量子论的物理原理

〔德〕W. 海森伯 著

科学出版社

量子论的物理原理

〔德〕W. 海森伯 著

王正行 李绍光 张 虞 译

TY1/156/02

北京师范大学
藏 1075933 书
图 学 书 馆

1983

内 容 简 介

本书是量子论的一本经典著作，并且全面系统地论述了哥本哈根学派的观点．书中阐述了量子论的物理意义，特别着重于粒子图象和波动图象的等价性，讨论了测不准原理对统一这两种图象的意义和必要性，有不少内容是作者独到的见解．本书不仅对了解物理学史很有参考价值，对于初学者掌握量子论的物理原理也很有帮助，可供大学物理系高年级学生和研究生阅读，也可供有关教师和研究人员参考．

Werner Heisenberg
DIE PHYSIKALISCHEN PRINZIPIEN
DER QUANTENTHEORIE
4 AUFLAGE, VERLAG VON S.HIRZEL, 1944

量子论的物理原理
〔德〕W. 海森伯 著
王正行 李绍光 张 虞 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

*

1983年4月第 一 版 开本：787×1092 1/32
1983年4月第一次印刷 印张：4 7/8
印数：0001—9,000 字数：107,000

统一书号：13031·2208
本社书号：3018·13—3

定价：0.78 元

J311/156/02

中译本前言

量子论和相对论是现代物理学的两大支柱．特别是量子论的建立，揭示了微观世界物质运动的基本规律，对现代许多科学技术的发展提供了强有力的理论武器，并起了决定性的推动作用．现在量子论不但本身已日臻完善，而且在科学技术上的应用也日益广泛和深化．

量子论是在本世纪二十年代建立起来的．本书作者海森伯是这一理论的重要创建者之一，他对量子论的发展曾作出了许多重大贡献．本书是他在1929年对量子论的物理原理所作的系统演讲，并于1930年出版了德文本和英文本，以后又陆续重版多次．书中对量子论物理基础的阐述很有特色，有不少是作者独到的见解，特别是对哥本哈根学派的观点和思想作了完整论述，是这一学派的一本代表作，它对我们了解量子论的发展历史有一定参考价值．尽管现在关于量子论已出版了许多优秀著作，人们对一些问题的认识已经更为深入，但海森伯在本书中所阐述的一些观点和内容，对我们加深对量子论的理解仍然是很有价值的．鉴于本书是一本经典著作，又是哥本哈根学派的代表作，我们把它译成中文出版，以供我国读者参考．中译本主要按照1944年德文第四版译出，同时参考了英译本．附录则采用了英译本的．译文不当之处，欢迎读者批评指正。

英文版前言

我很乐于把海森伯教授在芝加哥的讲演《量子论的物理原理》推荐给更为广泛的读者. 熟悉新量子力学成长过程的人，对海森伯教授在量子力学发展中的主导地位是一致公认的. 事实上，正是他第一个清楚地看出，在旧量子论中，我们是用原子机制来描述光谱的，而我们对原子机制却并没有明确的认识；也正是他第一个找到了不假设存在原子机制就能解释(至少是描述)光谱现象的方法. 而且"测不准原理"已成为我们习惯的用语，我们有此机会向它的创立者学习其涵义，这是特别幸运的.

新量子力学能使我们更好地理解原子尺度的现象，这一威力已变得越来越明显了. 氢原子结构，带光谱中半整数量子数的存在，光电子在空间的连续分布，以及放射性衰变现象等，都是新理论结果胜过旧量子论的一些例证. 物理学史的这一篇章无疑尚未完成*，而它确已进展到了一个新阶段，值得暂停下来思考一下已写成部分的涵义了. 在这样回顾时，有海森伯教授来引导我们思考，真是幸运之至.

A. H. 康普顿

---

* 这是指当时的情况. ——中译者

序　　言

1929 年春天，我在芝加哥大学讲学，使我有机会重新审定量子论的基本原理．自从 1927 年玻尔完成了总结性的研究以来，这些原理并没有实质性的改变，而这个理论的重要结果则得到了许多新实验的支持(例如喇曼效应)．不过至今还有不少物理学家，对这些新的原理与其说有了清晰的理解，还不如说多半只是对其正确性持有某种信念．因此，我觉得把在芝加哥的讲稿印成一本小册子出版还是合适的．

由于量子论的数学工具已经有了几本很出色的著作，而且比起物理原理来，这些数学知识在很多方面更为人们所熟悉，所以我只是把它们写成公式汇编形式放在书末*．在正文中我尽量只使用最基本的公式和计算．

本书特别强调的是粒子概念和波动概念的完全等价性，这在新近的数学理论形式中得到了清晰的表述．本书对“粒子”和“波动”这两个词作了完全对称的安排，这旨在表明在讨论一些基本问题(例如因果性问题)时，无论从这一概念或那一概念出发，都将失之于偏，而不能窥其全貌．此外，我还尽可能清晰地区分了时空中的波与位形空间中的薛定谔波．

但是整个说来，本书并没有包含在已发表的文章，特别是在玻尔的著名研究中所找不到的东西．如果本书能对传播指

---

* 英译本对原书附录进行了改写．——中译者

导近代原子物理学整个发展的“量子论的哥本哈根精神”(请允许我自己这么说)有所裨益,我觉得就达到目的了.

W. 海森伯

1930年3月3日　于莱比锡

目　　录

第一章　引论 …… (1)

1．理论和实验 …… (1)

2．量子论的基本概念 …… (3)

a. 威耳孙云室照相 …… (3)

b. 物质射线的衍射(戴维孙-革末实验；汤姆孙实验；茹普实验) …… (4)

c. 电磁辐射的衍射 …… (5)

d. 康普顿-西蒙实验 …… (6)

e. 夫兰克-赫兹碰撞实验 …… (7)

第二章　粒子图象物理概念的批判 …… (11)

1．测不准关系 …… (11)

2．用不同测量仪器验证测不准关系 …… (16)

a. 自由电子位置的测定 …… (16)

b. 自由电子速度或动量的测量 …… (21)

c. 束缚电子 …… (25)

d. 能量的测量 …… (32)

第三章　波动图象物理概念的批判 …… (39)

1．波动图象的测不准关系 …… (39)

2．用不均匀电磁场验证测不准关系 …… (43)

第四章　量子论的统计诠释 …… (45)

1．数学探讨 …… (45)

2．几率的干涉 …… (48)

3．玻尔的并协性概念 …… (50)

第五章　一些重要实验的讨论 …… (53)

1．威耳孙云室照相 …… (53)

2．衍射实验 …… (61)

3. 爱因斯坦-茹普实验 …… (63)
4. 辐射的发射、吸收和色散 …… (65)
a. 守恒定律的应用 …… (65)
b. 辐射和物质的统一处理 …… (66)
5. 干涉和守恒定律 …… (69)
6. 康普顿效应和康普顿-西蒙实验 …… (72)
7. 辐射的涨落现象 …… (75)
8. 量子论的相对论形式 …… (80)
附录 量子论的数学工具 …… (83)
1. 物质的粒子图象 …… (83)
2. 变换理论 …… (95)
3. 薛定谔微分方程 …… (102)
4. 微扰论 …… (106)
5. 双原子共振;变换矩阵的物理诠释 …… (110)
6. 辐射的粒子图象 …… (118)
7. 量子统计法 …… (118)
8. 物质与辐射的波动图象:经典理论 …… (121)
9. 波场的量子理论 …… (127)
10. 对负电荷波的应用 …… (132)
11. 粒子图象的量子论与波动图象的量子论在数学上等价的证明 …… (136)
12. 对辐射理论的应用 …… (139)
参考文献 …… (141)
人名和术语索引 …… (143)
译后记 …… (146)

第一章 引 论

1. 理论和实验

物理实验及其结果也同日常生活中的事物一样，都能够用我们对周围世界的直观的空间-时间概念以及跟这个空间-时间世界相适应的习惯语言来描述．如果物理学本身只是满足于描述照相底版上的线条位置或者诸如此类的事物，认为这就是实验结果，而不需要任何理论，则物理学中一切认识论的讨论就都是多余的了．然而，我们却还要对各种经验进行综合分类，把结果归纳成原因与效应，并且根据其系统化的程度建立理论．这种过程不仅对物理学是这样，在日常生活中对各种最原始的经验也是如此，这是一切概念形成的基础．

但是，就是在这个概念形成的过程中，人们往往离开了经验的坚实基础，经常是不自觉地不经过验证就进行推广，以致到了最后，理论与实验之间明显地发生矛盾．因此，为了防止这种情况出现，必须是只有经过实验验证的概念，才可以用来描述各种现象．然而不幸的是，这个要求根本无法满足，因为这要对所有日常最普通的概念都重新审查和修正，而很难估计在我们的语言中能有多少最后可以保留下来．这样普遍地重新审查和修正，看来在概念上存在不可克服的困难．在这种情况下，还不如不经过严格的实验验证就先将许多概念引到物理理论中来，然后再根据每个理论的独特性质来作出判断，看看是否有必要、以及在什么地方对基本概念进行修正．

例如，狭义相对论的特征就是按照实验对“标尺”和“时钟”等概念进行了批判．这个批判是从这样一点开始的，即在我们平常的概念中，始终隐含着这样一个假设：在原则上存在具有无限大传播速度的信号．但是后来经验证实，在自然界中并不存在任何比光速更快的速度，于是我们便把这个对速度的限制设想为一条自然定律，并且对于与此相关的所有概念都进行了修正，从而对原先看起来相互矛盾的各个事实求得了一个前后一致的解释．广义相对论对于经典概念的偏离就更大，它最后只是无批判地接受了空间-时间一致性这个概念．按照广义相对论，通常的语言(经典概念)只适用于描述引力常数和光速的倒数都小到可以忽略的那些实验．虽然相对论要求物理学家必须具有高度的抽象能力，但由于它还允许把世界严格地划分为主体和客体，因而能够精确地表述因果律，所以依然能够满足自然科学在这方面的传统要求．而量子论的困难恰巧就是从这一点开始的．在原子物理学中，因为在很大一个领域内，光速的倒数 $1/c$ 是可以忽略的，不必对“标尺”和“时钟”等概念立即进行深入批判，但是必须对于空间-时间一致性概念和“观测”概念进行彻底修正，特别是在讨论某些实验时，必须考虑到客体与观测者之间的相互作用，这种相互作用对于任何观测都是不可避免的．在经典理论中，我们总是假定这种相互作用或者可以忽略，或者可以加以控制，即通过计算来将其影响消去．

但是，在原子物理学中却不允许我们做这种假定，因为原子过程的特征不是连续变化的，“观测者”与“客体”之间的相互作用会对被观测体系引起不可控制的大的变化．

这种情况的直接后果是：由于实验对被观测体系有不可控制的影响，会改变先前测得的物理量值，因而一般说来，任何一个测定某些物理量的实验，同时也就会改变以前所获得

的另一些物理量的知识.即使定量地追溯这种影响,我们仍会发现,在很多情况下,同时测量两个不同物理量时总是存在一个不能再提高的精度下限. 相对论对经典概念进行批判的出发点,是假设不存在大于光速的信号速度. 类似地,我们可以把同时测量两个不同的物理量有一个精度下限,即所谓测不准关系假设为一条自然定律,并以此作为量子论对经典概念进行批判的出发点. 这个"测不准关系"告诉我们,要对原子过程作出一致描述,必须在多大程度上摆脱经典概念的限制.

因此,本书下面考虑的程序是: 首先,重新审定所有由有关实验引入的概念;其次,对这些概念的适用范围加以限制;然后指出,这些被限制的概念与量子论的数学形式一起,就构成了一个自洽的体系.

2. 量子论的基本概念

原子物理学最重要的概念可以从下述几个实验导出.

a. 威耳孙云室照相[1]

当放射性元素发射出来的 α 射线和 β 射线穿过充满过饱和蒸汽的云室时,会使蒸汽凝结,形成一种线状的径迹(图1). 这个实验证明 α 和 β 射线具有不连续的特征,并且表明,我们可以适当地把这些射线当成是由一些很小的高速飞行的粒子组成的. 在威耳孙云室中由水滴形成的径迹直接显示出单个粒子的轨道. 对于一个粒子或者微粒,我们总是理解为像经典力学的质点那样运动的一个点状物体,它的运动状态完全取决于它周围的物理场的影响. 我们知道,径迹的形成是由于在云室中飞行的粒子与在其轨道上的蒸汽原子发生了碰撞并且使它电离的结果. 这样产生的离子使得它们周围的蒸汽

凝结，形成生长小水滴的原始核．于是，沿着粒子飞行的轨道，由小水滴组成了一条可以直接观测的径迹．

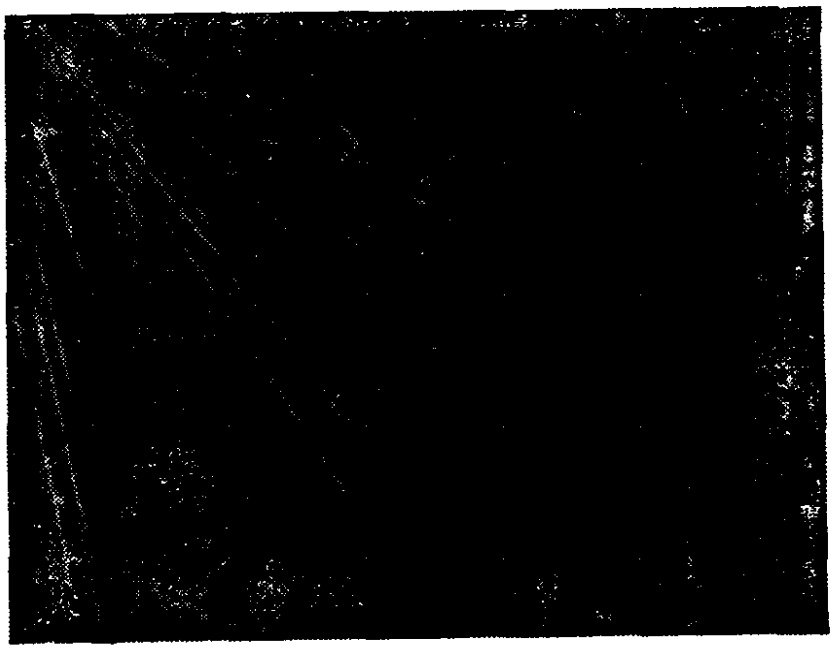

图 1

大家知道，我们根据粒子在电磁场中的偏转可以测出粒子的速度和质量，并且还可以进一步测出单个粒子的电荷．

b. 物质射线的衍射[2]（戴维孙-革末实验；汤姆孙实验；茹普实验）

当物质射线*穿过晶格（空间点阵、一维点阵）时会发生干涉现象，它跟可见光和伦琴射线的干涉现象完全一样（图 2 是根据汤姆孙实验拍摄的物质射线的德拜-谢乐像）．当然，物质射线被晶格反射时同样也会发生这种现象．因此在这里可以直观地把物质射线解释为一种波动过程．

就像在光学中那样，通过测量不同阶的衍射峰，可以确定

---

* 海森伯把除光子以外的其他粒子都称为物质射线或物质粒子，而把光子叫做场粒子．——中译者

物质波的波长. 波长 λ 与单个微粒的动量 p 之间有一个经验关系，根据 a 节所讨论的现象，这个动量必定是属于物质射线

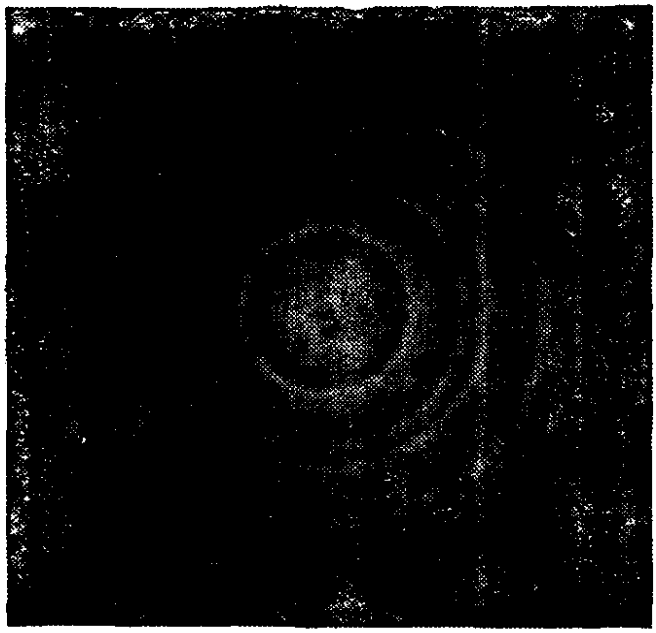

图 2

的. 按照德布罗意公式，波长为

$$\lambda = \frac{h}{p},$$

式中的 h 为普朗克常数.

c. 电磁辐射的衍射

当可见光或伦琴射线穿过光栅或晶格，或者被其反射时，大家知道，会发生干涉现象. 这个现象是射线的波动理论的基础，并且按照一种大家都知道的方法，可以用它来测量该射线的波长. 图 3 是一张用德拜-谢乐法拍摄的伦琴射线照片，其原理是令一束伦琴射线投射到晶体粉末上，排列不规则的各个晶粒除了透过原始射线束外，还要使射线衍射，这些射线的叠加就产生了图 3 的图样.

可能使另一个原子放出一个电子，而这个电子通过其雾迹也是看得见的. 从威耳孙云室的观测，可以确定上述光量子引起的这两个过程发生的位置，因此自然也就确定了它们联线的方向，这就是光量子运动的轨道(图 4 的下图是碰撞过程的真实照片；上图是同一张照片，用箭头标出了粒子的轨道).

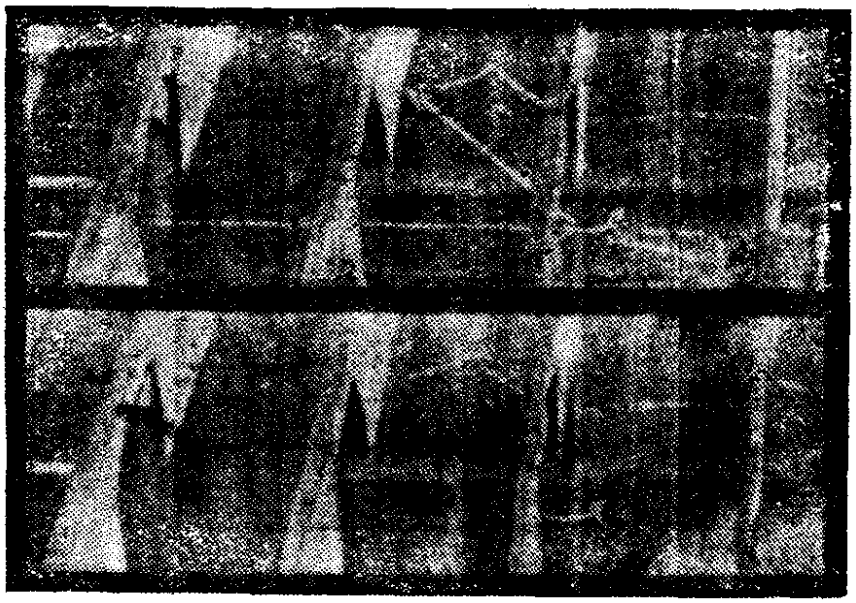

图 4

康普顿-西蒙实验的照片在事实上证明了这里遵守弹性碰撞定律，从而提供了电磁辐射具有粒子性的直接证据.

e. 夫兰克-赫兹碰撞实验[5]

我们令一束比较慢的匀速电子射线穿过气体. 改变电子速度，电流就发生变化，而在速度(能量)的某些特定的分立值处，电流发生不连续突变. 对这个实验的精确分析给出了下述的解释: 气体中的原子本身只能取一定的分立能量值(玻尔的基本假设). 当能量值已知时，按照玻尔理论，就说原子处于一个"定态". 如果一个电子的动能不足以使原子从原来的能态跃迁到高一级能态中去，则电子只能同原子发生弹性

碰撞，而这种碰撞不会改变电子的速率. 如果我们现在把电子射线的能量提高到某个一定值，使得单个电子的动能足以使原子跃迁到更高一级能态中去，则在电子射线穿过气体时，一部分电子便会把它的能量传给气体的原子，于是在这一临界点上电流就急速下降(图 5).

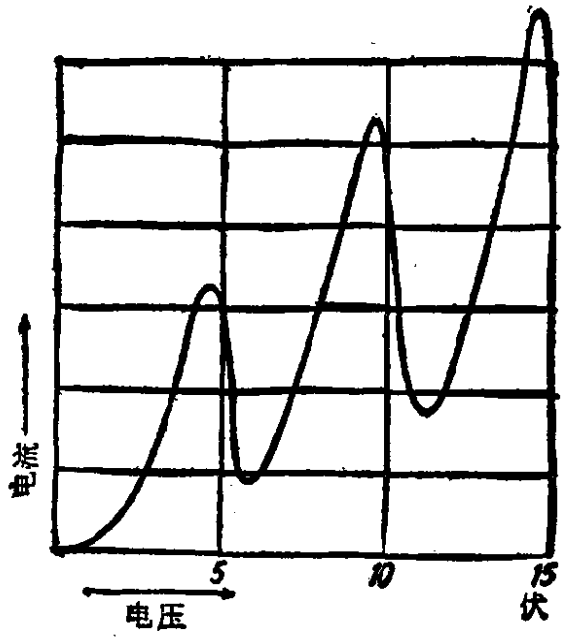

图 5

上述由夫兰克-赫兹实验所阐明的定态概念，最为明确地表达了我们所观测到的一切原子过程都具有不连续的特征.

由上述基本实验首先可以知道，物质和射线具有明显的二象性，它们的行为有时象波动，有时却又象粒子. 早在二十多年前，爱因斯坦就已经指出了辐射现象的这种波粒二象性，但只是到了后来，德布罗意才认识到物质同样也具有二象性[6]. 而我们知道，物质不可能同时既是波动又是粒子，这两个概念完全不同. 这个困难只能这样来解决，即认为粒子和波动这两个图象都只是一种类比：有时候像，有时候又不像. 事实上，实验只是证明电子在某些实验中的行为像粒子，但绝

对没有表明电子具有粒子图象的全部属性．对于波动图象同样也是这样．作为类比，这两种图象只有在一定限度内才有效，原子现象作为一个整体来说，不能直接用我们的语言来描述．光和物质是统一的物理现象，它们表观上的二象性起源于我们语言本身的局限性．

在引言中已经强调过，我们的语言并不能描述原子过程，这是不足为奇的．因为通常的语言都是用来描述日常的生活经验的，而这些经验总是包含大量原子的过程，我们对单个原子从来没有进行过观测，所以我们对原子过程并没有任何的直觉．幸而原子现象的数学规则完全不需要这样的直觉，我们已经有了一个量子论的数学形式，可以用它来处理所有的原子物理实验．但是若想从数学中得出原子过程的直观图象，那我们就只好满足于波动和粒子图象所提供的不完备的类比．

正如玻尔所指出的那样[7]，直观图象的二象性同样也是批判原先引进到理论中的那些图象和概念的一个自然出发点．不加批判地同时运用波动和粒子图象，势必会导致直接的矛盾．由这两个图象同时并存这一点出发，我们就可以立即推出，在这两个图象中，我们不论运用哪一种图象，自然界都给它设下了限制．例如，根据波动图象，可以求出对于运用粒子图象的限制．正像玻尔所指出的那样，这给出了粒子的动量与坐标之间测不准关系的一个很简单的推导．同样，我们也可以从粒子概念出发，求出自然界给波动图象所定下的限制．

在对量子论的基本概念进行批判之前，我们还必须强调指出，在历史上，量子论数学工具的发展先于对原子物理学原理的理解．不过，为了不致于在理解量子论的基本关系时一

开始就遇到过多的数学困难，我们把量子论的数学公式，除了对一般性讨论所必需者外，都列在书末(在正文中引用时简称为M). 当然在许多例子中，我们仍然需要引用这些公式，因为离开数学就无法把物理问题讨论彻底.

第二章　粒子图象物理概念的批判

1. 测不准关系[8]

位置、速度和能量等概念，都是从日常经验的简单实验中得来的，在这些实验中，宏观物体的力学行为就用这些言词来描述．后来，因为在一些基本实验中电子所呈现的力学行为与日常经验中的物体相似，人们就把这些概念移用来描述电子．但是我们知道，只有在某些有限的范围内才存在这种相似性，所以粒子图象概念的适用范围也就必须受到相应的限制．按照玻尔的方法[7]，可以很简单地得出这一限制，因为我们知道，原子物理学的所有直观(即用时空描述的)过程必然也可以用波动图象来描述．下面的考虑适用于电子的三个空间坐标中的任何一个，因此在这里只讨论其中一个就行．大家知道，电子的位置只能测量到一定的精度 Δq，这个事实在波动图象中可以用这样一个波函数来描述，它的振幅只在大小约为 Δq 的一个很小区域内才显著地异于零．这种结构的波函数总可以由一定数量的分波叠加而成，这些分波互相干涉，在这个小区域 Δq 之内彼此加强，而在这个区域之外彼此相消．我们把这种图象称为波包．普遍的数学定理表明，由单个的分波适当地叠加，总可以构成一个任意形状的波包．一般说来，随着时间的进展，这个波包的大小和形状都会逐渐变化，除了某些特殊情况外，最后将弥散到整个空间．波包的速度就相当于电子的速度．但波包的准确速度无法定义，因为如上所述，波包除了前进之外，还会扩展和发散．波包的发散

给动量(质量×速度)的测量带来一定的不确定性，我们用 Δp 来表示动量的测不准值．根据最简单的光学定律和数学附录中的 $M(83)$，$M(85)$ 式，可以推出

$$\Delta q \Delta p \gtrsim h. \tag{1}$$

这里我们把波包看作是由波长接近于 $\lambda = \lambda_0$ 的平面波叠加成的，所以一般说来，这时在波包里约有 $n = \Delta q/\lambda_0$ 个波峰和波谷，在波包外，这些平面波由于干涉而互相抵消．这种现象在而且也只在下述情况下才有可能，即在所使用的全体平面波中还有另外一些分波，它们在波包中至少有 $n+1$ 个波峰和波谷．这时有

$$\frac{\Delta q}{\lambda_0 - \Delta\lambda} \gtrsim n + 1, \tag{2}$$

$\Delta\lambda$ 表示描述波包所必须的大致的波长范围，从而有

$$\frac{\Delta q}{\lambda_0^2} \cdot \Delta\lambda \gtrsim 1. \tag{3}$$

此外，波的群速度[见 $M(85)$ 式，μ 是电子的质量]为

$$v_g = \frac{h}{\lambda_0 \cdot \mu},$$

因此，与 $\Delta\lambda$ 相应的波包弥散也可以用

$$\Delta v_g = \frac{h}{\lambda_0^2 \mu} \Delta\lambda \tag{4}$$

来表征．所以，根据定义 $\Delta p = \mu \Delta v_g$ 和 (3) 式，

$$\Delta p \cdot \Delta q \gtrsim h. \tag{5}$$

对于每个自由度都运用这一关系，就可以分别写出

$$\Delta x \Delta p_x \gtrsim h, \quad \Delta y \Delta p_y \gtrsim h, \quad \Delta z \Delta p_z \gtrsim h. \tag{6}$$

在以前通常是把相空间分割成大小为 h 的元胞，测不准关系与这种做法是一致的，而且给予这种元胞的分割以明确的物理含意．不过测不准关系比以往的相空间分割法显得更自然一些，因为它取消了在元胞之间人为地设置的壁．关系式(6)

给出了粒子图象的适用范围．想超出(6)式限定的范围而更严格地使用“位置”、“速度”这些词，那就像使用那些含义不明确的词一样，是没有意义的[1]．

可以不直接使用波动图象，借助于量子论的数学公式（M §2）及其物理诠释，我们也能推出测不准关系[9]．

关于电子坐标 q 的任何知识都可以用几率幅 $S(q')$ 来表示，$|S(q')|^2dq'$ 表示在 q' 与 $q'+\Delta q'$ 之间找到电子的几率．令

$$\bar{q}=\int q'|S(q')|^2dq' \tag{7}$$

代表 q 的平均值，则由

$$\overline{(\Delta q)^2}=\int(q'-\bar{q})^2|S(q')|^2dq' \tag{8}$$

定义的 $\overline{\Delta q^2}$ 可以用来表示电子位置的不准确程度．完全类似地，$|S(p')|^2dp'$ 表示测得电子的动量可能在 p' 与 $p'+\Delta p'$ 之间的几率．令

$$\bar{p}=\int p'|S(p')|^2dp' \tag{9}$$

和

$$\overline{(\Delta p)^2}=\int(p'-\bar{p})^2|S(p')|^2dp', \tag{10}$$

并且用 $\overline{\Delta p^2}$ 表示电子动量的不准确程度．

按照 M(69) 式，$S(p')$ 和 $S(q')$ 之间有下述关系：

---

1) 我们在这里必须记住，一般地说，人类的语言可以构成一些引伸不出任何结论的句子，尽管这种句子也描绘出某种图象，但实际上，它们是完全没有意义的．比如说除了我们这个世界外，还存在另一个原则上毫无联系的世界；这种陈述尽管在我们的想像中也会形成一幅图象，但是却得不出什么结论来．很明显，对这种陈述是既不能证明又无法否定的．所以在使用“事实上”这一类表述时要特别谨慎，因为一不小心就会导致上面这种陈述．

$$S(p') = \int S(p'q')S(q')dq', \tag{11}$$

式中 $S(p'q')$ 为希耳伯空间中从 q 为对角矩阵的坐标系到 p 为对角矩阵的坐标系的变换函数. 由于

$$S^{-1}p_{(p)}S = p_{(q)},$$

根据 $M(44)$ 式,可得

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q'}S(p'q') = p'S(p'q'), \tag{12}$$

$$S = \text{常数} \cdot e^{\frac{2\pi i}{h}p'q'}. \tag{13}$$

经过归一化之后,我们得到

$$S(p'q') = \frac{1}{\sqrt{h}}e^{\frac{2\pi i}{h}p'q'}. \tag{14}$$

根据(11)和(14)式,$\overline{\Delta p^2}$ 和 $\overline{\Delta q^2}$ 的值在数学上是有联系的,我们可以寻求使乘积 $\Delta p^2 \cdot \Delta q^2$ 取最小值的函数 $S(q')$:

$$\overline{\Delta p^2} \cdot \overline{\Delta q^2} = \text{极小值}. \tag{15}$$

为了简化进一步的计算,我们引进下列省略符号:

$$\left.\begin{aligned} &x = q' - \bar{q},\ y = p' - \bar{p},\\ &s(x) = S(q')e^{\frac{2\pi i}{h}\bar{p}q'},\\ &t(y) = S(p')e^{-\frac{2\pi i}{h}\bar{q}(p'-\bar{p})}. \end{aligned}\right\} \tag{16}$$

于是(8)和(10)式变成

$$\left.\begin{aligned} &\overline{(\Delta q)^2} = \int x^2|s(x)|^2dx,\\ &\overline{(\Delta p)^2} = \int y^2|t(y)|^2dy. \end{aligned}\right\} \tag{17}$$

而由(14)式得出

$$t(y) = \frac{1}{\sqrt{h}}\int s(x)e^{\frac{2\pi i}{h}xy}dx. \tag{18}$$

我们由(16)—(18)式可导出

$$
\left.\begin{aligned}
(\Delta p)^2 &= \frac{1}{\sqrt{h}}\int y^2 t^*(y)\,dy \cdot \int s(x) e^{\frac{2\pi i}{h}xy}\,dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{h}}\int t^*(y)\,dy \int s(x)\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 e^{\frac{2\pi i}{h}xy}\,dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{h}}\int t^*(y)\,dy \cdot \left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2 \int \frac{\partial^2 s}{\partial x^2} e^{\frac{2\pi i}{h}xy}\,dx \\
&= \left(\frac{h}{2\pi i}\right)^2 \cdot \int s^*(x)\frac{\partial^2 s}{\partial x^2}\,dx \\
&= \frac{h^2}{4\pi^2} \cdot \int \left|\frac{\partial s}{\partial x}\right|^2 dx .
\end{aligned}\right\} \quad (17a)
$$

现在由下述显而易见的关系

$$
\left|\frac{x}{2\overline{(\Delta q)^2}} s(x) + \frac{\partial s}{\partial x}\right|^2 \geqslant 0, \quad (19)
$$

推得不等式

$$
\left|\frac{\partial s}{\partial x}\right|^2 \geqslant \frac{1}{2\overline{(\Delta q)^2}}|s(x)|^2 - \frac{d}{dx}\left(\frac{x}{2\overline{(\Delta q)^2}}|s(x)|^2\right) - \frac{x^2}{4\overline{(\Delta q^2)^2}}|s(x)|^2,
$$

把它代入 (17a) 式积分:

$$
\overline{(\Delta p)^2} \geqslant \frac{1}{4}\frac{h^2}{4\pi^2}\frac{1}{\overline{\Delta q^2}},
$$

因此得

$$
\overline{\Delta p^2}\,\overline{\Delta q^2} \geqslant \left(\frac{h}{4\pi}\right)^2. \quad (20)
$$

只有当函数 $s(x)$ 使 (19) 式取等号时，才能得到上述极小值. 因此必须是

$$
\frac{\partial s}{\partial x} = -\frac{x}{2\overline{(\Delta q)^2}} s(x)
$$

或

$$s(x) = \text{常数} \cdot e^{-\frac{x^2}{4\Delta q^2}},$$

$$S(q') = \text{常数} \cdot e^{-\frac{(q'-\bar{q})^2}{4\Delta q^2} - \frac{2\pi i}{h}\bar{p}q'},$$

而根据(14)式有

$$S(p') = \text{常数} \cdot e^{-\frac{(p'-\bar{p})^2}{4\Delta p^2} + \frac{2\pi i}{h}\bar{q}(p'-\bar{p})}.$$

因此，对于测量 p 和 q 的几率来说，高斯分布使 $\overline{\Delta p^2} \cdot \overline{\Delta q^2}$ 取极小值；对于所有其它的分布，测不准量的这一乘积都大于 $(h/4\pi)^2$.

这里还必须强调指出，就其数学内容来说，对于测不准关系的这一推导与根据波粒二象性的推导没有什么区别，只不过(20)式的证明是严格地一步一步写了出来的. 但是在物理上，(20)式看起来比(6)式更普遍，因为(6)式只适用于自由电子的位置和动量，而(20)式却可适用于任何一对正则共轭变量，因而也可适用于束缚电子.

但是正如玻尔所强调的那样，(20)式的这一普遍性是表观上的，因为一个实验如果能够测量束缚电子的位置或动量，则在这个实验中这个电子在实际上就可以当成是自由的.

2. 用不同测量仪器验证测不准关系

a. 自由电子位置的测定

测不准关系所讨论的，是在量子理论中同时测量几个不同量的精确度问题. 这一关系对单独测定位置或速度的精确性并无限制，它的作用只表现在：任何一个测定位置的实验，必定会在某种程度上干扰对于速度的认识. 比如说，如果我

们准确地知道了电子的速度，则其位置就完全不清楚. 而随后对位置所作的每一次观测又必定会使电子动量发生改变，在实际上，这种改变必定是不确定到这样一个量值，使得在实验完成之后，我们对于电子运动的知识要受到测不准关系的限制. 在下面我们要用一些实验作为例子来验证这一点. 不过前面已经讲过，测不准关系本身显然并不涉及过去发生的事. 因为，如果事先知道了电子的速度，接着再精确地测出其位置，那就可以精确地推算出测定位置之前这段时间内电子的各个位置；于是在过去这段时间内 $\Delta q\,\Delta p$ 比通常的极限值(即 h——中译者注)要小. 不过对过去的这种认识纯粹是推测的，它绝不能用作初始条件(因为位置的测量使动量发生了改变)来推算电子的未来，所以它也不能用实验来检验. 至于人们对电子过去历史的这一计算究竟能否赋予任何物理上的真实性，则纯粹是个人的信念问题.

现在我们考虑用显微镜来测定位置(见玻尔[7])，作为测定位置的仪器会干扰对动量认识的第一个例子. 令电子在显微镜物镜下面一定距离内运动，这时由电子发出的射线束对物镜的孔径角为 ε. 假定射到电子上的光线其波长和频率分别为 λ 和 ν，则根据光学定律，在 x 方向测定位置的精度为

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin\varepsilon}. \tag{21}$$

为了测定电子的位置，至少必须从电子上散射出一个光量子，并且让它通过显微镜进入观测者的眼睛；电子从这个光量子得到的康普顿反冲数量级为 $h\nu/c$. 但是，不可能准确地知道这一反冲，因为并不知道光量子在辐射束(孔径角为 ε)中的方向. 因此在 x 方向上电子反冲值的测不准量为

$$\Delta p_x = \frac{h\nu}{c}\cdot\sin\varepsilon, \tag{22}$$

从而我们推出在实验后对电子运动的认识为

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim h. \qquad (23)$$

对上述推导首先可以提出的反驳是：反冲值不确定的原

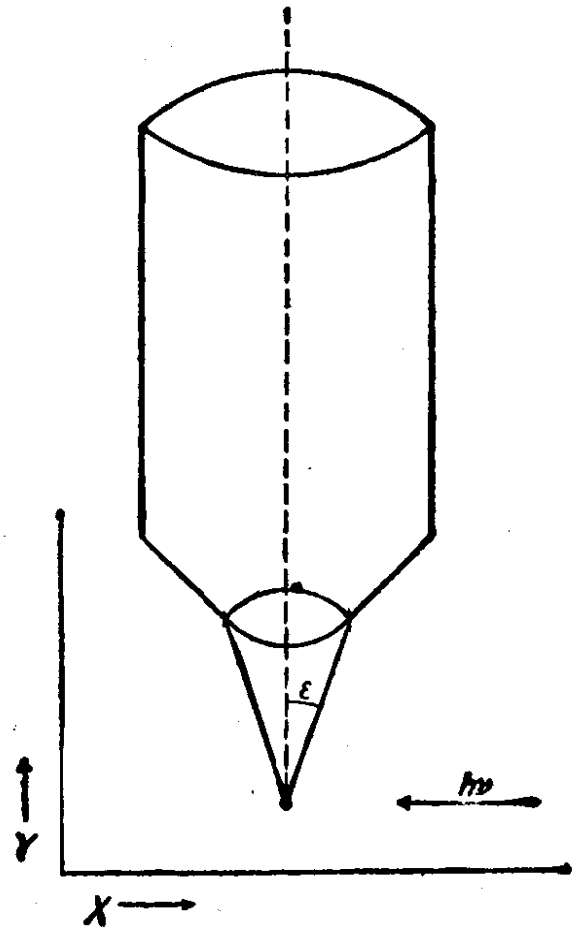

图 6

因，是不知道光量子在射线束中究竟沿哪条路径传播，如果我们使显微镜能够整体地移动，测出光量子传给显微镜的反冲，就可以确定光量子的路径. 然而仍然避不开测不准关系，因为这立即又会冒出来一个关于显微镜位置的问题，而对于整个显微镜的位置和动量，仍存在（23）式的测不准关系. 如果我们通过这个可以移动的显微镜同时观测电子和一固定标尺，当然就可以完全不考虑显微镜的位置测量. 但是作这样

一次观测至少要有两个光量子（一个来自标尺，一个来自电子）同时通过显微镜射向观测者，于是只测定显微镜的反冲并不足以确定从电子散射光量子的方向，如此等等，无限地推下去.

我们还可以想到，准确地测出显微镜衍射图样的极大值，就能从根本上提高位置测量的精度. 然而我们必须看到，只有由许多光量子来形成这个衍射图样（不管是在照相底片上还是在观测者的眼睛里），才能做到这一点. 简单的计算表明，一条由m个光量子产生的衍射图样，若其宽度的极大值为Δx，则其精度可以达到$\Delta x' = \Delta x/\sqrt{m}$. 因而精度确实提高了一个因子$\sqrt{m}$. 另一方面，对动量测量的精度来说，每个光量子的贡献为$\Delta p_x = \frac{h\nu}{c}\sin\varepsilon$，故总精度（按照独立误差相加定理）为$\Delta p_x' = \sqrt{m(\Delta p_x)^2} = \sqrt{m}\cdot\Delta p_x$. 因此又得到$\Delta x'\cdot\Delta p_x' \sim h$.

对这个实验的整个讨论，其特点又是同时运用了粒子图象和波动图象. 我们实际上使用了波粒二象性，即一方面提到射线束和光学定律，另一方面又提到光量子以及由光量子所引起的电子反冲.

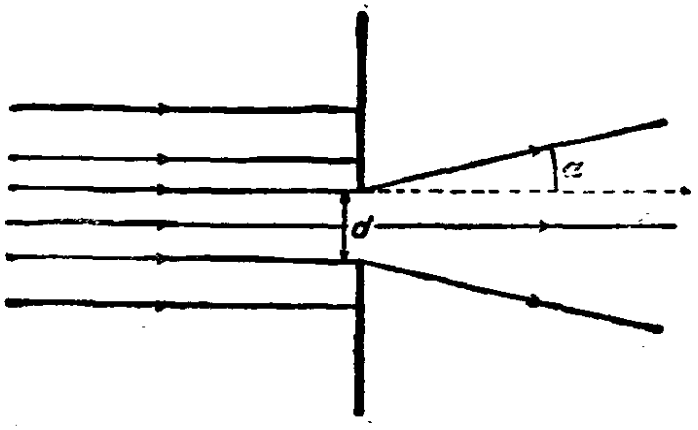

图 7

测量位置的另一个简单办法是假定已经完全知道电子的速度. 令一束电子射线穿过屏上一个宽度为 d 的狭缝投射出来(图 7). 在电子穿过狭缝时，它在与屏平行方向上的位置精度显然是 d. 我们用平面德布罗意波来代表这个射出的电子，不过我们马上就会发现，从狭缝处开始，这宽度为 d 的射线束是发散的. 这束射线具有某一最终孔径角 α，根据最简单的光学定律，它可以表示为

$$\sin\alpha \sim \frac{\lambda}{d}, \tag{24}$$

式中 λ 是德布罗意波的波长. 所以在电子穿过狭缝之后，它在与屏平行的方向上动量的测不准大小为

$$\Delta p = \frac{h}{\lambda} \cdot \sin\alpha, \tag{25}$$

式中 h/λ 是在射线束方向上的电子动量. 由于 $\Delta q = d$，我们得到

$$\Delta p \Delta q \sim h.$$

在这一推导中，虽然没有使用辐射理论的波粒二象性，但却用到了物质理论的波粒二象性.

作为通常用来测量位置的最后实验，我们再讨论闪烁观察法和威耳孙云室照相法.

这些方法有一个共同的特点，就是用粒子引起原子的电离，以此作为出现粒子的标记. 显然，测量位置的精度上限就是电离原子的大小 Δq. 由于电离，碰撞粒子的动量要发生改变. 我们可以测出从原子中出来电子的动量，所以碰撞粒子动量改变的测不准量，就等于反冲电子束缚在原子内时的动量范围 Δp. 这一动量范围与原子线度之间仍旧满足已知的关系

$$\Delta p \Delta q \gtrsim h$$

(根据后面的讨论，通常用 $\Delta p \Delta q \sim nh$ 来表示，其中 n 是有关定态的量子数)，所以这种类型的位置测量也服从测不准关系．在这一推导中，并没有直接提到波粒二象性，测不准关系表现为定态量子化条件的一个结论，不过波粒二象性依然隐含在量子化条件之中．

b. 自由电子速度或动量的测量

测量速度最简单的方法，是直接根据速度的定义，测定两个在不同时刻的位置．如果我们把测定位置的时间间隔定得很长，那么我们就能以任意的精度来测量粒子在后一次位置测定前的速度．但对物理学来说，感兴趣的只是粒子在测定位置以后的速度．而这是不能精确测定的．在作后一次位置测定时，动量必然会发生改变，而正如上节所说的那样，这一动量改变仍旧遵从测不准关系．

测量带电粒子速度的另一个常用方法，是利用它本身的多普勒效应(玻尔[7])，其实验步骤如下(图 8)：

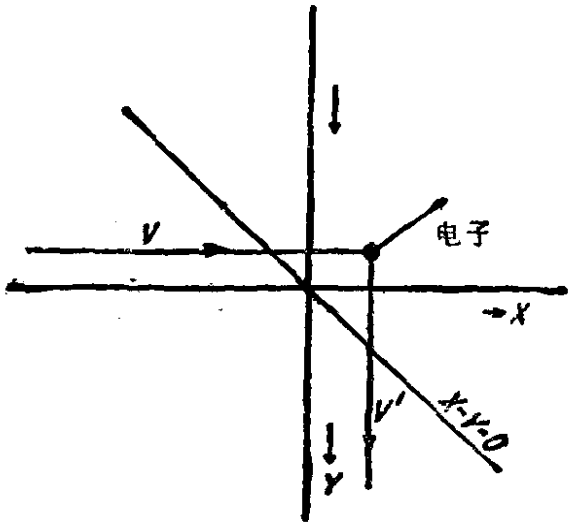

图 8

假定已经精确地知道电子在与入射光平行的方向（x 方向）的动量，则这时电子在 x 方向的位置就完全不知道；另一方面，假设已准确知道电子在 y 方向的位置，则不知道其动量．所以问题是要测量 y 方向的速度，并且表明在测量过程中，y 方向位置的知识将被破坏到这样的程度，使得在实验完成之后测不准关系成立．现在我们是在 y 方向来观测散射光（应该指出，这时若 $p_x = p_y$，即电子平行于直线 $x - y = 0$ 运动，则多普勒效应就会消失）．

我们只要把能量和动量守恒定律运用于电子与光量子的碰撞，就得到多普勒效应的理论（在本质上与康普顿效应的理论相同）．用 E 代表电子的能量，ν 代表入射光的频率，并且用不带撇号的量表示碰撞前的值，带撇号的量表示碰撞后的值，则有

$$\left.\begin{aligned} h\nu + E &= h\nu' + E', \\ \frac{h\nu}{c} + p_x &= p_x', \\ p_y &= \frac{h\nu'}{c} + p_y', \end{aligned}\right\} \tag{26}$$

$$\left.\begin{aligned} h(\nu - \nu) = E' - E &= \frac{1}{2m}[p_x'^2 + p_y'^2 - p_x^2 - p_y^2] \\ &\sim \frac{1}{m}[(p_x' - p_x)p_x + (p_y' - p_y)p_y] \\ &= \frac{1}{m}\left[\frac{h\nu}{c}p_x - \frac{h\nu'}{c}p_y\right] \sim \frac{h\nu}{cm}(p_x - p_y). \end{aligned}\right\} \tag{27}$$

因为设 p_x 和 ν 是已知的，所以 p_y 的测量精度直接与散射光频率 ν' 的测量精度有关：

$$\Delta\nu' = \frac{\nu}{mc} \cdot \Delta p_y. \tag{28}$$

为了使 ν' 的测量精确到 $\Delta\nu'$，必须观测一个有一定长度

的波列，根据最简单的光学定律，发出这个波列的时间为

$$T = \frac{1}{\Delta\nu'}. \tag{29}$$

由于我们不知道光量子与电子碰撞的时间是在这段时间的开始还是终了，因而也就不知道在这段时间 T 中电子在 y 方向运动的速度究竟是 p_y/m 还是 p'_y/m. 因此在这段时间的终了时电子位置的测不准量为

$$\Delta y \approx \frac{1}{m}(p_y - p'_y)T = \frac{h\nu'}{mc}T. \tag{30}$$

由(28)，(29)和(30)式，即得

$$\Delta p_y \cdot \Delta y \sim h.$$

测量速度的第三个方法，是利用带电粒子在磁场中的偏转. 其安排如下(见图 9)：令一束物质射线穿过宽度为 d 的狭缝，射入一个与纸面垂直的均匀磁场，在其中经过一段区域

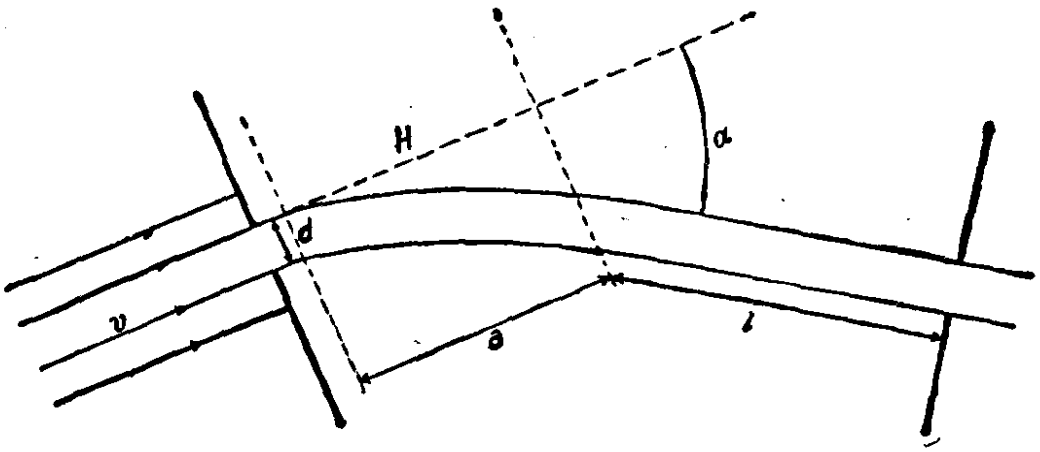

图 9

a；射线因而向下偏转，并与原来射线方向成 α 角($\alpha \ll 1$)而射出磁场，然后通过距离 l 到达第二道狭缝. α 由第二道狭缝的位置来确定. 粒子在射线方向的速度 $v = p/m$ 可由下述方程

$$\alpha = \frac{\frac{a}{v} \cdot H \cdot e\frac{v}{c}}{mv} = \frac{aHe}{mcv} \tag{31}$$

求出，而相应的测量误差为

$$\Delta\alpha = \frac{aHe}{mc} \cdot \frac{\Delta v}{v^2}. \tag{32}$$

现在进一步假定已经精确地知道粒子在射线方向的位置，迅速地开闭狭缝就能做到这一点．下面要指出，在这个实验过程中，我们关于粒子位置的知识还是要被破坏到这样的程度，使得在实验完成之后 $\Delta p \cdot \Delta q \gtrsim h$ 的关系依然成立．测量 α 可以达到的精度显然是 $\Delta\alpha \sim \frac{d}{l+a}$（$d$ = 两道狭缝的宽度）．但就是这一精度也只有在射线的自然发散（德布罗意发散）小于 $\frac{d}{l+a}$ 时才能达到，否则测量 α 的不准确度应该是这一发散度 $\Delta\alpha \sim \frac{\lambda}{d}$．也就是说给出了两个方程

$$\Delta\alpha \gtrsim \frac{d}{l+a} \text{ 和 } \Delta\alpha \gtrsim \frac{\lambda}{d}.$$

所以

$$(\Delta\alpha)^2 \gtrsim \frac{\lambda}{l+a}. \tag{33}$$

此外还有

$$\Delta v = \frac{mcv^2}{aHe} \cdot \Delta\alpha. \tag{34}$$

实验后粒子位置的测不准量，等于粒子经过两道狭缝之间的路程所用的时间乘以粒子速度的测不准量：

$$\Delta q \sim \frac{l+a}{v}\Delta v. \tag{35}$$

所以根据(34)和(35)式，得

$$\Delta v\Delta q \sim \frac{l+a}{v}\Delta v^2 \geqslant \left(\frac{mcv^2}{aHe}\right)^2 \cdot \frac{\lambda}{v} = \frac{1}{\alpha^2}\lambda v = \frac{1}{\alpha^2}\frac{h}{m},$$

和

$$\Delta p\Delta q \gtrsim \frac{h}{\alpha^2} \sim h,$$

因为这里的整个推导只适用于 α 值很小的情形. 对于 α 很大的情形需要特别注意，当 $\alpha = 2\pi$ 是可能的时候，实验上并不能区分 $\alpha = 0$ 和 $\alpha = 2\pi$ 这两种情形——除非我们改变实验装置，但这样就必须对整个实验重新进行讨论.

c. 束缚电子

若要问束缚电子位置与动量知识的不精确度，我们必须明白地分成两个问题. 第一个是假设已知体系的能量，亦即已知其定态，而问由于这个能量的知识，或者说与这个能量知识相应地，位置与动量知识的精度是多少. 第二个是我们在放弃定态知识的情况下，来问这些量的测量在实验上可以实现的最高精度是多少，而不管这些必要的测量可能会破坏对能量定态的认识.

我们先来研究第一个问题，考虑一个给定的定态. 正如玻尔所指出的，我们从粒子图象的经典理论可以推断，位置与动量知识的测不准量一般说来大于 $\Delta p\Delta q \sim h$. 显然我们关心的是要确定原子中电子位置和速度的范围. 而从第 n 个量子态所满足的关系

$$\int pdq \sim nh, \tag{36}$$

就得出

$$\Delta p_s \Delta q_s \sim nh. \tag{37}$$

我们画出相空间中经典力学的闭合轨道曲线(图 10)，这一关

系就很容易理解. $\int p dq$ 代表一条轨道所包围的面积. 显然 $\Delta p_s \Delta q_s$ 具有相同的数量级. 我们这里对测不准量 Δp, Δq 加一下标 s, 用以标明这不是测量 p 和 q 所可能达到的最高精

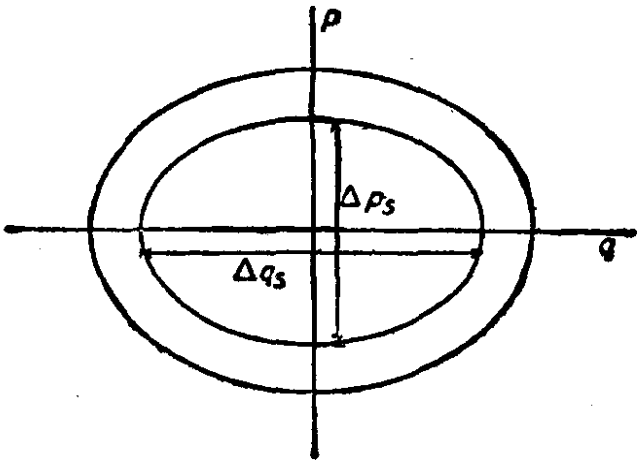

图 10

度,而是在定态,即在原子的能量准确知道时,对于 p 和 q 知识的特殊测不准量. 这种测不准在实际上很重要,例如在讨论闪烁观测法时(见第二章,2a),就已经提过它. 把位置范围 Δq_s 解释为位置的不精确度,这从经典理论来看是很奇怪的. 不过在量子理论中我们却必须这样去思考,因为对能量的知识表现为一个"纯态"*,即在数学形式上用一个完全确定的波包(有关定态的薛定谔函数)来表示的情况. 如果我们对这个波包进行(第二章,1)的计算,就会发现 Δp_s Δq_s 的值大于原子相应本征函数的零点数,亦即原子范围内本征函数的振动次数. 如果我们考虑一个正好有 n 个零点(节点)的本征函数(只有一个自由度的问题),则通过计算就会知道在(37)式的右边会出现因子 n.

---

* 原文为 "reiner Fall", 英译为"determinate case"(即"确定情况"). ——中译者

现在我们再来讨论上面所说的第二个问题. 如果我们不考虑定态的知识，则关于 p 和 q 的知识能够达到的最高精度显然是 $\Delta p \cdot \Delta q \sim h$. 因为这时我们可以用如此强烈的方式来测量位置和动量，以致于在实际上总可以把电子看成是自由的. 比如测量原子外围电子的动量就非常简单，我们可以在某一确定的时刻使电子失去它与原子核及其它电子的相互作用. 于是这个电子将作惯性运动，可以用已知的方法来测量其动量. 在这种情况下，测量其动量所必须的干扰显然与把这个电子固定在原子内的结合力具有相同的数量级.

正如玻尔强调指出的[7]，在量子数很大的情况下，从量子力学向经典力学过渡时，关系式(37)是很重要的. 我们来探讨一下轨道概念在量子力学中的地位. 因为关于位置与动量的知识可以达到的最高精度满足关系 $\Delta p \Delta q \sim h$，故其轨道可以用 p, q 空间中一面积 $\sim h$ 的几率波包 $(|S(p')|^2 \cdot |S(q')|^2)$ 来表示(见 $M.\S 2$). 于是，仅当此轨道所包围的面积比波包面积 h 大很多时，这个波包才能在相空间中描绘出一条定义明确的近似闭合的轨道；而根据(36)，(37)式，这相应于量子数 n 很高的极限情况. 对于量子数低的情况，不论是在相空间中还是在真实空间中，轨道概念显然都将失去意义. 因此对于决定高量子数极限下轨道概念的地位来说，(36)和(37)式右边的因子 n 具有决定性的意义.

在量子数较小情况下轨道概念的失效，可以直接从物理上解释如下：轨道可以看作电子运动所经过的各个空间点的一个时间序列. 在最低量子态，一个原子的大小为 10^{-8} 厘米数量级，所以为了测定电子的轨道，其位置的测量精度至少应为 10^{-9} 厘米. 比如说我们用波长 $\lambda \sim 10^{-9}$ 厘米的光来照射原子，可是只要一个这种光量子，就足以通过康普顿反冲把电子从原子中打出来. 所以对这个轨道只能观测一个单独的点.

不过我们可以对很多原子来重复这种位置的测量，从而得到电子在原子中的一个几率分布.按照玻恩的意见[14]，这一几率分布可以用$\psi^*\psi$来表示(如果在原子中有几个电子在运动，则应该用$\psi^*\psi$对其它电子坐标的平均值)，ψ代表薛定谔函数，见$M(47)$. 这就是“在某一给定的位置上找到电子的几率为$\psi^*\psi$”这句话的物理意义.这个结果比乍看起来还更奇怪.大家知道，$\psi^*\psi$随它与原子核的距离增大而按指数规律衰减，所以在距原子核很远处，始终有一个找到电子的有限几率.电子在这种地点的势能虽然是负的，但是很小；而电子的动能总是正的，因此这两项相加得到的总能量，显然要比定态的负总能量始终大一个有限的数值. 要解决这一佯谬，可以这样来考虑: 初看起来在这里好像违反了能量守恒定律，但这只是一种假象，因为在算能量平衡时，我们还必须把测量位置用的光量子和它通过康普顿反冲传给电子的能量也考虑进去. 这些能量比电子的电离功大得多，从而保证能量守恒定律成立，对这一点，我们根据康普顿效应理论仔细地检验过.

根据玻尔的看法，这一佯谬也警告我们，不能机械地使用“量子力学的统计诠释”. 由于薛定谔函数的这种指数行为，所以在离原子核很远的地方也还可以找到一些电子. 可以设想，或许能用红光来测定在这种地方出现的电子. 而红光不会使电子发生明显的康普顿反冲，因而又会发生上述的佯谬.但在事实上，不能用红光来测量远处电子的位置，根据通常的色散理论的公式，这时是整个原子与红光作用. 如果我们想到，按照经典的微粒图象，在红光的一个周期内电子要绕核转许多圈，就可以明白了. 所以，量子论的统计诠释只有与实验相联系，而这实验所观测的现象又真正可以用统计学来处理时，才有意义..

轨道概念在原子的高激发态是有意义的. 这时对位置的

测量又可以达到这样的精度，使得其平均误差小于原子的尺度. 也就是说，康普顿反冲不再把电子从原子中打出去. 因为由于(37)式，当 n 很大时，反冲动量可以小于定态电子的动量范围. 我们来简单地计算一下.

光波波长 λ 必须比 Δq_s 小得多，

$$\lambda \ll \Delta q_s;$$

于是根据(37)式有

$$\frac{h}{\lambda} \gg \frac{\Delta p_s}{n}.$$

因而康普顿反冲传给电子的能量其数量级为

$$\frac{h}{\lambda} \cdot \frac{\Delta p_s}{\mu} \gg \frac{\Delta p_s^2}{n\mu} \sim \frac{|E|}{n}$$

(E 是电子的能量，μ 是电子的质量). 因此在 n 很大时，传给电子的能量要比 $|E|$ 小得多. 不过它还总是大于相邻两能级的能量差，后者一般为 $|E|/n$ 的数量级. 另外，从 $\frac{h}{\lambda}\frac{\Delta p_s}{\mu} \gg \frac{|E|}{n}$ 还立即得到 $h\nu \gg |E|/n$，所以用来测量位置的光频率应大于原子中电子的运动频率.

康普顿反冲的结果，把原子从某一定态，比如说 $n=1000$，激发到 $n = 950$ 和 $n = 1050$ 之间的任意一个态上. 由于在(第二章 1)中讨论过的反冲不确定性，这时原子跃迁到哪一个定态，原则上是不确定的. 根据量子论的数学形式，可以用一位形空间的几率波包来表示位置测量的结果，这个几率波包基本上由 $n = 950$ 和 $n = 1050$ 之间态的本征函数组成，其大小由位置测量的精度来确定. 这个波包描绘出一条轨道，它类似于经典理论中的粒子轨道，但是一般地说它同时还在扩展. 因此对于未来位置的测量结果，一般只能作出统计性的预言. 每测量一次，物理过程的数学表示都要不连续地改变，

所谓观测就是从许多可能的情况中挑出一个确定的情况来，作为已经实现的情况，原来已经扩展了的几率波包则又变成一个表示观测结果的较小的波包．由于我们关于体系的知识在每次测量中不连续地改变，其数学表示当然也就不连续地改变，这和经典统计学一样．我们可以把这一事实表达成下述论断：电子的大小取决于为测定其位置而做的实验．关于几率波包的运动与扩展，在文献中已经反复和深入地研究过[10]，这里就不再给出它的数学表述．我们只提一下厄任费斯脱的简单考虑[11]．考虑一个电子在势为 $V(q)$ 的力场中的运动．这个问题的薛定谔方程是

$$-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\cdot\Delta\psi+eV\psi=-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t}.$$

如果 q 代表电子的某一直角坐标，则 q 的平均值为

$$\bar{q}=\int q\psi^*\psi dv(dv=dxdydz).$$

对时间微分给出

$$\mu\dot{\bar{q}}=\mu\int q\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)dv,$$

分部积分后得

$$\mu\dot{\bar{q}}=\mu\frac{h}{4\pi}\int\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial q}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial q}\right)dv.$$

对 t 再求一次微分，用类似的方法得到

$$\mu\ddot{\bar{q}}=-e\int\frac{\partial V}{\partial q}\psi^*\psi dv.$$

如果 $\psi^*\psi$ 代表一个几率波包，并且其大小小于 V 有明显变化的区域，则上式可以写成

$$\mu\ddot{\bar{q}}=-e\frac{\partial V(\bar{q})}{\partial\bar{q}}.$$

这个方程表明，几率波包近似地描绘出一条经典轨道．

在这里还要讨论一下波包发散的速率. 如果体系的经典运动是周期性的,则波包的大小在一开始只有周期性的变化. 在波包完全弥散到整个原子区域之前，它周转的最大圈数可以定性地估计如下: 如果波包完全没有扩展，对其电荷分布作傅里叶分析就可以发现,只出现轨道基频整数倍的振动项. 然而,事实上量子论的谐振频率并不正好是此基频的整数倍. 波包完全弥散所要的时间，定性地等于量子的谐振位相完全从经典谐振位相移开所要的时间. 设 J 为体系的经典作用变量,则这个时间是

$$t = \frac{1}{h\dfrac{\partial \nu}{\partial J}},$$

因而到波包弥散时的周转次数为

$$N \sim \frac{\nu}{h\dfrac{\partial \nu}{\partial J}}. \tag{38}$$

在谐振子的特殊情况下，N 成为无限大，波包一直保持着而不弥散开来. 但在一般情况下,根据(38)式，N 与量子数 n 同数量级. 所以在 n 很大时，在量子论中运用轨道概念是有根据的.

与上述考虑有关,在这里还应提到爱因斯坦的假想实验. 我们设想用一个由麦克斯韦波构成的波包来表示一个光量子[1],所以它具有一定的空间范围,在测不准关系的意义上说，也就是具有一定的频率范围. 把波包投射到一个半透明的板上,我们就可以把它分成两部分,即反射部分和透射部分. 于是无论是在波包的这一部分还是在那一部分，我们都有一定

1) 对一个光量子而言,坐标空间只有三维,因而可以把麦克斯韦方程看成光量子的薛定谔方程.

的几率找到这个光量子. 经过足够长的时间，这两部分将会分开到你所希望的任何距离. 这时如果一个实验发现光量子是在波包的比如说反射部分中，那么同时也就说明在波包的另一部分找到这个光量子的几率为零. 因此在波包的反射部分中做的实验，会对波包透射部分所在的遥远地点发生一种作用(波包的收缩!)，而我们很容易看出，这种作用的传播速度超过了光速. 但自然我们同时也会发现，这种作用绝不可能用来超光速地传递信号，因而这里讨论的波包的性质与相对论的基本假设绝不矛盾.

d. 能量的测量

测量自由电子的能量与测量粒子的速度是一样的，已经讨论过的各种测量方法在这里就不再重复了.

还有一个测量自由电子能量的方法至今尚未讨论过，这就是令电子通过一个已知的势垒；如果这个电子越过了势垒，按照经典理论，我们通常就认为这时电子的能量肯定大于势垒最高点的能量；如果电子被势垒反射回来，则我们就断定电子的能量小于上述临界值. 然而这种推论方式在量子论中肯定是不对的. 我们来简单地讨论一下这个问题. 电子的能量小于势垒的临界值时，只要势垒宽度不比电子的德布罗意波长大很多，就总会有相当数量的电子穿过势垒. 穿过势垒的电子数随着势垒高度和宽度的增大而按指数规律减少[1]. 反之，电子的能量超过势垒高度时，只要势场上升的区间不比电子的德布罗意波长大很多，就总会有相当多的电子被势垒反射回来. 然而对于实际可行的实验来说，势场改变的区间无

1) 这一事实与光学中大家熟悉的并且为实验证实了的现象完全相似，这就是一束光线在金属箔上全反射时，总会有很少量的光透过它. 当箔的厚度与光的波长同数量级时，透过部分就很显著.

疑总是要比电子的德布罗意波长大，所以实际上在大多数情况下我们都可以用经典理论来算．作为对上述现象进行数学

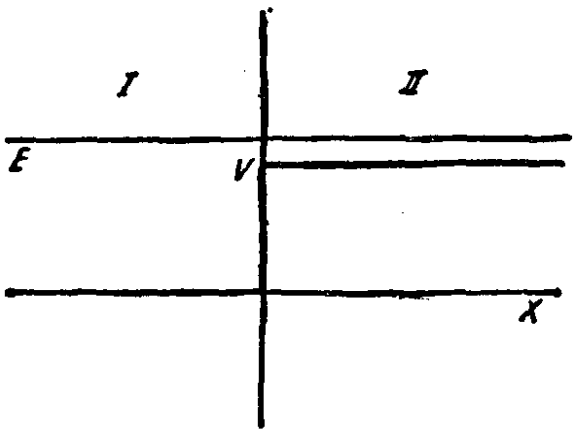

图 11

处理的例子，我们来讨论电子在一个突然上升的势壁上的反射．

我们运用单电子问题的薛定谔方程（*M*.§2 和 3）．对于入射的ψ波(在区域 *I* 中)，我们有

$$\left.\begin{aligned} &\psi = ae^{\frac{2\pi i}{h}(p_x x - Et)}, \quad \frac{1}{2\mu}p_x^2 = E, \ p_x \geqslant 0. \\ &\text{对于在区域 II 中的透射波，} \\ &\psi = a'e^{\frac{2\pi i}{h}(p'_x x - Et)}, \quad \frac{1}{2\mu}p_x'^2 = E - V, \ p'_x \geqslant 0. \\ &\text{对于在区域 } I \text{ 中的反射波，} \\ &\psi = a''e^{\frac{2\pi i}{h}(-p_x x - Et)}. \end{aligned}\right\} \quad (39)$$

如果 p'_x 是虚数，就出现全反射，这时 p'_x 必须取正虚数，因为 $x \to \infty$ 时 ψ 必须有限．在 $x = 0$ 的分界面处 ψ 及其一阶微商 ψ' 应当连续，因而可得

$$\left.\begin{aligned} a + a'' &= a', \\ (a - a'')p_x &= a'p'_x. \end{aligned}\right\} \quad (40)$$

从而解出

$$\left.\begin{aligned} a'' &= -a\,\frac{1-\dfrac{p_x}{p'_x}}{1+\dfrac{p_x}{p'_x}} = a\,\frac{p_x-p'_x}{p_x+p'_x}, \\ a' &= a\,\frac{2}{1+\dfrac{p'_x}{p_x}} = a\,\frac{2p_x}{p_x+p'_x}. \end{aligned}\right\} \tag{41}$$

用波幅绝对值的平方乘以动量，就得到(只差一个比例因子)单位时间内通过某一给定截面的电子数，因此对于入射、透射和反射波(当 p'_x 为实数时)分别有

$$\left.\begin{aligned} J &= |a|^2 p_x,\quad J' = |a|^2\left|\frac{2p_x}{p_x+p'_x}\right|^2 p'_x, \\ J'' &= -|a|^2\left|\frac{p_x-p'_x}{p_x+p'_x}\right|^2 p_x. \end{aligned}\right\} \tag{42}$$

当 p'_x 为虚数时，$J'=0$ 而 $J''=-J$. 这就很自然地得到了一般的关系

$$J = J' - J''. \tag{43}$$

根据(42)式，电子反射和透射的相对几率分别是

$$\left.\begin{aligned} W'' &= \left|\frac{p_x-p'_x}{p_x+p'_x}\right|^2 = \left|\frac{\sqrt{E}-\sqrt{E-V}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-V}}\right|^2, \\ W' &= \left|\frac{2p_x}{p_x+p'_x}\right|^2\frac{p'_x}{p_x} = \sqrt{\frac{E-V}{E}}\left|\frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E}+\sqrt{E-V}}\right|^2. \end{aligned}\right\} \tag{44}$$

图 12 给出了反射几率 W'' 随能量的变化，用虚线画出的是经典理论的曲线.

对于阐明量子论的物理原理来说，深入讨论原子能量的测量，即确定原子处于哪个定态的实验，比讨论自由电子能量的测量更为重要. 根据在位形空间中对原子运动的数学处理

可以知道，如果已经完全知道了原子的定态，则电子运动的位相或者与它相联系的辐射的位相在原则上就必定不知道．为

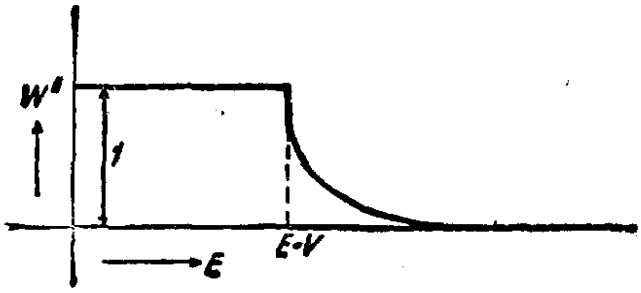

图 12

了说明这一点，让我们来讨论一个著名的实验，即我们在把不同定态比如说 n 和 m 的原子分开来的同时，也就失去了与 $n \longleftrightarrow m$ 跃迁相应的辐射的位相知识．

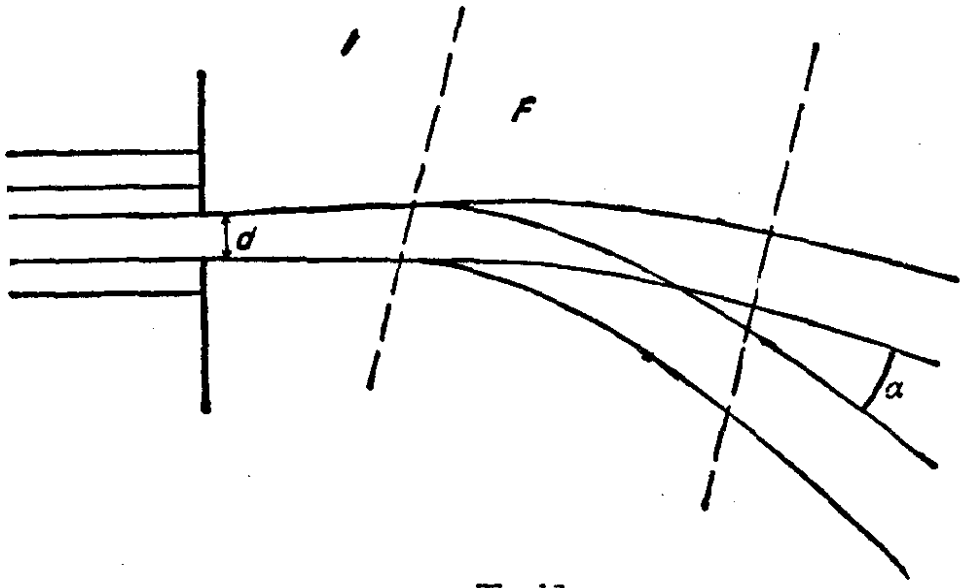

图 13

令一束宽度为 d 的斯特恩-革拉赫原子射线通过一个不均匀的场 F（不一定非要是磁场，见图 13）．

假定原子与 F 的相互作用能量为 $E(F)$，则在 x 方向（与射线方向垂直）场的偏转力为

场轴线进动的角速度是

$$\omega = \frac{e}{2\mu c} \cdot H.$$

由于射线有一宽度，这一进动速度对于射线中不同原子来说是不同的. 这就破坏了由原子发出的球面波之间的位相关系. 拉莫尔进动的这一测不准量为

$$\Delta\omega \sim \frac{e}{2\mu c} \frac{\partial H}{\partial x} d;$$

磁量子数分别为m和$m+1$的态，其原子射线偏转角之差为

$$\alpha = \frac{\frac{e}{2\mu c} \frac{\partial H}{\partial x} \frac{h}{2\pi} \cdot T}{p}.$$

由$\alpha \gtrsim \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{dp}$得

$$\Delta\omega \cdot T \gtrsim 2\pi.$$

于是原子之间原来的一切位相关系都被完全抹掉了.

玻尔讨论过下述假想实验[7]：对原来在正常态的斯特恩-革拉赫射线的原子，在它进入非均匀磁场之前先用具有共振频率的光来照射，使它激发出荧光. 它于是发出相干的共振光；这种光的相干特性在几何上是许多小振幅球面波迭加的结果，每个与入射光有一定位相差(对每个原子都相同)的原子都发出这种球面波. 因而在原则上就显然不能确定一个给定的原子究竟是在高能态还是在低能态. 现在让原子通过非均匀的磁场，使它们在定态上的差别表现出来. 在通过磁场之后，只有少数在高能态的原子才会发出辐射，这种辐射的相干特性取决于少数大振幅球面波的迭加，它在实际上像是从一些彼此没有位相关系的完全独立的中心发出的辐射一样. 如果从原子发出的辐射位相不会受磁场的影响，就会发生矛

盾．可是(48)式表明，测量能量的结果必然要破坏位相的关系．(48)式同时也给出了一个例子，说明对一个量子论的量(现在的情况是能量)的测量如何破坏了对其它一些量的知识．根据玻尔对假想实验的讨论可以看到，要想无矛盾地使用量子论，这种破坏是值得重视的．

第三章　波动图象物理概念的批判

在上一章里，对于波动图象那些最简单的并且被实验完全证实了的基本事实，不加批判地假定都是“正确的”. 用这些基本事实作为批判粒子概念的出发点，就表明了粒子概念只在一确定的限度内才适用.本章正好相反，我们将把粒子图象当作批判波动概念的出发点. 波动概念同样也只在一确定的限度内才适用，现在就要来确定这个限度. 正像粒子概念的情形一样，人们在历史上最初并没有考虑波的这种限度，就建立了三维的直观波动理论(麦克斯韦波和德布罗意波). 我们把这些理论称为“经典波动理论”. 它同波的量子理论的关系正像经典力学同量子力学的关系一样. 关于波的经典理论和量子理论的数学形式，可以在本书的数学附录M中找到(但在这里要提醒读者注意，切不可把物质的经典波动理论与相空间的薛定谔波动理论混为一谈). 如果我们既批判了经典的粒子图象，又批判了经典的波动概念，则只要我们时刻注意到波动图象和粒子图象适用的限度，在这两者之间的所有矛盾就都会消失.

1. 波动图象的测不准关系

波幅、电场和磁场强度、能量密度等概念，最初都来源于日常生活的原始经验，如对水波运动或弹性体振动的观察.而这些概念也适用于光，并且我们现在知道，甚至还适用于物质射线. 同时我们又知道，粒子概念同样也适用于辐射和物质，

所以正如我们说过的那样，这表明波动概念的运用也有限制，现在我们就从粒子概念出发来导出这一限制．我们先从辐射理论开始．

在进入主题之前，我们必须简短地讨论一下，对于通常所说的波幅——例如电场或磁场强度——的精确知识一般是如何理解的．波幅在一空间区域内每一点(在严格的数学意义上)的精确知识显然是个抽象的概念，是不能实现的．每次测量只能得到波幅在一很小空间区域及一很短时间间隔内的平均值．在原则上或许可以通过改进测量仪器把这些空间区域和时间间隔进一步减小，不过对于波动概念的物理讨论来说，最好还是先对这种测量明显地引进空间区域和时间间隔的下限，在计算末了再令这些下限趋于零．事实上这正是波场的量子理论的做法(见 M§9)．也许将来量子论的发展会表明，令上述区间趋于零的做法也是一个没有物理意义的抽象概念，不过现在看来，没有理由对它作任何限制．由于必须考虑场强对有限空间区域和时间间隔的平均，因而波场的量子理论比质点力学复杂得多．玻尔和罗森菲耳德定量地讨论过测量场强平均值的限制．下面我们只是定性地讨论一下这个限制．假定我们测量平均值的空间区域数量级为 $\delta v = (\delta l)^3$，时间间隔数量级为 $\delta t \sim \delta l/c$．因为是测量电场或磁场的场强，测量不可能分辨波长比 δl 短得多的光．测量给出场强(在 δv 内平均)的值 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$．如果 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 的值都精确知道，而且测量区域移动 δl 量级时没有明显的变化，这就会与粒子图象矛盾．因为在小体积 δv 内场的能量和动量——只要它是由波长大于 δl 的光所产生的——可以化为

$$E = \delta v \frac{1}{8\pi}(\boldsymbol{E}^2 + \boldsymbol{H}^2), \quad \boldsymbol{G} = \delta v \frac{1}{4\pi c}[\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}]. \quad (49)$$

把 δv 取得足够小，这两式右边的值就足够小，而根据粒子图

象，这个小体积的能量 E 和动量 $\boldsymbol{G}$ 只能由不连续的有限份额 $h\nu$ 和 $h\nu/c$ 组成. 对于在 δv 中的平均值有贡献从而需要考虑的最高频率为 $h\nu \lesssim hc/\delta l(\lambda \gtrsim \delta l)$，所以(49)式右边必须正好有这个光量子（其能量为 $h\nu$ 动量为 $h\nu/c$）量级的测不准，才能避免与粒子图象矛盾. 于是在 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 的分量之间必然存在测不准关系，使得用(49)式算出的 E 有数量级为 $hc/\delta l$ 的测不准，$\boldsymbol{G}$ 有数量级为 $h/\delta l$ 的测不准. 令 $\Delta\boldsymbol{E}$ 和 $\Delta\boldsymbol{H}$ 分别是 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 的测不准，则 E 和 $\boldsymbol{G}$ 的测不准是

$$\Delta E = \frac{\delta v}{8\pi}\{2|\boldsymbol{E}\cdot\Delta\boldsymbol{E}| + 2|\boldsymbol{H}\cdot\Delta\boldsymbol{H}| + (\Delta\boldsymbol{E})^2 + (\Delta\boldsymbol{H})^2\},$$

$$\Delta G_x = \frac{\delta v}{4\pi c}\{|[\boldsymbol{E}\times\Delta\boldsymbol{H}]_x| + |[\Delta\boldsymbol{E}\times\boldsymbol{H}]_x| + |[\Delta\boldsymbol{E}\times\Delta\boldsymbol{H}]_x|\},$$

取其循环置换就得到 y 和 z 方向的分量.

因为 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 的最可几值可能为零，上式右边只含 $\Delta\boldsymbol{E}$ 和 $\Delta\boldsymbol{H}$ 的项就必定足以给出对 E 和 $\boldsymbol{G}$ 所必须的测不准. 因此需要

$$\Delta\boldsymbol{E}_x\cdot\Delta\boldsymbol{H}_y \gtrsim \frac{hc}{\delta v\delta l} = \frac{hc}{\delta l^4}\ (\text{及其循环置换}). \qquad (50)$$

这些测不准关系首先显然适用于 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 在量级为 $\delta v\cdot\delta l$ 的同一时空区域的平均值. 另外在前面曾假定，当测量区域移动 δl 量级时 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 的平均值没有明显的变化，所以测不准关系(50)式也适用于 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 的测量区域互相离开 δl 量级的情形. 但在测量区域离开很远时，$\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 是能够同时精确测量的. 此外，玻尔和罗森菲耳德曾经指出，在两个界线分明而且精确相等的时空区域中，我们又能同时精确测量 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 的平均值. 对这种特殊情况上述考虑不适用，因为只从一个确定区域中的 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 不可能把能量与动量求出来.

完全与粒子图象的情形一样，(50)式也可以直接从$\boldsymbol{E}$和$\boldsymbol{H}$的对易关系推出来(见M.§9). 我们把空间分成大小为δv的有限元胞，在拉格朗日函数M(97)式中用对空间中所有元胞δv的求和来代替对dv的积分. 于是在元胞r中与$\psi_\alpha(r)$相应的正则共轭动量为(见M(104)式)

$$\delta v \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_\alpha(r)} = \delta v \Pi_\alpha(r), \tag{51}$$

而代替$M(111)$式有

$$\Pi_\alpha(r)\psi_\beta(s) - \psi_\beta(s)\Pi_\alpha(r) = \delta_{\alpha\beta}\delta_{rs}\frac{1}{2\pi i}\frac{1}{\delta v}, \tag{52}$$

δ_{rs}现在代表通常的δ函数，

$$\delta_{rs} = \begin{cases} 1, & \text{当 } r = s, \\ 0, & \text{当 } r \neq s. \end{cases}$$

在极限$\delta v \to 0$下(52)式成为$M(111)$式.

运用于电磁场，则由(52)和$M(134)$式可得

$$\boldsymbol{E}_i(r)\Phi_\alpha(s) - \Phi_\alpha(s)\boldsymbol{E}_i(r) = -2hci\delta_{rs}\delta_{\alpha i}\frac{1}{\delta v}. \tag{53}$$

考虑到Φ_h的不确定性$\Delta\Phi_h$给出场强数量级为$\Delta\Phi_{h'}/\delta l$的测不准，我们就会发现(53)式直接导致像(50)式那样的测不准关系.

物质波也可以用完全相同的方法来处理. 然而应该看到，实验不能直接测量波幅ψ，德布罗意波是复数就表明了这一点. 如果我们从ψ和ψ^*的对易关系在形式上推导波幅的测不准关系，那么采用玻色统计法就确实能给出物理上合理的结果. 而要是采用实际上观测到的费密-狄喇克统计法，由于对易关系$M(126)$式中包含的是正号，给出的结果就毫无意义，即在完全不同的空间点上却不能同时精确测量ψ和ψ^*. 所以，实验不能测量给定时刻在给定点处的ψ这一点，是

很令人满意的. 其数学上的原因在于，既使是对辐射与物质的相互作用，拉格朗日函数中关于物质的部分只含有 ψ 的(形如 $\psi^*\psi$ 的)二次项. 从上述考虑还可看出，如果我们作出十分自然的假定，认为在不同的空间点上电场与磁场强度的测量必须是互相无关的，那么对于光量子来说，玻色统计法在物理上就是必需的.

2. 用不均匀电磁场验证测不准关系

(50)式对精度的限制是由每次观测必然要带来的干扰所造成的，这在场论中也能用实验一一验证. 测量电磁场的最简单方法，是利用带电物质射线在电磁场中偏转的现象. 测量两束射线(一束沿正Y方向，一束沿负Y方向)在X方向的偏转就可以同时测量 E_x 和 H_x. 当电磁场在射线束宽范围内明显地不均匀时，射线就会散开，我们就不可能利用偏转来简单地测量场强. 假定射线的横截面为矩形，它在Z方向的宽度为 δl (也就是立方体 $(\delta l)^3$ 的总宽度)，在X方向的宽度 d 比 δl 小，使得两束射线在 $(\delta l)^3$ 内能够区分开(见图 14). 两束射线之间在X方向的距离为 δl 的数量级，场在这一区域

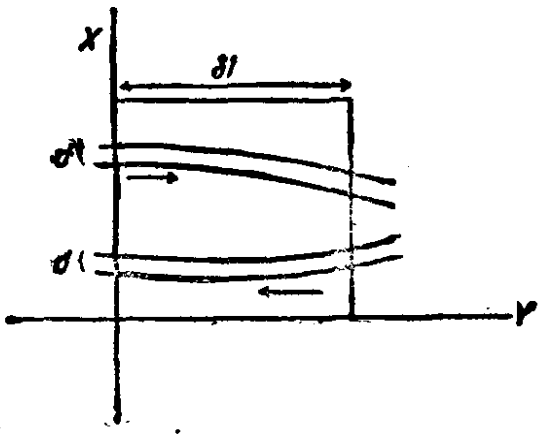

图 14

的不均匀性可以平均掉，为此我们可以调节两束射线之间的距离．如果电磁场在 $(\delta l)^3$ 内非常均匀，用这种装置就可以测量 E_x 和 H_z；如果电磁场很不均匀，这种测量就得不到任何确定的结果．

射线通过路程 δl 后的角偏转为

$$\frac{e\left(E_x \pm \frac{p_y}{\mu_c} H_z\right) \frac{\delta l \cdot \mu}{p_y}}{p_y}. \tag{54}$$

由于物质射线存在自然发散，所以 E_x 和 H_z 的测量精度为

$$\Delta E_x \sim \frac{h}{de} \frac{p_y}{\delta l \mu} \text{ 和 } \Delta H_z \sim \frac{h}{de} \frac{p_y}{\delta l \mu} \frac{\mu c}{p_y}. \tag{55}$$

但是这里还忽略了一个重要因素：在射线中运动的电子会改变立方体中的场，因而也改变了另一电子的轨道(因此必须同时测量这两束射线的偏转)．这种改变在一定程度上是不确定的，因为我们不知道电子是在射线中的哪一点运动(如果允许我们运用物质波的经典图象，就不会出现这种不确定性!)．由此引起的测不准分别为

$$\Delta E_x \gtrsim \frac{ed}{(\delta l)^3} \text{ 和 } \Delta H_z \gtrsim \frac{ed}{(\delta l)^3} \cdot \frac{p_y}{\mu c}. \tag{56}$$

由 (55) 和 (56) 式就得到

$$\Delta E_x \cdot \Delta H_z \gtrsim \frac{hc}{(\delta l)^4}. \tag{57}$$

对测不准关系的这个推导，我们又同时使用了粒子图象和波动图象的特性．只用这里描述的测量装置并不能定量地讨论测量中不可避免的不精确性．玻尔和罗森菲耳德用探测物体具有连续电荷分布的假设探讨了精度的限度．然而他们并没有联系到我们这里所谈的问题作深入的研究．

第四章　量子论的统计诠释[1)]

1. 数 学 探 讨

把量子论的数学工具与相对论对比一下是富有启发性的. 两者都用到线性代数，因而我们可以拿量子论的矩阵与狭义相对论的对称张量相比. 作为它们的重要区别，我们必须指出，量子论的张量是无限维空间的张量；此外这个空间并不是实空间，代替正交变换的是所谓幺正变换. 不过为了能得到一个直观的图象，我们暂且不管这些重要的区别. 于是每个量子论的量都可用一个张量来表征，其主轴方向可在此

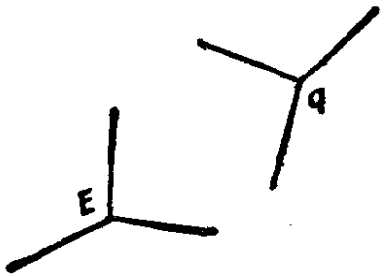

图　15

空间中画出，为了得到一个清晰的图象，我们可以想像一个刚体的转动惯量张量. 一般地说每个量子论的量其主轴方向都不同，只有彼此可对易的矩阵才有相同的主轴方向. 精确测量某个量子论的量，相应于在空间中确定一定的方向(即幺正空间中的一条线)，这就好像精确认识某个刚体的转动惯量，

1) 参见玻恩[14]，狄喇克[29]，约当[29]以及[7,8].

就确定了它相应的主轴方向(假定没有简并). 这个方向与张量 T 的某条主轴 k 平行，而张量 T 的分量 T_{kk} 则具有测得的值. 对幺正空间中方向的精确知识(精确到只差一个相因子)就是对量子论的量所能得到的最大信息. 因而韦耳[12]把这种程度的知识称为纯态. 例如原子的(非简并的)定态就是一个纯态，表征它的方向是张量 E 的第 k 个主轴方向，与它相应的定态具有能量值 E_{kk}. 说在这个(由 E 的一个主轴确定的)方向动量 p 或坐标 q 的值是没有意义的. 这就好像其轴不在主轴方向的转动惯量一样，不能用它来对刚体的任意一种运动作动力学的处理. 只有那些主轴与 E 相同的张量在上述方向上才有值. 例如在幺正空间中原子的总角动量就可以与它的能量同时确定. 假如进行一次 q 值的测量，则对这个方向的精确知识就必定是首先换成一个不精确的知识，它"混合"了 E 的不同的主轴方向，各取一定的几率系数. 例如，用显微镜测量电子的位置时，不确定的康普顿反冲就把"纯态" E_{kk} 变成这样的一个混合态(见第二章 2a). 这个混合态的形式必定也可以看成是把 q 的各个主轴方向混合在一起，每个方向具有适当的几率系数. 进行测量就是从这个混合态中挑出某个确定的值 q' 作为真实的结果. 从整个讨论可以知道，由测量 E 的实验并不能唯一地预言 q 的值，因为在这两次实验之间体系受到了一定程度上无法控制的干扰. 但是只要我们知道测量结果将是 q 的一个精确值，这个干扰就可以定性地确定. 这时测量 E 之后发现某一 q 值的几率就等于原方向"E"与方向"q"之间夹角余弦的平方，或者说得严格点，是等于幺正空间中与余弦平方相似的 $|S(E,q)|^2$. 这是量子论的一个基本假设，因而是无法进一步论证的. 由此假设可以推出：两个量子论的量，只有它们的张量主轴平行时，这两个量的值才有因果联系. 对所有别的情形，都没有因果联系. 至于一定的几率系

数所表现出来的统计联系，则是由测量仪器对体系的干扰来确定的. 如果没有这种干扰，谈论量子论的量在么正空间中与相应张量的主轴并不平行的方向上的值或可能值就没有任何意义.例如，如果我们只谈电子位置的几率而不考虑测量位置的实验，就会陷入矛盾之中(负动能佯谬，见第二章 2c).还必须强调指出，这种联系的统计特征，是由于我们处理测量仪器对被观测体系的影响的方式与处理体系各部分之间的相互影响的方式不同而出现的. 后一种影响虽然也会引起希耳伯空间中表示体系的矢量在方向上的改变，但这种改变是完全确定的. 如果我们把测量仪器也算作体系的一部分——这时要相应地扩大希耳伯空间，那么上面原来是不确定的改变现在就成为确定的了. 但是除非我们对测量仪器的观测不受测不准关系的限制，否则这一确定性仍然没有什么用处. 对于这些观测同样可以像上面那样考虑，于是我们只有把自己的眼睛也算到体系中去，才能使这一部分避开测不准关系，并且一直这样类推下去. 在最后只有把整个宇宙都算作我们的体系，才能定量地考察原因与结果的链条. 但是，这就没有物理学了，剩下的只是一套数学形式.把世界划分为观测体系和被观测体系，我们就不能清晰地表述因果定律(观测体系不一定总是人，也可以是仪器，如照相底片之类). 在特殊情况下还存在因果联系. 下面我们举几个例子. 在量子论中也严格地服从能量守恒定律和动量守恒定律，因为不同时刻的能量和动量是可对易的量. 另外，当 Δt 足够小时 q 在 t 时刻的主轴与 $t+\Delta t$ 时刻的主轴几乎平行. 所以，如果我们在很短的时间内相继测量两次位置，那么电子实际上几乎是在同一个位置上. 在量子力学中我们可以普遍地提出下述因果律：如果在某一时刻以原则上可能的精度测出了某些物理量，就可以精确地算出任一时刻这些量的值，即可以精确地预言这些量

的测量结果. 但是,在这期间,除了上述测量外,被观测体系不受任何别的干扰.

2. 几率的干涉

量子论的许多佯谬,都是由于没有妥善地考虑测量仪器的干扰. 作为典型的例子,这里来讨论一个简单的假想实验[8].

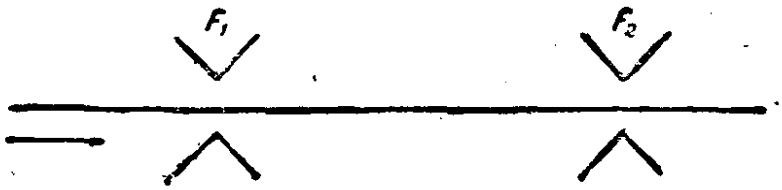

图 16

有一束斯特恩-革拉赫原子射线,它开始只包含在定态 n 的原子. 令它通过在射线方向极不均匀的场 F_1(图 16),场的变化用电磁振荡来控制. 如果相应于 F_1 的变换函数为 $S^{(1)}_{nm}$,则通过 F_1 之后射线中的原子处于 m 态的几率为 $|S^{(1)}_{nm}|^2$. 经过一段路程后使原子束通过性质类似的第二个场 F_2,假定与它相应的变换函数为 $S^{(2)}_{ml}$; 通过 F_2 以后测量射线束中原子的定态.

对于通过 F_1 以后处于 m 态的原子,它们通过 F_2 之后跃迁到 l 态的几率为 $|S^{(2)}_{ml}|^2$. 根据上面的论证,通过 F_2 之后处于 l 态的原子其总数为

$$\sum_m |S^{(1)}_{nm}|^2 |S^{(2)}_{ml}|^2. \tag{58}$$

另一方面,相应于场 F_1 和 F_2 的总的变换函数为

$$S^{(12)}_{nl} = \sum_m S^{(1)}_{nm} S^{(2)}_{ml},$$

于是通过 F_2 之后处于 l 态的原子总数为

$$|S_{nl}^{(12)}|^2 = \left| \sum_m S_{nm}^{(1)} S_{ml}^{(2)} \right|^2, \tag{59}$$

这与(58)式是矛盾的.

如果我们注意到公式(58)和(59)实际上分别属于两个不同的实验，这个矛盾也就解决了. 只有在 F_1 和 F_2 之间进行了一个确定原子定态的实验，导致(58)式的推理才是正确的. 就像在第二章 2d 中的计算那样，这个实验必定会把 m 态薛定谔波的位相改变某一量级为 2π 的未知量. 因此在把(59)式用于这一实验时，求和中的每一项 $S_{nm}^{(1)} S_{ml}^{(2)}$ 都应乘上一个未知的相因子 $\exp(i\varphi_m)$，(59)式右边最后必须对位相求平均.平均的结果与(58)式一致，这很容易算出来.如果在 F_1 和 F_2 之间没有进行确定原子定态的实验，则实验的结果是(59)式，这时导致(58)式的推理不正确，因为在 F_1 和 F_2 之间我们不能说原子处在一个确定的定态.

这个实验又可以系统地分成三种情形，我们必须把它们仔细地区别开. 这三种情形是:

实验 I. 在 F_1 和 F_2 之间原子保持不受干扰，于是通过 F_2 之后原子处于 l 态的几率是

$$\left| \sum_m S_{nm}^{(1)} S_{ml}^{(2)} \right|^2.$$

实验 II. 在 F_1 和 F_2 之间原子受到一个可以测定其定态的实验的干扰，但并没有把实验结果记录下来(只是形成了一个“混合态”)，于是通过 F_2 之后原子处于 l 态的几率是

$$\sum_m |S_{nm}^{(1)}|^2 |S_{ml}^{(2)}|^2.$$

实验 III. 在 F_1 和 F_2 之间原子受到一个可以测定其定态的实验的干扰，测量结果为“m 态”. 于是通过 F_2 之后原子处于 l 态的几率是

$|S_{mi}^{(2)}|^2$.

情况 II 与 III 的区别，我们在经典理论中就已经熟悉了。而情况 I 和 II 的原则差别适当推广之后，就构成了量子论的核心。这里我们还看到了与上节的考虑之间的联系：

测量一个物理量 η，一般都会使被观测体系发生一些改变；设在测量前 η 具有某一不准确度 $\Delta_1\eta$，则在测量后它将具有小一点的不准确度 $\Delta_2\eta < \Delta_1\eta$。按照前面讲的，这个测量过程必须分成作用显然不同的两步。第一步是使体系受到一个外加的能影响事件进程的物理作用，比如用光束照射或引进一个外场。这个外来作用的结果使被观测体系变到一个混合态，它一般是由无穷多个态组成的，对于这些态，量 η 的精度都能达到 $\Delta_2\eta$。

测量的第二步，是从混合的无穷多个态中挑出某一完全确定的态作为实际上实现了的态。这第二步并不代表任何影响事件进程的真实过程，而只是改变我们对实际关系的认识。

3. 玻尔的并协性概念

在爱因斯坦的相对论中我们第一次放弃了日常经验的概念体系。通常的概念在相对论中只适用于光的传播速度是无限大的过程。现代实验物理学的新的经验材料促使我们去重新审查原有的概念和提出一些新的概念。然而我们的思想对不断扩大的经验范围及其概念体系适应得太慢，所以相对论在刚一出现时就显得既很陌生又很抽象。由前面讲的可以知道，对于原子世界的经验正迫使我们不断地大量放弃那些习以为常的概念。事实上，我们通常对自然所作的描述，特别是关于在自然过程中存在严格的规律性的思想，都建筑在这样一种假设的基础之上，即不给现象施加明显的影响而对它进

行观测是可能的. 将一个确定的结果联系于一个确定的原因，这只有在我们能够对原因和结果进行观测，而在观测过程中对它们又不产生影响时，才有意义. 所以从实质上看，只有对一个孤立体系才能定义这样的经典因果律. 但是在原子物理学中，一般说来每次观测都会引起有限的、在一定程度上不可控制的干扰，而这可以说是意料之中的事，因为原子物理学所讨论的是一些在原则上不能再分的最小的单元. 在另一方面，每个物理过程的时空描述都取决于对这个过程的观测，所以，在一方面是对过程的空间-时间描述，在另一方面是经典的因果律，它们表示物理现象中既互相补充又互相排斥的两个方面. 在理论形式中与这个情况对应的是，量子论虽然有了一个数学形式，但却不能把它解释为事物在空间-时间中的简单联系. 由于时空描述和因果联系两方面的这种并协性，关于"观测"的概念也就出现了一种特殊的不确定性，即我们既可以把对象算在被观测体系之中，又可以把它们看成是一种观测手段. 理论形式包含了这种任意性的结果是，为了解释一个物理实验常常可以采用完全不同的方法，在以后将给出这方面的一些例子. 但是即使我们考虑了这种任意性，"观测"的概念严格说来仍然属于我们日常生活经验的观念范畴. 只有我们考虑了测不准关系对于整个时空图象所加的限制，这个概念才能用到原子现象中去. 因为任何观测按其定义都与空间和时间有关系，所以这个概念只有在由测不准关系限

表 1

经典理论	量子理论		
	或者是		或者是
空间-时间的描述 因果性	空间-时间的描述 测不准关系	统计性的联系	非空间和时间的数学形式 因果性

定的范围内才有意义. 在某些特殊情况下，经典因果律的要求有可能与时空描述在某种程度上一致，这在前面已经讲过. 我们可以把上述情况一般地归纳为表 1（玻尔）. 只有首先设法使概念体系适应时空描述和因果性之间的这个基本的并协性，我们对量子论方法（特别是对变换理论的诠释）的无矛盾性才能作出判断. 我们的思想和语言在适应原子物理学的经验方面，就像相对论的情形一样，确实存在很大的困难. 在相对论的情形中，我们看到古代关于空间和时间问题的哲学讨论对这种适应是有益的. 同样，在原子物理学中，我们可以从对于整个认识论的最基本的讨论中吸取营养，这就是关于把世界划分为主体和客体的困难讨论. 作为现代理论物理学特征的许多抽象，我们发现哲学上在几百年前就讨论过了. 在当时，只重视实际的自然科学家把这些抽象看作是观念上的游戏而不予理会，但是在今天，现代物理学实验技术的提高迫使我们不得不严肃地来讨论它们.

第五章　一些重要实验的讨论

前面几章我们详细地讨论了量子论的物理原理，但是由于我们的思想还不能适应实验带来的新形势，特别是不能适应上面讨论过的时空描述与因果律之间的关系，因而限制了我们对量子论原理的真正理解．所以讨论一下一些基本的实验，对理解量子论将是极为有益的．

1. 威耳孙云室照相

a）用经典的微粒图象理论很容易解释威耳孙云室照相的基本特征．从量子论的观点来看这种解释也是完全合理的．因为正如第二章所着重指出的，在威耳孙云室中测量粒子位置时测不准关系没有起多大作用，这一测不准对于解释威耳孙云室照相的主要结果(比如 α 射线轨道的直线性)并不重要．这类现象和其它宏观过程一样，用经典理论来解释总是正当的，只是对现象中极细微的部分，即测不准关系起作用的范围，量子论才重要．

b）然而，深入讨论一下威耳孙云室照相的量子理论还是有好处的．在这里我们立即遇到了前面所说的“观测”概念的任意性问题，也就是说我们既可以把电离的水分子和 α 粒子都当作被观测的体系，也可以把它们当作观测的手段，这纯粹是一个怎么做方便的问题．现在我们先采取后一种观点．于是，被观测体系就只由 α 粒子组成，从水分子电离得到的位置测量结果，在理论的数学形式中用 α 粒子在坐标空间 x，y，z

中的几率波包$|S(q')|^2$来表示. 为了省点事，下面的计算只考虑粒子的一个自由度，用q来表示[8,9]. 如果我们已知粒子在先前某一时刻的位置，那就可以求出(虽不那么准确)粒子的速度(见第二章2b)，从而根据(11)式就能精确地求出$S(q)$. 我们用$\bar{q},\bar{p}$表示在$t=0$时刻q和p的平均值，用$\Delta q,\Delta p$表示其平均误差. q_0'的下标0表示q_0'值是属于$t=0$时刻的. 于是根据第二章1，$t=0$时有

$$S(q_0') = \text{常数}\cdot e^{-\frac{(q_0'-\bar{q})^2}{2(\Delta q)^2}-\frac{2\pi i}{h}\bar{p}(q_0'-\bar{q})}. \tag{60}$$

对于不受外力的运动，我们有下述方程

$$\left.\begin{aligned} p &= \text{常数} = p_0, \\ \dot{q} &= \frac{1}{\mu}p, \\ q &= \frac{1}{\mu}p\cdot t + q_0. \end{aligned}\right\} \tag{61}$$

因此

为了求出在t时刻的几率分布，我们根据$M(44)$式来计算变换函数$S(q_0', q')$:

$$\left(\frac{t}{\mu}\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_0'}+q_0'\right)S(q_0'q') = q'S(q_0'q'). \tag{62}$$

这个方程的解为

$$S(q_0'q') = \text{常数}\cdot e^{\frac{2\pi i\mu}{ht}(q'q_0'-\frac{1}{2}q_0'^2)}. \tag{63}$$

因此根据$M(69)$式我们就得到t时刻的几率分布为

$$S(q') = \int S(q_0')S(q_0'q')dq_0', \tag{64}$$

亦即

$$S(q') = \text{常数}\cdot e^{\frac{1}{2(\Delta q)^2}\frac{[\bar{q}+\frac{i}{\beta}(q'-\frac{t}{\mu}\bar{p})]^2}{1+\frac{i}{\beta}}}, \tag{65}$$

其中 $\beta = \frac{h}{2\pi}\frac{t}{\mu}\frac{1}{(\Delta q)^2} = \Delta p\,\frac{t}{\mu}\,\frac{1}{\Delta q}$.

于是得到

$$|S(q')|^2 = \text{常数}\cdot e^{-\frac{(q'-\frac{t}{\mu}\bar{p}-\bar{q})^2}{(\Delta q)^2+(\frac{t}{\mu}\Delta p)^2}}. \qquad (66)$$

所以 q' 的平均值为 $\frac{t}{\mu}\bar{p}+\bar{q}$，这个结果同经典理论的计算相同. q' 的均方偏差 $\Delta q^2+\left(\frac{t}{\mu}\Delta p\right)^2$ 是两部分的和，分别对应于 $t=0$ 时 q_0' 和 p_0' 的测不准.

把(66)式用于 α 粒子的三个自由度 x, y, z，我们可以看出，几率波包的轨迹在不考虑发散时是一条直线. 但是必须指出，只有 α 粒子在运动中没有受到干扰时，(66)式才成立. 水分子的每一次电离都会使(66)式的波包变成这种波包的混合态（在第四章 2 的数学形式中情况 I 向情况 II 的过渡)；因为水分子电离同位置测量是联系在一起的，所以又可从这个混合态中挑出一个(66)式那样的较小的几率波包作为测量的结果，而它又成为进一步计算轨道的起点(在第四章 2 的形式中的情况 III)；如此类推下去. 偏离直线的程度同电离引起的动量变化与粒子动量之比有关，因此 α 粒子和 β 粒子轨道的差别是很明显的. 按照第二章 2 所述，动量变化的测不准与将被撞出电子的分子在碰撞前的动量范围有关，因此也就间接与分子的大小有关.

关于刚才所做的计算，还应该指出，从 q_0' 到 q' 的变换也可以用能量的方法来完成. 按照 $M(69)$ 式一般地有

$$S(q_0'q') = \int S(q_0'E)S(Eq')dE, \qquad (67)$$

因而

$$+\underbrace{\lambda(H_{\mathrm{I}}^{(1)}+H_{\mathrm{II}}^{(1)})}_{\text{相互作用}}+\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}\Big]\psi=0. \tag{69}$$

λ 是个很小的微扰参数，可把上式按 λ 的升幂展开.

我们令 $\psi=\psi^{(0)}+\lambda\psi^{(1)}+\lambda^2\psi^{(2)}+\cdots$，于是由(69)式，可得

$$\left.\begin{aligned}
&\Big[-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Big(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big)+H_{\mathrm{I}}^{(0)}(q_{\mathrm{I}})+H_{\mathrm{II}}^{(0)}(q_{\mathrm{II}})\\
&\qquad+\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}\Big]\psi^{(0)}=0,\\
&\Big[-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Big(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big)+H_{\mathrm{I}}^{(0)}(q_{\mathrm{I}})+H_{\mathrm{II}}^{(0)}(q_{\mathrm{II}})\\
&\qquad+\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}\Big]\psi^{(1)}=-(H_{\mathrm{I}}^{(1)}+H_{\mathrm{II}}^{(1)})\psi^{(0)},\\
&\Big[-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Big(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Big)+H_{\mathrm{I}}^{(0)}(q_{\mathrm{I}})+H_{\mathrm{II}}^{(0)}(q_{\mathrm{II}})\\
&\qquad+\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}\Big]\psi^{(2)}=-(H_{\mathrm{I}}^{(1)}+H_{\mathrm{II}}^{(1)})\psi^{(1)},\\
&\qquad\cdots\cdots
\end{aligned}\right\} \tag{70}$$

(70)中第一个方程的本征解可以写成

$$\psi^{(0)}=e^{\frac{2\pi i}{h}(p_x x+p_y y+p_z z)}\cdot\varphi_{n_{\mathrm{I}}}(q_{\mathrm{I}})\varphi_{n_{\mathrm{II}}}(q_{\mathrm{II}})e^{-\frac{2\pi i}{h}E_{p,n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}t}. \tag{71}$$

另外，由于函数 $\psi^{(1)}$ 和 $\psi^{(2)}$ 与 q_{I} 和 q_{II} 有关，于是也可按其正交系 $\varphi_{n_{\mathrm{I}}}(q_{\mathrm{I}})\varphi_{n_{\mathrm{II}}}(q_{\mathrm{II}})$ 展开，即如

$$\psi^{(1)}=\sum_{n_{\mathrm{I}},n_{\mathrm{II}}}v^{(1)}_{n_{\mathrm{I}},n_{\mathrm{II}}}(x,y,z,t)\varphi_{n_{\mathrm{I}}}(q_{\mathrm{I}})\varphi_{n_{\mathrm{II}}}(q_{\mathrm{II}}). \tag{72}$$

最后我们写出微扰能量的矩阵元

$$\left.\begin{aligned} H_{\mathrm{I}}^{(1)}\varphi_{n_{\mathrm{I}}}(q_{\mathrm{I}}) &= \sum_{m_{\mathrm{I}}} h^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}m_{\mathrm{I}}}(x, y, z)\varphi_{m_{\mathrm{I}}}(q_{\mathrm{I}}), \\ H_{\mathrm{II}}^{(1)}\varphi_{n_{\mathrm{II}}}(q_{\mathrm{II}}) &= \sum_{m_{\mathrm{II}}} h^{(1)}_{n_{\mathrm{II}}m_{\mathrm{II}}}(x, y, z)\varphi_{m_{\mathrm{II}}}(q_{\mathrm{II}}). \end{aligned}\right\} \tag{73}$$

由上所述，$t = 0$ 时未受微扰的态由下列参数给出：

$$n_{\mathrm{I}} = n_{\mathrm{I}}^0,\ n_{\mathrm{II}} = n_{\mathrm{II}}^0,\ \boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}^0(p_x = p_x^0,\ p_y = p_y^0,\ p_z = p_z^0),\ E = E_0^{(0)}.$$

将(72)和(73)式代入方程(70)，我们得到$\left(\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta + E^{(0)}_{n_{\mathrm{I}}} + E^{(0)}_{n_{\mathrm{II}}} + \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}\right)v^{(1)}_{n_{\mathrm{I}},n_{\mathrm{II}}}(x, y, z, t)$$

$$= -\left[h^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}^0 n_{\mathrm{I}}}(x, y, z)\cdot\delta_{n_{\mathrm{II}}^0 n_{\mathrm{II}}} + h^{(1)}_{n_{\mathrm{II}}^0 n_{\mathrm{II}}}(x, y, z)\delta_{n_{\mathrm{I}}^0 n_{\mathrm{I}}}\right]e^{\frac{2\pi i}{h}(\boldsymbol{p}^0\cdot\boldsymbol{r}^0 - E_0^{(0)}t)}. \tag{74}$$

我们在这儿再令

$$v^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}(x, y, z, t) = e^{-\frac{2\pi i}{h}E_0^{(0)}t}\cdot w^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}(x, y, z),$$

于是，由于 $E_0^{(0)} = E^{(0)}_{n_{\mathrm{I}}^0} + E^{(0)}_{n_{\mathrm{II}}^0} + \frac{1}{2\mu}(p_x^{(0)2} + p_y^{(0)2} + p_z^{(0)2})$，我们求得

$$\left\{-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta - \left[E^{(0)}_{n_{\mathrm{I}}^0} - E^{(0)}_{n_{\mathrm{I}}} + E^{(0)}_{n_{\mathrm{II}}^0} - E^{(0)}_{n_{\mathrm{II}}} + \frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}^{(0)})^2\right]\right\}w^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}(x, y, z)$$

$$= -\left[h^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}^0 n_{\mathrm{I}}}(x, y, z)\delta_{n_{\mathrm{II}}^0 n_{\mathrm{II}}} + h^{(1)}_{n_{\mathrm{II}}^0 n_{\mathrm{II}}}(x, y, z)\delta_{n_{\mathrm{I}}^0 n_{\mathrm{I}}}\right]e^{\frac{2\pi i}{h}(\boldsymbol{p}^0\cdot\boldsymbol{r})}. \tag{75}$$

按照第四章1所述，这时$|w^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}(x, y, z)|^2$给出一级近似.

下两个水分子分别处于 n_{I} 和 n_{II} 态、α 粒子处于位置(x,y,z)的几率.从(75)式我们可以看出,在一级近似下只能激发一个水分子,如果不仅 n_{I} 而且 n_{II} 也与初值 n_{I}^0 和 n_{II}^0 不同,则根据(75)式 $w_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}$ 将等于零. 在转入二级近似之前,我们先来讨论一下 $w^{(1)}(x,y,z)$ 在空间 (x,y,z) 中的几何性质. (75)式左边正是通常的波动方程 $\Delta u + k^2u = 0$, 波长 $\lambda = h/p^{(1)}$ 从下式算出:

$$\frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}^{(1)})^2 = E^0_{n_{\mathrm{I}}} - E_{n_{\mathrm{I}}} + E^0_{n_{\mathrm{II}}} - E_{n_{\mathrm{II}}} + \frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}^{(0)})^2. \tag{76}$$

(75)式右边是这个波的波源,因此根据惠更斯原理,$w^{(1)}(x,y,z)$ 就等于球面波按下述分布函数的叠加:

$$-[h^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}^0 n_{\mathrm{I}}}(x,y,z)\delta_{n_{\mathrm{II}}^0 n_{\mathrm{II}}} + h^{(1)}_{n_{\mathrm{II}}^0 n_{\mathrm{II}}}(x,y,z)\delta_{n_{\mathrm{I}}^0 n_{\mathrm{I}}}]e^{\frac{2\pi i}{h}(\boldsymbol{p}^0\cdot\boldsymbol{r})}. \tag{77}$$

当 $\frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}^{(0)})^2$ 比分子的能级差大时,我们不难看出,$w^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}^0}(x,y,z)$ 实际上只在分子 I 后面 $\boldsymbol{p}^{(0)}$ 方向上一个带状区域中才不为零,这个带状区域的截面(在靠近分子处)约等于分子的大小. 由于 α 粒子在激发水分子的过程中动量有一点改变,相应地,这个带状区域有一定的张角. 这些讨论对于 $w^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}^0 n_{\mathrm{II}}}(x,y,z)$ 也同样成立(见图 17).

在做了上述准备之后. 我们就可以来求二级近似. 由方程(70),可得 $w^{(2)}_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}(x,y,z)$ 的方程

$$\left\{-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta - \left[E_{n_{\mathrm{I}}^0} - E_{n_{\mathrm{I}}} + E_{n_{\mathrm{II}}^0} - E_{n_{\mathrm{II}}} + \frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}^{(0)})^2\right]\right\}$$

$$\times w^{(2)}_{n_I n_{II}}(x,y,z) = -\sum_{m_I}\sum_{m_{II}} w^{(1)}_{m_I m_{II}}(x,y,z)$$

$$\times [h^{(1)}_{m_I n_I}(x,y,z)\delta_{m_{II}n_{II}} + h^{(1)}_{m_{II}n_{II}}(x,y,z)\delta_{m_I n_I}]$$

$$= -\sum_{m_I} w^{(1)}_{m_I n_{II}}(x,y,z) h^{(1)}_{m_I n_I}(x,y,z)$$

$$-\sum_{m_{II}} w^{(1)}_{n_I m_{II}} h^{(1)}_{m_{II}n_{II}}(x,y,z). \qquad (78)$$

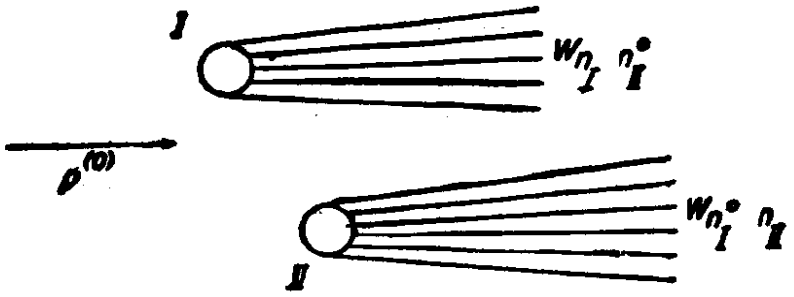

图 17

现在我们要问在什么条件下 $w^{(2)}_{n_I n_{II}}$ ($n_I \neq n_I^0$, $n_{II} \neq n_{II}^0$) 才显著地异于零. 对于这样的 $w^{(2)}_{n_I n_{II}}$，在 (78) 式右边的求和中只剩下 $m_I = n_I^0$ 或 $m_{II} = n_{II}^0$ 的项. 如果 $w^{(1)}_{n_I^0 n_{II}}$ 和 $h^{(1)}_{n_I^0 n_I}$ 在同一个 (x,y,z) 空间区域内显著地异于零，或者 $w^{(1)}_{n_I n_{II}^0}$ 和 $h^{(1)}_{n_{II}^0 n_{II}}$ 在同一个 (x,y,z) 空间区域内显著地异于零，则 $w^{(2)}_{n_I n_{II}}$ 也就显著地异于零. 这只有在下述条件下才可能发生，即或者是分子 I 处在 $w^{(1)}_{n_I^0 n_{II}}$ 的带状区域中，或者是分子 II 处在 $w^{(1)}_{n_I n_{II}^0}$ 的带状区域中. 把这个讨论推广到任意多个分子的情况——用不着任何新的观点——我们就可以证明 α 射线的轨道是直线. 由电离引起的动量改变的测不准与位置测量的精度有关，也就是与分子的大小有关，这已经表现在我们用惠更斯原

理所作的上述计算之中. 散射波的源区域 $h^{(1)}(x,y,z)$ 越小，"带状区域" $w^{(1)}$ 的张角就越大. 这样将分子包括到被观测体系之中，就不必引入几率波包的不连续变化，不过如果我们要讨论对水分子的电离进行观测的可能性，就又会出现几率波包的不连续改变*.

2. 衍 射 实 验

a) 对于光栅或晶格对光线或物质射线的衍射（戴维孙-革末，汤姆孙，茹普，菊池正士），可以用光和物质的经典波动理论作出最简单明了的解释. 从量子论的观点来看，对这些实验运用空间-时间的波动理论也是合理的，因为波幅间的测不准关系对波的几何性质完全不起作用. 只有对波的能量和动量以及类似的问题，量子论才重要.

b) 对于衍射现象来说，波的量子理论与经典理论完全一致，用不着把这种计算的数学推演再重复一遍. 另一方面，杜安从粒子图象的量子论出发，对于衍射现象给出了一个有趣的推导[15]. 为了简单起见，我们设想粒子在一个平面线状光栅（栅距为 d）上反射（栅线与垂直于纸面的 z 轴平行，见图18）. 设光栅本身可以移动，如果只考虑入射粒子与光栅的相

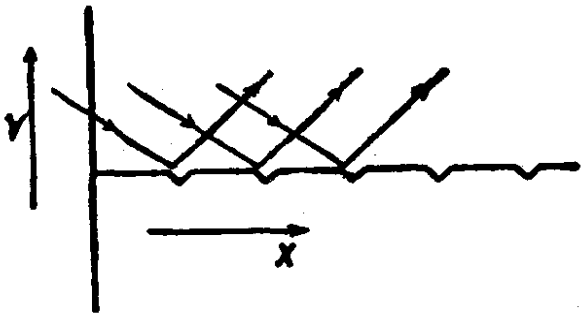

图 18

* 即波包的收缩. ——中译者注

互作用，就可以把光栅在 x 方向的平移看成一个周期运动，周期为 d，因为整个光栅移动距离 d 时这种相互作用保持不变．于是我们可以断定光栅在 x 方向的运动是“量子化”的，其动量 p_x 只能改变 h/d 的整数倍(参见从前的量子化条件 $\int pdq = nh$)．

因为在光栅反射粒子的过程中整个体系的动量守恒，所以粒子在 x 方向的动量改变也只能是 h/d 的整数倍．于是得

$$p'_x = p_x + m\frac{h}{d}; \tag{79}$$

另外由于光栅的质量很大，它不会吸收多少能量，所以

$$p'^2_x + p'^2_y = p^2_x + p^2_y = p^2. \tag{80}$$

设 θ 为入射角，θ' 为反射角，则有

$$\cos\theta = \frac{p_y}{p}, \quad \sin\theta = \frac{p_x}{p}.$$

$$\sin\theta' - \sin\theta = m\frac{h}{dp}. \tag{81}$$

根据与粒子相联系波的波长公式 $M(83)$，即可推出

$$(\sin\theta' - \sin\theta)d = m\lambda, \tag{82}$$

与通常的波动理论一致．

c) 物质和光辐射既有粒子性又有波动性这种情况，在量子论的原理被澄清之前经常造成困难．特别是，下述佯谬就常常被人们提到：被光栅反射的电子与构成光栅的物质之间的相互作用力随着它们距离的增大而迅速减小，反射方向应该只取决于紧靠着粒子的那部分光栅线．而实际上距离很远的光栅线对于反射也有影响，衍射峰的锐度取决于整个光栅．造成这一矛盾的原因是把两个不同的实验（见第四章 2 中的实验 I 和 II)混淆起来了．如果没有做任何实验来确定反射前

的电子位置，那么谈论电子的位置就没有意义，显然是整个光栅都对过程起着决定的作用. 相反，如果进行了一次这样的测定电子位置的实验(其精确度为 Δq)，那么这个实验就会使电子的动量和相应的波长发生改变，这个改变的不确定量为 $\Delta p \sim h/\Delta q$. 所以这时发生反射的方向也就不完全确定，就像是在少数的 $\Delta q/d$ 条光栅线上发生的反射一样. 当 $\Delta q < d$ 时，衍射峰就完全消失 ($\Delta p > h/d$). 如果我们真的对位置进行过测定，那我们就能对相应的电子的轨道进行精确的判断(见第四章 2 中实验 II 和 III 的差别)，比如确定这个电子究竟是在某一条光栅线上还是在线间的平面上，等等.

3. 爱因斯坦-茹普实验[16]

光量子理论和波动理论之间还存在一个矛盾，它可以通过下述实验表现出来:

在一束极隧射线中，有一个发光的原子与屏平行地飞过宽度为 d 的狭缝 S (见图 19). 可以用一台分光镜在 P 处观测这个原子通过狭缝发出的光. 设射线中原子的速度为 v，

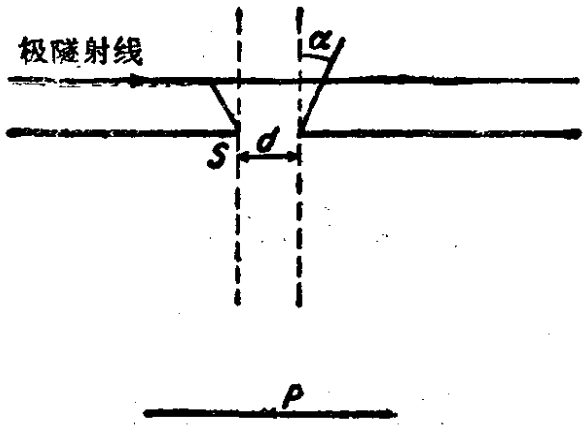

图 19

它所发出的单色光频率为 ν. 只有在原子正好飞过狭缝的一个极短时间间隔 t 内，它发出的光才能到达 P 处，所以在 P 处观测到光的波列就只有一有限的长度，因此按照光学定律，其频率是不确定的，在 P 处看到的谱线频率 ν 具有一定的宽度，其数量级为

$$\Delta\nu \sim \frac{1}{t} \sim \frac{v}{d}. \tag{83}$$

但是从光量子理论来看，发出的谱线不可能具有一定的宽度，因为原子发出的是单色光，屏虽然会改变光量子的动量，但由于它的质量很大，不可能吸收光量子的能量，从而不可能改变光量子的能量. 玻尔认为上述论证的错误在于忽略了多普勒效应和光在狭缝上的散射. 从原子发出而到达 P 处的光量子并不全都垂直于辐射的方向，由于光量子在狭缝上发生数量级为 λ/d 的散射，它们多数是在 α 角(相对于原子到 P 点的联线方向)内发出而到达 P 的，α 角的量级满足

$$\sin\alpha \sim \frac{\lambda}{d}. \tag{84}$$

由于多普勒效应，在这个方向发出的光频率改变为

$$\Delta\nu \sim \sin\alpha \cdot \frac{v}{c} \cdot \nu, \tag{85}$$

于是有

$$\Delta\nu \sim \frac{\lambda}{d} \cdot \frac{v}{c}\nu \sim \frac{v}{d}, \tag{86}$$

与(83)式一致.

所以在我们讨论的这个实验里，能量守恒定律对于粒子严格有效这一点，与经典波动光学的要求也是一致的.

4. 辐射的发射、吸收和色散

a. 守恒定律的应用

对于原子在辐射过程中的行为，根据存在不连续定态的假设以及光的量子论就已经能够给出一个定性的解释．实际上这个解释正是玻尔理论的第一个决定性的成就．现在我们把这个理论最重要的定性结论概述如下．

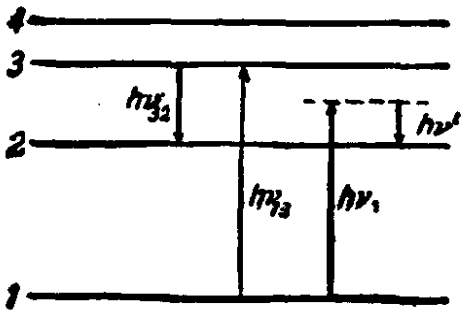

图 20

从基态算起，对原子的定态用 1，2，3···n 来编号(参看图 20 的能级图)．一个比如说处于态 3 的原子，能够在发出一个光量子 $h\nu_{32}$ 之后跃迁到态 2；同样，态 1 上的原子在吸收一个光量子 $h\nu_{13}$ 以后可以跃迁到态 3 上去．这里必须指出，这些叙述要完全按其字义来理解，绝对不只是具有“符号的性质”．因为原子处在哪个定态中是可以通过比如斯特恩-革拉赫实验来确定的．特别是由此可以推出，任何一条发射谱线的强度都和与它相应的高能态上的原子数目成正比；同样地，任何一条吸收谱线的强度则和与它相应的低能态上的原子数目成正比．这些曾反复得到实验充分支持的结论，完全是量子论所特有的，不可能从任何经典理论导出，无论是经典的波动图象还是经典的粒子图象，因为就连存在不连续的能量值

这一点也不能用经典理论来解释.

在色散理论中，特别是在斯梅克尔不相干辐射的散射理论中[17]，我们可以看到完全类似的情况.

如果一个态 1 上的原子被光量子 $h\nu$ 激发，则它可以不改变定态而发出相同的光量子 $h\nu$（假定原子核的质量是无限大），也可以发出一个波长向长波方向移动的光量子 $h\nu'$ 而跃迁到态 2. 这两种散射光的强度都正比于态 1 的原子数. 如果态 2 上的一个原子受到频率为 ν 的光的照射，则它可以发出波长较短的（光量子为 $h\nu'$）不相干的散射光而跃迁到态 1. 这种散射光（反斯托克斯散射光）的强度则正比于态 2 上的原子数. 这已经被喇曼实验所证实[18].

b. 辐射和物质的统一处理

守恒定律的这些定性的推论，由于它们本身的特点，对原子发射的光的干涉特征或跃迁几率的值都不可能作出任何说明. 对于原子发射的光的干涉特征，就像对于戴维孙-革末实验一样，用经典理论来解释就足够了；波的量子论不会改变干涉的几何图象. 然而对于跃迁几率的计算，就绝对需要运用量子理论. 虽然我们可以按照克莱因的做法，把对应原理与物质的量子论巧妙地结合起来，而不必运用辐射的量子论. 不过关于辐射问题的这种表述看来并不完全令人满意，用这种粗浅的做法可能会得出错误的结论. 无论如何，在考虑量子论的不同要求时，运用这种对应方法要特别小心.

对于物质和辐射两方面都运用量子论，就能对辐射现象作出一致的处理，而不管我们是从粒子图象还是从波动图象出发，结果都一样. 狄喇克在他的辐射理论中使用的是粒子图象的语言，但他在推导哈密顿函数时也部分地用到了辐射波动理论的结论[19]. 现在把这个理论的基本思想扼要地介绍

如下：

设原子可以用一个在静电场 Φ_0 中运动的电子来表示. 狄喇克把单电子问题的相对论不变性方程写成[20]

$$p_0 + \frac{e}{c}\Phi_0 + \alpha_i\left(p_i + \frac{e}{c}\Phi_i\right) + \alpha_4\mu c = 0 \qquad (87)$$

或者

$$H = -e\Phi_0 - \alpha_i c\left(p_i + \frac{e}{c}\Phi_i\right) - \alpha_4\mu c^2, \qquad (88)$$

其中 Φ_0 是标量势，$\Phi_i(i = 1, 2, 3)$ 是电磁势，指标重复总是意味着求和 $(i = 1, 2, 3)$. 和前面一样，p_i 表示与 q_i 对应的正则共轭动量，α_i 是满足下列方程的算符

$$\alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i = 2\delta_{ik}, \quad \alpha_i\alpha_4 + \alpha_4\alpha_i = 0;$$
$$\alpha_4^2 = 1; \quad \delta_{ik} = \begin{cases} 1 & \text{当 } i = k, \\ 0 & \text{当 } i \neq k. \end{cases} \qquad (89)$$

从运动方程可得

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \; \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = -\alpha_i \cdot c. \qquad (90)$$

因此 α_i 与速度矩阵只差一个因子 $-c$. 从 (88) 式我们知道，如果假定辐射场的标量势为零，就可以把原子与辐射场的相互作用能简单地写成

$$-\alpha_i e\Phi_i = \frac{e}{c}\dot{q}_i\Phi_i. \qquad (91)$$

因此，包括原子和辐射场的整个体系的哈密顿函数为

$$H_{总} = H_{原子} + \frac{e}{c}\dot{q}_i\Phi_i + H_{辐射场}. \qquad (92)$$

为了使得这个问题的数学形式简单起见，我们考虑在一个空腔中的辐射场. 空腔中麦克斯韦方程的解给出一个正交函数系，可以将 Φ_i 按这一正交函数系展开. 根据 $M(124)$ 式，展开式的系数可以写成

$$a_r = e^{-\frac{2\pi i}{h}\Theta_r} N_r^{\frac{1}{2}}$$

其中 N_r 表示属于第 r 个本征振动的光量子数. 用这个变量就可以把辐射场的总能量(不考虑与原子的相互作用)简写成

$$H_{\text{辐射场}} = \sum_r N_r h\nu_r. \tag{93}$$

在 Φ_i 按正交系的展开式中,各个项仍然依赖于原子在空腔中的位置. 只要我们假定空腔足够大,这种"依赖性"在最后的结果中就可以平均掉. 所以适宜的做法是,把展开式中的各个项分别换成一个"平均"振幅,使这个平均振幅的平方与原来振幅的平方平均值一致,而这个平均值是对于原子在空腔中所有可能的位置取的. 这样我们对于 Φ_i 就得到

$$\Phi_i = \left(\frac{h}{2\pi c}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_r \cos\alpha_{ir} \cdot \left(\frac{\nu_r}{\sigma_r}\right)^{\frac{1}{2}} \times [N_r^{\frac{1}{2}} e^{\frac{2\pi i}{h}\Theta_r} + e^{-\frac{2\pi i}{h}\Theta_r} \cdot N_r^{\frac{1}{2}}]. \tag{94}$$

这里的 α_{ir} 代表第 r 个本征振动的电矢量与 q_i 轴的夹角, σ_r 代表在频率范围 $\Delta\nu$ 和立体角 $\Delta\omega_r$ 之间的本征振动数除以 $\Delta\nu_r \cdot \Delta\omega_r$. 因此对于整个体系的哈密顿函数我们得到

$$H = H_{\text{原子}} + \sum_r N_r h\nu_r + \frac{e}{c}\left(\frac{h}{2\pi c}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_r \dot{q}_r \left(\frac{\nu_r}{\sigma_r}\right)^{\frac{1}{2}} [N_r^{\frac{1}{2}} e^{\frac{2\pi i}{h}\Theta_r} + e^{-\frac{2\pi i}{h}\Theta_r} N_r^{\frac{1}{2}}]. \tag{95}$$

这里的 $\dot{q}_r$ 代表矢量 $\dot{\boldsymbol{q}}$ 在第 r 个本征振动的电矢量方向的分量.

从(95)式可以直接导出上节运用守恒定律所得到的全部结果. 因为从量子力学方程可以一般地表明 H 是常数. 此外,从(95)式还可推知,对于一个光量子 $h\nu_r$ 的发射或吸收来说,重要的是 $\dot{q}_r$ 的与原子所涉及的跃迁相应的矩阵元. 除

了在这里不打算计算的一个数值因子之外，跃迁几率就直接由这个矩阵元的平方给出. 如果我们计算微扰(把相互作用项当作很小的微扰)，那么在一级近似下只能得到发射和吸收过程，在二级近似下则还有色散过程. 关于这个计算的细节请读者参看狄喇克的论文[1].

辐射问题的哈密顿函数(95)式有一个缺点，即看起来它并没有包含辐射的干涉和相干特性. 不过，只有像前面那样，在(94)式中引进一个平均振幅以后才是这样. 如果在 Φ_i 按正交系的展开式中我们保留正确的振幅，则这个正交系是麦克斯韦方程的解这一点就保证了辐射具有相干特性，这种特性是与麦克斯韦方程相适应的. 例如，麦克斯韦方程的解在 M(124)式中是量 a_r 的一个因子，如果在原子的位置上麦克斯韦矢势由于干涉而等于零，这个因子也就等于零，因此在按经典理论不可能发生吸收的区域，也就不会发生光的吸收. 从这些讨论我们可以直接看出，对于讨论相干问题来说，用经典波动理论就足够了.

5. 干涉和守恒定律

从我们的直觉来看，要承认光量子理论与麦克斯韦方程的要求不发生矛盾总是很困难的. 因此早在量子论被阐明之前，就有人试图求出麦克斯韦方程的具有"针孔辐射"性质的解. 这种解从量子论来看也是合理的，也就是说，任何实验只要能给出一个光量子发射方向的信息，那它的结果就自动地成为麦克斯韦方程的一个针孔辐射型的解(参见第二章 2c 中

1) 狄喇克[20]用最初的薛定谔形式代替哈密顿函数(88). 如果用(88)式，则由于在相互作用能中略去了 Φ_i 的平方项，所有的计算都要简单一些，而结果则与狄喇克的相同.

波包的收缩).

作为一个例子，我们来讨论由于发射一个光量子而引起的反冲[21]. 假定原子在发射一个光量子的同时从态 2 跃迁到态 1，而原子的总动量也发生相应的改变. 由于现在我们感兴趣的只是辐射的相干特性，所以我们采用上节所述的对应原理方法，对于辐射按经典理论来处理. 用物质的经典波动理论给出的电荷分布 $M(86)$ 式作为辐射源. 这个原子则由一个围绕某个核[其质量为 M，电荷为 e，坐标为 $\boldsymbol{r}_{核}(x, y, z)$] 旋转的电子[其质量为 μ，电荷为 $-e$，坐标为 $\boldsymbol{r}_{电子}(x, y, z)$] 来表示. 总动量为 $\boldsymbol{P}(p_x, p_y, p_z)$ 的原子，其定态 n 的薛定谔函数是

$$e^{\frac{2\pi i}{h}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}_s}\cdot\psi_n(\boldsymbol{r}_{电子}-\boldsymbol{r}_{核})\cdot e^{-\frac{2\pi i}{h}E_{n,P}t}, \tag{96}$$

其中 $\boldsymbol{r}_s=(\mu\boldsymbol{r}_{电子}+M\boldsymbol{r}_{核})/(\mu+M)$ 是原子的质心坐标. 如果计算跃迁 $n\to m$，$\boldsymbol{P}\to\boldsymbol{P}'$ 的几率密度矩阵元，我们得到

$$e^{\frac{2\pi i}{h}(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}')\cdot\boldsymbol{r}_s}\cdot\psi_n(\boldsymbol{r}_{电子}-\boldsymbol{r}_{核})\psi_m^*(\boldsymbol{r}_{电子}-\boldsymbol{r}_{核})e^{-\frac{2\pi i}{h}(E_{n,P}-E_{m,P'})t}. \tag{97}$$

对核的坐标和电子的坐标求平均，并且相加，我们就得到原子的总电荷密度，把它作为辐射的源，就可以说明发出辐射的相干特性.

对于原子核及电子的电荷密度我们有（略去共同的电荷因子 e，$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_{电子}-\boldsymbol{r}_{核}$ 是积分变量，dv 是相应的体积元）

$$\begin{aligned}\rho_{电子}&=e^{\frac{2\pi i}{h}(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}')\cdot\boldsymbol{r}_{电子}}\int e^{\frac{2\pi i}{h}\frac{M}{\mu+M}\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}')}\\&\quad\times\psi_n(\boldsymbol{r})\psi_m^*(\boldsymbol{r})dv\cdot e^{-\frac{2\pi i}{h}(E-E')t},\\\rho_{核}&=e^{\frac{2\pi i}{h}(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}')\cdot\boldsymbol{r}_{核}}\int e^{\frac{2\pi i}{h}\frac{M}{\mu+M}\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}')}\\&\quad\times\psi_n(\boldsymbol{r})\psi_m^*(\boldsymbol{r})dv\cdot e^{-\frac{2\pi i}{h}(E-E')t}.\end{aligned} \tag{98}$$

于是总电荷密度为

$$\rho = 常数 \cdot e^{\frac{2\pi i}{h}[(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}')\cdot \boldsymbol{r}-(E-E')t]}, \tag{99}$$

其中常数的值对于下面的讨论并不重要. 对于电流密度我们得到完全相似的表达式. 因此，从这个电荷分布发出的辐射可由下述推迟势来确定:

$$\Phi_0(P) = \int \frac{\rho\left(t-\frac{R}{c}\right)}{R_{pp'}} dv_{P'}, \tag{100}$$

对于 Φ_i 也有类似的表达式. R 表示从积分点 P' 到观测点 P (不要把它与总动量的绝对值 P 弄混了)的距离. 因此我们得到

$$\Phi_0(P) = 常数 \cdot \int dv_{P'} \frac{e^{\frac{2\pi i}{h}\left[(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}')\cdot \boldsymbol{r}_{P'}-(E-E')\left(t-\frac{R_{PP'}}{c}\right)\right]}}{R_{PP'}}, \tag{101}$$

Φ_i 的表达式与它类似.

假定我们有一个实验以一定的精度测定了原子的位置(于是动量 $\boldsymbol{P}$ 的值必定相应地测不准)，这意味着电荷分布 ρ 只存在于一个有限的空间区域 Δv 内. 由于我们只考察离 Δv 很远处的辐射，所以我们可以把 $R_{PP'}$ 展开，比如把坐标原点取在 Δv 中，我们就可以近似地得到

$$R_{PP'} = R_P - \frac{X_P}{R_P} \cdot x_{P'} - \frac{Y_P}{R_P} y_{P'} - \frac{Z_P}{R_P} z_{P'}. \tag{102}$$

于是由 (101) 式，可得

$$\Phi_0(P) = 常数 \cdot e^{\frac{2\pi i}{h}(E-E')\left(t-\frac{R_P}{c}\right)} \int_{\Delta v} \frac{dv_{P'}}{R_{PP'}} \cdot e^{-\frac{2\pi i}{h}\left(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}'-\frac{h\nu}{c}\frac{\boldsymbol{R}_P}{R_P}\right)\cdot \boldsymbol{r}_{P'}}. \tag{103}$$

其中 $E - E' = h\nu$.

只有当指数上 $\boldsymbol{r}_{P'}$ 的因子小于 $(\Delta l)^{-1}$ (Δl 是 Δv 的线度)时，这个势才明显地不为零，在其它位置上，这辐射由于干涉而抵消了，于是我们得到

$$\boldsymbol{P} - \boldsymbol{P}' = \frac{h\nu}{c}\frac{\boldsymbol{R}_P}{R_P} \pm \frac{h}{\Delta l}. \tag{104}$$

这时原子将受到一个数值为 $h\nu/c$ 的反冲(精确到自然测不准 $h/\Delta l$). 如果用实验确定了反冲的方向(在测不准关系许可的范围内)，则这个辐射的相干行为就像针孔辐射一样，它的势可以用 (103) 式来表示. 但针孔辐射只是一种可能的特殊情况，只有 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{P}'$ 足够精确，从而原子的质心坐标不能准确确定时，这种实验才能实现. 当实验确定原子质心位置的精度大于 $h/|\boldsymbol{P} - \boldsymbol{P}'| = c/\nu = \lambda$ 时，即精度大于发射光的波长时，我们就得到另一个特殊情况. 这时，(103) 式给出一个规则的球面波，对于反冲得不出任何结论，因为这时反冲的不精确度 $h/\Delta l$ 大于 $h\nu/c$.

在这个例子中我们清楚地看到，在量子论中，甚至光波也失去了经典理论所赋予它的朴素的现实性，因为原子辐射的麦克斯韦方程的解依赖于我们对原子质心坐标的知识.

6. 康普顿效应和康普顿-西蒙实验[3]

在康普顿效应理论中我们得到了完全类似的关系，计算与上节的相同，这里只扼要地给出主要的结果. 考虑束缚电子要比自由电子更有意思，因为这时我们(假定给定了原子核的位置)对散射电子的位置预先已经有了一定的知识. 由守恒定律得出下列方程:

$$\begin{aligned} &h\nu + E = h\nu' + E', \\ &\frac{h\nu}{c}\cdot \boldsymbol{e} \pm \sim \Delta \boldsymbol{P} = \frac{h\nu'}{c}\boldsymbol{e}' \pm \boldsymbol{P}'. \end{aligned} \tag{105}$$

式中没有撇号的字母表示碰撞前的量，有撇号的字母表示碰撞后的量. $\boldsymbol{P}$ 是电子的平移动量，$\boldsymbol{e}$ 与 $\boldsymbol{e}'$ 表示在光量子运动方向的单位矢量. $\sim\Delta\boldsymbol{P}$ 表示原子中电子的动量范围；如果 $\Delta\boldsymbol{P}$ 比 $\boldsymbol{P}$ 和 $h\nu/c$ 都小，我们就能从(105)式得到关于 $\boldsymbol{e}'$ 与 $\boldsymbol{P}'$ 的方向之间关系的相当精确的结论. 例如，若用威耳孙云室测量了 $\boldsymbol{P}'$，则辐射就具有针孔辐射的全部特征，因为光量子的发射方向是确定的. 如果 $\boldsymbol{P}' \gg \Delta\boldsymbol{P}$，我们就可以把电子的平移波函数近似为平面波（$\boldsymbol{r}$ 是电子坐标矢量）

$$e^{\frac{2\pi i}{h}(\boldsymbol{P}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)}.$$

假定初态是一个正常态，其本征函数为 $\psi_E(\boldsymbol{r})e^{-\frac{2\pi i}{h}Et}$，其中的 ψ，根据(37)式，在某一线度为 $\Delta l(\Delta l\cdot|\Delta\boldsymbol{P}|\sim h)$ 的区域内才不等于零. 这些波函数受到频率为 ν 的入射波的扰动，微扰函数是一个波长 $\lambda = c/\nu$ 的周期性空间函数. 于是，作为电荷分布扰动后的结果，我们最后得到下面的表达式：

$$\left.\begin{aligned} \rho &= \text{常数}\cdot f(\boldsymbol{r})e^{-\frac{2\pi i}{h}Et}\cdot e^{2\pi i\left(\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}}{\lambda}-\nu t\right)}\cdot e^{-\frac{2\pi i}{h}(\boldsymbol{P}'\cdot\boldsymbol{r}-E't)} \\ &= \text{常数}\cdot f(\boldsymbol{r})e^{\frac{2\pi i}{h}\left[\left(\frac{h\nu}{c}\boldsymbol{e}-\boldsymbol{P}'\right)\cdot\boldsymbol{r}-(E-E'+h\nu)t\right]}. \end{aligned}\right\} \tag{106}$$

其中的 $f(\boldsymbol{r})$ 也是在某一线度为 $\sim\Delta l$ 的区域内不等于零. 如果我们写出像(103)式那样在离原子很远处的推迟势，就得到(与(103)式一样，$\boldsymbol{R}_P/R_P = \boldsymbol{e}'$)

$$\begin{aligned} \Phi_0 = \text{常数}\cdot & e^{-\frac{2\pi i}{h}(E-E'+h\nu)\left(t-\frac{R}{c}\right)} \\ & \cdot\int_{\text{原子范围}}\frac{dv_{P'}}{R_{PP'}}f(\boldsymbol{r}_{P'})e^{\frac{2\pi i}{h}\left(\frac{h\nu}{c}\boldsymbol{e}-\boldsymbol{P}'-\frac{h\nu'}{c}\boldsymbol{e}'\right)\cdot\boldsymbol{r}_{P'}}. \end{aligned} \tag{107}$$

其中

$$h\nu' = E - E' + h\nu.$$

(107)式中的时间因子表明，散射辐射的频率为 ν'，与(105)式中的频率一致．另外，如果 $r_{P'}$ 的因子比原子线度的倒数大得多，(107)式右边的积分就由于干涉而成为零．于是，因为 $\Delta l|\Delta \boldsymbol{P}| \sim h$，可得

$$\frac{h\nu}{c}\boldsymbol{e} = \frac{h\nu'}{c}\boldsymbol{e}' + \boldsymbol{P}' \pm \sim |\Delta \boldsymbol{P}|, \qquad (108)$$

与(105)的第二式一致．所以散射辐射的相干特性就像针孔辐射的一样．当然光量子的方向并没有精确地确定，我们可以把这一点看作是初态动量不确定的结果．如果我们用束缚较松的电子来做实验，动量的测不准就会小一些．这时原子的截面要相应地大一些．如果把这些考虑运用于原子的激发态，那就要用关系式(37)$\Delta l|\Delta \boldsymbol{P}| \sim nh$ 来代替 $\Delta l|\Delta \boldsymbol{P}| \sim h$，并且在计算推迟势时把 $\phi(\boldsymbol{r})$ 的节面数也考虑进去．由于这样做只是引起一些非本质的复杂化，所以我们还是只限于讨论正常态．

如果我们想解释关于发射反冲电子和散射光量子的同时性的盖革-玻特实验[22]，并采用这里概述的对应原理方法，那我们就必须使用只在一确定的时间间隔内辐射的电荷密度．我们用一静止的波包描述电子的初态，用一运动的波包描述电子的终态，而波包的大小取决于测量的安排．电荷密度等于这两个波包的乘积，它只在一个很短的时间内才明显地不等于零，因为两个波包只在一个很短的时间内才会发生重迭．于是所产生的辐射是由一个有限的波列组成的，它以光速向前传播．根据辐射的量子论，我们可以得到盖革-玻特实验的一个前后一致的解释，不过它们在一切要点上都是等价的．此外，就像前面已经指出的那样，对于光量子和电子，守恒定律

根据几率计算规则有

$$\overline{\Delta n^2} = \bar{n},$$

于是

$$\overline{\Delta E^2} = (h\nu)^2 \cdot \bar{n} = h\nu \bar{E}. \tag{112}$$

所以微粒图象的经典理论只能给出公式(110)中的第一部分. 另一方面，辐射的经典波动理论则恰好导致公式(110)中的第二部分. 这个计算将在后面结合量子论一起给出. 因此，对于(110)式的推导来说，实质上必须用到量子论，至于我们是从波的还是微粒的图象出发，都是一样的.

特别是如果我们用粒子的位形空间来处理这个问题（迄今为止，确实还没有对光量子前后一致地这样做过)，我们就必须注意，这个问题的所有项可以分成不相混合的一些组，从其中可以选出一组确定的项来作为问题的解(见 *M*.§7). 由于对易关系 *M*(135)(它是相应的测不准关系所要求的)，因而必须特别选择其本征函数对光量子的坐标对称的那一组. 正如玻色所指出的，这种选择导致了光量子的玻色统计法，因而也导致了(109)和(110)式.

如果从波动图象出发，那么就像 *M*(124)式那样，我们从本征振动的振幅得到与此本征振动相应的光量子数，于是也得到相应的数学形式[24]. 为了避免计算中不必要的繁复，我们用一条长 l 的振动弦来代替辐射空腔. 设 $\varphi(x, t)$ 是弦的横向位移，c 是弦中的声速，则其拉格朗日函数为

$$L = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t}\right)^2 - \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)^2\right], \tag{113}$$

于是有

$$\Pi = \frac{1}{c^2}\frac{\partial \varphi}{\partial t} \tag{114}$$

以及

$$\bar{H} = \frac{1}{2}\int_0^l \left\{ c^2\Pi^2 + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2 \right\} dx$$
$$= \frac{1}{2}\int_0^l \left\{ \frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2 \right\} dx. \qquad (115)$$

此外，下述对易关系成立：

$$\Pi(x)\varphi(x') - \varphi(x')\Pi(x) = \delta(x - x')\frac{h}{2\pi i}. \qquad (116)$$

引入

$$\varphi(x, t) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sum_{k=1}^{\infty} q_k(t) \sin k\frac{\pi}{l} x,$$

$\bar{H}$ 就化为

$$\bar{H} = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\frac{1}{c^2}\dot{q}_k^2 + \left(k\frac{\pi}{l}\right)^2 q_k^2\right\} \qquad (117)$$

进一步我们可以令

$$p_k = \frac{1}{c^2}\dot{q}_k,$$
$$p_k q_l - q_l p_k = \delta_{kl}\frac{h}{2\pi i}, \qquad (118)$$

因而(见 $M(124)$ 式)

$$p_k = \sqrt{\frac{k\pi}{cl}}\sqrt{\frac{h}{4\pi}}\{N_k^{\frac{1}{2}} e^{\frac{2\pi i}{h}\Theta_k} + e^{-\frac{2\pi i}{h}\Theta_k} N_k^{\frac{1}{2}}\},$$
$$q_k = \sqrt{\frac{lc}{k\pi}}\sqrt{\frac{h}{4\pi}}\{N_k^{\frac{1}{2}} e^{\frac{2\pi i}{h}\Theta_k} - e^{-\frac{2\pi i}{h}\Theta_k} N_k^{\frac{1}{2}}\}\frac{1}{i}. \qquad (119)$$

弦的本征频率是

$$\nu_k = k \cdot \frac{c}{2l}. \qquad (120)$$

因而(117)式便成为

$$\bar{H} = \sum_{k=1}^{\infty} h\nu_k \cdot \left(N_k + \frac{1}{2}\right). \tag{121}$$

对于一小段弦 $(0, a)$ 中的能量，我们还得到

$$E = \frac{1}{l}\int_0^a \sum_{j,k=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{c^2}\dot{q}_j\dot{q}_k \sin j\frac{\pi}{l}x \sin k\frac{\pi}{l}x + q_jq_kjk\left(\frac{\pi}{l}\right)^2 \cos j\frac{\pi}{l}x \cos k\frac{\pi}{l}x \right\} dx. \tag{122}$$

如果我们从上述求和中特别挑出 $j = k$ 的项，另外显然还可以假设所考虑的波长都比 a 小，于是我们就得到 $\bar{E} = \frac{a}{l}\bar{H}$. 在(122)式中去掉那些 $j = k$ 的项，我们就得到涨落的值 $\Delta E = E - \bar{E}$.

经过积分后得

$$\Delta E = \frac{1}{2l} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \left\{ \frac{1}{c^2}\dot{q}_j\dot{q}_k K_{jk} + jkq_jq_k\left(\frac{\pi}{l}\right)^2 K'_{jk} \right\}, \tag{123}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} K_{jk} &= c\frac{\sin(\nu_j - \nu_k)\frac{a}{c}}{(\nu_j - \nu_k)} - c\frac{\sin(\nu_j + \nu_k)\frac{a}{c}}{(\nu_j + \nu_k)}, \\ K'_{jk} &= c\frac{\sin(\nu_j - \nu_k)\frac{a}{c}}{(\nu_j - \nu_k)} + c\frac{\sin(\nu_j + \nu_k)\frac{a}{c}}{(\nu_j + \nu_k)}. \end{aligned}\right\} \tag{124}$$

因此，我们得到均方涨落为

$$\overline{\Delta E^2} = \frac{1}{2l^2} \sum_{\substack{j,k=1 \\ j \neq k}}^{\infty} \left\{ \frac{1}{c^4}\overline{\dot{q}_j^2}\,\overline{\dot{q}_k^2}K_{jk}^2 + j^2k^2\left(\frac{\pi}{l}\right)^4 \overline{q_j^2}\,\overline{q_k^2}K_{jk}'^2 + \left(\frac{\pi}{l}\right)^2 \frac{1}{c^2} jk\left(\overline{q_j\dot{q}_j}\;\overline{q_k\dot{q}_k} + \overline{\dot{q}_jq_j}\;\overline{\dot{q}_kq_k}\right)K_{jk}K'_{jk} \right\}. \tag{125}$$

我们假定弦 l 很长，因而其相邻的本征振动频率很靠近，于是

可以用对频率 ν_j 和 ν_k 的积分来代替对 j 和 k 的求和. 此外，我们最后假定 a 很大，因而可用关系式

$$\lim_{a\to\infty}\frac{1}{a}\int_{-\nu_1}^{+\nu_2}\frac{\sin^2\nu a}{\nu^2}f(\nu)d\nu=\pi f(0),$$

$$\text{当 } \nu_1,\ \nu_2>0. \tag{126}$$

于是双重积分就化为一简单积分[1]，因而我们得到

$$\overline{\Delta E^2}=\frac{a}{c}\int d\nu\left\{\frac{1}{c^4}\left(\overline{\dot{q}_\nu^2}\right)^2+\left[\left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2\overline{q_\nu^2}\right]^2\right.$$

$$\left.+\left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2\frac{1}{c^2}\left[\left(\overline{q_\nu\dot{q}_\nu}\right)^2+\left(\overline{\dot{q}_\nu q_\nu}\right)^2\right]\right\}. \tag{127}$$

由于对易关系 (118)，有

$$\overline{q_\nu\dot{q}_\nu}=-\overline{\dot{q}_\nu q_\nu}=-c^2\frac{h}{4\pi i}. \tag{128}$$

此外还得到

$$\bar{E}=\frac{a}{c}\int d\nu\left\{\frac{1}{c^2}\overline{\dot{q}_\nu^2}+\left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2\overline{q_\nu^2}\right\}$$

$$=\frac{a}{l}\int d\nu\cdot z_\nu\cdot h\nu\left(N_\nu+\frac{1}{2}\right). \tag{129}$$

其中 $z_\nu d\nu$ 是频率范围 $d\nu$ 内的本征振动数，在此情形中 $z_\nu=2l/c$.

在频率区间 $\Delta\nu$ 上取积分，我们就得到

$$\bar{E}=\frac{a}{l}\cdot z_\nu\cdot\Delta\nu\cdot h\nu\left(N_\nu+\frac{1}{2}\right), \tag{130}$$

$$\overline{\Delta E^2}=\frac{a}{c}\Delta\nu\left[\frac{1}{2}\left(\frac{\bar{E}c}{a\Delta\nu}\right)^2-\frac{1}{2}(h\nu)^2\right]. \tag{131}$$

然后我们把 $\bar{E}$ 分为平均热能 $\overline{E^*}$ 和零点能：

---

1) 这只有在假定 $a\to\infty$ 的情况下把由于弦的端点所引起的项略去以后才可能做到，这时这些项在形式上成为无限大——这是因为在量子论中“精确”端点是一种物理上不能允许的假定.

$$\bar{E} = \overline{E^*} + \frac{a}{l} z_\nu \Delta\nu \cdot \frac{h\nu}{2}$$

$$= \overline{E^*} + \frac{a}{c} \Delta\nu \cdot h\nu, \qquad (132)$$

就求得

$$\overline{\Delta E^2} = \frac{a}{2c} \Delta\nu \left[\left(\frac{\overline{E^*} c}{a\Delta\nu} \right)^2 + 2 \frac{\overline{E^*} c}{a\Delta\nu} \cdot h\nu \right]$$

$$= \frac{\bar{E}^{*2}}{\Delta\nu \cdot z_\nu \cdot \frac{a}{l}} + h\nu \cdot \overline{E^*}. \qquad (133)$$

这个值与(110)式完全相符. 如果在(133)式中取极限 $h \to 0$, 我们就得到经典理论中相应的关系. 因此经典波动理论只能导致(133)式中的第一项. 而依照我们的愿望, 既可诠释为微粒理论也可诠释为波动理论的量子论, 则导出了完全的涨落公式.

8. 量子论的相对论形式*

在本书的绝大部分讨论中, 都没有考虑相对论原理的要求. 因而一般说来, 所得的结果只能保证在可以把光速看成无限大的实验中才成立. 迄今所得的公式在辐射理论中的适用范围还可以再扩大一些, 不过目前一般都用常数 c 作为量子论中已探索过的领域与尚未探索的领域之间的分界线. 因此在谈到一些基本物理问题时, 我们只限于采用量子论中已经完全肯定了的结果. 在下面我们只简单地讨论一下对于量子论相对论形式的一些尝试, 以及在这些尝试中所遇到的困

* 本节在 1944 年的德文版中已删去, 这里是从 1930 年的德文初版译出的. ——中译者

难. 狄喇克对单电子问题提出了一个相对论不变性波动方程[20](见第五章，4b)，它不仅满足量子论的要求，还满足相对论的要求. 但是这个方程存在一些根本的困难，它们来自：对于一个自由电子的运动有

$$\frac{E^2}{c^2} = \mu^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2. \tag{134}$$

根据这一关系，对于给定的动量，电子总是可以有两个能量值，它们只是符号不同. 这就得出一个结论：在每一个原子问题中，除了通常的能量值之外，还存在无限多个负能量值，这与实际情况不符. 而且从正能态向负能态跃迁的几率不会太小，在这种情况下，至少对于单电子问题，我们居然能得到符合实际的正能量值，这看起来是非常令人吃惊的. 特别是克莱因的计算表明[25]，这个困难还表现在，根据任何直接受(134)式限制的波动方程来计算，电子都能不受阻碍地穿过其高度 $>2\mu c^2$ 的势垒. 例如，若我们只考虑 x 方向的运动 ($p_y = p_z = 0$)，按照(134)式进行 第二章，2d 中的计算，我们就得到

$$\frac{E^2}{c^2} = \mu^2 c^2 + p_x^2,$$

$$\frac{(E-V)^2}{c^2} = \mu^2 c^2 + p_x'^2;$$

从而

$$p_x'^2 = p_x^2 + \frac{(E-V)^2 - E^2}{c^2}. \tag{135}$$

在势垒的右边，波函数的形式为

$$e^{\frac{2\pi i}{h}(p_x' x - Et)}. \tag{136}$$

当 V 值很小时，p_x' 是实数，于是如第二章 2d 中所述，我们得到一个透射波. 当 V 较大时，p_x' 是虚数，于是波在势垒

一侧发生全反射；这时物质波在区域 II（见图 11）中的透入部分将按指数规律衰减。当 V 值很大时，p'_x 又成为实数，也就是说，电子能以某一几率无阻碍地穿过非常高的势垒. 精确的计算表明这一几率不会为零. 在相对论性量子理论中，对于电子产生的场的能量，还存在另一个多少有些不同的困难。对于一个点状电子，大家知道，其自场的电磁能在经典理论中就已经是无限大. 为了避开这个困难，我们在经典理论中引进了一个普适长度，即电子的半径. 约旦和克莱因指出[38]，在非相对论性量子理论中，显然可以适当选择哈密顿函数中非对易因子的顺序，把电子的这个无限大自能完全消去. 但是这种办法在相对论性量子理论中迄今尚未找到.

人们常常表示希望在这些问题解决之后，量子论也许又可以回到经典概念中去. 但是我们只要稍为回顾一下最近三十年来物理学发展的近况就可以知道，等待着这个经典概念体系的，恐怕是进一步的限制. 除了相对论的要求所引起的我们通常的时空世界概念的改变（用常数 c 表征）以及由普朗克常数 h 所标志的量子论测不准关系以外，还可能会有其它一些与普适常数 e，μ，M（质子质量）相关的限制出现. 至于这些进一步的限制会是什么性质，目前还难以预料.

附　　录

量子论的数学工具*

要推出量子理论的数学形式，无论是采用波动图象，还是采用微粒图象，都要依据两个出发点：经验事实和对应原理。玻尔[26]提出来的对应原理，是假定量子理论可以和经典理论作详细的类比，而后者适合我们心目中使用的图象．这个类比不仅可以引导我们去发现形式定律，其特殊价值还在于，对于所发现的定律，它能用我们心目中使用的图象作出诠释．

下面我们就开始根据微粒类比来推导量子力学的数学结构。

1. 物质的粒子图象

一个具有 f 个自由度的体系，其经典力学的基本方程可以写成所谓的“正则”形式

$$\dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k},\quad \dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k},\quad (k = 1, 2, \cdots, f), \tag{1}$$

其中 $q_1, q_2, \cdots, q_f$ 是广义坐标，$p_1, p_2, \cdots, p_f$ 是它们的共轭动量，H 是哈密顿函数．当 H 不显含时间时，立即可得能量方程

$$H(p, q) = W, \tag{2}$$

---

* 附录内提到的节号和方程编号，未特别标明者，均指附录内的。——中译者

其中总能量W为一常数. 为简单起见，可以假定此体系是多周期的，这时任一坐标q_k作为时间的函数都可写成傅里叶级数，即写成谐波项的和，形如

$$q_k = \sum_{\tau_1=-\infty}^{+\infty} \sum_{\tau_2=-\infty}^{+\infty} \cdots \sum_{\tau_f=-\infty}^{+\infty} q^{(k)}_{\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_f} e^{2\pi i(\tau_1\nu_1+\tau_2\nu_2+\cdots\tau_f\nu_f)t}. \quad (3)$$

$q^{(k)}_{\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_f}$是与时间无关的振幅，$\nu_1$，$\nu_2$，$\cdots$，$\nu_f$是运动的基频. 对于$p_k$，或普遍地，对于$p_k$与$q_k$的任一函数，可以写出类似的表达式，其频率与$q_k$的相同.

应用正则变换——即保持方程(1)的形式不变的变换——可以引入一组新的正则共轭量J_k，w_k，称为“作用量-角度变量”. 它们由下列基本特性来定义：哈密顿函数H只依赖于J_k，而w_k与运动基频的关系式为

$$w_k = \nu_k t + \beta_k,$$

其中β_k为常数. 用这些变量，运动方程就成为

$$\dot{J}_k = -\frac{\partial H}{\partial w_k}, \quad \dot{w}_k = \nu_k = \frac{\partial H}{\partial J_k}, \quad (k = 1, 2, \cdots, f). \quad (4)$$

根据经典电动力学，(3)式中谐波项的频率就是一个原子所发射的光谱线的频率，而其振幅决定对应的强度.

根据对应原理，在上述经典粒子的力学与量子理论的力学之间，必定存在密切的关系. 因此，对于量子理论的力学来说，我们需要找出一组方程，使它们在形式上与经典理论的方程相似，但又要考虑原子物理学中已经很好确立了的经验事实[27]. 其中主要有：

(1) 里德伯-里兹组合原则——观察到的原子光谱频率具有特征项结构. 这就是说，一种元素的所有光谱线都能表示成数目较少的项的差. 若把这些项排成一维阵列T_1，T_2，$\cdots$，则原子频率就形成一个二维阵列

$$\nu(nm) = T_n - T_m, \quad (5)$$

由此立即可得组合原理

$$\nu(nk) + \nu(km) = \nu(nm). \tag{6}$$

（2）*存在分立的能量值*——夫兰克与赫兹关于电子碰撞的基本实验表明，一个原子的能量只能取某些确定的分立值[1] $W_1, W_2, \cdots$.

（3）*玻尔的频率关系*——原子的特征频率与它的本征能量有关，其方程为

$$\nu(nm) = \frac{1}{h}(W_n - W_m). \tag{7}$$

现在我们遵循上面所概述的程序，来勾画推演新量子力学基本方程的轮廓. 但是应该认识清楚，这决不是数学意义上说的推演，因为正是所要得到的方程本身构成了理论的基本假设. 虽然下面的考虑十分令人信服，但这些方程最终得到确认还是在于它们的预测与实验相符.

如果要把上述简单实验事实纳入新理论的基础之中，那么显然不仅对经典动力学，甚至对经典运动学都必须作出意味深长的改动. 在经典理论中，把(3)式中那种傅里叶项相加，就可构成坐标的各种可能的运动. 这些项可以称为“运动元”，因为理论所处理的量，特别是能量，都可以用它们表示出来. 它们的振幅和频率都是连续变化的积分常数以及决定谐波阶数的整数 $\tau_1, \cdots, \tau_f$ 的函数. 这与原子的能量和频率只存在分立值这一点，实际上也就是与明明存在一条一条明锐的光谱线这一点，是直接抵触的.

若要在两个理论之间保持对应的关系，就必须假定在量子力学中也存在类似的元素. 为了在一开始就确保存在分立的能量值，这些元素应该是一些整数的函数. 为了与里德伯-

1）一般地说，原子能量在一定范围内也可取连续值. 由于现在假定体系是多周期的，可以不考虑这个“连续谱”.

里兹组合原理相对应，就要求它们依赖于两组整数，而经典谐波的 f 重特征又启示我们，每组应包含 f 个整数. 因此我们假设这些元素的形式为

$$q(n_1\cdots n_f;\ m_1\cdots m_f)e^{2\pi i\nu(n_1\cdots n_f,m_1\cdots m_f)t}, \tag{8}$$

其中已经用数组 $n_1\cdots n_f$ 和 $m_1\cdots m_f$ 代替了单个的整数 n 和 m，这样做是容易理解的. 此外，假定振幅和频率正好就是对发出的辐射作光谱分析所给出的那些量，则新的理论就可以叙述为可观察量的一种算法. 因此我们假定频率 $\nu(n_1\cdots n_f;\ m_1\cdots m_f)$ 具有谱项结构 (5)，从而它们服从组合原理 (6).

显然没有疑问，能把这些元素相加，作成一个傅里叶级数，就像经典理论那样；然而，对于用这种级数表示的坐标，却必须有一个类比的东西. 一个足够普遍和有伸缩性的办法，就是简单地把形如 (8) 式的所有元素的集合当成一个整体，用以在粒子图象的量子理论中，在数学上取代坐标的经典表达式 (3). 这个集合可以写成一个矩阵

$$\|q(n_1\cdots n_f;\ m_1\cdots m_f)e^{2\pi i\nu(n_1\cdots n_f,m_1\cdots m_f)t}\|,$$

这是一个无限的平方阵列，按照整数 n_i，m_i 的顺序排列，取所有实数值. 因此新的运动学以坐标的矩阵表示为基础，用

$$q_k = \|q_k(nm)e^{2\pi i\nu(nm)t}\| \tag{9}$$

与 q_k 对应. 以后我们一般都用单个字母 n 和 m 来代替数组 $n_1\cdots n_f$ 和 $m_1\cdots m_f$. 对于动量 p_k，假设也有类似的矩阵表示，其频率与坐标的相同，就像经典傅里叶级数的情形那样[1].

然而，只有定义了矩阵运算的性质和法则，这种表示在数学上和在物理上才都有意义. 在这里我们必须把对应原理当做指导原则. 首先，经典的表达式 (3) 必须具有实数值；因为

1) 对于一个不是多周期的体系，经典的表示是傅里叶积分，所以对应的矩阵指标必须是连续变化的.

式中各项都是复数，这就只有每一项都有与之相应的共轭复数才行．如果我们假设

$$q_k(mn) = q_k^*(nm),$$

式中星号表示取共轭复数，那么对于(9)式中的每个矩阵元，也就存在与之相应的共轭复数元，这是因为根据(5)式有 $\nu(mn) = -\nu(nm)$．具有这类对称性的矩阵称为厄密矩阵，在量子理论中，假设所有的坐标矩阵都是这种矩阵．

任一坐标的时间导数 $\dot{q}_k$，在经典理论中也表示成一个傅里叶级数，而它的各项就是表示 q_k 的级数中相应项的时间导数．所以在量子理论中其矩阵为

$$\dot{q} \equiv \|2\pi i\nu(nm)q(nm)e^{2\pi i\nu(nm)t}\|, \qquad (10)$$

这又是一个形如(9)式的厄密矩阵．

量子理论一定要能够回答下述基本的运动学问题：比如说给定了表示动量 p 和坐标 q 的矩阵，用什么矩阵来表示 $p+q$，pq 以及一般地说 p 和 q 的任意函数呢？对于加法的情形，根据经典的类比答案是明显的．因为两个(3)式那样的傅里叶级数的和仍是一个同类的级数，其频率相同，而其振幅是分振幅之和，所以对量子理论的矩阵元，我们期待必然有

$$(p+q)(nm) \equiv \|[p(nm)+q(nm)]e^{2\pi i\nu(nm)t}\|.$$

乘法规则可以由类似的考虑来定义，然而，由于量子频率服从里德伯-里兹组合原理，它与经典乘法规则在性质上有一点很不一样．在经典理论中，两个傅里叶级数的乘积可以写成双重和式

$$pq = \sum_{\sigma}\sum_{\sigma'} p_\sigma q_{\sigma'} e^{2\pi i[(\sigma+\sigma')\nu]t},$$

其中用 σ 代替了数组 $\sigma_1\cdots\sigma_f$，而用 $[(\sigma+\sigma')\nu]$ 来代表 $(\sigma_1+\sigma_1')\nu_1+\cdots+(\sigma_f+\sigma_f')\nu_f$．为了把它也写成(3)式的形式，必须把同频率的亦即 $\sigma+\sigma'=\tau$ 的各项合并起来，这就

给出

$$pq = \sum_{\tau}(pq)_{\tau}e^{2\pi i[\tau\nu]t},$$

其中

$$(pq)_{\tau} = \sum_{\sigma} p_{\sigma}q_{\tau-\sigma}. \tag{11}$$

在量子理论中表示 pq 的矩阵必须是由 $p(nm)e^{2\pi i\nu(nm)t}$ 和 $q(nm)e^{2\pi i\nu(nm)t}$ 这些项所做成的一个总体. 如果根据组合原理 (6) $\nu(nk) + \nu(km) = \nu(nm)$, 把所有那些频率相同的元素加起来,那就仍然得到一个 (9) 式类型的矩阵. 因此取

$$pq(nm) = \sum_{k} p(nk)q(km) \tag{12}$$

作为新的振幅,而其矩阵元则是 $pq(nm)e^{2\pi i\nu(nm)t}$.

大家知道,这正是数学中矩阵或张量的乘法规则,这就说明在这里使用这些术语是恰当的. 根据 (12) 式, 显而易见 $pq(nm) \neq qp(nm)$,所以在量子理论中乘法是不可交换的——对于理论的进一步发展来说, 这是一个极为重要的结果.

应用加法和乘法的规则, 对于坐标和动量矩阵的任一函数 $x(p, q)$, 至少对于凡可表达为其幂级数的函数, 就都是有意义的. 函数 x 的矩阵元总是 $x(nm)e^{2\pi i\nu(nm)t}$ 这种形式,对于给定的原子系统,频率的阵列 $\nu(nm)$ 总是相同的. 因而可以省去指数项, 只用它的振幅 $x(nm)$ 就可以把一个矩阵很好地表示出来.

矩阵理论中通常的定义和习惯,量子理论都照样采用.两个矩阵相等的意思, 就是对应的矩阵元都相等. 单位矩阵定义为其对角元都是一, 而非对角元都是零的矩阵. 可以把它方便地写成

$$1 = \|\delta_{nm}\|,$$

其中

$$\delta_{nm}=\begin{cases}1 & \text{当 } n=m \text{ 时},\\ 0 & \text{当 } n\neq m \text{ 时}.\end{cases}$$

矩阵 x 的逆矩阵 x^{-1} 是满足方程

$$x^{-1}x=xx^{-1}=1$$

的矩阵. x 的转置矩阵 $\tilde{x}$ 是将 x 的行与列交换而得的矩阵 $\|x(mn)\|$.

我们现在有了一套量子代数的原则，不难看出其中除了交换律之外普通代数的其余规则都仍然成立. 所以若用 x, y 和 z 表示力学量的任意函数，则在量子理论中它们服从矩阵代数的规则:

$$\begin{aligned}&x+y=y+x,\\ &x(y+z)=xy+xz,\\ &x(yz)=(xy)z,\\ &(x+y)+z=x+(y+z),\end{aligned}$$

但是,一般说来

$$xy\neq yx.$$

到目前为止,在这个理论中还没有引入普朗克常数 h. 但它必定是一个基本的角色. 它的出现，应该和与经典理论形成鲜明对比的变量不可交换性有密切关系.事实上,狄喇克[28]已经发现,在量子理论中表达式 $(2\pi i/h)(xy-yx)$ 与经典力学中的泊松括号

$$[xy]=\sum_{k=1}^{f}\left(\frac{\partial x}{\partial q_k}\frac{\partial y}{\partial p_k}-\frac{\partial y}{\partial q_k}\frac{\partial x}{\partial p_k}\right)$$

相类似. 大家知道这个表达式对于 p_k 与 q_k 的正则变换是不变的. 为了使人相信这个重要的联系,我们将要表明,在整数 n 与 m 比它们的差大得多的极限范围内，$(2\pi i/h)(xy-yx)$ 的矩阵元与经典括号 $[xy]$ 的谐波项是渐近地一致的. 然而，必须先把矩阵元与傅里叶振幅间的联系说得更精确些.

我们还记得，作为今天量子力学发展准备阶段的定态理论，正是通过安置“稳定的”经典运动，而发现只存在分立的能量值. 从可能的运动的连续区域中，定义这种稳定运动的方程若是[1)]

$$J_k = n_k h \quad (k = 1, 2, \cdots, f), \tag{13}$$

其中 J_k 是作用变量，n_k 是整数，则玻尔频率条件 (7) 就与经典关系

$$\nu_k = \frac{\partial H}{\partial J_k}$$

相类似. 因为根据方程(4)，H 只是 n_k 的函数，$\partial H/\partial J_k$ 可写成

$$\frac{\partial H}{\partial J_k} = \lim_{\alpha_k \doteq 0} \frac{H(n_1 \cdots n_f) - H(n_1 \cdots n_k - \alpha_k, \cdots, n_f)}{\alpha_k h},$$

所以在 n_k 比 α_k 大得多的极限范围内，

$$\nu(n_1 \cdots n_f; m_1 \cdots m_f) = \frac{1}{h}[H(n_1 \cdots n_f)$$

$$- H(n_1 - \alpha_1, \cdots, n_f - \alpha_f)] \sim \alpha_1 \frac{\partial H}{\partial n_1}$$

$$+ \cdots + \alpha_f \frac{\partial H}{\partial n_f} = \alpha_1 \nu_1 + \cdots + \alpha_f \nu_f.$$

于是，简单点说，在这个量子数大的范围内，在光谱频率 $\nu(n_1 \cdots n_f; m_1 \cdots m_f)$ 与定态 $(n_1 \cdots n_f)$ 或 $(m_1 \cdots m_f)$ 的谐波频率 $(n_1 - m_1)\nu_1 + \cdots + (n_f - m_f)\nu_f$ 之间是渐近地一致的. 然而在量子力学中光谱线是用矩阵元来表示的，这就使我们猜想到，在矩阵元 $q(n_1 \cdots n_f;\ n_1 - \alpha_1, \cdots, n_f - \alpha_f) \times e^{2\pi i \nu(n_1 \cdots n_f, n_1 - \alpha_1 \cdots n_f - \alpha_f)t}$ 与定态 $(n_1 \cdots n_f)$ 的谐波项 $(\alpha_1 \cdots \alpha_f)$ 之间，存在普遍的对应. 简单点说，在量子数大的范围内，

$$q(n, n - \alpha) e^{2\pi i \nu(n, n-\alpha)t} \text{ 对应于 } q_\alpha(n) e^{2\pi i [\alpha \nu] t}. \tag{14}$$

---

1) 这里忽略了可能的简并.

经验上发现，在这个范围内，根据定态傅里叶振幅 $q_\alpha(n)$ 作经典计算所得的强度，与光谱线 $\nu(n, n-\alpha)$ 的强度近似地符合，这就进一步论证了这一对应。因而矩阵元的指标 n 与 m 对应于两个定态的量子数，对角元($n=m$)则对应于定态本身。

借助于对应关系(14)，就不难表明前面说的与泊松括号的对应。$(2\pi i/h)(xy-yx)$ 的 (nm) 矩阵元可以写成像 $(2\pi i/h)\{x(n, n-\alpha)y(n-\alpha, n-\alpha-\beta)-y(n, n-\beta)x \times(n-\beta, n-\alpha-\beta)\}$ 的项对 α 与 β 的和，这里 $\alpha+\beta=n-m$，加上再减去 $x(n-\beta, n-\alpha-\beta)y(n-\alpha, n-\alpha-\beta)$，就成为

$$\left(\frac{2\pi i}{h}\right)\{[x(n, n-\alpha)-x(n-\beta, n-\alpha-\beta)]y(n-\alpha, n-\alpha-\beta)-[y(n, n-\beta)-y(n-\alpha, n-\alpha-\beta)] \times x(n-\beta, n-\alpha-\beta)\}.$$

然而，在“大量子数”的范围内，$\alpha, \beta \ll n$，

$$x(n, n-\alpha)-x(n-\beta, n-\alpha-\beta) \sim h\beta \frac{\partial x_\alpha(n)}{\partial J},$$

并且

$$y(n-\alpha, n-\alpha-\beta) \sim \frac{1}{2\pi i\beta} \frac{\partial y_\beta(n-\alpha)}{\partial w} \sim \frac{1}{2\pi i\beta} \frac{\partial y_\beta(n)}{\partial w},$$

因为根据(14)式，y 的谐波项为 $y_\beta(n)e^{2\pi i\beta w}$。所以前面的矩阵元就近似为[1]

$$\sum_{\alpha+\beta=n-m} \sum_{k=1}^{f} \left[\frac{\partial x_\alpha(n)}{\partial J_k} \frac{\partial y_\beta(n)}{\partial w_k} - \frac{\partial y_\beta(n)}{\partial J_k} \frac{\partial x_\alpha(n)}{\partial w_k}\right],$$

1) 这个求和必须扩充到量子数并不比它们的差大的范围；所以，为了数值上一致，必须假定远离对角线的矩阵元可以忽略，因为它们对应于经典理论中的高阶谐波项。当然，这并不影响形式上的一致，然而这点才是重要的。

根据傅里叶振幅的乘法规则(11)，上式正是$[xy]$的用作用量-角度变量来表示的第$(n-m)$阶谐波项.

在经典理论中，正则共轭变量p_k和q_k的泊松括号满足关系式

$$[p_kq_l]=\begin{Bmatrix}1 & \text{当 } k=l\\ 0 & \text{当 } k\neq l\end{Bmatrix},\quad [p_kp_l]=0,\quad [q_kq_l]=0.$$

所以在量子理论中假定对共轭变量也有类似的关系式,即

$$\left.\begin{aligned} &p_kq_l-q_lp_k=\begin{cases}\dfrac{h}{2\pi i}1, & \text{当 } k=l,\\ 0, & \text{当 } k\neq l,\end{cases}\\ &p_kp_l-p_lp_k=0,\\ &q_kq_l-q_lq_k=0.\end{aligned}\right\}\qquad(15)$$

这些在方程中引入了h的"对易关系"，对于量子力学是头等重要的. 它们相当于稳定的经典运动理论中的量子条件，但是那些量子条件只能应用于多周期系，而现在的对易关系则必须认为对于任何运动都是普遍适用的. 事实上，在以后将会看到，为了使得运动方程的积分问题有意义，它们是必需的. 现在就来建立运动方程.

经典理论的正则方程(1)可以用泊松括号表达成

$$\dot{p}_k=[Hp_k],\quad \dot{q}_k=[Hq_k].$$

最简单的假设，就是把泊松括号换成量子理论中与它们对应的式子，而把这些方程形式地搬到量子理论中来. 我们假设量子理论中的运动方程为[1)]

---

1) 如果对于矩阵采用一个合理的方法来定义偏微分，就可以不用泊松括号，而直接把运动方程写成经典形式(1). 根据对易关系(15)不难建立对于任意函数f的关系

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial f}{\partial q}=pf-fp,\quad \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial f}{\partial p}=fq-qf.$$

于是立即就可得出更有用的形式(16).

$$\left.\begin{aligned}\dot{p}_k &= \frac{2\pi i}{h}(Hp_k - p_kH),\\ \dot{q}_k &= \frac{2\pi i}{h}(Hq_k - q_kH).\end{aligned}\right\} \tag{16}$$

显然方程(15)和(16)并不互相独立. 严格地说，只能假定在某一时刻方程(15)成立，而在任何其它时刻的对易关系必须由方程(16)的解来确定；但是计算表明，方程(15)的确与时间无关.

新力学的形式基础现在已经完成了，然而，对于任何物理应用，还必须知道与具体的动力学问题相应的哈密顿函数的形式. 按照对应原理的精神，假定它具有与经典理论相同的形式，一般就足够了. 不确定的情况，像在这里要提出的乘积因子的次序问题，是很少发生的；发生这种情况时，由一些具体的考虑也就足以决定正确的形式.

在这个理论的假设之中，并没有明显地包含能量守恒定律和玻尔频率条件，因此必须表明可以根据基本假设把它们推导出来. 我们先构成一个对角矩阵 W，其矩阵元为

$$W(nm) = \begin{cases} T_nh, & \text{当 } n = m,\\ 0, & \text{当 } n \neq m,\end{cases} \tag{17}$$

其中 T_n 是(5)式中的项. 因为根据(10)式，$(2\pi i/h)(Wx - xW)$ 的 (nm) 矩阵元是

$$\frac{2\pi i}{h}\sum_k [W(nk)x(km) - x(nk)W(km)] = 2\pi i(T_n - T_m)x(nm)$$

$$= 2\pi i\nu(nm)x(nm) = \dot{x}(nm),$$

所以任一量 x 的时间导数都可以根据方程

$$\dot{x} = \frac{2\pi i}{h}(Wx - xW) \tag{18}$$

用 W 矩阵来表达. 从方程(18)和运动方程(16)可以得到

$Wp - pW = Hp - pH$ 和 $Wq - qW = Hq - qH$，或者

$$(W - H)p = p(W - H),\quad (W - H)q = q(W - H). \tag{18'}$$

这就是说，矩阵 $W - H$ 同 p 和 q 二者都对易，因而很容易表明它也同可以表示成 p 和 q 的幂级数的任意函数对易．特别是它同H对易，所以

$$(W - H)H - H(W - H) = WH - HW = 0, \tag{19}$$

根据方程(18)，这就意味着

$$\dot{H} = 0, \tag{20}$$

它表示能量守恒．

(20)式给出H矩阵元的一个无穷方程组 $\nu(nm)H(nm) = 0$．如果只在 $n = m$ 时 $\nu(nm) = 0$，则H的所有非对角元都为零，从而H必定是一个对角矩阵．对于这种情形，我们说系统是"非简并"的．然而，当 $n \neq m$ 时也可能有 $\nu(nm) = 0$，于是H的相应矩阵元就不确定，H不一定是对角的．我们于是说这个系统是"简并"的．

从方程(18')还可得到

$$(W_n - H_n)p(nm) = p(nm)(W_m - H_m),$$
$$(W_n - H_n)q(nm) = q(nm)(W_m - H_m),$$

即对于 n 和m的任何值，都有 $W_n - H_n = W_m - H_m$．因而

$$H = W + C,$$

其中C是单位矩阵乘以任一常数．最方便的是取

$$H = W. \tag{21}$$

以上概述了微粒图象的数学工具．它的物理诠释在别处已有详细的讨论，但是在这里根据对应原理可以自然地得到两条最重要的法则．

1．表示为傅里叶级数的一个量，其时间平均值是由那些与时间无关的项给出的．所以，对于一个非简并系统，表示任一变量的矩阵对角元就给出了与不同定态相应的时间平均

值.

2. 使用微粒图象，可以把辐射过程看成是发射光子的过程，其光谱频率为 $\nu(nm)$，与此同时，原子从能量为 W_n 的初态跃迁到了能量为 W_m 的末态 $(W_n > W_m)$. 我们就可以把辐射强度（能量发射率）统计地表示成 $A(nm)h\nu(nm)$，其中 $A(nm)$ 是发射一个光子而从 n 态自发跃迁到 m 态的几率. 另一方面，经典理论给出与第 τ 阶谐波项相应的平均强度是 $2/3(e^2/c^3)(2\pi)^4[\tau\nu]^4|\boldsymbol{r}_\tau|^2 \cdot 2$，其中 $e\boldsymbol{r}$ 是电子的偶极矩矢量（矢量 $\boldsymbol{r}$ 的分量为 $x = \sum_k q_k^{(x)}$，$y = \sum_k q_k^{(y)}$，$z = \sum_k q_k^{(z)}$，$q_k^{(x)}q_k^{(y)}$，$q_k^{(z)}$ 是电子的直角坐标). 令这两个理论的表达式相等，再把傅里叶项换成矩阵元，我们就得到跃迁几率

$$A(nm) = \frac{1}{h\nu(nm)} \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} [2\pi\nu(nm)]^4 |\boldsymbol{r}(nm)|^2 \cdot 2. \quad (22)$$

这第二条法则的合理性并不明显，因为对麦克斯韦理论也需要重新考虑. 不过，(22) 式只决定所发出辐射的时间平均值，而我们在第五章 § 4 中已经指出，麦克斯韦理论是足以精确地提供这一知识的.

2. 变 换 理 论

在 § 1 中我们用一种可以展示出它与经典力学的类似性的方法，推出了量子力学的数学形式. 然而还没有把它写成一种易于使用的形式. 本节将要指出，在量子理论中一个动力学问题的解相当于一个厄密式或张量的主轴变换. 这就提供了一个可以实用的解法，同时还表明附加条件是恰当的.

假设可以找到一组厄密矩阵 p_k，q_k，它们与时间无关，满足对易关系，并使 $H(p, q)$ 成为对角矩阵，那么这一动力学问

题就被解决了.因为如果这些矩阵的时间因子为 $e^{\frac{2\pi i}{h}(H_n-H_m)t}$，其中 H_n 和 H_m 是H的对角元，则不难看出它们是满足方程(16)的. 如果 $p_k^{(0)}$，$q_k^{(0)}$ 是任意一组满足对易关系的矩阵，那么变换

$$p_k = S^{-1}p_k^{(0)}S, \quad q_k = S^{-1}q_k^{(0)}S \tag{23}$$

就给出一组新的同样满足对易关系的矩阵，这里的 S 是任一矩阵. 这只要将(23)式代入新变量的对易关系式中，就可以从代数上看出来. 用类似的方法不难证明，如果 f 是 $p_k^{(0)}$ 与 $q_k^{(0)}$ 的任一可以写成幂级数的函数，则有

$$f(p_k, q_k) = f(S^{-1}p_k^{(0)}S, S^{-1}q_k^{(0)}S) = S^{-1}f(p_k^{(0)}, q_k^{(0)})S. \tag{24}$$

因为满足对易关系的特殊厄密矩阵是能够找到的，这个问题就归结为寻求这样一个变换函数 S，使得

$$S^{-1}H(p_k^{(0)}, \quad q_k^{(0)})S = W, \tag{25}$$

其中的W是一个对角矩阵.

变换(23)类似于经典力学中的正则变换，但是若把量子理论中的矩阵诠释为无限维幺正空间（希耳伯空间）中的张量，它们就还有极其重要的几何诠释. 正如在第四章§1中所指出的那样，这不仅提供了一个表示变换(23)和方程(25)的解析方法，也为这个理论的物理诠释预备了一种方便的语言. 为此目的，用纯粹抽象的形式就够了.

令 $u_1^{(0)}$，$u_2^{(0)}$，$\cdots$为单位正交矢量的一个无限集合. 矢量

$$t = \sum_n t_n^{(0)}u_n^{(0)}$$

的全体构成了我们所使用的空间，这里的分量 $t_n^{(0)}$ 是复数. 于是一个张量 q 按照下式

$$t = qs, \text{ 或 } \quad t_n^{(0)} = \sum_m q^{(0)}(nm)s_m^{(0)}$$

表示两个矢量之间的一个线性关系. 现在考虑从上述坐标系

轴变换问题，至少对于有限矩阵来说，总是有解的.

关于符号还得说几句. 一般来说，用新的记号来区别在不同坐标系中的矩阵并不方便. 更合适的记法是，对不同坐标系中的分量指标，用不同的字母来区别；对同一坐标系中的指标的不同数值，用不同的撇号来表示. 因此 $p(l'l'')$ 表示 p 在“l”坐标系中的分量，而 $p(a'a'')$ 表示它在另一“a”坐标系中的分量. 例如，我们把方程 (23) 的第一式写成

$$p(a'a'') = \sum_{l'}\sum_{l''} S^{-1}(a'l')p(l'l'')S(l''a''),$$

于是变换矩阵 S 的指标就自然地对应于不同的坐标系.

这样，求解由运动方程 (16) 和对易关系 (15) 所给出的量子力学问题，就归结为厄密矩阵 H 的主轴变换问题. 下面简单说说解法，这是大家都熟悉的. (25) 式可以写成

$$HS - SW = 0, \tag{30}$$

它给出 S 矩阵元的方程

$$\sum_{l''} H(l'l'')S(l''a') - \sum_{a''} S(l'a'')W(a''a') = 0,$$

$$\begin{pmatrix} l' = 1, 2, \cdots \\ a' = 1, 2, \cdots \end{pmatrix},$$

或者，因为 W 是对角的，这就给出确定任意一列矩阵元 $S(l'a')$ 的一个无限维齐次线性方程组

$$\sum_{l''} H(l'l'')S(l''a') - S(l'a')W_{a'} = 0,$$

$$(l' = 1, 2, \cdots). \tag{31}$$

作为参数出现的各个 $W_{a'}$ 也是确定的，并且在实际上与 $S(l'a')$ 无关，这是因为当而且只有当左边的行列式为零时，即当 $W_{a'}$ 是代数方程

$$\begin{vmatrix} H(11)-W & H(12) & H(13) & \cdots \\ H(21) & H(22)-W & H(23) & \cdots \\ H(31) & H(32) & H(33)-W & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \end{vmatrix} = 0 \quad (32)$$

的解时，方程(31)才有解.

因此这个方程的根 $W_{a'}$ 也就是方程(30)或(31)的本征值，并且总是实数. 它们是W的对角元，因而给出了系统的能级；当方程(32)的根为重根时，系统是简并的，因为根据(7)式这时的频率有重合.

对于每一个 $W_{a'}$，方程(31)就有一组相应的本征解 $C_{a'}S(1a')$，$C_{a'}S(2a')$，$\cdots$，这也就是矩阵 S 的一列，其中出现任意常数 $C_{a'}$，是因为方程(31)是齐次的. 在系统为非简并时，不难看出任意两个本征解都互相正交，即

$$\sum_{l'} S(l'a')S^*(l'a'') = 0, \quad \text{当 } a' \neq a'' \text{ 时},$$

因而满足(29)式的非对角元部分. 只要适当选择 $C_{a'}$，也可以满足对角元部分，不过这个"归一化"只是明显地确定了 $C_{a'}$ 的绝对值. 所以对于 S 的每一列的元素，总有一个共同的绝对值为一的不定因子. 对于简并的情况，还有进一步的不确定性，但方程(29)总是能够满足的.

有了变换函数 S，(23)式就给出坐标和动量的解. 不过我们还是等到§5中再来进一步讨论 S 的物理诠释.

前面隐含着一个假定，即有限维矩阵和方程组的定理对于量子力学的无限维矩阵和方程组也成立. 这只有在一定条件下才能直接证明，但是更严格的处理表明上面形式上处理的结果在实际是正确的[1]. 不过无限维矩阵的情况有一个重

1) 而且在许多实际问题中，只用有限个变量的主轴变换就足够了，微扰论(§4)就是这样.

要的差别： 除了迄今我们只讨论过的不连续序列的值以外，本征值“谱”还可以包括连续序列的值. 对能量来说，这就说明了连续光谱的存在. 出现连续的本征值这也意味着在一定的坐标系中矩阵元的指标是连续改变的，或者在某一范围内不连续而在另一范围内连续. 我们的矩阵关系必须相应地推广，以包括这种情形在内. 为此我们用狄喇克[29]的方法来做；这个方法虽然有点过于形式，但好处是非常清楚，并且在所有实际发生的情形中都可以严格证明.

首先，对于指标连续变化的范围，求和必须代以积分，矩阵元变成两组变量的函数. 所以，比如说，当整个区域都连续的时候，乘法规则就变成

$$pq(nm) = \int dk p(nk) q(km),$$

而在混合区域的情形，则既有求和也有积分. 为了表示连续情形的单位矩阵，狄喇克引入函数 $\delta(\xi)$，它与 δ_{nm} 相当，由下列性质来定义：

$$\xi\delta(\xi) = 0,$$

所以当 $\xi \neq 0$ 时 $\delta(\xi) = 0$，

$$\delta(-\xi) = \delta(\xi), \tag{33}$$

并且，当零点在 ξ_1 与 ξ_2 之间时，

$$\int_{\xi_1}^{\xi_2} \delta(\xi) d\xi = 1. \tag{34}$$

因此它是一个以 $\xi = 0$ 为奇点的函数，并且也只能作为一个函数序列的极限. 从上述性质不难推得

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi)\delta(a - \xi) d\xi = f(a), \tag{35}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\xi)\delta'(a - \xi) d\xi = f'(a), \tag{36}$$

其中 $f(\xi)$ 是任一正规函数，而 $\delta'(\xi) = (d/d\xi)\delta(\xi)$. (36)式

是用分部积分法得到的．另外，由于当 $a \neq b$ 时

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(a-\xi)\delta(\xi-b)d\xi=0,$$

和

$$\int db\int\delta(a-\xi)\delta(\xi-b)d\xi=\int\delta(a-\xi)d\xi\int\delta(\xi-b)db=1,$$

所以还有

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(a-\xi)\delta(\xi-b)d\xi=\delta(a-b), \tag{37}$$

因为这个积分具有 $a-b$ 的 δ 函数的全部性质．

在连续的情形中，单位矩阵的矩阵元可以用 δ 函数来表示．因为根据 (35) 式，$\delta(a'-a'')$ 具有下列性质

$$\int\delta(\alpha'-\alpha''')x(\alpha'''\alpha'')d\alpha'''=x(\alpha'\alpha''), \tag{38}$$

因而

$$1(\alpha'\alpha'')=\delta(\alpha'-\alpha'').$$

具有连续指标的对角矩阵其形式为 $q(\alpha'\alpha'')\delta(\alpha'-\alpha'')$．推广到多重指标并不困难；例如，单位矩阵是

$$1(\alpha'\alpha'')=\delta(\alpha_1'-\alpha_1'')\delta(\alpha_2'-\alpha_2'')\cdots\delta(\alpha_f'-\alpha_f''),$$

它也可以简单地写做 $\delta(\alpha'-\alpha'')$．

对量子理论来说，那些除能量外别的量也取对角形的坐标系也很重要．在这种坐标系中，用这些对角矩阵的相应对角元作为所有矩阵的指标，常常是很方便的．于是我们使用定义坐标系的那些矩阵的本征值来标记行与列．对于一个自由度的体系，这相当于用相应的定态能量来代替量子数；对于两个自由度的体系，就用能量和比如角动量来代替，如此等等．一般来说，如果矩阵 $x_1, x_2, \cdots, x_f$ 是对角形的，就可以把 q 的矩阵元写成

$$q(x'x'')=q(x_1'x_2'\cdots x_f';\ x_1''x_2''\cdots x_f''),$$

有撇号的字母表示相应矩阵的本征值；特别是，当指标是连续的时候，对角矩阵 x 的形式为

$$x(x'x'') = x'\delta(x_1' - x_1'')\delta(x_2' - x_2'')\cdots\delta(x_f' - x_f''). \qquad (39)$$

自然会产生这样的问题： 在一给定的坐标系中，哪些矩阵可以同时取对角形？ 根据厄密式的理论，这答案是大家都知道的，并且对于量子理论具有极其重要的意义： 任何一组矩阵，若其中的每一个都能与其余的任何一个对易，则可以用一个幺正变换把它们同时化为对角形. 所以总能找到一个坐标系，使得在其中位置坐标 $q_1\cdots q_f$ 是对角化的；但是如果要满足对易关系，则动量 $p_1\cdots p_f$ 就不能也有对角的形式.

3. 薛定谔微分方程[30]

在数学形式中纳入了连续矩阵，就可以把主轴变换问题表达成一个新的形式. 这就是，若原坐标系既满足对易关系，又使 q_k 成为连续的对角矩阵，则确定变换函数 S 的方程就成为一个与方程 (31) 类似的偏微分方程，S 是使某个任意函数 F 对角化的坐标变换. 要严格论证这里所用的方法(狄喇克[29]方法)是困难的，但其结果可以用更精确虽然也更繁复的方法来证实.

对于原坐标系，只要求它能使坐标矩阵对角化，而不必与任何特殊动力学问题相联系，所以我们可以假定 q_k 具有一般的对角形式

$$q_k = q_k'\delta(q_1' - q_1'')\cdots\delta(q_f' - q_f''), \qquad (40a)$$

指标用 q_k 的本征值 q_k' 来标记. 为了表示共轭动量，我们必须找出一组矩阵，使之与上述的 q_k 满足对易关系(15). 取

$$p_k(q'q'') = \frac{h}{2\pi i}\delta'(q_k' - q_k'')\delta(q_1' - q_1'')\cdots$$

$$\times\delta(q'_{k-1}-q''_{k-1})\delta(q'_{k+1}-q''_{k+1})\cdots\delta(q'_f-q''_f), \quad (40b)$$

我们就得到一组可能的矩阵，计算一下 $p_kq_l-q_lp_k$ 就可以发现它们确实满足对易关系. 对一个自由度，可证明如下：$pq-qp$ 的 $(q'q'')$ 矩阵元是

$$\frac{h}{2\pi i}\int dq'''[\delta'(q'-q''')q'''\delta(q'''-q'')$$

$$-q'\delta(q'-q''')\delta'(q'''-q'')],$$

分部积分后第一项成为

$$\int dq'''\delta(q'-q''')\frac{\partial}{\partial q'''}[q'''\delta(q'''-q'')]$$

$$=\int dq'''[q'''\delta'(q'''-q'')\delta(q'-q''')$$

$$+\delta(q'-q''')\delta(q'''-q'')].$$

所以

$$(pq-qp)(q'q'')=\frac{h}{2\pi i}\int dq'''[(q'''-q')\delta(q'-q''')$$

$$\times\delta'(q'''-q'')]+\frac{h}{2\pi i}\int\delta(q'-q''')\delta(q'''-q'')dq'''.$$

根据(33)式，第一个积分为零，而根据(37)式，第二个积分为 $(h/2\pi i)\delta(q'-q'')$. 因此

$$(pq-qp)(q'q'')=\left(\frac{h}{2\pi i}\right)\delta(q'-q'')=\left(\frac{h}{2\pi i}\right)1(q'q''),$$

这就满足了对易关系. 推广到几个自由度并不困难.

现在考虑用一个幺正变换 S 把任一函数 $F(p,q)$ 变为对角形的一般问题. 与不连续的情形一样，S 基本上由方程(25)决定，它现在成为

$$S^{-1}FS=F'\delta(F'-F''),$$

在新坐标系中，F 是对角形，指标用 F' 和 F'' 来表示. 这个式子又可以写成方程(30)的形式：

$$FS = S[F'\delta(F' - F'')]$$

或者

$$\int F(q'q'')S(q''F')dq'' = S(q'F')F', \tag{41}$$

这是一个与无限维线性方程组(31)相对应的积分方程. 然而，把(40)式所给定的 p_k, q_k 的特殊值代入左边，它就变成一个偏微分方程. 用 δ 函数的性质完成积分后可得

$$\int F(p_k, q_k)(q'q'')S(q''F')dq'' = F\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_k'}, q_k'\right)S(q'F'), \tag{42}$$

其中的 $F\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_k'}, q_k'\right)$ 是对 F 作下列代换

$$p_k \to \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_k'}, \quad q_k \to q_k' \tag{43}$$

而得到的算符. 这里只需要给出对一个自由度的证明. 对于 $F = q$ 和 $F = p$ 的特殊情况，结果马上就可以推出来，因为根据(35)和(36)式

$$\int \frac{h}{2\pi i}\delta'(q' - q'')S(q''F')dq'' = \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial S(q'F')}{\partial q'},$$

$$\int q'\delta(q' - q'')S(q''F')dq'' = q'S(q'F').$$

由于所有需要考虑的函数都可由 p 与 q 相乘和相加而得，所以只需要证明，若(42)式对 F_1 与 F_2 成立，则它对 $F_1 + F_2$ 与 F_1F_2 也成立. 它对 $F_1 + F_2$ 成立的证明很普通. 对于

$$F_1F_2 = \int F_1(q'q''')F_2(q'''q'')dq''',$$

代入(42)式，可得

$$\iint F_1(q'q''')dq'''F_2(q'''q'')dq''S(q''F')$$

$$= \int F_1(q'q''')dq''' \int F_2(q'''q'')S(q''F')dq'',$$

$$= \int F_1(q'q''')dq''' F_2\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q'''}, q'''\right) S(q'''F'),$$

$$= F_1\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q'}, q'\right) F_2\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q'}, q'\right) S(q'F'),$$

$$= F_1F_2\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q'}, q'\right) S(q'F'),$$

于是此定理得证.

因而所要求的变换函数 $S(q'F')$ 必须是下列偏微分方程的一个解:

$$F\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q'_k}, q'_k\right) S(q'F') - F'S(q'F') = 0, \quad (44)$$

其中 F' 为一参数,与相似的方程(31)中的 $W_{a'}$ 相当. 这里也只有对 F' 的某些确定的分立值或连续区域才有解;这些本征值就是 F 的对角元. 这个变换的幺正条件 ($\tilde{S}^* = S^{-1}$) 在确定方程(44)解的性质时很重要. 当 S 的两个指标都连续时,幺正条件可以与(29)式类似地写成

$$\int S^*(q'F')S(q'F'')dq' = \delta(F' - F''), \quad (45)$$

$$\int S^*(q'F')S(q''F')dF' = \delta(q' - q''). \quad (46)$$

当本征值谱中包括分立的部分时,还要有相应的求和.

刚才处理的数学问题是很普遍的. 在§5中对变换函数给出详尽的物理诠释以后,就会明白有相应的物理问题. 目前我们只想指出,把上述方法用于哈密顿函数 H,就得到运动方程的解.

在方程(44)中用 H 代替 F,得到的微分方程就是当初用完全不同的方法所发现的薛定谔[30]方程. 这时相应的变换函数 $S(q'H')$ 在习惯上写成 $\psi_W(q)$. 于是薛定谔方程为

$$H\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_k}, q_k\right)\psi_W(q) - W\psi_W(q) = 0, \quad (47)$$

而它的本征值就决定了系统的能级.

解 $\psi_W(q)$ 构成了与 §2 中 S 相当的变换矩阵的列. 这二者都表示使能量对角化的坐标变换——不过在现在的情况下,原坐标系中的坐标是对角化的,这相当于在 §2 中选择了一组特殊的 $p_k^{(0)}$, $q_k^{(0)}$.

对于分立本征值谱的典型情况,正交条件(45)成为

$$\int \psi_{W'}^*(q)\psi_{W''}(q)dq = 0, \text{ 当 } W' \neq W'' \text{ 时}, \tag{48}$$

和

$$\int |\psi_W(q)|^2 dq = 1. \tag{49}$$

(49)式一般说来相当于边界条件,通常由之而得的本征解 $\psi_W(q)$ 有正交性,这就保证了(48)式成立. 就像 §2 的变换矩阵 S 那样,在每一"列" $\psi_W(q)$ 中也还有一个不确定的位相因子 $e^{i\varphi_W}$,未能由归一化条件(49)所决定.

根据(23)式,在使能量对角化的坐标系中,坐标矩阵和动量矩阵为

$$p(W'W'') = \int \psi_{W'}^* \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \psi_{W''}}{\partial q} dq, \tag{50}$$

$$q(W'W'') = \int \psi_{W'}^*(q) q \psi_{W''}(q) dq. \tag{51}$$

(47),(50)和(51)式构成了处理量子力学动力学问题最有效的数学方法,但它们对物理诠释并没有什么新的贡献. 要弄清变换矩阵的物理含意,还必需做一番特别的探讨(见 §5).

4. 微 扰 论[24]

在这里叙述一下量子力学微扰理论的主要特征是必要

的．当哈密顿函数H可以用一小参数λ展开成下列形式

$$H = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \cdots, \tag{52}$$

并且与哈密顿函数H_0相应问题的解为已知时，即在H_0对角化的坐标系（H_0坐标系）中矩阵p和q以及它们的任意函数皆为已知时，就可以运用这个方法．下面用字母H表示在此坐标系中的能量矩阵，用W表示在使完全的哈密顿函数H对角化的坐标系(H坐标系)中的能量矩阵．与(52)式相应地，我们可以把W写成下列形式

$$W = W_0 + \lambda W_1 + \lambda^2 W_2 + \cdots, \tag{53}$$

其中$W_0 = H_0$．我们要求的从H_0坐标系到H坐标系的变换函数也可以写成

$$S = S_0 + \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \cdots, \tag{54}$$

并且假如

$$S_0 \tilde{S}_0^* = 1, \tag{55}$$

则S的零级近似就是幺正的．

现在我们来找出一组确定S的方程．像在§2中那样，S必须满足方程$HS = SW$，W是对角化的；把展开式(52)，(53)和(54)代入这一方程，并令λ的同幂项的系数相等，就得方程组

$$\left.\begin{aligned}
&H_0 S_0 = S_0 W_0, \\
&H_0 S_1 - S_1 H_0 + H_1 S_0 = S_0 W_1, \\
&H_0 S_2 - S_2 H_0 + H_1 S_1 - S_1 W_1 + H_2 S_0 = S_0 W_2, \\
&\qquad\vdots \\
&H_0 S_r - S_r H_0 + F_r(S_1 \cdots S_{r-1}, H_1 \cdots H_{r-1}) = S_0 W_r, \\
&\qquad\vdots
\end{aligned}\right\} \tag{56}$$

可以按$S_0, S_1, \cdots$和$W_0, W_1, \cdots$的顺序把它们解出来．

对于S_0的矩阵元，第一个方程给出

用同样的方法处理，(56) 中其余的方程给出

$$W_r(nn) = F_r(nn),$$

$$S_r(nm) = -\frac{F_r(nm)}{h\nu_0(nm)}(1-\delta_{nm}),$$

每一个 F_r 由第 r 个方程以前的那些方程来确定.

如果未受微扰的解是简并的，则从 $W_0S_0 = S_0W_0$ 就不再能推出 S_0 是对角的，例如，当 $W_0(n+1) = W_0(n+2) = \cdots = W_0(n+k)$ 时，方程 (57) 表明 S_0 仍能包含那些与在 $n+1, n+2, \cdots, n+k$ 各态之间的跃迁相应的矩阵元. 不过，(56) 的第二个方程提供了一个齐次线性方程组，它们确定 S_0 的这些不为零的矩阵元，同时也确定了 W_1. 对未受微扰的运动求时间平均 (即挑出那些使 $\nu(nm)$ 等于零的行 n 与列 m) 就得到方程

$$\overline{H}_1S_0 = S_0W_1, \tag{60}$$

它提供了一个与方程 (31) 完全类似的齐次线性方程组. 像那里一样，根据所谓的"久期方程"

$$\begin{vmatrix} H_1(n+1,n+1)-W_1 & \cdots & H_1(n+1,n+k) \\ H_1(n+2,n+1) & \cdots & H_1(n+2,n+k) \\ \vdots & & \vdots \\ H_1(n+k,n+1) & \cdots & H_1(n+k,n+k)-W_1 \end{vmatrix} = 0, \tag{61}$$

可以与 S_0 无关地求出 W_1. 这个方程的根就是 W_1 的矩阵元，而相应的线性方程组则决定了 S_0，每列只差一个位相因子没有确定. 由此往下的计算就可以和非简并系统的计算一样地进行了.

5. 双原子共振[31]；变换矩阵的物理诠释

对于量子理论中的数学的诠释，其整个体系都取决于对变换函数的物理含意所作的一定的假设．为了说明这些假设的性质并使它们能够令人信服，我们首先讨论一个简单的问题——两个共振原子的相互作用问题[31]．

考虑两个原子 I 和 II，其本征值谱为 $W_{\mathrm{I}}(n)$ 和 $W_{\mathrm{II}}(i)$，它们有共同的本征频率，比如说 $\nu_{\mathrm{I}}(nm)=\nu_{\mathrm{II}}(ik)$，或 $W_{\mathrm{I}}(n)-W_{\mathrm{I}}(m)=W_{\mathrm{II}}(i)-W_{\mathrm{II}}(k)$；因此它们能够共振．即使这两个原子间的耦合很弱，在它们之间也能够发生能量交换，其相互作用是这样发生的：原子 I 自 n 态转入 m 态，放出能量 $h\nu(nm)$，同时原子 II 吸收等量的能量 $h\nu(nm)=h\nu(ik)$ 而自 k 态转入 i 态；这个过程是可逆的．

若把未耦合的原子看成“未受微扰”的体系，而把相互作用能量 H_1 当作微扰，就可以用 § 4 的方法来处理．在 $W_{\mathrm{I}}+W_{\mathrm{II}}$ 为对角形的坐标系中，双原子体系的一个态可以用两个整数 (nk) 来标记，第一个表示原子 I 的态，第二个表示原子 II 的态．对于未受微扰体系的态 (nk) 和 (mi)，由于其频率相等，可以推得关系

$$W_0(nk)=W_{\mathrm{I}}(n)+W_{\mathrm{II}}(k)=W_{\mathrm{I}}(m)+W_{\mathrm{II}}(i)$$
$$=W_0(mi), \tag{62}$$

于是它们的能量相等；因而共振会引入一个本征简并．像 § 2 那样，根据 (62) 式挑出那些使频率

$$\nu(nk;\ mi)=(1/h)[W_0(nk)-W_0(mi)]$$

等于零的相互作用能量矩阵元 $H_1(nk;\ mi)$，就可以构成确定能量的微扰 W_1 的久期方程．这就得到与方程 (61) 相当的方程

$$\begin{vmatrix} H_1(nk;\ nk) - W_1 & H_1(nk;\ mi) \\ H_1(mi;\ nk) & H_1(mi;\ mi) - W_1 \end{vmatrix} = 0. \qquad (63)$$

这一方程的两个解 $W_1(a)$ 和 $W_1(b)$，就是耦合体系两个态的微扰能量，这两个态取代了未耦合体系能量相等的两个态 (nk) 和 (mi)（较为对称的记号 $W(nk;\ mi)$ 等等容易引起混乱，因为它们与未受微扰的态并没有一一的对应）. 方程 (63) 的每一个根，对应着变换矩阵 S 的一个列（从线性方程组解得），其形式为

$$\left.\begin{aligned} S(nk;\ a) &= s(nk;\ a)e^{i\phi_a} \\ S(mi;\ a) &= s(mi;\ a)e^{i\phi_a} \end{aligned}\right\}\text{对于 } W_1(a),$$

$$\left.\begin{aligned} S(nk;\ b) &= s(nk;\ b)e^{i\phi_b} \\ S(mi;\ b) &= s(mi;\ b)e^{i\phi_b} \end{aligned}\right\}\text{对于 } W_1(b).$$

Φ 是实数，不能由“归一化”条件 $S\tilde{S}^* = 1$ 定下来. 因而正交矩阵

$$S = \left\| \begin{matrix} s(nk;\ a)e^{i\phi_a} & s(nk;\ b)e^{i\phi_b} \\ s(mi;\ a)e^{i\phi_a} & s(mi;\ b)e^{i\phi_b} \end{matrix} \right\| \qquad (64)$$

就是变换函数的零级近似，它把能量 W_{I} 和 W_{II} 为对角形的坐标系变换成总能量 $W_{\mathrm{I}} + W_{\mathrm{II}} = W$ 为对角形的坐标系.

可以顺便指出，对于两个原子等同的情形，一定会发生共振. 在前面令 $i = n$ 和 $k = m$ 就得到这个特殊情形；于是，当这两个体系中的相互作用对称时，不难表明

$$H_1(nm;\ nm) = H_1(mn;\ mn),$$
$$H_1(nm;\ mn) = H_1(mn;\ nm).$$

因为 H_1 是厄密的，方程 (63) 的行列式中非对角项都是实数，可以看出解为

$$\left.\begin{aligned} W_1(a) &= H_1(nm;\ nm) + H_1(mn;\ nm), \\ W_1(b) &= H_1(nm;\ nm) - H_1(mn;\ nm). \end{aligned}\right\} \qquad (65)$$

归一化以后，算出相应的 s 矩阵为

$$\begin{array}{c} \\ nm \\ mn \end{array}\begin{array}{c} \begin{array}{cc} (a) & (b) \end{array} \\ \begin{Vmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{Vmatrix} \end{array}. \tag{66}$$

我们现在回到一般的情形.

下面我们来讨论从这些结果可以得出的进一步的物理知识. 比如说,考虑这样的问题: 在量子理论中,对于原子 I 本身的能量随时间的变化,能够说些什么. 按照经典理论,在频率相等的两个耦合振子之间, 会发生周期性的并且是谐和的

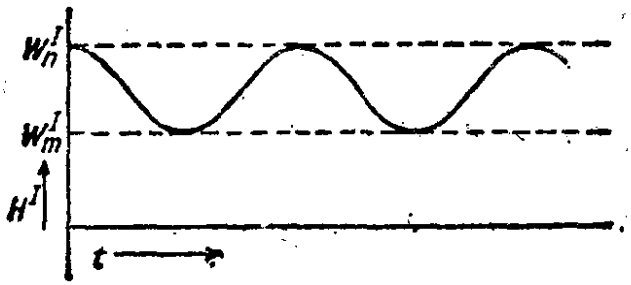

图 21

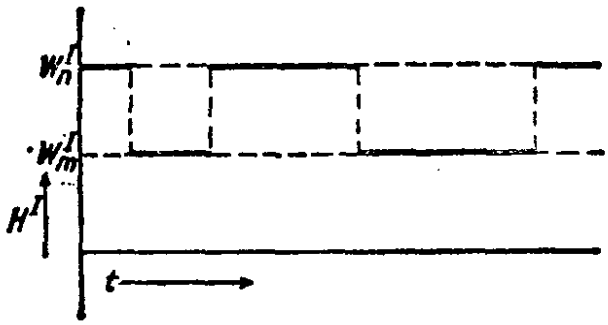

图 22

能量交换,其频率正比于耦合力;其中一个振子的能量可以由像图 21 那样的曲线给出. 另一方面,在量子理论中我们预期原子 I 的能量值或者为 $W_I(n)$, 或者为 $W_I(m)$, 在这两者之间的跃迁几率仍然依赖于耦合的强度; 因而 $H_I(t)$ 应该由像

图 22 那样的曲线来表示. 当然，这一曲线既不能用量子理论来计算，也不能由实验来确定；不过，迄今所得的对于量子力学物理诠释的规则，足以允许我们计算 $H_I(t)$ 或 $H_I(t)$ 的任何函数的时间平均及均方涨落.

计算 $H_I(t)$ 的任一函数的时间平均，可以进行如下. 根据 §1 的法则 1，表示任一量的矩阵，其对角元直接给出了在相应态中的时间平均值. 因此，应用 (64) 式的变换函数 S，可以用在 H_I 本身为对角形的坐标系（未受微扰的系统）中 $f(H_I)$ 的对角矩阵元 $f(W_I(n))$ 与 $f(W_I(m))$ 来计算在态 a 中的平均值 $\overline{f(H_I)_a}$:

$$\left.\begin{aligned}\overline{f(H_I)_a} &= [f(H_I)](aa) = S^*(nk;a)f(nk;nk)S(nk;a)\\ &\qquad + S^*(mi;a)f(mi;mi)S(mi;a)\\ &= |S(nk;a)|^2 f(W_I(n))\\ &\qquad + |S(mi;a)|^2 f(W_I(m)).\end{aligned}\right\} \tag{67}$$

假设 $f(H_I)$ 只能取值 $f(W_I(n))$ 和 $f(W_I(m))$，并且这些值出现的相对频率分别为 $|S(nk;a)|^2$ 和 $|S(mi;a)|^2$，则其时间平均值的表达式正好就是这个式子. 因为 $f(W_I(n))$ 和 $f(W_I(m))$ 是在 $f(H_I)$ 为对角形的坐标系中 $f(H_I)$ 的矩阵元，上述假设的第一部分就相当于，假设 f 的可能值是在它本身为对角形的坐标系中它的对角矩阵元. 另一方面，第二部分则是认为当总的体系处于态 a 时，发现 $f(H_I)$ 的值为 $f(W_I(n))$ 的相对几率为 $|S(nk;a)|^2$ 这个假设的一个结果(指标 (nk) 相当于值 $f(W_I(n))$，因为它就是在 f 为对角形的坐标系中一个定态的标志). 由于有归一化 $|S(nk;a)|^2+|S(mi;a)|^2=1$，所以把它们诠释为相对几率是恰当的.

虽然这里处理的是一个特殊问题，但是在一般的变换问

题中形式关系仍然相同. 因而，如果变换矩阵 $S(\alpha'\beta')$ 把一个任意量 α 为对角形的坐标系变到另一量 β 为对角形的坐标系[1]，则 $f(\alpha)$ 的时间平均值就一定是 (67) 的样子，即 $f(\alpha)$对应于 β' 态的时间平均值为

$$f(\alpha)_{\beta'} = [f(\alpha)](\beta'\beta') = \sum_{\alpha'} S^*(\alpha'\beta')[f(\alpha)](\alpha'\alpha')S(\alpha'\beta')$$

$$= \sum_{\alpha'} |S(\alpha'\beta')|^2 f_\alpha(\alpha'\alpha').$$

所以我们有理由把上面在特殊情形中的假设加以推广，提出下面的假说来作为变换体系的物理诠释：

一个量 α 的本征值谱，亦即在使之成对角形的坐标系中它本身的矩阵元，给出了它所能取的值.

若 $S(\alpha'\beta')$ 是从一个 α 为对角形的坐标系到另一 β 为对角形的坐标系的幺正变换矩阵，则

$$|S(\alpha'\beta')|^2 \tag{68}$$

就是已知 β 必取 β' 值时发现 α 的值为 α' 的相对几率.

对于指标连续改变的情形，包括对于 S 是得自薛定谔方程之解的情形，上述假说当然都同样适用.

对于这样引入到理论中的统计成分的物理诠释，在本书正文特别是在第四章中有详细的讨论. 在这里只须指出我们必须加上一个明确的条件，即所考虑的实验要真的能够确定 α'. 这一条件初看起来似乎不值一提；然而，它是必不可少的，因为若不考虑测量 α' 的实验就运用量(68)的上述诠释，就立即会引起逻辑上的前后矛盾.

确立了它的物理诠释的基础，我们就可以对一般变换理论作进一步的展开.

变换矩阵 S 的矩阵元，只有它们绝对值的平方才表示几

1) 这里还是采用对角矩阵元来标志行与列.

率;它们本身可以称为"几率幅". 相继地完成自坐标系 α (α 为对角形的坐标系) 到坐标系 β 的变换和自坐标系 β 到坐标系 γ 的变换,因为变换的组合遵从矩阵的乘法规则,

$$S(\alpha'\gamma') = \sum_{\beta'} S(\alpha'\beta')S(\beta'\gamma'), \tag{69}$$

所以, 几率幅 $S(\alpha'\gamma')$ 总可以与 γ 完全无关地表示成几率幅 $S(\alpha'\beta')$ 的一个线性函数. 因此,即使在最一般的情况下,不管预先确定的量 γ' 如何, 找到 α' 的几率幅都是变换矩阵元 $S(\alpha'\beta')$ 的一个线性函数,能简单地写成 $S(\alpha')$, 而坐标系 β 可以任意选择. 特别是 β 可以取为能量,于是 $S(\alpha')$ 总可以表示成下列形式

$$S(\alpha') = \sum_{W'} c_{W'} S_{W'}(\alpha'), \tag{70}$$

其中 $c_{W'}$ 是常数,而 $S_{W'}(\alpha')$ 是变换到 W 为对角形的坐标系的变换矩阵.

虽然关于定态 W' 的几率 $|S_{W'}(\alpha')|^2$ 是不随时间改变的常数,但是一般说来对于 $|S(\alpha')|^2$ (即指定的是能量以外的某一其它量)却不然. 根据下述考虑可以推出 $S(\alpha')$ 随时间变化的适当关系:

根据 (9) 式,在能量为对角形的坐标系中,每一个矩阵元 $x(nm)$ 都有一个时间因子 $e^{\frac{2\pi i}{h}(W_n - W_m)t}$. 因为从任一别的坐标系到这一坐标系的变换为

$$x(nm) = \sum_{\alpha'\alpha''} S^*(\alpha'n)x(\alpha'\alpha'')S(\alpha''m), \tag{71}$$

若每个矩阵元 $S(\alpha'n)$ 的时间因子为 $e^{-\frac{2\pi i}{h}W_n t}$, 就可以得到正确的时间关系. 这样做是可能的,因为直到现在 $S(\alpha'n)$ 还包含一个绝对值为 1 的任意相因子; 自此以后我们将认为 $S(\alpha'n) = S_{W'}(\alpha')$ 包含这一时间因子.

因为最一般的几率幅 $S(\alpha')$ 可以表达为 (70) 的形式，所以它必须满足确定 $S_W(\alpha')$ 的方程 $HS - SW = 0$. 由于 S 包含上面引入的时间因子，$SW = -(h/2\pi i)(\partial S/\partial t)$，$S(\alpha')$ 的方程成为

$$\sum_{\alpha''} H(\alpha'\alpha'')\,S(\alpha'') + \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial S(\alpha')}{\partial t} = 0. \qquad (72)$$

特别是当 α 取成坐标 q 时，这就成为薛定谔波动方程

$$H\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q},\ q\right)\phi(q) + \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\phi(q)}{\partial t} = 0. \qquad (73)$$

形如 $\phi_{W'}(q) = u_{W'}(q)e^{-\frac{2\pi i}{h}W't}$ 的本征解就相当于含有时间因子的矩阵元 $S_{W'}(\alpha')$，并且由于 (70)，最一般的几率幅为

$$\phi = \sum_{W'} c_{W'}u_{W'}e^{-\frac{2\pi i}{h}W't}. \qquad (74)$$

作为运用方程 (72) 的一个例子，我们再来考虑耦合原子的问题. 假定在 $t = 0$时测量的结果为原子 I 在 n 态而原子 II 在 k 态. 于是方程 (72) 确定了 (64) 式给出的矩阵 S 随时间的变化，在 (64) 中只有位相 ϕ_a 和 ϕ_b 包含时间. 代入方程 (72)，因为常数振幅的矩阵 s 满足方程 $Hs + sW = 0$，我们得到

$$\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\phi_a}{\partial t} = -W_a,\quad \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\phi_b}{\partial t} = -W_b.$$

因此 $\phi_a = -(2\pi i/h)\cdot W_at +$常数，$\phi_b = -(2\pi i/h)\cdot W_bt +$常数，而方程 (70) 的本征解为 $S(nk;\,a) =$ 常数 $\times\, s(nk;\,a)\times e^{-\frac{2\pi i}{h}W_at}$，等等. 于是，根据方程 (70)，一般的几率幅为

$$S(nk) = c_as(nk;\,a)e^{-\frac{2\pi i}{h}W_at} + c_bs(nk;\,b)e^{-\frac{2\pi i}{h}W_bt},$$

$$S(mi) = c_as(mi;\,a)e^{-\frac{2\pi i}{h}W_at} + c_bs(mi;\,b)e^{-\frac{2\pi i}{h}W_bt},$$

其中的 c 为常数，可由初始条件来确定. 因为现在的情形初

始条件为 $S(nk)=1$，$S(mi)=0$，并且 s 的行列式为 1，我们不难得到

$$S(nk)=s(mi;\ b)s(nk;\ a)e^{-\frac{2\pi i}{h}W_a t}$$
$$-s(mi;\ a)s(nk;\ b)e^{-\frac{2\pi i}{h}W_b t},$$
$$S(mi)=s(mi;\ b)s(mi;\ b)[e^{-\frac{2\pi i}{h}W_a t}-e^{-\frac{2\pi i}{h}W_b t}].$$

对于两个原子等同的特殊情形，s 取 (66) 的形式，

$$S(nm)=\frac{1}{2}(e^{-\frac{2\pi i}{h}W_a t}+e^{-\frac{2\pi i}{h}W_b t}),$$
$$S(mn)=\frac{1}{2}(e^{-\frac{2\pi i}{h}W_a t}-e^{-\frac{2\pi i}{h}W_b t}).$$

由此得到几率为

$$|S(nm)|^2=\frac{1}{2}\left[1+\cos\frac{2\pi}{h}(W_a-W_b)t\right],$$
$$|S(mn)|^2=\frac{1}{2}\left[1-\cos\frac{2\pi}{h}(W_a-W_b)t\right].$$

这些公式给出了发现 (nm) 或者 (mn) 的几率，都是时间的函数. 由于 W_a-W_b 小到只有原子间相互作用能的数量级，几率变化得很慢. 在第一次测量后很短的时间内(即 t 的值很小)，再发现组态 (nm) 是极其可能的. 但是，假如第二次测量刚好在 $t=\frac{1}{2}h(W_a-W_b)^{-1}$ 时进行，则结果肯定是组态 (mn). 只有当系统在这两次测量之间的间隔内确实未受扰动时，即确实还由方程 (72) 支配时，所有这些考虑才能成立. 当然，这个条件是很平常的. 不过，我们在这里还要特别提出来，因为对于这一理论的前后一贯性来说，它的重要地位是决定性的.

刚才所概述的把变换矩阵看作几率函数的诠释，为在一切物理问题之中运用量子力学的数学提供了一个完整的体

系。

6. 辐射的粒子图象

大家对辐射的微粒理论的一般概要都很熟悉，这里无需再作详尽的讨论. 它基本上就是爱因斯坦的光量子理论，根据这一理论，可以把辐射看作高速运动粒子(光子)的作用，其速度总是 c. 能量 E 与动量 p 由基本方程

$$E = cp \tag{75}$$

相联系，而颜色则由量子关系

$$\nu = \frac{E}{h}$$

给出.

光量子可以产生也可以消失，所以与物质的微粒图象不同，它们的数目是可变的. 在不同的光量子之间不发生相互作用(不考虑引力时)，而光量子与物质的相互作用则引起吸收、发射和色散现象. 由于在经典理论中只有运用电磁辐射的波动图象才能表述这种相互作用，所以，看起来从波动图象出发来得出辐射的量子理论更合适一些.

7. 量子统计法

考虑由 n 个完全不能互相区分的全同粒子（例如电子和光子)组成的体系. 为了简单起见，假定这个体系只有分立的本征值谱，并且开始先略去粒子间的相互作用. 处理这个问题时，可以先确定单个粒子的可能态及其相应的本征函数 $\phi_a(r)$，然后再考虑 n 个粒子在这些态中的分布. 为了处理这种统计分布，必须定义什么是这个体系的一个不同态.

在经典统计法(玻耳兹曼统计法)中，n 个粒子在 n 个不同态中分布的相对几率为 $n!$，因为这 n 个粒子的每一种排列，显然就表示这个给定分布的一个独立状态．在量子理论中，这就意味着 n 个粒子在 n 个不同态中的每一个分布，都对应于整个体系的一个 $n!$ 重简并的项．在表达式

$$\psi_{\alpha_1}(r_{\beta_1})\psi_{\alpha_2}(r_{\beta_2})\cdots\psi_{\alpha_n}(r_{\beta_n}) \tag{76}$$

中固定 α_i，做出 r_{β_k} 的 $n!$ 种排列，就得到相应的 $n!$ 个线性无关的本征函数．

不用函数系 (76)，而用由它的线性组合给出的另外任意 $n!$ 个线性无关函数系，当然也可以描述这个 n 体问题．例如，欲将粒子的相互作用当作微扰来处理，就会导致这种函数系．在这样得到的 $n!$ 个线性组合中，有两个的结构特别简单，即

$$\sum_{\text{所有排列}}\psi_{\alpha_1}(r_1)\psi_{\alpha_2}(r_2)\cdots\psi_{\alpha_n}(r_n), \tag{77}$$

和行列式

$$|\psi_{\alpha i}(r_k)| \quad (i,k=1,2,\cdots,n). \tag{78}$$

第一式在两个粒子的任意交换下不变，因而称为这个体系的“对称本征函数”；第二式在这种交换下只改变它的正负号，因而称为“反对称本征函数”[32]．如果假定 ψ_α 是归一化的，则不难表明整个体系的本征函数 (77) 与 (78) 乘上 $\sqrt{1/n!}$ 以后也是归一化的．

用最简单的 $n=2$ 的情形为例，就可以把这些关系解说清楚．对应于一个粒子在 α_1 态，另一个在 α_2 态的分布，有一个双重简并的项，其两个本征函数为

$$\psi_s(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{\alpha_1}(r_1)\psi_{\alpha_2}(r_2)+\psi_{\alpha_1}(r_2)\psi_{\alpha_2}(r_1)],$$

$$\psi_a(1,2)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{\alpha_1}(r_1)\psi_{\alpha_2}(r_2)-\psi_{\alpha_1}(r_2)\psi_{\alpha_2}(r_1)].$$

首先不难看出在具有对称本征函数的项与具有反对称本征函数的项之间不会发生互相的组合．这种跃迁的几率总可写成一个形如

$$\int f(1,2)\psi_s(1,2)\psi_a(1,2)d\tau_1 d\tau_2 \qquad (79)$$

的积分，其中的函数 $f(1,2)$ 在粒子交换下不变，因为这两个粒子不能区分．现在假如在(79)式中交换这两个电子，积分值显然不变，因为这只改变了积分变量的记号．另一方面，$\psi_a(1,2)$ 要变号，而被积函数中所有其它的量都保持不变，从而(79)必定为零．

在群表示论的基础上所作的更透彻的数学研究表明，这一特殊结果必能推广如下[36]：

n 个等同粒子所组成的一个体系的项，总可以这样分成若干组，使得只有属于同一个给定组的项才能互相组合．特别是，总有两组，其中一组的本征函数是对称的，另一组则是反对称的．

对于粒子间的任何相互作用，只要它是粒子坐标的对称函数，这一结果都保持有效．

在不同的两组间不会发生互相组合这一事实，使得我们有可能引入进一步的假说，认为在这些组当中，除了一个以外，其余全都没有物理意义．

例如，只考虑对称的一组．在这一组中，粒子在单粒子态中(再忽略相互作用)的一个确定的分布，只对应于一个本征函数．因而，能用对称的一组来表示的态，相应于在玻色-爱因斯坦[33]统计法中所描述的那些态．

另一方面，在由反对称本征函数所组成的那一组中，任一函数里如果有两个粒子处于同一态，它就必定为零．这一表述就是在量子理论中的泡利[34]等价轨道不相容原理，它适

用于电子与质子. 选择反对称的项就相当于采用费密-狄喇克[35]统计法.

于是，量子统计法就从一个 n 体问题的可能项系中挑出了一组项，其特征函数是对称的或者反对称的，也只有它才有物理意义；这样挑出来的项系中的每一项，表示这 n 体物理系统的一个不同的态. 第一种情形相应于玻色-爱因斯坦统计法，它适用于光量子；第二种相应于泡利-费密-狄喇克统计法. 要记住这一形式对于粒子的任何相互作用都保持有效，这是很重要的.

在把泡利不相容原理运用于电子或质子时，必须不要忘记在 $\psi_\alpha(r_k)$ 中 r_k 不只代表第 k 个粒子的三个空间坐标，也代表描述自旋的第四个变量，它只能取值 $+\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$.

波动图象中量子统计法的形式将在 §10 中处理.

8. 物质与辐射的波动图象：经典理论

经典波动理论是指物质的德布罗意波和辐射的电磁波的理论. 本节主要处理与电子相联系的波(质子波可以用完全相似的方法处理)，虽然也要简略地考虑光波. 我们并不打算包括相对论性效应，因此只处理静电力而略去磁现象和推迟现象，这是合乎逻辑的.

物质波恰当的波动方程是薛定谔[30]首先发现的，它可以从 §5 的变换方程(73)最简捷地得到. 把这个普遍的薛定谔方程(73)本身看作一个真正的波动方程并不合适，因为对于 N 个粒子来说它是一个 $3N$ 维坐标空间中的方程；不过对于 $N=1$ 的情形，这个空间约化成普通的 3 维空间，因而在这一特殊情形中就有理由把这个方程当做物质波的空间-时间(即

经典的)方程. 于是可以把变换函数 $\psi(xyz)$ 看成一个"场标量".

对于一个(微粒性的)电子，总哈密顿函数由动能 $E_{动} = (1/2\mu)(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$ 和势能 $E_{势} = -eV$ 组成，这里 e 与 μ 分别是电子的电荷与质量，V 是静电势. 所以在这一情形中方程(73)简化为

$$\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla^2\psi + eV\psi - \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = 0, \qquad (80)$$

其中 ∇^2 是拉普拉斯算符 $(\partial^2/\partial x^2) + (\partial^2/\partial y^2) + (\partial^2/\partial z^2)$. 在方程(80)中还隐含了共轭复方程

$$\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla^2\psi^* + eV\psi^* + \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = 0. \qquad (81)$$

这些方程的数学理论可以看作是物质波的"经典"理论，不过在这一情形中对于数学的诠释当然与前节根本不同. 在这些方程中的量，就象麦克斯韦方程中的量一样，全都可以形象化地想象为空间与时间中的量，因为它们都只是四个变量 x, y, z, t 的函数.

波动理论没有考虑电子的问题，e 和 μ 只是波动方程中的普适常数. 虽然方程(80)和(81)是得自微粒理论的单电子问题，但它们现在并没有被限制为"只适用于一个电子"，因为这句话在波动理论中没有意义. 相反，我们说"负电的波"，就此而言它们是完全普遍的. 由此立即可知，与单电子问题的量子理论相反，V 不再只是简单地表示外力的势，它还包括物质波自身的势在内，即它还考虑了电荷分布的一部分对另一部分的反作用. 与麦克斯韦理论一样，这一理论也不能表示原子物理学现象. 它所特有的启发作用在于，它与波的量子理论的关系，和经典力学与粒子的量子理论的关系一样.

作为第一个例子，我们来处理波幅很小，也就是物质密度

很低的情形．再假定外力的势为零，因而在所要求的近似下 V 为零．于是方程(80)成为

$$\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla^2\psi - \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = 0, \tag{82}$$

它具有解

$$\psi = e^{\frac{2\pi i}{h}(p_x x + p_y y + p_z z - Et)},$$

其中

$$E = \frac{1}{2\mu}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = \frac{1}{2\mu}p^2.$$

它们具有平面波的形式，波的法线方向由 p_x，p_y，p_z 给出，波长和频率为

$$\lambda = \frac{h}{p}, \qquad \nu = \frac{E}{h}. \tag{83}$$

波的相速度 v_ϕ 为

$$v_\phi = \frac{E}{p} = \frac{p}{2\mu}, \tag{84}$$

而群速度 v_g 可以从基本的光学原理算出为

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{\mu} = \frac{h}{\lambda\mu}. \tag{85}$$

按照德布罗意[6]的看法，这些方程是支配着低密度物质波干涉的方程．群速度与波长之间的关系使我们可以把波长与运动着的负电复合体联系起来，而不必以任何方式去求助于微粒的图象．所以德布罗意的这一理论对戴维孙-革末、汤姆孙、茹普和其他人的实验给出了一个简单定性的说明．这恰好与经典力学在解释威耳孙照相及电场对阴极射线的偏转等等的成功相类似．尽管如此，对于经典理论的这些成就，我们仍然只能看做是在对应原理的意义上经典理论与量子理论相似的证明；要解答所有定量的问题都必须求助于精确的量子理论．

在转入波的量子理论以前，还必须稍微深入一步把这个经典的波动理论弄得更精细些．为此目的，我们回到波动方程(80)，它不限于低密度的物质；对于波函数ψ的诠释，我们提出下述假设：

$$\left.\begin{aligned}&\text{电荷密度：}\ \rho = -e\psi^*\psi,\\&\text{电流密度：}\ \sigma = -\frac{eh}{4\pi i\mu}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*),\\&\text{能量密度：}\ u = \frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi.\end{aligned}\right\} \tag{86}$$

只有在以后发展波的量子理论时，才能严密地论证这些假设．不过在这里它们仍然是令人信服的，因为由于方程(80)和(81)的作用，这样引入的量ρ，σ和u服从下述对任何经典理论都必须要求的守恒定律：

$$\text{电荷守恒：}\ \frac{d}{dt}\int\rho dv = 0, \tag{87a}$$

$$\text{动量守恒：}\ \frac{d}{dt}\int\sigma dv = -e\int\nabla V\psi^*\psi dv, \tag{87b}$$

$$\text{能量守恒：}\ \frac{d}{dt}\int u dv = \int eV\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)dv. \tag{87c}$$

在这些方程中，dv是体积元，积分遍于整个空间．假定在无限大球面上ψ为零，因此只要应用格临定理，这个面积分就等于零．为了推导(87a)式，用ψ^*乘方程(80)，用ψ乘方程(81)，把所得的两式相减，在整个空间积分并运用格临定理即得．为了推导(87b)式，用$\partial\psi^*/\partial x$乘方程(80)，将方程(81)对$x$微分，乘以$\psi$，然后相减，并象前面一样地积分．最后，(87c)式的推导方法，除了把方程的相减换成相加之外，与(87a)式的相同．

除了负电的波以外，在空间中也可能出现别的电荷，如象

原子核、带电的电容器等等. 用 ρ_0 表示这些电荷的密度. 于是总电势必须由泊松方程 $\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 4\pi(\rho + \rho_0)$ 来确定，这也就是

$$\nabla^2 V = -4\pi(\rho + \rho_0). \tag{88}$$

为了在下节中发展波场的量子理论，必须指出(80),(81)和(88)三个方程全都可以从一个单独的变分原理导出. 可以看出恰当的拉格朗日函数是

$$L = -\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi - \frac{h}{4\pi i}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right) + eV\psi\psi^* - \rho_0 V + \frac{1}{8\pi}\nabla V \cdot \nabla V, \tag{89}$$

因为从条件

$$\iint L\,dv\,dt = \text{极值}$$

对 ψ 和 ψ^* 变分就分别得到方程(80)和(81)，而对 V 变分则得到方程(88).

系统的总能量由物质波的能量和电磁场的能量所组成. 因而总能量密度 $\mathscr{H}$ 的式子为

$$\mathscr{H} = \frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi + \frac{1}{8\pi}\nabla V \cdot \nabla V, \tag{90}$$

而且不难证明，当 ρ_0 与时间无关时，有能量守恒定律

$$H = \int \mathscr{H}\,dv = \text{常数}. \tag{91}$$

其证明如下：从方程(90)，(88)和(87c)，有

$$\frac{dH}{dt} = \int dv\left[\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{1}{4\pi}V\frac{\partial}{\partial t}(\nabla V \cdot \nabla V)\right],$$

$$= \int dv\left[\frac{\partial u}{\partial t} - V\frac{\partial}{\partial t}(e\psi\psi^*)\right],$$

$$= 0.$$

这个按照经典场论模型建立起来的自洽空间-时间理论，到目前为止还没有包含单个微粒的成分．这是很明显的，首先一点是系统的总电荷

$$\int \rho dv = -e\int \psi^* \psi dv \tag{92}$$

可以取任何想给的数值，而不只是 $-e$，$-2e$，$-3e$，$\cdots$ 等值，象原子(或量子化的)系统的任何真正的理论所必须要求的那样．此外，总能量和本征频率也能有任何数值，因为微分方程是非线性的，所以本征频率依赖于 ψ 的振幅．尽管有这些缺点(这是任何经典理论都具有的)，现在的这个理论仍可用来说明原子现象，其做法完全类似于玻尔和索末菲运用经典微粒理论时采取的做法．正如他们把条件 $\int p_k dq_k = n_k h$ 引入到经典力学中一样，哈特里[37]把“量子条件”

$$\int \psi_k^* \psi_k dv = n_k \tag{93}$$

加到现在的这个场论上[1)]，从而就能对原子光谱作出一个近似的说明．量 n_k 是一个整数，指标 k 与系统的本征振动有关．只是由于略去了从 ψ 的周期特性所引起的 V 的周期性时间变化，哈特里才能得出令人满意的结果．这与玻尔-索末菲理论所遇到的困难相似．其特征在于，这个场论在数学处理上与经典力学一样十分困难；至少，它比无论是粒子的还是波的量子理论都要困难得多．

我们没有必要再详细讲解经典辐射理论，因为它就是著名的麦克斯韦理论．它不包含丝毫量子的成分，能量 $\int (\boldsymbol{E}^2 + \boldsymbol{H}^2) dv$ 是连续变量这一事实就是证明．要避开这一困难，也

1) 哈特里曾经指出，只要从总能量中减去电子与它自己场的相互作用能量，就可得到满意的结果．

可以使用与哈特里的条件相似的量子条件，它只允许能量按 $h\nu$ 的大小不连续地改变；但是，这并没有导致场的量子理论.

9. 波场的量子理论[38]

如果首先把经典波动理论纳入与经典力学哈密顿形式相似的形式，那末波场的量子理论所必须的数学工具也可以纳入一个与粒子的量子力学的数学工具完全相似的形式. 本节处理经典波动理论的一般性问题，它可以从变分原理导出. 变分原理的拉格朗日函数可以包含若干个波函数 $\psi_\alpha = \psi_\alpha(x, y, z, t)$, $(\alpha = 1, 2, 3\cdots)$ (例如 § 8 中的 ψ, ψ^* 和 V)，它们的一阶空间微商 $(\partial\psi_\alpha/\partial x_i)$ $(i = 1, 2, 3$ 相应于 $x, y, z)$，以及它们的一阶时间微商 $(\partial\psi_\alpha/\partial t) = \dot{\psi}_\alpha$. 于是变分原理为

$$\iint L\left(\psi_\alpha, \frac{\partial\psi_\alpha}{\partial x_i}, \dot{\psi}_\alpha\right) dv dt = \text{极值}, \tag{94}$$

而波动方程就是相应的欧勒方程

$$\frac{\partial L}{\partial\psi_\alpha} - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial L}{\partial\left(\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial x_i}\right)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial L}{\partial\dot{\psi}_\alpha} = 0$$

$$(\alpha = 1, 2, \cdots). \tag{95}$$

质点系的经典力学可以完全从哈密顿变分原理

$$\int L(q_k, \dot{q}_k) dt = \text{极值} \tag{96}$$

导出. 对于连续场的变分原理(94)可以在形式上写得与对于离散质点组的变分原理(96)相似，只要引入量

$$\bar{L} = \int L\left(\psi_\alpha, \frac{\partial\psi_\alpha}{\partial x_i}, \dot{\psi}_\alpha\right) dv, \tag{97}$$

就可以把(94)写成

$$\int \bar{L}\left(\psi_\alpha, \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial x_i}, \dot{\psi}_\alpha\right) dt = \text{极值}. \tag{98}$$

$L(q_k, \dot{q}_k)$ 依赖于 q_k，指标 k 取所有可能的值，而现在的 $\bar{L}(\psi_\alpha, (\partial\psi_\alpha/\partial x_i), \dot{\psi}_\alpha)$ 则取决于 ψ_α 和 $\dot{\psi}_\alpha$，它们在空间的所有点上取值．所以，若把空间中的点 P 看作波函数的指标，这两个量是完全类似的．于是可以把整个波函数看成量 $\psi_\alpha(P)$ 的集合，它依赖于两种指标：一个分立的集合 α 和一组连续的变量 P（当然，这里用 P 代替了三个指标 x, y, z）．

现在欧勒方程(95)可以用拉格朗日函数 $\bar{L}$ 来表达，它类似于质点系的拉格朗日函数．通常的微商 $(\partial/\partial q_k)L(q_i, \dot{q}_i)$ 可以写成

$$\frac{\partial L}{\partial q_k} = \lim_{\Delta q \doteq 0} \frac{L(q_i + \delta_{ik}\Delta q, \dot{q}_i) - L(q_i, \dot{q}_i)}{\Delta q},$$

与此类似地，我们可以定义微商

$$\begin{aligned}
&\frac{\delta \bar{L}\left(\psi_\beta(P'), \dfrac{\partial \psi_\beta(P')}{\partial x_i}, \dot{\psi}_\beta(P')\right)}{\delta \psi_\alpha(P)} \\
&= \lim_{\Delta\psi \doteq 0} \frac{1}{\Delta\psi}\Big\{\bar{L}(\psi_\beta(P') + \delta_{\alpha\beta}\delta(P - P')\Delta\psi(P'), \\
&\quad \frac{\partial}{\partial x_i}[\psi_\beta(P') + \delta_{\alpha\beta}\delta(P - P')\Delta\psi(P'), \dot{\psi}_\beta(P')]) \\
&\quad - \bar{L}\left(\psi_\beta(P'), \frac{\partial \psi_\beta(P')}{\partial x_i}, \dot{\psi}_\beta(P')\right)\Big\}.
\end{aligned} \tag{99}$$

符号 $\delta(P - P')$ 所代表的函数与狄喇克的 δ 函数（见 §2）相似，具有下列性质

$$\left.\begin{aligned}
&\delta(P - P') = 0 \text{ 当 } P \neq P' \text{ 时}, \\
&\int \delta(P - P')dv = 1 \text{ 或 } 0,
\end{aligned}\right\} \tag{100}$$

和

它取决于积分体积包括不包括 P' 点. 从 $\bar{L}$ 的定义(97)不难看出

$$\frac{\delta \bar{L}}{\delta \phi_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \phi_\alpha} - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial L}{\partial \left(\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i}\right)}. \tag{101}$$

因为显然有

$$\frac{\delta \bar{L}}{\delta \dot{\phi}_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}_\alpha},$$

欧勒方程成为

$$\frac{\delta \bar{L}}{\delta \phi_\alpha} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\delta \bar{L}}{\delta \dot{\phi}_\alpha} = 0, \tag{102}$$

与经典力学的拉格朗日方程完全相似.

在经典的质点力学中引入哈密顿函数

$$H = \sum_k p_k \dot{q}_k - L, \tag{103}$$

就可以实现自拉格朗日形式到哈密顿形式的过渡，这里 $p_k = \partial L / \partial \dot{q}_k$; 这样方程就取哈密顿形式(1). 现在把同样的程序运用于波动方程(95). 由关系式

$$\Pi_\alpha = \frac{\delta \bar{L}}{\delta \dot{\phi}_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\phi}_\alpha} \tag{104}$$

可以引入一个与波函数 ϕ_α 共轭的量 Π_α，与(103)式类比，哈密顿函数就是

$$\bar{H} = \int \sum_\alpha \Pi_\alpha \dot{\phi}_\alpha dv - \bar{L}. \tag{105}$$

与 L 和 $\bar{L}$ 之间的关系类似地，

$$\bar{H} = \int H dv, \tag{106}$$

其中

$$H = \sum_\alpha \Pi_\alpha \dot{\phi}_\alpha - L. \tag{107}$$

这时波动方程(95)就取哈密顿形式

$$\dot{\phi}_\alpha = \frac{\delta \bar{H}}{\delta \Pi_\alpha}, \quad \dot{\Pi}_\alpha = -\frac{\delta \bar{H}}{\delta \phi_\alpha}. \tag{108}$$

像质点力学一样,也可以导出守恒定律. 从(108)式就直接得到能量守恒

$$\frac{d\bar{H}}{dt} = 0, \tag{109}$$

而表达动量守恒的方程

$$\frac{d}{dt}\int \sum_\alpha \Pi_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i}\, dv = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \tag{110}$$

则得自(108)和(101),因为

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dt}\int dv \sum_\alpha \Pi_\alpha \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i} &= \int dv \left[\Pi_\alpha \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\delta \bar{H}}{\delta \Pi_\alpha} - \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i}\frac{\delta \bar{H}}{\delta \phi_\alpha}\right], \\ &= -\int dv \sum_\alpha \left[\frac{\partial \Pi_\alpha}{\partial x_i}\frac{\delta \bar{H}}{\delta \Pi_\alpha} + \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial x_i}\frac{\delta \bar{H}}{\delta \phi_\alpha}\right], \\ &= -\int dv \frac{\partial H}{\partial x_i} = 0. \end{aligned}$$

在这两种情形中,都假定除了 Π_α, ϕ_α 及其微商以外, H 不含别的空间和时间的函数.

现在可以用与 §1 类似的程序毫无困难地完成自经典理论到量子理论的过渡. 正像那里的坐标用矩阵来代替一样,这里的波函数可以用不对易的变量来代替,它们能够在适当选择的希耳伯空间中表示成矩阵(狄喇克把这种量称为"q数").于是对于微分方程(108)还必须加上与(15)相似的对易关系:

$$\left.\begin{aligned} &\Pi_\alpha(P)\phi_\beta(P') - \phi_\beta(P')\Pi_\alpha(P) = \delta_{\alpha\beta}\delta(P - P')\frac{h}{2\pi i}, \\ &\Pi_\alpha(P)\Pi_\beta(P') - \Pi_\beta(P')\Pi_\alpha(P) = 0, \\ &\phi_\alpha(P)\phi_\beta(P') - \phi_\beta(P')\phi_\alpha(P) = 0. \end{aligned}\right\} \tag{111}$$

里也适用——事实上，在波场和粒子的量子理论之间，差别只在于前者变量的个数是无限的而后者则是有限的。

10. 对负电荷波的应用

现在来将上节的方法运用于§8中所处理的负电荷的波. 这时经典的拉格朗日函数是

$$L = -\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi + \frac{1}{8\pi}\nabla V\cdot\nabla V + eV\psi^*\psi - \rho_0 V - \frac{h}{4\pi i}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* - \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\right).$$

把电荷密度分成给定外电荷的(ρ_0)和内电荷的(ρ)两部分，相应地可以把电势 V 写成 $V = V_0 + V_1$，而

$$\nabla^2 V_0 = -4\pi\rho_0, \quad \nabla^2 V_1 = 4\pi e\psi^*\psi. \tag{115}$$

于是，把上述拉格朗日函数加上全微商 $(h/4\pi i)(\partial/\partial t)(\psi^*\psi)$ 和 $-(1/4\pi)\nabla\cdot(V_1\nabla V_0)$，并且去掉只包含已知函数 ρ_0 的项，就可以改换成更方便的形式. 这样做并没有改变这个变分问题，而在这样得到的拉格朗日函数

$$L = -\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* + \frac{1}{8\pi}\nabla V_1\cdot\nabla V_1 + e(V_0+V_1)\psi^*\psi \tag{116}$$

中，只有 ψ，ψ^* 和 V_1 是要变分的.

因为在(116)中不出现 V_1 的时间微商，由(104)式定义的与 V_1 共轭的量等于零，不能引入对易关系(111)，从而产生了一点困难. 不过这个困境很容易避开，只要不把 V_1 看成一个独立的波函数，而把从对它变分而得的方程当作一个附加条件来处理就行. 利用这个附加条件可以把 V_1 表示为 ψ

和 ψ^* 的函数. 因为对 V_1 变分而得的方程是 $\nabla^2 V_1 = 4\pi e\psi^*\psi$，根据这个方程著名的解

$$V_1(P) = -e\int G(PP')\psi^*(P')\psi(P')dv_{P'}, \qquad (117)$$

就把 V_1 用 ψ 和 ψ^* 表达了出来，其中 $G(PP')$ 是有波出现区域的格临函数(一般说来，就是简单的 $1/r_{PP'}$). 把这个式子代入拉格朗日函数(116)，稍加修改(包括再加上全微商)就得到

$$L = -\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^* - eV_0\psi^*\psi$$
$$-\frac{e^2}{2}\int dv_{P'}\psi^*(P)\psi(P)\psi^*(P')\psi(P')G(PP'). \qquad (118)$$

与 ψ 共轭的动量是(见(104)式)

$$\Pi = \frac{\partial L}{\partial\dot{\psi}} = -\frac{h}{2\pi i}\psi^*,$$

从而哈密顿函数为

$$H = -\frac{h}{2\pi i}\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} - L,$$

它给出了

$$\overline{H} = \int dv\left[\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi - eV_0\psi^*\psi\right]$$
$$+\frac{e^2}{2}\iint dv_P dv_{P'}G(PP')\psi^*(P)\psi(P)\psi^*(P')\psi(P'). \qquad (119)$$

引入对易关系

$$\left.\begin{aligned}&\psi(P)\psi^*(P') - \psi^*(P')\psi(P) = \delta(P-P'),\\&\psi(P)\psi(P') - \psi(P')\psi(P) = 0,\\&\psi^*(P)\psi^*(P') - \psi^*(P')\psi^*(P) = 0,\end{aligned}\right\} \qquad (120)$$

就可以像§9那样从这个经典的哈密顿形式过渡到量子理论. 哈密顿函数还是可以从经典理论的表达式(119)照搬过

来. 但是这样做并不能确定因子的次序，而它现在是很重要的；事实上，如果要考虑因子的次序，正确的形式就只能由经验来确定. 约且与克莱因[38] 发现物质波的恰当的哈密顿函数为

$$\bar{H}=\int dv\left[\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi-eV_0\psi^*\psi\right]$$
$$+\frac{e^2}{2}\iint dv_P dv_{P'}G(PP')\psi^*(P)\psi^*(P')\psi(P)\psi(P'). \quad (121)$$

应该指出，当 ψ 是一个 q 数时，ψ 的共轭量 ψ^* 的定义要作一些修改. 如果 ψ 给定为厄密矩阵的函数，则除了把其中的 i 换成 $-i$，还要把其中的因子交换次序，才能得到 ψ^*，例如

$$(pq)^*=q^*p^*.$$

在物质波的这一量子理论中，总电荷

$$-e\int dv\psi^*\psi$$

仍然还是一个时间常数，这很容易证明，只要表明它与 $\bar{H}$ 对易就行. 在这个情形中，它的本征值还必定是 $-e$ 的整数倍. 这可以用下面的方法来表明. 像 §9 那样，我们令

$$\left.\begin{aligned}\psi=\sum_r a_r u_r(P),\quad \psi^*=\sum_r a_r^* u_r(P),\\ \int u_r u_s dv=\delta_{rs},\end{aligned}\right\} \quad (122)$$

a_r 和 a_r^* 满足与 (114) 式类似的对易关系

$$\left.\begin{aligned}a_r a_s^*-a_s^* a_r=\delta_{rs},\\ a_r a_s-a_s a_r=0,\\ a_r^* a_s^*-a_s^* a_r^*=0.\end{aligned}\right\} \quad (123)$$

为了满足上述对易关系，我们令

$$a_r=e^{-\frac{2\pi i}{h}\theta_r}N_r^{\frac{1}{2}},\quad a_r^*=N_r^{\frac{1}{2}}e^{\frac{2\pi i}{h}\theta_r}, \quad (124)$$

并且要求 N_r 和 θ_r 是满足下列对易关系

$$\theta_r N_s - N_s\theta_r = \delta_{rs}$$

的厄密算符．于是可以证明

$$e^{-\frac{2\pi i}{h}\theta_r} f(N_r) = f(N_r + 1)e^{-\frac{2\pi i}{h}\theta_r}, \qquad (125)$$

并且 N_r 的本征值都是正整数．再从(122)式就推出

$$e\int dv\phi^*\phi = e\int dv \sum_{r,s} a_r^* a_s u_r u_s$$

$$= e\sum_{r,s} a_r^* a_s \delta_{rs} = e\sum_r N_r.$$

这样，物质波的量子理论就说明了电子的存在(即电荷总是某一基本单位的整数倍．但是为什么这种大小完全确定的基本单位只有一个，凭借物质波的量子理论确实还不能说明)．同时也很明显，哈特里的"量子条件"(93)在对应原理的意义上就类似于对易关系(123)．因为 $\sum N_r$ 是运动方程的一个积分常数，我们可以分别考虑这个量的数值为 N 的那些定态(可以指出，即使 V_0 与时间有关，$\sum N_r$ 也是常数)．约旦与克莱因[38]曾经指出(见§11)，具有哈密顿函数(119)的波动问题，满足这个条件的解在数学上和物理上都等价于微粒理论中 N 电子问题的解，即等价于薛定谔方程(47)的解．然而，它们并不是对应于这个方程的所有的解，而只是对应于那些变换函数 ϕ 是对电子坐标对称的可能解．这些解本身组成了一个闭合项系，即一个适用玻色-爱因斯坦统计法的项系．因此，物质波的量子理论(特别是对易关系(111))在相应的粒子图象中要求玻色-爱因斯坦统计法．

不过，对易关系(111)只是许多可能性中的一种．把减号改成加号，就得到另一组同样合理的关系，这时波函数满足方程

$$\left.\begin{aligned}&\psi(P)\psi^*(P')+\psi^*(P')\psi(P)=\delta(P-P'),\\&\psi(P)\psi(P')+\psi(P')\psi(P)=0,\\&\psi^*(P)\psi^*(P')+\psi^*(P')\psi^*(P)=0.\end{aligned}\right\}\quad(126)$$

根据约旦与维格纳[38]的研究，基于这些对易关系的波场量子理论等价于薛定谔方程的反对称解；亦即这些关系导致泡利不相容原理和与之相应的费密-狄喇克统计法.

11. 粒子图象的量子论与波动图象的量子论在数学上等价的证明

粒子图象和波动图象只不过是同一物理实在的两个不同方面，这一事实正是量子理论的问题之核心. 虽然这是一个纯粹的物理本质问题，不过令人满意的是，在这个理论的数学工具之中我们也找到了这种二象性的反映. 这表现在对于同一组数学方程我们能够随便用哪一种图象来进行诠释.

这一断言的证明可以作得十分普遍，而不必涉及所考虑的哈密顿函数的特殊形式. 对于N个等同粒子来说，粒子图象的薛定谔方程可以写成

$$\left\{\sum_{n=1}^{N}O^n+\sum_{n>m}^{N}O^{nm}+\cdots+\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}\right\}\varphi(x_1,\cdots,x_N)=0,\quad(127)$$

其中 O^n 是一个算符，只作用在第 n 个粒子的空间坐标 $\boldsymbol{x}_n$ 上，而 O^{nm} 则作用在第 n 和第 m 两个粒子的坐标上. 此外，可以假定已经找到一个确定的正交函数系 $u_r(\boldsymbol{x})$，在三维空间中满足边界条件的所有函数都能够用它展开；于是就可以把 $\varphi(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)$ 展开成这些函数的乘积：

$$\varphi(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)=\sum_{r_1\cdots r_N}b(r_1,\cdots,r_N,t)u_{r_1}(\boldsymbol{x}_1)\cdots u_{r_N}(\boldsymbol{x}_N).\quad(128)$$

可以认为量 $|b(r_1, \cdots, r_N, t)|^2$ 确定了粒子 1 处于 r_1 态、粒子 2 处于 r_2 态等等的几率. 如果把 Ψ 的这一表达式代入方程(127)中，对结果乘以 $u_{s_1}(\boldsymbol{x}_1)u_{s_2}(\boldsymbol{x}_2)\cdots u_{s_N}(\boldsymbol{x}_N)$ 然后对 $\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ 积分，就得到下面关于 b 的微分方程

$$\begin{aligned} 0 = & \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t} b(s_1, s_2, \cdots, s_N, t) \\ & + \sum_n \sum_{r_n} O^n_{s_n r_n} b(s_1 \cdots r_n \cdots s_N) \\ & + \sum_{n>m} \sum_{r_n r_m} O^{nm}_{s_n s_m; r_n r_m} b(s_1 \cdots r_n \cdots r_m \cdots s_N) + \cdots . \end{aligned} \tag{129}$$

这里用到了 $u_r(\boldsymbol{x})$ 的正交关系，而量

$$O^n_{s_n r_n} = \int u_{s_n} O^n u_{r_n} dv_n ,$$

$$O^{nm}_{s_n s_m; r_n r_m} = \iint u_{s_n} u_{s_m} O^{nm} u_{r_n} u_{r_m} dv_n dv_m ,$$

则是在由函数 $u_r(\boldsymbol{x})$ 表征的坐标系中表示相应算符的矩阵元. 因为哈密顿函数对于粒子的坐标对称，这些矩阵元的数值只依赖于指标 r 和 s，而不明显地依赖于 n 和 m. 在玻色-爱因斯坦统计法的情形中，$b(s_1 \cdots s_N)$ 对粒子的量子数是对称的，所以它们也可以表达为处于第 r 态的粒子数 N_r 的函数. 因为发现 N_1 个粒子处于第一态、N_2 个粒子处于第二态等等的先验几率为 $Z^2 = N!/(N_1!N_2!\cdots)$，定义量

$$b(N_1, N_2, \cdots) = Z b(r_1, r_2, \cdots, r_N) \tag{130}$$

是很方便的. (125)式中的算符 $e^{-\frac{2\pi i}{h}\theta_r}$ 在这里很有用，它把 N_r 变成了 $N_r + 1$；借助于它们可以把方程(129)写成

$$\begin{aligned} 0 = & \left\{ \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{s,r} N_s O_{sr} e^{\frac{2\pi i}{h}(\theta_s - \theta_r)} \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \sum_{ss';rr'} N_s (N_{s'} - \delta_{ss'}) O_{ss';rr'} e^{\frac{2\pi i}{h}(\theta_s + \theta_{s'} - \theta_r - \theta_{r'})} \right. \end{aligned}$$

$$+\cdots\Big\}\frac{1}{Z}\,b(N_1, N_2, \cdots).$$

对这个方程从左面乘上 Z，并将 $1/Z$ 对易到左面，根据(125)式，可得

$$0=\Big\{\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{s,r}N_s^{\frac{1}{2}}(N_s-\delta_{rs}+1)^{\frac{1}{2}}\,O_{sr}e^{\frac{2\pi i}{h}(\theta_s-\theta_r)}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{ss';rr'}N_s^{\frac{1}{2}}(N_{s'}-\delta_{ss'})^{\frac{1}{2}}(N_r+1-\delta_{rs}-\delta_{rs'})^{\frac{1}{2}}O_{ss'rr'}$$

$$(N_{r'}+1+\delta_{rr'}-\delta_{r's}-\delta_{r's'})^{\frac{1}{2}}\cdot e^{\frac{2\pi i}{h}(\theta_s+\theta_{s'}-\theta_r-\theta_{r'})}+\cdots\Big\}$$

$$\cdot\,b(N_1, N_2, \cdots). \tag{131}$$

我们现在回到用波动理论表述的相应问题；于是与(127)式相应的哈密顿函数为

$$\bar{H}=\int dv_P\phi_P^*O^P\phi_{P'}+\frac{1}{2}\iint dv_P dv_{P'}\phi_{P'}^*\phi_P^*O^{P'P}\phi_{P'}\phi_P+\cdots.$$

利用(122)，这也可以写成

$$\bar{H}=\sum_{s,r}a_s^*a_rO_{sr}+\frac{1}{2}\sum_{ss';rr'}a_s^*a_{s'}^*a_ra_{r'}O_{ss';rr'}+\cdots.$$

然后将(124)式代入方程

$$\bar{H}S+\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial S}{\partial t}=0,$$

我们就得到

$$0=\Big\{\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{s,r}N_s^{\frac{1}{2}}\,O_{sr}e^{\frac{2\pi i}{h}(\theta_s-\theta_r)}\,N_r^{\frac{1}{2}}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{ss';rr'}N_s^{\frac{1}{2}}\,e^{\frac{2\pi i}{h}\theta_{s'}}O_{ss';rr'}e^{\frac{2\pi i}{h}\theta_r}\,N_r^{\frac{1}{2}}e^{-\frac{2\pi i}{h}\theta_{r'}}N_r^{\frac{1}{2}}$$

$$+\cdots\Big\}S(N_1, N_2, \cdots).$$

把算符 $e^{\frac{2\pi i}{h}\theta}$ 对易到右面，得到

$$0=\left\{\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{s,r}N_s^{\frac{1}{2}}(N_r-\delta_{sr}+1)^{\frac{1}{2}}O_{sr}e^{\frac{2\pi i}{h}(\theta_s-\theta_r)}\right.$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{ss';rr'}N_s^{\frac{1}{2}}(N_{s'}-\delta_{ss'})^{\frac{1}{2}}(N_r+1-\delta_{rs'}-\delta_{rs})^{\frac{1}{2}}O_{ss'rr'}$$
$$\left.(N_{r'}+1+\delta_{rr'}-\delta_{r's}-\delta_{r's'})^{\frac{1}{2}}e^{\frac{2\pi i}{h}(\theta_s+\theta_{s'}-\theta_r-\theta_{r'})}+\cdots\right\}S. \tag{132}$$

这个方程与方程(131)完全相同，因此就证明了粒子图象和波动图象在数学上是等价的. 对于泡利不相容原理和对易关系(126)的情形，也可以作出类似的证明.

尽管微粒图象和波动图象的经典理论在物理和数学两方面都是这样全然不同，但二者的量子理论却是相同的.

12. 对辐射理论的应用[38]

我们还记得，支配着辐射的经典波动理论的麦克斯韦方程可以从拉格朗日函数

$$L=\frac{1}{8\pi}(\boldsymbol{E}^2-\boldsymbol{H}^2)+\sum_{\alpha=1}^{4}\Phi_\alpha s_\alpha$$

对势函数变分而导出. $s_\alpha(\alpha=1,2,3,4)$是4维电流密度的分量，Φ_α是4维电磁势($\Phi_4=i\Phi_0$, $x_4=ict$)的分量；因而若用势函数明写出来，拉格朗日函数就成为

$$L=\frac{1}{8\pi}\left[\sum_i\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\Phi_i}{\partial t}+\frac{\partial\Phi_0}{\partial x_i}\right)^2\right.$$
$$\left.-\sum_{i>k}\left(\frac{\partial\Phi_i}{\partial x_k}-\frac{\partial\Phi_k}{\partial x_i}\right)^2\right]+\sum_\alpha\Phi_\alpha s_\alpha \tag{133}$$

(在这个方程和后面的方程中，拉丁字母的指标取1到3，希腊字母的指标取1到4).

由(104)，与Φ_i共轭的动量为

参 考 文 献

[1] C. T. R. Wilson, *Proc. Roy. Soc.*, **A85**, 285 (1911); Jahrbuch d. Radioakt. **10**, 34 (1913).

[2] Davisson u. Germer, *Phys. Rev.*, **30**, 705 (1927); *Proc. Nat. Acad.* **14**, 317 (1928). C. P. Thomson, *Proc. Roy. Soc.*, **A117**, 600 (1928), **A119**, 651 (1928). Kikuchi, *Jap. Journ. Phys.* **5**, 83 (1928). Rupp, *Ann. d. Physik*, **85**, 981 (1928).

[3] A. H. Compton u. A. Simon, *Phys. Rev.*, **25**, 306 (1925).

[4] A. Einstein, *Ann. d. Phys.*, **17**, 145 (1905).

[5] J. Franck u. G. Hertz, *Verh. d. Deutsch. Phys. Ges.*, **15**, 613 (1913).

[6] L. de Broglie, *Ann. d. Phys.* sér. **10**, 2 (1925).

[7] N. Bohr, *Naturwissenschaften*, **16**, 245 (1928). N. Bohr, H. A. Kramers, J. C. Slater, *ZS. f. Phys.*, **24**, 69 (1924).

[8] W. Heisenberg, *ZS. f. Phys.*, **43**, 172 (1927).

[9] 同见[8]与 Kennard, *ZS. f. Phys.*, **44**, 326 (1927).

[10] 同见 Kennard[9] 与 C. Darwin, *Proc. Roy. Soc.*, **A117**, 258 (1927).

[11] P. Ehrenfest, *ZS. f. Phys.*, **45**, 455 (1927).

[12] H. Weyl, *ZS. f. Phys.*, **46**, 1 (1927).

[13] N. Bohr[7] sowie *Naturwiss.*, **17**, 483 (1929), **18**, 73 (1930); Atomteori og Naturbeskrivelse, Festschrift der Kopenhagener Universität 1929.

[14] M. Born, *ZS. f. Phys.*, **38**, 803 (1926). N. F. Mott, *Proc. Roy. Soc.*, **A126**, 79 (1930).

[15] Duane, *Proc. Nat. Acad.*, **9**, 158 (1923).

[16] A. Einstein, *Sitzungsber. d. preuß. Akad.*, **334** (1926). A. Rupp, *Sitzungsber. d. preuß. Akad.*, 341 (1926).

[17] A. Smekal, *Naturwiss.*, **11**, 873 (1923). H. Kramers u. W. Heisenberg, *ZS. f. Phys.*, **31**, 681 (1925).

[18] C. Raman, *Nature*, **121**, 501 (1928), **122**, 12 (1928).

[19] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.*, **A114**, 243, 710 (1927).

[20] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.*, **A117**, 610 (1928), **A118**, 351 (1928).

[21] G. Breit, *Journ. of the Optical Society Am.*, **14**, 374 (1927).

[22] W. Bothe u. H. Geiger, *ZS. f. Phys.*, **32**, 639 (1925).

[23] A. Einstein, *Phys. ZS.*, **10**, 185 (1909).

[24] M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan, *ZS. f. Phys.*, **35**, 557 (1926).

[25] O. Klein, *ZS. f. Phys.*, **53**, 157 (1929).
[26] N. Bohr, *ZS. f. Phys.*, **13**, 117 (1923).
[27] W. Heisenberg, *ZS. f. Phys.*, **33**, 879 (1925). M. Born u. P. Jordan, *ZS. f. Phys.*, **34**, 858 (1925) 和 [24]; W. Heisenberg, *Mathem. Ann.*, **95**, 683 (1926).
[28] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.*, **A109**, 642 (1925).
[29] P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.*, **A113**, 621 (1927). P. Jordan, *ZS. f. Phys.*, **40**, 809 (1927).
[30] E. Schrödinger, *Ann. d. Phys.*, **79**, 361, 489 (1926).
[31] W. Heisenberg, *ZS. f. Phys.*, **40**, 501 (1926).
[32] 见[31]和 P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.* **A112**, 661 (1926).
[33] S. N. Bose, *ZS. f. Phys.*, **26**, 178 (1924). A. Einstein, *Sitzungsber. d. preuß. Akad.*, 261 (1924).
[34] W. Pauli, *ZS. f. Phys.*, **31**, 765 (1925).
[35] E. Fermi, *ZS. f. Phys.*, **36**, 902 (1926) 和[32].
[36] E. Wigner, *ZS. f. Phys.*, **40**, 883 (1927).
[37] D. R. Hartree, *Proc. Cambr. Phil. Soc.* **24**, 89 (1928).
[38] 同见[24,20]和 P. Jordan u. W. Pauli, *ZS. f. Phys.*, **45**, 151 (1928). P. Jordan u. O. Klein, *ZS. f. Phys.*, **45**, 751 (1927). P. Jordan u. E. Wigner, *ZS. f. Phys.*, **47**, 631 (1928). G. Mie, *Ann. d. Phys.*, **85**, 711 (1928). W. Heisenberg u. W. Pauli, *ZS. f. Phys.*, **56**, 1 (1929), **59**, 168 (1930). E. Fermi, *Rendiconti d. R. Acc. d. Lincei*, (6) **9**, 881 (1929).
[39] N. Bohr u. L. Rosenfeld, *Kgl. Dansk Vidensk. Selskab. Math. -fys. Medd.* **XII**, 8 (1933).

人名和术语索引

（按汉语拼音字母顺序排列）

A

α射线 α-Strahlen 3, 53.
爱因斯坦 Einstein 8, 31, 50, 63, 75.

B

变换理论 Transformationstheorie 45, 95.
并协性 Komplementarität 50.
波包 Wellenpaket 11, 26, 29, 31, 54.
波包的发散 Zerstreuung von Wellenpaketen 11, 31.
波动理论 Wellentheorie 39, 121.
波动图象的测不准关系 Unbestimmtheitsrelationen im Wellenbild 39.
玻尔 Bohr 9, 11, 16, 21, 27, 37, 50, 64, 83.
玻恩 Born 28, 45, 56, 76.
玻色-爱因斯坦统计法 Bose-Einstein-Statistik 43, 76, 118, 137, 140.
玻特 Bothe 74.
布赖特 Breit 70.

C

纯态 Reiner Fall 46.

D

达尔文 Darwin 56.
戴维孙 Davisson 4, 61, 66.
德布罗意 De Broglie 8, 39, 121, 123.
德布罗意波 De Broglie-Wellen 8, 20, 39, 121.
狄喇克 Dirac 45, 66, 89, 110, 140.
电子碰撞 Elektronenstoβ 7.
迭加 Superposition 48, 56.
动量测量 Impulsmessung 21.
杜安 Duane 61.
对易关系 Vertauschungsrelationen 89, 130.
对应原理 Korrespondenzprinzip 66, 83.
多普勒效应 Doppler-Effekt 21, 64.

E

厄任费斯脱 Ehrenfest 30.

F

发射 Emission 65.
费密 Fermi 42, 121.
费密-狄喇克统计法 Fermi-Dirac-Statistik 42, 121.
夫朗克 Franck 7.
辐射的反冲 Rückstoβ bei Strahlung 72.
辐射理论 Strahlungstheorie 65.

G

盖革 Geiger 74.
盖革-玻特实验 Geiger-Bothesches Experiment 74.
革末 Germer 4, 61, 66.
共振 Resonanz 110.
共振荧光 Resonanzfluoreszenz 37.
观测 Beobachtung 46.
光的干涉 Interferenz des Lichtes 69.
光的衍射 Beugung von Licht 5.
光量子 Lichtquanten 6, 9, 18, 28, 31, 63, 66, 76, 118.
轨道概念 Bahnbegriff 27.

H

哈特里 Hartree 126, 135.
赫兹 Hertz 7.
混合态 Gemenge 46, 49.

J

几率波包 Wahrscheinlichkeitspaket 11, 27, 30, 31, 55.
几率的干涉 Interferenz der Wahrscheinlichkeiten 48.
菊池正士 Kikuchi 61.
矩阵 Matrizen 86.

K

凯纳德 Kennard 13.
康普顿 Compton 6, 72.
康普顿效应 Comptoneffekt 6, 17, 28, 72.
康普顿-西蒙实验 Compton-Simonsches Experiment 6, 72.
克拉默斯 Kramers 66.
克莱因 Klein 66, 127, 135.

L

喇曼效应 Ramaneffekt 66.
粒子图象的测不准关系 Unbestimmtheitsrelationen im Partikelbild 11.
量子论的统计诠释 Statistische Deutung der Quanten-Theorie 45.

N

能量的测量 Energiemessung 32.

P

泡利 Pauli 120, 136, 139.
泡利不相容原理 Paulisches Ausschließungsprinzip 120.

R

茹普 Rupp 4, 61, 63.

S

闪烁 Szintillation 20.
时空描述 Raum-Zeitbeschreibung 1, 51.
势垒 Potentialschwelle 32, 74.
守恒定律 Erhaltungssätze47 , 65, 69, 124.
束缚电子 Gebundene Elektronen 25.
斯梅克尔 Smekal 66.
斯特恩-革拉赫实验 Stern-Gerlachsches Experiment 35, 48, 65.

速度的测量 Geschwindigkeitsmessung 21.
索末菲 Sommerfeld 126.

T

汤姆孙 Thomson 4, 61.
统计法 Statistik 118.

W

威耳孙 Wilson 3.
威耳孙云室照相 Wilson-Aufnahmen 3, 20, 53.
微扰论 Störungstheorie 106.
韦耳 Weyl 46.
维格纳 Wigner 136.
位置的测量 Ortsmessung 16, 25.
位置概念 Ortsbegriff 13, 16.
物质射线的磁致偏转 Magnetische Ablenkung von Materiestrahlen 23, 35, 43.
物质射线的衍射 Beugung von Materiestrahlen 4, 20, 61.

X

西蒙 Simon 6, 72.
吸收 Absorption 65.
显微镜 Mikroskop 17.
相对论 Relativitätstheorie 2, 45, 50, 80.
相对论波动方程 Relativistische Wellengleichung 67, 80.
薛定谔 Schrödinger 28, 56, 69, 116, 121.
薛定谔函数 Schrödingerfunktion 28, 33, 56, 102, 116, 121.

Y

因果律 Kausalgesetz 46, 51.
约旦 Jordan 45, 76, 95, 136.

Z

涨落现象 Schwankungserscheinungen 75, 113.
针孔辐射 Nadelstrahlung 69.

译　后　记

本书德文版初版于1930年，由德国莱比锡S. Hirzel出版社出版．我们看到的较近版本是该出版社1944年印刷的，与1930年版相比，只有个别的改动，主要是在第三章增加了几段话，删去了第五章第8节．本书的英文版也初版于1930年，由美国芝加哥大学出版社出版．后来转给Dover出版社，曾经重印过许多次，但都和初版一样，没有作任何改动．英文版与德文版不完全一样，特别是数学附录部分英文版较详细．从这两种版本的发行情况来看，英文版的传播要比德文版广泛得多．虽然如此，法译本(1957年)和日译本(1954年)都是根据德文版译出的．

中译本的正文部分根据1944年的德文版译出，并参考了英文版．数学附录部分由于英文版较详细，所以我们根据英文版译出，并参考了德文版．数学附录中公式的编号，德文版是接着正文顺序连续编下来的，英文版则从头编起．我们也按照英文版从头编起，而在正文中引用到附录的公式时都一一作了相应改动．书中插图取自德文版．对于我们所加的注释，都署明"中译者"．书末人名和术语索引根据德文版译出，我们根据汉语拼音字母重新编排了次序．书中出现的人名大都可以在本书的参考文献中查到，对于专门的名词术语我们原则上以《英汉物理学词汇》(科学出版社，1975年，北京)的译名为准，所以就不再列出译名对照表了．