}) \cdot (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}) = \sum_{i,j} (r_i p_i r_j p_j - r_i p_j r_j p_i).$$

对易关系(9.4)的重复应用使我们能够把这一恒等式重写为

$$\boldsymbol{l}^2 = r^2\boldsymbol{p}^2 - (\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{p})^2 + i\hbar(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{p}). \tag{9.10}$$

然而，鉴于 $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$，

$$x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y} + z\frac{\partial}{\partial z} = r\frac{\partial}{\partial r},$$

因此

$$\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{p} = r\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r} = rp_r + i\hbar,$$

再考虑到对易关系(9.8)，得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{p})^2 - i\hbar(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{p}) &\equiv [(\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{p}) - i\hbar](\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{p}) \\ &= rp_r(rp_r + i\hbar) = r^2p_r^2.\end{aligned}$$

因而恒等式(9.10)的右边等于

$$r^2(\boldsymbol{p}^2 - p_r^2).$$

逐项除以 r^2，我们就得到恒等式(9.9)；这个式子到处有效，可能 $r=0$ 除外。

从(9.9)，逐项除以 $2m$，我们得到动能的表示式。因而得到哈密顿量在球极坐标中的表示式为

$$H=\frac{p_r^2}{2m}+\frac{\boldsymbol{l}^2}{2mr^2}+V(r). \tag{9.11}$$

象相应的经典粒子的能量一样，它是三项之和："径向动能" $p_r^2/2m$，"转动动能" $\boldsymbol{l}^2/2mr^2$（mr^2 是关于原点的转动惯量），以及势能 $V(r)$。

本节开始时提及的直接计算最终将会导致这个相同的表示式，那时 $\boldsymbol{l}^2$ 是以它的显示形式出现的

$$\boldsymbol{l}^2=-\frac{\hbar^2}{\sin^2\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{9.12}$$

最后，薛定谔方程在球极坐标中写为

$$\left[\frac{p_r^2}{2m}+\frac{\boldsymbol{l}^2}{2mr^2}+V(r)\right]\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi). \tag{9.13}$$

然而，这个方程的解只有在检查了它们在原点的行为以后才能保持为薛定谔方程的解。事实上，表示式(9.11)在原点的有效性并不是对于算符 H 可能作用的任何函数都自动地保证的。这里我们只是不加证明地指出，只要 ψ 满足条件(9.7)，即 p_r 的厄密性条件，方程(9.13)就在全部空间，**包括原点在内**，等效于薛定谔方程。

3. 角度变数的分离　球谐函数

从 H 和 $\boldsymbol{l}^2$ 的表示式(9.11)和(9.12)容易看出它们对易。这是预料之中的；一旦 H 与 l_x,l_y,l_z 对易，它就与这些算符的任何函数对易，当然也与 $\boldsymbol{l}^2$ 对易。观测算符 H 和 $\boldsymbol{l}^2$（至少）具有一个共同的基，因而使我们分成两步来求解 H 的本征值问

题．首先，求解 $\boldsymbol{l}^2$ 的本征值问题，其次，找出 $\boldsymbol{l}^2$ 的那些满足薛定谔方程的本征解．势能 $V(r)$ 的特定形式仅仅涉及这一解法的第二步．

寻找 $\boldsymbol{l}^2$ 的本征函数的完全系时，变数 r 起着简单参数的作用，可以暂时不去管它，因为算符 $\boldsymbol{l}^2$ 仅作用在角度变数 θ 和 φ 上．

$\boldsymbol{l}^2$ 与角动量的各个分量，特别是与 l_z 对易[方程(5.70)]．我们在函数论中证明，分别由表示式(9.12)和(9.3)定义的微分算符 $\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 的共同本征函数是一些**球谐函数** $Y_l^m(\theta,\varphi)$，这些函数的主要性质总结在附录 B(§ 10)中．它们的构成将在我们对量子力学中的角动量作系统研究(第十三章)时再详细地给出．它们是用指标 l 和 m 标记的；l 能取所有的正整数值或零，m 则取区间 $(-l,+l)$ 内的所有整数值，两端包括在内．我们有

$$\boldsymbol{l}^2 Y_l^m(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta,\varphi), \tag{9.14}$$

$$\left.\begin{aligned} &l_z Y_l^m(\theta,\varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta,\varphi), \\ &(l = 0,1,2,\cdots,\infty; m = -l,-l+1,\cdots,+l). \end{aligned}\right\} \tag{9.15}$$

在 (θ,φ) 的平方可积函数的函数空间内，亦即在单位球上定义的平方可积函数的空间内，球谐函数组成一个完全正交归一系．我们必须认识到，在这种情况下标积是定义为单位球上的积分，而表面元是[1]

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi;$$

正交归一关系因而写作

$$\int Y_l^{m*} Y_{l'}^{m'} d\Omega \equiv \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta Y_l^{m*}(\theta,\varphi) Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi)$$

$$= \delta_{ll'}\delta_{mm'}. \tag{9.16}$$

---

1) 见第七章末 § 13 的讨论．写出 (θ,φ) 表象中的闭合关系时必须同样小心．

对于各对量子数 (lm)，有一个球谐函数与之相对应．因此，函数 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 的角度依赖性是完全确定的，如果我们要求这一函数是 $\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 的、相应于本征值各为 $l(l+1)\hbar$ 和 $m\hbar$ 的共同本征函数；$\psi(r,\theta,\varphi)$ 必然是 $f(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$ 形式的．

4. 径向方程

现在我们来着手处理薛定谔方程的解法的第二步．它的实质在于组成一些对于对易算符 H，$\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 都是共同的本征函数．它们是薛定谔方程的型如

$$\psi_l^m(r,\theta,\varphi)=Y_l^m(\theta,\varphi)\chi_l(r) \tag{9.17}$$

的解．既然 ψ_l^m 是方程(9.13)的解，而 Y_l^m 是 $\boldsymbol{l}^2$ 的本征函数[方程(9.14)]，$\chi_l(r)$ 就是二阶线性微分方程

$$\left[\frac{p_r^2}{2m}+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}+V(r)-E\right]\chi_l(r)=0 \tag{9.18}$$

的解，此处 $p_r^2\equiv-\hbar^2\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r$。

方便的是让

$$y_l(r)=r\chi_l(r), \tag{9.19}$$

并用等价的径向方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+l(l+1)\frac{\hbar^2}{2mr^2}+V(r)-E\right]y_l(r)=0 \tag{9.20}$$

来代替方程(9.18)；注意这个方程与一维薛定谔方程的相似性．也要注意到 ψ_l^m 的模方，在对角度积分以后，由表示式

$$\langle\psi_l^m,\psi_l^m\rangle=\int_0^\infty r^2|\chi_l(r)|^2dr=\int_0^\infty|y_l(r)|^2dr \tag{9.21}$$

给出，而 p_r 的厄密性条件(9.7)等效于条件

$$y_l(0)=0. \tag{9.22}$$

并非径向方程(9.20)的所有解都应该保留．为了使得

ϕ_l^m 可被接受为一个本征函数，y_l 必须满足某些正则性的条件。的确，必要的是：

（a）由检查 y_l 在原点的行为来确信 ϕ_l^m 实际上是薛定谔方程在包括原点在内的全部空间的解；

（b）这个解是可以归一的（在第五章§9所定义的一般意义上）。

为了使这些正则性的条件变得具体，我们将对方程(9.20)在原点处的解的行为进行系统研究。

我们假定 $V(r)$ 在任何有限的区间上都是有界的，原点可能除外，在此处它可能有一个 $\frac{1}{r}$ 型的奇点。这些条件在所有有实际意义的情况下都是满足的。在这个假设下，方程(9.20)具有一个"正则"解 R_l（确定到最多差别一个常数），它在原点处依 r^{l+1} 等于零，而这个方程所有其它的解在原点处都依 $\left(\frac{1}{r}\right)^l$ 变化[1]。

为了证明这一点，我们假设 $V(r)$ 在原点邻近是解析的，并且寻求一个形如

$$r^s(1 + a_1 r + a_2 r^2 + \cdots)$$

的特殊解。把这个展开式和能够从它导出的二级微商，以及 $V(r)$ 的泰勒展开式一起代入方程(9.20)，并且让出现在方程左边的那些 r 的递次幂的系数等于零，我们得到一个无限的方程系列，它的第一个（特征方程）

$$s(s-1) - l(l+1) = 0$$

给出 s，而其次的方程相继给出 $a_1, a_2, \cdots$。在现在这个例子

1）这一结果是可以预期的，因为方程(9.20)的一般解在原点邻近是方程

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]v(r) = 0$$

的一个近似解，这个方程的一般解是 $v(r) = ar^{l+1} + br^{-l}$（$a$ 和 b 是任意常数）。

中，s 的方程有两个解，$l+1$ 和 $-l$. 如果 $s=l+1$，级数系数的计算能够进行到所有的阶，并导致“正则”解 R_l. 如果 $s=-l$，方程不可能有解，这个方法失效. 然而，如果 R_l 是方程(9.20)的一个解，容易看出在原点处依 $\left(\frac{1}{r}\right)^l$ 变化的函数

$$R_l(r)\int^r \frac{dr'}{R_l(r')}$$

也是这个方程的解. 一般解是这两个特殊解的线性组合.

现在，任何 $\left(\frac{1}{r}\right)^l$ 型的解必须摒弃，因为它至少不满足条件(a)和(b)中的一个.

的确，如果 $l\neq 0$，它的模方的积分在原点处发散，按照方程(9.21)，用这个解建造的函数 ϕ_l^m 不属于希耳伯特空间[条件(b)]. 当我们组成 ϕ_l^m 的本征微分时，在原点处的这一发散继续存留. 所以这个解在任何情况下都必须摒弃，不论本征值 E 属于分立谱或是连续谱.

当 $l=0$ 时，前述论证不适用. 但是在这种情况下，相应的波函数 ϕ_0 不满足薛定谔方程[条件(a)]. 事实上，ϕ_0 在原点处依 $\left(\frac{1}{r}\right)$ 变化，并且由于[方程($A.12$)] $\Delta\left(\frac{1}{r}\right)=-4\pi\delta(\boldsymbol{r})$，有

$$(H-E)\phi_0=\frac{2\pi\hbar^2}{m}\delta(\boldsymbol{r}).$$

所以我们必须只保留所谓的“正则”解，即在原点处满足条件(9.22)的解. 对这样一个解，我们能够确信，函数 ϕ_l^m 处处(包括原点在内)是薛定谔方程的解[条件(a)]；再者，既然归一积分在原点处收敛，ϕ_l^m 或它的本征微分属于希耳伯特空间[条件(b)]的条件唯一地依赖于这个解在无限远处的行为.

在原点处增补条件

$$y_l(0) = 0 \tag{9.22}$$

后，径向方程(9.20)是一个质量为m的一维粒子的薛定谔方程，它在区域$(0,\infty)$受制于势$V(r) + [l(l+1)\hbar^2/2mr^2]$，在区域$(-\infty,0)$受制于一个无限的推斥势．因而三维薛定谔方程的解简化为一维薛定谔方程的解．第三章中所述的那些性质(朗斯基性质，解的渐近行为，正交关系等等)在这个情况下保持有效，尽管"等效势"在原点处有$l(l+1)/r^2$型的奇点．

5. 径向方程的本征解　谱的性质

能谱的性质和属于一个给定l值的径向方程(9.20)的本征解的性质可以从这一方程的在原点处为正则的解的渐近行为推演出来．第三章§10的讨论可以不加改变地移用过来．

譬如说，假定$V(r)$比$\frac{1}{r}$更为迅速地渐近地趋近于零：

$$\lim_{r\to\infty} rV(r) = 0.$$

能谱包含两个部分：

(i) 如果$E < 0$，这个在原点处是正则的解的绝对值依$\exp(\kappa r)(\kappa = \sqrt{-2mE}/\hbar)$无限地增长，只有某几个分立值$E_l^{(1)}, E_l^{(2)}, \cdots$除外，对于它们

$$y_l \underset{r\to\infty}{\sim} e^{-\kappa r}.$$

只有这些值是可能的本征值．对于它们中的每一个，有一个有限模方的径向函数与之相对应．

(ii) 如果$E > 0$，这个在原点处是正则的解按照规律

$$y_l \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right) \quad \left(k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right)$$

无休止地振荡．对于任何E都可以认为它是一个本征解，且表示一个非束缚的本征态．常数δ_l称为相移(加上附加项

$-\frac{1}{2}l\pi$ 是为了使 $V(r)=0$ 时 $\delta_l=0$；参见下面 §7）. δ_l 是一个非常重要的量；它表征这个正则解的渐近行为，并且碰撞问题常常涉及到它（第十章）.

如果当 $r\to\infty$ 时，V 依 $\frac{1}{r}$ 或更慢地（但是单调地）趋近于零，就不可能同样简单地写出那些渐近形式，但是关于谱的性质的实质性结论继续存留. 它是由一个连续部分，即正能量的半轴，和一套（可数地无限的）负的分立值组成的完全非简并的谱.

还需要指出，对于一个给定的 l 值，如此建造的本征函数 $\gamma_l(r)$ 的系综组成一个完全系，它的含义是，在半轴 $(0,\infty)$ 上定义的，r 的任何平方可积函数都能够用这些本征函数展成级数. 我们将要假设，这一点对于我们将要考虑的所有的势的形状都实际上保持正确；否则，哈密顿量 H 就不是一个观测算符了.

6. 结论

最后，我们注意到观测算符 H，$\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 组成对易观测算符的一个完全系. 建造 H，$\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 的共同本征函数的问题就是在薛定谔方程中把角度变数同径向变数分离开来. 如果我们固定 $\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 的本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$，这些本征函数具有形式

$$\psi_l^m=r^{-1}\gamma_l(r)Y_l^m(\theta,\varphi), \tag{9.23}$$

此处 $\gamma_l(r)$ 是径向方程(9.20)的解，它在原点处等于零，且在全部空间保持有界.

我们通常说，这样一个本征函数代表一个角动量为 l 的态，或者更为确切地说，这个粒子具有角动量 l，沿 z 轴有一个分量 m. 我们记得，l 和 m 都是整数，而且

$$l \geqslant 0, \quad -l \leqslant m \leqslant l.$$

按照传统的光谱学术语，l 是**角量子数**，m 是**磁量子数**. 用一些特定的字母，而不是它们的角量子数的值来标记那些最低角动量的态也是传统的需要：角动量的值 0,1,2,3,4,5…分别相应于字母 $s,p,d,f,g,h,\cdots$.

H的谱的性质依赖于 $V(r)$ 在无限远处的行为. 特别是如果 $V(r)$(单调地)趋近于零，能谱将由一定数目的分立负值和一些(连续的)正值组成.

连续谱的各个值是**无限简并的**. 的确，对于角动量的所有的可能值 (lm)，存在有一个正能量 E 的本征函数.

分立谱的能量 E_{kl} 能够用两个指标来标记，它们是角量子数 l 和径向量子数 k，k 是用来标记属于一个给定角动量的径向方程的各种本征值的. 为什么属于不同 l 值的径向方程应当有共同的本征值，这一点不存在先验的理由：**一般说来**，本征值 E_{kl} 全都是不同的，而且它们分别是 $(2l+1)$ **度简并**的，因为对于它们中的每一个，都是有多少个可能的磁量子数

$$-l, -l+1, \cdots, +l,$$

就有多少个线性独立的本征函数与之相对应. 对于势 $V(r)$ 的某些非常特殊的形状，可能发生这些值 E_{kl} 中有某几个恰相符合的情况；这时，简并度更大. 我们在处理氢原子(第十一章)和三维各向同性的谐振子(第十二章)时，将会碰到这一型式的偶然简并度.

II. 中心方阱势　自由粒子

7. 球贝塞耳函数

如果区间$(0,\infty)$内存在一些区域，该处的势是恒定的：

$$V(r) = V_0 = \text{常数},$$

径向方程将呈现特别简单的形式，而它的一般解是函数论中众所周知的函数，即球贝塞尔函数的线性组合。

让我们首先假定 $E > V_0$. 如果我们设

$$k = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}, \quad \rho = kr, \tag{9.24}$$

方程(9.20)能够写成

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right] y_l = 0.$$

同样，径向函数 $f_l = y_l/r$(看作为 φ 的函数)是"球贝塞尔微分方程"

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right)\right] f_l = 0 \tag{9.25}$$

的一个解. 方程(9.25)的一般解是两个特解的线性组合. 最为常用的特解在附录 B(§ 6) 中描述. 它们是函数 j_l, n_l[1], $h_l^{(+)}$, $h_l^{(-)}$. j_l 是唯一在原点处为正则的(依 ρ^l 变化)解；其它三个解在那里有一个 $l+1$ 阶的极点. j_l 和 n_l 是实函数，在无限远处的行为象是驻波

$$j_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{\sin\left(\rho - \frac{1}{2}l\pi\right)}{\rho}, \quad n_l(\rho) \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{\cos\left(\rho - \frac{1}{2}l\pi\right)}{\rho}. \tag{9.26}$$

函数 $h_l^{(+)} \equiv n_l + ij_l$ 和 $h_l^{(-)} \equiv n_l - ij_l$ 的渐近行为分别象出射和入射波：

$$h_l^{(+)} \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{e^{i(\rho - \frac{1}{2}l\pi)}}{\rho}, \quad h_l^{(-)} \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{e^{-i(\rho - \frac{1}{2}l\pi)}}{\rho}. \tag{9.27}$$

---

1) 大多数作者把具有相反符号的这同一个函数记为 n_l.

在 $E < V_0$ 的情况下，我们设

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}, \tag{9.28}$$

则要求我们把各处的 k 用 $i\kappa$ 代替，迄今所述的一切就都保持有效．特别是，渐近形式(9.26)和(9.27)保持有效．在无限远处为有界的唯一径向解是函数 $h_l^{(+)}(i\kappa r)$；它指数地趋近于零．更为精确地说，函数 $i^l h_l^{(+)}(i\kappa r)$ 是一个实函数，等于一个 $\left(\frac{1}{\kappa r}\right)$ 的 l 次多项式和 $\exp(-\kappa r)/\kappa r$ 的乘积，而它的渐近形式是

$$i^l h_l^{(+)}(i\kappa r) \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{e^{-\kappa r}}{\kappa r}. \tag{9.29}$$

8. 自由粒子　平面波和自由球面波

前述考虑特别适用于自由粒子．在这种情况下，在整个区间$(0,\infty)$上 $V(r) = 0$，哈密顿量简化为它的动能项：

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}.$$

所以让我们寻找 H，$\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 的共同本征函数．角动量为 (lm) 和能量为 E 的解是形如

$$Y_l^m(\theta,\varphi) f_l(r)$$

的函数，其中 f_l 是方程(9.25)的，在整个区间$(0,\infty)$上为有界的解．

如果 $E < 0$，在无限远处为有界的唯一解 $h_l^{(+)}(i\kappa r)$ 在原点处具有一个 $l+1$ 阶的极点．本征值问题无解；正如所预期的那样，不存在有负能量的本征态．

如果 $E > 0$，方程(9.25)有且仅有一个处处有界的解：函数 $j_l(kr)$．因而对能量的每个正值 $E = \hbar^2 k^2/2m$ 存在一个

角动量为(l_m)的本征解，也就是函数

$$Y_l^m(\theta,\varphi)j_l(kr). \tag{9.30}$$

如此构成的各个本征解能够用两个分立指标 l，m，和一个能够在区间$(0,\infty)$上取任何值的连续指标 k 来标记；这些球面波组成一个完全的正交归一系(习题 9.3)。

平面波 $\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$ 的集合组成自由粒子能量本征函数的另一个完全正交归一系。它们是观测算符 p_x，p_y，p_z 的共同本征函数，也就是说，是相应于一个完全确定的动量 $\boldsymbol{p}$ 的解。每个平面波是由三个连续参数，即矢量 $\boldsymbol{k}$ 的三个分量确定的，它们能够取$-\infty$同$+\infty$之间的所有值。

波 $\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$ 表示一个动量为 $\hbar\boldsymbol{k}$ 和能量为 $E=\hbar^2k^2/2m$ 的自由粒子。另一方面，它并不表示一个完全确定的角动量态，正如球面波(9.30)不表示一个完全确定的动量态。这一点并不令人感到惊奇，因为动量的三个分量 p_x,p_y,p_z 不同时与 $\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 对易。

9. 平面波用球谐函数展开

自由粒子的每个能量本征值都是无限地简并的。由于球面波(9.30)组成一个完全系，相应于一个给定波数值 k 的球面波的可数系张成能量 $E=\hbar^2k^2/2m$ 的本征函数的空间；所以，平面波 $\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$ 可以展开为这些函数的级数：

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}a_{lm}(\boldsymbol{k})Y_l^m(\theta,\varphi)j_l(kr). \tag{9.31}$$

如果我们选择 z 轴沿着 $\boldsymbol{k}$，这个波能够写成$\exp(ikr\cos\theta)$形式；它与 φ 无关，而展开式(9.31)仅仅包含 $m=0$ 项[1]。让

1) 的确：

$$l_z\exp(jkr\cos\theta)=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\exp(ikr\cos\theta)=0$$

$$\rho = kr, \quad u = \cos\theta.$$

这个平面波的展开式就简化为一个勒让德多项式的级数展开式[参见方程(B.94)]

$$e^{i\rho u} = \sum_{l=0}^{\infty} c_l j_l(\rho) P_l(u). \tag{9.32}$$

为了确定系数 c_l，我们可以采取如下做法。把级数(9.32)逐项对 ρ 求微商，我们得到

$$iue^{i\rho u} = \sum_l c_l \frac{dj_l}{d\rho} P_l. \tag{9.33}$$

但如考虑到勒让德多项式的递推关系 (B.78)，这一展开式也可写成

$$iue^{i\rho u} = i\sum_l c_l j_l u P_l = i\sum_l \left(\frac{l+1}{2l+3} c_{l+1} j_{l+1} + \frac{l}{2l-1} c_{l-1} j_{l-1}\right) P_l. \tag{9.34}$$

让展开式(9.33)和(9.34)中的 P_l 的系数相等，并且使用球贝塞尔函数的递推关系(B.53)和(B.54)，我们得到关系式

$$l\left(\frac{1}{2l+1} c_l - \frac{i}{2l-1} c_{l-1}\right) j_{l-1}(\rho)$$

$$= (l+1)\left(\frac{1}{2l+1} c_l + \frac{i}{2l+3} c_{l+1}\right) j_{l+1}(\rho).$$

为了使任何 ρ 都满足它们，必要和充分的条件是括号中的那些表示式全部等于零，或者说

$$\frac{1}{2l+3} c_{l+1} = \frac{i}{2l+1} c_l \quad (l = 0, 1, 2, \cdots, \infty),$$

亦即

$$c_l = (2l+1) i^l c_0.$$

对 $\rho = 0$ 写出展开式 $\exp(i\rho u)$，得到系数 c_0；鉴于 $j_l(0) =$

δ_{l0}，故有 $c_0 = 1$。

最后，平面波的展开式可以写成

$$e^{ikz} \equiv e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta). \quad (9.35)$$

为了在任何极坐标系内得到这个展开式，人们注意到出现在展开式(9.35)中的角度 θ 是矢量 $\boldsymbol{k}$ 同 $\boldsymbol{r}$ 之间的夹角。让我们用 $\hat{\boldsymbol{k}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{r}}$ 来表示这些矢量的各自的角坐标。按照球谐函数的相加定理[方程 (B.98)]

$$P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}).$$

把这一表示式代入展开式(9.35)中，得出

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = 4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(kr)Y_l^{m*}(\hat{\boldsymbol{k}})Y_l^m(\hat{\boldsymbol{r}}). \quad (9.36)$$

10. 球方阱的研究

我们处理“方阱”(图 9.2)

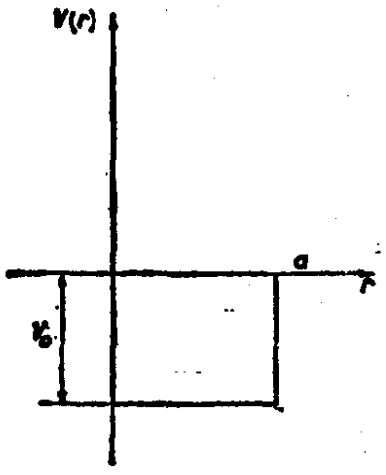

图 9.2 球方阱.

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a. \end{cases} \quad (9.37)$$

以阐明粒子在一个中心力场中的问题。

径向方程的解完全类似于一维方阱的解。我们知道怎样在各个区域$(0,a)$和(a,∞)写出薛定谔方程的一般解：它是球贝塞尔函数的线性组合。在原点处和在无限远处的正则性条件，以及函数和它的对数微商在点 $r = a$ 处的连续条件使我们得以确定那些合意的解。

设 E 是粒子的能量，并设 $K=[2m(E+V_0)]^{1/2}/\hbar$. 在内区($0<r<a$)，径向方程写为

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\left(K^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\right]f_l(r)=0.$$

让 $\rho=Kr$，我们又一次得出方程(9.25). 在原点处是正则的解只有一个：

$$A_{jl}(Kr) \qquad (A \text{ 是一个归一常数}).$$

在外区($r>a$)，薛定谔方程是一个自由粒子的方程. 按照 $E<0$ 还是 $E>0$，必须分别考虑两种情况.

A) $E<0$. **分立谱，束缚态.**

让我们设 $\kappa=(-2mE)^{\frac{1}{2}}/\hbar$. 唯一在无限远处为有界的解是表征束缚态的，指数式减小的解 $Bh_l^{(+)}(i\kappa r)$. 函数在 $r=a$ 处的连续条件确定比值 B/A. 而对数微商的连续性给出

$$\frac{1}{h_l^{(+)}(i\kappa r)}\left(\frac{d}{dr}h_l^{(+)}(i\kappa r)\right)\Big|_{r=a}=\frac{1}{j_l(Kr)}\frac{d}{dr}j_l(Kr)\Big|_{r=a}. \tag{9.38}$$

这一条件只能被 E 的某些分立值满足. 它确定粒子在所研究的这个阱内的束缚态能级. 如果我们论述 s 态($l=0$)，这个方程就成为

$$-\kappa a=Ka\cot Ka. \tag{9.38a}$$

这几乎就是第三章 § 6 对于一维问题的方程(3.18). 关于方程的根数和解的节点数的讨论不作很多改变就能够移用过来. 对于那些较高角动量的能级，可以作类似的讨论(习题 9.5).

B) $E>0$. **连续谱，非束缚态.**

设 $k=(2mE)^{\frac{1}{2}}/\hbar$. 薛定谔方程的一般解在外区是处处有界的. 它是 $j_l(kr)$ 和 $n_l(kr)$ 的线性组合. 在点 $r=a$ 处的连续条件确定可以作为本征函数接受的那个线性组合的系

数. 所以对于各个 E 值，有且仅有一个波函数同它相对应(最多差别一个常数).

如果我们把外区的解写成形式

$$B[\cos\delta_l j_l(kr) + \sin\delta_l n_l(kr)], \tag{9.39}$$

函数在 $r = a$ 处的连续条件确定比值 B/A. δ_l 是由对数微商的连续条件决定的

$$\frac{Kj_{l'}(Ka)}{j_l(Ka)} = k\frac{\cos\delta_l j_{l'}(ka) + \sin\delta_l n_{l'}(ka)}{\cos\delta_l j_l(ka) + \sin\delta_l n_l(ka)}. \tag{9.40}$$

它是一个实量. 事实上 δ_l 是角动量为 l 的球面波的相移. 利用表示式(9.26)，的确容易证实解(9.39)的渐近形式是

$$B\frac{\sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right)}{kr}.$$

在 s 波的情况下，方程(9.40)取非常简单的形式

$$K\cot Ka = k\cot(ka + \delta_0). \tag{9.40a}$$

III. 两体问题　质心运动的分离

11. 在经典力学中质心运动的分离

在量子力学中，两粒子体系的研究是一个六维问题. 然而，当这两个粒子除了它们相互之间的作用以外，不再受到其它的作用时（这种相互之间的作用仅仅依赖于它们的相对位置 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$)，它分成为两个三维问题，一个是自由粒子的，另一个是粒子在一静态势中的. 让我们把两个粒子的质量记为 m_1, m_2; 动量记为 $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2$; 而各自的位置则记为 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$. 所研究的体系的哈密顿量具有形式

$$H = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2} + V(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2). \tag{9.41}$$

这个处理在于把质心运动同相对运动分离开来，与相应的经典处理完全类似。

让我们简要地回忆经典程序是如何出现在哈密顿形式中的．让我们写下

$$M = m_1 + m_2, \boldsymbol{R} = \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2}, \boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2,$$
$$m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{r}_2, \quad \boldsymbol{p} = \frac{m_2\boldsymbol{p}_1 - m_1\boldsymbol{p}_2}{m_1 + m_2}. \tag{II}$$

按照动力学变数的代换 (II)，两个粒子的运动能够描绘为两个假想粒子的运动．一个是**质心**，它的位置是 $\boldsymbol{R}$；它的动量 $\boldsymbol{P}$ 是体系的总动量，它的质量 M 是体系的总质量．另一个是联系于相对运动的粒子；它的位置 $\boldsymbol{r}$ 是第一个粒子关于第二个粒子的相对位置，而它的速度 $\boldsymbol{p}/m$ 等于它们的相对速度 $(\boldsymbol{p}_1/m) - (\boldsymbol{p}_2/m)$；这一**相对粒子**的质量 m 称为**折合质量**.

我们只是简要地列出变换 (II) 的一些值得注意的性质：

$$m_1 m_2 = mM, \tag{9.42a}$$
$$\frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} = \frac{p^2}{2m} + \frac{P^2}{2M}, \tag{9.42b}$$
$$m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = mr^2 + MR^2, \tag{9.42c}$$
$$\boldsymbol{p}_1 \cdot \boldsymbol{r}_1 + \boldsymbol{p}_2 \cdot \boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{r} + \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{R}, \tag{9.42d}$$
$$\boldsymbol{l}_1 + \boldsymbol{l}_2 = \boldsymbol{l} + \boldsymbol{L}. \tag{9.42e}$$

在方程 (9.42e) 中，我们已经引进了两个粒子的角动量 $\boldsymbol{l}_1, \boldsymbol{l}_2$，相对粒子的角动量 $\boldsymbol{l} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$，以及质心的角动量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{p}$.

我们容易证实，泊松括号在这一变数代换中守恒：它是一个正则变换．因此新变数的运动方程是从看作为新变数的函数的哈密顿函数，也就是从

$$H = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) \tag{9.43}$$

得到的正则方程．我们发现

$$\dot{\boldsymbol{R}}=\frac{\boldsymbol{P}}{M},\dot{\boldsymbol{P}}=0,$$

$$\dot{\boldsymbol{r}}=\frac{\boldsymbol{p}}{m},\quad \dot{\boldsymbol{p}}=-\mathrm{grad}V.$$

质心和相对粒子的运动方程是完全分离的．质心运动是匀速直线运动，也就是一个质量M的自由粒子的运动．相对粒子的运动是一个质量m的粒子在势$V(\boldsymbol{r})$中的运动．

12. 量子化的两粒子体系的质心运动的分离

为了在量子力学中处理这同一个问题，我们同样引进一些新的动力学变量$\boldsymbol{r},\boldsymbol{R},\boldsymbol{p}$和$\boldsymbol{P}$，它们由方程(II)定义为那些老变量的函数．哈密顿量作为老变量的函数，由表示式(9.41)给出，而作为新变量的函数，则取(9.43)的形式．事实上，新变量服从同样的对易关系，就象它们分别代表两个位置为$\boldsymbol{r}$和$\boldsymbol{R}$，动量为$\boldsymbol{p}$和$\boldsymbol{P}$的粒子似的，仅有的非零对易子是

$$[r_j,P_j]=i\hbar,\quad [R_j,P_j]=i\hbar,\quad (j=x,y,z).$$

所有这些性质都是能够从方程(II)出发容易加以检验的代数性质．

我们还可以证实，方程(9.42)，包括方程(9.42e)在内，在量子论中保持有效，甚至没有必要改变出现在方程中的那些算符的次序．

当表示为新变量的函数时，H是两项的和：

$$H=H_r+H_R,$$

它的第一项

$$H_R=\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}$$

仅依赖于质心变量，而第二项

$$H_r = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + V(r)$$

仅依赖于相对粒子的变量. 由 H_r 的本征矢和 H_R 的本征矢的张量积组成的那些矢量构成 H 的本征矢的一个完全系.

因此在表象 $\{\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}\}$ 中的薛定谔方程写作

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + V(\boldsymbol{r})\right]\Psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}) = E\Psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}), \tag{9.44}$$

此处分别用 Δ_R 和 Δ_r 来记相对于坐标 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{r}$ 的拉普拉斯算符[1]. 这个方程具有一个如下形式的本征解的完全系:

$$\Psi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}) = \Phi(\boldsymbol{R})\varphi(\boldsymbol{r}),$$

其中函数 Φ 和 φ 分别满足分离方程

$$H_R\Phi(\boldsymbol{R}) \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R\right)\Phi(\boldsymbol{R}) = E_R\Phi(\boldsymbol{R}),$$

$$H_r\varphi(\boldsymbol{r}) \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_r + V(\boldsymbol{r})\right)\varphi(\boldsymbol{r}) = E_r\varphi(\boldsymbol{r}).$$

整个体系的能量本征值是部分体系的能量本征值之和:

$$E = E_R + E_r.$$

更为一般地,如果在起始时刻 t_0,被函数是两个因子的乘积 $F(\boldsymbol{R})f(\boldsymbol{r})$,这一因式化性质在时间的进程中是守恒的.函数 $F = (\boldsymbol{R})$ 象代表质量为 M 的自由粒子的波包那样运动,而函数 $f(\boldsymbol{r})$ 象代表质量为 m 的粒子在势 $V(\boldsymbol{r})$ 中的波函数那样运动[2].

---

1) 这一方程也可以直接从表象 $\{\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\}$ 中的薛定谔方程出发,在这偏微分方程中作出变量的代换

$$(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) \longrightarrow (\boldsymbol{r},\boldsymbol{R})$$

而得到.

2) 如果 $m_1 \ll m_2$,则 $m \approx m_1$ 和 $M \approx m_2$ (例子: 氢原子,m_1 = 电子质量,m_2 = 质子质量);如果 $m_1 \approx m_2$,则 $m \approx \frac{1}{2}m$, $M \approx 2m_1$ (例子: 氘核,m_1 = 质子质量,m_2 = 中子质量).

实际上，我们原来的两体问题的解因而简化为一个单粒子在势 $V(\boldsymbol{r})$ 中的解. 在势是中心势的情况下，如何求解这个问题是我们已经学过了的.

13. 扩展到多于两个粒子的体系

质心运动的分离非常一般地适用于若干粒子的体系，只要相互作用势 V 依赖于粒子的相对位置而不依赖于它们的绝对位置;换句话说，**只要相互作用对于所有粒子的整体平移是不变的.**

的确，让我们考虑一个$(N+1)$个粒子的量子体系，它的哈密顿量H具有上面所说的不变性质. 总是可能对其中两个粒子进行到质心的简化，即把它们的动力学变量用它们的质心和它们的相对粒子的动力学变量来代替. 这一程序可以继续下去;在第一步对两个粒子进行简化以后，我们能够对这两个粒子的质心和第三个粒子履行同一种简化. 经过这样两次相继的变量代换，这三个粒子将被:粒子1和2的"相对粒子"，粒子1和2的质心关于粒子3的相对运动的有关"粒子"，以及所有三个粒子的质心所代替. 一般地，经过N次这样的相继代换，有可能用N个"相对粒子"和$(N+1)$个粒子的体系的质心来代替这$(N+1)$个粒子. 这种到总体质心的简化能够用多种方法来完成，或是一步一步，一个粒子一个粒子地做下去$\left(\text{具有}\frac{1}{2}(N+1)!\text{种可能的不同做法}\right)$，或是把$(N+1)$个粒子分成分别等于$N_1$和$N_2$的两组粒子；然后在这两组的各组中履行到质心的简化，再把它们的质心$\boldsymbol{R}_1,\boldsymbol{R}_2$用"相对粒子" $\boldsymbol{R}_1-\boldsymbol{R}_2$和总体质心 $(M_1\boldsymbol{R}_1+M_2\boldsymbol{R}_2/(M_1+M_2)$ 来代替;要不然也可以把$(N+1)$个粒子分成三组，等等.

分别用$\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{p}_i$和$m_i$来记第$i$个粒子的位置，动量和质量;

用 $\boldsymbol{R},\boldsymbol{P}$ 和 M 来记 $(N+1)$ 个粒子的总体质心的相应量：

$$M=\sum_{i=1}^{N+1}m,\quad \boldsymbol{P}=\sum_{i=1}^{N+1}\boldsymbol{p}_i,\quad \boldsymbol{R}=\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{N+1}m_i\boldsymbol{r}_i;$$

并用 $\boldsymbol{\rho}_i,\boldsymbol{k}_i,\mu_i(j=1,2,\cdots,N)$ 来记联系于第 j 个“相对粒子”的相应量，它是在作上面所描述的某一个到质心的简化时引进来的. 既然这样一种简化是 N 次到两粒子质心的简化的持续，容易把等式(9.42)扩展一下而给出

$$m_1m_2\cdots m_{N+1}=M_{\mu_1\mu_2\cdots\mu N},\tag{9.45a}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1}\frac{p_i^2}{2m_i}=\frac{P^2}{2M}+\sum_{j=1}^{N}\frac{\boldsymbol{k}_j^2}{2\mu_j},\tag{9.45b}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1}m_ir_i^2=MR^2+\sum_{j=1}^{N}\mu_j\rho_j^2,\tag{9.45c}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1}\boldsymbol{p}_i\cdot\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R}+\sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{k}_j\cdot\boldsymbol{\rho}_j,\tag{9.45d}$$

$$\sum_{i=1}^{N+1}(\boldsymbol{r}_i\times\boldsymbol{p}_i)=\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P}+\sum_{j=1}^{N}(\boldsymbol{\rho}_j\times\boldsymbol{k}_j)\tag{9.45e}$$

另一方面，由于同样的理由，新的动力学变量服从一些对易关系，它们是表征 $(N+1)$ 个粒子的量子体系的动力学变量的. 最后，显而易见，势 V 仅仅依赖于相对坐标 $\boldsymbol{\rho}_1,\boldsymbol{\rho}_2,\cdots,\boldsymbol{\rho}_N$，而总动能是质心动能 $P^2/2M$ 和那些相对粒子的动能之和[方程(9.45b)]；也就是

$$H=\frac{P^2}{2M}+\left[\sum_{j=1}^{N}\frac{\boldsymbol{k}_j^2}{2\mu_j}+V(\boldsymbol{\rho}_1,\cdots,\boldsymbol{\rho}_N)\right].$$

哈密顿量象在两粒子的情况下一样地分离了，$(N+1)$ 体问题的解因而简化为一个 N 体问题的解.

刚才阐述的所有性质都与到质心的简化所采取的特定方法无关. 特别是，不管我们如何选择这 N 个引进的“相对粒

子”，它们的折合质量的乘积 $\mu_1\mu_2\cdots\mu_N$，它们的动能之和 $\sum_j(\boldsymbol{k}_j^2/2\mu_j)$，以及它们的角动量之和 $\sum_j(\boldsymbol{\rho}_j\times\boldsymbol{k}_j)$ 都保持不变[方程(9.45a)，(9.45b)和(9.45c)](问题 9.7)。

练 习 和 问 题

1 证明由方程(9.6)定义的厄密径向动量 p_r 满足方程

$$p_r=\frac{1}{2}\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right].$$

2.有一个粒子处在中心势 $V(r)$ 中，具有一定数目的束缚态．证明基态必然是一个 s 态．更为一般地，证明：如果存在一个角动量为 L 的束缚态，则相应于各个 $l<L$ 的角动量值，都至少存在一个束缚态，再证明如果 E_l 是我们对角动量 l 所能得到的最低能级，就必然有

$$E_0<E_1<\cdots<E_L.$$

3.明显地写下正交关系和闭合关系，再证明自由粒子的依赖于连续指标 $k(0<k<\infty)$ 和整数指标 l 和 $m(l\geqslant 0,-l\leqslant m\leqslant l)$ 的本征函数

$$k\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}Y_l^m(\theta,\varphi)j_l(kr)$$

组成一个完全正交归一系。

为此目的，推导关系式

$$\int_0^\infty j_l(kr)j_l(k'r)r^2dr=\frac{1}{2}\,\frac{\pi}{k^2}\delta(k-k'),$$

已知函数 $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\equiv\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$ 在极坐标中是由

$$\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=[(r^2\sin\theta)^{-1}\delta(r-r')\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi')]$$

表示的。证明如果 (k,θ_k,φ_k) 是矢量 $\boldsymbol{k}$ 的极坐标，则

$$\int\exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})Y_l^m(\theta,\varphi)j_l(k'r)dr=\frac{2\pi^2}{k^2}(-i)^lY_l^m(\theta_k,\varphi_k)\delta(k-k').$$

4.计算 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{p}$ 的各个分量与角动量 $\boldsymbol{l}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 沿着单位矢量 $\boldsymbol{u}$ 的分量$(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{l})$的对易子．证明它们能够写成缩写形式

$$[(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{l}),\boldsymbol{p}]=\frac{\hbar}{i}(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{p}),[(\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{l}),\boldsymbol{r}]=\frac{\hbar}{i}\,(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{r}).$$

由此证明 $\boldsymbol{l}$ 的每个分量与标量 $\boldsymbol{p}^2, \boldsymbol{r}^2$ 和 $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ 对易.

5.为了使得没有束缚的 s 态，§10 的方阱的特征参数 V_0 和 a 必须满足什么关系式？为了使得有一个给定数目的束缚的 s 态，关系式又是怎样的？在束缚的 s 态的数目和属于零能量的径向函数的节点数目之间是否有联系？再对于一个任意的 l 回答这几个相同的问题.

6.让我们用 WKB 方法来处理粒子在中心势 $V(r)$ 中的径向方程. 为了使这个方法适用，$V(r)$ 在波长量级的区域上的变化必须是小的，而且须有 $l \gg 1$。我们凭经验注意到，而且对此也能提出一些理论上的正当理由(参见 *Langer*，第六章第 II 节题注的引文)，如果把径向方程的离心垒项 $l(l+1)/r^2$ 中的 $l(l+1)$ 用 $\left(l+\frac{1}{2}\right)^2$ 代替，这个方法对于一些小的 l 值也能给出好的结果. 求证：如果预先进行径向方程的这一修饰，WKB 方法对于任何 l 都正确地给出：

(i) 自由球面波 $[V(r)=0]$ 的渐近形式 $\sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi\right)\Big/r$;

(ii) 氢原子 $[V(r)=-e^2/r]$ 的谱；

(iii) 各向同性谐振子 $\left[V(r)=\frac{1}{2}m\omega^2r^2\right]$ 的谱.

(本征值问题(ii)和(iii)的严格解分别在第十一和十二章中给出.)

7.我们用两种不同的方法对一个 $(N+1)$ 个粒子的量子体系履行质心运动的分离. 在第二种情况下引进的这 N 个"相对粒子"的位置矢量 $\boldsymbol{\rho}_1', \cdots, \boldsymbol{\rho}_N'$ 是从第一种情况下引进的那 N 个"相对粒子"的位置矢量 $\boldsymbol{\rho}_1, \cdots, \boldsymbol{\rho}_N$ 由一线性变换推演出来的：

$$\boldsymbol{\rho}_i' = \sum_{k=1}^{N} A_{ik}\boldsymbol{\rho}_k.$$

设 $\mu_1, \cdots, \mu_N$ 和 $\mu_1', \cdots, \mu_N'$ 是这些相对粒子的折合质量，证明矩阵元为

$$U_{jk} = \mu_j'^{\frac{1}{2}} A_{jk} \mu_R^{-\frac{1}{2}}$$

的这个 $(N\times N)$ 矩阵是一个正交矩阵.

8.对于势能 $V(r)$ 仅依赖于径向变量 $(x = r\cos\theta,\ y = r\sin\theta)$ 的

情况考虑二维薛定谔方程．求证恒等式

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}.$$

由此推演，有一个如下形式的本征函数的完全系：

$$\psi(r,\theta)=f(r)\exp(il\theta),$$

它的径向部分就是方程

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{d}{dr}-\frac{l^2}{r^2}+\frac{2m}{\hbar}[E-V(r)]\right]f(r)\equiv 0$$

在 $r=0$ 处等于零的那个解．

注意，如果 $V(r)=0$，这一正则解是贝塞耳函数 $J_{|l|}(kr)$，其中

$$k=(2mE)^{\frac{1}{2}}/\hbar.$$

第十章　散射问题　中心势和相移方法

1. 引言

这一章专门用来讨论与碰撞问题有关的基本概念. 碰撞实验的结果是用一些称为截面的量来表达的，且与薛定谔方程的定态解的渐近行为直接有关. 在给出截面的一般定义以后，我们把第 I 节的主要部分专门用来确立**截面同渐近形式之间的这一联系**，不过讨论的是一种简单情况——一个粒子被一在大距离处足够迅速地趋近于零(快于 $1/r$) 的势散射. 我们然后证明，分离质心运动的技术如何把这一处理用于两个相互作用粒子的碰撞.

这一章的所有其余部分专门用来讨论粒子被一**中心**势的散射，以及那种被通称为**相移方法**的解法. 这种方法在第 II 节中概述. 当势具有有限程时，它特别有用；相移的一些非常重要的性质，在这种情况下特别容易论证，将在第 III 节中讨论. 共振现象可能出现在量子力学的碰撞中，正如可能出现在任何被传播问题中一样；散射共振的讨论和解释组成第 IV 节的主题. 在第 V 即最后一节中给出一些现时感兴趣的相移表示式，特别是两个近似公式，即玻恩公式和贝推公式(或称有效程公式).

I. 截面和散射振幅

2. 截面的定义

考虑一个典型的散射实验. 一个靶受到一束单能粒子的

撞击. 设 J 是入射通量的大小，即单位时间穿过垂直于传播方向、且相对靶为静止的单位表面的入射粒子数目. 如果 P 是入射束中单位体积内的粒子数，v 是入射粒子相对于靶的速度，则有

$$J = Pv.$$

在实验条件下，P 是如此之小，以致我们能够忽略入射粒子之间的相互作用；所以它们互相独立地进行碰撞. 用适当的计数器，我们可测量单位时间被散射到位于 $\Omega \equiv (\theta,\varphi)$ 方向的立体角 $d\Omega$ 内的粒子数 $\mathcal{N}$. $\mathcal{N}$ 直接正比于入射流：

$$\mathcal{N} = J\Sigma(\Omega)d\Omega.$$

具有面积量纲的量 $\Sigma(\Omega)$ 是粒子与靶碰撞的特征参数；它是粒子被靶散射到 Ω 方向的散射截面.

在大多数情况下，靶是由 N 个(一个大数)原子或核的散射中心构成的，这些原子或原子核间的距离对于入射粒子的波长来说足够大，以致我们可以忽略被各个原子或核散射的波之间的所有相干[1]. 因此，各个散射中心独自地起作用. 再者，如果靶足够薄，以致我们可以忽略多次散射，则 $\mathcal{N}$ 直接正比于 N，而且我们有

$$\mathcal{N} = JN\sigma(\Omega)d\Omega.$$

面积 $\sigma(\Omega)$ 称为粒子被散射中心散射到 Ω 方向的散射截面，或简称为**微分散射截面.**

单位时间内被散射的粒子总数是由对角度积分而得到的. 它等于 $JN\sigma_{\text{tot.}}$，此处

$$\sigma_{\text{tot.}} = \int \sigma(\Omega)d\Omega$$

是总散射截面.

在核物理中，散射中心具有 10^{-13}—10^{-12} 厘米量级的大

1) 这一情况并不总是可实现的. 这一规则的重要例外是晶体中的衍射现象：电子衍射，热中子衍射，或X射线衍射.

小，截面通常用靶恩或毫靶恩来量度：

$$1\text{ 靶恩} = 10^{-24}\text{ 厘米}^2, 1\text{ 毫靶} = 10^{-27}\text{ 厘米}^2.$$

前面我们含蓄地假设可能的碰撞都是弹性碰撞，即碰撞时散射体的量子态不改变，或更明确地说，没有能量转移给散射体内部自由度．我们暂且仅限于讨论这种型式的碰撞．再者，我们将用一个依赖于粒子坐标 $\boldsymbol{r}$ 的静态势 $V(\boldsymbol{r})$ 来表示散射体(原子或核)，而不管它的一切复杂性．

3. 稳定的散射波

我们要考虑一个质量为 m 的粒子被势 $V(r)$ 的散射．在这一章中，我们只限于讨论当 $r \to \infty$ 时比 $1/r$ 更迅速地趋向于零的势 $V(r)$．库仑势的散射将在第十一章中处理．

设 E 是粒子的能量，$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ 是粒子的初始动量．我们能够把截面 $\sigma(\Omega)$ 与薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\boldsymbol{r})\right]\psi_k(\boldsymbol{r}) = E\psi_k(\boldsymbol{r})$$

的解联系起来．方程的解在无限远处的行为具有形式

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + f(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}. \tag{10.1}$$

我们将不作进一步讨论而假设[1]，对于各个 $\boldsymbol{k}$ 值，有一个且仅有一个这种型式的解存在．我们称这个解 $\psi_k(\boldsymbol{r})$ 为具有波矢 $\boldsymbol{k}$ 的稳定的散射波．

这个渐近形式中的两项是容易解释的，如果我们使用流密度矢量的定义(4.9)[2]

1) 我们将在第 II 节中对于一个特殊情况——V 是一个在原点处足够正则的中心势——来证明这一点．

2) 我们能够定义一个在点 $\boldsymbol{r}_0$ 处代表流的厄密算符 $J(\boldsymbol{r}_0)$：

$$J(\boldsymbol{r}_0) = \frac{1}{2m}[\boldsymbol{p}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) + \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)\boldsymbol{p}];$$

上面定义的流是这一算符关于一个给定量子态的平均值．

$$J(r) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*(r)(\nabla\psi(r)) - (\nabla\psi(r))^*\psi(r)\right].$$

平面波项 $\exp(ik\cdot r)$ 表示一个单位密度和流密度为 $\hbar k/m$ 的波. 仅保留 $1/r$ 的最低阶，项 $f(\Omega)\exp(ikr)/r$ 表示密度为 $|f(\Omega)|^2/r^2$ 和流密度沿着 Ω **指向** r **增大**的方向(出射波)、且等于 $(\hbar k/m)(|f(\Omega)|^2/r^2)$ 的波. 事实上，既然势 $V(r)$ 的影响在渐近区域是能够忽略的，我们就能够按照经典近似(参见第六章 § 4) 把项 $\exp(ik\cdot r)$ 解释成为一束动量为 $\hbar k$ 密度为 1 的代表入射束的单能粒子. 项 $f(\Omega)\exp(ikr)/r$ 可解释为一束从散射中心径向发射出去的粒子，它代表的是被散射粒子的束.

按照这一解释，我们能够计算单位时间发射到位于 Ω 方向的立体角 $d\Omega$ 内的粒子数目: 它等于被散射粒子通过一个半径非常大的、对着立体角 $(\Omega, \Omega+d\Omega)$ 的球表面元的通量，也就是 $(\hbar k/m)|f(\Omega)|^2 d\Omega$. 用入射通量 $J = \hbar k/m$ 相除，我们得到散射截面

$$\sigma(\Omega) = |f(\Omega)|^2, \tag{10.2}$$

$f(\Omega)$ 称为**散射振幅**.

4. 用一束波包来表示散射现象[1)]

由于两个理由，上面所给的这种非常直观的论证是不正确的.

首先，流密度矢量并不简单地就是入射平面波的流和被散射波的流之和. 我们必须把 $\exp(ik\cdot r)$ 同 $f(\Omega)[\exp\times(ikr)/r]$ 之间的相干项加到这些贡献上去. 在前述论证中，有意地没有考虑入射波和被散射波之间的相干.

1) 我们在 §§ 4,5 和 6 中对散射问题的处理基本上取自 Clew 和 Low 对散射理论所作的一篇综述. §16 的计算也是从这个工作中借用过来的.

其次，用稳定的散射波

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})e^{iEt/\hbar} \tag{10.3}$$

来表示物理情况是一种理想化的做法. 实际上，参与散射的各个粒子必须用一波包表示，这个波包是由一些(10.3)型的驻波(各相应于一些**大小**和**方向**稍为不同于 $\boldsymbol{k}$ 的波矢)的叠加组成的. 建造这个波包是为了正确地满足初始条件. 由于动量方向上的展开，它在横向受到这样的束缚，以致于它的横向线度不超过产生入射束的仪器的(一块或几块)光阑的线度. 由于能量上的展开，它在纵向也是受限制的；它的中心沿着一根直线以一个等于它的群速度 $\boldsymbol{v}=\hbar\boldsymbol{k}/m$ 的速度向着靶运动.

我们用波包与垂直于传播方向又通过散射中心的平面 (S) 的交点的位置 $\boldsymbol{b}$ 来指明每一个这样的初始轨道. 设想波包的运动不曾由于势的存在而受到修正，如果我们把波包中心通过平面(S)的瞬时记为 t_0，则在碰撞以前波包中心的运动遵循规律

$$\langle\boldsymbol{r}\rangle=\boldsymbol{b}+\boldsymbol{v}(t-t_0)\qquad(t\ll t_0).$$

入射束实际上是一束这种型式的波包，它们以速度 $\boldsymbol{v}$ 彼此平行地运动，彼此的差别仅仅是参数 $\boldsymbol{b}$ 和 t_0 的数值不同(这两个参数用来固定各自的中心在碰撞以前的运动).

在下面要用到一些特征长度(图 10.1)：

$\lambda=\hbar/mv=$ 入射波包的平均波长；

$d,l=$ 入射波包的横向和纵向线度；

$a=$ 散射区域的扩展范围；

$D=$ 从计数仪器到散射区域的距离.

通过测不准关系，d 和 l 分别联系于入射波包在方向上和在能量上的展开. 既然我们假设入射传播方向和能量是确定的，就必须有

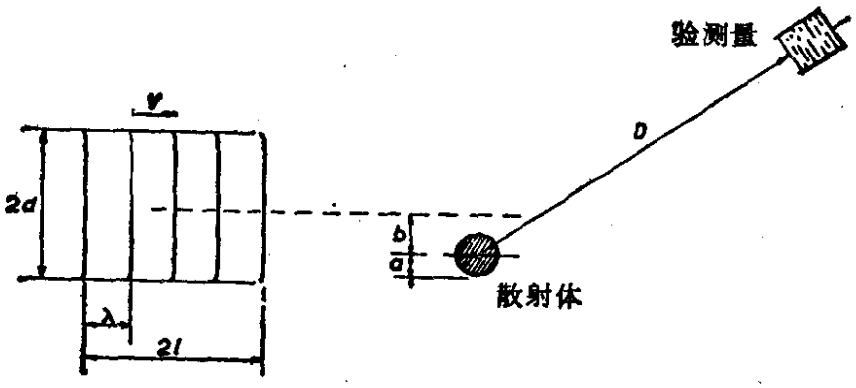

图 10.1　散射实验以及描述散射现象的一些特征长度的示意图

$$\lambda\!\!\!^{-} \ll d \text{ 和 } \lambda\!\!\!^{-} \ll l. \tag{10.4}$$

为了使碰撞现象不会过分地依赖于波包的特定形状，还进一步要求波包的线度比散射区域的线度大得多，也就是

$$a \ll d, l \tag{10.5}$$

(如果散射体是原子，$a \approx 10^{-8}$ 厘米，如果它是原子核，$a \approx 10^{-12}$ 厘米)。

如果碰撞参数大于波包的侧向扩展范围($b > d$)，入射波包永不进入散射区域，并在散射现象的整个持续期间作为一个自由波包传播。另一方面，如果 $b < d$，它在某个时刻 $t_1 \approx t_0 - (l/v)$ 进入散射区域。碰撞恰好是在这一瞬间开始的。经过一段足够长的时间以后，波包又完全在散射区域之外；因而它一般地由两个相加项组成：一个透射波包，它的传播形式和规律本质上同入射波包一样，以及一个被散射在一些不同于入射方向的方向上的波包[1](图 10.2)。

在给定的方向 $\Omega = (\theta, \varphi)$ 上，在离散射中心为 D 量级的距离处放置一个合适的计数系统(计数器，照相板等等)，以此来探测被散射粒子。如果我们希望波包的展开在实验期间是

1) 这个现象类似于第三章 (§§ 3,6 和 7) 中研究的一维波的反射和透射现象.

可忽略的，这一距离就必须不太大(参见第六章 § 3)：

$$\sqrt{\lambda D} \ll d, l. \tag{10.6}$$

为了使我们探测的波的传播不受散射中心存在的影响，也就是

$$a, \lambda \ll D, \tag{10.7}$$

也为了使得探测器在任何情况下都不被透射波触发：

$$d \ll D \sin\theta. \tag{10.8}$$

探测必须在足够远地方进行.

[注意：朝前的散射波($\theta = 0$)决不能同透射波分开.]

合并条件(10.4)—(10.8)，我们最后得到下列不等式[1]：

$$a, \sqrt{\lambda D} \ll 1, \tag{10.9a}$$

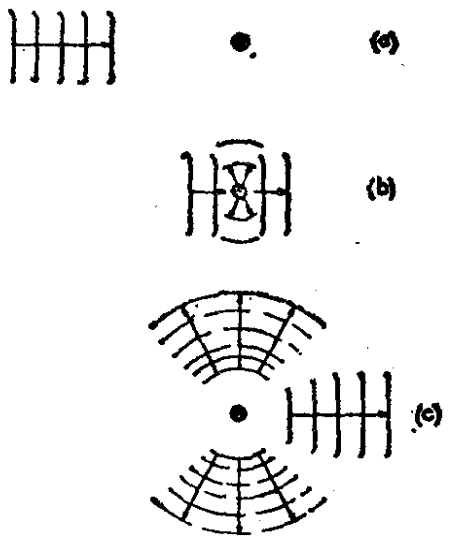

图 10.2 波包散射现象的几个阶段：
(a) 碰撞以前；(b) 碰撞期间；(c) 碰撞以后.
(阴影区：非零势奏效的区域.)

$$a, \sqrt{\lambda D} \ll d \ll D. \tag{10.9b}$$

为了使得截面 $\sigma(\Omega)$ 实际上由公式(10.2)给出，有必要让测量装置满足条件(10.9).

再者，波包必须在方向上和在能量上足够好地确定，以致我们能够为它们指派一个完全确定的散射振幅：当能量变化一个 $\delta E \approx \hbar v/l$ 量级的数量，而入射角关于它们各自的平均值变化一个 λ/d 量级的数目时，$f(\Omega)$ 必须实际上在**模数**和**幅角**上保持恒定.

---

1) 在原子物理或核物理中，d 至多等于入射粒子的进口光阑的尺寸，$d \approx$ 1 毫米；l 可以显著地较大；D 是 1 米的量级. 取 $a \approx 10^{-8}$ 厘米和 $\lambda \approx 10^{-8}$ 厘米(至多)，我们得到 $\sqrt{\lambda D} \approx 10^{-3}$ 厘米和 $l/a \gtrsim d/a \approx 10^{7}$，$l\sqrt{\lambda D} \gtrsim d/\sqrt{\lambda D} \approx 10^{2}$，$d/D \approx 10^{-3}$. 因而条件(10.9)充分满足.

这一结果的证明组成下面两节的主题。

5. 波包被一个势散射

在($l, d \gg a$)的情况下，入射波包的演变实际上是与它们的特定形状无关的。我们假设，它们全都有相同的形状，各个波包都由确定其中心运动的参数 $\boldsymbol{b}$ 和 t_0 表征。我们取 $t_0=0$，这样做不会失去一般性。

为了确定入射波的形状，让我们引进一个归一的函数 $\chi(\boldsymbol{\rho})$：

$$\int|\chi(\boldsymbol{\rho})|^2 d\boldsymbol{\rho}=1. \tag{10.10}$$

再用 $A(\boldsymbol{\kappa})$ 来表示它的傅里叶变换，它的模方是这样确定的，使

$$\chi(\boldsymbol{\rho})=\int A(\boldsymbol{\kappa}) e^{i\boldsymbol{\kappa}\cdot\boldsymbol{\rho}} d\boldsymbol{\kappa}. \tag{10.11}$$

根据假说，$\chi(\boldsymbol{\rho})$ 是一个实函数，当 $\boldsymbol{\rho}$ 位于 $\rho=0$ 附近一个长为 l，宽为 d 的区域内时，它才有显著的值。同样，$A(\boldsymbol{\kappa})$ 是实的，且仅在点 $\kappa=0$ 附近一个长为 $1/l$，宽为 $1/d$ 的区域内有显著值。我们假设 $d\approx l$，以简化讨论。

碰撞之前很久 ($t \ll -l/v$)，所讨论的波包 $\Psi_b(\boldsymbol{r},t)$ 势必就是自由波包 $\Phi_b(\boldsymbol{r},t)$，它的中心按照规律

$$\langle \boldsymbol{r}\rangle = \boldsymbol{b}+\boldsymbol{v}t$$

运动，而它在 $t=0$ 瞬时的形状由

$$\Phi_b(\boldsymbol{r},0)=e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{b})}\chi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{b})$$

$$=\int A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}) e^{i\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{b})} d\boldsymbol{k}'$$

给出。事实上

$$\Phi_b(\boldsymbol{r},t)=\int A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}) e^{i[\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{b})-(E't/\hbar)]} d\boldsymbol{k}'. \tag{10.12}$$

如果我们忽略它的展开，这一自由波包可以同样好地由下式

$$\Phi_b(\boldsymbol{r},t) \approx e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}} e^{i[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-(Et/\hbar)]}\chi(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{v}t-\boldsymbol{b}) \quad (10.13)$$

来表示（参见第八章 § 18）。它是把(10.12)右边的积分中的能量 $E'=\hbar^2k^2/2m$ 用它的 $(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$ 幂的展开式中的头两项来代替而得到的：

$$E' = E + \hbar\boldsymbol{v}\cdot(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}).$$

波包 Ψ_b 则是在积分(10.12)中用稳定的散射波 $\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})$ 来代换平面波 $\exp(i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r})$ 而得到的：

$$\Psi_b(\boldsymbol{r},t) \approx \int A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{b}}\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})e^{-iE't/\hbar}d\boldsymbol{k}'. \quad (10.14)$$

的确，这实际上是薛定谔方程的一个解，因为它是这个方程的一些解的叠加。所以只要证明它在碰撞以前同自由波包 Φ_b 恒等，这样就足够了。

既然函数 $A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$ 在点 $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}$ 附近有一个显著的峰，对于积分(10.14)的唯一重要的贡献就来自那个点周围的区域。当 $t \ll -l/v$ 时，被积函数的相位在这个区域内由于指数 $\exp(iE't/\hbar)$ 的缘故而非常迅速地变化，积分实际上是零，只有对于这个相位是稳定的那些 r 值除外；这一点只有对量级为 $v/|t|$ 的 r 才能够发生，换句话说，只能够发生在位形空间的这样一些区域，在那里 $\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})$ 能够用它的渐近形式

$$\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r}) \sim e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}} + f_{\boldsymbol{k}'}(\Omega)\frac{e^{ik'r}}{r} \quad (10.15)$$

来代替。把这个表示式代入积分(10.14)，就给出

$$\Psi_b(\boldsymbol{r},t) \underset{t\to-\infty}{\sim} \Phi_b(\boldsymbol{r},t) + \Psi_b^{(d)}(\boldsymbol{r},t), \quad (10.16)$$

其中

$$\Psi_b^{(d)} = \int A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{b}} f_{\boldsymbol{k}'}(\Omega)\frac{e^{i[k'r-(E't/\hbar)]}}{r}d\boldsymbol{k}'. \quad (10.17)$$

当 $t \to -\infty$ 时，(10.17)右边的被积函数的相位在区域 $\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k}$ 内不是稳定的，积分 $\Psi_b^{(d)}$ 对任何 r 实际上是零．在这个极限下，因而波包 Ψ_b 实际上与自由波包全同．

现在考虑波包 Ψ_b 在探测区域 $(r \gtrsim D)$ 的运动． 在空间的这个区域，用它的渐近形式(10.15)来替换 $\psi_{\boldsymbol{k}'}$ 当然是有理由的．因而表示式(10.16)再一次成立．

我们假设角度和能量的展开是如此之小，以致 $f_{\boldsymbol{k}'}(\Omega)$ 在点 $\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{k}$ 周围的扩展区域 $1/d \approx 1/l$ 实际上保持恒定，而且我们能够在积分(10.17)中把 $f_{\boldsymbol{k}'}(\Omega)$ 的模数用它在点 $\boldsymbol{k}$ 处的值代替，而它的幅角用它的展开式中的头两项来代替：

$$\begin{aligned} &\arg f_{\boldsymbol{k}'}(\Omega) \approx \arg f_{\boldsymbol{k}}(\Omega) + (\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}) \cdot \boldsymbol{s}(\Omega), \\ &\boldsymbol{s}(\Omega) = \operatorname{grad}_{\boldsymbol{k}}[\arg f_{\boldsymbol{k}}(\Omega)] (s \ll d, l). \end{aligned} \tag{10.18}$$

同样，我们把其它因子的幅角用它们的展开式中的头两项来代替：

$$k' \approx k + \boldsymbol{u} \cdot (\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}), \quad E' \approx E + \hbar \boldsymbol{v} \cdot (\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}) \tag{10.19}$$

$(\boldsymbol{u} \equiv \boldsymbol{v}/v =$ 沿入射方向的单位矢量$)$． 同对 Φ_b 的考虑［参见方程(10.13)］相类似，稳定相位的考虑使我们得到方程

$$\Psi_b^{(d)} \approx e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{b}} f_{\boldsymbol{k}}(\Omega) \frac{e^{i[kr-(Et/\hbar)]}}{r} \chi[\boldsymbol{u}(r - vt) + \boldsymbol{s} - \boldsymbol{b}]. \tag{10.20}$$

$\Psi_b^{(d)}$ 是否能够忽略，依赖于碰撞参数 b 是大于还是小于 d．

如果 $b > d$， χ 的幅角在所有的时间和对于所有的 r 都处于这一函数是能够忽略的区域内，$\Psi_b^{(d)}$ 总是实际上为零，波包就作为一个简单的自由波包传播．

如果 $b < d$，即如果入射被包在它的运动期间实际上进入散射区，χ 在球 $r = vt$ 两边、厚度为 l 量级的球壳内有显

著值：$\Psi_b^{(d)}$，它在碰撞以前实际上保持为零，在碰撞以后表示一个速度为 v 的出射波包，即一个以径向速度 v 从散射体向外行进的球面波包．在时刻 $t \approx D/v$，被 $\Psi_b^{(d)}$ 进入探测区；它然后同透射波 Φ_b 完全分开，除了朝前方向 $(\theta < d/D)$ 以外，在那里这两个波都是重要的，而且将会相干[1]．我们于是得到了在第十章 § 4 中阐述的那些定性的结果．

6. 截面的计算

在计算截面以前，让我们清楚地说明：探测的操作究竟涉及到什么．不管使用什么样的实验安排，它本质上在于在距离 D 处、在相对于靶为 $\Omega = (\theta, \varphi)$ 的方向上放置一个光阑．这个光阑的开放用这样一种方法安排，以致它让发射到一个给定立体角 $(\Omega, \Omega + \delta\Omega)$ 的任何波都没有畸变地通过，而把其余的排除掉．每当一个粒子横越光阑时，放置在它后面的探测系统就受到触发．探测器被一个其运动在探测以前是由波 $\Psi_b(\boldsymbol{r}, t)$ 表示的粒子触发的几率 $P_b(\Omega)\delta\Omega$ 等于穿过光阑的这个波的通量对整个碰撞持续时间作的积分[2]，或者等效地说，等于当碰撞已经发生 $(t = T \gg l/v)$ 时，被散射的粒子出现在立体角 $(\Omega, \Omega + \delta\Omega)$ 内的几率．

由于探测器位于横方向的足够远处，以致透射波决不能达到它[条件 (10.8)]，只有被散射的波 $\Psi_b^{(d)}$ 进入这一几率的计算．从它的表示式(10.20)，我们得到

---

1) 干涉项一定不能忽略，因为保证模方守恒的正是这一项(习题 10.1)．

2) 粒子横越光阑的那个时间，平均地说来，等于 $[D + (\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{s})]/v$．按照时间-能量测不准关系，它实际上是不能以大于 l/v 的精度被预告的．$(\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{s})/v$ 可解释为散射波透射时的延迟．然而，此处考虑的实验安排当然不允许这样一种延迟会被观测到，因为 $s \ll l$（参见第三章 § 6 关于反射延迟的讨论）．这种类型的延迟的观测以一种足够差的能量界限为条件（参见第十章 § 16）．

$$P_b(\Omega)=\int_0^\infty|\psi_b^{(d)}(r,T)|^2r^2dr$$
$$=|f_k(\Omega)|^2\int_0^\infty|\chi[u(r-vT)+s-b]|^2dr. \tag{10.21}$$

鉴于 $vT\gg l$，我们能够作出变数代换

$$z=r-vT$$

并把积分限扩展到$-\infty$，由此得到

$$P_b(\Omega)=|f_k(\Omega)|^2\int_{-\infty}^{+\infty}|\chi(uz+s-b)|^2dz.$$

现在考虑一束单位通量的粒子： 单位时间内在表面元 $(b,b+db)$ 上，有 db 个入射粒子，它们中的每一个被散射在 $(\Omega,\Omega+\delta\Omega)$方向上的几率为 $P_b(\Omega)\delta(\Omega)$.这个表示式对 b 积分，我们得到单位时间、单位通量散射到 $(\Omega,\Omega+\delta\Omega)$ 的几率为

$$\sigma(\Omega)=|f_k(\Omega)|^2\int_{-\infty}^{+\infty}dz\int db|\chi(uz+s-b)|^2.$$

b 的积分区域是垂直于 u 的那个平面． 进行变数代换 $\rho=uz+s-b$，我们把上述三重积分简化为函数 χ 的归一积分[方程(10.10)]．我们于是得出表示式(10.2)：

$$\sigma(\Omega)=|f_k(\Omega)|^2.$$

7. 两个粒子的碰撞 实验室系和质心系

分离质心运动的技术使我们能够把一个粒子被势散射的处理扩展到受制于势 $V(r)$的两个粒子的碰撞，这里 $V(r)$ 仅仅依赖于它们的相对位置．正如第九章第 III 节所示(我们借用那一节的记号)，两个粒子的运动可分解为两个分离的运动：它们的质心象一个自由粒子那样运动，以及质量为 $m=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$ 的“相对粒子”受制于势 $V(r)$ 的运动．

在一个典型的散射实验中，我们用一束型 1 的单能粒子轰击一个由型 2 的粒子组成的靶，且记录发射到一给定方向 $\Omega_1 = (\theta_1, \varphi_1)$ 的某种类型的粒子数目(譬如粒子 1)．碰撞以前，粒子 2 是静止的，粒子 1 以一给定速度 $\boldsymbol{v}$ 行进，而质心以速度

$$\boldsymbol{V} = \frac{m_1}{M}\boldsymbol{v} \qquad (M = m_1 + m_2)$$

运动．体系的总能量是质心运动和相对运动的能量之和

$$E = E_R + E_r$$

$$\left(E = \frac{1}{2} m_1 v^2;\ \ E_R = \frac{1}{2} MV^2 = \frac{m_1}{m_1 + m_2} E; \right.$$

$$\left. E_r = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2} E \right).$$

碰撞期间，质心继续作匀速直线运动，碰撞现象仅影响相对坐标．显而易见，散射截面 $\sigma_1(\Omega)$ 与相对坐标的能量 E_r 的定态的渐近行为有关．

为了确立这种关系，改变一下参考系并在一个质心在其中是静止的参考系中研究这同一现象是方便的．我们通常称靶粒子在其中是静止的那个参考系为**实验室系**，称质心在其中是静止的那个为**质心系**．第一个就是上面所考虑的；第二个则对前者作速度为 $\boldsymbol{v}$ 的匀速平移运动．从一个参考系过渡到另一个，仅仅影响质心的运动；相对粒子的运动保持不变．

第十章 § 2 中所给的截面定义决没有假定靶在开始时是静止的．我们强调写在那个定义中的入射通量是射弹关于散射体的**相对通量**；它是一个与参考系无关的量．一旦认清是这一点，我们就能在质心系中定义微分截面 $\sigma(\Omega)$，其方法与在实验室系中定义这同一个过程的微分截面 $\sigma_1(\Omega)$ 一样．$\sigma(\Omega)$ 是当我们以相对通量为一的粒子 1 的入射通量轰击粒子 2

时，单位时间在Ω方向的单位立体角内所发射的粒子 1 的数目，所有的观测都在质心系内进行，发射角也是在这个系统中测量的.

这些定义意味着

$$\sigma(\Omega)d\Omega = \sigma_1(\Omega_1)d\Omega_1, \tag{10.22}$$

表示式中用Ω_1记粒子 1 在实验室系中的发射方向，而在质心系中，这个粒子正在沿Ω方向行进. 注意总截面的等式

$$\sigma_{\text{tot.}} \equiv \int \sigma(\Omega)d\Omega = \sigma_{1\text{tot.}}.$$

这一点事实上是不言而喻的，因为总截面是单位入射通量的被散射粒子的总数，这个量对于参考系的改变是协变的.

$\sigma(\Omega)$比$\sigma_1(\Omega_1)$更为直接地联系于相对粒子被势$V(r)$散射的(三维)散射问题. 的确，在质心系内，粒子 1 的传播方向和相对粒子的传播方向是全同的（粒子 2 在相反方向上行进). 再者，既然相对粒子关于力心（$r = 0$）的入射通量等于我们的碰撞问题的入射通量，$\sigma(\Omega)$是相对粒子在Ω方向的散射截面，也就是说，它是一个质量为m，初速度为v的粒子被势$V(r)$散射时在Ω方向的微分散射截面.

特别是，如果$V(r)$比$1/r$更为迅速地渐近地趋向于零，则相对粒子的薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(r)\right]\psi(r) = E_r\psi(r)$$

有一个能量为E_r的本征解，其渐近行为是

$$e^{ik\cdot r} + f(\Omega)\frac{e^{ikr}}{r}$$

($E_r = \hbar^2k^2/2m$，$k = mv/\hbar = m_2k_1/M$，k_1是实验室系的入射波矢)，再应用前面几节的结果，得

$$\sigma(\Omega) = |f(\Omega)|^2.$$

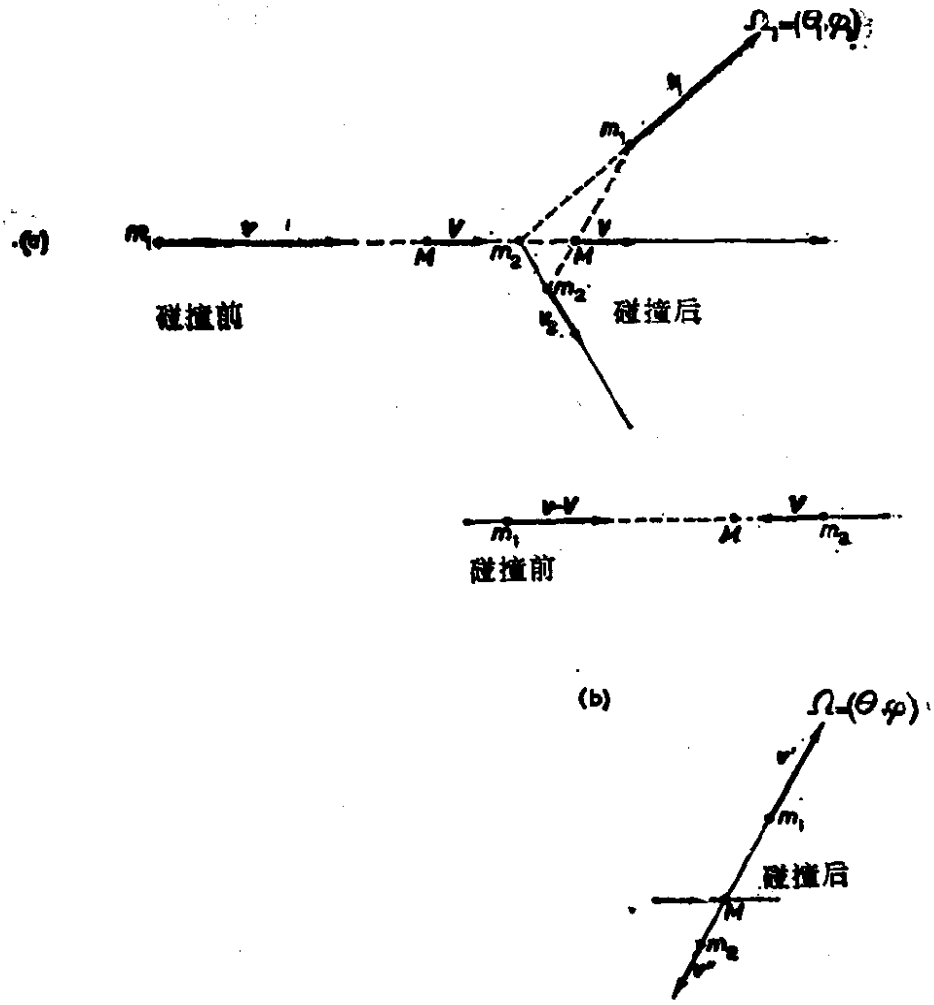

图 10.3 (a) 实验室系中的碰撞 ($V = m_1 v/M$).
(b) 质心系中的同一碰撞.

为了能够从上面这些表示式[1] 推导实验室系的截面 $\sigma_1(\Omega_1)$，我们还必须确定 Ω 同 Ω_1 之间的关系. 为此目的，我们把平行于传播方向的轴取为两个坐标系的极轴. 图 10.3 a 给出实验室系中的一次碰撞的示意图，而图 10.3 b 给出质心

1) 这里所做的所有计算只在非相对论近似下才是有效的. 然而，质心系的概念在相对论力学中保持有效: 它是总动量(粒子 1 的动量＋粒子 2 的动量)在其中是零的参考系. 我们用洛仑兹变换可从质心系过渡为实验室系. 在这里所考虑的非相对论近似中，这一洛仑兹变换简化为伽利略变换，也就是

$$r_i \to r_i + Vt, \quad p_i \to p_i + m_i V.$$

系中的同一次碰撞. 两个粒子的初速度和末速度同它们的球极坐标一起,在下面这个表中给出:

	初速度		末速度	
	1	2	1	2
实验室系	$v(v,0,0)$	0	$v_1(v_1,\theta_1,\varphi_1)$	$v_2(v_2,\theta_2,\varphi_2)$
质心系	$v-V(v-V,0,0)$	$-V(V,\pi,0)$	$v'(v',\theta,\varphi)$	$v''(v'',\pi-\theta,\varphi+\pi)$

$$\boldsymbol{V}=\frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{v},\quad \boldsymbol{v}'=\boldsymbol{v}-\boldsymbol{V}=\frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{v},$$

$$v''=V=\frac{m_1}{m_1+m_2}v$$

(θ_1,φ_1) 由矢量等式

$$\boldsymbol{v}_1=\boldsymbol{v}'+\boldsymbol{V} \tag{10.23}$$

定义为(θ,φ)的函数[1]. 我们有

$$\varphi_1=\varphi,\quad v_1\sin\theta_1=v'\sin\theta,\quad v_1\cos\theta_1=v'\cos\theta+V,$$

由此得出

$$\tan\theta_1=\frac{\sin\theta}{\cos\theta+\tau},$$

或者

$$\cos\theta_1=\frac{\cos\theta+\tau}{(1+2\tau\cos\theta+\tau^2)^{1/2}}, \tag{10.24}$$

在这两个表示式中我们已经设

$$\tau=\frac{V}{v'}=\frac{m_1}{m_2}. \tag{10.25}$$

1) 同样,(θ_2,φ_2) 同(θ,φ)之间的关系由等式 $\boldsymbol{v}_2=\boldsymbol{v}''+\boldsymbol{V}$ 定义. 由于 $v''=V$,容易证明, $\theta_2=\frac{1}{2}(\pi-\theta)$, $\varphi_2=\varphi+\pi$.

矢量求和(10.23)实际上能够图解;关系式(10.24)能够直接从图上读出，用图来讨论这些结果比用公式(10.24)本身来得容易. 这一图形解释描绘在图 10.4 中. 两种情况可能出现:

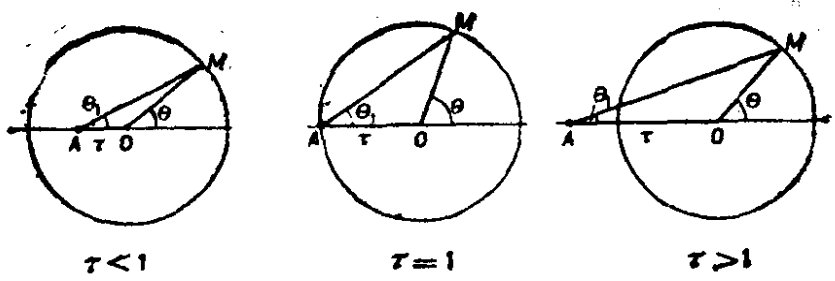

图 10.4 θ_1 作为 θ 的函数的几何解释:
$OA=\tau$ $OM=1$ $(\tau=V/v'=m_1/m_2)$.

(i) $\tau<1(m_1<m_2)$. 当 θ 从 0 增长到 π 时，角度 θ_1 单调地从 0 增长到 π. 注意对于任何 θ，有 $\frac{1}{2}\theta<\theta_1<\theta$.

在 $m_1 \ll m_2$ 的极限情况下，$\theta_1 \approx \theta$ (质心在碰撞期间与粒子 2 实际上保持重合，因此它在实验室中实际上是静止的).

(ii) $\tau>1(m_1>m_2)$. 当 θ 从 0 增长到 π 时，θ_1 首先从0增大到某个小于 $\frac{1}{2}\pi$ 的极大值，也就是 $\theta_{1\max}=\sin^{-1}\left(\frac{1}{\tau}\right)$，然后它从 $\theta_{1\max}$ 减小到零. 对于各个 θ_1 值，因而有两个可能的 θ 值，即 $\theta_<$ 和 $\theta_>$ 与之相对应，它们由 $\theta_1=\frac{1}{2}(\theta_<+\theta_>-\pi)$ 相联系；这两个 θ 值分别对应于两个不同的 v_1 值，较大的一个对应于较小的 θ 值.

[当 $\tau=1(m_1=m_2)$ 时，我们就有 $\theta_1=\frac{1}{2}\theta$.]

从关系式(10.24)，们们得到

$$\frac{d(\cos\theta_1)}{d(\cos\theta)}=\frac{1+\tau\cos\theta}{(1+2\tau\cos\theta+\tau^2)^{3/2}},$$

鉴于

$$\frac{d\Omega_1}{d\Omega}=\left|\frac{d(\cos\theta_1)}{d(\cos\theta)}\right|$$

应用关系式(10.22),我们得到

$$\sigma_1(\Omega_1)=\sigma(\Omega)\frac{d\Omega}{d\Omega_1}=\frac{(1+2\tau\cos\theta+\tau^2)^{3/2}}{|1+\tau\cos\theta|}|f(\Omega)|^2. \tag{10.26}$$

II. 被一中心势散射　相移

8. 分解为分波　相移方法

考虑粒子被一**中心势** $V(r)$ 的散射. 我们需要稳定的散射波 ψ 的渐近形式以计算截面. 为此目的，我们在球坐标中求解薛定谔方程.

入射波矢 $\boldsymbol{k}$ 的方向是这个问题的转动对称轴；如果我们取此为极轴，被 ψ 和散射振幅 f 都与 φ 无关. 把它们展开为勒让德多项式的级数，我们有

$$\psi(r,\theta)=\sum_l\frac{y_l(r)}{r}P_l(\cos\theta), \tag{10.27}$$

$$f(\theta)=\sum_l f_lP_l(\cos\theta). \tag{10.28}$$

让我们设

$$\varepsilon=k^2=\frac{2m}{\hbar^2}E,\quad U(r)=\frac{2m}{\hbar^2}V(r).$$

y_l 是径向方程

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\left(\varepsilon-U(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\right]y_l=0 \tag{10.29}$$

的正则解. 它的渐近形式为

$$y_l \underset{r\to\infty}{\sim} a_l \sin\left(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l\right). \qquad (10.30)$$

方程(10.29)的所有正则解给出相同的相移 δ_l；它们的不同在归一化常数 a_l。这里，a_l 必须以这样一种方法调节，以致 $\psi(r,\theta)$ 具有所期望的渐近行为。利用展开式(9.35)和(10.28)，我们能够把 ψ 的渐近形式写成勒让德多项式的级数形式：

$$e^{ik\cdot r} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} = \sum_l \left((2l+1)i^l j_l(kr) + f_l \frac{e^{ikr}}{r}\right)P_l(\cos\theta).$$

如果我们考虑到 $j_l(kr)$ 的渐近形式，我们还能把入射波和出射波分离开来，而重写这个表示式

$$r\psi(r,\theta) \sim \sum_l \left[(-)^{l+1}\frac{2l+1}{2ik}e^{-ikr} + \left(\frac{2l+1}{2ik} + f_l\right)e^{ikr}\right]P_l(\cos\theta).$$

y_l 的渐近形式必须等于右边括号内的量。这一个条件唯一地确定 a_l 并使我们能够把 f_l 写为相移的函数。我们相继地有

$$a_l = i^l\frac{2l+1}{k}e^{i\delta_l},$$

$$f_l = \frac{2l+1}{k}e^{i\delta_l}\sin\delta_l.$$

把这个表示式代入方程(10.28)，我们得到作为相移 δ_l 的函数 $f(\theta)$：

$$f(\theta) = \lambda\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta). \qquad (10.31)$$

这里的 λ 系指入射波长 ($\lambda = 1/k$)。

有启发性的是把 y_l/r 的渐近形式、散射定态的角动量 l 的分量和函数 $(2l+1)i^l j_l(kr)$ 的相应表达式、平面波 $\exp\times(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$ 的同一个动量的分量比较：

$$\frac{y_l}{r}\sim\frac{(2l+1)}{2ikr}[(-)^{l+1}e^{-ikr}+e^{2i\delta_l}e^{ikr}],$$

$$(2l+1)i^l j_l(kr)\sim\frac{2l+1}{2ikr}[(-)^{l+1}e^{-ikr}+e^{ikr}].$$

这两个式子都是相同强度的入射波和出射波的叠加。对这两个函数来说，入射波显然是相同的。散射定态的出射波同平面波的出射波的差别在于相因子 $\exp(2i\delta_l)$ 的存在：**散射势的效应将是移动各个出射分波的相位。**

微分截面是由 $f(\theta)$ 的模方来得到的：

$$\sigma(\Omega)=\lambda\!\!\!^{-2}\sum_{ll'}(2l+1)(2l'+1)e^{i(\delta_l-\delta_{l'})}\sin\delta_l\sin\delta_{l'}P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta). \tag{10.32}$$

对角度 (θ,φ) 的积分给出总截面 $\sigma_{\text{tot.}}$。考虑到勒让德多项式的正交关系，后者写成级数形式：

$$\sigma_{\text{tot.}}=4\pi\lambda\!\!\!^{-2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l. \tag{10.33}$$

它的各项

$$\sigma_l=4\pi(2l+1)\lambda\!\!\!^{-2}\sin^2\delta_l \tag{10.34}$$

表示相应的角动量 l 对散射的贡献。注意不等式：

$$\sigma_l\leqslant 4\pi(2l+1)\lambda\!\!\!^{-2}. \tag{10.35}$$

当相移是 π 的“半整数”倍时：

$$\delta_l=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\quad(n\text{ 整数}),$$

σ_l 达到极大值。

9. 碰撞的半经典表示　碰撞参数

考虑一个**经典**粒子与一中心力场的碰撞. 入射粒子的能量固定在 $E = p^2/2m$, 每个射弹可以用它的碰撞参数 b 来表征, b 被定义为从力心 C 到包含着初动量 $\boldsymbol{p}_0$ 的直线的距离(图 10.5). 在这样一个碰撞中, 角动量 L 是运动常数. b 直接正比于 L:

$$L = bp.$$

如果力场具有有限程 r_0,

$$V(r) = 0 \text{ 对 } r > r_0,$$

则入射粒子受到或不受到偏转, 取决于 $b < r_0$ 或 $b > r_0$. 偏转只限于那些角动量足够小的粒子.

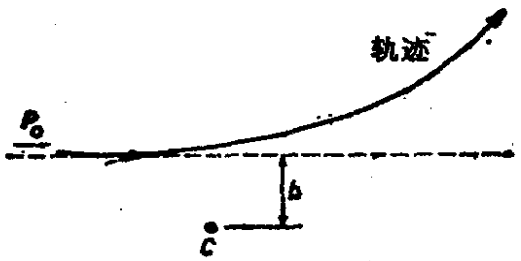

图 10.5　经典粒子被一力心 C 散射.
$\boldsymbol{p}_0$ = 初动量; b = 碰撞参数.

碰撞在量子论中是与经典的碰撞非常不一样的: 它本质上是一个波现象. 然而, 当散射势 $V(r)$ 可以忽略时——不一定是零——碰撞现象在某个距离 r_0 外面或多或少类似于一束经典粒子被一有限程 r_0 的势的散射. **作为一般规则, 如果 $l\lambda\bar{} \gtrsim r_0$, 则第 l 个分波的贡献 σ_l 是可以忽略的**[1]; 另一方面, 如果 $l\lambda\bar{} < r_0$, 它可能取从零和它的极大值 $4\pi(2l+1)\lambda\bar{}^2$ 间的所有数值. 在经典散射问题中, 相应于第 l 个分波的那部分是

1) 这个规则不是绝对的; 在§ 14 中讨论共振现象时, 我们将遇到例外.

由它们的碰撞参数在 $l\lambda$ 到 $(l+1)\lambda$ 间变化的那些粒子给出的，因此它们的角动量在 $l\hbar$ 到 $(l+1)\hbar$ 间变化。如果 $l\lambda > r_0$，贡献 σ_l 显然为零，如果 $(l+1)\lambda < r_0$，σ_l 将取值 $\pi(2l+1)\lambda^2$，如果 r_0 处于 $l\lambda$ 和 $(l+1)\lambda$ 之间，则将取某个中间值。

量子力学散射的前述规则基于下面这个半定量的论证。入射波是一些给定角动量的球面波的叠加。与角动量为 l 的分波相应的项的径向部分正比于 $j_l(r/\lambda)$，因此存在于球壳 $(r, r+dr)$ 内的相对几率密度等于 $r^2 j_l^2(r/\lambda)$。只要 $r < \sqrt{l(l+1)}\,\lambda$，这个密度就是非常低的，而当 $r > \sqrt{l(l+1)}\,\lambda$ 时则在 0 和大约 1 之间振荡（参见图 10.6）。如果 $r_0 < l\lambda$，这个波实际上不透入强势区；所以波几乎没有机会由于势的存在而大受影响。

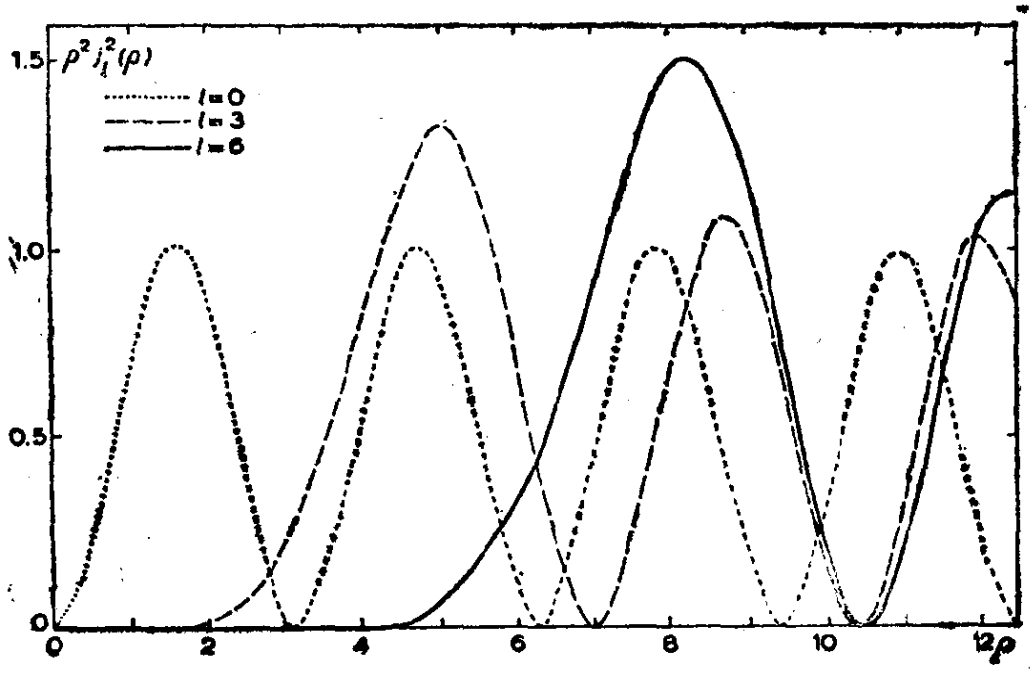

图 10.6　函数 $\rho^2 j_l^2(\rho)$ 的图解 $(l=0,3,6)$.

这里给出的论证是不严格的。关于级数(10.31)和(10.32)收敛的迅速性的更为精确的说明将在 § 12 中给出。尽管如

此，每当散射势的力程不扩展到几个波长范围以外时，相移方法对于截面的计算就是特别合适的.

III. 有限程的势[1)]

10. 相移同对数微商之间的关系

假定 $V(r)$完全集中在一个有限的空间区域，所以我们严格地有

$$V(r)=0, \quad 当 \quad r>r_0.$$

用 q_l 来表示径向方程(10.29)的解（在原点为正则）的对数微商在点 r_0 所取的值

$$q_l=\left.\frac{r(dy_l/dr)}{y_l}\right|_{r=r_0} \tag{10.36}$$

(这里采用的定义同通常的定义差别一个因子 r). 已知 q_l 是能量的一个单调减小函数(第三章，§8)；这一函数的精确形式明显地依赖于考虑中的势 $V(r)$.

鉴于势在 $r>r_0$ 区域等于零，在 q_l 同 δ_l 之间存在一个与 $V(r)$ 的特定形式无关的关系式；指明 q_l 就足以确定这个解的渐近行为.

下面，我们假设 y_l 是用这样一种方法归一的，以致有

$$y_l \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi+\delta_l\right). \tag{10.37}$$

所以我们在外区有

---

1) 在这里，程是在多少受点限制的意义上使用的；它是这样一个径向距离值，超出这个值，势严格地等于零. 比较一般地说，一个势的程是这样一个径向距离值，超出这个值，势将取可以忽略的值. 下面得到的结果对于在较宽的意义上说的有限程势实质上保持正确；势的尾部效应可以借助于广义的玻恩公式来估计(见下面§19).

$$y_l = kr[\cos\delta_l j_l(kr) + \sin\delta_l n_l(kr)] \quad (r > r_0).$$

着眼于以后的讨论，方便的是设

$$\xi = kr$$

并引进出射波和入射波

$$u_l^{(\pm)}(\xi) = \xi[n_l(\xi) \pm i j_l(\xi)] = \xi h_l^{(\pm)}(\xi).$$

它们的朗斯基数(一个与 ξ 无关的量)是

$$u^{(-)}\frac{d}{d\xi}u^{(+)} - u^{(+)}\frac{d}{d\xi}u^{(-)} = 2i. \tag{10.38}$$

在外区，

$$\begin{aligned} y_l &= \frac{1}{2i}(u_l^{(+)}e^{i\delta_l} - u_l^{(-)}e^{-i\delta_l}) \qquad (r > r_0) \\ &= \mathrm{Im}\, u_l^{(+)}e^{i\delta_l}. \end{aligned} \tag{10.39}$$

对数微商在 $r = r_0$ 的连续条件给出关系式

$$q_l = \xi\left.\frac{\mathrm{Im}\, e^{i\delta_l}(du_l^{(+)}/d\xi)}{\mathrm{Im}\, e^{i\delta_l}u_l^{(+)}}\right|_{\xi=kr_0}, \tag{10.40}$$

这就是我们要找的 q_l 同 δ_l 之间的关系式.

为了把这一关系式表成较易处理的形式，设

$$\begin{aligned} |u_l^{(\pm)}(kr_0)| &= v_l^{-\frac{1}{2}} \\ u_l^{(\pm)}(kr_0) &= v_l^{-\frac{1}{2}}e^{\mp i\tau_l} \\ \left.\frac{\xi(du_l^{(\pm)}/d\xi)}{u_l^{(\pm)}}\right|_{\xi=kr_0} &= q_l^{(\pm)} \end{aligned} \tag{10.41}$$

是方便的. 从方程(10.38)，我们得到关系式(习题 10.3)

$$\mathrm{Im}\, q_l^{(+)} = kr_0 v_l;$$

v_l 是一个小于 1 的正量，kr_0 越小，l 越大，它就越小；v_l 称为**贯穿因子**.

用这些记号，连续关系式(10.40)写作

$$e^{2i\delta_l} = e^{2i\tau_l}\frac{q_l - q_l^{(-)}}{q_l - q_l^{(+)}}$$

或

$$\delta_l = \tau_l + \rho_l, \tag{10.42}$$

其中

$$\rho_l = \arg(q_l - q_l^{(-)}) = \tan^{-1}\frac{kr_0 v_l}{q_l - \mathrm{Re}q_l^{(+)}}. \tag{10.43}$$

最后，δ_l 能够表成两项之和的形式，它的第一项 τ_l 与散射势的特定形式无关，而第二项 ρ_l，按照方程(10.43)，通过 q_l 依赖于势的形式.

注意

$$y_l(r_0) = \frac{\sin\rho_l}{\sqrt{v_l}}. \tag{10.44}$$

11. 相移在低能区($\lambda \to \infty$)的行为

知道了球贝塞尔函数对非常小的自变数的行为 [方程(B. 52)]我们可以从方程(10.42)和(10.43)推断 δ_l 在 $kr_0 \ll l$ 时，即很低能量或很大角动量值时的行为. 的确，如果 $kr_0 \ll l$，

$$\begin{aligned} \tau_l &\approx -\frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!}, \\ v_l &\approx \frac{(kr_0)^{2l}}{[(2l-1)!!]^2} \quad \mathrm{Re}q_l^{(+)} \approx -l + O(k^2r_0^2) \end{aligned} \tag{10.45}$$

(当 $kr_0 \ll 1$ 时，这些表示式对 $l = 0$ 也是有效的).

在这一节中，我们来检查截面当能量趋近于零时的行为.

在这个极限下，实量 q_l 增大到某个极限 $\hat{q}_l$. 一般地，$\hat{q}_l \neq -l$，而相移 δ_l 象 k^{2l+1} 那样趋向于零. 我们发现

$$\delta_l \underset{k\to 0}{\sim} \frac{l+1-\hat{q}_l}{l+\hat{q}_l}\frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!}. \tag{10.46}$$

振幅 f_l 正比于 δ_l/k，因而象 k^{2l} 那样趋向于零. 所以，在非常

低能量的极限下，截面变为各向同性的，因为所有的部分截面 σ_l 象 k^{4l} 那样趋于零[方程(10.34)]，只是 S 波截面 σ_0 除外，它一般趋于一个不等于零的常数.

根据定义，我们把长度

$$a = -\lim_{k\to 0} f_0 = -\lim \frac{\delta_0}{k} = \left(1 - \frac{1}{\hat{q}_0}\right) r_0 \tag{10.47}$$

称为**散射长度**. a 由求解零能量的径向方程

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - U(r)\right] y_0 = 0$$

来得到. 它是 y_0 的渐近线切割 r 轴的那个点的横坐标. 在非常低能量的极限下

$$\sigma_{\text{tot.}} = \sigma_0 = 4\pi a^2.$$

如果偶然地 $\hat{q}_l = -l$，则当能量趋向于零时，f_l 依 k^{2l-2} 变化(除非 $l = 0$，这里 $\hat{q}_0 = 0$ 意味着：$f_0 \sim i/k$). 我们就说态 l 在零能量有一个共振. 因而前述结论必须修正如下. 如果它是一个 S 共振 ($l = 0$)，a 是无限的，而 $\sigma_{\text{tot.}}$ 依 $1/E$ 趋于无限大. 如果它是一个 p 共振 ($l = 1$)，$f(\theta)$趋近于形式 $-a + b\cos\theta$；截面保持有限但决不会变为各向同性的. 如果共振是较高阶的，则截面的零能极限不会受到影响.

12. 较高阶的分波　级数的收敛 ($l \to \infty$)

当我们挑选一个完全确定的能量值时，渐近形式(10.45)还使我们能够得到一些较高阶相移的渐近表示式. 如果 l 足够大，表示式

$$k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}$$

在区间$(0,r_0)$内总是保持为负；因此方程(10.29)的解y_l在这个区间内具有"指数式的"行为，而q_l当然是正的．再者，如果$l \gg kr_0$，表示式(10.45)成立，而且由于$q_l + l$显然不是零，我们可对足够大的l找到一个类似于表示式(10.46)的渐近表示式：

$$\delta_l \underset{l\to\infty}{\sim} \frac{l+1-q_l}{l+q_l} \frac{(kr_0)^{2l+1}}{(2l-1)!!(2l+1)!!}. \qquad (10.48)$$

在势具有有限程时，这一表示式使我们能够量度分波级数展开式的收敛的迅速性．从而证实了在§9中阐述的数量级预测．

13. 被一个硬球散射

如果有限程的势是一个硬球势，也就是说，$V(r)$在区域$r < r_0$是无限地排斥的，在区间$r > r_0$是零，

$$V(r) = \begin{cases} +\infty & \text{如果 } r < r_0 \\ 0 & \text{如果 } r > r_0, \end{cases}$$

则§10的所有公式都简化了．波函数在球的表面上必须等于零，因此对于任何$l(q_l = -\infty)$，$y_l(r_0) = 0$，由此给出[方程(10.44)]$\rho_l = 0$，或

$$\delta_l = \tau_l = \arg u_l^{(-)}. \qquad (10.49)$$

经过一些计算，我们由此推断

$$\sigma_l = \frac{4\pi(2l+1)}{k^2} \frac{j_l^2(kr_0)}{j_l^2(kr_0) + n_l^2(kr_0)}, \qquad (10.50)$$

特别是

$$\sigma_0 = 4\pi r_0^2 \left(\frac{\sin kr_0}{kr_0}\right)^2.$$

在非常低的能量处，按照§11的研究，微分截面变成各向同性的，而总截面以

$$\lim_{k\to 0}\sigma_{\text{tot.}}=\lim_{k\to 0}\sigma_0=4\pi r_0^2 \tag{10.51}$$

作为它的极限，它相应于散射长度 $a=r_0$。

随着能量的增大，高阶分波的贡献变得越来越重要，散射的各向异性变得越来越显著。在非常高的能量处（$\lambda\ll r_0$），微分截面和总截面能够利用贝塞尔函数对大的 l 值的渐近性质来估算。我们发现[1]

$$\sigma(\Omega)\underset{k\to\infty}{\sim}\frac{1}{4}r_0^2\left(1+\cot^2\frac{\theta}{2}J_1^2(kr_0\sin\theta)\right), \tag{10.52}$$

$$\lim_{k\to\infty}\sigma_{\text{tot.}}=2\pi r_0^2. \tag{10.53}$$

让我们在这里给出关系式(10.53)的一个简化了的证明。知道了函数 $j_l(\xi)$ 和 $u_l(\xi)$ 的一般形状，我们能够推断函数

$$g_l(\xi)=\frac{j_l^2(\xi)}{j_l^2(\xi)+n_l^2(\xi)}$$

的行为。对 $\xi=0$，它依 $\xi^{4l+2}/[(2l+1)!!(2l-1)!!]^2$ 趋于零，当 ξ 向着 $\xi=l$ 的邻近增大时，它规则地增大，然后按照规律

$$g_l(\xi)\underset{\xi\to\infty}{\sim}\sin^2\left(\xi-\frac{1}{2}l\right)\pi \tag{10.54}$$

无休止地振荡。因此，在求和式

$$\sigma_{\text{tot.}}=\sum_{l=0}^{\infty}\sigma_l=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)g_l(kr_0)$$

---

1) 参见 Morse 和 Feshbach，本书第六章第 II 节题注中引文的第 1551 页。$J_1(x)$ 是一阶贝塞尔函数。当 x 从 0 增大到 $+\infty$ 时，$J_1(x)$ 从 0［$J_1(x)\sim\frac{1}{2}x$］增大到第一极大 $J_1(1.84)\approx 0.58$，然后减小，并在 $x\approx 3.83$ 处第一次等于零；然后它按照渐近表示式

$$J_1(x)\underset{x\to\infty}{\sim}\left(\frac{2}{\pi x}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\left(x-\frac{3}{4}\pi\right)$$

无休止地振荡。

中，那些 $l > kr_0$ 项的贡献能够忽略，而那些 $l < kr_0$ 项的贡献则能粗略地把 $g_l(kr_0)$ 代之以它的渐近形式(10.54)而估计，由此

$$\sigma_{\text{tot.}} \underset{k\to\infty}{\sim} \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{kr}(2l+1)\sin^2\left(kr_0-\frac{1}{2}l\pi\right).$$

我们把递次项两两分组而估算右边的求和在非常大的 k 值的极限下，它给出

$$\int_0^{kr_0} l\,dl = \frac{1}{2}k^2r_0^2,$$

我们由此得到方程(10.53).

同我们预期的相反，在短波长的极限下 $(kr_0 \gg 1)$，我们没有得到一个经典粒子被半径为 r_0 的硬球散射的散射截面. 经典的总截面

$$\sigma_{\text{cl.}} = \pi r_0^2$$

刚好是非常短波长的极限下的量子力学结果的一半. 同样，经典的微分截面是各向同性的，且等于 $\frac{1}{4}r_0^2$：它等于 $\sigma(\Omega)$ 的渐近形式(10.52)的第一项.

事实上，这个现象的波动性决不能忽略，因为即使在非常短的波长下，由于在点 $r = r_0$ 处的突然不连续性，势也决不能看作是慢变化的. 观测到的波现象完全类似于光学中见到的衍射现象，正如检查一下微分截面的渐近形式(10.52)就可以发现的. 后者包含有两项. 第一项是全同于经典微分截面的各向同性“反射”项. 第二项

$$\frac{1}{4}r_0^2\cot^2\left(\frac{1}{2}\theta\right)J_1^2(kr_0\sin\theta),$$

由于它的贡献实质上局限于量级为 $\lambda\!\!\!^{-}/r_0$ 的小角度，因而强烈

的各向异性是由理想反射球在入射波路程上投下的影子产生的“衍射”项(影散射).

IV. 散 射 共 振

14. 被一个深方阱散射

作为有限程的势的另一个例子，我们再一次考虑第九章§10的方阱. 设

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m},\quad V_0=\frac{\hbar^2K_0^2}{2m},\quad K^2=K_0^2+k^2$$

我们要研究当阱非常深时各种分波的行为如何随动量变化. 更为精确地,我们假设,

$$Kr_0\gg l, \tag{10.55}$$

$$K\gg k. \tag{10.56}$$

在这种情况下,要代入方程(10.43)右边的那个 q_l 值在好的近似下是

$$q_l\approx Kr_0\cot\left(Kr_0-\frac{1}{2}l\pi\right). \tag{10.57}$$

在低能时(按照条件(10.56),也就是 $E\ll V_0$ 时), $\delta_l(E)$ 的一般行为是容易由审视而得到的.

按照公式(10.42)和(10.43),δ_l 通过量 τ_l,kr_0v_l,$\mathrm{Re}q_l^{(+)}$,和 q_l 而依赖于能量. 头三个是 kr_0 的单调函数 (τ_l 是一个减小函数，另外两个是增大函数)，它们在原点的行为由表示式(10.45)给定,而在渐近区 ($kr_0\gg l$) 内则由表示式

$$\tau_l\underset{kr_0\to\infty}{\sim}-\left(kr_0-\frac{1}{2}l\pi\right),$$

$$\lim_{kr_0\to\infty}v_l=1\qquad\lim_{kr_0\to\infty}\mathrm{Re}q_l^{(+)}=0 \tag{10.58}$$

给定. 在感兴趣的能区内，这三个函数变化相当缓慢. 另一方面，对数微商 q_l(能量的单调减小函数)变化非常迅速，且具有一条条垂直的渐近线，它们坐落在这样一些能量值，对于它们，$Kr_0 = \frac{1}{2} l\pi + n\pi$($n$ 整数). 两条相邻渐近线之间的能量差近似为

$$D \approx \pi \frac{\hbar^2 K}{m r_0} \approx \pi \frac{V_0}{K_0 r_0}. \tag{10.59}$$

当能量变化这一数量时，$|q_l|$ 几乎到处具有 Kr_0 的量级或大于 Kr_0，我们几乎在整个区间上都有

$$|q_l - \mathrm{Re} q_l^{(+)}| \gg k r_0 v_l.$$

相移的第二项 ρ_l 保持非常小(可能相差 $n\pi$)

$$\rho_l \approx \frac{k r_0 v_l}{q_l - \mathrm{Re} q_l^{(+)}} \lesssim \frac{k}{K} v_l,$$

而对于 τ_l 是不存在**先验的**极限的. 所以我们能够写出

$$\delta_l \approx \tau_l.$$

这个相移实际上与一个同样半径的硬球所产生的相移是一样的. 所以，在能量变化的大部分范围内，这个势用一种与硬球很相似的方式散射各个分波：这就是所谓的“势散射”；入射波实际上没有透入内区.

然而，在点 E_r 周围存在一个小的能域，在那里 $q_l = \mathrm{Re} q_l^{(+)}$，对于它们，

$$|q_l - \mathrm{Re} q_l^{(+)}| \lesssim k r_0 v_l.$$

让我们定义量

$$\left.\begin{aligned} \gamma &= -\frac{dE}{dq_l}\bigg|_{E=E_r} \quad (\gamma > 0) \\ \Gamma &= 2 k r_0 v_1 \gamma \end{aligned}\right\} \tag{10.60}$$

Γ 是所述能域的宽度. 我们注意到[1]

$$\frac{\Gamma}{D} \approx \frac{2}{\pi}\frac{k}{K} v_l \ll 1.$$

对于 E_r 两边量级为几个 Γ 的能量变化，$q_l - \mathrm{Re}q_l^{(+)}$ 从比 kr_0v_l 大非常多的值减小为比 $-kr_0v_l$ 小非常多的值，而 ρ_l 突然地从接近于 $n\pi$ 的值过渡为 $(n+1)\pi$ 邻域内的值. 部分截面 σ_l 经历了剧烈的变化，在此期间它达到它的极大值 $4\pi(2l+1)\lambda^2$：我们说，这里有一个 l **共振**. 根据定义，E_r 是共振能量[2]，Γ 是共振宽度. Γ 是一个在内区依赖于势的一般形状的量(实际上与 l 无关)和一个在外区依赖于波的行为的因子 kr_0v_l 的积.

共振区域足够狭，以致在 ρ_l 的表示式中我们可以用它在点 $E = E_r$ 处的斜率来代替曲线 $q_l(E)$，因此

$$\rho_l \approx \tan^{-1}\frac{\Gamma}{2(E_r - E)}. \tag{10.61}$$

利用连续条件(10.44)来归一内区的径向函数，我们发现，在这相同的近似下[在共振周围的一个能区 ($\Gamma \ll \Delta E \ll D$) 内有效]，

---

1) 的确，按照方程(10.57)，有

$$\frac{dq_l}{p(Kr_0)} = -Kr_0\left(1 + \frac{q_l(q_l-1)}{(Kr_0)^2}\right).$$

鉴于当 $E = E_r$ 时 $Kr_0 \gg l$ 和 $|\mathrm{Re}q_l^{(+)}| \lesssim l$，$dq_l/dK \approx -Kr_0^2$，因此

$$\gamma \approx \frac{\hbar^2}{mr_0^2} \text{ 和 } \Gamma = 2v_1\frac{\hbar^2 k}{mr_0}.$$

2) 由于势散射项的存在，σ_l 是在一个与共振能量稍有不同的能量值达到极大值的，共振能量定义为这样一个能量，对于它，$\rho_l = \frac{1}{2}\pi$ (可能相差 $n\pi$). 甚至可能发生这样的情况：在共振处，$\tau_l = \frac{1}{2}\pi$，所以当 $E = E_r$ 时，σ_l 等于零；共振区域的横越是由函数 $\sigma_l(E)$ 的突然降落到零体现出来的.

$$y_l = \frac{1}{\sqrt{v_l}} \frac{1}{\sqrt{4(E-E_r)^2+\Gamma^2}} K_r j_l(Kr). \quad (r < r_0) \tag{10.62}$$

所以，越过一个 l 共振是与 l 阶分波强度在内区的突然增大相关的.

在 S 波情况下，上述分析大大地简化. 我们严格地有

$$\tau_0 = -kr_0, \quad v_0 = 1, \quad \mathrm{Re}q_0^{(+)} = 0, \quad q_0 = Kr_0 \cot Kr_0$$

$$\delta_0 = -kr_0 + \tan^{-1}\left(\frac{k}{K}\tan Kr_0\right).$$

解 y_0 明显地写作

$$y_0 = \begin{cases} \sin(kr+\delta_0) & r > r_0 \\ \dfrac{k}{\sqrt{k^2 + K_0^2 \cos^2 Kr_0}} \sin Kr & r < r_0. \end{cases}$$

除了记号上的某些差别$\left(L \to r_0, K \to K_0, \eta K \to k, \xi K \to K, \varphi_1 \to \rho_0 - \frac{1}{2}\pi\right)$，$S$ 波散射的问题同在第三章§ 6(情况 b)中处理的波被一维方阱反射的问题完全一样，而共振效应的讨论能够不作修正地继续下去.

15. 散射共振的研究　亚稳态

共振现象在微观物理中是经常碰到的. 对于那些在一个有限的空间区域内强烈吸引的势，我们在方阱情况下已经讨论过的那种型式的散射共振更经常地发生. 由于这类现象的重要性，我们将对散射的 l 共振作一详尽研究. 这里所作的具体研究涉及到方阱，但是它几乎能够精确地推广于更为一般的势，势的形式仅仅通过对数微商 q 的变化规律而体现出来.

为了简单起见，我们假设共振足够狭和分得足够开，以致

只有一个分波在所考虑的能区中显现共振．再者，我们假设共振能量是如此之低，以致

$$kr_0 \ll 1, \tag{10.63}$$

而且势散射项对于散射的贡献能够完全忽略[1)]．换句话说，所有的相移实际上是零，除了相移 δ_l 之外，它作为入射能量 E 的函数，是按照规律

$$\delta_l \approx \rho_l = \tan^{-1}\frac{\Gamma}{2(E_r - E)}$$

变化的．所以

$$e^{i\delta_l}\sin\delta_l = \frac{\tan\delta_l}{1 - i\tan\delta_l} \approx -\frac{\Gamma}{2(E - E_r) + i\Gamma},$$

而散射振幅可以简单地写为

$$f(\theta) \approx -\frac{2l+1}{k} P_l(\cos\theta)\frac{\Gamma}{2(E - E_r) - i\Gamma}. \tag{10.64}$$

横越共振，$f(\theta)$ 的模数和幅角的微商显现出非常明显的峰．我们有

$$\sigma(\Omega) = |f(\theta)|^2 = (2l+1)^2 P_l^2(\cos\theta)\lambda\!\!\!^{-2} \times \frac{\Gamma^2}{4(E - E_r)^2 + \Gamma^2}, \tag{10.65}$$

$$\frac{d}{dE}[\arg f(\theta)] = \frac{d\delta_l}{dE} = \frac{2}{\Gamma} \times \frac{\Gamma^2}{4(E - E_r)^2 + \Gamma^2}. \tag{10.66}$$

方程(10.65)表明，在共振的邻近——在势散射效应可以忽略的范围内——散射的角分布不依赖于能量，而仅依赖于 l，还表明总截面作为能量的函数是按照“洛仑兹规律”变化的：

---

1) 这些项对于截面的贡献是 $4\pi r_0^2$ 的量级，l 共振在共振能量处的贡献是 $4\pi(2l+1)\lambda\!\!\!^{-2} = 4\pi(2l+1)/k^2$ 的量级．

$$\sigma_{\text{tot.}} = 4\pi(2l+1)\lambda\!\!\!^{-2} \times \frac{\Gamma^2}{4(E-E_r)^2+\Gamma^2}. \qquad (10.67)$$

为了解释方程(10.66),我们必须涉及第十章 §§ 4-6 中所作的波包的散射研究. 的确,用那几节的记号,我们看到

$$\frac{u\cdot s}{v} = \hbar\frac{d}{dE}[\arg f(\theta)],$$

而且表示式(10.66)给出在散射波透射中的延迟(参见本章 §6 中的注). 这一延迟按照总截面一样的洛仑兹规律而依赖于能量,并在共振能量处达到它的极大值 $2\hbar/\Gamma$.

所以我们能够把共振现象描绘如下. 远离共振,入射波实际上不透入内区[参见方程(10.62)]; 一切就象波碰到了一个硬球那样地进行. 被散射的只是那个波的一个相对地可以忽略的部分,而这一散射的发生实际上没有延迟($-r_0/v$ 量级的延迟). 在共振能量的邻近,入射波深深地透入内区;因而,大部分波包在以一个被散射波的形式重新发射出来以前,在 $\hbar/\Gamma$ 量级的时间期间是留存在内区的. 大的共振散射截面的存在因而得到了解释. 在重新发射以前的整个时期内,粒子存在于内部或内区邻近的几率是非常大的,象是在一个束缚态中那样. 但是鉴于束缚态是一个定态,它的寿命是无限大的,这里所考虑的**亚稳态**却具有 $\hbar/\Gamma$ 量级的寿命. 结果,按照时间-能量不确定性关系,它必须由一个能量上的展开为 Γ 量级的波来代表,而不是一个能量严格地确定的态. 因而使我们想到把各个共振与一个亚稳态联系起来,它的寿命是 $\hbar/\Gamma$,它的能量平均地等于共振能量,并具有一个等于共振宽度 Γ 的能量展开.

16. 亚稳态寿命的观测

严格地说来,共振散射现象的半经典图象不能没有矛盾

地推进得太远. 事实上，在截面的正常观测条件下(诸如在§§ 4—6 中描述的)，探测这种刚才讨论的亚稳态是完全不可能的. 的确，在一给定能量下，履行截面的测量，入射波包的能量展开 ΔE 必须如此之小，以致散射振幅在区间 ΔE 上实际保持恒定；在共振区域，这一点意味着

$$\Delta E \ll \Gamma.$$

如果这一条件实现，有可能探测截面在共振区域作为能量函数的变化规律. 另一方面，碰撞时间 $\hbar/\Delta E$，即整个波包透入散射区所必需的时间，比亚稳态的寿命 $\hbar/\Gamma$ 要长得很多. 所以后者是完全不可能观测的(参见本章 § 6 中的注).

为了探测亚稳态，我们必须在互补的实验条件(在玻尔的意义上说)，也就是在

$$\Delta E \gg \Gamma \tag{10.68}$$

下工作.

为了更加确切起见(参见本章 § 4 题注)，考虑 § 5 中所仔细构思的那种型式的波包，它同时满足条件 (10.9) 和条件 (10.68). 我们进一步假定，$E_r \gg \Delta E \gg \Gamma$[1]. 我们采用 § 4 至 § 6 的记号，并为简单起见而假定 $\boldsymbol{b} = 0$ 和 $t_0 = 0$. 把 $f(\theta)$的表示式(10.64)代入(10.17)，我们对于被散射的波包得到下列渐近形式：

$$\Psi^{(d)} \sim -(2l+1)P_l(\cos\theta)\frac{\Gamma}{2}\frac{e^{i[k_r r-(E_r t/\hbar)]}I}{r},$$

$$I = \int \frac{A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})}{E'-E_r+\frac{1}{2}i\Gamma}\exp[i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}_r)\boldsymbol{r}$$

---

1) 这一限制以及条件(10.63)都不是必不可少的，但是这样做就能把最后的结果表成较简单的形式. 为了使它们可与条件(10.9)和 (10.68) 同时实现，我们必须有

$$v_l \ll k r_0 \ll 1.$$

$$-i(E'-E_r)t/\hbar]\frac{d\boldsymbol{k}'}{k'}.$$

$\left(\text{我们使用记号 } E_r=\frac{1}{2}\hbar^2k_r^2/m=\frac{1}{2}mv_r^2\right)$.

在积分 I 中，主要的贡献来自于 $A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\Big/\left(E'-E_r+\frac{1}{2}\times i\Gamma\right)$大的区域. 为了转换为极坐标，我们设

$$d\boldsymbol{k}'=k'^2d\Omega'dk'=\frac{mk'}{\hbar^2}d\Omega'dE'$$

和 $\boldsymbol{k}'=k'\boldsymbol{u}'$. 角度的积分仅包含 $A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$. 至于对 dE' 的积分，按照假设(10.68)，唯一重要的区域是 $|E'-E_r|\lesssim\Gamma$ 区域，在这个区域内，$A(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}')$可用 $A(k_r\boldsymbol{u}'-\boldsymbol{k})$ 代替，而 k' 能够由它的泰勒展开式的头两项代替(我们已经假设 $\Gamma\ll E_r$)：

$$k'\approx k_r+\frac{1}{\hbar v_r}(E'-E_r).$$

所以我们能够写出

$$I\approx\frac{m}{\hbar^2}A_rF\left(t-\frac{r}{v_r}\right),$$

其中定义

$$A_r=\int A(k_r\boldsymbol{u}'-\boldsymbol{k})d\Omega',$$

$$F(\tau)=\int_0^\infty\frac{e^{-i(E'-E_r)\tau/\hbar}}{E'-E_r+\frac{1}{2}i\Gamma}dE'.$$

读者容易相信，I 的这个表示式仅当 $|\tau|\gg\hbar/\Delta E$ 时才是有理的. 注意

$$F(\tau)=\int_{-(2E_r/\Gamma)}^\infty\frac{\exp[-i\Gamma\tau z/2\hbar]}{z+i}dz.$$

鉴于 $|\tau| \gg \hbar/E_r$，我们能够用$-\infty$来代替积分的下限，而积分 $F(\tau)$ 可容易地由留数法计算，也就是

$$F(\tau)=\begin{cases}0 & \text{如 } \tau \ll -\hbar/\Delta E<0\\ -2\pi i e^{-\Gamma\tau/2\hbar} & \text{如 } \tau \gg \hbar/\Delta E>0.\end{cases} \tag{10.69}$$

最后我们有

$$\psi^{(d)} \sim -(2l+1)P_l(\cos\theta)\frac{mA_r}{2\hbar^2}\Gamma \times F\left(t-\frac{r}{v_r}\right) \times \frac{e^{i[k_r r-(E_r t/\hbar)]}}{r}. \tag{10.70}$$

这个波的一般行为是从表示式(10.69)所给出的函数 $F(\tau)$ 的性质推知的。它是一个出射波，以按照规律 $r=v_r t$ 运动的波前为界；在一个给定点，这个波的强度先是零，然后突然地从 0 过渡到某个正值。这一跃迁相应于波前的通过；它持续一段量级为 $\hbar/\Delta E$ 的时间（这段时间间隔大大地短于 $\hbar/\Gamma$）；以后，强度按照规律 $\exp(-\Gamma t/\hbar)$ 减小。

在一个为观测这一指数减小规律而设计的典型实验中，我们在一段非常短的时间内加上一束满足前面那些条件的波包，并记录被散射进入立体角 $(\Omega,\Omega+\delta\Omega)$ 的粒子数，办法是在那个方向上，在离开散射中心某个距离 D 处放置一个探测器。由于入射波包的能量展开[1]非常大 $(\Delta E \gg \Gamma)$，碰撞所发生的那个瞬时 $t=0$ 是非常确定的：$\Delta t \ll \hbar/\Gamma$。计数率由 $|\psi^{(d)}|^2$ 在计数器坐落处所取的值给定。按照方程 (10.70)，这是正比于 $F^2(t-D/v_r)$ 的。直到瞬时 D/v_r——波前就在这时到达计数器，探测不到任何粒子。D/v_r 是被散射中心以"共振速度" v_r 发射的粒子到达计数器所需的时间。以后，计数率由规律 $\exp(-\Gamma t/\hbar)$ 给出，它相应于一个在瞬时 $t=0$ 的形

1) 我们这里论述的是各个波包单个地所取的能量展开。

成的平均寿命为 $\hbar/\Gamma$ 的亚稳态。

在放射性核的蜕变(α 和 β 放射性，同质异能核的 γ 放射性)中，前面那些实验条件通常是能够实现的。

V. 各种公式和性质

17. 相移的积分表示

相移的某些性质或计算方法可由相移的一些合适的积分表示出发而得到。这样的积分表示有许多种。它们中的大多数是简单地把朗斯基定理应用于相应的径向方程的适当定义的解而得到的。在这一节中，我们将给出它们中的一个，另一个将在 § 20 中给出。

我们正在寻求的表示式可用来比较势 $V(r)$ 和 $\hat{V}(r)$ 的相移 δ_l 和 $\hat{\delta}_l$(在同样能量时)。我们用 § 8 的记号，并设 $\hat{U}=2m\hat{V}/\hbar^2$。$y_l$ 是方程(10.29)的正则解，它的渐近形式由表示式(10.37)给定。同样，我们把径向方程

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\left(\varepsilon-\hat{U}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)\right]\hat{y}_l=0 \qquad (10.71)$$

的正则解记为 $\hat{y}_l$，它的渐近表示式为

$$\hat{y}_l \underset{r\to\infty}{\sim} \sin\left(kr-\frac{1}{2}l\pi+\hat{\delta}_l\right).$$

朗斯基数 $W(y_l,\hat{y}_l)$ 在原点处为零，且渐近地趋近于极限

$$\lim_{r\to\infty} W(y_l,\hat{y}_l)=k\sin(\delta_l-\hat{\delta}_l).$$

按照朗斯基定理：

$$W(y_l,\hat{y}_l)\Big|_a^b=-\int_a^b \hat{y}_l(U-\hat{U})y_l dr.$$

让 a 和 b 分别趋近于 0 和∞，我们有

$$\sin(\delta_l - \hat{\delta}_l) = -\frac{2m}{\hbar^2 k}\int_0^\infty \hat{y}_l(V - \hat{V})y_l dr. \qquad (10.72)$$

这一重要关系式对于任何形式的势 V 和 $\hat{V}$ 都是有效的，只要它们在无限远处比 $1/r$ 更为迅速地等于零，而且在原点处没有象 $1/r^2$ 那样强的奇点。

如果 $\hat{V} = 0$，我们有 $\hat{\delta}_l = 0$，$\hat{y}_l = kr j_l(kr)$；关系式(10.72)在这种特殊情况下写作

$$\sin\delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_0^\infty j_l(kr)V y_l r dr. \qquad (10.73)$$

18. 对势的依赖性　相移的正负号

当我们改变势时，对相移会有什么影响？方程(10.72)允许我们对此作出某些结论。的确，如果 $\Delta V \equiv V - \hat{V}$ 无限小，$\Delta\delta_l = \delta_l - \hat{\delta}_l$ 也是无限小；另一方面，解 y_l 同 $\hat{y}_l$ 之间的差别在方程(10.72)右边的积分中可以忽略，由此

$$\Delta\delta_l = -\frac{2m}{\hbar^2 k}\int_0^\infty y_l^2 \Delta V dr. \qquad (10.74)$$

如果势的变化 $\Delta V(r)$ 在整个区间 $(0,\infty)$ 上具有相同的正负号，相移的变化 $\Delta\delta_l$ 就有相反的正负号。因此势的任何增大（较大的排斥）将使相移减小，势的任何减小(较大的吸引)将使相移增大。

到目前为止，相移 δ_l 的定义可能相差 $2n\pi$ 的。为了消除这一含糊不清，我们想象地把势从 0 连续地变到 $V(r)$。在这一运算中，相移以一种连续的方式从 0 一直变到某个值 δ_l；我们能够证明，这个值是与从零势到势 $V(r)$ 所走的路线无关的。今后我们就用这个值作为相移的定义。

确立了这一点以后，如果势 $V(r)$ 到处是排斥的，我们就能够把所有这些排斥性的无限小贡献相加起来，而从零势转

换为 $V(r)$势. 按照方程(10.74)，这些贡献中的各个都是缩减相移的；结果 δ_l 为负. 同样，如果 $V(r)$ 是到处吸引的，则 δ_l 为正.

更为一般地:

如果对任何 r，$V(r) > \hat{V}(r)$，则 $\delta_l < \hat{\delta}_l$;

如果对任何 r，$V(r) < \hat{V}(r)$，则 $\delta_l > \hat{\delta}_l$.

19. 玻恩近似

为了精确地知道相移，我们原则上必须积分方程(10.29). 然而，如果 $V(r)$ 足够小，这个方程的正则解 y_l 同自由球面波 $krj_l(kr)$ 差别非常小，相移 δ_l 接近于零. 因而我们能够在方程(10.73)中用自由波关系来代替 y_l，这样做是不会引进多少误差的，由此给出

$$\delta_l \approx -\frac{2m}{\hbar^2} k \int_0^\infty j_l^2(kr) V(r) r^2 dr. \qquad (10.75)$$

这就是在“**玻恩近似**”中的相移表示式.

如果 $V(r)$在 r 变化的大部分区域上同 $E-[l(l+1)\hbar^2/2mr^2]$ 相比足够小，则误差是小的. 我们因而预期，在高能情况下，或者，倘若 $V(r)$ 在无限远处对于大的 l 值减小得足够迅速，玻恩近似将是好的. 事实上，表示式(10.75)是 V 幂展开式中的第一项；所以有可能粗略地估算那个紧接的较高级项而估计误差. 这个问题将在第十九章中讨论.

从关系式(10.72)出发，我们同样得到一个 $\delta_l - \hat{\delta}_l$ 的近似表示式，也就是

$$\delta_l - \hat{\delta}_l \approx -\frac{2m}{\hbar^2 k} \int \hat{y}_l^2 (V - \hat{V}) dr. \qquad (10.76)$$

当我们对势 $\hat{V}$(它同势 V 只是稍微有些不同)知道径向方程的正则解 $\hat{y}_l$ 时，这一“广义玻恩公式”是有用的. 因为它使我们

能够在好的近似下得到 δ_l，而不必要精确地对势 V 求解径向方程[1]。

20. 有限程理论　贝推公式

§ 17 的公式允许我们研究相移在势被修改而同时保持能量恒定时所经受的变化。我们在这一节中确立的公式关系到相移作为能量的函数如何变化。它在低能极限下对于一个短程势特别有用。

用 u 来表示方程(10.29)的某一个正则解。我们暂且不指定它的归一。设 $\hat{u}$ 是方程(10.71)的一个(非正则)解，它与 u 有相同的能量值和相同的渐近形式，且有相同的归一。现在考虑两个不同的能量 E_1 和 E_2；我们用指标 1 来标记那些与能量 E_1 有关的函数和量，用指标 2 来标记那些与能量 E_2 有关的函数和量。按照朗斯基定理[方程(3.27)]

$$W(u_1,u_2)\Big|_a^b = (\varepsilon_1-\varepsilon_2)\int_a^b u_1u_2dr,$$

以及另一个对于 $\hat{u}$ 的类似关系式，可以得出

$$W(\hat{u}_1,\hat{u}_2)-W(u_1,u_2)\Big|_a^b = (\varepsilon_1-\varepsilon_2)\int_a^b(\hat{u}_1\hat{u}_2-u_1u_2)dr.$$

当 $b\to\infty$ 时，鉴于 u 和 $\hat{u}$ 具有相同的渐近形式，右边的积分收敛，在 b 处估算的朗斯基数的差趋向于零。鉴于还有 $\lim\limits_{a\to 0}W(u_1,u_2)=0$，前述关系式在 $b\to\infty$ 和 $a\to 0$ 的极限下可以写作

---

1) 人们还能利用这一公式来研究势 V 的尾部效应。把势 $\hat{V}$ 取为

$$\hat{V}=\begin{cases}V(r) & \text{如 } r<r_0\\ 0 & \text{如 } r>r_0\end{cases}$$

就足够了，其中 r_0 值可以合适地选取。$\hat{V}$ 是一个有限程的势，且具有这种型式的势的所有性质(第 III 节和第 IV 节)。$V-\hat{V}$ 是势 V 的尾巴；它的效应能够用公式(10.76)来估算，如果它是小的话。

$$\lim_{a\to 0}[W(\hat{u}_1,\hat{u}_2)+(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\int_a^\infty(\hat{u}_1\hat{u}_2-u_1u_2)dr]=0. \tag{10.77}$$

适当选择 u 的归一，我们能够把这个基本关系式写成一种形式，使得 $\delta-\hat{\delta}$ 在能量 E_1 和 E_2 处的差值明晰地出现在式中.

我们的这种研究将只限于 S 波($l=0$)的情况[1]. 再者，我们假定 $\hat{V}=0$，并以 v_1,v_2 来表示这一特殊情况下的函数 $\hat{u}_1,\hat{u}_2$. 让我们用条件 $v(0)=1$ 来固定 u 的归一

$$v=\cos kr+\cot\delta\sin kr.$$

因而公式(10.77)写作

$$W(v_2,v_1)|_{a=0}\equiv k_1\cot\delta_1-k_2\cot\delta_2=(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\int(v_1v_2-u_1u_2)dr. \tag{10.78}$$

倘若当 $r\to\infty$ 时 $V(r)$ 足够迅速地趋向于零，以致右边的积分收敛，(10.78)在 $\varepsilon_2\to 0$ 的极限下是成立的. 让我们用 u_0，v_0 来记相应于零能量的函数 u,v. 注意

$$v_0=1-\frac{r}{a}\quad\text{和}\quad\lim_{\varepsilon\to 0}k\cot\delta=-\frac{1}{a},$$

此处 a 是由方程(10.47)定义的散射长度. 在关系式(10.78)中让 $\varepsilon_1=\varepsilon$ 和 $\varepsilon_2=0$ (参见图 10.7)，我们有(**贝推公式**)

$$k\cot\delta=-\frac{1}{a}+\varepsilon\int(vv_0-uu_0)dr. \tag{10.79}$$

这一关系式是精确的. 当右边的积分作为能量的函数缓慢变化时，它是有用的. 当 $V(r)$ 是在核物理中碰到的那种型式的短程势时，也就是说，如果我们能够把位形空间分为内

---

1) 当 $l\neq 0$，u_1 和 u_2 在原点处有 $-(1/r)^l$ 型的奇点. 在公式(10.77)中，项 $W(\hat{u}_1,\hat{u}_2)$ 和 $(\varepsilon_1-\varepsilon_2)\int\hat{u}_1\hat{u}_2dr$ 依 $(1/a)^{2l-1}$ 趋近于无限大；然而，它们的和趋向于一个有限的极限.

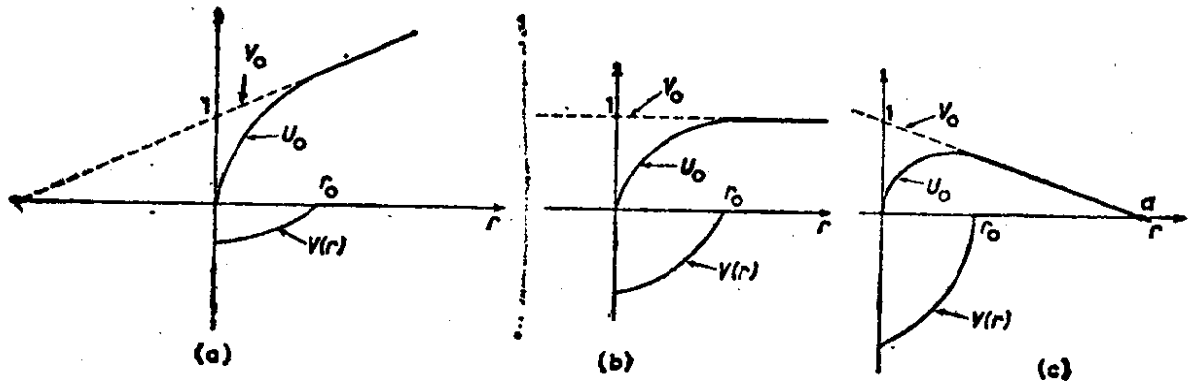

图 10.7　出现在有效程理论中的零能量 S 波函数［有限程势的深度依次增大，$V(r)=\tilde{\omega}W(r)$，$\tilde{\omega}$ = 深度参数，$\tilde{\omega}=1$ 给出的深度恰好能够出现一个束缚态］$(a)\tilde{\omega}<1(a<0)$　$(b)\tilde{\omega}=1(a=\infty)$　$(c)\tilde{\omega}>1(a>0)$. 注意：a 是 $\tilde{\omega}$ 的一个减函数，它在存在一个能量为 0 的束缚态的各个 $\tilde{\omega}$ 值处各有一条垂直的渐近线.

区 $(r<r_0, kr_0 \ll 1)$，对于它，$|V| \gg E$，和外区$(r>r_0)$，此处势 V 是可以忽略的，情况就是这样. 因而，对于积分的贡献实质上来自内区，在那里我们能用 u_0 来代替 u，用 v_0 来代替 v，而不会引进大误差，因为我们在原点处严格地有 $u=u_0=0$ 和 $v=v_0=1$；同时，函数 u 和 u_0 在这整个区域上实际上具有同样的相对曲率 $(u''/u \approx 2mV/\hbar^2)$（图 10.7）. 因此在非常好的近似下，我们有

$$k\cot\delta \approx -\frac{1}{a}+\varepsilon\int_0^\infty (v_0^2-u_0^2)dr. \qquad (10.80)$$

量 $r_{\text{eff.}} \equiv 2\int_0^\infty (v_0^2-u_0^2)dr$ 是势 $V(r)$ 的特征参数，所谓**有效程**.

(10.80)右边的两项是 $k\cot\delta$ 的能量的幂级数展开式中的头两项. 为了写下那些较高阶的项，必须把 u 和 v 展开成 ε 的幂级数，并把由此得到的表示式代入(10.79)右边的积分[1].

1) 参见 G. Chew 和 M. L. Goldberger, *Phys. Rev.* **75**(1949) 1637; H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **76** (1949) 38.

按照以上得出的论证，这些展开式在内区是迅速地收敛的；结果 $k\cot\delta$ 作为能量的函数的展开式的收敛同样是非常迅速的。

练习和问题

1.考虑一个波长为 λ 的粒子被一个当 $r\to\infty$ 时比 $1/r$ 更为迅速地趋向于零的势 $V(r)$ 散射. 设 $f(\Omega)$ 是 $\Omega\equiv(\theta,\varphi)$ 方向上的散射振幅. 求证

$$\sigma_{\text{tot.}}\equiv\int|f(\Omega)|^2d\Omega=4\pi\lambda\,\text{Im}f(0),$$

此处 $f(0)$ 代表朝前散射振幅 $(\theta=0)$ [**玻尔-彼埃尔斯-泼拉塞克关系**].

2.我们能用核 a 轰击核 A 而形成核 b 和 B: $a+A\to b+B$. 在实验室系中靶 A 是静止的. 设 m_a,m_A,m_b,m_B 是这一反应中所涉及到的那些粒子的质量. 我们作非相对论近似: $m_a+m_A=m_b+m_B$. 设 E_i 和 E_f 分别是初态$(a+A)$和终态$(b+B)$在质心系中的总动能，再设 θ 和 θ_1 分别是粒子 b 在质心系和实验室系中的发射角. 证明 θ_1 作为 θ 的函数由关系式(10.24)给定，若 τ 表示质心的速度 V 同粒子 b 在质心系的速度 v_b 的比值，也就是

$$\tau=\frac{V}{v_b}=\left[\frac{m_am_bE_i}{m_Am_BE_f}\right]^{\frac{1}{2}}.$$

3.证明在 §10 中引入的那些量 τ_l, v_l 和 $q_l^{(+)}$ [定义(10.41)]之间的下列关系式

$$v_l=-\frac{d\tau_l}{d\xi},\quad \text{Im}q_l^{(+)}=\xi v_l,\quad \text{Re}q_l^{(+)}=-\frac{1}{2}\frac{\xi}{v_l}\frac{dv_l}{d\xi}.$$

4.求证: 在 WKB 近似中，相移 δ_l 由公式

$$\delta_l=\lim_{R\to\infty}\left[\int_a^R\sqrt{k^2-U(r)-\frac{l(l+1)}{r^2}}\,dr-\int_{a_0}^R\sqrt{k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}}\,dr\right]$$

给定. δ_l, k 和 $U(r)$ 取与§8中相同的定义. 积分的下限 a 和 a_0 是相应的被积函数的零点[如果 $k^2 - U(r) - l(l+1)/r^2$ 有好几个零点, a 是它们中间最大的]. 讨论这一近似的有效条件[为了使这个方法适用于小的 l 值,我们必须遵循 Langer 的推荐(参见习题 9.6), 在两个被积函数中用$\left(l + \frac{1}{2}\right)^2$来代替 $l(l+1)$].

5.把有效程理论应用于 p 波散射. 证明它给出 $k^3\cot\delta_1$ 作为能量函数的展开式,再写出这一展开式的头两项的表示式($\delta_1 = p$ 波相移).

第十一章　库仑相互作用

1. 引言

设 r 是两个电荷分别为 Z_1e 和 Z_2e 的粒子之间的距离；这两个粒子的静电相互作用势是库仑势

$$V(r)=\frac{Z_1Z_2e^2}{r}.$$

设 $\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2$ 是这两个粒子的动量；m_1,m_2 是它们的质量；$\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2$ 是各自的位置（$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2$）. 如果它们的相互作用纯粹是库仑型的，它们的运动将由哈密顿量

$$\frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1}+\frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2}+\frac{Z_1Z_2e^2}{r}$$

支配.

用第九章中概述的方法，质心运动能够同粒子的相对运动分离开来. 粒子的相对运动由哈密顿量

$$H\equiv\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}+\frac{Z_1Z_2e^2}{r} \tag{11.1}$$

支配，此处 m 是折合质量：

$$m=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}. \tag{11.2}$$

所以，把处理库仑相互作用的二粒子量子体系的问题简化为一个粒子在中心势 $\frac{Z_1Z_2e^2}{r}$ 中的问题.

由于它对大的 r 值是缓慢减小的，第九和第十章中得到的中心势的某些性质不适用于库仑势. 特别是在散射问题中，

定态解的渐近行为不如在短程势的情况下那么简单，相移的定义必须相应改变;实际上,用分离角度和径向变数的办法来处理散射问题的实用性已不那么明显了，因为散射振幅的球谐函数展开式收敛得非常慢.

另一方面，一个粒子在库仑势中的薛定谔方程的解总是能够简化为一个拉普拉斯微分方程的解，这个方程在函数论中是众所周知的. 所以，关于库仑相互作用的那些最令人感兴趣的量，诸如束缚态的能谱和散射截面，都能够精确地计算.

这一章由两节组成. 第一节专门用来研究氢原子的束缚态,这个研究容易扩展于类氢原子,更为一般地可扩展于以$1/r$形式相互吸引的两个粒子的体系. 第II节论述库仑散射问题.

I. 氢 原 子

2. 氢原子的薛定谔方程

最简单的具有库仑相互作用的两体体系是氢原子. 两个粒子，即电子和质子，受制于吸引势$-e^2/r$. 电子-质子体系的折合质量m稍小于电子质量: $(m_e - m)/m_e \approx 5 \times 10^{-4}$. 设$E$是电子-质子体系在质心系中的能量. 相对粒子的波函数$\psi(\boldsymbol{r})$是薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{r}\right]\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \qquad (11.3)$$

的解.

如果我们进行角度和径向变数的分离，这一方程的正则解的性质是容易展现的. 因而，能量E和角动量(lm)的本征解是函数

$$Y_l^m(\theta,\varphi)\frac{y_l(r)}{r},$$

此处 y_l 是径向方程[参见方程(9.2)]

$$y_l'' + \left[\varepsilon + \frac{2m}{\hbar^2}\frac{e^2}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]y_l = 0. \qquad (11.4)$$

的解，它在原点等于零

我们已经设

$$\varepsilon = \frac{2mE}{\hbar^2}. \qquad (11.5)$$

如果 $E > 0$，这个解在无限远处具有振荡行为，可作为任何 E 的本征解. 它代表一个非束缚态，而且参与能量为 E 的电子-质子碰撞定态的构成.

如果 $E < 0$，在原点为正则的解的渐近形式是指数 $\exp \times (xr)$ 和 $\exp(-xr)$ 的线性组合，此处

$$x = (-\varepsilon)^{\frac{1}{2}} = \frac{(-2mE)^{\frac{1}{2}}}{\hbar}. \qquad (11.6)$$

要使这个解成为一个合意的本征解，$\exp(xr)$ 前面的系数必须等于零：这一点仅仅对某几个分立的 E 值才会发生. 这些值是氢原子的分立谱的能量，而相应的波函数表示这原子的一个可能的束缚态.

这一节的目的是研究氢原子的束缚态. 这一研究的结果容易扩展于类氢原子 (He^+, Li^{++} 等)，在这些原子中，质子被一较重的核代替. 设 M_A 是这个核的质量，M_P 是质子的质量. 类氢原子的折合质量为

$$m' = \frac{m_e M_A}{m_e + M_A},$$

稍为不同于氢原子的折合质量

$$m = \frac{m_e M_p}{m_e + M_p}.$$

另一方面，如果 Z_e 是核的电荷，则库仑吸引势是 Ze^2/r 而非 e^2/r。只要我们用 m' 代替 m，用 Ze^2 代替 e^2，则氢原子的所有有关公式就都适用于类氢原子。

3. 基态结合能的数量级

用 r_0 表示原子处在基态时的"半径"。我们知道，波函数实际上完全集中在一个半径为 r_0 的球内部，换句话说，当 $r > r_0$ 时，电子出现在离质子 r 处的几率是非常小的；如果 $r < r_0$，则有一个不可忽略的值。一种非常粗糙的模型认为，遍及整个半径为 r_0 的球体，几率密度近似地均匀分布。

显然，r_0 越小，势能的平均值越小(指代数值)：它具有量级 $(-e^2/r_0)$。另一方面，r_0 越小，动能的平均值越大。的确，如果电子局域在一个半径为 r_0 的球内部，测不准关系将对它的动量值强加一个下限；动量的均方根偏差不能小于 $\hbar/r_0$，因此有一个极小的平均动能 $\hbar^2/2mr_0^2$。总能量因而至少等于这两个量之和：

$$\frac{\hbar^2}{2mr_0^2} - \frac{e^2}{r_0},$$

当 $r_0 = \hbar^2/me^2$ 时，它达到极小。我们预期这个极小的值

$$E_1 = -\frac{1}{2}\frac{me^4}{\hbar^2} \quad (=-13.5\text{eV}) \tag{11.7}$$

是基态能量的量级，而相应半径值

$$a = \frac{\hbar}{me^2} \quad (=0.529\times10^{-8}\text{公分}) \tag{11.8}$$

给出基态波函数的扩展的数量级。

事实上——而这不过是巧合——基态的能量是严格地由

方程(11.7)给定的. 长度 a 称为**玻尔半径**，或“氢原子的半径”.

4. 薛定谔方程在球坐标中的解

为了求解薛定谔方程，我们转换为球极坐标.象对任何中心势的情况一样，角度和径向变数在这一坐标系中是相分离的，问题简化为寻求径向方程(11.4)的正则解. 在抛物坐标中求解薛定谔方程也是可能的，因为变数在那个坐标系中同样可以分离. 我们只是为了将来的参考而指出库仑势的这一特征性质，而我们自己只限于在球极坐标中处理这个问题.

如果我们作变数代换

$$x = 2\varkappa r, \tag{11.9}$$

方程(11.4)只依赖于无量纲参数

$$\nu = \frac{1}{\varkappa a} = \frac{e^2}{\hbar c}\sqrt{\frac{mc^2}{-2E}}; \tag{11.10}$$

x 和 a 分别由方程(11.6)和(11.8)定义. 方程(11.4)等效于方程

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{\nu}{x} - \frac{1}{4}\right] y_l = 0, \tag{11.11}$$

y_l 是在原点处依 x^{1+l} 变化的那个解. 对于非常大的 x，它指数式地增大，除了某几个特定的 ν 值以外，对这些 ν 值，它依 $\exp\left(-\frac{1}{2}x\right)$ 变化. 我们打算确定 ν 的这些特殊值，以及它们相应的本征解.

为此目的，我们进行函数的代换

$$y_l = x^{l+1}e^{-\frac{1}{2}x}v_l(x),$$

它给出

$$\left[x\frac{d^2}{dx^2}+(2l+2-x)\ \frac{d}{dx}-(l+1-\nu)\right]v_l=0. \tag{11.12}$$

这个微分方程是一个拉普拉斯方程(参见附录 B §1). 在原点处只有一个解是有限的(最多差别一个常数); 所有其它的解在原点都有一个$\left(\frac{1}{x}\right)^{2l+1}$型的奇点. 这一正则解是合流超几何级数:

$$F(l+1-\nu|2l+2|x)\equiv\sum_{\nu=0}^{\infty}\frac{\Gamma(l+1+p+\nu)}{\Gamma(l+1-\nu)}\times\frac{(2l+1)!}{(2l+1+p)!}\frac{x^p}{p!}. \tag{11.13}$$

为了看出这一点, 实际上只要寻找方程(11.12)在原点处由泰勒级数展开式所代表的解就足够了,

$$v_l(x)=1+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_px^p+\cdots,$$

把这一展开式代入方程(11.12), 人们能够将左边写成 x 的幂级数展开式的形式. 这个展开式的所有系数必须等于零; 因此

$$\begin{aligned}(2l+2)a_1&=(l+2-\nu),\\ 2(2l+3)a_2&=(l+2-\nu)a_1,\\ &\vdots\qquad\qquad\vdots\\ p(2l+1+p)a_p&=(l+2-\nu)a_{p-1},\end{aligned}$$

由此

$$a_p=\frac{(p+l-\nu)(p-1+l-\nu)\cdots(1+l-\nu)}{(p+2l+1)(p-1+2l+1)\cdots(1+2l+1)}\times\frac{1}{p!}.$$

a_p 实际上是 x_p 在超几何级数(11.13)中的系数.

一般地，级数(11 13)是一个无限级数，对于大 x，依 $x^{-l-1-\nu}\exp(x)$ 变化[方程(B .9)到(B. 11)]。因而 y_l 在渐近区域依 $x^{-\nu}\exp\left(\frac{1}{2}x\right)$变化;它不可能是一个本征解。

然而,对 ν 的某几个特殊的值,那些系数从某一阶开始全部等于零，而超几何级数简化为一个多项式。为了能出现这一情况，$l+1-\nu$ 必须是一个负的整数或零,也就是

$$\nu = n = l + 1 + n' \quad (n' = 0,1,2,\cdots,\infty). \tag{11.14}$$

在这种情况下，超几何级数简化为一个 n' 阶的多项式，径向函数在 $x \to \infty$ 时依 $x^n\exp\left(-\frac{1}{2}x\right)$变化,而薛定谔方程的正则解可被接受为本征解。

量子条件(11.14)于是给出角动量为 (lm) 的那些束缚态的能级。它们中的每一个由整数 n' 的一个特定值确定。相应的束缚态波函数是以径向解

$$y_l = x^{l+1}e^{-\frac{1}{2}x}\sum_{p=0}^{n}(-)^p\frac{n'!(2l+1)!}{(n'-p)!(2l+1+p)!p!}x^p \tag{11.15}$$

建造的(未归一的)波函数。由右边的求和表示的这个 n' 阶多项式是缔合拉盖尔多项式 $L_{n'}^{2l+1}(x)$(最多差别一个常数)，它的定义和主要性质在附录 B(§ 2) 中给出。

5. 能谱　简并性

把方程(11.14)中的参数 ν 用它的作为能量函数的表示式(11.10)来代替,我们得到角动量为 l 的态的能谱,

$$E_{ln'} = -\left(\frac{l^2}{\hbar c}\right)^2\frac{mc^2}{2(l+1+n')^2}. \tag{11.16}$$

n'(径向量子数)等于波函数的径向部分的节点数目。这个谱

包含能级是一个可数的无限系，因为 n' 可以取从 0 至 $+\infty$ 的所有整数值. 当 $n' \to \infty$，这些能级分布得越来越密集极限下趋向于 $E = 0$，在这一点上，连续谱开始了.

这一情况是长程势的特征. 另一方面，短程势，诸如方阱等，给出有限(有时是零)数目的束缚态. 我们能够非常一般地证明，当势渐近地通过那些负值，且不如 $1/r^2$ 那么迅速地趋近于零时，

$$r^2V \xrightarrow[r\to\infty]{} -\infty;$$

能级系是可数地无限的(在值 0 处有一个集聚点).
我们也能够证明，它们的数目是有限的(可能是零)，如果势比 $1/r^2$ 更为迅速地渐近地趋近于零.

按照薛定谔理论，属于 l 的不同可能值 ($l = 0,1,2,\cdots,\infty$) 的谱系表示氢原子的完全谱. 这一完全谱是由方程 (11.16) 确定的一套数值 $E_{ln'}$ 组成的，l 和 n' 取所有可能的非负的整数值. 注意这些量只依赖于和 $l + n'$，或者等效地说，只依赖于"主量子数"

$$n = l + n' + 1.$$

我们有

$$E_n = -\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \frac{mc^2}{2n^2} \quad (n = 1,2,\cdots,\infty). \qquad (11.17)$$

对于各个能量 E_n，也就是说对于各个整数值 n，角动量可能取从 0 直到 $n - 1$ 的所有整数值. 能级 E_n 的简并度因而是

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n(n - 1) + n = n^2.$$

本征函数的 n^2 维子空间由 n^2 个函数张成，各相应于一个给定角动量(lm)的态，"方位量子数"取 n 个值

$$l = 0,1,2,\cdots,n - 1,$$

而“磁量子数”取$(2l+1)$个值

$$m=-l,-l+1,\cdots,+l.$$

按照光谱学的传统，这样确定的各个本征态是用正整数n，后面跟上一个指示l值的字母$(s,p,d,f,g,\cdots)$(依照前一章中叙述的定义)来标记的。指示体系取向的量子数m就不提了。因此基态是$1s$态，第一激发态是四度简并的，包含一个$2s$态和三个$2p$态；第二激发态是九度简并的，包含一个$3s$态，三个$3p$态和五个$3d$态；等等(图 11.1)。

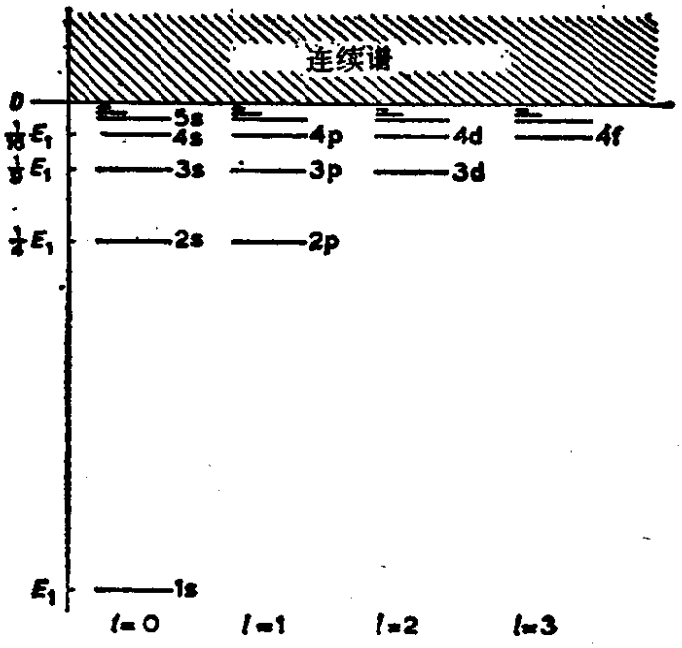

图 11.1 氢原子的谱.

这个谱正好就是老量子论所预告的谱；已经指出过，它与实验谱极好地符合。更为确切地说，这个理论正确地说明了谱线的位置，但是并未说明它们的精细结构。它的根本缺陷在于它是一个非相对论性理论。能级位置的相对论性效应具有量级v^2/c^2，或约为E_n/mc^2。因而相对论的校正具有量级10^{-4}至10^{-5}。另一方面，薛定谔理论不考虑电子的自旋：自旋是一个没有经典模拟的内部自由度；在第十三章中，我们将

有机会来讨论它. 在第二十章讨论电子的相对论量子力学时将会再次继续分析氢原子的精细结构.

6. 束缚态的本征函数

属于能级 E_n 的本征函数是 n^2 个线性独立函数的线性组合. §4 的研究为我们提供了 n^2 个正交本征函数，也就是各相应于一个完全确定的角动量值的那些函数. 因此量子态 (nlm) 的波函数写成

$$\psi_{nlm} = a^{-\frac{3}{2}} N_{nl} F_{nl}\left(\frac{2r}{na}\right) Y_l^m(\theta,\varphi), \qquad (11.18)$$

其中

$$F_{nl}(x) = x^l e^{-\frac{1}{2}x} L_{n-l-1}^{2l+1}(x). \qquad (11.18a)$$

N_{nl} 是归一化常数. 我们用拉盖尔多项式的生成函数[方程(B. 15)]来计算 ψ_{nlm} 的模方. 这个模方等于一，如果我们取

$$N_{nl} = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}. \qquad (11.18b)$$

量子态 (nlm) 中 r 的递次幂的平均值是令人感兴趣的. 它们的计算将不在这里进行（习题 11.1). 计算结果在附录 B(§3)中给出. 特别是，我们有

$$\langle r\rangle_{nl} = \frac{1}{2}a[3n^2 - l(l+1)]. \qquad (11.19)$$

因而 n 越大，电子平均地说来越远离质子. 对于基态，我们发现 $\langle r\rangle_{ls} = \frac{3}{2}a$，同 §3 的粗糙预言相一致.

当 l 取它的极大值$(n-1)$时，波函数取一种特别简单的形式: 它是 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 和径向函数

$$[(2n)!]^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{2}{na}\right)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{2r}{na}\right)^{n-1}e^{-r/na}$$

的积. r 在这个态中的平均值是

$$\langle r\rangle = \frac{1}{(2n)!}\left(\frac{2}{na}\right)^3\int_0^\infty\left(\frac{2r}{na}\right)^{2n-2}e^{-\frac{2r}{na}}r^3dr$$

$$= n\left(n+\frac{1}{2}\right)a,$$

同上面指出的更为一般的公式相一致. 相似的计算给出

$$\langle r^2\rangle = n^2\left(n+\frac{1}{2}\right)(n+1)a^2,$$

由此我们得到对于均方根径向偏差的表示式

$$\Delta r = \sqrt{\langle r^2\rangle - \langle r\rangle^2} = \frac{1}{2}na\sqrt{2n+1} = \frac{\langle r\rangle}{\sqrt{2n+1}}.$$

对于非常大的 n 值，$\frac{\Delta r}{\langle r\rangle}$变得非常小，电子实际上局域在一个半径为 n^2a 的球的附近，而能级的能量$-\frac{1}{2}e^2/n^2a$ 同一个在半径为 n^2a 的圆形轨道上运动的经典电子的能量一样.

我们在这个特定例子中证实了一般的对应定则，按照这个定则，我们在非常大的量子数的极限下回到了经典的运动定律. 为了详细地比较量子理论和经典理论，我们必须研究波包的运动. 这里我们将不这样做. 我们只是注意到，l 极大 ($l = n-1$) 的态相应于经典的圆形轨道，这是一个可与老量子论的结果作比较的事实，按照老量子论，量子化轨道的偏心率等于$\sqrt{1-\frac{l^2}{n^2}}$，而且当 l 取极大值时它等于零(参见第一章 § 15).

II. 库 仑 散 射

7. 库仑散射波

在约化到质心系以后，用 § 1 的记号，库仑相互作用的两

个粒子的碰撞问题的薛定谔方程写作

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\frac{Z_1Z_2e^2}{r}\right]\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r}), \qquad (11.20)$$

此处 E 是质心系中的能量. 散射截面与方程(11.20)的正能本征解的渐近行为有关. 让我们设[1)]

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{1}{2}mv^2, \qquad (11.21)$$

$$\gamma=\frac{Z_1Z_2e^2}{\hbar v}; \qquad (11.22)$$

方程(11.20)也可以写作

$$\left(\Delta+k^2-\frac{2\gamma k}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r})=0. \qquad (11.23)$$

这个方程有一个如下形式的正则解:

$$e^{ikz}f(r-z). \qquad (11.24)$$

的确,如果我们把这个表示式代入方程(11.23),并设 $u=r-z$,我们得到微分方程

$$\left[u\frac{d^2}{du^2}+(1-iku)\frac{d}{du}-\gamma k\right]f(u)=0,$$

或者,设

$$v=iku=ik(r-z),$$

$$\left[v\frac{d^2}{dv^2}+(1-v)\frac{d}{dv}+i\gamma\right]f(v)=0.$$

这是一个拉普拉斯型的方程,它在原点是正则的解是合流超几何级数 $F(-i\gamma|1|v)$. 因而薛定谔方程实际上有一个(11.24)形式的正则解,即函数

$$\psi_c=Ae^{ikz}F[-i\gamma|1|ik(r-z)], \qquad (11.25)$$

---

1) γ 是在氢原子问题中引进的参量 ν 的模拟. 如果我们设 $a=\hbar^2/Z_1Z_2\times me^2$,就有 $\gamma=1/ka$ [参见方程(11.10)].

A是一个可调节的常数。

同附录B(§1)中所作的研究相一致，出现在方程(11.25)中的超几何级数是两个函数之和，对于大的$|v| = 2kr\sin^2\frac{1}{2}\theta$值，它们的渐近形式分别由方程(B. 10)和(B. 11)给出. 让我们采用附录B的记号，并设

$$\psi_i = Ae^{ikz}W_1(-i\gamma|1|iku), \tag{11.26}$$

$$\psi_s = Ae^{ikz}W_2(-i\gamma|1|iku). \tag{11.27}$$

我们有

$$\psi_c = \psi_i + \psi_s. \tag{11.28}$$

函数ψ_i和ψ_s是方程(11.20)的(非正则)解。

如取

$$A = \Gamma(1 + i\gamma)e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}, \tag{11.29}$$

我们得到ψ_i和ψ_s的下列渐近形式:

$$\psi_i \underset{|r-z|\to\infty}{\sim} e^{i[kz+\gamma\ln k(r-z)]}\left[1 + \frac{\gamma^2}{ik(r-z)} + \cdots\right], \tag{11.30}$$

$$\psi_s \underset{|r-z|\to\infty}{\sim} -\frac{\gamma}{k(r-z)}\frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)}e^{i[kr-\gamma\ln k(r-z)]} \times\left[1 + \frac{(1+i\gamma)^2}{ik(r-z)} + \cdots\right]. \tag{11.31}$$

由于$z = r\cos\theta$，ψ_s的渐近展开式的第一项也能够写作

$$\psi_s \underset{|r-z|\to\infty}{\sim} \frac{1}{r}\exp[i(kr - \gamma\ln 2kr)]f_c(\theta), \tag{11.32}$$

其中

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k\sin^2\frac{1}{2}\theta}\exp\left[-i\gamma\ln\left(\sin^2\frac{1}{2}\theta\right) + 2i\sigma_0\right], \tag{11.33}$$

$$\sigma_0 = \arg\Gamma(1 + i\gamma). \qquad (11.34)$$

8. 卢瑟福公式

波 ψ_c 表示入射动量 $\hbar k$ 沿 z 轴的一个粒子的碰撞定态. 对于这种情况: 当 $r \to \infty$ 时势至少与 $1/r^2$ 一样快地趋于零，我们知道这同一个碰撞定态是由其渐近形式为 $\exp(ikz) + f(\theta)\exp(ikr)/r$ 的波函数表示的；后者能够解释为入射平面波和出射被散射波的和. 同样，波 ψ_c 能够写成两项 ψ_i, ψ_s 之和的形式，它们各自的渐近形式象是一个平面波和一个出射波.

然而，甚至在距离原点无限大距离处，由于因子 $\exp \times [i\gamma \ln k(r - z)]$ 的存在，ψ_i 也不能比拟作一个平面波；换句话说，库仑场具有这样长的程，以致它甚至在渐近区域也要影响入射波. 不管这个事实，对于负的和非常大的 z 值，ψ_i 是一个单位密度的波，它的流密度

$$j_i = \frac{\hbar}{2im}[\psi_i^*(\nabla\psi_i) - \psi_i(\nabla\psi_i)^*]$$

沿 oz 轴且等于 $v \equiv \hbar k/m$ (对数项引进量级为 $1/r$ 的校正，这是我们能够忽略的). 这一点说明有理由把 ψ_i 解释为入射波.

同样，波 ψ_s 的径向依赖性决不(即使对非常大的 r 值也不)趋近于代表出射波的形式 $\exp(ikr)/r$，而是趋近于更为复杂的表示式 $\exp[i(kr - \gamma\ln 2kr)]/r$. 然而，$\psi_s$ 在渐近区域(除了沿正 z 轴以外，在那里入射波和被散射波的分离是没有意义的)的行为象是一个被散射波，因为用这个波计算的流密度 j_s 实际上是径向地指向 r 增大的方向；因子 $\exp(-i\gamma\ln 2kr)$ 的效应在 $1/r$ 的最低阶内能够忽略；在这一近似下，波 ψ_s 是一个密度为 $|f_c(\theta)|^2/r^2$，流密度为 $v|f_c(\theta)|^2/r^2$ 的波.

作出被散射进入立体角 $(\Omega, \Omega + d\Omega)$ 的流密度同入射流密度的比值，我们得到微分散射截面

$$\sigma_c(\Omega) = |f_c(\theta)|^2. \tag{11.35}$$

这个公式类似于一个短程势的碰撞公式(10.2). 刚才给出的证明同第十章 § 3 的证明一样容易受到相同的批评. 然而，一种更为严格的、模仿第十章 § 4 至 § 6 的证明是容易作出的.

$f_c(\theta)$ 称为库仑散射振幅. 它的显式形式由方程(11.33)给出. 我们推导出库仑散射截面的表示式

$$\begin{aligned}\sigma_c(\Omega) &= \frac{\gamma^2}{4k^2\sin^4\frac{1}{2}\theta} \\ &= \left(\frac{z_1 z_2 e^2}{4E}\right)^2 \sin^{-4}\frac{1}{2}\theta.\end{aligned} \tag{11.36}$$

前面这个表示式是和第六章中计算的经典库仑散射截面 [方程(6.29)]全同的. 因此，即便当经典近似不再合理时，经典卢瑟福公式还是保持正确. 这个事实必须认为是偶然的.

在截面的表示式(11.36)中，我们注意到库仑散射的下述值得注意的性质:

(i) 它单独地依赖于势的绝对值，而不依赖于它的正负号;

(ii) 角分布是与能量无关的;

(iii) 在一给定角度处，当能量增大时截面依 $1/E^2$ 降落;

(iv) 总截面是无限的: $\int\sigma_c(\Omega)d\Omega$ 在小角度处发散.

这一发散性质是纯库仑场的特征. 实际上，决不会碰到这样一个场;例如，在一个带电粒子被原子核的散射中，核引起的库仑场在大的距离处逐渐被电子云的场补偿，势在同原子半径相比足够大的距离处等于零. 这种屏蔽在小角度处以

这样一种方式修正被散射波，以致微分截面不再发散．我们能够证明，屏蔽引起的修正在远大于 $2\gamma/ka$ 和 $1/ka$ (a 是原子半径)的角度处是可以忽略的．在核物理中常用的能量内，这两个限制角度是如此之小，以致屏蔽效应能够完全忽略．

9. 分解为分波

薛定谔方程(11.20)可以由分离角度和径向变数而解出．这种方法对于纯库仑散射的处理并没有引起太大的兴趣，因为我们有一种更为直接的方法可供使用．再者，由于这种势有一个长程，散射振幅 $f_c(\theta)$ 的球谐函数展开式是收敛得非常慢的．然而，分解为分波的做法在所有短程相互作用加上纯库仑相互作用的问题中都是有用的．这种附加的相互作用的存在仅仅影响振幅 $f(\theta)$ 的球谐函数展开式的开始几项，结果，$f(\theta)-f_c(\theta)$ 迅速地收敛．

角度和径向变数的分离早已在氢原子问题中履行．用现在的记号，方程(11.4)写作

$$y_l''+\left[k^2-\frac{2\gamma k}{r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]y_l=0. \tag{11.37}$$

为建造这个方程的解，我们用氢原子问题中一样的做法，作函数和变数的代换

$$\begin{aligned} y_l &= e^{ikr}(kr)^{l+1}v_l, \\ \xi &= -2ikr; \end{aligned} \tag{11.38}$$

v_l 是拉普拉斯方程[参见方程(11.12)]

$$\left[\xi\frac{d^2}{d\xi^2}+(2l+2-\xi)\frac{d}{d\xi}-(l+1+i\gamma)\right]v_l=0 \tag{11.39}$$

的解．从两个非正则解 $W_{1,2}(l+1+i\gamma|2l+2|\xi)$ 的渐近展开式[方程(B. 10)—(B. 11)]，我们推断出(11.39)的一般

解的渐近形式，并经过简略的运算而推断出(11.37)的一般解的渐近形式：它是两个指数的线性组合：

$$e^{\pm i(kr-\gamma\ln 2kr)}.$$

(11.39) 的在原点为正则的解是超几何级数 $F(l+1+i\gamma|2l+2|\xi)$；它是两个函数 W_1 和 W_2 之和[方程(B.9)]，方程(11.37)的相应解渐近地趋近于 $\sin\left(kr-\gamma\ln 2kr-\frac{1}{2}l\pi+\sigma_l\right)$的倍数，其中

$$\sigma_l=\arg\Gamma(l+1+i\gamma); \tag{11.40}$$

σ_l 称为**库仑相移**. 根据定义，正则的库仑波函数 $F_l(\gamma;kr)$ 是(11.37)的正则解，它的渐近形式是

$$F_l\underset{r\to\infty}{\sim}\sin\left(kr-\gamma\ln 2kr-\frac{1}{2}l\pi+\sigma_l\right). \tag{11.41}$$

据上所述，我们得到

$$F_l(\gamma;kr)=c_l(\gamma)e^{ikr}(kr)^{l+1}F(l+1+i\gamma|2l+2|-2ikr), \tag{11.42}$$

常数 $c_l(\gamma)$ 是这样调节的，以致 F_l 满足(11.41)，也就是

$$c_l=\frac{2^l e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}|\Gamma(l+1+i\gamma)|}{(2l+1)!}; \tag{11.43}$$

F 是一个实函数. 我们常常把它称为正则球库仑函数. 它是 kr 的一个依赖于参数 γ 的函数.

我们还定义“非正则球库仑函数”. 它们是方程 (11.37) 的在原点为非正则的解. 最为常用的那些在附录 B § 5 中定义. 我们只在这里指出具有渐近形式

$$u_l^{(\pm)}\underset{r\to\infty}{\sim}e^{\pm i(kr-\gamma\ln 2kr-\frac{1}{2}l\pi)}$$

的出射波和入射波 $u_l^{(+)}$ 和 $u_l^{(-)}$. 这些函数是互为复共轭的，我们有

$$F_l = \mathrm{Im}\, e^{+i\sigma_l} u_l^{(+)}. \tag{11.44}$$

10. 波 ψ_c 的球谐函数展开式

在第十一章 § 7 中定义的库仑波函数 ψ_c

$$\psi_c \equiv e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}\Gamma(1+i\gamma)e^{ikz}F[-i\gamma|1|ik(r-z)] \tag{11.45}$$

能够用勒让德多项式的级数展开式来表示

$$\psi_c = \frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l e^{i\sigma_l}F_l(\gamma;kr)P_l(\cos\theta). \tag{11.46}$$

这个展开式类似于一个平面波的展开式

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta), \tag{11.47}$$

前者在 $r\to 0$ 的极限下简化为后者.

为了证明关系式 (11.46)，我们利用出现在 ψ_c 的定义式中的超几何函数的积分表示(B. 6)，它给出

$$\psi_c = \frac{e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}}{(1-e^{-2\pi\gamma})\Gamma(-i\gamma)}e^{ikz}\int_{\Gamma_0} e^{ik(r-z)t}t^{-i\gamma-1}(1-t)^{i\gamma}dt$$

$$= \frac{e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}}{(1-e^{-2\pi\gamma})\Gamma(-i\gamma)}\int_{\Gamma_0} e^{ikrt}e^{ikz(1-t)}t^{-i\gamma-1}(1-t)^{i\gamma}dt,$$

把被积函数中的指数 $\exp[ikz(1-t)]$ 按照公式 (11.47) 展开为勒让德多项式的级数，并交换求和和积分，我们得到

$$\psi_c = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\varphi_l(r)P_l(\cos\theta), \tag{11.48}$$

其中

$$\varphi_l(r) = \frac{e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}}{(1-e^{-2\pi\gamma})\Gamma(-i\gamma)}\int_{\Gamma_0} e^{ikrt}j_l[kr(1-t)]t^{-i\gamma-1}$$

$$\times(1-t)^{i\gamma}dt. \tag{11.49}$$

另一方面，我们知道

$$\xi j_l(\xi) = F_l(0;\xi) = \frac{2^l l!}{(2l+1)!}\xi^{l+1}e^{i\xi}F(l+1|2l+2|-2i\xi),$$

或

$$j_l(\xi) = 2^l\xi^l e^{i\xi}\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(l+p)!}{(2l+1+p)!}\frac{(-2i\xi)^p}{p!}.$$

把 j_l 的这个表示式代入(11.49)右边的积分中，并再一次交换求和和积分，我们得到

$$\varphi_l(r) = \frac{2^l e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}}{(1-e^{-2\pi\gamma})\Gamma(-i\gamma)}(kr)^l e^{ikr}$$

$$\times\sum_{p=0}^{\infty}\frac{(l+p)!}{(2l+1+p)!}\left[\int_{\Gamma_0} t^{-i\gamma-1}\right.$$

$$\left.\times(1-t)^{l+p+i\gamma}dt\right]\frac{(-2ikr)^p}{p!};$$

再按照关系式(B. 5)，鉴于

$$\int_{\Gamma_0} t^{-i\gamma-1}(1-t)^{l+p+i\gamma}dt$$

$$= (1-e^{-2\pi\gamma})\frac{\Gamma(-i\gamma)\Gamma(l+p+1+i\gamma)}{(l+p)!},$$

$$\varphi_l(r) = 2^l e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}(kr)^l e^{ikr}\sum_{p=0}^{\infty}\frac{\Gamma(l+p+1+i\gamma)}{(2l+1+p)!}\frac{(-2ikr)^p}{p!}$$

$$= 2^l e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}\frac{\Gamma(l+1+i\gamma)}{(2l+1)!}(kr)^l e^{ikr}F(l+1+i\gamma|2l+2|-2ikr).$$

考虑到定义(11.40)，(11.42)和(11.43)，由此得

$$kr\varphi_l(r) = e^{i\sigma_l}F_l(\gamma;kr).$$

我们把这个表示式代入方程(11.48)，就得到所期望的表示式。

实际上，我们可能已经预料到一个这种形式的解. 的确，既然 ψ_c 是薛定谔方程(11.20)的正则解，$r\varphi_l(r)$ 必然是径向方程(11.37)的正则解，因而正比于 $F_l(r;kr)$. 上述计算的主要目的是要找到那个比例常数.

借助于出射和入射库仑波来表示展开式(11.46)是有启发性的. 把 F_l 用它的作为 $u_l^{(+)}$ 和 $u_l^{(-)}$ 的函数[方程(11.44)]来代替，我们发现

$$\psi_c = \frac{1}{2kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^{l+1}[u_l^{(-)} - e^{2i\sigma_l}u_l^{(+)}]P_l(\cos\theta). \tag{11.50}$$

11. 用一短程相互作用来修正库仑势

当把一个短程相互作用 $V'(r)$ 加于库仑场 $V_c(r)$ 时，碰撞定态不再由纯库仑波，而是由波 ψ 代表，ψ 的勒让德多项式的级数展开式具有形式

$$\psi = \frac{1}{kr}\sum_{l=0}(2l+1)i^l\chi_l(r)P_l(\cos\theta). \tag{11.51}$$

用来处理粒子被势 $V'(r)$ 散射的相移方法几乎可以一步一步地扩展于被势 $V_c(r)+V'(r)$ 的散射；实际上只要在每一步上用相应的库仑波来代替自由波，这样就足够了.

函数 $\chi_l(r)$ 是径向方程

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{2\gamma k}{r} - \frac{2m}{\hbar^2}V' - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]\chi_l(r) = 0 \tag{11.52}$$

的解. 我们能够证明(习题 11.2)，如果 $V'(r)$ 至少同 $1/r^2$ 一样快地渐近地趋向于零，这一径向方程的解就渐近地趋近于指数

$e^{\pm i(kr-\gamma\ln 2kr)}$

的线性组合，或者等效地说，趋近于出射和入射库仑函数 $u_l^{(+)}$ 和 $u_l^{(-)}$ 的线性组合。特别是，这一方程的正则解渐近地趋向于这两个函数的某一个线性组合。设

$$A_l[u_l^{(-)} - e^{2i\delta_l}e^{2i\delta_l}u_l^{(+)}]$$

就是这个线性组合；A_l 是一个任意常数。相移 δ_l 是用来表征势 $V'(r)$ 的，我们已经把它加在库仑势上。如果 $V'(r) = 0$，δ_l 就是零，而且以后起着类似于短程势散射理论中的相移的作用。

径向方程的正则解 χ_l 必须用这样一种方式来选取，使得波 ψ 表示一个碰撞定态。所以，$\psi - \psi_c$ 的行为必须渐近地象是一个 $\exp[i(kr - \gamma\ln 2kr)]/r$ 型的纯粹的出射波。我们只要比较一下(11.50)和(11.51)就能够看到，如果对于所有的 l 值，$A = \frac{1}{2}i$，这个条件就是满足的。在渐近区域内(也就是对于足够大的 r 值，$V'(r)$ 能够忽略)，因而 ψ 能够展开如下：

$$\psi \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{2kr}\sum_l (2l+1)i^{l+1}[u_l^{(-)} - e^{2i\delta_c}e^{2i\sigma_l}u_l^{(+)}]P_l(\cos\theta)$$

$$\underset{r\to\infty}{\sim} -\frac{1}{2kr}\sum_l (2l+1)i^{l+1}e^{2i\sigma_l}(e^{2i\delta_l} - 1)u_l^{(+)}P_l(\cos\theta). \tag{11.53}$$

同 § 7 中的一样，我们能够把 ψ 表成和的形式：

$$\psi = \psi_i + \psi_s, \tag{11.54}$$

此处 ψ_i 是由方程(11.26)定义的函数，表示入射波。另一方面，ψ_s 与方程(11.27)定义的函数有所不同；经过某些计算以后，它的渐近形式写作

$$\psi_s \underset{r\to\infty}{\sim} \frac{1}{r}\exp[i(kr - \gamma\ln 2kr)]\cdot f(\theta),$$

其中

$$f(\theta) = f_c(\theta) + f'(\theta) \tag{11.55}$$

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k\sin^2\frac{1}{2}\theta}\exp\left[-i\gamma\ln\left(\sin^2\frac{1}{2}\theta\right) + 2i\sigma_0\right] \tag{11.55a}$$

$$f'(\theta) = \frac{1}{2ik}\Sigma(2l+1)e^{2i\sigma_l}(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\theta). \tag{11.55b}$$

通过同在§8中给出的相类似的论证，容易看出散射截面是

$$\sigma(\Omega) = |f(\theta)|^2. \tag{11.56}$$

如果 $f(\theta)$ 用它的表示式(11.55)来代替，我们能够把上式写成三项之和的形式，也就是

$$\sigma(\Omega) = \sigma_c(\Omega) + 2\mathrm{Re}f_c^* f' + |f(\theta)|^2.$$

普通相移的许多性质不作多少改变就能适用于此处引进的相移．特别是，附加势 $V'(r)$ 的程越短，级数(11.55b)收敛得就更为迅速． 第十章§10公式(10.39)直到(10.44)严格地保持有效，显然，函数 $u_l^{(\pm)}$ 表示库仑波而非自由波（习题11.3)．然而，量 $\tau_l, v_l, q_l^{(+)}$ 的数值可能同自由波的相同的量非常不一样，以致关于在低能区的行为和级数收敛性的讨论必须相当彻底地修改．特别是，如果库仑势是排斥性的，入射能量越小，贯穿因子就越小，一旦 $E \lesssim Z_1Z_2e^2/r_0$（能量在 $r = r_0$ 点低于库仑势垒)，我们对任何 l 就有 $v_l \ll 1$． 除了这一点，散射共振的整个处理能够不作改变地移用过来．只要我们对所涉及到的量的定义作一些改变(习题11.4)，公式(10.72)和(10.73)(玻恩近似的出发点)和公式(10.77)("有效程"近似的出发点)就保持有效。

练 习 和 问 题

1.利用氢原子的径向方程，推导递归关系式(**克喇末关系式**)

$$\frac{s+1}{n^2}\langle r^s\rangle-(2s+1)a\langle r^{s-1}\rangle+\frac{s}{4}[(2l+1)^2-s^2]a^2\langle r^{s-2}\rangle=0,$$

其中$\langle r^t\rangle$表示r^t的平均值，当原子处于量子态(nlm)时$(a>-2l-3)$. 推导附录B§3中所给的$\langle r^{-1}\rangle$，$\langle r\rangle$，$\langle r^2\rangle$的表示式[我们不能用这个关系式来确定$\langle r^{-2}\rangle$].

求证：对于类氢原子的任何定态，动能的平均值与能量的本征值数值相等而符号相反：

$$E_n=-\langle p^2/2m\rangle_{nlm}.$$

2.考虑一个质量为m的粒子被中心势$V(r)=Ze^2/r+V'(r)$散射，此处$V'(r)$当$r\to\infty$时至少同$1/r^2$一样快地趋向于零. 求证：径向方程的解渐近地趋向于指数

$$\exp[\pm i(kr-\gamma\ln 2kr)]$$

的线性组合$(k=\sqrt{2mE}/\hbar,\ \gamma=Ze^2/\hbar v$; E和v分别是入射能量和速度).

3.证明：如果我们把一个库仑相互作用项$Z_1Z_2e^2/r$加于有限程势上，第十章(§10)的公式(11.39)直到(11.44)就保持有效，只要我们使用函数$u_l^{(+)}$和$u_l^{(-)}$的适当定义.

4.当散射势是一个短程项和一个库仑相互作用项之和时，积分表示式(10.72)和(10.73)必须作怎样的修饰？对公式(10.77)回答同样的问题. 当短程项具有第十章§20中所述的性质时，对S波散射，检查有效程理论(参见 H. A. Bethe，第十章§20末一注中的引文).

第十二章 谐 振 子

1. 引言

在经典力学中，谐振子是被约束在一根轴线上运动的粒子，作用在它上的是恢复力(与粒子的位移成正比).这是一个典型问题，它的解是众所周知的. 设 q 是轴线上的这个粒子的位置坐标(以力心作为原点)，并设 p 是它的动量，m 是它的质量，而 $-m\omega^2 q$ 是恢复力. 粒子的运动方程是从哈密顿量 $(p^2+m^2\omega^2q^2)/2m$ 推导出来的；我们容易证明，这种运动是在原点附近振荡的、(角)频率为 ω 的正弦运动.

相应的量子力学问题是质量为 m 的一维粒子，具有哈密顿量

$$\mathscr{H}=\frac{1}{2m}(p^2+m^2\omega^2q^2) \tag{12.1}$$

的问题，位置变量 q 和动量 p 由对易关系

$$[q,p]=i\hbar. \tag{12.2}$$

联系. 这里论述的是一个特别简单的量子体系，它的薛定谔方程是我们知道如何严格地求解的. 再者，它还具有某些值得注意的性质.

谐振子的研究在量子论中有巨大重要性，因为(12.1)型式的哈密顿量涉及量子化振荡的所有问题：我们在量子电动力学中，或更为一般地，在量子场论中碰到它；同样，在分子和晶体振动论中也碰到它. 另一方面，与谐振子有关的问题为量子论的一般原理和量子论的形式提供了极好的例证. 所有这些理由说明，在这一章中详尽地研究它是正确的.

开始两节专门用来讨论一维振子. 哈密顿量的本征值问题的一般解在第 I 节中给出. 第 II 节专门用来讨论各种应用: 确定定态的生成函数,解海森伯运动方程,比较经典和量子力学振子; 研究波包运动(它是对应原理,也是测不准关系的好例证);最后是检查处于热力学平衡的谐振子系综的某些性质.

第 III 节论述多维各向同性谐振子. 这个问题的基本特征是存在简并本征值. 在两维和三维各向同性振子的两个特定情况下详尽检查简并性的结果.

I. 哈密顿量的本征态和本征矢

2. 本征值问题

为了避免计算中堆满无用的常数,我们设

$$\mathscr{H} = H\hbar\omega, \tag{12.3}$$

$$q = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} Q, \tag{12.4}$$

$$p = (m\hbar\omega)^{\frac{1}{2}} P. \tag{12.5}$$

我们的问题是找出算符

$$H = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2) \tag{12.6}$$

的本征值,以及建造它的本征矢;厄密算符 P 和 Q 满足对易关系

$$[Q, P] = i. \tag{12.7}$$

为了解决这个问题,我们可选择一个特定表象,譬如说 $\{Q\}$ 表象,并在那个表象中求解薛定谔方程. 既然 P 是由微分算符 $(-id/dQ)$ 表示的,我们有一维薛定谔方程

$$\frac{1}{2}\left[-\frac{d^2}{dQ^2} + Q^2\right] u(Q) = \varepsilon u(Q). \tag{12.8}$$

我们在这里仿效的是狄拉克的更为直接的方法；它的实质在于把一些合适的算符作用于H的一个本征矢上，以此来建造它们。因而我们是在设法不涉及特定的表象，而仅仅基于希耳伯特空间的基本公理和对易关系(12.7)来求解这个本征值问题。这里描述的方法事实上能够看作是建造体系的动力学态的矢量空间 $\mathscr{E}$ 的方法，同第八章 § 6 中描述的方法有很大的相似性。

3. 算符 a, $a^\dagger$ 和 N 的引进

让我们设

$$a = \frac{1}{2}\sqrt{2}(Q + iP), \tag{12.9a}$$

$$a^\dagger = \frac{1}{2}\sqrt{2}(Q - iP); \tag{12.9b}$$

a 和 $a^\dagger$ 互为厄密共轭。对易关系(12.7)等效于

$$[a, a^\dagger] = 1. \tag{12.10}$$

如果我们在方程(12.6)中把 Q 和 P 用它们的作为 a 和 $a^\dagger$ 的函数的表示式来代替，我们发现

$$H = \frac{1}{2}(aa^\dagger + a^\dagger a). \tag{12.11}$$

我们设

$$N = a^\dagger a. \tag{12.12}$$

从(12.10)和(12.11)，我们推出

$$H = N + \frac{1}{2}. \tag{12.13}$$

从(12.10)和(12.12)，我们得出重要的关系式

$$Na = a(N - 1), \tag{12.14a}$$

$$Na^\dagger = a^\dagger(N + 1). \tag{12.14b}$$

我们要求解的本征值问题等价于建造算符 N（由表示式(12.12)定义)的本征矢的问题，式中的算符 a 和 $a^\dagger$ 是满足关系式(12.10)的两个厄密共轭算符.

为此目的，我们将要证明一个重要定理.

定理：**如果 $|\nu\rangle$ 是 N 的一个本征矢，ν 是相应的本征值，则**

(i) **必然有 $\nu \geqslant 0$；**

(ii) **如果 $\nu = 0$，则 $a|\nu\rangle = 0$；如若不然，则 $a|\nu\rangle$ 是一个模方为**

$$\nu\langle\nu|\nu\rangle$$

的非零矢量，而且它是 N 的一个具有本征值 $\nu - 1$ 的本征矢；

(iii) **$a^\dagger|\nu\rangle$ 必然不是零；它的模方是**

$$(\nu + 1)\langle\nu|\nu\rangle,$$

而且它是 N 的一个相应于本征值 $\nu + 1$ 的本征矢.

根据假说，

$$N|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle,\ \langle\nu|\nu\rangle > 0.$$

利用定义(12.12)和关系式(12.10)，我们推出 $a|\nu\rangle$ 和 $a^\dagger|\nu\rangle$ 的各自模方为

$$\langle\nu|a^\dagger a|\nu\rangle = \langle\nu|N|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle, \qquad (12.15a)$$

$$\langle\nu|aa^\dagger|\nu\rangle = \langle\nu|(N+1)|\nu\rangle = (\nu+1)\langle\nu|\nu\rangle. \qquad (12.15b)$$

希耳伯特空间的矢量的模方是非负的，模方等于零是矢量等于零的必要和充分的条件. 为了使这个基本公理在这里得到满足，必要和充分的条件是 $\nu \geqslant 0$[性质(i)][1]. 让 $a|\nu\rangle$ 等于零的条件是方程(12.15a)的特殊情况. 另一方面，$a|\nu\rangle$ 和 $a^\dagger|\nu\rangle$ 实际上满足所说的本征值方程，因为按照(12.14a)和

---

1) 参见习题 7.9.

(12.14b)，有

$$Na|v\rangle = a(N-1)|v\rangle = (v-1)a|v\rangle,$$
$$Na^\dagger|v\rangle = a^\dagger(N+1)|v\rangle = (v+1)a^\dagger|v\rangle.$$

证毕。

4. N的谱和基

如果$v>0$，前述定理同样好地适用于其本征值为$v-1$的矢量$a|v\rangle$；结果$v\geqslant 1$. 如果$v>1$，定理还适用于矢量$a^2|v\rangle$. 因而我们相继地组成本征矢量系

$$a|v\rangle, a^2|v\rangle, \cdots, a^p|v\rangle, \cdots,$$

它们分别具有本征值

$$v-1, v-2, \cdots, v-p, \cdots.$$

这个系当然是有限的，因为N的本征值的下限是零. 换句话说，这个系的矢量从某个秩$n+1$开始全部等于零: a对本征值为$v-n$的非零本征矢$a^n|v\rangle$的作用给出零；按照(ii)，这需要$v=n$.

用相同的方法，我们把这个定理应用于矢量$a^\dagger|v\rangle$，它当然不是零，而是本征值为$v+1$的；然后再应用于矢量$a^{\dagger 2}|v\rangle$，等等. 因而我们相继地组成了一个没有极限的非零矢量系

$$a^\dagger|v\rangle, a^{\dagger 2}|v\rangle, \cdots, a^{\dagger p}|v\rangle, \cdots,$$

它们是N的分别具有本征值

$$v+1, v+2, \cdots, v+p, \cdots$$

的本征矢.

最后，**N的本征值谱是由非负的整数系组成的.** 再者，通过a或$a^\dagger$对它们中的一个的重复作用，我们得到一套本征矢，各具有谱中的一个本征值. 各个矢量的模方与相继矢量的模方之比由关系式(12.15a)或(12.15b)中的一个给出. 矢

量的这个系综组成一个完全系。的确，我们能够证明，与N对易的a和$a^\dagger$的任何函数是N的函数(习题 12.1)。结果N独自组成对易观测算符的一个完全系，而且它的本征值中没有一个是简并的。

这样建造的矢量是不归一的。为了组成观测算符N的一个正交归一基，只要把它们中的各个乘上一个合适的常数就足够了；这是容易从关系式(12.15a)和(12.15b)推出的。这个常数确定到差别一个任意的相位，我们将以这样一种方法来定这相位，以致能够得到尽可能简单的公式。因而我们组成正交归一矢量系

$$|0\rangle,|1\rangle,\cdots,|n\rangle,\cdots, \tag{12.16}$$

它们分别相应于N的下列本征值：

$$0,1,\cdots,n,\cdots.$$

它们能够用递推关系

$$a^\dagger|n\rangle = (n+1)^{\frac{1}{2}}|n+1\rangle \tag{12.17}$$

$$a|n\rangle = n^{\frac{1}{2}}|n-1\rangle \quad (n\neq 0) \tag{12.18}$$

$$a|0\rangle = 0 \tag{12.19}$$

互相推演。我们容易证实，它们全都可以用关系式

$$|n\rangle = (n!)^{-\frac{1}{2}}a^{\dagger n}|0\rangle \tag{12.20}$$

从矢量$|0\rangle$推出，而且它们实际上服从本征值方程

$$N|n\rangle = n|n\rangle, \tag{12.21}$$

再有它们的模方实际上等于 1，因此它们满足关系式

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'}. \tag{12.22}$$

既然N单独组成一个完全系，矢量序列(12.16)组成空间$\mathscr{E}$(也就是在所研究的这个量子体系的动力学态的空间内)的正交矢量的一个完全系。这样建造$\mathscr{E}$的内在一致性尚待证实，也就是说，我们必须确信$\mathscr{E}$的矢量全部满足希耳伯特空间的矢量的特征性公理，而联系于体系的那些物理量都是满足

合适的代数关系的观测算符。但是这些数学的严格论点将不在这里坚持(习题 12.3)。

5. {N}表象

序列(12.16)的矢量组成某个表象的基,我们就称之为{N}表象。从方程(12.17),(12.18),(12.19)和(12.20),我们容易推导算符 N, a 和 $a^\dagger$ 在这个表象中的表示矩阵。如果我们沿用惯例,把这些矩阵的行和列按量子数 n 的增大次序排列(最上面一行相应于 $n=0$,接下来一行是 $n=1$,等等;最左面的列相应于 $n=0$,接下来一列是 $n=1$,等等),我们找到的 N 的对角矩阵是

$$N=\begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots\cdots & & \\ 0 & 1 & 0 & & \\ \vdots & 0 & 2 & 0 & \\ \vdots & & 0 & 3 & 0 \\ \vdots & & & 0 & \ddots \end{pmatrix},$$

对于 a, 找到的是实矩阵

$$a=\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & & \\ \vdots & 0 & 0 & \sqrt{3} & \\ \vdots & & 0 & 0 & \sqrt{4} \\ & & & 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix},$$

只有直接位于主对角线上一条对角线上的元是非零矩阵元,对 $a^\dagger$ 找到的是其厄密共轭矩阵

$$a^\dagger=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots\cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ \vdots & & \sqrt{3} & 0 \\ \vdots & & & \sqrt{4} & 0 \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix},$$

只有直接位于主对角线下一条对角线上的元是非零矩阵元·既然量子体系的观测算符全部是 a 和 $a^\dagger$ 的函数，要在$\{N\}$表象中构成代表它们的矩阵是容易的．特别是，我们有

$$\mathscr{H} = \left(N + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \tag{12.23}$$

$$q = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}(a^\dagger + a), \tag{12.24}$$

$$p = i\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}}(a^\dagger - a). \tag{12.25}$$

$\mathscr{H}$ 在这个表象中是对角的，它的本征值是

$$\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (n = 0,1,2,\cdots,\infty).$$

因为 q 和 p 是 a 和 $a^\dagger$ 的线性函数，它们的仅有的非零矩阵元是位于主对角线邻近的两条对角线上的．我们把建立这些矩阵的任务留给读者．

6. 产生算符和消灭算符

算符 N，$a^\dagger$ 和 a 是为了便于本征值问题的解而引进的．如果 $\mathscr{H}$ 是一个一维量子化粒子的哈密顿量，这些算符没有直接的物理意义．

但是 $\mathscr{H}$ 的本征值问题还可以作另一种解释．的确，鉴于能级是等距离分布的(间距为 $\hbar\omega$)，我们可以把 $\mathscr{H}$ 看作是不可区分的微粒的体系的哈密顿量，这些微粒全部处于一个相同的动力学态，它们的能量是 $\hbar\omega$．它们的数目 N 能够变化，$\mathscr{H}$ 的各个本征态相应于一个完全确定的 N 值，因而相应于总体系的一个完全确定的能量值．因此，矢量 $|n\rangle$ 表示一个由 n 个微粒构成的态；而矢量 $|0\rangle$ 则是真空态，对于它，微粒的数目是零．当我们从态 $|n\rangle$ 转换为态 $|n+1\rangle$ 时，微粒的数目增加

一个单位，而体系的总能量增大数量 $\hbar\omega$，我们注意到真空的能量不是零，而是等于 $\frac{1}{2}\hbar\omega$；如果我们取 $\mathscr{H}-\frac{1}{2}\hbar\omega$ 而非 $\mathscr{H}$ 作为定义体系的能量的算符，这一反常是可以避免的.

按照这一解释，算符 N 表示微粒的数目，能够取 0 至 $+\infty$ 之间的所有整数值. 算符 $a^\dagger$ 把一个由 n 个微粒构成的态变换为一个 $(n+1)$ 个微粒的态：$a^\dagger$ 是一个**产生算符**. 与之相反，算符 a 把存在的微粒数目减小一个单位：a 是一个**消灭算符**.

谐振子的这一解释在量子场论和晶体及分子振动论中是广泛使用的. 譬如说，电磁场能够写成一些平面波的叠加形式，这些平面波是由它们的极化 $\boldsymbol{E}$ 和它们的波矢 $\boldsymbol{k}$ 表征的；它们的频率是 $\omega=k/c$. 经典地，各个分量的强度能够以连续的方式变化；实际上，它是通过能量为 $\hbar\omega$ 的光量子或光子而变化的. 量子化电磁场的哈密顿量是一些项的叠加，每一项涉及到由 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 表征的一种特殊型式的光子[我们用下标 S 来表示集 $(\boldsymbol{\varepsilon},\boldsymbol{k})$]：

$$H=\sum_S \mathscr{H}_S.$$

各个分哈密顿量能够写成形式

$$\mathscr{H}_S=\hbar\omega_S a_S^\dagger a_S.$$

算符 a_S 和 $a_S^\dagger$ 是互为厄密共轭的，并满足对易关系

$$[a_S,a_{S'}^\dagger]=\delta_{SS'},$$

它是关系式(12.10)的简单推广. 算符 $a_S^\dagger$ 和 a_S 分别解释为 S 型光子的产生和消灭算符(参见第二十一章).

7. {Q}表象. 厄密多项式

用波动力学的语言来说，$\mathscr{H}$ 的本征值问题在于确定数值

E，对于这些 E 值，方程

$$\mathscr{H}\psi(q)\equiv\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2}+\frac{1}{2}m\omega^2q^2\right)\psi(q)=E\psi(q)$$

在区间$(-\infty,+\infty)$的两个极限处具有正则解。如果我们把第三章（§10）的讨论应用于这个问题，我们发现满足这一条件的那些 E 值组成一个分立谱，而且对于它们中的各个值，有一个且仅有一个解（确定到最多差别一个常数）与之相对应；再者，这个解具有有限的模方。这一点与前面的研究是相当一致的，按照前述，$\mathscr{H}$ 的谱是完全分立和非简并的。求解如此阐述的本征值问题，我们将再一次找到$\mathscr{H}$的本征值的序列

$$\frac{1}{2}\hbar\omega,\frac{3}{2}\hbar\omega,\cdots,\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\cdots.$$

相应的本征函数 $\psi_n(q)\equiv\langle q|n\rangle$ 是在$\{q\}$表象中代表本征态$|n\rangle$的函数。

在下面，我们采用由变量代换(12.4)从$\{q\}$表象推演出来的$\{Q\}$表象。分别在$\{Q\}$和$\{q\}$表象中表示同一个本征态$|n\rangle$的本征函数 $u_n(Q)$ 和 $\psi_n(q)$ 明显地由关系式

$$\langle Q|n\rangle\equiv u_n(Q)=\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{1}{4}}\psi_n(q)$$

相联系。方程(12.8)是(最多差别常数 $\hbar\omega$)$\{Q\}$表象中的薛定谔方程。

本征函数 $u_0(Q)$，$u_1(Q),\cdots,u_n(Q),\cdots$是容易用关系式（12.17）和（12.19）得到的。基态的本征函数满足方程(12.19)

$$\left[\frac{d}{dQ}+Q\right]u_0(Q)=0,$$

它的归一为一的解是

$$u_0(Q)=\pi^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2}Q^2}. \qquad (12.26)$$

从(12.17)和(12.18),我们推演具有相邻本征值的那些归一本征函数之间的关系(参见附录 B,第 III 节);特别是,(12.17)的重复应用允许我们建立从函数 u_0 开始的所有本征函数.我们能够同样好地利用关系式(12.20)、而不是利用(12.17)(两者是等价的);由此得到

$$u_n(Q) = [\pi^{\frac{1}{2}}2^n(n!)]^{-\frac{1}{2}}\left(Q - \frac{d}{dQ}\right)^n e^{-\frac{1}{2}Q^2}. \qquad (12.27)$$

利用算符恒等式

$$\left(Q - \frac{d}{dQ}\right) \equiv \left(-e^{\frac{1}{2}Q^2}\frac{d}{dQ}e^{-\frac{1}{2}Q^2}\right),$$

我们能够把方程(12.27)写作(B.70)的形式,其中的 $H_n(Q)$ 按照定义(B.59)是 n 阶的厄密多项式.因此 $u_n(Q)$ 是

$$\exp\left(-\frac{1}{2}Q^2\right)$$

和一个奇偶性为$(-)^n$的 n 阶多项式的积.这些多项式的主要性质列在附录 B (§ 7)中.

II. 应用和各种性质

8. 本征函数 $u_n(Q)$ 的生成函数

作为一个应用,我们将要确定函数 $u_n(Q)$ 的**生成函数**,那是这样一个函数:

$$F(t,Q) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(Q) t^n,$$

此处 c_n 是一些合适的归一常数.鉴于 $u_n(Q)$ 代表矢量 $(n!)^{-\frac{1}{2}}a^{\dagger n}|0\rangle$ [方程(12.20)],作为Q的一个函数看待的函数 $F(t,Q)$表示矢量

$$\sum_n \frac{c_n}{(n!)^{\frac{1}{2}}}(a^\dagger t)^n|0\rangle.$$

选择

$$c_n = \frac{1}{(n!)^{1/2}},$$

$F(t,Q)$ 表示矢量 $\exp(a^\dagger t)|0\rangle$:

$$F(t,Q) = \langle Q|\exp(a^\dagger t)|0\rangle. \tag{12.28}$$

为了计算最后这个表示式,我们将利用下列引理:

引理——**如果两个算符 A, B 的对易子与它们中的各个对易:**

$$[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0,$$

则我们有恒等式

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}. \tag{12.29}$$

下面这个证明是格劳勃 (Glauber) 的.

让我们考虑有赖于参数 x 的算符

$$f(x) = e^{Ax}e^{Bx}.$$

我们有

$$\frac{df}{dx} = Ae^{Ax}e^{Bx} + e^{Ax}Be^{Bx}$$

$$= (A + e^{Ax}Be^{-Ax})f(x).$$

但是鉴于$[B,A]$与A对易

$$[B,A^n] = nA^{n-1}[B,A]$$

$$[B,e^{-Ax}] = \sum_n (-)^n \frac{x^n}{n!}[B,A^n]$$

$$= \sum_n (-)^n \frac{x^n}{(n-1)!}A^{n-1}[B,A]$$

$$= -e^{-Ax}[B,A]x,$$

因此(参见习题 8.4)

$$e^{Ax}Be^{-Ax} = B - [B,A]x,$$

所以

$$\frac{df}{dx} = (A + B + [A, B]x)f(x).$$

$f(x)$ 是这个微分方程的解，对于它，$f(0) = 1$. 既然算符$(A + B)$和$[B, A]$对易，它们在这里是能够看作为普通代数的量的. 这个微分方程能够容易地积分，并给出

$$f(x) = \exp[(A + B)x]\exp\left(\frac{1}{2}[A, B]x^2\right).$$

如果我们让 $x = 1$，就得到恒等式(12.29).

证毕

取 $A = Q\iota/\sqrt{2}$，$B = -iP\iota/\sqrt{2}$，$[A, B] = \frac{1}{2}\iota^2$，我们把恒等式(12.29)应用于算符 $\exp(a^\dagger \iota)$，也就是

$$\exp(a^\dagger \iota) = \exp[Q\iota/\sqrt{2}]\exp[-iP\iota/\sqrt{2}]\exp\left(-\frac{1}{4}\iota^2\right).$$

把这个表示式插入方程(12.28)，得

$$F(\iota, Q) = \exp\left(-\frac{1}{4}\iota^2\right)\exp[Q\iota/\sqrt{2}]\langle Q|\exp$$

$$\times[-iP\iota/\sqrt{2}]|0\rangle.$$

但是

$$\langle Q|\exp[-iP\iota/\sqrt{2}]|0\rangle = \exp\left(-\frac{\iota}{\sqrt{2}}\frac{d}{dQ}\right)u_0(Q)$$

$$= u_0\left(Q - \frac{\iota}{\sqrt{2}}\right).$$

对 u_0 用表示式(12.26)，经过一些计算，我们得到

$$F(\iota, Q) \equiv \sum_{n=0}^{\infty}\frac{u_n(Q)}{(n!)^{\frac{1}{2}}}\iota^n$$

$$= \pi^{-\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{1}{2}Q^2 + \iota Q\sqrt{2} - \frac{1}{2}\iota^2\right). \qquad (12.30)$$

9. 海森伯方程的积分

让我们**在海森伯"表象"中**考虑谐振子. 既然出现在这一节中的所有算符都是海森伯表象中的算符，我们将省去下标 H，在第八章的讨论中，下标 H 是为了使它们同薛定谔表象中的相应算符区别. 这些算符随时间演变. 我们把下标 0 加于那些在初始瞬时 $t = 0$ 所取的值.

考虑到方程(12.23)和关系式(12.14)，算符 a 和 $a^\dagger$ 的海森伯方程分别写作

$$i\hbar \frac{da}{dt} = [a, \mathscr{H}] = \hbar\omega a,$$

$$i\hbar \frac{da^\dagger}{dt} = [a^\dagger, \mathscr{H}] = -\hbar\omega a^\dagger.$$

这些方程可以容易地积分并给出

$$a(t) = a_0 e^{-i\omega t}, \tag{12.31a}$$

$$a^\dagger(t) = a_0^\dagger e^{+i\omega t}. \tag{12.31b}$$

利用关系式(12.24)和(12.25)，这些关系式给出 q 和 p 作为 a 和 $a^\dagger$ 的函数，我们有

$$q(t) = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}} (a_0^\dagger e^{i\omega t} + a_0 e^{-i\omega t}), \tag{12.32}$$

$$p(t) = \left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^{\frac{1}{2}} (a_0^\dagger e^{i\omega t} - a_0 e^{-i\omega t}). \tag{12.33}$$

如果我们用表示成初始位置 q_0 和初始动量 p_0 函数的 a_0 和 $a_0^\dagger$ 的表达式代入这些方程，则我们有

$$q(t) = q_0 \cos\omega t + \frac{1}{m\omega} p_0 \sin\omega t, \tag{12.34}$$

$$p(t) = p_0 \cos\omega t - m\omega q_0 \sin\omega t. \tag{12.35}$$

我们找到的是同经典谐振子一样的正弦函数. 特别是，平均

值$\langle q\rangle_t$,$\langle p\rangle_t$ 遵循经典运动定律

$$\langle q\rangle_t = \langle q\rangle_0 \cos\omega t + \frac{1}{m\omega}\langle p\rangle_0 \sin\omega t, \tag{12.36}$$

$$\langle p\rangle_t = \langle p\rangle_0 \cos\omega t - m\omega\langle q\rangle_0 \sin\omega t. \tag{12.37}$$

谐振子的这一性质已经在第六章中指出.

10. 经典和量子化的振子

为了阐明经典力学和量子力学之间的对应性，我们在这一节和下一节中把经典振子的运动同相应的量子力学振子的运动作比较.

$$q_{\mathrm{Cl.}} = A\sin(\omega t + \varphi),$$

$$p_{\mathrm{Cl.}} = m\omega A\cos(\omega t + \varphi).$$

它是(角)频率为ω的正弦型的振荡运动. 它依赖于两个参数A和φ. 振子的能量由关系式

$$E_{\mathrm{Cl.}} = \frac{m\omega^2 A^2}{2} \tag{12.38}$$

联系于振动的幅度A. 如果我们固定能量$E_{\mathrm{Cl.}}$，则各种可能的运动的差异就表现在相位常数φ上.

设$F_{\mathrm{Cl.}}$是体系的动力学变数.. 既然它是$q_{\mathrm{Cl.}}$和$p_{\mathrm{Cl.}}$的函数，$F[q_{\mathrm{Cl.}}(t), p_{\mathrm{Cl.}}(t)]$随时间以频率$\omega$周期性地(但不一定是正弦型地)变化. 除了相位以外，$F_{\mathrm{Cl.}}$的时间依赖性对于相等能量的两种运动是相同的. $F_{\mathrm{Cl.}}$对相同能量的所有运动(微正则系综)所取的平均$\overline{F_{\mathrm{Cl.}}}$是对相位常数履行平均而得到的；$\overline{F_{\mathrm{Cl.}}}$与时间无关，而且等于$\overline{F_{\mathrm{Cl.}}}$在这些运动的任何一个中的取值对一个周期$2\pi/\omega$的平均. 我们特别发现

$$\bar{q}_{\mathrm{Cl.}} = \bar{p}_{\mathrm{Cl.}} = 0, \tag{12.39}$$

$$\overline{q^2_{\mathrm{Cl.}}} = \frac{A^2}{2} = \frac{E_{\mathrm{Cl.}}}{m\omega^2}, \tag{12.40}$$

$$\overline{p^2_{\mathrm{Cl.}}} = m^2\omega^2\overline{q^2_{\mathrm{Cl.}}} = mE_{\mathrm{Cl.}} \tag{12.41}$$

(一个振子的平均动能和平均势能是相等的).

让我们看看这一点如何同处在定态的量子化振子的行为相比较. 处在态 $|n\rangle$ 时,量子化振子具有完全确定的能量,它在时间上是恒定的: $\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = E_n$. 另一方面, 位置 q 和动量 p 的观测算符不具有精确值. 我们只能在履行这样一种测量时,在各种可能事件中,确定这些量的这个或那个测量结果的统计分布. 既然这个态是定态, 这些统计分布在时间上就是恒定的. 特别是, q 和 p 的平均值分别等于观测算符 q 和 p 在$\{N\}$表象中的秩数为 n 的对角元:

$$\langle n|q|n\rangle = \langle n|p|n\rangle = 0. \tag{12.42}$$

q^2 和 p^2 的平均值容易由把这些算符表成 a 和 $a^\dagger$ 的函数 [方程(12.24)和(12.25)]并利用关系式(12.17)和(12.19)而得到. 我们有

$$\langle n|q^2|n\rangle = \frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega}\langle n|(a^\dagger a + aa^\dagger)|n\rangle = \frac{E_n}{m\omega^2}, \tag{12.43}$$

$$\langle n|p^2|n\rangle = \frac{1}{2}m\hbar\omega\langle n|(a^\dagger a + aa^\dagger)|n\rangle = mE_n. \tag{12.44}$$

对应原理要求(参见习题 12.4),在 $n\to\infty$ 的极限下, 平均值的表示式 (12.42), (12.43)和(12.44)分别变得与同样能量值 ($E_n = E_{\mathrm{Cl.}}$) 的经典表示式(12.39), (12.40)和(12.41)全同. 这一全同性对于所有的 n 值(甚至较小的那些)都是严格地正确的,这个事实是谐振子的特征性质.

我们顺便说及,处在态$|n\rangle$时

$$\Delta p\cdot\Delta q = \frac{E_n}{\omega} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar, \tag{12.45}$$

与位置-动量不确定关系相一致.

11. 极小波包的运动和经典极限

考虑一维波包

$$f(q)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\langle p\rangle q-\frac{m\omega}{2\hbar}(q-\langle q\rangle)^2\right]. \quad (12.46)$$

这是一个极小波包(习题 4.4): 它表示一个粒子，在位形空间中位于它的平均位置 $\langle q\rangle$ 附近、均方根偏差为 $\Delta q=(\hbar/2m\omega)^{\frac{1}{2}}$；而在动量空间中位于它的平均位置 $\langle p\rangle$ 附近、均方根偏差为 $\Delta p=(\hbar m\omega/2)^{\frac{1}{2}}$. 如果这个粒子受制于哈密顿量 $\mathscr{H}$，我们能够证明(习题 12.6)，这样一个波包在时间的进程中其大小保持极小，并以频率 ω 振荡. 更为确切地说，q 的统计分布 $\rho(q,t)$ 按照规律

$$\rho(q,t)\equiv|f(q,t)|^2=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}(q-\langle q\rangle_t)^2\right]$$

变化. 它没有畸变地振荡，它的中心 $\langle q\rangle_t$ 作经典理论所预告的正弦运动. p 的统计分布显示出类似的行为.

另一方面，$\mathscr{H}$ 的统计分布在时间上是恒定的. 发现体系处在能量 $\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ 的态的几率在每个瞬时都等于[习题(12.6)]

$$e^{-E_{\mathrm{Cl.}}/\hbar\omega}\frac{(E_{\mathrm{Cl.}}/\hbar\omega)^n}{n!}.$$

我们利用记号

$$E_{\mathrm{Cl.}}=\frac{1}{2m}(\langle p\rangle^2+m^2\omega^2\langle q\rangle^2).$$

从这个几率定律，我们容易推演出能量的平均值

$$\begin{aligned}\langle E\rangle&=e^{-E_{\mathrm{Cl.}}/\hbar\omega}\sum_{n=0}^{\infty}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\frac{(E_{\mathrm{Cl.}}/\hbar\omega)^n}{n!}\\&=E_{\mathrm{Cl.}}+\frac{1}{2}\hbar\omega,\end{aligned} \quad (12.47)$$

而它的均方根偏差为

$$\Delta E = \sqrt{\langle \mathscr{H}^2 \rangle - \langle \mathscr{H} \rangle^2} = \sqrt{\hbar\omega E_{\mathrm{Cl.}}}. \quad (12.48)$$

这个波包为我们提供了测不准关系的一个好例证.

它是以这样一种方法选择的，以致偏差的积 $\Delta p \cdot \Delta q$ 保持恒定并等于极小值 $\frac{1}{2}\hbar$.

就时间-能量关系而论，我们能够把 ΔE 同 q 的统计分布的演变率的特征时间 τ_q 相比较. τ_q 是分布的中心 $\langle q \rangle_t$ 行进一段等于它的扩展 Δq 的距离所需的时间；鉴于中心的速度是 $\langle p \rangle_t / m$，我们有

$$\tau_q = \frac{m}{\langle p \rangle_t} \Delta q = \frac{1}{\langle p \rangle_t} (\hbar m / 2\omega)^{\frac{1}{2}}.$$

当 $\langle p \rangle_t$ 达到它的最大值 $(2mE_{\mathrm{Cl.}})^{\frac{1}{2}}$ 时，τ_q 周期性地通过一个极小. 因而我们有

$$\tau_{q\min.} = \frac{1}{2}\hbar \left(\frac{1}{\hbar\omega E_{\mathrm{Cl.}}}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

按照(12.48)，

$$\tau_{q\min.} \Delta E = \frac{1}{2}\hbar, \quad (12.49)$$

这与时间-能量测不准关系(8.47)相一致.

波包中心的振荡幅度 A 由经典关系(12.38)给出:

$$A = (2E_{\mathrm{Cl.}}/m\omega^2)^{\frac{1}{2}}.$$

在幅度比波包的扩展 $(\hbar/2m\omega)^{\frac{1}{2}}$ 大得很多的极限下，在我们能够把量级为 $(\hbar/2m\omega)^{\frac{1}{2}}$ 的长度认为是可以忽略的程度上，按照规律 $\langle q \rangle_t$ 振荡的一个点粒子的**经典图画**为现象提供的描述是令人满意的. 这个极限正好就是对应原理所需的、量子数很大的极限. 的确，它是当 $E_{\mathrm{Cl.}} \gg \hbar\omega$ 时实现的；现在，对波包的分量有显著贡献的量子化能态的数目具有能量展开

ΔE 同能级间距之比的量级，也就是

$$\frac{\Delta E}{\hbar\omega}=\left(\frac{E_{\mathrm{Cl.}}}{\hbar\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\gg 1.$$

当然，这幅图画同样假定，我们是把动量上的弥散 $\Delta p=(\hbar m\omega/2)^{\frac{1}{2}}$ 和能量上的弥散 $\Delta E=(\hbar\omega E_{\mathrm{Cl.}})^{\frac{1}{2}}$ 都作为可以忽略的量处理的。就能量而论，我们在这个精度上具有 $\langle E\rangle\approx E_{\mathrm{Cl.}}$。的确，

$$\langle E\rangle-E_{\mathrm{Cl.}}=\frac{1}{2}\hbar\omega\ll\Delta E.$$

因而我们有相当理由把相应的经典粒子的能量 $E_{\mathrm{Cl.}}$ 认为是属体系所有的。

12. 处于热力学平衡的谐振子

考虑一个与温度 T 的热库处于热平衡的谐振子。它的动力学态不是一个纯态，而是由密度算符

$$\rho=\frac{e^{-\mathscr{H}/kT}}{\mathrm{Tr}e^{-\mathscr{H}/kT}}\tag{12.50}$$

代表的一个统计混合(遵循玻尔兹曼定律)。我们将要检查这个混合的某些性质。

首先让我们计算**配分函数**

$$Z(\mu)=\mathrm{Tr}e^{-\mu\mathscr{H}}.$$

迹的计算在 $\mathscr{H}$ 为对角的表象中是容易进行的：

$$Z(\mu)=\sum_{n=0}^{\infty}\exp\left[-\mu\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\right]$$

$$=e^{-\frac{1}{2}\mu\hbar\omega}\sum_{n=0}^{\infty}(e^{-\mu\hbar\omega})^{n},$$

对右边的几何级数求和以后，得出

$$Z(\mu)=\frac{e^{-\frac{1}{2}\mu\hbar\omega}}{1-e^{-\mu\hbar\omega}}. \tag{12.51}$$

平均能量

$$\langle E\rangle \equiv \mathrm{Tr}\rho\mathscr{H}$$

是应用方程(8.84)从配分函数推演的. 我们有

$$\ln Z=-\frac{1}{2}\mu\hbar\omega-\ln(1-e^{-\mu\hbar\omega}),$$

由此得出

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= -\frac{\partial(\ln Z)}{\partial\mu}\Big|_{\mu=1/kT}\\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega\coth\frac{\hbar\omega}{2kT}\\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega+\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1}.\end{aligned} \tag{12.52}$$

这正好就是对于量子化振子的平均能量的普朗克公式（最多差常数$\frac{1}{2}\hbar\omega$).

温度非常低($kT\ll\hbar\omega$)时,振子几乎必然始终处在它的基态

$$\langle E\rangle\approx\frac{1}{2}\hbar\omega.$$

温度非常高（$kT\gg\hbar\omega$）时，平均能量趋向于由经典的麦克斯韦-玻尔兹曼统计给出的能量:

$$\langle E\rangle\approx kT.$$

作为处于热力学平衡的量子化振子的最后一个性质，让我们提及布洛赫的下述定理:

定理——**动量和位置的结定组合 $\alpha q+\beta p$ 的几率定律是高斯型的.**

为了证明这个定理，我们计算这一几率定律的特征函数 $\varphi(\xi)$. 根据定义 $\varphi(\xi)$ 是 $\exp[i\xi(\alpha q+\beta p)]$ 的平均值:

$$\varphi(\xi)=\mathrm{Tr}\rho e^{i\xi(\alpha q+\beta p)}. \tag{12.53}$$

我们将在 $\{N\}$ 表象中计算这个迹，ρ 在那个表象中是对角的.

先计算量

$$g_n(\xi)=\langle n|e^{i\xi(\alpha q+\beta p)}|n\rangle. \tag{12.54}$$

我们有[方程(12.24)和(12.25)]

$$\alpha q+\beta p=\gamma a+\gamma^* a^\dagger,$$

其中

$$\gamma=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{1}{2}}(a-im\omega\beta).$$

按照恒等式(12.29),

$$\exp[i\xi(\alpha q+\beta p)]=\exp[i\xi(\gamma a+\gamma^* a^\dagger)]$$
$$=\exp\left(\frac{1}{2}\xi^2\gamma\gamma^*\right)\exp(i\xi\gamma a)\exp$$
$$\times(i\xi\gamma^* a^\dagger),$$

由此

$$g_n(\xi)=\exp\left(\frac{1}{2}\xi^2\gamma\gamma^*\right)\langle n|\exp(i\xi\gamma a)\exp(i\xi\gamma^* a^\dagger)|n\rangle.$$

展开指数并考虑到关系式(12.20),我们得到

$$e^{i\xi\gamma^* a^\dagger}|n\rangle=\sum_{t=0}^{\infty}\left(\frac{(n+t)!}{n!}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{(i\xi\gamma^*)^t}{t!}|n+t\rangle$$

$$\langle n|e^{i\xi\gamma a}=\sum_{S=0}^{\infty}\left(\frac{(n+S)!}{n!}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{(i\xi\gamma)^S}{S!}\langle n+S|.$$

在这两个矢量的标积中，二重和的交叉项由于正交关系而全部为零;因此最后有

$$g_n(\xi)=e^{\frac{1}{2}\xi^2\gamma\gamma^*}\sum_{S=0}^{\infty}\frac{(-\xi^2\gamma\gamma^*)^S}{(S!)^2}\frac{(n+S)!}{n!}. \tag{12.55}$$

让我们设

$$x = -\xi^2\gamma\gamma^*, \quad y = e^{-\hbar\omega/kT}. \tag{12.56}$$

在{N}表象中，ρ 是对角的，而它的第 n 个对角元等于

$$\begin{aligned}\rho_n \equiv \langle n|\rho|n\rangle &= \frac{e^{-(n+\frac{1}{2})\hbar\omega/kT}}{Z(1/kT)} \\ &= (1-y)y^n.\end{aligned} \tag{12.57}$$

从方程(12.53)到(12.57)，我们求得

$$\varphi(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \rho_n g_n(\xi)$$

$$= (1-y)e^{-\frac{1}{2}x}\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{S=0}^{\infty}\frac{(n+S)!}{n!(S!)^2}x^S y^n.$$

这个二重级数能够精确地求和．对 n 的和可以用级数展开式

$$\begin{aligned}\frac{1}{(1-y)^{S+1}} &= 1 + (S+1)y \\ &\quad + \frac{(S+1)(S+2)}{2!}y^2 + \cdots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(S+n)!}{S!n!}y^n\end{aligned}$$

先进行．因此

$$\begin{aligned}\varphi(\xi) &= e^{-\frac{1}{2}x}\sum_{s}\frac{1}{S!}\left(\frac{x}{1-y}\right)^S \\ &= \exp\left[x\left(\frac{1}{1-y}-\frac{1}{2}\right)\right].\end{aligned}$$

考虑到 x 和 y 的定义，上式可以写成

$$\varphi(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\sigma\xi^2}, \tag{12.58}$$

其中

$$\sigma = \gamma\gamma^*\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right). \tag{12.59}$$

既然这个分布的特征函数是高斯型的，几率定律当然也是高斯型的：它的均方偏差是 σ。

证毕

III. 多维各向同性谐振子

13. p 维各向同性振子的一般处理

p 维各向同性谐振子是具有哈密顿量

$$\mathscr{H} = \sum_{i=1}^{p} \mathscr{H}_i \tag{12.60}$$

$$\mathscr{H}_i = \frac{1}{2m}(p_i^2 + m^2\omega^2 q_i^2) \tag{12.61}$$

的 p 维体系。

设 $\mathscr{E}_1$ 是与变量对 (p_1, q_1) 有关的那些动力学态的空间，$\mathscr{E}_2$ 是与变量对 (p_2, q_2) 有关的那些动力学态的空间，等等。所考虑的体系的动力学态的空间 $\mathscr{E}$ 是空间 $\mathscr{E}_1, \mathscr{E}_2, \cdots, \mathscr{E}_p$ 的张量积：

$$\mathscr{E} = \mathscr{E}_1 \otimes \mathscr{E}_2 \otimes \cdots \otimes \mathscr{E}_p. \tag{12.62}$$

让我们用 $|n_i\rangle$（i 固定，$n_i = 0, 1, \cdots, \infty$）来表示看作空间 $\mathscr{E}_i$ 的算符的哈密顿量 $\mathscr{H}_i$ 的本征矢；它们组成 $\mathscr{E}_i$ 中的一个完全正交归一系。在下面，我们假定它们的相对相位是以这样一种方法选择的，以便满足用 i 型变量有关的消灭和产生算符写下的关系式 (12.17) 到 (12.20)。由分别属于空间 $\mathscr{E}_1, \mathscr{E}_2, \cdots, \mathscr{E}_p$ 的 p 个矢量的张量积组成的矢量

$$|n_1, n_2, \cdots, n_p\rangle \equiv |n_1\rangle |n_2\rangle \cdots |n_p\rangle$$
$$(n_1 = 0, 1 \cdots, \infty; n_2 = 0, 1, \cdots, \infty; \cdots; n_p = 0, 1, \cdots \infty) \tag{12.63}$$

组成$\mathscr{E}$中的一个完全正交归一系[1]. 显然,这些矢量是$\mathscr{H}$的本征矢. 再者,鉴于

$$\mathscr{H}_1|n_1\rangle=\left(n_1+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n_1\rangle,$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$\mathscr{H}_p|n_p\rangle\equiv\left(n_p+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n_p\rangle,$$

我们有

$$\mathscr{H}|n_1\cdots n_p\rangle\equiv(\mathscr{H}_1+\cdots+\mathscr{H}_p)|n_1\cdots n_p\rangle$$
$$=\left(n_1+\cdots+n_p+\frac{1}{2}p\right)\hbar\omega|n_1\cdots n_p\rangle.$$

我们组成的$\mathscr{H}$的这个基的矢量是用p个量子数n_1, $n_2,\cdots,n_p$标记的,它们能够取从0到$+\infty$的所有整数值. 然而,相应的能量本征值

$$\left(n_1+\cdots+n_p+\frac{1}{2}p\right)\hbar\omega$$

仅依赖于这p个数之和

$$n=n_1+n_2+\cdots+n_p.$$

对于一个给定的整数值$n(\geq 0)$,对于这套数目$n_1, n_2, \cdots, n_p$存在有

$$C^n_{n+p-1}\equiv\frac{(n+p-1)!}{n!(p-1)!}\qquad(12.64)$$

个不同的可能值. 本征值$\left(n+\frac{1}{2}p\right)\hbar\omega$因而是$C^n_{n+p-1}$度简并的.[2]

---

1) 在表象$\{q\}\equiv\{q_1q_2\cdots q_p\}$中,矢量$|n_1n_2\cdots n_p\rangle$是由积
$\langle q_1|n_1\rangle\langle q_2|n_2\rangle\cdots\langle q_p|n_p\rangle\equiv\psi_{n_1}(q_1)\psi_{n_2}(q_2)\cdots\psi_{n_p}(q_p)$
表示的.

2) 事实上,把n个不可区别的物体放进p个空格时,($p\geq 0$的整数,其和等于n,)有多少种区别得开的排列就有多少套不同的$(n_1,n_2,\cdots,n_p)$.

让我们引进 i 型量子的消灭和产生算符

$$a_i = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} qi + i(2m\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}} p_i,$$
$$a_i^\dagger = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} q_i - i(2m\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}} p_i. \tag{12.65}$$

它们满足对易关系[参见关系式(12.10)]

$$\begin{aligned} &[a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 \\ &[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij} \end{aligned} \quad (i,j = 1,\cdots,p). \tag{12.66}$$

与上面所给的矢量$|n_i\rangle$|的定义相一致，矢量 $|n_1\cdots n_p\rangle$ 满足关系式(12.17)到(12.20)的那些普遍化关系式. 特别是,如果我们用 $|0\rangle$ 来记基态的本征矢:

$$|0\rangle \equiv |\underbrace{0\cdots\ \cdots 0}_{p\text{个}}\rangle,$$

我们能够写下

$$a_1|0\rangle = a_2|0\rangle = \cdots = a_p|0\rangle = 0, \tag{12.67}$$
$$|n_1\cdots n_p\rangle = (n_1!\cdots n_p!)^{-\frac{1}{2}} a_1^{\dagger n_1}\cdots a_p^{\dagger n_p}|0\rangle. \tag{12.68}$$

观测算符

$$N_i \equiv a_i^\dagger a_i (i = 1,2,\cdots,p) \tag{12.69}$$

各有一个由非负整数的序列组成的谱; 它们分别被解释为 1, 2, …, p 型量子的数目. 它们的和

$$N \equiv \sum_{i=1}^{p} N_i$$

是量子的总数. 我们有

$$\mathscr{H} = \left(N + \frac{1}{2}p\right)\hbar\omega.$$

显而易见, $N_1, N_2, \cdots, N_p$ 组成对易观测算符的一个完全系, 而它们的基恰恰就是我们刚刚组成的 $\mathscr{H}$ 的基.

显然不是只有运动常数 N_i 才组成一个完全系. 任何形

如 $a_i a_j^\dagger$ 的算符与$\mathscr{H}$对易；通过这一型式的算符的线性组合，以及它们的伴的线性组合，我们能够组成 p^2 个独立的厄密算符．在这些 p^2 个运动常数的函数中间，存在有对易观测算符的好几个完全系．我们将在 $p=2$ 和 $p=3$ 的两种特殊情况下阐明这一点．

14. 两维各向同性振子

我们这里的两维体系具有哈密顿量

$$\mathscr{H}=\frac{1}{2m}(p_1^2+m^2\omega^2q_1^2)+\frac{1}{2m}(p_2^2+m^2\omega^2q_2^2).$$

前一节的研究适用于这一特殊情况．下表给出$\mathscr{H}$的本征值(第一列)以及 N_1 和 N_2 的一套共同本征矢(第三列)，N_1 和 N_2 的本征矢各自张成自己的子空间：

$\hbar\omega$	1	$\|00\rangle$
$2\hbar\omega$	2	$\|10\rangle,\|01\rangle$
$3\hbar\omega$	3	$\|20\rangle,\|11\rangle,\|02\rangle$
⋯⋯	⋯⋯	⋯⋯
$(n+1)\hbar\omega$	$n+1$	$\|n0\rangle,\|n-11\rangle,\cdots,\|n-SS\rangle,\cdots\|0n\rangle.$
⋯⋯	⋯⋯	⋯⋯

(12.70)

角动量算符 L，由

$$L\equiv\frac{1}{\hbar}(q_1p_2-q_2p_1)=i(a_1a_2^\dagger-a_1^\dagger a_2) \tag{12.71}$$

定义，是一个运动常数．我们将证明N和L组成对易观测算符的另一个完全系．为此目的，我们引进算符

$$\begin{aligned}A_\pm&=\frac{1}{2}\sqrt{2}\,(a\mp ia_2),\\ A_\pm^\dagger&=\frac{1}{2}\sqrt{2}\,(a_1^\dagger\pm ia_2^\dagger).\end{aligned} \tag{12.72}$$

这些算符满足一些与 a 同 $a^\dagger$ 之间的关系式(12.66)全同的对易关系：

$$\begin{aligned}&[A_r, A_s] = [A_r^\dagger, A_s^\dagger] = 0\\&[A_r, A_s^\dagger] = \delta_{rs}\end{aligned} \qquad (r = +\text{或}-;s = +\text{或}-). \tag{12.73}$$

因而 A_+ 和 $A_+^\dagger$ 被解释为+型量子的消灭和产生算符，A_- 和 $A_-^\dagger$ 为一型量子的消灭和产生算符；遵循这一解释，算符

$$A_+ = A_+^\dagger A_+ \text{ 和 } N_- \equiv A_-^\dagger A_- \tag{12.74}$$

分别表示“+量子”和“一量子”的数目．既然对易关系(12.73)与关系式(12.66)全同，组成 N_+ 和 N_- 的共同本征矢的问题在数学上全同于组成 N_1 和 N_2 的共同本征矢的问题．所以，N_+ 和 N_- 各以非负整数的序列

$$n_+ = 0,1,2,\cdots \quad n_- = 0,1,2,\cdots$$

作为它们的谱，而这两个观测算符组成对易观测算符的一个完全系：对于各对量子数 (n_+, n_-)，有一单个共同本征矢与之相对应(最多差别一个常数)．事实上，关系式(12.67)意味着

$$A_+|00\rangle = A_-|00\rangle = 0. \tag{12.75}$$

因此表(12.70)的矢量 $|00\rangle$ 是基态 $(n_+ = n_- = 0)$ 的本征矢．矢量

$$|n_+n_-\rangle \equiv (n_+!n_-!)^{-\frac{1}{2}} A_+^{\dagger n_+} A_-^{\dagger n_-}|00\rangle \tag{12.76}$$

组成 N_+ 和 N_- 的一个共同的完全正交归一本征系：

$$N_+|n_+n_-\rangle = n_+|n_+n_-\rangle,$$
$$N_-|n_+n_-\rangle = n_-|n_+n_-\rangle.$$

现在，如果我们把 N 和 L 表成 A 和 $A^\dagger$ 的函数，经过某些计算，我们有

$$N = N_+ + N_-,$$
$$L = N_+ - N_-.$$

既然观测算符 N_+ 和 N_- 组成对易观测算符的一个完全系，它们的和 N 和它们的差 L 也具有同样的性质．这就是我们所要证明的．

最后，我们还可以有 $\mathscr{H}$ 的本征矢的另一个完全正交归一系，也就是 $|n_+n_-\rangle$ 这套矢量．它们满足本征值方程

$$\mathscr{H}|n_+n_-\rangle = (n_+ + n_- + 1)\hbar\omega|n_+n_-\rangle, \tag{12.77}$$

$$L|n_+n_-\rangle = (n_+ - n_-)|n_+n_-\rangle. \tag{12.78}$$

让我们检查 L 与 A 和 $A^\dagger$ 的对易关系．简单的计算给出：

$$[L, A_\pm^\dagger] = \pm A_\pm^\dagger, \tag{12.79}$$

$$[L, A_\pm] = \mp A_\pm. \tag{12.80}$$

结果，当它们作用在 L 的本征矢时，$A_+^\dagger$ 和 A_- 使 L 增大一个单位，$A_-^\dagger$ 和 A_+ 使 L 减小一个单位．这一点可以用各种方式来解释．在电荷场的量子论中，场是作为一套两维的各向同性振子出现的，N_+ 是带正电荷的粒子数，N_- 是负电荷的粒子数，而 L 是总电荷(最多差别一个常数)．遵循这一解释，$A_+^\dagger$ 产生一个正电荷，A_- 消灭一个负电荷；因而两者都使电荷增大一个单位；类似地，$A_-^\dagger$ 和 A_+ 使得电荷减小一个单位．

在晶体振动论中，点阵的运动同样由一套各向同性的两维振子表示；振荡的量子称为**声子**．用型 1 和型 2 的声子作出的表象相应于驻波；用＋型和－型作出的表象相应于在一个或另一个方向上“传播着”的行波．在(中子，X 射线，等等)被一个晶格散射的问题中，行波的表象最适合于计算的目的．

15. 三维各向同性振子

三维谐振子是局域于中心势中同离中心的距离平方成正比的一个粒子．它的哈密顿量是

$$\mathscr{H} = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\boldsymbol{r}^2. \tag{12.81}$$

$\mathscr{H}$ 是三项之和：

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_x + \mathscr{H}_y + \mathscr{H}_z$$

$$\mathscr{H}_i = \frac{1}{2m}(p_i^2 + m^2\omega^2 r_i^2). \qquad (i = x, y \text{ 或 } z) \quad (12.82)$$

按照我们在第十二章 §13 中的研究，$\mathscr{H}$ 的本征值由公式

$$\left(m + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \quad (n = 0,1,2,\cdots,\infty) \quad (12.83)$$

给出，而且是 $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$ 度简并的。观测算符 N_x，N_y，N_z 组成运动常数的一个完全系，而它们的基的本征矢 $|n_x n_y n_z\rangle$ 由三个相应的本征值 n_x, n_y 和 n_z 标记。这些矢量是由公式

$$|n_x n_y n_z\rangle = (n_x! n_y! n_z!)^{-\frac{1}{2}} a_x^{\dagger n_x} a_y^{\dagger n_y} a_z^{\dagger n_z} |000\rangle \quad (12.84)$$

从基态矢量 $|000\rangle$ 推出的，后者本身由三个方程

$$a_x|000\rangle = a_y|000\rangle = a_z|000\rangle = 0 \quad (12.85)$$

定义(最多差别一个常数)。

让我们引进角动量

$$\boldsymbol{l} \equiv \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}.$$

按照中心势的哈密顿量的著名性质(第九章)，$\mathscr{H}$，$\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 同样构成对易观测算符的一个完全系。这三个观测算符的共同本征矢 $|nlm\rangle$ 由三个量子数 n, l, m 标记，而 $\mathscr{H}$，$\boldsymbol{l}^2$ 和 l_z 的相应的本征值分别是 $\left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$，$l(l+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$。矢量 $|nlm\rangle$ 组成 $\mathscr{H}$ 的本征矢的一个完全正交归一系。它们是由一次么正变换从矢量 $|n_x n_y n_z\rangle$ 推导出来的。这些矢量的明

晰解释将不在这里给出[1]。我们将只来确定量子数 l 和 m 当人们固定 n 时所取的值；换句话说，我们试图要找的是相应于各个能级的、角动量的各种不同的可能态。

这里考虑的算符 l_z 同前一节的算符 L 之间的极大的相似性使人想起一种类似的变数代换。让我们引进由

$$A_1 = \frac{1}{2}\sqrt{2}\,[a_x - ia_y]$$

$$A_0 = a_z \tag{12.86}$$

$$A_{-1} = \frac{1}{2}\sqrt{2}\,[a_x + ia_y]$$

定义的算符 $A_m(m = 1,0,-1)$，以及厄密共轭算符 $A_m^\dagger$。A_m 和 $A_m^\dagger$ 满足类似于关系式(12.73)的对易关系，能够分别被解释为 m 型量子的消灭和产生算符。m 型量子的数目是由算符 $N_m = A_m^\dagger A_m$ 表示的。显然，N_1，N_0 和 N_{-1} 组成对易观测算符的一个完全系，而

$$\mathscr{H} = \left(N_1 + N_0 + N_{-1} + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega,$$

$$N = N_1 + N_0 + N_{-1}.$$

对于本征值的各个三重组 (n_1, n_0, n_{-1})，有这三个观测算符的一个共同本征矢，也就是矢量

$$|n_1 n_0 n_{-1}\rangle = (n_1!\,n_0!\,n_{-1}!)^{-\frac{1}{2}} A_1^{\dagger n_1} A_0^{\dagger n_0} A_{-1}^{\dagger n_{-1}} |000\rangle$$

与之相对应。这些矢量的集组成 $\mathscr{H}$ 的本征矢的一个完全系。

---

1) 在{r}表象中，$|n_x n_y n_z\rangle$ 是由波函数 $\psi_{n_x}(x)$，$\psi_{n_y}(y)$，$\psi_{n_z}(z)$ 表示的；$|nlm\rangle$ 是由函数

$$\Psi_{nlm}(r) = \frac{y_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\theta,\varphi)$$

表示的，$y_{nl}(r)$ 是微分方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2\right] y_{nl} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega y_{nl}$$

在原点等于零的解(它在无限远处是正则的)。

的确，

$$\mathscr{H}|n_1n_0n_{-1}\rangle=\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega|n_1n_0n_{-1}\rangle,$$

$$n=n_1+n_0+n_{-1}.$$

我们刚才组成的矢量，一般说来，不是 l^2 的本征矢，但是它们是 l_z 的本征矢，因为

$$l_z=(N_1-N_{-1})\hbar, \tag{12.87}$$

结果

$$m=n_1-n_{-1}. \tag{12.88}$$

考虑 $\mathscr{H}$ 的相应于本征值 $\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$ 的那些本征矢的子空间. 张成它的这 $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$ 个矢量 $|n_1n_0n_{-1}\rangle$ 组成 l_z 的本征矢的一个完全正交归一系 $(n_1+n_0+n_{-1}=n)$. 按照方程(12.88)，量子数 m 可以取从 $-n$ 到 $+n$ 的所有整数值. 要确定相应于每一个 m 值的线性独立矢量的数目 c_m 是容易的；结果由下表给出：

$\lvert m\rvert=$	n	$n-1$	$n-2\cdots n-2s$	$n-(2s+1)$	$n-(2s+2)\cdots$
$c_m=$	1	1	$2\cdots s+1$	$s+1$	$s+2\cdots$

(12.89)

现在，按照角动量的性质，对于 l^2 的各个本征值，亦即对于各个 l 值，有某些矢量系与之相对应，它们由 $(2l+1)$ 个角动量完全确定为 (l_m) 的矢量组成，m 在各系中取包含在 $-l$ 到 $+l$ 之间的 $(2l+1)$ 个整数值. 设 d_l 是这个数目. 显然有

$$c_m=\sum_{l\geqslant m}d_l,$$

因此

$$d_l=c_l-c_{l+1}.$$

查阅表 12.89，我们见到，对于 $l = n, n-2, \cdots, n-2s, \cdots$，也就是说，对于 l 的包含在 0 同 n 之间(极限包括在内)的、宇称为$(-)^n$ 的所有整数值，$d_l = 1$，而对于所有其它的 l 值，$d_l = 0$.

最后，对于能量的各个本征值 $\left(n+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$，有角动量完全确定为$(l_m)$的 $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$ 个态与之相对应. 对各个可能的 l 值，存在有 $(2l+1)$ 个本征态，它们分别相应于 $(2l+1)$ 个从 $-l$ 到 $+l$ 之间变化的 m 值. l 可以取的那些值是

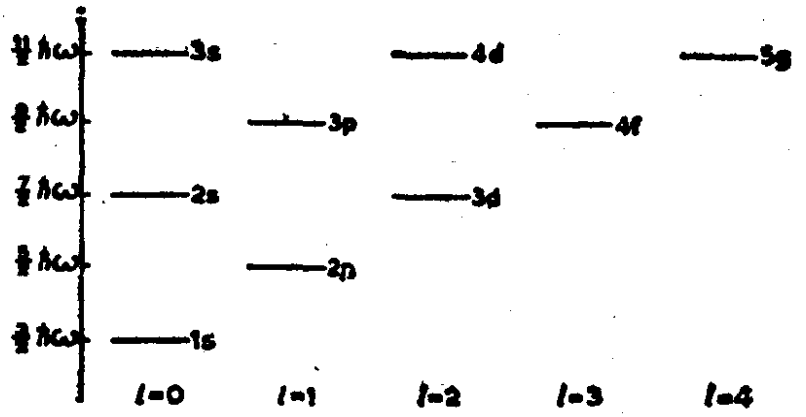

图 12.1　三维谐振子的谱.

$n, n-2, \cdots, 0$ 如 $(-)^n = 1$ $\left[\frac{1}{2}(n+2)\text{个不同的值}\right]$

$n, n-2, \cdots, 1$ 如 $(-)^n = -1\left[\frac{1}{2}(n+1)\text{个不同的值}\right]$.

图 12.1 的光谱图表示三维各向同性谐振子的基态和开始几个激发态. 把这个图同氢原子的图(图 11.1)相比较是有启发性的.

练 习 和 问 题

1.设 a 和 $a^\dagger$ 是两个这样的厄密共轭算符，以致有 $[a,a^\dagger]=1$. 我们设 $N=a^\dagger a$. 求证:

(i) $[N,a^p]=-pa^p$; $[N,a^{\dagger p}]=+pa^{\dagger p}$($p$ 是>0 的整数);

(ii) a 和 $a^\dagger$ 的代数函数中只有 N 的函数是与 N 对易的.

2.证明习题 12.1 的算符 a 和 $a^\dagger$ 没有逆算符.

3.构出在 $\{N\}$ 表象中代表算符 q 和 p 的矩阵(第十二章 § 5 的记号). 证实它们是厄密的，且满足对易关系(12.2). 在这个表象中建立 q 的本征值问题;证明 q 的谱是非简并和连续的，并从 $-\infty$ 扩展到 $+\infty$. 明晰地构成相应于本征值 0 的本征矢.

4.我们希望把处在态 $|n\rangle$ 的一个量子化振子的性质与同样能量的经典振子的微正则系综的性质(第十二章 § 10)作比较. 证明变量 q 在那个量子态的统计分布呈显出振荡，n 越大，这种振荡越是密集; 再证明在 $n\to\infty$ 的极限下，它对好几个振荡的平均值趋向于经典振子的系综的相应分布(利用 WKB 方法).

5.设 $\chi_0,\tilde{\omega}_0,\eta_0$ 分别是那些联系于一个谐振子的波包的平均值

$$\chi=\langle q^2\rangle-\langle q\rangle^2,\quad \tilde{\omega}=\langle p^2\rangle-\langle p\rangle^2,\quad \eta=\langle pq+qp\rangle-2\langle p\rangle\langle q\rangle$$

的初始值. 确立这些平均值的演变规律(作为时间的函数). 证明它们是 $A+B\cos 2\omega t+c\sin 2\omega t$ 形式的函数，再证当且仅当

$$\eta_0=0,\quad \tilde{\omega}_0=m^2\omega^2\chi_0$$

时，χ 和 $\tilde{\omega}$ 才保持恒定.

6.谐振子的态在时刻零是由极小波包

$$f(q)=(2\pi\sigma)^{-1/4}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\langle p\rangle q-\frac{(q-\langle q\rangle)^2}{4\sigma}\right]$$

表示的. 证明当且仅当 $\sigma=\hbar/2m\omega$ 时，这个波包才在时间的进程中保持极小(参见习题 12.5). 我们进而假设这一条件是满足的. 证明 $f(q)$ 是代表矢量

$$|f\rangle=\exp\left(\frac{i}{\hbar}\langle p\rangle q\right)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\langle q\rangle p\right)|0\rangle$$

的波函数. 由此推断[利用恒等式(12.29)]函数 $f(q,t)$ 等于(最多差别

一个相因子)在 $f(q)$ 中把时刻 0 的平均值 $\langle q\rangle$, $\langle p\rangle$ 代之以它们在时刻 t 的值而得到的那个表示式. 确定 $|f\rangle$ 用哈密顿量的本征矢级数展开的公式中的系数 c_n,并证明

$$|c_n|^2 = e^{-\alpha}\frac{\alpha^n}{n!}$$

$$\left[\alpha = E_{\mathrm{Cl.}}/\hbar\omega;\ E_{\mathrm{Cl.}} = \frac{1}{2m}(\langle p\rangle^2 + m^2\omega^2\langle q\rangle^2)\right].$$

7.证实布洛赫定理(第十二章 § 12)也适用于经典谐振子,再证:对于一个处于热力学平衡的量子化谐振子,$\alpha q + \beta p$ 的统计分布在 $kT \gg \hbar\omega$ 的极限下趋近于经典分布.

8.证明一个质量为 m, 电荷为 e, 处在一个沿 oz 指向的恒定磁场 $\mathscr{H}$ 中的粒子的哈密顿量能够写成形式

$$H = \frac{p_z^2}{2m} + H_\rho,$$

其中

$$H_\rho = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) - \frac{e}{2mc}\mathscr{H} l_z + \frac{e^2}{8mc^2}\mathscr{H}^2(x^2 + y^2).$$

证明算符 p_z, l_z, H_ρ 组成对易运动常数的一个完全系,再证它们的共同本征函数在极坐标(z, ρ, θ)中写成 $\exp(ikz)\exp(i\lambda\theta)v_{\lambda n}(\rho)$ 形式 [k 是任何实数;$\lambda = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm\infty$;$n = 0, 1, 2, \cdots, \infty$]. 相应的本征值分别是

$$\hbar k, \hbar\lambda, (2n + 1)\frac{e\hbar}{2mc}\mathscr{H}.$$

把这些结果同习题 2.4 的那些结果作比较.

附录 A　分布 δ“函数”和傅里叶变换

I. 分布理论的基础

1. 泛函的概念和连续谱的严格处理
2. 分布的定义
3. 分布的线性组合
4. 两个分布的积
5. 分布的级数和积分
6. 分布的微商

II. δ“函数”的性质

7. $\delta(x)$的定义
8. 表示为积分算符的核的极限
9. 主要性质
10. $\delta(x)$ 的微商

III. 傅里叶变换

11. 函数的傅里叶变换．定义
12. 可积函数
13. χ 函数
14. 分布的傅里叶变换．定义
15. 调和分布
16. 平方可积函数
17. 把褶积变换为乘法

傅里叶变换表

I. 分布理论的基础[1)]

1. 泛函的概念和连续谱的严格处理

狄拉克的 δ "函数"使我们能够以一种类似于处理分立谱的方式来处理连续谱，它不是一个完全确定的数学客体. 如果我们希望把具有连续谱的观测算符严格地引进理论，就必须用一种不同的方式来建立本征值问题.

事实上，波动力学的观测算符的本征函数仅仅通过它们和波函数的标积形式出现，也就是说，是以它们同平方可积函数的标积而出现的. 设 F 是这些本征函数中的一个，而 ψ 是一个任意选择的波函数；标积 $\langle \psi, F \rangle$（第五章的记号）可以看作是 ψ 的反线性泛函，或更好地说，是 ψ^* 的线性泛函. 让我们用 $\hat{F}$ 来表示后者；根据定义

$$\hat{F}[\psi] = \langle \psi^*, F \rangle.$$

它就是这样地同出现在理论中的各个本征函数相联系的泛函，它们本身并不是本征函数.

现在，这些泛函属于某一类称为**分布**的泛函，对于它们，我们能够同对于函数一样，定义本质上相同的代数与分析运算. 所以，有可能以严格的方式把理论的算符定义为**作用在分布上**、而不是函数上**的算符**，从而重新表述波动力学；**因而，厄密算符的本征解是一些特定的分布**：它们是**满足该算符的本征值方程的一些有界、平方可积函数的线性和连续的泛函.**

更为一般地，设 X 和 Ξ 是两个观测算符，为了简单起见，

1) 参见 L. Schwartz, *Théorie des distributions* (Paris, Hermann, 1950—1951)；也见同一作者的 *Les Méthodos Mathématiqnes de la Physique*, 巴黎大学讲稿 (Paris, 1955). I. Halperin, *Introdnction to the Theory of Distributcons*, 基于 L. Schwartz 的讲演 (Toronto, University *of* Toronto Press, 1952).

假设它们的谱是完全连续和非简并的；设 $\langle\xi|x\rangle$ 是允许从 $\{X\}$ 表象过渡到 $\{\Xi\}$ 表象的么正变换. 在量子论的严格表述中，$\langle\xi|x\rangle$ 同时表示:

(i) X 在 $\{\Xi\}$ 表象中的本征解的系综，即用指标 x 标记的 ξ 的函数的某一个泛函系；

(ii) Ξ 在 $\{X\}$ 表象中的本征解的系综，即用指标 ξ 标记的 x 的函数的某一泛函系.

在这一节中，我们给出分布的定义并且不加证明地叙述它们的主要性质.

2. 分布的定义

让我们用 $\varphi(x_1,\cdots,x_n)$，或更为简单地用 $\varphi(x)$，来表示 n 个连续变数 $x_1,\cdots,x_n$ 的函数，这个函数的非零值全部都包含在这些变数的一个有限域中，并有关于这些变数的所有各阶的微商(具有有界支集的无限可微的函数).

根据定义，**分布 $T[\varphi]$ 是函数 φ 的一个线性和连续的泛函.**

线性意味着对于所有的线性组合 $\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2$，我们有

$$T[\lambda_1\varphi_1+\lambda_2\varphi_2]=\lambda_1T[\varphi_1]+\lambda_2T[\varphi_2].$$

连续性意味着对于函数 φ 的任何序列 $\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_j,\cdots$，如果 $\lim\limits_{j\to\infty}\varphi_j=\varphi$，我们就有

$$\lim_{j\to\infty}T[\varphi_j]=T[\varphi].$$

对于任何**局部地可积的**函数 f，也就是说其积分[1]在任何有限区间都存在的任何函数，有一个由标积

---

1) 我们在这个理论中涉及到的积分都是勒贝卡意义上的积分. 勒贝卡积分简化为通常意义上的积分(黎曼积分)，只要后者有意义；然而，勒贝卡积分在黎曼积分不确定的那些情况下也存在.

$$\hat{f}[\varphi] = \int f(x)\varphi(x)dx = \langle \varphi^*, f \rangle \qquad (A.1)$$

定义的分布 $\hat{f}$ 与之相对应。两个局部地可积的函数定义同一个分布，如果它们几乎处处(即除了零测度集以外的各处)相等。特别是，波动力学的波函数(平方可积函数)是定义分布的。

没有分布联系于函数 $\frac{1}{x}$，因为这个函数在点 $x = 0$ 处是不可积的。但是人们能够定义分布

$$PP\frac{1}{x}[\varphi] \equiv PP\int \frac{\varphi(x)}{x}\,dx\,, \qquad (A.2)$$

此处 PP 表示积分

$$PP\int_{-\infty}^{+\infty} = \lim_{\varepsilon \to 0}\left\{\int_{-\infty}^{-\varepsilon} + \int_{\varepsilon}^{+\infty}\right\}$$

的柯希主值。

"狄拉克函数"$\delta(x)$ 定义分布

$$\delta[\varphi] = \varphi(0). \qquad (A.3)$$

同样，"函数"$\delta(x - x_0)$ 定义分布

$$\delta_{x_0}[\varphi] = \varphi(x_0). \qquad (A.4)$$

评论一个分布最终能够在一个大于 φ 空间的函数空间上定义。的确，如果 $U[\phi]$ 是大于 φ 空间的一个函数空间中的函数 ϕ 的线性和连续的泛函，泛函 $U[\varphi]$ 就是完全确定的，且在 φ 空间上是线性和连续的：U 是一个分布。

例子：

δ_{x_0} 是在 $x = x_0$ 处为连续的函数 $\alpha(x)$ 的空间上定义的：

$$\delta_{x_0}[\alpha] = \alpha(x_0).$$

$\hat{\Psi}$，相应于一个平方可积函数的分布，是在平方可积函数 $\phi(x)$ 的空间中定义的：

$$\Psi[\phi] = \int \Psi \phi dx = \langle \phi^*, \Psi \rangle.$$

波动力学的波函数的线性和连续的泛函是一些特定分布.

3. 分布的线性组合

$T = \lambda_1 T_1 + \lambda_2 T_2$ 是由

$$T[\varphi] = \lambda_1 T_1[\varphi] + \lambda_2 T_2[\varphi]$$

定义的分布 (λ_1, λ_2 是给定的复常数).

4. 两个分布的积

如果 $\hat{f}$ 是一个联系于局部地可积的函数 f 的分布，而 T 是一个任意的分布，分布

$$P = \hat{f}T$$

是完全确定的，如果 T 是函数 f_φ 的一个线性、连续的泛函，而我们根据定义有

$$P[\varphi] = T[f\varphi]. \tag{A.5}$$

两个分布的积**并不总是存在的**. 如果 f 具有所有各阶的微商，$\hat{f}T$ 对任何 T 都存在. 如果 f 在点 x_0 处是连续的，

$$(\hat{f}\delta_{x_0})[\varphi] = f(x_0)\varphi(x_0). \tag{A.6}$$

如果 f 和 g 是平方可积函数，积 $\hat{f}\hat{g}$ 是完全确定的. 另一方面，$[\delta(x)]^2$ 没有任何意义，$\left(\frac{1}{\sqrt{|x|}}\right)^2$ 也没有任何意义.

作为方程(A.6)的特殊情况，我们具有关系式

$$x\delta(x) = 0. \tag{A.7}$$

反之，如果 $xT = 0$，T 是 δ 的倍数：$T = c\delta$ (c = 常数).

所以，如果 $f(x)$ 和 $g(x)$ 是由关系式

$$xf(x) = g(x)$$

相联系的，我们必然有

$$f(x) = PP\frac{g(x)}{x} + c\delta(x), \qquad (A.8)$$

此处 c 是一个待定常数。

5. 分布的级数和积分

如果分布系 $T_1, T_2, \cdots, T_j, \cdots$ 是这样的，以致当 $j \to \infty$ 时，$T_j[\varphi]$ 对任何 φ 具有一个极限，则这个极限是一个分布（即函数 φ 的一个线性、连续的泛函）：

$$T = \lim_{j\to\infty} T_j.$$

等价的表述：如果无限级数 $\sum_i T_i[\varphi]$ 对任何 φ 是可求和的，则它的和定义一个分布；我们就说，分布的**级数** $\sum_i T_i$ **是可求和的。**

如果 $T(\lambda)$ 是一个依赖于参量 λ 的分布，λ 能够在域 Λ 中连续地变化，又如果积分

$$I[\varphi] = \int_\Lambda T(\lambda)[\varphi]d\lambda$$

对任何 φ 收敛，它定义一个分布

$$I = \int_\Lambda T(\lambda)d\lambda.$$

对于多重积分也有类似的定义。

特别是，如果 $f(x,\lambda)$ 是 x（局部地）和 λ 的可积函数，则分布 $\hat{f}(\lambda)$ 是对 λ 可积的，而它的积分是联系于函数

$$g(x) = \int f(x,\lambda)d\lambda$$

的分布 $\hat{g}$。

如果当 $|k| \to \infty$ 时函数 $a(k)$ 保持小于 $|k|$ 的一个正幂：

$$|a(k)| \leqslant A|k|^{\alpha} \quad (A \text{ 和 } \alpha \text{ 都是正的常数}),$$

则积分$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} a_k dk$是一个分布.

特别是

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk = 2\pi\delta.$$

6. 分布的微商

根据定义,分布T的微商$\frac{\partial T}{\partial x_i}$是

$$\frac{\partial T}{\partial x_i}[\varphi] = -T\left[\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}\right]. \tag{A.9}$$

特别是,如果一个局部地可积的函数是可微的,相应分布的微商是相应于它的微商的分布. 的确,部分积分以后,

$$\hat{f}'[\varphi] = \int f'(x)\varphi(x)dx = -\int f(x)\varphi'(x)dx = -\hat{f}[\varphi'].$$

函数微商的所有性质适用于分布. 譬如说,积$P = \hat{f}T$的微商是

$$P' = \hat{f}'T + \hat{f}T'. \tag{A.10}$$

再者,属于多少有些限制的一类函数的某些结果是可以没有限制地应用于**所有的**分布上的. 它们是:

1) **分布对于所有的阶都是可微的.**

特别是,局部地可求和函数

$$\log|x|,\ 1/r\left(r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}\right)$$

对于所有的阶都是可微的,因为它们是分布:

$$\frac{d}{dx}\log|x| = PP\frac{1}{x}. \tag{A.11}$$

$$\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = -4\pi\delta \quad [\delta \equiv \delta(x)\delta(y)\delta(z)]. \tag{A.12}$$

2）**微分在分布的空间中是一种线性、连续的运算：**

如果

$$\lim_{j\to\infty} T_j = T,\quad \lim_{j\to\infty} T_j' = T'.$$

因此，如果一个级数是可求和的，则它在求和号Σ下就是逐项可微的. 同样，如果 $T(\lambda)$ 关于参数 λ 是可求和的：

$$I = \int_{\Lambda} T(\lambda)d\lambda,$$

$\dfrac{\delta T(\lambda)}{\delta x_i}$ 在同一个 λ 域内当然是可求和的，而它的积分等于 $\dfrac{\delta I}{\delta x_i}$.

II. δ “函数”的性质

7. $\delta(x)$ 的定义

在物理学中通常使用记号 $\delta(x-x_0)$，而不用更为正确的记号 $\delta_{x_0}[\varphi]$. 实践证明这个记号相当方便. $\delta(x-x_0)$ 是作为一种其运算受一些多少有点特殊的规则支配的函数而出现的. 分布理论将对这些规则提供数学的佐证，我们不需要明晰地提到它.

根据定义，$f(x)$ 在点 $x=x_0$ 处是一个完全定义的函数，

$$\int f(x)\delta(x-x_0)dx \equiv \delta_{x_0}[f(x)] = f(x_0). \qquad (A.13)$$

所以我们在形式上有

$$\delta(x-x_0) = \begin{cases} 0 & \text{如 } x \neq x_0 \\ +\infty & \text{如 } x = x_0 \end{cases} \quad \text{和} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x_0)dx = 1, \qquad (A.14)$$

$\delta(x-x_0)$ 是克朗内克符号的推广

$$\delta_{mn}=\begin{cases}0 & \text{如 } m\neq n\\ 1 & \text{如 } m=n.\end{cases}$$

8. 表示为积分算符的核的极限

$\delta(x-x_0)$可以看作是一个函数的极限，这个函数在 x_0 附近呈现一个非常尖锐的峰，而它对全部空间的积分保持为常数且等于 1. 譬如说:

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{\pi}\lim_{L\to\infty}\sin\frac{L(x-x_0)}{x-x_0} \tag{A.15a}$$

$$=\frac{1}{\pi}\lim_{x\to\infty}\frac{1-\cos x(x-x_0)}{x(x-x_0)^2} \tag{A.15b}$$

$$=\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to+0}\frac{\varepsilon}{(x-x_0)^2+\varepsilon^2} \tag{A.15c}$$

$$=\lim_{\eta\to 0}\frac{E(x-x_0+\eta)-E(x-x_0)}{\eta}. \tag{A.15d}$$

在最后的表示式中，$E(x)$ 是亥维赛函数:

$$E(x)=\begin{cases}1 & \text{如 } x>0\\ 0 & \text{如 } x<0.\end{cases}$$

(分布 δ 是亥维赛分布的微商.)

与性质(A.15c)相配的是极限性质:

$$\lim_{\varepsilon\to+0}\frac{1}{x-x_0\pm i\varepsilon}=PP\frac{1}{x-x_0}\mp i\pi\delta(x-x_0). \tag{A.15e}$$

9. 主要性质

函数 $\delta(x)$ 的主要性质如下:

$$\delta(x)=\delta(-x), \tag{A.16}$$

$$\delta(ax)=\frac{1}{|a|}\delta(x)\quad(a\neq 0), \tag{A.17}$$

$$\delta[g(x)]=\sum_n\frac{1}{|g'(x_n)|}\delta(x-x_0)\quad[g(x_n)=0,\ g'(x_n)\neq 0],\tag{A.18}$$

$$x\delta(x)=0,\tag{A.19}$$

$$f(x)\delta(x-a)=f(a)\delta(x-a),\tag{A.20}$$

$$\int\delta(x-y)\delta(y-a)dy=\delta(x-a),\tag{A.21}$$

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ikx}dk.\tag{A.22}$$

所有这些等式表明，当乘以一个正则函数并对 x 作积分时，一边可用另一边代替．我们能够严格地用分布理论证明全部等式(参见第 1 节)．我们还能够在形式上(但非严格地)由表明各项与 $f(x)$ 的乘积的积分是相等的而证明它们 ($f(x)$ 是任何足够正则的函数)．因而，关系式(A.16)，(A.17)和 (A.18) 也由在这些积分中履行适当的变数代换而得到了证明．在表示式(A.18)中，求和必须对 $g(x)$ 的所有零点作出；仅当 $g(x)$ 和 $g'(x)$ 永不同时等于零时，这个表示式才有意义；譬如说 $\delta(x^2)$ 就是没有意义的．

10. $\delta(x)$ 的微商

“函数” $\delta(x)$ 是对所有的阶可微的．它的第 m 阶微商 $\delta^{(m)}(x)$ 由性质

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta^{(m)}(x)f(x)dx=(-)^m f^{(m)}(0)\tag{A.23}$$

定义，对于在点 $x=0$ 处是 m 次可微的任何函数 $f(x)$ 有效．$\delta^{(m)}(x-x_0)$ 能够看作是出现在方程 (A.15a)，(A.15b) 和 (A.15c) 右边的那些函数的某一个或另一个第 m 阶微商的极限．下面这些性质，我们能够在形式上(但不正确地)用通常的积分学步骤来推断，是能够严格地用分布理论来加以证明

的：

$$\delta^{(m)}(x) = (-)^m\delta^{(m)}(-x), \quad \text{(A.24)}$$

$$\int\delta^{(m)}(x-y)\delta^{(n)}(y-a)dy = \delta^{(m+n)}(x-a), \quad \text{(A.25)}$$

$$x^{m+1}\delta^{(m)}(x) = 0. \quad \text{(A.26)}$$

特别是，一阶微商具有性质

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta'(x)f(x)dx = -f'(0), \quad \text{(A.27)}$$

$$\delta'(x) = -\delta'(-x), \quad \text{(A.28)}$$

$$\int\delta'(x-y)\delta(y-a)dy = \delta'(x-a), \quad \text{(A.29)}$$

$$x\delta'(x) = -\delta(x), \quad \text{(A.30)}$$

$$x^2\delta'(x) = 0, \quad \text{(A.31)}$$

$$\delta'(x) = \frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}ke^{ikx}dk. \quad \text{(A.32)}$$

III. 傅里叶变换[1)]

11. 函数的傅里叶变换定义

如果 $f(x)$ 是变数 x 的（实或复）函数，它的傅里叶变换（如果它存在）是函数

$$F(u) \equiv \mathscr{F}[f] = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\alpha ux}f(x)dx, \quad \text{(A.33)}$$

此处 α 是一个常数，一旦确定就一直确定了（在波动力学中，我们取 $\alpha = \frac{1}{\hbar}$）。倘若某些收敛条件满足，$f(x)$ 是从 $F(u)$ 用

1) 参见 L. Schwartz, 第 463 页注中的引文；也见 E. C. Titchmarsh, *Introduction to the Theory of Fourier Integrals* (2nd Ed. Oxford University Press, 1948).

逆傅里叶变换

$$f(x) = \mathscr{F}^{\dagger}[F] = \left(\frac{\alpha}{\alpha\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\alpha ux}F(u)du \quad (A.33^{\dagger})$$

推演的。

更为一般地，如果 $f(x_1,x_2,\cdots,x_n)$ 是 n 个变数 $x_1,\cdots,x_n$ 的函数，它的傅里叶变换是

$$F(u_1,\cdots,u_n) \equiv \mathscr{F}[f]$$
$$= \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}n}\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\alpha(u_1x_1+\cdots+u_nx_n)}f(x_1,\cdots,x_n)$$
$$\times dx_1,\cdots,dx_n, \qquad (A.34)$$

而逆变换由

$$f(x_1,\cdots,x_n) \equiv \mathscr{F}^{\dagger}[F]$$
$$= \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}n}\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\alpha(u_1x_1+\cdots+u_nx_n)}F(u_1,\cdots,$$
$$u_n)du_1\cdots du_n \qquad (A.34^{\dagger})$$

定义。

倘若 f 的傅里叶变换存在，我们有

$$\mathscr{F}[f(cx_1,\cdots,cx_n)] = \frac{1}{|c|^n}F\left(\frac{u_1}{c},\cdots\frac{u_n}{c}\right)(c = \text{任意常数}).$$
$$(A.35)$$

同样，具有相同的限制条件，我们有

$$\mathscr{F}^{\dagger}[F(cu_1,\cdots,cu_n)] = \frac{1}{|c|^n}f\left(\frac{x}{c},\cdots,\frac{x_n}{c}\right)$$
$$(c = \text{任意常数}). \qquad (A.35^{\dagger})$$

下面我们不加证明地给出一个变数的函数(或分布)的傅里叶变换的主要性质。一维傅里叶变换的所有这些性质容易扩展于任何维数。

12. 可积函数

任何可积函数 $f(x)\left(\int_{-\infty}^{+\infty}|f(x)|dx<\infty\right)$ 具有傅里叶变换:

$$F(u)=\mathscr{F}[f].$$

$F(u)$ 是: (i) 连续的,

(ii) 有界的: 对任何 u $|F(n)|\leqslant\int_{-\infty}^{+\infty}|f(x)|dx$,

(iii) 在无限远处为零: $F(u)\underset{|u|\to\infty}{\longrightarrow}0$.

如果 $f(x)$ 是 m 次**连续地可微的**,再如果它的 m 阶微商是可积的,则

$$\mathscr{F}[f^{(m)}]=(i\alpha u)^m F(u). \tag{A.36}$$

如果 $x^m f(x)$ 是可积的,则 $F(u)$ 是 m 次连续地可微的,而且

$$F^{(m)}(u)=\mathscr{F}[(-i\alpha x)^m f(x)]. \tag{A.37}$$

(变换 $\mathscr{F}^{\dagger}$ 的性质是从前文的所有公式中改 i 为 $-i$ 而推出的).

13. χ 函数

我们用 $\chi(x)$ 来记一个无限可微函数,它(连同它的所有微商)比 $|x|$ 的任何幂更为迅速地渐近地趋向于零:

$$|x|^l\chi^{(m)}(x)\underset{|x|\to\infty}{\longrightarrow}0 \quad \text{对任何 } m \text{ 和 } l.$$

更为一般地,用 $\chi(x_1,\cdots,x_n)$ 来记一个 n 个变数的函数,它是无限地可微的,且对任何 l, m 和对指标 $\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n$ 的任何选择 $(\alpha_1+\cdots+\alpha_n=m)$ 都有

$$R^l\frac{\partial^m\chi}{\partial x_1^{\alpha_1}\partial x_2^{\alpha_2}\cdots\partial x_n^{\alpha_n}}\underset{R\to\infty}{\longrightarrow}0 \quad [R\equiv(x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2)^{\frac{1}{2}}].$$

第 I 节的函数 φ 是特定的 χ 函数；另一方面，函数 χ 并非都是 φ 函数[例如：$\exp(-R^2)$]。

既然函数 χ 是可积的，所以前节的性质适用。另外，我们有下列结果：

函数 χ 的傅里叶变换 $\mathscr{F}\chi$ 和逆傅里叶变换 $\mathscr{F}^\dagger\chi$ 同样是(变数 $u_1, u_2, \cdots, u_n$ 的) χ 函数。再者，傅里叶变换具有**倒易性质**：

$$\mathscr{F}\mathscr{F}^\dagger\chi = \mathscr{F}^\dagger\mathscr{F}\chi = \chi$$

($\mathscr{F}\mathscr{F}^\dagger\chi$ 意为 $\mathscr{F}^\dagger\chi$ 的傅里叶变换)。

14. 分布的傅里叶变换定义

如果 T 是一个分布，它的傅里叶变换 $\mathscr{F}T$ 是由

$$\mathscr{F}T[\varphi] = T[\mathscr{F}\varphi]$$

定义的泛函，它的逆傅里叶变换是泛函

$$\mathscr{F}^\dagger T[\varphi] = T[\mathscr{F}^\dagger\varphi].$$

既然 $\mathscr{F}\varphi$，$\mathscr{F}^\dagger\varphi$ 不一定是 φ 型的函数，可能发生这样的情况：泛函 $T[\mathscr{F}\varphi]$，$T[\mathscr{F}^\dagger\varphi]$ 不存在；在那种情况下，T 既无傅里叶变换又无逆傅里叶变换。

如果 $\hat{f}$ 是相应于函数 $f(x)$ 的分布，且如果 $F(u)$ 是 $f(x)$ 的傅里叶变换(假设它存在)，则

$$\begin{aligned}\mathscr{F}\hat{f}[\varphi] &= \hat{f}[\mathscr{F}\varphi] \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\left[\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\alpha ux}\varphi(u)du\right]dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(u)\left[\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\alpha ux}f(x)dx\right]du \\ &= \hat{F}[\varphi].\end{aligned}$$

因此，分布 $\hat{f}$ 的傅里叶变换是联系于函数 f 的傅里叶变换的分布 $\hat{F}$。

15. 调和分布

根据定义，调和分布是函数 χ 的线性和连续的泛函．它们是一些特定的分布．

第 I 节中的分布的所有性质都可扩展于调和分布．只要在所有的陈述中用函数 χ 来替换函数 φ 就足够了．特别是，调和分布是所有阶都可微的，而且**它们的微商是调和分布．**

平方可积函数，在所有空间有界的函数，以及更为一般地，在无限远处增大得足够慢的局部可积函数 $f(x)$（即我们能够对这些函数找到两个正的数 A 和 α，致使当 $|x| \to \infty$ 时 $|f(x)| \leqslant A|x|^{\alpha}$），全都定义调和分布．$\delta, \delta_{x_0}$ 和它们的所有微商都是调和分布．

波动力学中的本征值问题的解是波函数的［也就是说，是平方可积函数 $\psi(q_1, \cdots q_R)$ 的］线性和连续的泛函．**理由更为充足地，**它们是函数 χ 的线性和连续的泛函：**它们是调和分布．**

对调和分布的兴趣导源于它们的值得注意的傅里叶变换性质：

如果 U_x 是一个调和分布［对函数 $\chi(x)$ 定义的］：

1）**它的傅里叶变换 V_u 和它的逆傅里叶变换 $V_u^{\dagger}$ 总是存在，而且它们是调和分布**［对函数 $\chi(u)$ 定义的］．它们分别由

$$V_u[\chi] \equiv \mathscr{F} U_x[\chi] = U_x[\mathscr{F}\chi] \qquad (A.38)$$

$$V_u^{\dagger}[\chi] \equiv \mathscr{F}^{\dagger} U_x[\chi] = U_x[\mathscr{F}^{\dagger}\chi] \qquad (A.38^{\dagger})$$

定义．

2）**变换 $\mathscr{F}$ 和 $\mathscr{F}^{\dagger}$ 是倒易的：**

$$\mathscr{F}^{\dagger}\mathscr{F} U \equiv \mathscr{F}^{\dagger} V = U, \qquad (A.39)$$

$$\mathscr{F}\mathscr{F}^{\dagger} U \equiv \mathscr{F} V^{\dagger} = U. \qquad (A.40)$$

3）按照规律

$$\mathscr{F}(U_x^{(m)}) = (i\alpha u)^m V_u, \tag{A.41}$$

$$\mathscr{F}[(-i\alpha x)^m U_x] = V_u^{(m)}, \tag{A.42}$$

微分变换为用 u 相乘，反之亦然.

16. 平方可积函数

平方可积函数定义调和分布.

如果我们沿用惯例，不把两个几乎处处(即除了零测度集以外的各处)相等的函数看作是不同的，调和分布的傅里叶变换的性质就适用于平方可积函数. 在这些性质上还要添加上平方可积函数的一些特定性质. 几个主要的定理如下：

定理 I. 如果 $f(x)$ 是**平方可积的**，则积分

$$\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\xi}^{+\xi} e^{-i\alpha ux} f(x)\,dx$$

向着平方可积函数

$$F(u) \equiv \mathscr{F}f(x) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \operatorname*{lqm}_{\xi\to\infty}\int_{-\xi}^{+\xi} e^{-i\alpha ux} f(x)\,dx \tag{A.43}$$

均方收敛[1].

定理 II. $f(x)$ 同 $F(u)$ 之间的对应性在

$$f(x) = \mathscr{F}^{\dagger}F(u) = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \operatorname*{lqm}_{\lambda\to\infty}\int_{-\lambda}^{+\lambda} e^{i\alpha ux} F(u)\,du \tag{A.43†}$$

的意义上是**倒易的.**

事实上，对于任何 x 值的近邻，$f(x)$ 是有有界变差，

---

1) 函数 $\Phi(n,\xi)$ 当 $\xi\to X$ 时向着 $\Phi(u)$ 均方收敛 (不如普通收敛那么严格)在这里用符号表示为

$$\operatorname*{lqm}_{\xi\to X}\Phi(u,\xi) = \Phi(u),$$

意指

$$\lim_{\xi\to X}\int_{-\infty}^{+\infty}|\Phi(u,\xi) - \Phi(u)|^2 du = 0,$$

换句话说，$\Phi(u,\xi)$ 几乎处处趋向于 $\Phi(u)$.

$$\mathscr{F}^{\dagger}F(u)=\lim_{\varepsilon\to\infty}\frac{f(x+\varepsilon)+f(x-\varepsilon)}{2}. \qquad (A.44)$$

定理 III. 设平方可积函数 $f(x)$ 和 $F(u)$ 是互为傅里叶变换. 如果微商 $f(x)$ 是平方可积的，它的傅里叶变换，即 $i\alpha uF(u)$，也是平方可积的；反之，如果 $i\alpha uF(u)$ 是平方可积的，则 $f(x)$ 是可微的，而且 $f'(x)$ 是 $i\alpha uF(u)$ 的逆傅里叶变换. 对于 $xf(x)$ 和 $\left(\frac{i}{\alpha}\right)F'(x)$ 这一对函数也有类似的性质存在.

注意：即使作为一个函数来考虑，$f(x)$ 不是处处可微的，(调和) 分布 $\hat{f}'_x$ 也总是存在的；它的傅里叶变换是 (调和) 分布 $i\alpha u\hat{F}_u$；后者，作为一个函数来考虑，可能不是平方可积的.

平方可积函数的标积在傅里叶变换中保持不变：

定理 IV. 如果 $F(u)$ 和 $G(u)$ 是平方可积函数 $f(x)$ 和 $g(x)$ 各自的傅里叶变换，我们有

$$\langle g,f\rangle=\langle G,F\rangle, \qquad (A.45)$$

或者换一种说法

$$\int_{-\infty}^{+\infty}g^*(x)f(x)\,dx=\int_{-\infty}^{+\infty}G^*(u)F(u)\,du.$$

这个定理的一个特殊情况 ($f=g$) 是**模方的守恒**

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|f(x)|^2dx=\int_{-\infty}^{+\infty}|F(u)|^2du. \qquad (A.46)$$

17. 把褶积变换为乘法

根据定义，两个函数的褶积 (如果它存在) 是表示式

$$f\circ g\equiv\int_{-\infty}^{+\infty}f(x-t)g(t)\,dt. \qquad (A.47)$$

我们能够同样定义 (参见本附录头一个脚注) (但是我们将不在这里明晰地阐明) 两个分布的褶积. 特别是

$$\delta \circ T = T \quad (T \text{ 一个任意分布})$$

$$\delta \circ T = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-t) f(t)\,dt = f(x) \quad (f \text{ 一个任意函数}).$$

褶积是可对易运算：$f \circ g = g \circ f$.

对褶积概念的兴趣来自下列定理：

定理 V. 倘若它存在，两个函数 $f(x)$ 和 $g(x)$ 的褶积有 $\sqrt{\frac{2\pi}{2}} F(u)G(u)$ 作为它的傅里叶变换，在这个表示式中 $F(u)$ 和 $G(u)$ 分别是 $f(x)$ 和 $g(x)$ 的傅里叶变换； 这个变换是倒易的.

特别是：

定理 V′. 如果 $f(x)$ 是平方可积函数，$g(x)$ 是可积函数，而 $F(x)$ 和 $G(x)$ 是它们各自的傅里叶变换，则褶积 $f \circ g$ 以及积 $\sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} FG$ 是平方可积函数，而第二个是第一个的傅里叶变换.

傅里叶变换表

$f(x)=\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{i\alpha ux}F(u)du$	$F(w)=\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i\alpha ux}f(x)dx$
$f\left(\frac{x}{c}\right)$	$\lvert c\rvert F(cu)$
$f(-x)$	$F(-u)$
$f^*(x)$	$F^*(-u)$
$F(x)$	$f(-u)$
$xf(x)$	$\frac{i}{\alpha}F'(u)$
$f'(x)$	$i\alpha uF(u)$
$f(x-x_0)$	$e^{-i\alpha ux_0}F(u)$
$e^{i\alpha u_0x}f(x)$	$F(u-u_0)$
$\delta(x)$	$\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2}$
$\delta(x-x_0)$	$\left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{1/2}e^{-i\alpha ux_0}$
$E(x)=\begin{cases}1 & \text{当 } x>0\\ 0 & \text{当 } x<0\end{cases}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}\,\alpha}\left[\pi\delta(u)-iPP\frac{1}{u}\right]$
$\left(\frac{\chi}{\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}e^{-\frac{1}{2}\chi^2x^2}$	$\left(\frac{\alpha}{\chi\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}e^{-\alpha^2u^2/2\chi^2}$ $(R_e\chi>0,\ Re\chi^2>0)$
$\frac{1}{\sqrt{2a}}[E(x+a)-E(x-a)]$ $=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2a}} & \text{当 } \lvert x\rvert<a\\ 0 & \text{当 } \lvert x\rvert>a\end{cases}$	$\left(\frac{\alpha a}{\pi}\right)^{1/2}\frac{\sin\alpha au}{\alpha au}$ (实 $a>0$)
$\sqrt{\gamma}\,e^{-\gamma\lvert x\rvert}$	$\left(\frac{2\alpha\gamma^3}{\pi}\right)^{1/2}\frac{1}{\gamma^2+\alpha^2u^2}$ $(R_e\gamma>0)$
$i\sqrt{2\gamma}\,e^{-\gamma X}E(x)$ $=\begin{cases}i\sqrt{2\gamma}e^{-\gamma x} & \text{当 } x>0\\ 0 & \text{当 } x<0\end{cases}$	$\left(\frac{\alpha\gamma}{\pi}\right)^{1/2}\frac{1}{\alpha u-i\gamma}$ $(R_e\gamma>0)$

注意：最后四行的函数是归一的：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|f(x)|^2dx=\int_{-\infty}^{+\infty}|F(u)|^2du=1.$$

附录 B　特殊函数和有关公式

I. 拉普拉斯方程,拉盖尔多项式,库仑函数

1. 拉普拉斯方程和合流超几何级数
2. 拉盖尔多项式
3. 类氢原子的本征函数
4. 纯库仑波
5. 球库仑函数

II. 球贝塞尔函数

6. 球贝塞尔函数

III. 谐振子和厄密多项式

7. 厄密多项式
8. 谐振子的本征函数

IV. 缔合勒让德函数和勒让德多项式,球谐函数

9. 勒让德多项式和缔合勒让德函数
10. 球谐函数
11. 各种展开式和公式

I. 拉普拉斯方程,拉盖尔多项式,库仑函数

1. 拉普拉斯方程和合流超几何级数

拉普拉斯方程

$$\left[z\frac{d^2}{dz^2}+(\beta-z)\frac{d}{dz}-\alpha\right]f(z)=0 \qquad (B.1)$$

(α,β 是任意复常数)。

合流超几何级数 $F(\alpha|\beta|z)$.

根据定义，

$$F(\alpha|\beta|z)=1+\frac{\alpha}{\beta}\cdot\frac{z}{1!}+\frac{\alpha(\alpha+1)}{\beta(\beta+1)}\cdot\frac{z^2}{2!}+\cdots$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(\alpha+n)\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta+n)}\cdot\frac{z^n}{n!}. \tag{B.2}$$

这个级数：

(i) 对任何 α 和 β 都是完全确定的，只要 $\beta\neq -p$(p 是 ≥ 0 的整数)；

(ii) 在整个复平面 z 上收敛；

(iii) 是一个 p 次(p 是≥ 0 的整数)多项式，如果 $\alpha=-p$；在无限远处具有一个本性奇点，如果 $\alpha\neq -p$；

(iv) 满足**克姆默（Kummer）关系**

$$F(\alpha|\beta|z)=e^z F(\beta-\alpha|\beta|-z). \tag{B.3}$$

如果它们存在[1]，函数

$$F(\alpha|\beta|z) \text{ 和 } z^{1-\beta}F(\alpha-\beta+1|2-\beta|z)$$

是方程(B.1)的解.

积分形式的解(拉普拉斯方法)：

如果 Γ 是复平面 t 的围道，以致 $t^{\alpha}(1-t)^{\beta-\alpha}e^{zt}$ 在两个极限处取同样的值，则积分

$$\int_{\Gamma}e^{zt}t^{\alpha-1}(1-t)^{\beta-\alpha-1}dt \tag{B.4}$$

是方程(B.1)的一个特殊解.

我们从现在开始假设：

---

1) 如果 β 不是整数，这两个函数存在，且是不同的. 如果 $\beta=1$，它们是全同的. 如果 $\beta=0,-1,-2,\cdots$，只有函数

$$z^{1-\beta}F(\alpha-\beta+1|2-\beta|z)$$

存在. 如果 $\beta=2,3,\cdots$，只有函数 $F(\alpha|\beta|z)$ 存在.

α 非整数;$\beta = b$ (b 是>0 的整数).

对于围绕点 $t = 0$ 和 $t = 1$ 的闭合围道 Γ_0 (图 B.1a)[1], 有一个(B.4)型的解与之相对应.[根据惯例, $\arg t - \arg(1-t) = 0$ 在 Γ_0 的那个部分位于 0 和 1 之间的实轴上, 且在 t 增大的方向上描述.] 既然这个解是 z 的整函数,它是正比于 $F(\alpha|\beta|z)$ 的. 比例系数由积分号下展开 e^{zt},并利用公式

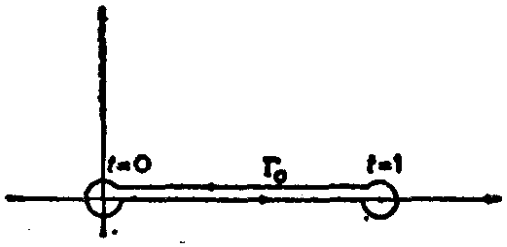

图 B.1a

$$B(x,y) \equiv \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)} = (1 - e^{2\pi i y})^{-1}\int_{\Gamma_0} t^{x-1}(1-t)^{y-1}dt \tag{B.5}$$

$$(x + y = \text{整数},\quad y \neq \text{整数})$$

而得到. 我们有

$$F(\alpha|b|z) = (1 - e^{-2\pi i\alpha})^{-1}\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(b-\alpha)} \times \int_{\Gamma_0} e^{zt}t^{\alpha-1}(1-t)^{b-\alpha-1}dt. \tag{B.6}$$

对于分别围绕 $t = 0$ 和 $t = 1$ 的回路 Γ_1,Γ_2(图 B.1b)[2], 有两个在原点非正则的(B.4)型的解,也就是

$$W_r(\alpha|b|z) = (1 - e^{-2\pi i\alpha})^{-1}\frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(b-\alpha)}\int_{\Gamma_r} e^{zt}t^{\alpha-1}(1-t)^{b-\alpha-1}dt \tag{B.7}$$

1) Γ_0 是在正常的意义上描述的.

2) Γ_1 和 Γ_2 是在正常的意义上描述的.

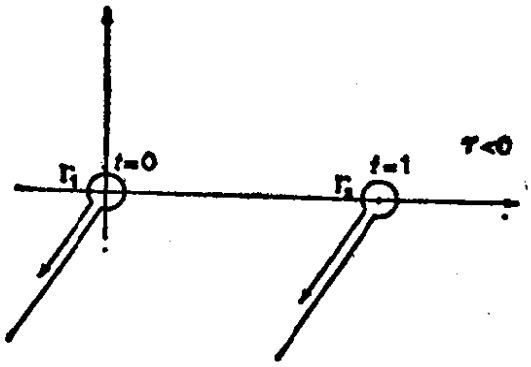

图 B.1*b*

$$(r=1,\alpha),$$

与之相对应. 这个积分的收敛条件是:

$$\frac{\pi}{2}<\arg z+\tau+2n\pi<\frac{3\pi}{2}$$

(τ 是回路 Γ_1 和 Γ_2 在无限远点的幅角).

根据惯例[1]:

$-\pi<\arg z<+\pi$, $-\pi<\tau<+\pi$, τ 的正负号=($\arg z$) 的正负号. 在回路 Γ_1 的终端和在回路 Γ_2 的始端:

$$\arg t=\tau.$$

在回路 Γ_1 的终端和在回路 Γ_2 的始端:

$$\arg(1-t)=\begin{cases}\tau-\pi & \text{如 } 0<\tau<\pi\\ \tau+\pi & \text{如 } -\pi<\tau<0.\end{cases}$$

由这些惯例,

$$W_1(b-\alpha|b|-z)=e^{-z}W_2(\alpha|b|z), \qquad (B.8a)$$

$$W_2(b-\alpha|b|-z)=e^{-z}W_1(\alpha|b|z) \qquad (B.8b)$$

$$[-\pi<\arg z<+\pi;\ -\pi<\arg(-z)<+\pi].$$

$$F(\alpha|b|z)=W_1(\alpha|b|z)+W_2(\alpha|b|z). \qquad (B.9)$$

---

1) 只要 $\mathrm{Im}z\neq0$,这些惯例就是有意义的. 为了在实轴上定义 W_1 和 W_2,我们必须履行解析延拓;所得到的函数按照 $\mathrm{Im}z\to0_+$ 或 $\mathrm{Im}z\to0_-$ 而有所不同.

解 W_1 和 W_2 的渐近展开式(由鞍点方法确定):

$$W_1(\alpha|b|z) \underset{|z|\to\infty}{\sim} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-\alpha)}(-z)^{-\alpha}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(n+\alpha)}{\Gamma(\alpha)}$$

$$\times \frac{\Gamma(n+\alpha-b+1)}{\Gamma(\alpha-b+1)}\frac{(-z)^{-n}}{n!} \qquad \text{(B.10)}$$

$$[-\pi < \arg(-z) < +\pi].$$

$$W_2(\alpha|b|z) \underset{|z|\to\infty}{\sim} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha-b}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(n+1-\alpha)}{\Gamma(1-\alpha)}$$

$$\times \frac{\Gamma(n+b-\alpha)}{\Gamma(b-\alpha)}\frac{z^{-n}}{n!} \qquad \text{(B.11)}$$

$$(-\pi < \arg z < +\pi).$$

2. 拉盖尔多项式

定义[1]:

$$L_p^0 = e^z \frac{d^p}{dz^p}(e^{-z}z^p),$$

$$L_p^k = (-)^k \frac{d^k}{dz^k} L_{p+k}^0 \qquad \text{(B.12)}$$

$$(k,p = 0,1,2,\cdots,\infty),$$

L_p^k 是在 0 和 $+\infty$ 之间具有 p 个零点的 p 次多项式:

$$L_p^k(z) = \frac{[(p+k)!]^2}{p!k!} F(-p|k+1|z)$$

$$= \sum_{s=0}^{p}(-)^s \frac{[(p+k)!]^2}{(p-s)!(k+s)!s!} z^s. \qquad \text{(B.13)}$$

特别是 $L_0^k = k!$

拉普拉斯方程

---

1) 某些作者用 L_p^k 来记在我们的记号下等于$(-)^k L_{p-k}^k$ 的这个多项式.

$$\left[z\frac{d^2}{dz^2}+(k+1-z)\frac{d}{dz}+p\right]L_p^k=0. \qquad (B.14)$$

生成函数

$$\frac{e^{-xt/(1-t)}}{(1-t)^{k+1}}=\sum_{p=0}^{\infty}\frac{t^p}{(p+k)!}L_p^k(z) \quad (|t|<1). \qquad (B.15)$$

"正交归一"关系

$$\int_0^{\infty}e^{-z}z^kL_p^kd_q^kLz=\frac{[(p+k)!]^3}{p!}\delta_{pq}. \qquad (B.16)$$

3. 类氢原子的本征函数(薛定谔理论)

$$a=\frac{a_0}{Z}=\frac{\hbar^2}{Zm'e^2} \quad (a_0\approx \text{波尔轨道的半径}),$$

$Ze=$ 核电荷;$m'=$ 电子的折合质量.

能量本征值

$$E_n=-\left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2\frac{m'c^2}{2n^2}=-\frac{1}{n^2}\frac{Ze^2}{2a}.$$

在球坐标中归一的本征函数

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=a^{-\frac{3}{2}}N_{nl}F_{nl}\left(\frac{2r}{na}\right)Y_l^m(\theta,\varphi). \qquad (B.17)$$

$$N_{nl}=\frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}. \qquad (B.17a)$$

$$F_{nl}(x)=x^le^{-\frac{1}{2}x}L_{n-l-1}^{2l+1}(x) \qquad (B.17b)$$

$$(n=1,2,\cdots,\infty;\ l=0,1,\cdots,n-1;$$
$$m=-l,-l+1,\cdots,l).$$

r 的各次幂的平均值

从属于同一个本征态(nlm)的各平均值之间的递归关系

$$\frac{s+1}{n^2}\langle r^s\rangle-(2s+1)a\langle r^{s-1}\rangle$$

$$+\frac{s}{4}[(2l+1)^2-s^2]a^2\langle r^{s-2}\rangle=0$$

$$(s>-2l-1),$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle=\frac{1}{n^2a};\ \left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle=\frac{2}{(2l+1)n^3a^2}$$

$$\langle r\rangle=\frac{1}{2}[3n^2-l(l+1)]a;$$

$$\langle r^2\rangle=\frac{1}{2}[5n^2+1-3l(l+1)]n^2a^2.$$

头几个径向函数的表

$$\rho=\frac{r}{a},\ g_{nl}(l)=N_{nl}F_{nl}\left(\frac{2}{n}\rho\right),$$

$n=1$ $g_{1s}=2e^{-l}$,

$n=2$ $g_{2s}=\frac{\sqrt{2}}{2}\left(1-\frac{1}{2}\rho\right)e^{-\frac{1}{2}\rho}$, $g_{2p}=\frac{\sqrt{6}}{12}\rho e^{-\frac{1}{2}\rho}$,

$n=3$ $g_{3s}=\frac{2\sqrt{3}}{9}\left(1-\frac{2}{3}\rho+\frac{2}{27}\rho^2\right)e^{-\frac{1}{2}\rho}$,

$$g_{3p}=\frac{8\sqrt{6}}{27}\left(\rho-\frac{1}{6}\rho^2\right)e^{-\frac{1}{2}\rho},$$

$$g_{3d}=\frac{2\sqrt{30}}{955}\rho^3e^{-\frac{1}{2}\rho}.$$

4. 纯库仑波

$\psi_c(r)$ 是一个粒子被一纯库仑势 $ZZ'e^2/r$ 散射的散射波。

$$k=\frac{mv}{\hbar}=\text{波数},\qquad\text{(B.18)}$$

$$v=\text{入射速度},$$

$$\gamma = \frac{ZZ'e^2}{\hbar v}, \tag{B.19}$$

$$\psi_c = e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}\Gamma(1+i\gamma)e^{ikz}F[-i\gamma|1|ik(r-z)]$$
$$= \psi_i + \psi_s, \tag{B.20}$$

$$\psi_i = e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}\Gamma(1+i\gamma)e^{ikz}W_1[-i\gamma|1|ik(r-z)], \tag{B.21}$$

$$\psi_s = e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}\Gamma(1+i\gamma)e^{ikz}W_2[-i\gamma|1|ik(r-z)]. \tag{B.22}$$

渐近形式

$$\psi_i \underset{k(r-z)\to\infty}{\sim} \exp[ikz + i\gamma\ln k(r-z)]$$
$$\times\left\{1 + \frac{\gamma^2}{ik(r-z)} + \cdots\right\}, \tag{B.23}$$

$$\psi_s \underset{k(r-z)\to\infty}{\sim} f_c(\theta)\ \frac{e^{i(kr-\gamma\ln 2kr)}}{r}\left\{1 + \frac{(1+i\gamma)^2}{ik(r-z)} + \cdots\right\}, \tag{B.24}$$

$$f_c(\theta) = -\frac{\gamma}{2k\sin^2\frac{1}{2}\theta}\exp\left[-i\gamma\ln\left(\sin^2\frac{1}{2}\theta\right) + 2i\sigma_0\right], \tag{B.25}$$

$$e^{2i\sigma_0} = \frac{\Gamma(1+i\gamma)}{\Gamma(1-i\gamma)}. \tag{B.26}$$

在原点处的行为

$$\psi_c(0) = e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}\Gamma(1+i\gamma)$$
$$|\psi_c(0)|^2 = \frac{2\pi\gamma}{e^{2\pi\gamma}-1}. \tag{B.27}$$

5. 球库仑函数

微分方程

在球坐标中，§ 4 的碰撞问题对于各个轨道角动量值 l 导出径向方程：

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\gamma k}{r}\right]y_l = 0. \tag{B.28}$$

球库仑函数是这个方程的特殊解．它们是宗量

$$\rho = kr$$

的函数．它们通过 k 和 γ 依赖于能量．我们定义在原点处为正则（如 r^{l+1}）的解 $F_l(\gamma;kr)$；以及非正则的解 G_l，$u_l^{(+)}$ 和 $u_l^{(-)}$ $\left[\text{有}\left(\frac{1}{r}\right)^l\text{型的奇点}\right]$．

通过变换和函数的代换

$$z = -2i\rho, \quad y_l = e^{i\rho}\rho^{l+1}v_l,$$

方程(B.28)产生拉普拉斯微分方程：

$$\left[z\frac{d^2}{dz^2} + (2l+2-z)\frac{d}{dz} - (l+1+i\gamma)\right]v_l = 0,$$

我们知道，它的一个在原点处为正则的解是 $F(l+1+i\gamma|2l+2|z)$，而两个非正则解是

$$W_{1,2}(l+1+i\gamma|2l+2|z).$$

定义和连通关系

$$F_l(\gamma;\rho) = c_l e^{i\rho}\rho^{l+1}F(l+1+i\gamma|2l+2|-2i\rho) \quad \text{(B.29a)}$$

$$= c_l e^{-i\rho}\rho^{l+1}F(l+1-i\gamma|2l+2|+2i\rho), \quad \text{(B.29b)}$$

$$u_l^{(\pm)}(\gamma;\rho) = \pm 2ie^{\mp i\sigma_l}c_l e^{\pm i\rho}\rho^{l+1}W_1(l+1\pm i\gamma|2l+2|\mp 2i\rho) \quad \text{(B.30a)}$$

$$= \pm 2ie^{\mp i\sigma_l}c_l e^{\mp i\rho}\rho^{l+1}W_2(l+1\mp i\gamma|2l+2|\pm 2i\rho), \quad \text{(B.30b)}$$

$$G_l(\gamma;\rho) = \frac{1}{2}(u_l^{(+)}e^{i\sigma_l} + u_l^{(-)}e^{-i\sigma_l}). \quad \text{(B.31)}$$

c_l 和 σ_l（库仑相移）是 γ 的下列函数：

$$c_l = 2^l e^{-\frac{1}{2}\pi\gamma}\frac{|\Gamma(l+1+i\gamma)|}{(2l+1)!} \quad \sigma_l = \arg\Gamma(l+1+i\gamma), \quad \text{(B.32)}$$

或者：

对 $l=0$，

$$c_0=\left(\frac{2\pi\gamma}{e^{2\pi\gamma}-1}\right)^{\frac{1}{2}}\quad \sigma_0=\arg\Gamma(1+i\gamma),\quad (B.32a)$$

对 $l\neq 0$，

$$c_l=c_0\frac{1}{(2l+1)!!}\times\prod_{s=1}^{l}\left(1+\frac{\gamma^2}{s^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\sigma_l=\sigma_0+\sum_{s=1}^{l}\tan^{-1}\frac{\gamma}{s}.\qquad (B.32b)$$

F_l 和 G_l 是实的；$u_l^{(-)}=u_l^{(+)*}$，

$$F_l=\frac{1}{2i}(u_l^{(+)}e^{i\sigma_l}-u_l^{(-)}e^{-i\sigma_l}),\qquad (B.33)$$

$$u_l^{(\pm)}=e^{\mp i\sigma_l}(G_l\pm iF_l).\qquad (B.34)$$

渐近形式： $r\to\infty[\rho\gg l(l+1)+\gamma^2]$

$$F_l\underset{\rho\to\infty}{\sim}\sin\left(\rho-\gamma\ln 2\rho-\frac{1}{2}l\pi+\sigma_l\right),\qquad (B.35)$$

$$G_l\underset{\rho\to\infty}{\sim}\cos\left(\rho-\gamma\ln 2\rho-\frac{1}{2}l\pi+\sigma_l\right),\qquad (B.36)$$

$$u_l^{(+)}\underset{\rho\to\infty}{\sim}\exp\left[i\left(\rho-\gamma\ln 2\rho-\frac{1}{2}l\pi\right)\right]\text{(出射波)},(B.37)$$

$$u_l^{(-)}\underset{\rho\to\infty}{\sim}\exp\left[-i\left(\rho-\gamma\ln 2\rho-\frac{1}{2}l\pi\right)\right]\text{(入射波)}.(B.38)$$

在原点处的行为： $r\to 0$

$$F_l\underset{\rho\to 0}{\sim}c_l\rho^{l+1}\left[1+\frac{\gamma}{l+1}\rho+\cdots\right],\qquad (B.39)$$

$$G_l\underset{\rho\to 0}{\sim}\frac{1}{(2l+1)c_l}\rho^{-l}\left[1+\begin{cases}0(\gamma\rho\ln\rho & \text{如 } l=0\\ 0\left(\frac{\gamma}{l}\rho\right) & \text{如 } l\neq 0\end{cases}\right].$$

(B.40)

F_l 的一般行为

当 ρ 从 0 增大至 ∞，函数 F_l 先依 ρ^{l+1} 增大，然后越来越迅速地增大(指数行为)，直至

$$\rho = \gamma + \sqrt{\gamma^2 + l(l+1)},$$

此处它有一个反射点；然后函数在两个分别渐近地趋向于+1和−1的极端值之间无休止地振荡. 这些振荡的周期渐近地趋向于 2π.

递归公式

$$(2l+1)\left[\gamma + \frac{l(l+1)}{\rho}\right]F_l = l\sqrt{\gamma^2 + (l+1)^2}\,F_{l+1}$$

$$+ (l+1)\sqrt{\gamma^2 + l^2}F_{l-1}(l \neq 0), \tag{B.41}$$

$$\left(1 + \frac{\gamma^2}{l^2}\right)^{\frac{1}{2}} F_{l-1} = \left(\frac{d}{dl} + \frac{l}{\rho} + \frac{\gamma}{l}\right)F_l \quad (l \neq 0), \tag{B.42}$$

$$\left(1 + \frac{\gamma^2}{l^2}\right)^{\frac{1}{2}} F_l = \left(-\frac{d}{dl} + \frac{l}{\rho} + \frac{\gamma}{l}\right)F_{l-1}(l \neq 0). \tag{B.43}$$

如果我们用 $U_l \equiv aF_l + bG_l$ 来代替 F_l，这些关系式都保持有效(a，b 是与 l 无关的、任意确定的系数).

朗斯基关系

$$G_l \frac{dF_l}{dl} - F_l \frac{dG_l}{d\rho} = 1, \tag{B.44}$$

由此 ($l \neq 0$)：

$$G_l F_{l-1} - F_l G_{l-1} = \frac{l}{\sqrt{l^2 + \gamma^2}}. \tag{B.45}$$

如果 $\gamma = 0$，我们得到球贝塞耳函数(只差别一个因子 ρ)：

$$\begin{aligned} &F_l(0;\rho) = \rho j_l(\rho), \quad G_l(0;\rho) = \rho n_l(\rho), \\ &u_l^{(+)}(0;\rho) = \rho h_l^{(+)}(\rho), \; u_l^{(-)}(0;\rho) = \rho h_l^{(-)}(\rho) \end{aligned} \tag{B.46}$$

(对于 j_l，n_l，$h_l^{(\pm)}$ 的定义，参见下节).

II. 球贝塞耳函数

6. 球贝塞尔函数

微分方程

在极坐标中，自由粒子的薛定谔方程对于各个轨道角动量值 l 导致**径向方程**[1]

$$\left[\frac{1}{\rho}\frac{d^2}{d\rho^2}\rho+1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]f_l\equiv\left[\frac{d^2}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{d}{dl}+1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]f_l=0. \tag{B.47}$$

在复平面中，f_l 在无限远处呈现一个本性奇点，而在 $l=0$ 处，一般呈现一个 $l+1$ 阶的极点.

球贝塞耳函数是这个方程的特殊解. 我们定义解 j_l，它在原点处是(依 r^l)正则的(正常球贝塞耳函数)，非正则解 n_l(纽曼函数)，$h_l^{(+)}$(第一种汉克尔函数)和 $h_l^{(-)}$(第二种汉克尔函数).

定义[2]

$$j_l(\rho)=\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{\frac{1}{2}}J_{l+\frac{1}{2}}(\rho),\quad n_l(\rho)=(-)^l\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{\frac{1}{2}}J_{-l-\frac{1}{2}}(\rho),$$

$$h_l^{(\pm)}(\rho)=n_l(\rho)\pm ij_l(\rho),$$

(用 J_ν 来记 ν 阶的普通贝塞耳函数)

$$j_l\text{ 和 }n_l\text{ 是实的；}h_l^{(-)}=h_l^{(+)*}. \tag{B.48}$$

显示形式

---

1) 在特殊情况 $\gamma=0$ 下，如设

$$\rho=kr,\quad y_l=krf_l(kr),$$

我们重又得到径向方程 (B. 28).

2) 大多数作者用 n_l 来表示**正负号相反**的同一个函数，而在第一和第二种球汉克尔函数的名义下分别引进函数

$$h_l^{(1)}=-ih_l^{(+)},\quad h_l^{(2)}=ih_l^{(-)}.$$

$$j_l = R_l \frac{\sin\rho}{\rho} + s_l \frac{\cos\rho}{\rho}, \quad n_l = R_l \frac{\cos\rho}{\rho} - s_l \frac{\sin\rho}{\rho},$$
$$h_l^{(\pm)} = (R_l \pm i s_l) \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho}. \tag{B.49}$$

R_l 是 $\frac{1}{\rho}$ 的具有实系数的 l 次多项式，字称为 $(-)^l$；

s_l 是 $\frac{1}{\rho}$ 的具有实系数的 $l-1$ 次多项式，字称为 $(-)^{l-1}$。

$$R_l + i s_l = \sum_{s=0}^{l} \frac{i^{s-1}}{2^s s!} \frac{(l+s)!}{(l-s)!} \rho^{-s}, \tag{B.50}$$

$$j_0 = \frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad n_0 = \frac{\cos\rho}{\rho}, \qquad h_0^{(\pm)} = \frac{e^{\pm i\rho}}{\rho},$$

$$j_1 = \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho}, \quad n_1 = \frac{\cos\rho}{\rho^2} + \frac{\sin\rho}{\rho},$$

$$h_1^{(\pm)} = \left(\frac{1}{\rho^2} \mp \frac{i}{\rho}\right) e^{\pm i\rho}.$$

渐近形式： $\rho \to \infty$ $[\rho \gg l(l+1)]$

$$j_l \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \sin\left(\rho - \frac{1}{2} l\pi\right), \quad n_l \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \cos\left(\rho - \frac{1}{2} l\pi\right),$$
$$h_l^{(\pm)} \underset{\rho\to\infty}{\sim} \frac{1}{\rho} \exp\left[\pm i\left(\rho - \frac{1}{2} l\pi\right)\right]\left[1 \pm i \frac{l(l+1)}{2\rho} - \cdots\right]. \tag{B.51}$$

在原点处的行为： $\rho \to 0$

$$j_l \underset{\rho\to 0}{\sim} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}\left[1 - \frac{\rho^2}{2(2l+3)} + \cdots\right],$$
$$n_l \underset{\rho\to 0}{\sim} \frac{(2l+1)!!}{(2l+1)}\left(\frac{1}{\rho}\right)^{l+1}\left[1 + \frac{\rho^2}{2(2l-1)} + \cdots\right]. \tag{B.52}$$

j_l 的一般行为

当 ρ 从 0 增大至 $+\infty$，ρj_l 先依 ρ^{l+1} 增大，然后越来越迅

速地增大(指数行为),直至点 $\rho=\sqrt{l(l+1)}$，此处它有一个反射点.然后函数在两个分别渐近地趋向于+1 和−1 的极端值之间无休止地振荡. 当 $\rho \gg \frac{1}{2}\, l(l+1)$ 时，渐近形式(B.51)是一个好的近似,但是一旦 $\rho \gtrsim 2l$,振荡的幅度就实际上达到了它的渐近值(最多相差 10%).

递归公式

下面,$f_l \equiv a j_l + b n_l$， a 和 b 是与 l 无关的、任意确定的系数. 我们有 $(l \neq 0)$:

$$(2l+1) f_l = \rho [f_{l+1} + f_{l-1}], \tag{B.53}$$

$$f_{l-1} = \left[\frac{d}{d\rho} + \frac{l+1}{\rho}\right] f_l = \frac{1}{\rho^{l+1}} \frac{d}{d\rho} (\rho^{l+1} f_l), \tag{B.54}$$

$$f_l = \left[-\frac{d}{d\rho} + \frac{l-1}{\rho}\right] f_{l-1} = -\rho^{l-1} \frac{d}{d\rho}\left(\frac{f_{l-1}}{\rho^{l-1}}\right), \tag{B.55}$$

由此:

$$f_l = \left[\rho^l \left(-\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\right] f_0. \tag{B.56}$$

朗斯基关系

$$\rho^2 \left[n_l \left(\frac{d}{d\rho} j_l\right) - j_l \left(\frac{d}{d\rho} n_l\right)\right] = 1, \tag{B.57}$$

由此 $(l \neq 0)$

$$\rho^2 [n_l j_{l-1} - j_l n_{l-1}] = 1. \tag{B.58}$$

III. 谐振子和厄密多项式

7. 厄密多项式

定义

$$H_n(z) = (-)^n e^{z^2} \left(\frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}\right) \quad (n = 0,1,2,\cdots,\infty), \tag{B.59}$$

H_n 是 n 次多项式，奇偶性为 $(-)^n$，具有 n 个零点。

$$H_n(z)=\begin{cases}(-)^p\dfrac{(2p)!}{p!}F\left(-p\left|\dfrac{1}{2}\right|z^2\right) & \text{如 } n=2p\\ (-)^p 2\dfrac{(2p+1)!}{p!}zF\left(-p\left|\dfrac{3}{2}\right|z^2\right) & \text{如 } n=2p+1.\end{cases}$$

(B.60)

微分方程

$$\left[\frac{d^2}{dz^2}-2z\frac{d}{dz}+2n\right]H_n(z)=0. \tag{B.61}$$

生成函数

$$\exp(-s^2+2sz)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{s^n}{n!}H_n(z). \tag{B.62}$$

递归关系

$$\frac{d}{dz}H_n=2nH_{n-1}, \tag{B.63}$$

$$\left(2z-\frac{d}{dz}\right)H_n=H_{n-1}, \tag{B.64}$$

$$2zH_n=H_{n+1}+2nH_{n-1}.$$

开始六个厄密多项式的表

$H_0=1$，　　$H_1=2z$，

$H_2=4z^2-2$，　　$H_3=8z^3-12z$，

$H_4=16z^4-48z^2+12$，　　$H_5=32z^5-160z^3+120z$。

8. 谐振子的本征函数

$u_n(Q)$ 是归一的本征函数，其本征值

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\quad(n=0,1,\cdots,\infty)$$

(相位是以这样一种方式选择的，以致关系式 (B.68) 得到满足，而且 $u_0(0)$ 是实的和正的)。

本征值方程 [$Q=(m\omega/\hbar)^{\frac{1}{2}}q$].

$$\frac{1}{2}\left(Q^2-\frac{d^2}{dQ^2}\right)u_n(Q)=\left(n+\frac{1}{2}\right)u_n. \tag{B.65}$$

生成函数

$$\pi^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2}Q^2}e^{-\frac{1}{2}t^2+\sqrt{2}Qt}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{\sqrt{n!}}u_n(Q). \tag{B.66}$$

正交归一和闭合关系

$$\int_{-\infty}^{+\infty}u_nu_pdQ=\delta_{np}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}u_n^*(Q)u_n(Q')=\delta(Q-Q').$$

递归关系

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q+\frac{d}{dQ}\right)u_n=\sqrt{n}\,u_{n-1}, \tag{B.67}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q-\frac{d}{dQ}\right)u_n=\sqrt{n+1}\,u_{n+1}, \tag{B.68}$$

$$Qu_n=\sqrt{\frac{n+1}{2}}\,u_{n+1}+\sqrt{\frac{n}{2}}\,u_{n-1}. \tag{B.69}$$

奇偶性$(-)^n$: $u_n(-Q)=(-)^nu_n(Q)$.

表示成为厄密多项式的函数

$$u_n=(\sqrt{\pi}\,2^nn!)^{-\frac{1}{2}}e^{-\frac{1}{2}Q^2}H_n(Q). \tag{B.70}$$

IV. 缔合勒让德函数和勒让德多项式;球谐函数

9. 勒让德多项式和缔合勒让德函数

定义

勒让德多项式 $P_l(l=0,1,2,\cdots,\infty)$:

$$P_l(u)=\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{du^l}(u^2-1)^l, \tag{B.71}$$

P_l 是一个 l 次多项式，字称为$(-)^l$，在区间$(-1,+1)$内具有 l 个零点.

缔合勒让德函数 $P_l^m(l=0,1,2,\cdots,+\infty;\ m=0,1,2,\cdots,l)$:

$$\begin{aligned}P_l^m(u)&=(1-u^2)^{\frac{1}{2}m}\frac{d^m}{du^m}P_l(u)\\&=\frac{(1-u^2)^{\frac{1}{2}m}}{2^l l!}\frac{d^{l+m}}{du^{l+m}}(u^2-1)^l,\end{aligned}\qquad(-1\leqslant u\leqslant 1) \tag{B.72}$$

$P_l^m(u)$ 是 $(1-u^2)^{\frac{1}{2}m}$ 和一个奇偶性为 $(-)^{l-m}$ 的$(l-m)$次多项式之积，在区间$(-1,+1)$内具有$(l-m)$个零点. 特别是:

$$\begin{aligned}&m=l\quad P_l^l=(2l-1)!!(1-u^2)^{\frac{1}{2}l},\\&m=0\quad P_l^0=P_l(u),\end{aligned} \tag{B.73}$$

$P_l(u)$ 是一个特殊的缔合勒让德函数.

微分方程

$$\left[(1-u^2)\frac{d^2}{du^2}-2u\frac{d}{du}+l(l+1)-\frac{m^2}{1-u^2}\right]P_l^m=0. \tag{B.74}$$

生成函数

$$\frac{1}{\sqrt{1-2tu+t^2}}=\sum_{l=0}^{\infty}t^l P_l(u), \tag{B.75}$$

$$(2m-1)!!(1-u^2)^{\frac{1}{2}m}\frac{t^m}{[1-2tu+t^2]^{m+\frac{1}{2}}}\quad(|t|<1)$$

$$=\sum_{l=m}^{\infty}t^l P_l^m(u). \tag{B.76}$$

正交归一关系

$$\int_{-1}^{+1} P_k^m P_l^m du = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\delta_{kl}. \qquad (B.77)$$

递归关系

$$(2l+1)uP_l^m = (l+1-m)P_{l+1}^m + (l+m)P_{l-1}^m, \qquad (B.78)$$

$$(1-u^2)\frac{d}{du}P_l^m = -luP_l^m + (l+m)P_{l-1}^m \qquad (B.79)$$

$$= (l+1)uP_l^m - (l+1-m)P_{l+1}^m \qquad (B.80)$$

(利用约定 $P_{-1}=0$,当 $l=0$ 时这些关系式也是有效的).

特殊值

$$\begin{aligned} &P_l(1)=1, \quad P_l(-1)=(-)^l, \\ &\text{如 } m\neq 0, \quad P_l^m(1)=P_l^m(-1)=0 \end{aligned} \qquad (B.81)$$

$$P_l^m(0) = \begin{cases} (-)^p \dfrac{(2p+2m)!}{2^l p!(p+m)!} & \text{如 } l-m=2p \\ 0 & \text{如 } l-m=2p+1. \end{cases}$$

开始五个勒让德多项式的表

$$P_0=1, \quad P_1=u, \quad P_2=\frac{1}{2}(3u^2-1),$$

$$P_3=\frac{1}{2}(5u^3-3u), \quad P_4=\frac{1}{8}(35u^4-30u^2+3).$$

10. 球谐函数

极坐标中的算符 L_x, L_y, L_z

L_x, L_y, L_z 是厄密微分算符,(在 $\hbar=1$ 的单位系中)由

$$\boldsymbol{L} \equiv \frac{1}{i}(\boldsymbol{r}\times\nabla)$$

定义.

我们取 Oz 为极轴;(r,θ,φ) 是 $\boldsymbol{r}$ 的极坐标;用 $\Omega\equiv(\theta,\varphi)$ 来记两个角度坐标的集合$\Big($$\varphi=0$:平面 zOx;$\varphi=\dfrac{\pi}{2}$: 平

面 zOy)。立体角元是：

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi.$$

在极坐标中：

$$L_z = \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{B.82}$$

$$L_\pm \equiv L_x \pm iL_y = e^{\pm i\varphi}\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\ \frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \tag{B.83}$$

$$\boldsymbol{L}^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{B.84}$$

球谐函数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 的定义：

算符 $\boldsymbol{L}^2$ 和 L_z 的共同本征函数：

$$\boldsymbol{L}^2 Y_l^m = l(l+1)Y_l^m, \qquad L_z Y_l^m = mY_l^m, \tag{B.85}$$

$$(l = 0,1,2,\cdots,\infty;\ m = -l,-l+1,\cdots,l). \tag{B.86}$$

我们沿用下列惯例而完成定义：

a) Y_l^m 在单位球上是归一为一的；

b) 它们的相位是这样的，以致递归关系 (B.89) 得到满足，且 $Y_l^0(0,0)$ 是实的和正的.

正交归一和闭合关系

$$\int Y_l^{m*}Y_{l'}^{m'}d\Omega \equiv \int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta Y_l^{m*}(\theta,\varphi)Y_{l'}^{m'}(\theta,\varphi) = \delta_{mm'}\delta_{ll'}, \tag{B.87}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}Y_l^{m*}(\theta,\varphi)Y_l^m(\theta',\varphi') = \frac{\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi')}{\sin\theta} \equiv \delta(\Omega-\Omega'). \tag{B.88}$$

Y_l^m 组成单位球上的平方可积函数的一个完全正交归一系.

递归关系

$$L_{\pm}Y_l^m = [l(l+1) - m(m\pm 1)]^{\frac{1}{2}}Y_l^{m\pm 1} = [(l\mp m)(l+1\pm m)]^{\frac{1}{2}}Y_l^{m\pm 1}, \tag{B.89}$$

$$\cos\theta\, Y_l^m = \left[\frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)}\right]^{\frac{1}{2}}Y_{l+1}^m + \left[\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}\right]^{\frac{1}{2}}Y_{l-1}^m. \tag{B.90}$$

奇偶性$(-)^l$

在空间反射 $(\theta,\varphi)\to(\pi-\theta,\varphi+\pi)$ 下：

$$Y_l^m(\pi-\theta,\varphi+\pi) = (-)^l Y_l^m(\theta,\varphi). \tag{B.91}$$

复共轭

$$Y_l^{m*}(\theta,\varphi) = (-)^m Y_l^{-m}(\theta,\varphi). \tag{B.92}$$

同缔合勒让德函数($m\geqslant 0$)的联系

$$Y_l^m(\theta,\varphi) = (-)^m\left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}. \tag{B.93}$$

Y_l^m 是 $e^{im\varphi}\sin^{|m|}\theta$ 和 $\cos\theta$ 的一个奇偶性为 $(-)^{l-m}$ 的 $(l-|m|)$ 次多项式之积. 特别是：

$$m=0 \quad Y_l^0 = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta), \tag{B.94}$$

$$m=l \quad Y_l^l = (-)^l\left[\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(2l)!}{2^{2l}(l!)^2}\right]^{\frac{1}{2}}\sin^l\theta e^{il\varphi}. \tag{B.95}$$

谐多项式和球谐函数

$(2l+1)$ 个 x,y,z 的 l 次齐次多项式

$$\mathscr{Y}_l^m(\boldsymbol{r}) \equiv r^l Y_l^m(\theta,\varphi) \quad (m=-l,-l+1,\cdots,+l) \tag{B.96}$$

组成一套$(2l+1)$个线性独立的 l 次谐多项式[1]:

$$\Delta\mathscr{Y}_l^m(\boldsymbol{r})=0. \tag{B.97}$$

开始几个球谐函数的表

$$Y_0^0=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},\quad Y_1^0=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\quad Y_2^0=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1),$$

$$Y_3^0=\sqrt{\frac{7}{16\pi}}(5\cos^3\theta-3\cos\theta),$$

$$Y_1^1=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\varphi},\quad Y_2^1=-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\varphi},$$

$$Y_3^1=-\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)e^{i\varphi},$$

$$Y_2^2=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{2i\varphi},\quad Y_3^2=\sqrt{\frac{105}{32\pi}}\sin^2\theta\cos\theta e^{i\varphi},$$

$$Y_3^3=-\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\theta e^{3i\varphi}.$$

11. 各种展开式和公式

相加定理

$$\frac{2l+1}{4\pi}P_l(\cos\alpha)=\sum_{m=-l}^{+l}Y_l^{m*}(\theta_1,\varphi_1)Y_l^m(\theta_2,\varphi_2) \tag{B.98}$$

[α = 方向 (θ_1,φ_1) 和 (θ_2,φ_2) 之间的角度].

算符 Δ 和 $\Delta+k^2$[2] 的格林函数

---

1) (B.97)产生于算符恒等式

$$\Delta\equiv\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}r-\frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2},$$

它对在点 $r=0$ 处为有限的任何函数都成立. 根据定义, $h(x,y,z)$ 是一个谐多项式,如果它关于 x,y,z 是齐次的,且满足方程: $\Delta h=0$. 存在有$(2l+1)$个线性独立的 l 次谐多项式.

2) $\Delta\left(\frac{1}{r}\right)=-4\pi\delta(r)$, $(\Delta+k^2)\frac{e^{ikr}}{r}=-4\pi\delta(r)$, $(\Delta+k^2)\frac{\cos kr}{r}=-4\pi\delta(r)$.

$$\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{r_<^l}{r_>^{l+1}}P_l(\cos\alpha), \tag{B.99}$$

$$\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}=k\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)j_l(kr_<)h_l^{(+)}(kr_>)P_l(\cos\alpha), \tag{B.100}$$

$$\frac{\cos(k|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|)}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}=k\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)j_l(kr_<)n_l(kr_>)P_l(\cos\alpha) \tag{B.101}$$

(α = 方向 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 之间的角度；$r_<$ = 长度 r_1 和 r_2 中的较小者；$r_>$ = 长度 r_1 和 r_2 中的较大者).

公式(B.100)和(B.101)对任何 k 有效，即使 $\boldsymbol{k}$ 是复数.

平面波和纯库仑散射波的展开

极轴 ≡ z 轴二入射被矢 $\boldsymbol{k}$ 的方向

$$e^{ikz}=\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta), \tag{B.102}$$

$$\psi_c=\frac{1}{kr}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l e^{i\sigma_l}F_l(\gamma;kr)P_l(\cos\theta), \tag{B.103}$$

$$f_c(\theta)=\frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\sigma_l}\sin\sigma_l P_l(\cos\theta). \tag{B.104}$$

γ, φ_c, $f_c(\theta)$, F_l,σ_l 的定义就是 §§ 4 和 5 中的定义 [方程 (B.18), (B.19), (B.25), (B.29)和 (B.32)].

选择不同的极轴，展开式(B.102), (B.103) 和(B.104)保持有效，因为 θ 表示方向 $\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{r}$ 之间的角度.

应用相加定理，我们可以推导出这几个表示式的具有宗量 (θ_k,φ_k) 和 (θ_r,φ_r) 的球谐函数级数展开式. 譬如:

$$e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=4\pi\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l}i^l j_l(kr)Y_l^{m*}(\theta_k,\varphi_k)Y_l^m(\theta_r,\varphi_r). \tag{B.105}$$

第一部分 公式体系及其解释

第一章 量子论的起源 I
1 引言
I 经典时代的终结 2
2 经典理论物理掌
3 对微观现象认识的进展和物理学中量子的出现
II 光量子即光子 9
4 光电效应
5 康普顿效应
6 光量子和干涉现象
7 结论
III 物质系绕的量子化 19
8 原子光谱和卢瑟福经典模型的困难
9 原子能级的量子化
10 其它量子化的例子 空间量子化
IV 对应原理和旧量子论 25
11 经典微粒说的不足
12 对应原理
13 对应原理在里德伯常数计算中的应用
14 经典力学方程的拉格朗日形式和哈密顿形式
15 玻尔-索末菲量子化规则
16 旧量子论的成就和局限性性
17 结论

第二章 物质波与薛定谔方程 44
1 历史概观和以后各章的总计划
I 物质波 48
2 引言
3 自由波包 相速度和群速度
4 慢变场中的波包
5 原子能级的量子化
6 物质波的衍射
7 物质的粒子结构
8 波粒二象性的普遍性
II 薛定谔方程 59
9 物质粒子数守恒定律
10 波动方程的必要性及加于这个方程的条件
11 算符概念
12 自由粒子的波动方程
13 标势中的粒子
14 电磁场中的带电粒子
15 由对应性构薛定谔方程的普遍规则
III 不含时间的薛定谔方程 72
16 找稳定解
17 方程的一般性质 能谱的本质

第三章 一维量子化体系 78
1 引言
I 方形势 79
2 一般评述
3 势阶梯 波的反射和透射

4 无限高势垒
5 无限深方势阱 分立谱
6 有限方势阱的研究 共振
7 方势垒的贯穿 “隧道”效应
II 一维薛定谔方程的一般性质 101
8 朗斯基式的性质
9 解的渐近行为
10 本征值 璐的性质
11 非束缚态波的反射和透射
12 束缚态的节点数
13 正交关系
14 关于宇称的注记

第四章 波粒二象性的统计解释和测不准关系 119
1 引言
I 波动力学中波函数的统计解释 120
2 粒子位置测量结果的几率和动量测量结果的几率
3 模方的时间守恒
4 流的概念
5 r函数的平均值或p函数的平均值
6 多粒子体系的推广
II 海森伯测不准关系 134
7 量子化粒子的位置一动量测不准关系
8 位置动量测不准关系的精确陈述
9 推广共轭变量间的测不准关系
10 时间-能量测不准关系
11 光子的测不准关系
III 测不准关系和测量过程 144
12 在测量操作期间不可控制的扰动
13 位置测量
14 动量测量
IV 在量子理论中现象的描述 并协性和因果性 154
15 统计解释引起的问题
16 微观现象的描述和井协
17 并协变量 相容变量
18 波粒二象性和井协性
19 井协性和因果性

第五章 波动力学的发展及其解释 167
1 引言
I 厄密算符和物理量 168
2 波函致空间
3 平均值定义
4 不存在涨落和本征值问题
II 分立谱的研究 176
5 厄密算符的本征值和本征函数
6 波函数按正交归一本征函数的级数展开
7 和一个算符相联系的量的测量结果的统计分布
III 一般情况下测量的统计 184
8 连续谱的困难狄拉克δ函数的引人
9 一般情况下本征函数的级数展式闭合关系
10 一般情况下测量结果的统计分布
11 处理连续谱的其它方式
12 注释和例子

IV 波函数的确定 201
13 测量过怪和波包的“过祥”理想测量
14 对易的观测算符和相容变量
15 对易观测算符的完备系
16 纯态和混合
V 对易子代数和它的应用 211
17 对易子代数和基本对易子的性质
18 角动量的对易关系
19 统计分布的时间依赖关系 运动积分
20 运动积分的例子 能量 字称

第六量 经典近似与WKB方法 219
I 波动力学和经典近似 219
1 一般评述
2 厄任费斯脱定理
3 波包的运动和伸展
4 薛定谔方程的经典极限
5 用于库仑散射 卢瑟福公式
II WKB方法 236
6 方法的原理
7 一维WKB解
8 WKB近似成立的条件
9 转折点和联接公式
10 势垒贯穿
11 势阱的能级

第七章 量子论的一般形式（A） 教学根架 249
1 叠加原理和动力学态的矢量表示
I 矢量和算符 251
2 矢量空间“刃”矢量
3 对偶空间“刁”矢里
4 标积
5 线性算符
6 两个矢里空间的张最积
II 厄密算符投影算符和观测算符 261
7 伴算符和共轭关系
8 厄密（或自伴）算符 正定厄密算符幺正算符
9 本征值问理和观测算符
10 投影子（投影算符）
11 投影子代数
12 具有完全分立谱的观测算符
13 一股情况下的观测算符 广义的闭合关系
14 观测算符的函数
15 与观测算符对易的算符 对易观测算符
III 表象理论 282
16 关于有限矩阵的一般评述
17 方阵
18 扩展到无限矩阵
19 矢量和算符的矩阵表象
20 矩阵变换
21 表象的代换
22 算符和矢量的幺正变换

第八章 一般形式（B） 物理现象的描述 303

1 引言
I 动力学态和物理量 305
2 几率的定义关于侧量的假设
3 量子化体系的观测算符和它们的对易关系
4 海森伯测不准关系
5 动力学态的定义以及空闻构建
6 具有经典模拟的一维量子体系
7 由较简单空间的张量积来建造体系的空间
II 运动方程 319
8 演变算符和薛定谔方程
9 薛定谔"表象"
10 海森伯“表象”
11 海森伯“表象”和对应原理
12 运动常数
13 平均值的运动方程 时间-能量测不准关系
14 中间“表象”
III 理论的各种表象 333
15 表象的定义
16 波动力学
17 动量表象
18 一个例于 自由波包的运动
19 其它表象 能量在其中为对角的表象
IV 量子统计 342
20 不完全已知的体系和统计混合
21 密度算符
22 统计混合在时间上的演变
23 密度算符的特征性质
24 纯态
25 经典绕计和量子绕计

第二部分 简单体系

第九章 用分离变量法求解薛定谔方程 中心势 353
1.引言
I 在中心势中的粒子 一般处理 354
2 哈密顿量在球极坐标中的表示式
3 角度变数的分离 球谐函教
4 径向方程
5 径向方程的本征解 谱的性质
6 结论
II 中心方阱势 自由粒子 365
7 球贝塞耳函数
8 自由粒子 平面波和自由球面波
9 平面波用球谐函数展开
10 球方阱的研究
III 两体问题质心运动的分离 372
11 在经典力学中质心运动的分离
12 量子化的两粒子体系的质心运动的分离
l3 扩展到多于两个粒子的体系

第十章 散射问题 中心势和相移方法 381
1 引言
I 截面和散射振幅 381
2 截面的定义

3 稳定的散射波
4 用一束波包来表示散射现象
5 波包被一个势散射
6 截面的计算
7 两个粒子的碰撞 实验室系和质心系
II 被一中心势散射 相移 398
8 分解为分波 相移方法
9 碰撞的半经典表示 碰搜参数
III 有限程的势 403
10 相移同对数微商之间的关系
11 相移在低能区的行为
12 较高阶的分波 级数的收敛
13 被一个硬球散射
IV 散射共振 410
14 被一个深方阱散射
15 散射共振的研究 亚稳态
16 亚稳态寿命的观测
V 各种公式和性质 419
17 相移的积分表示
18 对势的依赖性 相移的正负号
19 玻恩近似
20 有限程理论 贝推公式

第十一章 库仑相互作用 427
I.引言
I 氢原于 428
2 氢原子的薛定谔方程
3 基态结合能的数量级
4 薛定谔方程在球坐标中的解
5 能谱 简并性
6 束搏态的本征函数
II 库仑散射 437
, 7 库仑散射波
8 卢瑟福公式
9 分解为分波
10 波的球谐函数履开式
11 用一短程相互作用来修正库仑势

第十二章 谐振子 450
1 引言
I 哈密顿量的本征态和本征矢 451
2 本征值问题
3 算符??和N的引进
4 N的谱和基
5 {N} 表象
6 产生算符和消灭算符
7 {Q}表象 厄密多项式
II 应用和各种性质 460
8 本征函数????的生成函数
9 海森伯方程的积分
10 经典和量子化的振子
11 极小波包的运动和经典极限
12 处于热力学平衡的谐振子
III 多维各向同性谐振子 472

13 p维各向同性振子的一般处理
14 两维各向同性振子
15 三维各向同性振子

附录A 分布δ函数和傅里叶变换 484

附录B 特殊函数和有关公式 503