贝尔物理学奖获得者

SENBERG 著作选译

海森伯

DIE PHYSIKALISCHEN PRINZIPIEN
DER QUANTENTHEORIE

量子论的物理原理

W. 海森伯 著 王正行 李绍光 张虞 译

高等教育出版社

GOETHE INSTITUT

The translation of this work was supported by a grant from the Goethe-Institut which is funded by the German Ministry of Foreign Affairs



本书是量子论的一本经典著作，书中阐述了量子论的物理意义，特别着重于粒子图像和波动图像的等价性，讨论了测不准原理对统一这两种图像的意义和必要性，有不少内容是海森伯独到的见解，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很有参考价值。尽管现在人们对量子论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很有价值。本书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。

学科类别：物理

ISBN 978-7-04-048107-5

9 787040 481075 >

定价 49.00元

academic.hep.com.cn

本书微信、微博

微信号：ldjjhwx

@朗道集结号





1932年诺贝尔物理学奖获得者

WERNER HEISENBERG 著作选译

DIE PHYSIKALISCHEN PRINZIPIEN DER QUANTENTHEORIE

LIANGZILUN DE WULI YUANLI

量子论的物理原理

W. 海森伯 著 王正行 [illegible] 张虞 译

[illegible]大学 图书馆

高等教育出版社·北京

图字：01-2013-7412

Die physikalischen Prinzipien der Quantentheorie
By Werner Heisenberg
© 1930, 2008 S. Hirzel Verlag GmbH & Co, Birkenwaldstrasse 44, 70191 Stuttgart, Germany
All rights reserved.

No part of this book may be translated, reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, microfilming, recording, or otherwise, without written permission from the copyright holder.

图书在版编目（CIP）数据

量子论的物理原理 /（德）W. 海森伯著；王正行，李绍光，张虞译 . -- 北京：高等教育出版社，2017. 9
ISBN 978-7-04-048107-5

Ⅰ. ①量… Ⅱ. ① W… ②王… ③李… ④张… Ⅲ. ①量子论 Ⅳ. ① O413

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2017）第 151125 号

策划编辑	王 超	责任编辑	王 超	封面设计	王 洋	版式设计	杜微言
插图绘制	杜晓丹	责任校对	王 雨	责任印制	刘思涵		

出版发行	高等教育出版社	网 址	http://www.hep.edu.cn
社 址	北京市西城区德外大街4号		http://www.hep.com.cn
邮政编码	100120	网上订购	http://www.hepmall.com.cn
印 刷	山东临沂新华印刷物流集团		http://www.hepmall.com
开 本	787mm×1092mm 1/16		http://www.hepmall.cn
印 张	8.75		
字 数	160千字	版 次	2017 年 9 月第 1 版
购书热线	010-58581118	印 次	2017 年 9 月第 1 次印刷
咨询电话	400-810-0598	定 价	49.00元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题，请到所购图书销售部门联系调换
版权所有 侵权必究
物 料 号 48107-00

前　言

海森伯为他 1929 年在芝加哥大学的演讲撰写的《量子论的物理原理》, 要是以为它现在只有历史或哲学意义, 那就错了. 正好相反, 对于实验在量子物理中的全新含意与作用, 它所给出的清晰阐述, 即所谓 "量子论的哥本哈根精神", 在今天具有更现实的意义. 当时海森伯在分析中, 只从几个早期在量子论里所考虑的实验, 实际上是假想实验, 就得到了重大的成果. 而今天对单个量子系统进行的实验, 在许多实验室都已经驾轻就熟了. 早期的假想实验大多是实际或类似实际的, 而对量子物理来说, 就像海森伯那时一样, 还有许多更为基本的实验. 解释的问题在今天同样是现实的, 尽管不一定比当时更现实. 把握了这个根源, 今天的一些讨论就能得到澄清.

波粒二象性就是一个具体的例子, 它在今天仍然是讨论的中心. 海森伯清楚地表明, 波动图像和粒子图像两者都只是类比的描述, 有时适用, 有时失效, 而两者是有联系的. 他也清楚地表明, 许多现象有时既可以用粒子亦可用波动来理解. 一个具体而富有教益的例子或许是, 如何用两种图像来理解威耳孙云室中的一束粒子. 粒子图像当然是最直观而让人信服的: 按照这一图像, 束流中的一个 α 粒子沿其路径径直撞上不同的原子. 而这同样也可用波动图像来理解. 事实上, 按照海森伯的说法, 这里只是在一条狭长带内的原子在向前方向才能发生前向散射. 以这样的方式, 在云室中就形成了径迹. 反之, 海森伯也类似地表明, 我们通常看到的波在周期性网格上的弯曲, 也能用粒子图像来理解. 观测的这种确定无疑的两重性, 在今天的实验中将会变得更加清晰.

当人们谈及他们实验的联系时, 就会遇到解释上的分歧. 谈论决定体系特性的实验, 只有该特性确实能实际测量才有意义. 把一个实验联系到另一个实验, 不可避免地会带来分歧. 说一个体系 "在实际上" 有什么特性, 是没有意义的. 问题在于, 我们的经典语言是来自通常经验的理解, 我们允许毫无意义的语言表述. 海森伯由此还认为, 存在一个原则上与之不可能有什么联系的世界. 按照这种说法来思考, 当今一些关于解释的讨论就可以明显地简化.

按照海森伯的说法, 量子理论的 "核心" 在于, 通过统计混合, 各种各样可能性的叠加在原则上还是各种各样的. 正如 J · 贝尔 (John Bell) 已经表明的那样, 上述说法并不改变今天对消干* 的讨论, 因为 "对所有实际的目的"† 来说, 通过消干得到的态只是等效于量子力学的态. 在经典物理里, 一个统计混合描述的是理想系综, 它不同于经典体系. 测量仅仅只是鉴别在这些情形中哪一个成为真实的. 与之相反, 量子物理的统计混合有两方面的作用: 一方面像经典物理一样, 一个系综描述许多各不相同的体系; 而另一方面情形又是, 一个单个的量子力学体系, 通过与周围环境的耦合, 就不再处于一个纯态. 在这种情形, 由于我们只有一个单独的体系, 测量就不是选出一个体系, 而是态按一种可能来缩编‡.

有意思的问题是, 对于从单个体系到观测结果的转变, 在量子物理的描述与经典物理的描述之间, 界线放在哪里. 这个界线, 正如海森伯依据威耳孙云室十分出色地表明的那样, 可以随意放到任意一点. 若只涉及轨迹本身的描述, 在把引起 α 粒子散射的原子计入量子体系时, 是否把人也算进去并没有差别. 从近代的观点来看, 可以把人算进去, 而在考虑对 α 粒子和原子的观测时也包括人的干扰, 这就会引起差别. 这种干扰的出现是一种幺正的演化, 它在原则上必须是可逆的, 这对将来的实验是一个突出的挑战.

从今天的观点看, 特别是考虑到从那时以来实验的巨大进步, 人们或许更看重海森伯的一些表述. 例如宏观分子的量子相干实验就展现得非常清楚, 无论单个体系本身的状态是处于量子还是经典力学的情形, 这实际上都是一个实验装置的问题. 在基本的表述上, 海森伯并没有改变, 尽管在有些地方他或许是谨慎的. 例如在语言上常常隐含的意思是, "宏观的" 等同于 "经典的", 同样 "微观的" 等同于 "量子力学的", 这在今天不再成立. 但是在海森伯的时候, 按照当时的实验情形而把这种对应当成显而易见, 这应该是可以理解的. 与海森伯的时代相比, 今天人们或许倒是看重观测者在量子实验中的作用. 从叠加到统计混合的过渡, 可以理解为是从量子体系到另一个体系的信息流动, 这在原则上是可逆的. 这就是说, 通过与另一个体系的耦合, 观测者并不能从中获得知识, 而只不过是得到一种可能, 使观测者有可能获得确定的知识. 因而, 观测者实际获得知识, 是在最后结束可逆过程, 并且发生了从可能到现实的转变的情形.

海森伯这一分析各种实验的演讲, 值得推荐给当今从事量子物理基础实验的各位实验家. 这无疑有助于实现海森伯的目的, 他通过这本书所追求的信

* 德语 Dekohaerenz, 英语 decoherence, 亦译 "退相干". —— 中译者

† 原文是英语 "for all practical purposes". —— 中译者

‡ 或收缩, 德语 reduzieren, 英语 reduction, 又称 collapse, 译 "坍缩". —— 中译者

念, 正如前面已经提到的, 是通过实际的理解来建立量子论的物理原理. 海森伯在他的书中期待未来对经典观念领域的限制还会进一步加强. 于是可以肯定, 一个实际实验的仔细分析, 在观念上有着实质的助益.

A. 蔡林格 (Anton Zeilinger) 博士教授

2008 年 6 月于维也纳

维尔纳 · 海森伯与量子物理

量子物理是微观物理的科学: 是分子、原子和原子核的科学. 此外, 它在固体物理中起着巨大的作用. 它为激光技术、晶体管、隧道显微镜、微电子学和手机提供了基础. 更有甚者, 当今全世界国民生产总值的三分之一都是以量子物理为基础的. 宇宙学用它来探索宇宙之起源. 天体物理学家用它来描述星体动力学. 量子物理是基本粒子物理的基础, 并且应能阐明, 何以万物内部能结合在一起.

在物理学的历史上, 我们对自然的观念之深化, 依次走过了重要的几步. 重要的第一步, 是伊萨克 · 牛顿在 17 世纪引入了经典力学. 在 19 世纪, 法拉第和麦克斯韦阐明了电与磁是一个统一的电磁场的表现. 这就诞生了由麦克斯韦方程描述的电动力学. 在此基础上, 爱因斯坦狭义相对论表明, 时间与空间构成统一的四维时空.

量子力学的引入, 是引入经典力学以来最重要的一步. 一小群天资聪颖的年轻物理学家, 其中顶尖的有维尔纳 · 海森伯、沃尔夫冈 · 泡利和埃尔温 · 薛定谔, 按照马克斯 · 普朗克、尼尔斯 · 玻尔和阿诺德 · 索末菲的想法, 于 1926 年从量子和原子过程创设了新的学说.

在物理中有整整一系列现象, 人们不能用经典物理来解释. 例如原子分子和原子核的大小, 化学键, 以及原子和原子核的稳定性. 借助于量子物理, 这些现象都成为可以理解的, 甚至常常可以算出来.

围绕对空腔射线 (Hohlraumstrahlung, 即黑体辐射 —— 译注) 的理解, 马克斯 · 普朗克本人多年都是采用光的波动理论, 然而没有得到解答. 最后他终于发现, 光并不是从空腔壁反射的波, 而是一种具有确定能量的小小的基元量子. 它由光的频率和一个常量唯一地确定, 这个常量是普朗克当年引进的, 今天被大家称之为普朗克作用量子 h. 它实际上是一个作用量, 即**能量** × **时间**的值, 所以作用量子与光的频率的乘积是能量. 这个常量是今天量子物理的基础, 它的精确数值为 $h = 6.62608 \times 10^{-34}\mathrm{kg{\cdot}m^2/s}$.

普朗克由此推导出空腔射线的定律. 他表明, 用他新的观测定律, 可以很好地描述从热金属球发出的射线. 一个发热的铁球, 会自行发出光的射线. 在这种情形, 还没有人对射线用数学来描述. 马克斯 · 普朗克最后获得了成功. 他把他的假设称为一个绝望的行为, 并暗暗地希望, 他的想法将会被证明是无意义的. 但是它却起了非常好的作用, 取得了决定性的成功.

1900 年 12 月, 普朗克在柏林普鲁士科学院的一次会议上提出了他的想法. 这就是量子物理诞生的日期. 在物理学这一新的领域, 前辈们发现按照经典力学来想象是完全不可能的. 在此情形, 我们不可能借助于直观的图像, 这种从生物进化过程形成的本能, 来详细地把握原子的动力学. 尽管如此, 借助于量子物理, 还是可以计算原子中发生的过程. 结果与测量出色地相符.

阿尔伯特 · 爱因斯坦把握了普朗克的论述. 他于 1905 年发表了他的光子理论. 按照爱因斯坦的看法, 光仅仅以小小的量子即光子的形式存在. 直到那时, 人们认为光是一种波动现象. 而在此后, 人们不得不把波动与粒子的图像结合起来. 甚至在 1923 年, 路易 · 德布罗意就认为, 不仅仅是光, 而且所有的物质粒子, 都具有这种双重的特征. 粒子有时是波, 波有时是粒子. 后来人们称之为波粒二象性.

或许能用一个例子来说明经典物理与量子物理之间的区别. 在围绕太阳运动的任一距离, 地球都服从经典力学的规律. 而电子围绕原子核的轨道则完全是另一回事. 它在一个完全确定的轨道上运动. 不能是任意轨道, 只允许少数完全确定的轨道. 人们称之为电子轨道的 “量子化”. 尼尔斯 · 玻尔在 1912 年就已经认识到了这种量子性. 电子可以从一个轨道变换到另一个轨道. 人们称之为 “量子跳跃”. 在量子世界里没有像经典力学那样的连续过渡. 经典力学在量子世界失效了, 在这里代之起作用的, 是 1926 年由维尔纳 · 海森伯、埃尔温 · 薛定谔、马克斯 · 玻恩和沃尔夫冈 · 泡利发展的新的量子力学.

维尔纳 · 海森伯在慕尼黑大学跟阿诺德 · 索末菲念博士, 直到 1924 年. 在获得博士学位之后, 他到哥廷根成为马克斯 · 玻恩的助手. 同时他还跟哥本哈根的尼尔斯 · 玻尔工作.

海森伯认为, 经典力学对原子不再适用. 他只用可观测的频率和可测量的跃迁概率, 依序排列成表格. 马克斯 · 玻恩立刻发现, 这涉及的正是矩阵. 海森伯去除了像原子中电子的轨道这样不能观测的量. 他称其新的力学为矩阵力学.

这个新力学的一个主要结论是, 为了描述电子与原子核的运动, 所必需的物理量, 如速度和位置, 从来就不可能精确地测量, 而总是仅仅在一确定的测不准范围之内. 这坚固地立足于海森伯于 1927 年建立的测不准关系 (Unschärferelationen) 之上. 对于原子内部过程的动力学, 这个新的解释的一个结

果就是, 对于原子过程, 人们不再能够更精确地描述. 人们总是只能谈论过程发生的概率.

电子不可能同时具有准确的位置和速度. 人们可以尽量准确地描述位置, 而速度则完全不准确, 反之亦然. 不准确的大小大致由作用量 h 确定. 极限 $h \to 0$ 相应于经典力学, 没有不准确. 测不准关系是这样一个事实的结果, 即物理量, 无论位置或者动量, 不是用数值而是用数学的算符来描述. 由此就导致了测不准关系.

宏观物体也有测不准关系, 例如活动金属球的位置. 只是这里量子理论所要求的在位置与速度之间的测不准是如此微小, 人们无疑可以忽略, 事实上说到最后, 对于实际自然过程的量子特性的把握, 完全超出了我们的直觉. 这在原子物理中也不可能. 这种测不准大约准确到氢原子的尺度. 每个氢原子准确到氢原子间距的大小. 这在经典力学里人们无法理解.

对于原子, 其电子位置测不准的大小是原子外壳直径, 这大约是 1 cm 的一亿分之一. 我们今天已经可以观察一个外壳小得多, 比如说只有正常原子 1/100 的氢原子. 这时电子比定域在正常氢原子中的活动更强. 测不准关系表明, 现在电子速度有上百倍大小的测不准, 所以电子平均来说必定比在正常原子中的运动要激烈得多. 而高的速度意味着高的能量, 从而, 较小的原子却具有比正常原子要高的能量. 这就违反了一个重要的自然法则 —— 每个体系都尽量变到能量低的状态. 于是较小的原子是不稳定的, 会在短时间内放出能量, 膨胀到正常原子的大小.

对人造的原子, 例如比正常原子大 100 倍的原子, 我们能观测到类似的情形. 对于这样一个原子, 我们必须把一个电子从原子核移开. 这就是说, 对于这样一个原子, 必须花费能量. 这样一来, 这个新的原子的能量又是比正常原子的要高. 同样这个较大的原子也会在短时间内变到正常的状态, 亦即能量最低的状态. 人们不能迫使这个电子再减少能量. 海森伯认为, 这是位置与速度之间的测不准关系规定了原子的大小. 因此地球上的一个氢原子与银河系仙女座一个行星上的氢原子其大小完全一样.

然而在测不准关系中出现的不是速度而是动量, 即速度与质量的乘积. 从而原子外壳的大小直接取决于电子质量. 电子质量若小到原来的 1/100, 原子外壳就大 100 倍, 即约为一个厘米的百万分之一. 若电子质量只有 0.5 eV*, 即约一个中微子的大小, 则原子外壳就是大约 1 mm 的十分之一这样宏观的大小. 由于量子力学的测不准, 不可能追踪电子围绕原子核的运动. 海森伯认为, 说一个电子的轨道是根本没有意义的. 人们只能说出电子在原子核周围空间一定范围的概率.

---

* 这里作者按习惯使用了 $c = 1$ 的单位. —— 中译者

量子理论迫使原子有统一的大小, 这是自然界稳定的一个主要的基础. 海森伯第一个认识到这一点. 自然界的趋势, 不管如何不断变化, 最后总是又变到同样稳定的形态, 如在原子物理、化学或生物中那样, 这只能用量子物理的框架来理解.

电子在原子中的分布通过电子的波函数来描述, 人们可以借助于量子理论的方程来进行严格的计算. 这种波函数描述原子的状态. 虽然在量子理论中人们不能精确描述有关的事实, 而仅仅是概率, 但这却是严格的. 波函数的动力学通过一个微分方程来描述, 这是埃尔温 · 薛定谔于 1926 年发现的, 今天称之为薛定谔方程.

在原子物理中有许多现象, 不能用经典力学的框架来理解. 若用经典物理的框架来描述氢原子, 围绕质子运动的电子就有一个确定的角动量. 而在量子力学里, 基态氢原子中的电子根本没有角动量. 它的运动也不像在经典力学中那样沿着一个连续的轨道曲线. 其实它是在围绕着原子核振荡, 没有固定的方向. 不能从粒子轨道来解释.

量子理论的另一特征, 亦如核与粒子物理所表明的, 是存在激发态. 当人们供给氢原子能量, 比如用电磁波来照射, 则电子在短时间内就被输送到另一个态, 相应于较高的能量. 这是一个激发态, 具有完全不同的能量. 因此人们也说离散能谱.

体系最低的能态称之为基态. 一个被激发的原子或者原子核, 会跃迁到一个激发态, 但在那里只停留一个短暂的时间, 通过发射光或其他电磁射线, 例如伦琴射线或伽玛射线的形式, 自发地放出能量, 又会跃迁回来. 为了发生这种激发, 必须精确控制体系的能量, 使得跃迁能够发生. 量子力学可以严格算出跃迁能量.

量子力学在产业中形成了五花八门的应用. 现代固体物理缺了量子力学是不可想象的. 正是借助于量子物理, 人们才发明了晶体管和造出了电子计算机. 对于用核物理的框架来描述原子核, 量子力学同样也是不可或缺的. 由于人们把量子力学用于核过程, 原子弹或原子反应堆才能建造出来.

量子物理的价值不仅限于微观领域. 它一直延伸到我们的日常生活世界, 尽管我们大都没有意识到. 量子理论是全部化学和分子生物学的基础. 只有借助于量子力学, 人们才能理解何以原子能够互相结合成为分子. 同样, 使得种植物得以从日光萃取能量的光合作用, 也只有借助于量子物理才能理解. 医学中大量的应用亦以量子物理为基础, 比如核自旋断层摄影或激光技术.

在哲学方面人们对于量子力学同样也有很大的兴趣, 不过主要是在于其因果性的基本特征. 因果性原理认为, 对于每一个效果, 都源自一个唯一确定的原因. 在经典力学里, 这个因果性没有问题. 众所周知, 如果一个粒子在一确

定时刻的位置和动量是精确的, 则在所有作用于粒子的力均为已知的情况下, 按照力学的方程, 其在随后的运动是完全确定的.

在量子物理里, 由于测不准关系的结果, 在现在与未来之间的因果联系并不存在. 量子力学的规律具有统计的特征. 在观测一个放射性原子核的时候, 人们不能预言什么时候发生衰变. 人们只知道核的平均寿命是比如说十分钟, 但可能半分钟就衰变了, 或者正好一个小时. 这并非我们无知, 亦非我们说不精确, 而是由于在原则上就不可能, 这是尼尔斯 · 玻尔和维尔纳 · 海森伯首先指出的. 量子力学需要重新诠释物理量. 尼尔斯 · 玻尔和维尔纳 · 海森伯拟定了量子力学的哥本哈根诠释, 这在今天获得了大多数物理学家的接受.

大约 100 年前, 许多日常现象的基础完全不清楚. 举例来说, 比如一块煤, 烧起来以后, 先是红的, 然后变黄, 每个人都知道. 但是没人能解释. 为什么铜是褐色而银是白色? 为什么金属导电这么好? 为什么氢与氧能结合成水? 为什么所有的原子都有确定的大小?

人们对原子学习得越多, 就有越多的现象不清楚. 我们来看看氖元素, 即具有 10 个电子的原子. 氖是一种在化学上不活泼的气体, 即惰性气体. 另一方面, 钠元素, 具有 11 个电子, 则是在化学上完全活泼的元素. 而人们从量子理论就能完全解释.

只要参与的粒子的速度与光速相比较小, 量子力学就能很好地起作用. 在高速下理论失效, 必须替换理论, 把量子力学与相对论结合起来. 这就是维尔纳 · 海森伯与沃尔夫冈 · 泡利发展的相对论性量子场论. 应用于电动力学的情形就导致量子电动力学 (QED). 借助于 QED 就能够解释电子和光子的相互作用, 特别是一些非常纯粹的量子现象, 比如 “兰姆移动” 或者电子的磁矩.

发现具有质量大约与质子相同的中子之后, 海森伯把这两个粒子纳入一个新的对称性, 即同位旋对称性的框架, 看作一个统一的粒子. 海森伯认为强相互作用, 特别是核粒子之间的相互作用, 满足这个对称性. 今天这个强相互作用是通过另外一种量子场论来描述, 即与量子电动力学非常类似的量子色动力学, 亦即 QCD. 它描述夸克与胶子的相互作用. 与 QED 一样, 这个理论是一种规范场论. 在 QCD 中同位旋对称性自动得到满足.

维尔纳 · 海森伯是当代最著名的物理学家之一. 海森伯的贡献覆盖了近代物理观念的大部分. 它们涵盖了量子力学、量子场论、量子电动力学以及核力的理论.

H. 弗里奇 (Harald Fritzsch) 博士教授

2008 年 7 月于特兰托 (Trento)

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,在旧量子论中用来描述光谱的原子机制, 我们对它并不能得到确定的认识; 也正是他第一个找到了不假设存在这种原子机制就能解释 (至少是描述) 光谱现象的方法. 而且 "测不准原理" 已成为我们大学里的习惯用语, 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, 这已变得越来越明显. 氦原子结构, 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. 在此回顾时, 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 (例如拉曼效应). 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, 所以我只是把它们以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

* 英文版本附录经过改写, 比德文版本稍详. —— 中译者

目　录

第一章　引论 ····· **1**

1. 理论和实验 ····· 1
2. 量子论的基本概念 ····· 2
   a. 威耳孙云室照相 ····· 2
   b. 物质射线的衍射 (戴维孙 – 革末实验; 汤姆孙实验; 茹普实验) ····· 3
   c. 电磁辐射的衍射 ····· 4
   d. 康普顿 – 西蒙实验 ····· 4
   e. 弗兰克 – 赫兹碰撞实验 ····· 5

第二章　粒子图像物理概念的批判 ····· **9**

1. 测不准关系 ····· 9
2. 用不同测量仪器验证测不准关系 ····· 13
   a. 自由电子位置的测定 ····· 13
   b. 自由电子速度或动量的测量 ····· 16
   c. 束缚电子 ····· 19
   d. 能量的测量 ····· 24

第三章　波动图像物理概念的批判 ····· **29**

1. 波动图像的测不准关系 ····· 29
2. 用不均匀电磁场验证测不准关系 ····· 32

第四章　量子论的统计诠释 ····· **35**

1. 数学探讨 ····· 35
2. 概率的干涉 ····· 37
3. 玻尔的并协性概念 ····· 39

第五章　一些重要实验的讨论 ····· **41**

1. 威耳孙云室照相 ····· 41
2. 衍射实验 ····· 47

3. 爱因斯坦 – 茹普实验 · · · · · 48
4. 辐射的发射、吸收和色散 · · · · · 49
a. 守恒定律的应用 · · · · · 49
b. 辐射和物质的统一处理 · · · · · 50
5. 干涉和守恒定律 · · · · · 53
6. 康普顿效应和康普顿 – 西蒙实验 · · · · · 55
7. 辐射的涨落现象 · · · · · 56
8. 量子论的相对论形式 · · · · · 61

附录 量子论的数学工具 · · · · · 63
1. 物质的粒子图像 · · · · · 63
2. 变换理论 · · · · · 72
3. 薛定谔微分方程 · · · · · 77
4. 微扰论 · · · · · 81
5. 双原子共振: 变换矩阵的物理诠释 · · · · · 84
6. 辐射的粒子图像 · · · · · 89
7. 量子统计法 · · · · · 90
8. 物质与辐射的波动图像: 经典理论 · · · · · 92
9. 波场的量子理论 · · · · · 96
10. 对负电荷波的应用 · · · · · 100
11. 粒子图像的量子论与波动图像的量子论在数学上等价的证明 · · · 103
12. 对辐射理论的应用 · · · · · 106

参考文献 · · · · · 107

人名和术语索引 · · · · · 109

中文版后记 · · · · · 113

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时空概念以及跟这个时空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入到物理理论中来, 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时钟和标尺等概念进行了批判. 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: 在原则上存在传播速度为无限大的信号. 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时间 – 空间一致性这个概念. 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量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, 不必对时钟和标尺等概念立即进行深入批判, 但是必须对于时间 – 空间一致性概念和 "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, 本书下面考虑的顺序是: 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.

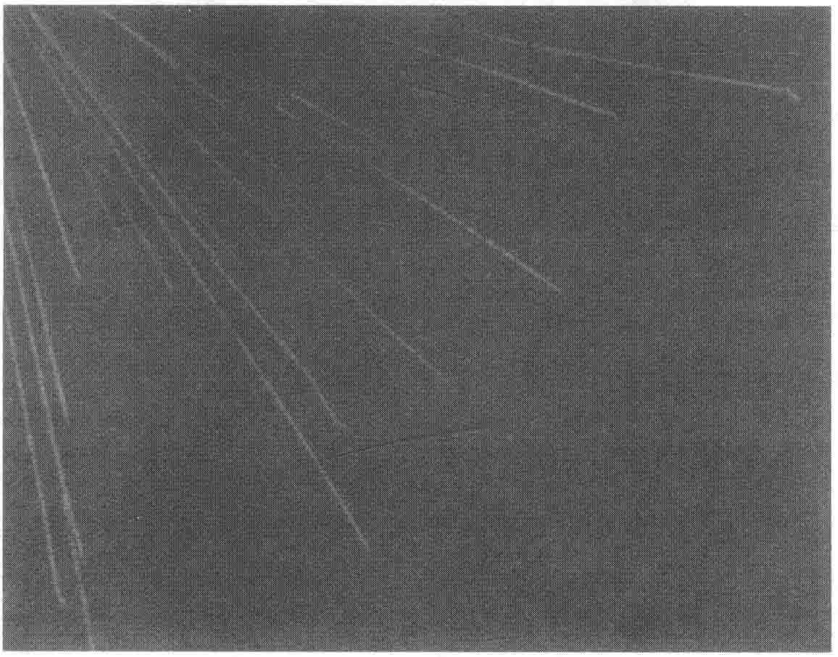

图 1

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 – 谢勒像). 当然, 物质射线被晶格反射时同样也会发生这种现象.

* 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, 而把光子叫作场粒子. —— 中译者

因此在这里可以直观地把物质射线解释为一种波动过程.

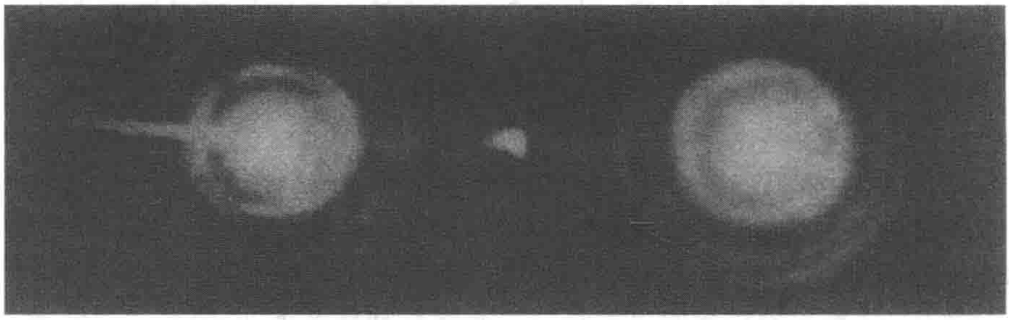

图 2

就像在光学中那样, 通过测量不同阶的衍射峰, 可以确定物质波的波长. 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 为普朗克常量.

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 – 谢勒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.

d. 康普顿 – 西蒙实验[3]

当伦琴射线射入威耳孙云室 (见 a 节) 时, 云室中的气体分子由于受到碰撞, 会释放出电子 (反冲电子), 如 a 节所述, 这一电子的雾迹是肉眼可见的. 这种现象可以解释为, 电磁辐射 (这里是伦琴射线) 是由许多单个微粒 (光量子) 所组成的, 它们同气体分子的一个电子碰撞 (爱因斯坦的光量子理论[4]). 每个光量子都具有能量 (E) 和动量 (p), 它们与测得的 (见 c 节) 射线频率 ν 和波长 λ 之间的关系为

$$E = h \cdot \nu, \quad p = \frac{h}{\lambda}.$$

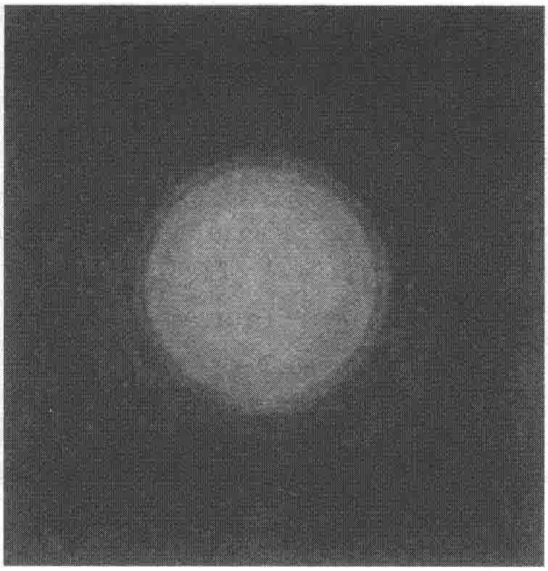

图 3

对光量子与电子的碰撞运用质点力学的碰撞定律, 就可以推出被撞出电子方向与散射光量子运动方向之间的关系. 用康普顿 – 西蒙实验, 可以直接验证从伦琴射线散射的纯微粒理论所得出的结论. 反冲电子方向可根据它在威耳孙云室中的雾迹测量出来, 此外, 在一定情况下散射光量子的方向也可以观测到. 这就是说, 光量子在穿过威耳孙云室的过程中, 还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连线的方向, 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). 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. 弗兰克 – 赫兹碰撞实验[5]

让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) 的某些特定的离散值处, 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离散能量值 (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. 如果现在把电子射线的能量提高到某个确定值, 使得单个电子的动能足以使原子

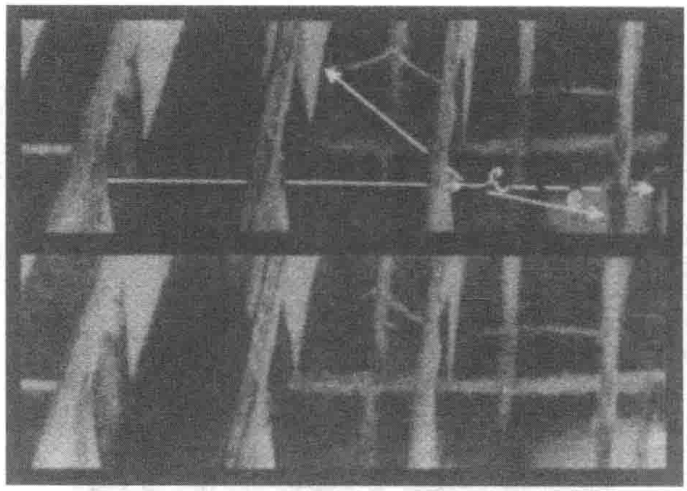

图 4

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).

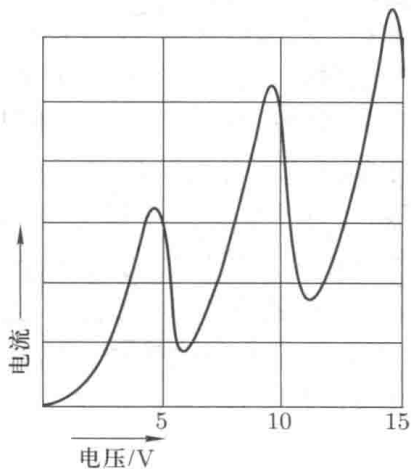

图 5

上述由弗兰克 – 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, 它们的行为有时像波动, 有时却又像粒子. 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像都只是一种

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像的全部属性. 对于波动图像同样也是这样. 作为类比, 这两种图像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.

在第 1 节中已经强调过, 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像, 那我们就只好满足于波动和粒子图像所提供的不完备的类比.

正如玻尔所指出的那样[7], 直观图像的二象性同样也是批判原先引进到理论中的那些图像和概念的一个自然的出发点. 不加批判地同时运用波动和粒子图像, 势必会导致直接的矛盾. 由这两个图像同时并存这一点出发, 我们就可以立即推出, 在这两个图像中, 我们不论运用哪一个图像, 自然界都给它设下了限制. 例如, 根据波动图像, 可以求出对于运用粒子图像的限制. 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像所定下的限制.

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

粒子图像物理概念的批判

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, 所以粒子图像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像来描述. 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, 这个事实在波动图像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. 我们把这种图像称为波包. 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 $\times$ 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设置的壁. 关系式 (6) 给出了粒子图像的适用范围. 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*.

可以不直接使用波动图像, 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].

* 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像, 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象中也会形成一幅图像, 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.

关于电子坐标 q 的任何知识都可以用概率幅 $S(q')$ 来表示, $|S(q')|^2\mathrm{d}q'$ 表示在 q' 与 $q'+\Delta q'$ 之间找到电子的概率. 令

$$\overline{q}=\int q'|S(q')|^2\mathrm{d}q' \tag{7}$$

代表 q 的平均值, 则由*

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

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

$$\overline{p}=\int p'|S(p')|^2\mathrm{d}p' \tag{9}$$

和

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

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:

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

式中 $S(p'q')$ 为希尔伯特空间中从 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

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

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

经过归一化之后, 我们得到

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

* 德文 1944 年版在定义 (8) 和 (10) 式右边各差一个因子 2, 因而 (17)、(17a)、(19)、(20) 等各式及相关表示均作了相应的改变. 参见对 (20) 式的原注, 该注所引 Weyl 的德文原著 67 页, 在其 1931 年的英译本 The Theory of Groups and Quantum Mechanics 中为 77 页. —— 中译者

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

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

为了简化进一步的计算, 我们引进下列省略符号:

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

于是 (8) 和 (10) 式变成

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

而由 (14) 式得出

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

我们由 (16)—(18) 式可导出

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

现在由下述显而易见的关系

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

推得不等式

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

把它代入 (17a) 式积分:

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

因此得*

$$\Delta p \Delta q \geqslant \frac{h}{2\pi}. \tag{20}$$

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

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

或

$$s(x) = 常量 \cdot \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\Delta q^2}},$$

$$S(q') = 常量 \cdot \mathrm{e}^{-\frac{(q'-\overline{q})^2}{2(\Delta q)^2} - \frac{2\pi \mathrm{i}}{h}\overline{p}q'},$$

而根据 (14) 式有

$$S(p') = 常量 \cdot \mathrm{e}^{-\frac{(p'-\overline{p})^2}{2(\Delta p)^2} + \frac{2\pi \mathrm{i}}{h}\overline{q}(p'-\overline{p})}.$$

因此, 对于测量 p 和 q 的概率来说, 高斯分布使 $\Delta p \cdot \Delta q$ 取极小值; 对于所有其他的分布, 测不准量的这一乘积都大于 $h/(2\pi)$.

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:

* 注意, 取代这里定义的大小 $\Delta\eta$ (η 表示 p 或 q), 有时采用 "平均测不准" $\Delta\eta'$, 它与我们的 $\Delta\eta$ 由关系 $\Delta\eta = \sqrt{2}\Delta\eta'$ 相联系. 于是 (20) 式成为 $\Delta p'\Delta q' \geqslant \frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$. 可见 Weyl 的 Gruppentheorie und Quantenmechanik, 1928, 莱比锡, 67页.

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 —— 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 (图 6). 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

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \sim h. \tag{23}$$

对上述推导首先可以提出的反驳是: 反冲值不确定的原因, 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.

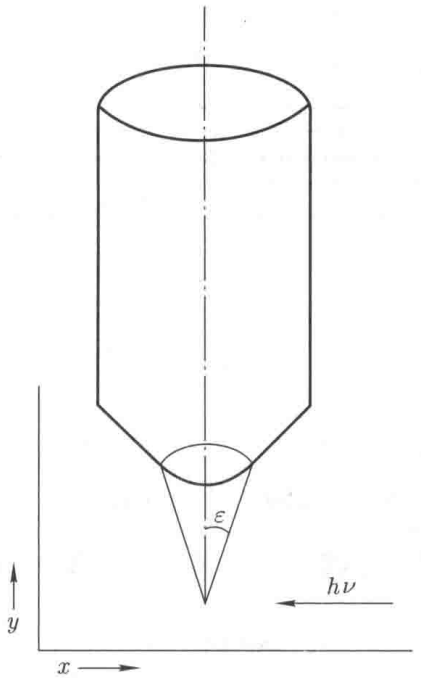

图 6

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 $\Delta p_x = \dfrac{h\nu}{c}\sin\varepsilon$, 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像和波动图像. 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.

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. 这束射线具有某一有限孔径角 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

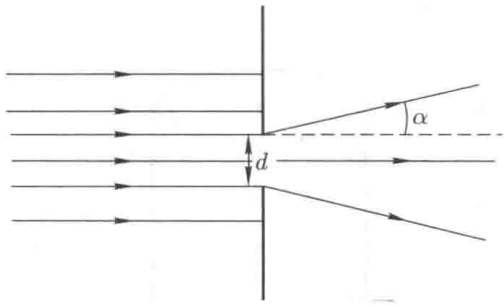

图 7

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的实验, 我们再来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的电子的动量, 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):

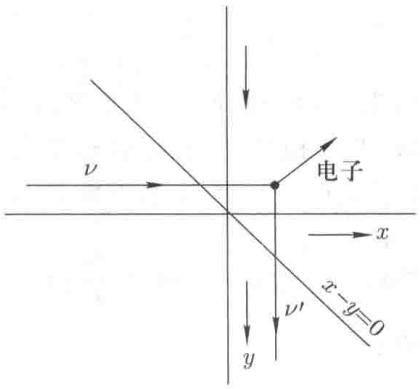

图 8

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

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

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

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

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

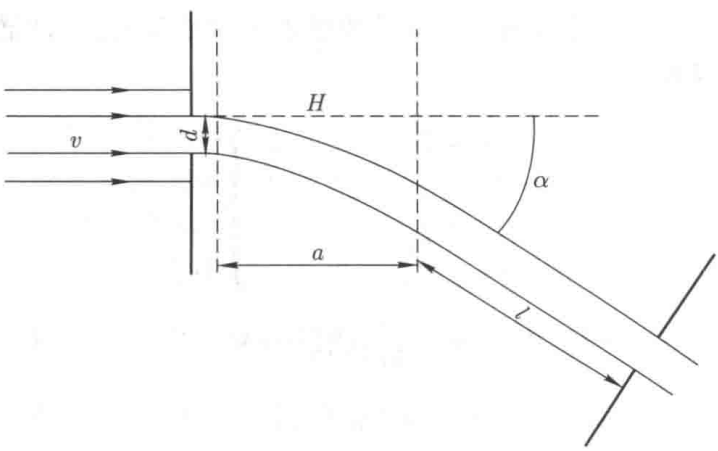

图 9

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 $\Delta\alpha \sim \dfrac{d}{l+a}$ ($d =$ 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 $\dfrac{d}{l+a}$ 时才能达到, 否则测量 α 的不准确度应该是这一发散度 $\Delta\alpha \sim \dfrac{\lambda}{d}$. 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 $\alpha = 2\pi$ 成为可能的时候, 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, 我们从粒子图像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

$$\int p\mathrm{d}q \sim nh, \tag{36}$$

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. $\int p\mathrm{d}q$ 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度, 而是在定态, 即在准确知道原子的能量时, 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), 就已经提到过它. 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 $\Delta p_s\Delta q_s$ 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的倍数. 如果我们考虑一个正好有 n 个零点 (节点) 的本征

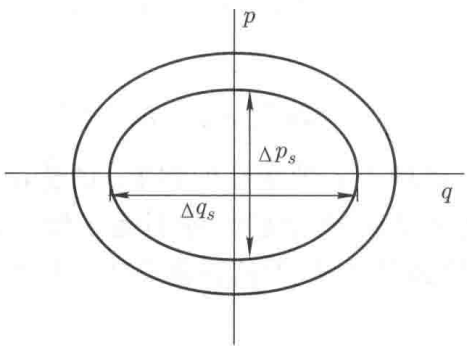

图 10

* 原文为 "reiner Fall", 英文本为 "determinate case" (即 "确定情况"). —— 中译者

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.

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, 以至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消去电子与原子核及其他电子的相互作用. 于是这个电子将做惯性运动, 可以用已知的方法来测量其动量. 在这种情况下, 测量其动量所必需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 $\sim h$ 的概率波包 $(|S(p')|^2 \cdot |S(q')|^2)$ 来表示 (见 M §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.

在量子数较小的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}cm 的数量级, 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}cm. 比如说我们用波长 $\lambda \sim 10^{-9}$cm 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概率分布. 按照玻恩的意见[14], 这一概率分布可以用 $\psi^*\psi$ 来表示 (如果在原子中有几个电子在运动, 则应该用 $\psi^*\psi$ 对其他电子坐标的平均值来表示), 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概率为 $\psi^*\psi$" 这句话的物理意义. 这个结果比初看起来还更奇怪. 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概率. 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, 按照经典的微粒图像, 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 $\dfrac{h}{\lambda}\dfrac{\Delta p_s}{\mu} \gg \dfrac{|E|}{n}$ 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 中讨论过的反冲的不确定性, 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, 可以用一个位形空间的概率波包来表示位置测量的结果, 这个概率波包基本上由 $n = 950$ 和 $n = 1050$ 之间的态的本征函数组成, 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, 原来已经扩展了的概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. 关于概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

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

如果 q 代表电子的某一直角坐标, 则 q 的平均值为

$$\overline{q}=\int q\psi^*\psi\mathrm{d}v(\mathrm{d}v=\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z).$$

对时间微分给出

$$\mu\dot{\overline{q}}=\mu\int q\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi+\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\mathrm{d}v,$$

分部积分后得

$$\mu\dot{\overline{q}}=\mu\frac{h}{4\pi}\int\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial q}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial q}\right)\mathrm{d}v.$$

对 t 再求一次微分, 用类似的方法得到

$$\mu\ddot{\overline{q}}=-e\int\frac{\partial V}{\partial q}\psi^*\psi\mathrm{d}v.$$

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

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

这个方程表明, 概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相位完全从经典谐振相位移开所要的时间. 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*, 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, 我们都有一定的概率找到这个光量子. 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概率为零. 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.

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†. 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

* 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.

† 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.

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计算. 作为对上述现象进行数学处理的例子, 我们来讨论电子在一个突然上升的势壁上的反射 (图 11).

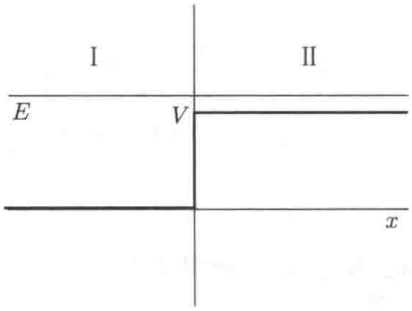

图 11

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

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

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

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

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

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

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概率分别是

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

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

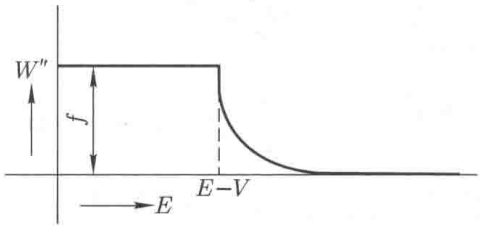

图 12

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, 则电子运动的相位或者与它相联系的辐射的相位在原则上就必定不知道. 为了说明这一点, 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 $n \longleftrightarrow m$ 跃迁相应的辐射的相位知识.

令一束宽度为 d 的施特恩 – 格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

$$\frac{\partial E(F)}{\partial x} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}F} \cdot \frac{\partial F}{\partial x}.$$

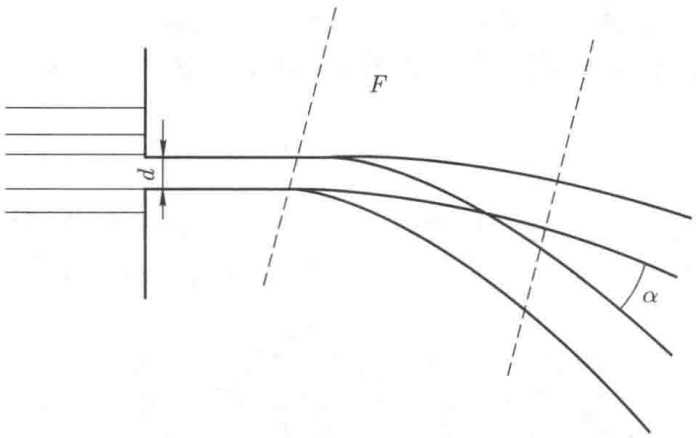

图 13

如果用 T 表示原子通过场 F 的时间, 用 p 表示原子沿射线方向的动量, 则 n 态原子的角偏转就是

$$\frac{\dfrac{\partial E_n(F)}{\partial x}\cdot T}{p}, \tag{45}$$

因而 n 态与 m 态原子射线的角偏转的差 α 是

$$\alpha=\frac{\dfrac{\partial E_n(F)}{\partial x}\cdot T-\dfrac{\partial E_m(F)}{\partial x}\cdot T}{p}. \tag{46}$$

这一角度 α 必须大于原子射线的自然散射角, 才能把这两种原子分开, 所以

$$\alpha\gtrsim\frac{\lambda}{d}=\frac{h}{dp}. \tag{47}$$

n 态的薛定谔函数包含周期性因子 $\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}E_nt}$. E 本身在场中是变化的, 因而波的频率和相位都要随之改变. 这种改变在一定程度上是测不准的, 因为原子在射线束中的哪一部分运动, 在原则上是不能观测的. 因此, 相应辐射的组合振动为 $\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}(E_n-E_m)t}$, 其相位改变的总测不准量 $\Delta\varphi$ 为

$$\Delta\varphi\sim\frac{d\left[\dfrac{\partial E_n(F)}{\partial x}-\dfrac{\partial E_m(F)}{\partial x}\right]T}{h}2\pi,$$

从 (46) 和 (47) 式立即得到

$$\Delta\varphi\geqslant 2\pi, \tag{48}$$

这表示相位是完全测不准的.

如果用一个具体的非均匀磁场, 运用拉莫尔定理, 这一计算还能稍为具体些. 若不考虑电子自旋, 则整个原子围绕磁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相位关系. 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

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

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

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

于是原子之间原来的一切相位关系都被完全抹掉了.

玻尔讨论过下述假想实验[7]: 对原来在正常态的施特恩 – 格拉赫射线的原子, 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叠加的结果, 每个与入射光有一定相位差 (对每个原子都相同) 的原子都发出这种球面波. 因而显然原则上就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叠加, 它在实际上像是从一些彼此没有相位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相位不会受磁场的影响, 就会发生矛盾. 可是 (48) 式表明, 测量能量的结果必然要破坏相位的关系. (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他一些量的知识. 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

波动图像物理概念的批判

在上一章里, 对于波动图像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, 我们将把粒子图像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像, 又批判了经典的波动概念, 则只要我们时刻注意到波动图像和粒子图像适用的限度, 在这两者之间的所有矛盾就都会消失.

1. 波动图像的测不准关系

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. 因而, 为了思考的严谨, 我们假设测量总是给出在一个很小空间区域内的平均值, 其体积 $\delta v=(\delta l)^3$, δl 依赖于所用的测量方法, 原则上没有下限*. 因为是测量电场或磁场的场强, 测量不可能分辨波长 λ 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, 这就会与粒子图像矛盾. 因为在小体积 δv 内场的能量和动量为

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

把 δv 取得足够小, 这两式右边的值就足够小, 而根据粒子图像, 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, 才能避免与粒子图像矛盾. 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 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{G}$ 的测不准是

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

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

取其循环置换就得到 y 和 z 方向的分量.

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

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

* 德文 1944 年版这句话改为, "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 $\delta t\simeq\delta l/c$.", 并对其下直到 (49) 式前的文字有少许增加. 其中提到的玻尔和罗森菲耳德的文章, 见本书末的参考文献 [39], 以及 *Phys. Rev.* **78** (1950), 794. —— 中译者

† 原文为歌德体$\mathfrak{E}$和$\mathfrak{H}$. 实际上, 原文统一用歌德体表示矢量, 本书仿英文本, 一律改用斜黑体, 如这里的 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$. —— 中译者

这是关于在同一体积元内同时认识 E_x 与 E_y 的测不准关系. 对于在不同体积元内的 E_x 与 E_y, 完全可以认识到任意的精确度*.

完全与粒子图像的情形一样, (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 $\mathrm{d}v$ 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

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

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

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

考虑到 Φ_h 的不确定性 $\Delta\Phi_h$ 给出场强 Φ_h 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, 那么对于玻色统计的情形, 其结果在物理上确实是合理的. 而要是采用实验上正确的费米 – 狄拉克统计, 由于对易关系 M (126) 式中包含的是正号, 给出在完全不同的空间点上却不能同时精确测量 ψ 和 ψ^* 的结果, 这就没有意义. 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, 即使是对辐射与物质

* 德文 1944 年版这两句话改为, "这些测不准关系首先显然适用于 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 在数量级为 $\delta v \cdot \delta t$ 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, 在两个界限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." —— 中译者

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的方法, 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 $\boldsymbol{E}_x$ 和 $\boldsymbol{H}_z$. 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 $(\delta l)^3$ 的整体宽度], 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 $\boldsymbol{E}_x$ 和 $\boldsymbol{H}_z$; 如果电磁场很不均匀, 这种测量就得不到任何确定的结果.

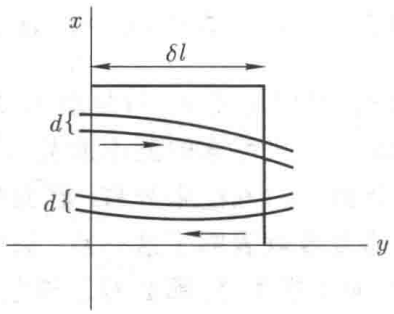

图 14

射线通过路程 δl 后的角偏转为

$$\frac{e\left(\boldsymbol{E}_x \pm \dfrac{p_y}{\mu c}\boldsymbol{H}_z\right)\dfrac{\delta l \cdot \mu}{p_y}}{p_y}. \tag{54}$$

由于物质射线存在自然发散, 所以 $\boldsymbol{E}_x$ 和 $\boldsymbol{H}_z$ 的测量精度为

$$\Delta\boldsymbol{E}_x \sim \frac{h}{de}\frac{p_y}{\delta l \mu} \text{ 和 } \Delta\boldsymbol{H}_z \sim \frac{h}{de}\frac{p_y}{\delta l \mu}\frac{\mu c}{p_y}. \tag{55}$$

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像, 就不会出现这种不确定性!). 由此引起的测不准量分别为

$$\Delta \boldsymbol{E}_x \gtrsim \frac{ed}{(\delta l)^3} \text{ 和 } \Delta \boldsymbol{H}_z \gtrsim \frac{ed}{(\delta l)^3} \cdot \frac{p_y}{\mu c}. \tag{56}$$

由 (55) 和 (56) 式就得到

$$\Delta \boldsymbol{E}_x \cdot \Delta \boldsymbol{H}_z \gtrsim \frac{hc}{(\delta l)^4}. \tag{57}$$

对测不准关系的这个推导, 我们又同时使用了粒子图像和波动图像的特性*.

* 德文 1944 年版还有下面一段话: "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." —— 中译者

第四章

量子论的统计诠释*

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像, 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, 其主轴方向可在此空间中画出, 为了得到一个清晰的图像, 我们可以想象一个刚体的转动惯量张量 (见图 15). 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射线), 这就好像精确认识某个刚体的转动惯量, 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. 因而外尔[12] 把这种程度的知识称为纯态. 例如原

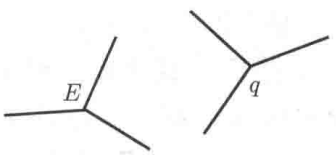

图 15

* 参见玻恩[14]、狄拉克[29]、约当[29] 以及[7, 8].

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探讨. 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, 则原来对这个方向的精确知识就必然要换成一个不精确的知识, 它 "混合" 了 E 的不同的主轴方向, 各取一定的概率系数. 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概率系数. 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 值的概率就等于原方向 "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. 至于一定的概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, 谈论量子论的量在幺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概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 21 页). 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尔伯特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尔伯特空间, 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, 并且一直这样推演下去. 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. 概率的干涉

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].

有一束施特恩 – 格拉赫原子射线, 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 态的概率为 $|S^{(1)}_{nm}|^2$. 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.



图 16

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 态的概率为 $|S^{(2)}_{ml}|^2$. 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

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

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 态薛定谔波的相位改变某一量级为 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 $S^{(1)}_{nm}S^{(2)}_{ml}$ 都应乘上一个未知的相因子 $\exp(\mathrm{i}\varphi_m)$, (59) 式右边最后必须对相位求平均. 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.

这个实验又可以在总体上分成三种情形, 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 态的概率是

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

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 态的概率是

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

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 态的概率是

$$|S^{(2)}_{ml}|^2.$$

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观念, 都建立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时空描述, 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时间与空间中的简单联系. 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像所加的限制, 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时间和空间有关系, 所以这个概念只有在由测不准关系限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, 我们看到古代关于时间和空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的讨论. 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.

表 1

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

第五章

一些重要实验的讨论

前面几章我们详细讨论了量子论的物理原理. 但是对其真正的理解, 还依赖于调整我们的观念, 以适合实验所呈现的情形, 特别是适合上面讨论过的时空描述与因果律之间的关系. 所以讨论一下一些基本的实验, 对于理论的理解肯定是有益的.

1. 威耳孙云室照相

a) 用经典的微粒图像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. 这类现象和其他宏观过程一样, 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 粒子一样, 都归入被观测的体系, 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 中的概率波包 $|S(q')|^2$ 来表示. 为了方便起见, 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 $\overline{q}, \overline{p}$ 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

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

对于不受外力的运动, 我们有下述方程

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

因此

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

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

这个方程的解为

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

因此根据 M (69) 式我们就得到 t 时刻的概率分布为

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

亦即

$$S(q') = 常量 \cdot \mathrm{e}^{\frac{1}{2(\Delta q)^2}\frac{\left[\overline{q}+\frac{1}{\beta}\left(q'-\frac{t}{\mu}\overline{p}\right)\right]^2}{1+\frac{1}{\beta}}}, \tag{65}$$

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

于是得到

$$|S(q')|^2 = 常量 \cdot \mathrm{e}^{-\frac{\left(q'-\frac{t}{\mu}\overline{p}-\overline{q}\right)^2}{(\Delta q)^2+\left(\frac{t}{\mu}\Delta p\right)^2}}. \tag{66}$$

所以 q' 的平均值为 $\dfrac{t}{\mu}\overline{p}+\overline{q}$, 这个结果同经典理论的计算相同. q' 的方均偏差 $\Delta q^2 + \left(\dfrac{t}{\mu}\Delta p\right)^2$ 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, 概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) 式那样的较小的概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

$$S(q'_0q') = \int S(q'_0E)S(Eq')\mathrm{d}E, \tag{67}$$

因而

$$S(q') = \int \mathrm{d}E \int \mathrm{d}q'_0 S(q'_0)S(q'_0E)\cdot S(Eq'). \tag{68}$$

函数 $S(q'_0E)$ 是相空间中通常的薛定谔波; 于是函数 $S(q')$ 可以由这种薛定谔函数叠加而成. 达尔文在研究概率波包的运动时就用过这一方法[10].

c) 现在我们把电离的水分子算作被观测体系的一部分, 在这个假设下再来对威耳孙云室照相进行数学处理. 这个处理比前面的做法复杂, 不过它把前面计算中由观测引起的波包收缩推迟了一步, 对于量子论的这个新奇的成分, 我们通常的直觉也就不太感到惊奇. 为了使计算不致过于复杂, 我们的体系除了一个 α 粒子外只包括两个水分子; 假定已经准确知道这个 α 粒子在水分子电离前的动量 $\boldsymbol{p}(p_x,p_y,p_z)$, 而其位置 $\boldsymbol{r}(x,y,z)$ 则完全不知道. 现在来求这两个水分子都电离的概率, 我们将要指出, 只有这两个分子的联线近乎平行于 α 粒子的速度方向时, 这一概率才有明显的值. 假定这两个分子的质心位置固定, 我们分别用 $x_{\mathrm{I}},y_{\mathrm{I}},z_{\mathrm{I}}$ 和 $x_{\mathrm{II}},y_{\mathrm{II}},z_{\mathrm{II}}$ 表示, 而分子的内部坐标用 q_{I} 和 q_{II} 表示. 于是位形空间包含的全部坐标为 $(x,y,z;q_{\mathrm{I}};q_{\mathrm{II}})$. 我们略去两个水分子之间的相互作用, 并且把 α 粒子与水分子之间的相互作用当作微扰来处理, 在哈密顿函数中与之相应的项为 $H_{\mathrm{I}}^{(1)}(x,y,z,q_{\mathrm{I}})$ 和 $H_{\mathrm{II}}^{(1)}(x,y,z,q_{\mathrm{II}})$; $H_{\mathrm{I}}^{(1)}$ 和 $H_{\mathrm{II}}^{(1)}$ 应看成是作用于薛定谔理论的波函数 $\psi(x,y,z;q_{\mathrm{I}},q_{\mathrm{II}})$ 上的算符.

于是薛定谔波动方程最后写成*

* 下面的计算基本上引自玻恩的工作[14]. 可以略去 α 粒子与水分子的原子核的相互作用.

$$\left[\underbrace{-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)}_{\alpha\text{ 粒子}}+\underbrace{H_{\mathrm{I}}^{(0)}(q_{\mathrm{I}})}_{\text{分子 I}}+\underbrace{H_{\mathrm{II}}^{(0)}(q_{\mathrm{II}})}_{\text{分子 II}}\right.$$

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

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

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

(70) 中第一个方程的本征解可以写成

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

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

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

最后我们写出微扰能量的矩阵元

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

由上所述, $t=0$ 时未受微扰的态由下列参数给出:

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

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

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta+E_{n_{\mathrm{I}}}^{(0)}+E_{n_{\mathrm{II}}}^{(0)}+\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial t}\right)v_{n_{\mathrm{I}},n_{\mathrm{II}}}^{(1)}(x,y,z,t)$$
$$=-[h_{n_{\mathrm{I}}^0n_{\mathrm{I}}}^{(1)}(x,y,z)\cdot\delta_{n_{\mathrm{II}}^0n_{\mathrm{II}}}+h_{n_{\mathrm{II}}^0n_{\mathrm{II}}}^{(1)}(x,y,z)\delta_{n_{\mathrm{I}}^0n_{\mathrm{I}}}]\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}(\boldsymbol{p}^0\cdot\boldsymbol{r}-E_0^{(0)}t)}.\tag{74}$$

我们在这儿再令

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

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

$$\left\{-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta-\left[E_{n_{\mathrm{I}}^0}^{(0)}-E_{n_{\mathrm{I}}}^{(0)}+E_{n_{\mathrm{II}}^0}^{(0)}-E_{n_{\mathrm{II}}}^{(0)}+\frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}^{(0)})^2\right]\right\}w_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}^{(1)}(x,y,z)$$
$$=-[h_{n_{\mathrm{I}}^0n_{\mathrm{I}}}^{(1)}(x,y,z)\delta_{n_{\mathrm{II}}^0n_{\mathrm{II}}}+h_{n_{\mathrm{II}}^0n_{\mathrm{II}}}^{(1)}(x,y,z)\delta_{n_{\mathrm{I}}^0n_{\mathrm{I}}}]\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}(\boldsymbol{p}^0\cdot\boldsymbol{r})}.\tag{75}$$

按照第四章 §1 所述, 这时 $|w_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}^{(1)}(x,y,z)|^2$ 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) 的概率. 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:

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

(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:

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

当 $\dfrac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}^{(0)})^2$ 比分子的能级差大时, 我们不难看出, $w_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}^0}^{(1)}(x,y,z)$ 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 $w^{(1)}_{n^0_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}(x,y,z)$ 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

$$\begin{aligned}
&\left\{-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta-\left[E_{n^0_{\mathrm{I}}}-E_{n_{\mathrm{I}}}+E_{n^0_{\mathrm{II}}}-E_{n_{\mathrm{II}}}+\frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}^{(0)})^2\right]\right\}\\
&\times w^{(2)}_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}(x,y,z)=-\sum_{m_{\mathrm{I}}}\sum_{m_{\mathrm{II}}}w^{(1)}_{m_{\mathrm{I}}m_{\mathrm{II}}}(x,y,z)\\
&\times[h^{(1)}_{m_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{I}}}(x,y,z)\delta_{m_{\mathrm{II}}n_{\mathrm{II}}}+h^{(1)}_{m_{\mathrm{II}}n_{\mathrm{II}}}(x,y,z)\delta_{m_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{I}}}]\\
=&-\sum_{m_{\mathrm{I}}}w^{(1)}_{m_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}(x,y,z)h^{(1)}_{m_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{I}}}(x,y,z)\\
&-\sum_{m_{\mathrm{II}}}w^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}m_{\mathrm{II}}}h^{(1)}_{m_{\mathrm{II}}n_{\mathrm{II}}}(x,y,z).
\end{aligned}\tag{78}$$

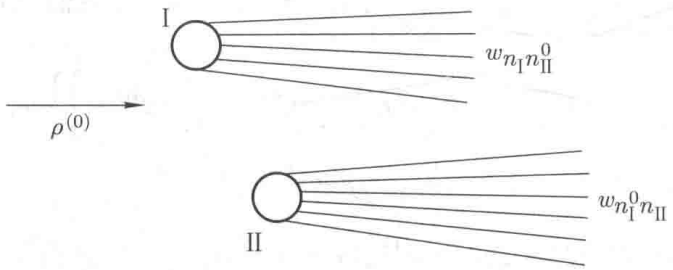

图 17

现在我们要问在什么条件下 $w^{(2)}_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}(n_{\mathrm{I}}\neq n^0_{\mathrm{I}},n_{\mathrm{II}}\neq n^0_{\mathrm{II}})$ 才显著地异于零. 对于这样的 $w^{(2)}_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}$, 在 (78) 式右边的求和中只剩下 $m_{\mathrm{I}}=n^0_{\mathrm{I}}$ 或 $m_{\mathrm{II}}=n^0_{\mathrm{II}}$ 的项. 如果 $w^{(1)}_{n^0_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}$ 和 $h^{(1)}_{n^0_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{I}}}$ 在同一个 (x,y,z) 空间区域内显著地异于零, 或者 $w^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}n^0_{\mathrm{II}}}$ 和 $h^{(1)}_{n^0_{\mathrm{II}}n_{\mathrm{II}}}$ 在同一个 (x,y,z) 空间区域内显著地异于零, 则 $w^{(2)}_{n_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}$ 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 $w^{(1)}_{n^0_{\mathrm{I}}n_{\mathrm{II}}}$ 的带状区域中, 或者是分子 II 处在 $w^{(1)}_{n_{\mathrm{I}}n^0_{\mathrm{II}}}$ 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. 散射波源的区域 $h^{(1)}(x,y,z)$ 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, 就不必引入概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, 就又会出现概率波包的不连续改变*.

* 即波包的收缩. —— 中译者

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, 对这些实验运用时空的波动理论也是完全合理的, 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, 杜安从粒子图像的量子论出发, 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 $\int p\mathrm{d}q = nh$).

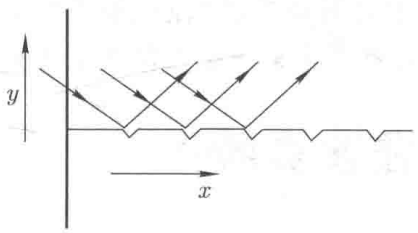

图 18

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, 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

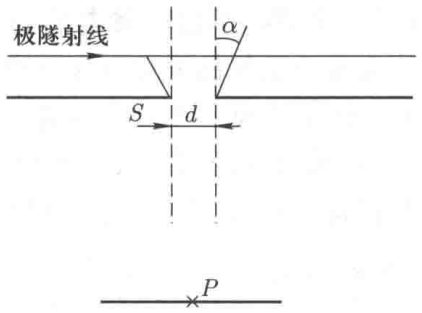

图 19

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.

从基态算起, 对原子的定态用 $1, 2, 3, \cdots, n$ 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施特恩 – 格拉赫实验来确定的. 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像还是经典的粒子图像, 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.

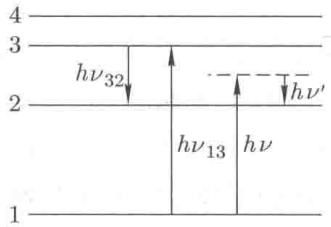

图 20

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. 这已经被拉曼实验所证实[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概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像. 然而对于跃迁概率的计算, 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像还是从波动图像出发, 结果都一样. 狄拉克在他的辐射理论中使用的是粒子图像的语言, 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. 狄拉克把单电子问题的相对论不变性方程写成 [20]

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

或者

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

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

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

从运动方程可得

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = -\alpha_i \cdot c. \tag{90}$$

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

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

因此, 包括原子和辐射场的整个体系的哈密顿函数为

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

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

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

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

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

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 $\Delta\nu_r$ 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

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

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 是常量. 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, 跃迁概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拉克的论文*.

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.

* 狄拉克[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, 而结果则与狄拉克的相同.

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 $\boldsymbol{r}_{\text{核}}(x,y,z)$] 旋转的电子 [其质量为 μ, 电荷为 $-e$, 坐标为 $\boldsymbol{r}_{\text{电子}}(x,y,z)$] 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

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

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

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

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 $e,\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_{\text{电子}}-\boldsymbol{r}_{\text{核}}$ 是积分变量, $\mathrm{d}v$ 是相应的体积元)

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

于是总电荷密度为

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

其中常量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:

$$\Phi_0(P)=\int\frac{\rho\left(t-\dfrac{R}{c}\right)}{R_{PP'}}\mathrm{d}v_{P'},\tag{100}$$

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

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

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

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

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, 在其他位置上, 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 $\boldsymbol{P}' >> \Delta\boldsymbol{P}$, 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)

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

假定初态是一个正常态, 其本征函数为 $\psi_E(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{-\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}Et}$, 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:

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

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, $\boldsymbol{R}_P/R_P = \boldsymbol{e}'$)

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

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 $\boldsymbol{r}_{P'}$ 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

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

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 $\psi(\boldsymbol{r})$ 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叠. 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, 守恒定律仍然成立, 因此毫无疑问, 我们可以运用通常的微粒理论来解释上述实验.

7. 辐射的涨落现象

不连续理论* 所具有的大的方均涨落, 在事实上已经包括在量子论的数学形式之中, 这一点将在本书第二部分 (M §5) 中阐明. 但是, 在计算辐射场的涨落时, 研究一下量子论所运用的不同的直观图像之间的关系, 还是特别富有教益的. 假定有一个体积为 V 的空腔, 其中有处于温度平衡的辐射. 根据普朗克公式, 在小体积元 ΔV 中频率范围在 ν 到 $\nu + \Delta\nu$ 之间的平均能量 $\overline{E}$ 为

$$\overline{E} = \frac{8\pi\nu^2\Delta\nu \cdot h\nu}{c^3(\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{kT}} - 1)}\Delta V, \tag{109}$$

* 原文 Diskontinuumstheorie, 英文本为 corpuscular theory, 即微粒理论. —— 中译者

其中 k 是玻尔兹曼常量, T 是温度. 根据普遍的热力学定律, E 的方均涨落 $\overline{\Delta E^2}$ 为

$$\overline{\Delta E^2} = kT^2 \frac{\mathrm{d}\overline{E}}{\mathrm{d}T},$$

所以根据爱因斯坦理论有[23]

$$\overline{\Delta E^2} = \overbrace{h\nu \cdot \overline{E} + \frac{c^3}{8\pi\nu^2 \Delta\nu \Delta V} \overline{E^2}}^{\text{量子论, 波=粒子}}. \tag{110}$$

$$\uparrow \qquad\qquad \uparrow$$

经典微粒理论　　经典波动理论

对于这一方均涨落的值, 根据经典理论, 只能两部分分别导出. 微粒图像首先给出

$$\overline{E} = h\nu \cdot \overline{n}, \tag{111}$$

$\overline{n}$ 是在体积 ΔV 中频率在 ν 和 $\nu + \Delta\nu$ 之间的平均光量子数, 根据概率计算规则有

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

于是

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

所以微粒图像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像出发, 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.

如果从波动图像出发, 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

$$\begin{aligned}\overline{H} &= \frac{1}{2}\int_0^l \left\{ c^2\Pi^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)^2 \right\} \mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{2}\int_0^l \left\{ \frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial \varphi}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x}\right)^2 \right\} \mathrm{d}x. \end{aligned} \tag{115}$$

此外, 下述对易关系成立:

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

引入

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

$\overline{H}$ 就化为

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

进一步我们可以令

$$\begin{aligned} p_k &= \frac{1}{c^2}\dot{q}_k, \\ p_k q_l - q_l p_k &= \delta_{kl}\frac{h}{2\pi \mathrm{i}}, \end{aligned} \tag{118}$$

因而 [见 M (124) 式]

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

弦的本征频率是

$$\nu_k = k\cdot\frac{c}{2l}. \tag{120}$$

因而 (117) 式便成为

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

对于一小段弦 $(0,a)$ 中的能量, 我们还得到

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

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 $\overline{E}=\dfrac{a}{l}\overline{H}$. 在 (122) 式中去掉那些 $j=k$ 的项, 我们就得到涨落的值 $\Delta E=E-\overline{E}$.

经过积分后得

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

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, 我们得到方均涨落为

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

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

$$\lim_{a\to\infty}\frac{1}{a}\int_{-\nu_1}^{+\nu_2}\frac{\sin^2\nu a}{\nu^2}f(\nu)\mathrm{d}\nu=\pi f(0),$$
$$\text{当 }\nu_1,\nu_2>0. \tag{126}$$

于是双重积分就化为一简单积分*, 因而我们得到

$$\overline{\Delta E^2} = \frac{a}{c}\int \mathrm{d}\nu \left\{ \frac{1}{c^4}(\overline{\dot{q}_\nu^2})^2 + \left[\left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2 \overline{q_\nu^2}\right]^2 + \left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2 \frac{1}{c^2}[(\overline{q_\nu \dot{q}_\nu})^2 + (\overline{\dot{q}_\nu q_\nu})^2] \right\}. \tag{127}$$

由于对易关系 (118), 有†

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

此外还得到

$$\begin{aligned} \overline{E} &= \frac{a}{c}\int \mathrm{d}\nu \left\{ \frac{1}{c^2}\overline{\dot{q}_\nu^2} + \left(\frac{2\pi\nu}{c}\right)^2 \overline{q_\nu^2} \right\} \\ &= \frac{a}{l}\int \mathrm{d}\nu \cdot z_\nu \cdot h\nu \left(N_\nu + \frac{1}{2}\right). \end{aligned} \tag{129}$$

其中 $z_\nu \mathrm{d}\nu$ 是频率范围 $\mathrm{d}\nu$ 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

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

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

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

$$\begin{aligned} \overline{E} &= \overline{E^*} + \frac{a}{l} z_\nu \Delta\nu \cdot \frac{h\nu}{2} \\ &= \overline{E^*} + \frac{a}{c}\Delta\nu \cdot h\nu, \end{aligned} \tag{132}$$

就求得

$$\begin{aligned} \overline{\Delta E^2} &= \frac{a}{2c}\Delta\nu \left[\left(\frac{\overline{E^*}c}{a\Delta\nu}\right)^2 + 2\frac{\overline{E^*}c}{a\Delta\nu} \cdot h\nu \right] \\ &= \frac{\overline{E}^{*2}}{\Delta\nu \cdot z_\nu \cdot \dfrac{a}{l}} + h\nu \cdot \overline{E^*}. \end{aligned} \tag{133}$$

* 德文 1944 年版这里有下述页下注: "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."——中译者

† 原文下式最右边无负号, 现据英文版本加上. —— 中译者

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量 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, 我们只限于采用理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理论的相对论形式的一些尝试, 以及在这些尝试中所遇到的困难. 狄拉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 50 页), 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概率不会太小, 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

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

* 本节在 1944 年的德文版中已删去. —— 中译者

在势垒的右边, 波函数的形式为

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

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, 电子能以某一概率无阻碍地穿过非常高的势垒. 精确的计算表明这一概率不会为零. 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. 约当和克莱因指出[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. 但是我们只要稍微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 (用常量 c 表征) 以及由普朗克常量 h 所标志的量子论测不准关系以外, 还可能会有其他一些与普适常量 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, 无论是采用波动图像, 还是采用微粒图像, 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像. 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像作出诠释.

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. 物质的粒子图像

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

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

其中总能量 W 为一常量. 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

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

$q^{(k)}_{\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_f}$ 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.

* 附录内提到的节号和方程号, 未特别标明者, 均指附录内的. —— 中译者

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 为常量. 用这些变量, 运动方程就成为

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

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

$$\nu(nm) = T_n - T_m, \tag{5}$$

由此立即可得组合原理

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

(2) 存在离散的能量值 —— 弗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离散值* $W_1, W_2, \cdots$.

(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.

* 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".

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量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离散值这一点, 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离散的能量值, 这些元素应该是一些整数的函数. 为了与里德伯 – 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

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

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, 用以在粒子图像的量子理论中, 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

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

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

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

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*.

* 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.

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作指导原则. 首先, 经典的表达式 (3) 必须具有实数值; 因为式中各项都是复数, 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米矩阵, 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

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

这又是一个形如 (9) 式的厄米矩阵.

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

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

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

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

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

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

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 $p(nm)\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\nu(nm)t}$ 和 $q(nm)\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\nu(nm)t}$ 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 $pq(nm)\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\nu(nm)t}$.

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 $x(nm)\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\nu(nm)t}$ 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 1, 而非对角元都是 0 的矩阵, 可以把它方便地写成

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

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 $\widetilde{x}$ 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量 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, 狄拉克[28] 已经发现, 在量子理论中表达式 $(2\pi\mathrm{i}/h)(xy-yx)$ 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, $(2\pi\mathrm{i}/h)(xy-yx)$ 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, 而发现只存在离散的能量值. 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*

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

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

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

所以在 n_k 比 α_k 大得多的极限范围内,

$$\begin{aligned}\nu(n_1\cdots n_f;m_1\cdots m_f)&=\frac{1}{h}[H(n_1\cdots n_f)\\&-H(n_1-\alpha_1,\cdots,n_f-\alpha_f)]\sim\alpha_1\frac{\partial H}{\partial n_1}\\&+\cdots+\alpha_f\frac{\partial H}{\partial n_f}=\alpha_1\nu_1+\cdots+\alpha_f\nu_f.\end{aligned}$$

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 $(n_1-m_1)\nu_1+\cdots+(n_f-m_f)\nu_f$

* 这里忽略了可能的简并.

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,

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

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. $(2\pi i/h)\cdot(xy-yx)$ 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*

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

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.

* 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.

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

$$[p_k q_l] = \left\{ \begin{matrix} 1 & \text{当 } k = l \\ 0 & \text{当 } k \neq l \end{matrix} \right\}, \quad [p_k p_l] = 0, \quad [q_k q_l] = 0.$$

所以在量子理论中假定对共轭变量也有类似的关系式, 即

$$\left. \begin{aligned} & p_k q_l - q_l p_k = \begin{cases} \dfrac{h}{2\pi \mathrm{i}} 1, & \text{当 } k = l, \\ 0, & \text{当 } k \neq l, \end{cases} \\ & p_k p_l - p_l p_k = 0, \\ & q_k q_l - q_l q_k = 0. \end{aligned} \right\} \tag{15}$$

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

$$\dot{p}_k = [H p_k], \quad \dot{q}_k = [H q_k].$$

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*

$$\left. \begin{aligned} \dot{p}_k &= \frac{2\pi \mathrm{i}}{h} (H p_k - p_k H), \\ \dot{q}_k &= \frac{2\pi \mathrm{i}}{h} (H q_k - q_k H). \end{aligned} \right\} \tag{16}$$

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, 而在任何其他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

* 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:

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

于是立即就可得出更有用的形式 (16).

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

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

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

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

所以任一量 x 的时间导数都可以根据方程

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

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

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

以上概述了微粒图像的数学工具. 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) 使用微粒图像, 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 态的概率. 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, 我们就得到跃迁概率

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

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米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米矩阵 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 $\mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}(H_n-H_m)t}$, 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米矩阵是能够找到的, 这个问题就归结为寻求这样一个变换函数 S, 使得

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

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 (希尔伯特空间) 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

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

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 $U_0(u_1^{(0)}, u_2^{(0)}, \cdots)$ 到一个新坐标系 $U(u_1, u_2, \cdots)$ 的变换, 用原来的矢量来表示新矢量的线性方程为

$$u_n = \sum_m S(mn)u_m^{(0)}. \tag{26}$$

于是在新坐标系中, 确定任一矢量 t 的分量 t_n 和任一矩阵 q 的分量 $q(nm)$ 的方程为

$$t_n^{(0)} = \sum_m S(nm)t_m, \tag{27}$$

$$q(nm) = \sum_{k,l} S^{-1}(nk)q^{(0)}(kl)S(lm), \tag{28}$$

其中 S^{-1} 是与 (27) 式相反的变换 $t_n=\sum_m S^{-1}(nm)t_m^{(0)}$ 的矩阵 (假定 S 是非奇异的). 特别重要的是所谓 "幺正" 变换, 即使幺正空间中类似距离的二次齐次式 $\sum_n t_n t_n^*$ 保持不变的变换. 很容易验证, 对于这种幺正变换,

$$\sum_k S(nk)S^*(mk)=\sum_k S(kn)S^*(km)=\delta_{nm},$$

即 $S^{-1}=\widetilde{S}^*$, 或

$$S\widetilde{S}^*=\widetilde{S}^*S=1. \tag{29}$$

在幺正空间中, 它们就是与实三维空间中直角坐标系转动类似的变换.

现在我们看到, 根据量子的乘法规则 (12), (23) 式和 (28) 式的形式完全相同, 因而可以把 p_k,q_k 看成是用新坐标系 U 表示的与 $p_k^{(0)},q_k^{(0)}$ 相同的矩阵或张量, 新坐标与坐标系 U_0 中的原坐标的关系为 (27) 式. 于是 (25) 式表示对于变换矩阵 S 的一个条件, 要求在新坐标系中张量 H 成为对角形的, 即要求新坐标系的坐标矢量就是 H 的主轴. 只考虑幺正变换 [满足 (29) 式的 S] 就够了, 因为大家知道, 在此条件下的主轴变换问题, 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

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

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, 就归结为厄米矩阵 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

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

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 1 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上是正确的*. 不过无限维矩阵的情况有一个重要的差别: 除了迄今我们只讨论过的不连续序列的值以外, 本征值

* 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.

"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. 为此我们用狄拉克[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

$$pq(nm) = \int \mathrm{d}k p(nk) q(km),$$

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, 狄拉克引入函数 $\delta(\xi)$, 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,

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

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

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

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

其中 $f(\xi)$ 是任一正规函数, 而 $\delta'(\xi) = (\mathrm{d}/\mathrm{d}\xi)\delta(\xi)$. (36) 式是用分部积分法得到的. 另外, 由于当 $a \neq b$ 时

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

和

$$\int \mathrm{d}b \int \delta(a-\xi)\delta(\xi-b)\mathrm{d}\xi = \int \delta(a-\xi)\mathrm{d}\xi \int \delta(\xi-b)\mathrm{d}b = 1,$$

所以还有

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

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

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

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

$$x(x'x'') = x'\delta(x_1'-x_1'')\delta(x_2'-x_2'')\cdots\delta(x_f'-x_f''). \tag{39}$$

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? 根据厄米式的理论, 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 (狄拉克[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

$$q_k = q'_k\delta(q'_1 - q''_1)\cdots\delta(q'_f - q''_f), \tag{40a}$$

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

$$p_k(q'q'') = \frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\delta'(q'_k - q''_k)\delta(q'_1 - q''_1)\cdots$$
$$\times\delta(q'_{k-1} - q''_{k-1})\delta(q'_{k+1} - q''_{k+1})\cdots\delta(q'_f - q''_f), \tag{40b}$$

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

$$\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\int \mathrm{d}q'''[\delta'(q' - q''')q'''\delta(q''' - q'')$$
$$-q'\delta(q' - q''')\delta'(q''' - q'')],$$

分部积分后第一项成为

$$\int \mathrm{d}q'''\delta(q' - q''')\frac{\partial}{\partial q'''}[q'''\delta(q''' - q'')]$$
$$= \int \mathrm{d}q'''[q'''\delta'(q''' - q'')\delta(q' - q''')$$
$$+\delta(q' - q''')\delta(q''' - q'')].$$

所以

$$(pq - qp)(q'q'') = \frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\int \mathrm{d}q'''[(q''' - q')\delta(q' - q''')$$
$$\times\,\delta'(q''' - q'')] + \frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\int \delta(q' - q''')\delta(q''' - q'')\mathrm{d}q'''.$$

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

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

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

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

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

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

其中的 $F\left(\dfrac{h}{2\pi\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial q'_k}, q'_k\right)$ 是对 F 作下列代换

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

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

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

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

$$F_1F_2 = \int F_1(q'q''')F_2(q'''q'')\mathrm{d}q''',$$

代入 (42) 式, 可得

$$\begin{aligned}
&\iint F_1(q'q''')\mathrm{d}q'''F_2(q'''q'')\mathrm{d}q''S(q''F') \\
&= \int F_1(q'q''')\mathrm{d}q''' \int F_2(q'''q'')S(q''F')\mathrm{d}q'', \\
&= \int F_1(q'q''')\mathrm{d}q'''F_2\left(\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'''}, q'''\right)S(q'''F'), \\
&= F_1\left(\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}, q'\right)F_2\left(\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}, q'\right)S(q'F'), \\
&= F_1F_2\left(\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}, q'\right)S(q'F'),
\end{aligned}$$

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:

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

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' 的某些确定的离散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 ($\widetilde{S}^* = S^{-1}$) 在确定方程 (44) 的解的性质时很重要. 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

$$\int S^*(q'F')S(q'F'')\mathrm{d}q' = \delta(F' - F''), \tag{45}$$

$$\int S^*(q'F')S(q''F')\mathrm{d}F' = \delta(q' - q''). \tag{46}$$

当本征值谱中包括离散的部分时, 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

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

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 $p_k^{(0)}, q_k^{(0)}$.

对于离散本征值谱的典型情况, 正交条件 (45) 成为

$$\int \psi^*_{W'}(q)\psi_{W''}(q)\mathrm{d}q = 0, \quad \text{当 } W' \neq W'' \text{ 时}, \tag{48}$$

和

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

(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相位因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_W}$, 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

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

$$q(W'W'') = \int \psi^*_{W'}(q) q \psi_{W''}(q) \mathrm{d}q. \tag{51}$$

(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

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

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

$$\left.\begin{aligned}
&H_0S_0 = S_0W_0,\\
&H_0S_1 - S_1H_0 + H_1S_0 = S_0W_1,\\
&H_0S_2 - S_2H_0 + H_1S_1 - S_1W_1 + H_2S_0 = S_0W_2,\\
&\qquad\vdots\\
&H_0S_r - S_rH_0 + F_r(S_1\cdots S_{r-1}, H_1\cdots H_{r-1}) = S_0W_r,\\
&\qquad\vdots
\end{aligned}\right\} \tag{56}$$

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

$$S_0(nm)[H_0(nn) - H_0(mm)] = S_0(nm)h\nu_0(nm) = 0, \tag{57}$$

其中 $\nu_0(nm)$ 是未受微扰系统的频率*. 在这里, 我们必须把未受微扰的系统区分为非简并的和简并的两种情形. 对前者 (当 $n \neq m$ 时 $\nu_0(nm) \neq 0$) 从方程 (57) 马上可以推得 S_0 为一对角矩阵; 而对后者 S_0 的非对角项就不一定为零. 因为对这两种情形的处理不一样, 下面我们先假设未受微扰的系统是非简并的.

当 S_0 为对角矩阵时, (55) 式要求 $|S_0(nn)| = 1$; 因此, 不考虑那在 S 中总会出现的不定相位, 我们可以取 $S_0 = 1$. 于是 (56) 的第二个方程成为

$$H_0S_1 - S_1H_0 + H_1 = W_1,$$

或者, 写成矩阵元的形式

$$h\nu_0(nm)S_1(nm) + H_1(nm) = W_1(nm)\delta_{nm}. \tag{58}$$

这个方程的对角部分确定了第一级近似的微扰能量

$$W_1(nn) = H_1(nn). \tag{59}$$

* 为了简单起见, 假设所有矩阵的指标都不连续. 对于指标连续的情形, 从而对于薛定谔方程, 这方法也同样适用.

当 $n \neq m$ 时方程 (58) 确定了 S_1 的非对角元; 由方程 (58) 并不能确定 S_1 的对角元, 但是若令它为零, 则条件 $S\widetilde{S}^* = 1$ 就可以满足到第一级近似. 所以

$$S_1(nm) = -\frac{H_1(nm)}{h\nu_0(nm)}(1 - \delta_{nm}).$$

需要指出, 这些结果与经典力学中微扰理论的结果是类似的. 特别是 (59) 式对应于一个著名的经典定理: 对于第一级近似, 微扰函数等于微扰能量的平均, 因为 H_1 的对角元正是它的时间平均. 这方程可以相应地写成

$$W_1 = \overline{H}_1.$$

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

$$\overline{H}_1 S_0 = S_0 W_1, \tag{60}$$

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, 每列只差一个相位因子没有确定. 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

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

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_{I} 的久期方程. 这就得到与方程 (61) 相当的方程

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

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

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

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

ϕ 是实数, 不能由 "归一化"条件 $S\widetilde{S}^*=1$ 定下来. 因而正交矩阵

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

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

$$\begin{aligned} H_1(nm;nm)&=H_1(mn;mn),\\ H_1(nm;mn)&=H_1(mn;nm). \end{aligned}$$

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

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

归一化以后, 算出相应的 s 矩阵为

$$\begin{matrix} & (a) & (b) \\ nm & & \\ mn & & \end{matrix}\left\|\begin{matrix} \dfrac{1}{\sqrt{2}} & -\dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}} & \dfrac{1}{\sqrt{2}} \end{matrix}\right\|. \tag{66}$$

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 $W_{\mathrm{I}}(n)$, 或者为 $W_{\mathrm{I}}(m)$, 在这两者之间的跃迁概率仍然依赖于耦合的强度; 因而 $H_{\mathrm{I}}(t)$ 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 $H_{\mathrm{I}}(t)$ 或 $H_{\mathrm{I}}(t)$ 的任何函数的时间平均及方均涨落.

计算 $H_{\mathrm{I}}(t)$ 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

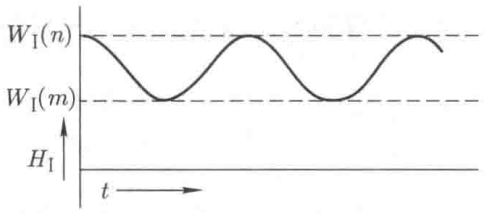

图 21

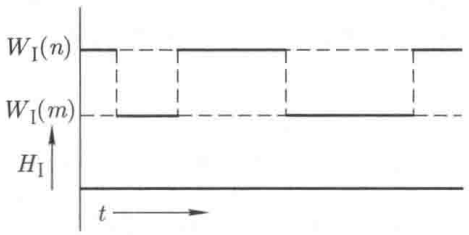

图 22

(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 $f(H_{\mathrm{I}})$ 的对角矩阵元 $f(W_{\mathrm{I}}(n))$ 与 $f(W_{\mathrm{I}}(m))$ 来计算在态 a 中的平均值 $\overline{f(H_{\mathrm{I}})_a}$:

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

假设 $f(H_{\mathrm{I}})$ 只能取值 $f(W_{\mathrm{I}}(n))$ 和 $f(W_{\mathrm{I}}(m))$, 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 $f(W_{\mathrm{I}}(n))$ 和 $f(W_{\mathrm{I}}(m))$ 是在 $f(H_{\mathrm{I}})$ 为对角形的坐标系中 $f(H_{\mathrm{I}})$ 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 $f(H_{\mathrm{I}})$ 的值为 $f(W_{\mathrm{I}}(n))$ 的相对概率为 $|S(nk;a)|^2$ 这个假设的一个结果 (指标 (nk) 相当于值 $f(W_{\mathrm{I}}(n))$, 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概率是恰当的.

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*, 则 $f(\alpha)$ 的时间平均值就一定是 (67) 的样子, 即

* 这里还是采用对角矩阵元来标示行与列.

$f(\alpha)$ 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矩阵的物理诠释[29]:

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' 的相对概率.

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概率; 它们本身可以称为 "概率幅". 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, 概率幅 $S(\alpha'\gamma')$ 总可以与 γ 完全无关地表示成概率幅 $S(\alpha'\beta')$ 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' 的概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 $c_{W'}$ 是常量, 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' 的概率 $|S_{W'}(\alpha')|^2$ 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他量) 却不然. $S(\alpha')$ 随时间变化的恰当关系可由下述考虑推出:

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 $\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}(W_n-W_m)t}$. 因为从任一别的坐标系到这一坐标系的变换为

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

若每个矩阵元 $S(\alpha' n)$ 的时间因子为 $\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}W_n t}$, 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.

因为最一般的概率幅 $S(\alpha')$ 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, $SW=-(h/2\pi\mathrm{i})(\partial S/\partial t)$, $S(\alpha')$ 的方程成为

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

特别是当 α 取成坐标 q 时, 这就成为薛定谔波动方程

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

形如 $\psi_{W'}(q)=u_{W'}(q)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}W't}$ 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), 最一般的概率幅为

$$\psi=\sum_{W'}c_{W'}u_{W'}\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}W't}. \tag{74}$$

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) 中只有相位 ϕ_a 和 ϕ_b 包含时间. 代入方程 (72), 因为常量振幅的矩阵 s 满足方程 $Hs+sW=0$, 我们得到

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

因此 $\phi_a=-(2\pi\mathrm{i}/h)\cdot W_a t+$常量, $\phi_b=-(2\pi\mathrm{i}/h)\cdot W_b t+$常量, 而方程 (70) 的本征解为 $S(nk;a)=$常量 $\times\, s(nk;a)\times\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}W_a t}$, 等等, 于是, 根据方程 (70), 一般的概率幅为

$$S(nk)=c_a s(nk;a)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}W_a t}+c_b s(nk;b)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}W_b t},$$
$$S(mi)=c_a s(mi;a)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}W_a t}+c_b s(mi;b)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}W_b t},$$

其中的 c 为常量, 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

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

对于两个原子等同的特殊情形, s 取 (66) 的形式,

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

由此得到概率为

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

这些公式给出了发现 (nm) 或者 (mn) 的概率, 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, 概率变化得很慢. 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概率函数的诠释, 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. 辐射的粒子图像

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像不同, 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像才能表述这种相互作用, 所以, 看起来从波动图像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, 假定这个体系只有离散的本征值谱, 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 $\psi_\alpha(r)$, 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 (玻尔兹曼统计法) 中, n 个粒子在 n 个不同态中分布的相对概率为 $n!$, 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. 这种跃迁的概率总可写成一个形如

$$\int f(1,2)\psi_s(1,2)\psi_a(1,2)\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2 \tag{79}$$

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他的量都保持不变, 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米 – 狄拉克[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, 其本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 – 费米 – 狄拉克统计法. 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 $+\dfrac{1}{2}$ 和 $-\dfrac{1}{2}$.

波动图像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像: 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作物质波的时间 – 空间 (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 $E_{\text{动}}=(1/2\mu)(p_x^2+p_y^2+p_z^2)$ 和势能 $E_{\text{势}}=-eV$ 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

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

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

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

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, 就像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量, 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

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

它具有解

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

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

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

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

$$v_g = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}p} = \frac{p}{\mu} = \frac{h}{\lambda\mu}. \tag{85}$$

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像. 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, 我们仍然只能看作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:

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

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 $\rho, \boldsymbol{\sigma}$ 和 u 服从下述对任何经典理论都必须要求的守恒定律:

$$\text{电荷守恒:}\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int \rho \mathrm{d}v = 0, \tag{87a}$$

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

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

在这些方程中, $\mathrm{d}v$ 是体积元, 积分遍于整个空间. 假定在无限大球面上 ψ 为零, 因此只要应用格林定理, 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林定理即得. 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 ψ, 然后相减, 并像前面一样地积分. 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

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

因为从条件

$$\iint L\mathrm{d}v\mathrm{d}t = \text{极值}$$

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

$$H=\int\mathscr{H}\mathrm{d}v=\text{常量}. \tag{91}$$

其证明如下: 从方程 (90), (88) 和 (87c), 有

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}&=\int\mathrm{d}v\left[\frac{\partial u}{\partial t}-\frac{1}{4\pi}V\frac{\partial}{\partial t}(\nabla V\cdot\nabla V)\right],\\&=\int\mathrm{d}v\left[\frac{\partial u}{\partial t}-V\frac{\partial}{\partial t}(e\psi\psi^*)\right],\\&=0.\end{aligned}$$

这个按照经典场论模型建立起来的自洽时空理论, 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

$$\int\rho\mathrm{d}v=-e\int\psi^*\psi\mathrm{d}v \tag{92}$$

可以取任何想给的数值, 而不只是 $-e,-2e,-3e,\cdots$ 等值, 像原子 (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 $\int p_k\mathrm{d}q_k=n_kh$ 引入到经典力学中一样, 哈特里[37] 把 "量子条件"

$$\int\psi_k^*\psi_k\mathrm{d}v=n_k \tag{93}$$

加到现在的这个场论上*, 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

* 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.

论. 它不包含丝毫量子的成分, 能量 $\int(\boldsymbol{E}^2+\boldsymbol{H}^2)\mathrm{d}v$ 是连续变量这一事实就是证明. 要避开这一困难, 也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, 那么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

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

而波动方程就是相应的欧拉方程

$$\frac{\partial L}{\partial\psi_\alpha}-\sum_i\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial L}{\partial\left(\dfrac{\partial\psi_\alpha}{\partial x_i}\right)}-\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial L}{\partial\dot{\psi}_\alpha}=0$$
$$(\alpha=1,2,\cdots).\tag{95}$$

质点系的经典力学可以完全从哈密顿变分原理

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

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

$$\overline{L}=\int L\left(\psi_\alpha,\frac{\partial\psi_\alpha}{\partial x_i},\dot{\psi}_\alpha\right)\mathrm{d}v,\tag{97}$$

就可以把 (94) 写成

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

$L(q_k,\dot{q}_k)$ 依赖于 q_k, 指标 k 取所有可能的值, 而现在的 $\overline{L}(\psi_\alpha,(\partial\psi_\alpha/\partial x_i),\dot{\psi}_\alpha)$ 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, 这两个量就是完全类似的. 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: 一个离散的集合 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).

现在欧拉方程 (95) 可以用拉格朗日函数 $\overline{L}$ 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

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

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

和

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

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

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

因为显然有

$$\frac{\delta\overline{L}}{\delta\dot{\psi}_\alpha}=\frac{\partial L}{\partial\dot{\psi}_\alpha},$$

欧拉方程成为

$$\frac{\delta\overline{L}}{\delta\psi_\alpha}-\frac{\partial}{\partial t}\frac{\delta\overline{L}}{\delta\dot{\psi}_\alpha}=0,\tag{102}$$

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

$$\Pi_\alpha = \frac{\delta \overline{L}}{\delta \dot{\psi}_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}_\alpha} \tag{104}$$

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

$$\overline{H} = \int \sum_\alpha \Pi_\alpha \dot{\psi}_\alpha \mathrm{d}v - \overline{L}. \tag{105}$$

与 L 和 $\overline{L}$ 之间的关系类似地,

$$\overline{H} = \int H \mathrm{d}v, \tag{106}$$

其中

$$H = \sum_\alpha \Pi_\alpha \dot{\psi}_\alpha - L. \tag{107}$$

这时波动方程 (95) 就取哈密顿形式

$$\dot{\psi}_\alpha = \frac{\delta \overline{H}}{\delta \Pi_\alpha}, \quad \dot{\Pi}_\alpha = -\frac{\delta \overline{H}}{\delta \psi_\alpha}. \tag{108}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}\overline{H}}{\mathrm{d}t} = 0, \tag{109}$$

而表达动量守恒的方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int \sum_\alpha \Pi_\alpha \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial x_i} \mathrm{d}v = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \tag{110}$$

则得自 (108) 和 (101), 因为

$$\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int \mathrm{d}v \sum_\alpha \Pi_\alpha \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial x_i} = \int \mathrm{d}v \left(\Pi_\alpha \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\delta \overline{H}}{\delta \Pi_\alpha} - \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\delta \overline{H}}{\delta \psi_\alpha} \right), \\ &= -\int \mathrm{d}v \sum_\alpha \left(\frac{\partial \Pi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\delta \overline{H}}{\delta \Pi_\alpha} + \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial x_i} \frac{\delta \overline{H}}{\delta \psi_\alpha} \right), \\ &= -\int \mathrm{d}v \frac{\partial H}{\partial x_i} = 0. \end{aligned}$$

在这两种情形中, 都假定除了 Π_α, ψ_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尔伯特空间中表示成矩阵 (狄拉克把这种量称为 "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:

$$\left.\begin{aligned} &\Pi_\alpha(P)\psi_\beta(P') - \psi_\beta(P')\Pi_\alpha(P) = \boldsymbol{\delta}_{\alpha\beta}\boldsymbol{\delta}(P-P')\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}, \\ &\Pi_\alpha(P)\Pi_\beta(P') - \Pi_\beta(P')\Pi_\alpha(P) = 0, \\ &\psi_\alpha(P)\psi_\beta(P') - \psi_\beta(P')\psi_\alpha(P) = 0. \end{aligned}\right\} \tag{111}$$

于是在波场的这一量子理论中, 时空坐标 x, y, z, t 都是参数 (像粒子理论中的时间一样); 所以它们是在通常意义下的数 (狄拉克称之为 "c 数"), 而且当然是互相对易并与一切其他量对易的.

守恒定律

$$\overline{H} = \text{常量}, \quad \int \sum_\alpha \Pi_\alpha \frac{\partial \psi_\alpha}{\partial x_i}\mathrm{d}v = \text{常量} \tag{112}$$

依然有效, 这利用关系 (111) 不难证明.

在数学上处理一个由方程 (108) 和 (111) 所定义的波动问题, 最简单的方法是把波函数用一适当选择的正交函数系 $u_\alpha^r(P)$ 来展开:

$$\psi_\alpha = \sum_r a_r(t)u_\alpha^r(P), \quad \Pi_\alpha = \sum_r b_r(t)u_\alpha^r(P). \tag{113}$$

$u_\alpha^r(P)$ 是通常的 c 数, 而系数 a_r, b_r 则必须看作是依赖于时间的 q 数.

为了使得用这种形式写出的 ψ_α 与 Π_α 服从对易关系 (111), a_r 与 b_r 必须满足对易关系:

$$\left.\begin{aligned} &b_s a_r - a_r b_s = \frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\delta_{rs}, \\ &a_s a_r - a_r a_s = 0, \\ &b_s b_r - b_r b_s = 0, \end{aligned}\right\} \tag{114}$$

它们在形式上与 (15) 式相似. 这只要把展开式 (113) 代入 (111) 式, 两边都乘以 $u_\alpha^s(P)u_\beta^r(P')$, 对 P 和 P' 积分, 对 α 和 β 求和, 就立即可以证明. 在积分中必须运用 u_α^r 的正交关系

$$\int \mathrm{d}v_P \sum_\alpha u_\alpha^r(P)u_\alpha^s(P) = \delta_{rs}.$$

现在可以用 a_r 与 b_r 来表达哈密顿函数 H 和运动方程 (108). 于是前面叙述过的求解量子动力学问题的方法在这里也适用 —— 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

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

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 $(h/4\pi\mathrm{i})(\partial/\partial t)(\psi^*\psi)$ 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

$$L=-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi-\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^*$$
$$+\frac{1}{8\pi}\nabla V_1\cdot\nabla V_1+e(V_0+V_1)\psi^*\psi \tag{116}$$

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

$$V_1(P)=-e\int G(PP')\psi^*(P')\psi(P')\mathrm{d}v_{P'}, \tag{117}$$

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林函数 (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

$$L=-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi-\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\partial\psi}{\partial t}\psi^*-eV_0\psi^*\psi$$
$$-\frac{e^2}{2}\int\mathrm{d}v_{P'}\psi^*(P)\psi(P)\psi^*(P')\psi(P')G(PP'). \tag{118}$$

与 ψ 共轭的动量是 [见 (104) 式]

$$\Pi = \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} = -\frac{h}{2\pi \mathrm{i}}\psi^*,$$

从而哈密顿函数为

$$H = -\frac{h}{2\pi \mathrm{i}}\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} - L,$$

它给出了

$$\begin{aligned}\overline{H} = &\int \mathrm{d}v \left[\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi - eV_0\psi^*\psi\right] \\ &+\frac{e^2}{2}\iint \mathrm{d}v_P \mathrm{d}v_{P'} G(PP')\psi^*(P)\psi(P)\psi^*(P')\psi(P'). \end{aligned} \tag{119}$$

引入对易关系

$$\left.\begin{aligned}&\psi(P)\psi^*(P') - \psi^*(P')\psi(P) = \delta(P-P'), \\ &\psi(P)\psi(P') - \psi(P')\psi(P) = 0, \\ &\psi^*(P)\psi^*(P') - \psi^*(P')\psi^*(P) = 0,\end{aligned}\right\} \tag{120}$$

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. 约当与克莱因[38]发现物质波的恰当的哈密顿函数为

$$\begin{aligned}\overline{H} = &\int \mathrm{d}v \left[\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\nabla\psi^* \cdot \nabla\psi - eV_0\psi^*\psi\right] \\ &+\frac{e^2}{2}\iint \mathrm{d}v_P \mathrm{d}v_{P'} G(PP')\psi^*(P)\psi^*(P')\psi(P)\psi(P'). \end{aligned} \tag{121}$$

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 给定为厄米矩阵的函数, 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

$$-e\int \mathrm{d}v\psi^*\psi$$

仍然还是一个时间常量, 这很容易证明, 只要表明它与 $\overline{H}$ 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

$$\left.\begin{aligned} \psi = \sum_r a_r u_r(P), \quad \psi^* = \sum_r a_r^* u_r^*(P), \\ \int u_r u_s^* \mathrm{d}v = \delta_{rs}, \end{aligned}\right\} \tag{122}$$

a_r 和 a_r^* 满足与 (114) 式类似的对易关系:

$$\left.\begin{aligned} a_r a_s^* - a_s^* a_r = \delta_{rs}, \\ a_r a_s - a_s a_r = 0, \\ a_r^* a_s^* - a_s^* a_r^* = 0. \end{aligned}\right\} \tag{123}$$

为了满足上述对易关系, 我们令

$$a_r = \mathrm{e}^{-\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}\theta_r} N_r^{\frac{1}{2}}, \quad a_r^* = N_r^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}\theta_r}, \tag{124}$$

并且要求 N_r 和 θ_r 是满足下列对易关系

$$\theta_r N_s - N_s \theta_r = \delta_{rs}$$

的厄米算符. 于是可以证明

$$\mathrm{e}^{-\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}\theta_r} f(N_r) = f(N_r + 1)\mathrm{e}^{-\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}\theta_r}, \tag{125}$$

并且 N_r 的本征值都是正整数. 再从 (122) 式就推出

$$e \int \mathrm{d}v \psi^* \psi = e \int \mathrm{d}v \sum_{r,s} a_r^* a_s u_r^* u_s$$

$$= e \sum_{r,s} a_r^* a_s \delta_{rs} = e \sum_r N_r.$$

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量, 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, $\sum N_r$ 也是常量). 约当与克莱因[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 ψ 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)] 在相应的粒子图像中要求玻色 – 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:

$$\left.\begin{aligned}&\psi(P)\psi^*(P')+\psi^*(P')\psi(P)=\delta(P-P'),\\&\psi(P)\psi(P')+\psi(P')\psi(P)=0,\\&\psi^*(P)\psi^*(P')+\psi^*(P')\psi^*(P)=0.\end{aligned}\right\}\tag{126}$$

根据约当与维格纳[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米 – 狄拉克统计法.

11. 粒子图像的量子论与波动图像的量子论在数学上等价的证明

粒子图像和波动图像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像来进行诠释.

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, 粒子图像的薛定谔方程可以写成

$$\left\{\sum_{n=1}^{N}O^n+\sum_{n>m}^{N}O^{nm}+\cdots+\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial t}\right\}\varphi(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)=0,\tag{127}$$

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:

$$\varphi(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)=\sum_{r_1,\cdots,r_N}b(r_1,\cdots,r_N,t)u_{r_1}(\boldsymbol{x}_1)\cdots u_{r_N}(\boldsymbol{x}_N).\tag{128}$$

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 态等等的概率. 如果把 φ 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:

$$\begin{aligned} 0 = & \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial t} b(s_1, s_2, \cdots, s_N, t) \\ & + \sum_n \sum_{r_n} O^n_{s_n r_n} b(s_1 \cdots r_n \cdots s_N) \\ & + \sum_{n>m} \sum_{r_n r_m} O^{nm}_{s_n s_m; r_n r_m} b(s_1 \cdots r_n \cdots r_m \cdots s_N) + \cdots . \end{aligned} \tag{129}$$

这里用到了 $u_r(\boldsymbol{x})$ 的正交关系, 而量

$$O^n_{s_n r_n} = \int u_{s_n} O^n u_{r_n} \mathrm{d}v_n,$$

$$O^{nm}_{s_n s_m; r_n r_m} = \iint u_{s_n} u_{s_m} O^{nm} u_{r_n} u_{r_m} \mathrm{d}v_n \mathrm{d}v_m,$$

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概率为 $Z^2 = N!/(N_1!N_2!\cdots)$, 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 $\mathrm{e}^{-\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}\theta_r}$ 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

$$\begin{aligned} 0 = & \left\{ \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{s,r} N_s O_{sr} \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}(\theta_s - \theta_r)} \right. \\ & + \frac{1}{2} \sum_{ss';rr'} N_s (N_{s'} - \delta_{ss'}) O_{ss';rr'} \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}(\theta_s + \theta_{s'} - \theta_r - \theta_{r'})} \\ & \left. + \cdots \right\} \frac{1}{Z} b(N_1, N_2, \cdots). \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} 0 = & \left\{ \frac{h}{2\pi \mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{s,r} N_s^{\frac{1}{2}} (N_r - \delta_{rs} + 1)^{\frac{1}{2}} O_{sr} \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}(\theta_s - \theta_r)} \right. \\ & + \frac{1}{2} \sum_{ss';rr'} N_s^{\frac{1}{2}} (N_{s'} - \delta_{ss'})^{\frac{1}{2}} (N_r + 1 - \delta_{rs} - \delta_{rs'})^{\frac{1}{2}} O_{ss'rr'} \\ & \left. (N_{r'} + 1 + \delta_{rr'} - \delta_{r's} - \delta_{r's'})^{\frac{1}{2}} \cdot \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{h}(\theta_s + \theta_{s'} - \theta_r - \theta_{r'})} + \cdots \right\} b(N_1, N_2, \cdots). \end{aligned} \tag{131}$$

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

$$\overline{H}=\int \mathrm{d}v_P\psi_P^* O^P\psi_P+\frac{1}{2}\iint \mathrm{d}v_P\mathrm{d}v_{P'}\psi_{P'}^*\psi_P^* O^{P'P}\psi_{P'}\psi_P+\cdots .$$

利用 (122), 这也可以写成

$$\overline{H}=\sum_{s,r} a_s^* a_r O_{sr}+\frac{1}{2}\sum_{ss';rr'} a_s^* a_{s'}^* a_r a_{r'} O_{ss';rr'}+\cdots .$$

然后将 (124) 式代入方程

$$\overline{H}S+\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\partial S}{\partial t}=0,$$

我们就得到

$$\begin{aligned}0=\Bigg\{&\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{s,r} N_s^{\frac{1}{2}} O_{sr}\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}(\theta_s-\theta_r)}N_r^{\frac{1}{2}}\\&+\frac{1}{2}\sum_{ss';rr'} N_s^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\theta_{s'}}O_{ss';rr'}\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\theta_r}N_r^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\theta_{r'}}N_r^{\frac{1}{2}}\\&+\cdots\Bigg\}S(N_1,N_2,\cdots).\end{aligned}$$

把算符 $\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\theta}$ 对易到右面, 得到

$$\begin{aligned}0=\Bigg\{&\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial t}+\sum_{s,r} N_s^{\frac{1}{2}}(N_r-\delta_{sr}+1)^{\frac{1}{2}}O_{sr}\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}(\theta_s-\theta_r)}\\&+\frac{1}{2}\sum_{ss';rr'} N_s^{\frac{1}{2}}(N_{s'}-\delta_{ss'})^{\frac{1}{2}}(N_r+1-\delta_{rs'}-\delta_{rs})^{\frac{1}{2}}O_{ss'rr'}\\&(N_{r'}+1+\delta_{rr'}-\delta_{r's}-\delta_{r's'})^{\frac{1}{2}}\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}(\theta_s+\theta_{s'}-\theta_r-\theta_{r'})}+\cdots\Bigg\}S.\end{aligned}\tag{132}$$

这个方程与方程 (131) 完全相同, 因此就证明了粒子图像和波动图像在数学上是等价的. 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.

尽管微粒图像和波动图像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 ($\Phi_4=\mathrm{i}\Phi_0, x_4=\mathrm{i}ct$) 的分量; 因而若用势函数明写出来, 拉格朗日函数就成为

$$L=\frac{1}{8\pi}\left[\sum_i\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\Phi_i}{\partial t}+\frac{\partial\Phi_0}{\partial x_i}\right)^2-\sum_{i>k}\left(\frac{\partial\Phi_i}{\partial x_k}-\frac{\partial\Phi_k}{\partial x_i}\right)^2\right]+\sum_\alpha\Phi_\alpha s_\alpha \tag{133}$$

(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

$$\Pi_i=\frac{\partial L}{\partial\dot{\Phi}_i}=\frac{1}{4\pi c}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\Phi_i}{\partial t}+\frac{\partial\Phi_0}{\partial x_i}\right)=\frac{1}{4\pi c}E_i. \tag{134}$$

因为光量子遵从玻色 – 爱因斯坦统计法, 所以恰当的对易关系是

$$E_i(P)\Phi_\alpha(P')-\Phi_\alpha(P')E_i(P)=-2hc\mathrm{i}\delta(P-P')\delta_{i\alpha},$$

微分后给出

$$\left.\begin{aligned}&E_i(P)E_k(P')-E_k(P')E_i(P)=0,\\&H_i(P)H_k(P')-H_k(P')H_i(P)=0,\\&E_i(P)H_k(P')-H_k(P')E_i(P)=-2hc\mathrm{i}\frac{\partial\delta(P-P')}{\partial x_j},\end{aligned}\right\} \tag{135}$$

其中 i,j,k 是 $1,2,3$ 的任意循环排列.

这里出现一个困难的情况, 即 $\dot{\Phi}_0$ 并不出现在拉格朗日函数中; 不过, 这只影响势函数与场分量之间的对易关系, 而不影响对易关系 (135).

如果把 Φ_α 按一组适当选择的正交函数 (如在一闭合腔中的驻波) 展开, 则频率为 ν 的振动所包含的能量就是 $h\nu$ 的整数倍. 狄拉克[19] 曾经指出, 这使得我们有可能把在每一态中的光量子数目当作系统的变量; 于是这就与粒子图像建立了联系.

参考文献

[1] C. T. R. Wilson, *Proc. Roy. Soc.*, **A85**, 285 (1911); 同见 Jahrbuch d. Radioakt. **10**, 34 (1913).

[2] Davisson and 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 and 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). 亦见 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] 以及 *Naturwiss.*, **17**, 483 (1929) 和 **18**, 73 (1930); 进一步见 Atomteoriog Naturbeskrivelse, Festschrift der Kopenhagener Universität 1929.

[14] M. Born, *ZS. f. Phys.*, **38**, 803 (1926). 亦见 N. F. Mott, *Proc. Roy. Soc.*, **A126**, 79 (1930).

[15] Duane, *Proc. Nat. Acad.*, **9**, 158 (1923).

[16] A. Einstein, *Sitzungsber. d. preuβ. Akad.*, **334** (1926). A. Rupp, *Sitzungsber. d. preuβ. 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 und 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 and L. Rosenfeld, *Kgl. Dansk Vidensk. Selskab. Math. -fys. Medd.* **XII**, 8 (1933).

* 此文献见德文 1944 年版. —— 中译者

人名和术语索引

(按汉语拼音字母顺序排列)

A

α 射线 α-Strahlen 2, 41.

爱因斯坦 Einstein 6, 24, 39, 57.

B

变换理论 Transformationstheorie 35, 72.

并协性 Komplementarität 39.

波包 Wellenpaket 9, 20, 22, 24, 41.

波包的发散 Zerstreuung von Wellenpaketen 9, 23.

波动理论 Wellentheorie 29, 92.

波动图像的测不准关系 Unbestimmtheitsrelationen im Wellenbild 29.

玻尔 Bohr 7, 9, 13, 17, 21, 28, 39, 48, 63.

玻恩 Born 21, 35, 43.

玻色 – 爱因斯坦统计法 Bose-Einstein-Statistik 35, 57, 90, 104, 106.

玻特 Bothe 56.

布赖特 Breit 53.

C

纯态 Reiner Fall 36.

D

达尔文 Darwin 43.

戴维孙 Davisson 3, 47, 50.

德布罗意 De Broglie 4, 29, 92, 93.

德布罗意波 De Broglie-Wellen 15, 29, 92.

狄拉克 Dirac 35, 50, 68, 99, 106.

电子碰撞 Elektronenstoβ 5.

叠加 Superposition 28, 43.

动量测量 Impulsmessung 16.

杜安 Duane 47.

对易关系 Vertauschungsrelationen 70, 99.

对应原理 Korrespondenzprinzip 50, 63.

多普勒效应 Doppler-Effekt 17, 49.

E

厄任费斯脱 Ehrenfest 23.

F

发射 Emission 50.

费米 Fermi 31, 92.

费米 – 狄拉克统计法 Fermi-Dirac-Statistik 31, 92.

弗兰克 Franck 5.

辐射的反冲 Rückstoß bei Strahlung 54.

辐射理论 Strahlungstheorie 50.

G

盖革 Geiger 56.

盖革 – 玻特实验 Geiger-Bothesches Experiment 56.

概率波包 Wahrscheinlichkeitspaket 23, 41, 43, 46.
概率的干涉 Interferenz der Wahrscheinlichkeiten 37.
革末 Germer 3, 47, 50.
共振 Resonanz 84.
共振荧光 Resonanzfluoreszenz 28.
观测 Beobachtung 36.
光的干涉 Interferenz des Lichtes 50.
光的衍射 Beugung von Licht 3.
光量子 Lichtquanten 4, 7, 14, 21, 24, 48, 50, 57, 89.
轨道概念 Bahnbegriff 21.

H

哈特里 Hartree 95, 102.
赫兹 Hertz 5.
混合态 Gemenge 36, 38.

J

菊池正士 Kikuchi 47.
矩阵 Matrizen 65.

K

凯纳德 Kennard 11.
康普顿 Compton 4, 55.
康普顿效应 Comptoneffekt 4, 17, 22, 55.
康普顿 – 西蒙实验 Compton-Simonsches Experiment 4, 55.
克莱因 Klein 50, 61, 102.

L

拉曼效应 Ramaneffekt 50.
粒子图像的测不准关系 Unbestimmtheitsrelationen im Partikelbild 9.
量子论的统计诠释 Statistische Deutung der Quanten-Theorie 35.

N

能量的测量 Energiemessung 24.

P

泡利 Pauli 91, 103, 105.
泡利不相容原理 Paulisches Ausschließungsprinzip 92.

R

茹普 Rupp 3, 47, 93.

S

闪烁 Szintillation 16.
时空描述 Raum-Zeitbeschreibung 1, 39.
势垒 Potentialschwelle 24, 62.
守恒定律 Erhaltungssätze 49, 53, 94, 99.
束缚电子 Gebundene Elektronen 19.
斯梅克尔 Smekal 50.
施特恩 – 格拉赫实验 Stern-Gerlachsches Experiment 26, 37, 49.
速度的测量 Geschwindigkeitsmessung 16.
索末菲 Sommerfeld 95.

T

汤姆孙 Thomson 3, 47.
统计法 Statistik 90.

W

威耳孙 Wilson 3.
威耳孙云室照相 Wilson-Aufnahmen 2, 16.
微扰论 Störungstheorie 81.
外尔 Weyl 36.
维格纳 Wigner 103.
位置的测量 Ortsmessung 13, 22.
位置概念 Ortsbegriff 11, 14.

物质射线的磁致偏转 Magnetische Ablenkung von Materiestrahlen 18, 26, 32.
物质射线的衍射 Beugung von Materiestrahlen 3, 15, 47.

X

西蒙 Simon 4, 55.
吸收 Absorption 49.
显微镜 Mikroskop 14.
相对论 Relativitätstheorie 1, 35, 39, 61.
相对论波动方程 Relativistische Wellengleichung 51, 61.
薛定谔 Schrödinger 20, 22, 29, 38, 43.
薛定谔函数 Schrödingerfunktion 20, 27, 43, 53.

Y

因果律 Kausalgesetz 36, 39.
约当 Jordan 35, 62, 103.

Z

涨落现象 Schwankungserscheinungen 56, 85.
针孔辐射 Nadelstrahlung 53.

中文版后记

我初学量子力学, 是 1959 年, 师从孙洪洲先生. 那时大学授课还是沿袭旧的传统, 不用教材, 先生授课, 学生记笔记, 每堂课指定的参考书一般都不相同. 时值 "反右" 不久, 先生们都很谨慎, 孙先生采用了莫斯科大学布洛欣采夫 (Д. И. Блохинцев) 的讲法, 认为波函数不是描述单个体系而是描述系综, 把波函数的模方诠释为对系综测量的概率, 参考书就是布氏《量子力学原理》的中译本. 当时哥本哈根学派在苏联受到批判, 量子力学的诠释是个敏感的话题, 采用布氏的诠释, 是最保险的做法. 之后做学年论文和后来做毕业论文, 我和夏梦棼在胡慧玲先生指导下, 开始读创立量子力学的那些原始论文, 回溯那个英雄时代, 追寻先驱和开拓者们的研究历程. 我这才知道, 量子力学在其创立伊始, 就是被大师们定位为描述单个体系的基本理论, 用以在微观领域取代牛顿力学的.

玻尔旧量子论只给出原子的能级, 即谱线的位置. 进一步的问题是如何确定谱线的强度, 即跃迁概率. 按照经典理论, 谱线强度正比于周期运动中该谐振振幅的平方, 只涉及一个态. 而量子的跃迁, 涉及始末两个态. 为了得到这种涉及始末两态的 "跃迁量", 就没有从经典力学挑出一些量子化轨道那么简单. 玻恩提出必须改造经典力学, 把正则微分换成以普朗克常量为增量的差分, 并为新力学取名 "量子力学" (1924). 在与两位助手约当和海森伯的讨论中, 根据跃迁量对应于经典振幅的平方, 玻恩提出了跃迁振幅的概念, 指出跃迁振幅很可能是起核心作用的量, 其平方要用某种符号乘法来处理. 针对玻恩的问题, 1925 年夏天, 海森伯解开了这个符号乘法之谜, 取得了突破, 迈出了创立量子力学关键的一步.

海森伯当时已经接替泡利, 在哥廷根做玻恩的助手. 他 1925 年 6 月告假去北海赫尔戈兰岛 (Helgoland) 养病期间, 想到在新的力学中, 应该放弃玻尔轨道的经典图像, 用量子的观测量来代替, 重新诠释运动学和动力学关系. 量子的观测量联系于始末两态. 用一个态的量子数和跃迁量子数, 海森伯把观测量写成依赖于这两个量的数组, 并给出它们的乘法规则, 以及用坐标和频率表示的玻尔 – 索末菲量子化条件, 写出了创立量子力学的第一篇论文, 史称 "一个人的论文". 玻恩把海森伯的论文送去发表后陷入沉思, 最后想到, 若用始末两态的量子数来表征数组, 海森伯的数组就是矩阵, 他的数组乘法就是矩阵乘法, 并且发现, 经他改写过的海森伯量子化条件, 是坐标动量正则对易式的对

角部分. 玻恩猜测其非对角部分应为零, 写出了完整的正则对易关系. 7 月中旬, 他去汉诺威开会, 遇到了泡利, 请他来共同研究这个问题. 泡利觉得这是数学而非物理, 拒绝了. 玻恩转而请他的学生约当. 约当证明了正则对易式的时间微商必须为零, 从而其非对角项确应为零. 于是他们合写了一篇论文, 这就是创立量子力学的第二篇论文, 亦即 "两个人的论文" (1925). 此文首次提出的这个著名的正则对易关系, 常被称为海森伯对易关系. 在这两篇论文的基础上, 玻恩、海森伯、约当进一步合作, 写出了一篇长文, 逻辑和系统地给出了新理论完整和全面的表述, 这就是创立量子力学的第三篇论文, 即 "三个人的论文" (1925).

1925 年 7 月底海森伯访问剑桥, 在卡皮查 (Kapitza, 俄文 Капица) 俱乐部演讲, 把他一个人论文的预印本送给福勒 (R. H. Fowler), 9 月初福勒把它转给了自己的研究生狄拉克. 狄拉克受到启发, 提出 "量子的量" (quantum variables) 是不可对易的, 把经典力学的泊松 (Poisson) 括号推广为量子泊松括号, 也得到了上述正则对易关系, 在哥廷根玻恩小组之外, 开辟了创立量子力学的另一途径 (1925). 而另一方面, 当时在苏黎世的薛定谔从波动图像出发, 建立了他的著名方程 (1926). 德布罗意波是平面波, 生成这个波的微分方程, 其算符对应于自由粒子的动能. 薛定谔在动能后加上束缚电子的势能, 从得到的方程算出了正确的氢原子能级, 给出了创立量子力学的又一途径. 接着薛定谔证明, 他的微分方程与哥廷根小组的矩阵方程在数学上是等价的. 实际上, 哥廷根小组选择了力学量随时间变而态不随时间变的绘景, 薛定谔选择了态随时间变而力学量不随时间变的绘景, 二者分别是狄拉克的形式理论在这两种绘景中的具体表现.

创立量子力学的这三条途径, 无论是海森伯的矩阵, 还是狄拉克的不可对易代数, 或者薛定谔的波动方程, 都是先猜出和建立了理论的数学形式, 然后再来寻求物理的诠释. 玻恩他们和狄拉克都采用粒子图像, 而薛定谔采用波动图像. 两种理论形式在数学上的等价, 意味着粒子与波动这两种看似冲突和不相容的图像, 可以通过某种途径协调和统一. 这就需要恰当的物理诠释, 亦即恰当诠释薛定谔的波函数. 薛定谔认为它描述粒子物质在空间的分布, 德布罗意把它看作引导粒子在空间运动的导波, 玻恩则通过对散射过程的计算, 认为它的模方给出散射粒子空间分布的概率 (1926). 薛定谔的看法因与粒子稳定性明显不符而被放弃, 最后是玻恩的统计假设胜出, 成为主流的诠释.

由波函数给出的概率分布是原理性的, 这意味着原则上就不可能完全测准, 测量结果一般不可能完全确定. 反过来说, 之所以原理上就具有概率性的统计特征, 其物理基础是原则上的测不准或不确定. 这就为海森伯提出测不准原理提供了观念基础.

在量子力学中不用轨道概念,那如何解释威尔孙云室观察到的粒子径迹? 经过几个月的疑惑与思索, 1927 年初, 海森伯忽然想起在年前的一次讨论中, 当他向爱因斯坦表示 "一个完善的理论必须以直接可观测量作依据" 时, 爱因斯坦向他指出: "在原则上, 试图单靠可观测量去建立理论那是完全错误的. 实际上正好相反, 是理论决定我们能够观测到什么东西". 在爱因斯坦的启发下, 海森伯仿效爱因斯坦在狭义相对论里对同时性的操作定义, 马上领悟到: 云室里的径迹不能精确表示经典意义上的电子路径或轨道, 它原则上至多给出电子坐标和动量的一种近似和模糊的描写. 在这种想法指导下, 他用高斯 (Gauss) 型波函数来研究量子力学对经典图像的限制, 立即导出了共同测量粒子坐标和动量所受的限制: 坐标测不准与动量测不准的乘积不小于约化普朗克常量的一半. 这就是著名的海森伯测不准关系. 1927 年秋, 玻尔在科莫 (Como) 会议上, 通过波粒二象性的论证也导出了测不准关系.

从把量子力学的观测量写成依赖于两个量子数的数组, 到提出测不准原理, 知道了这段发生在短短两年中的历史, 就能明白和体会康普顿在本书英文版前言中所说的话: "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." 那时康普顿年近四十刚得诺奖, 海森伯才二十八岁!

综合运用粒子与波动两种图像, 通过直观和详细的分析, 归纳提出测不准原理, 这是海森伯《量子论的物理原理》的主题, 这里就毋庸多说. 测不准是量子力学的物理原理, 但在书名中却用 "量子论" 而不是 "量子力学", 这表明海森伯的思路, 正是沿着改进和发展玻尔旧量子论的途径走过来的.

这里需要强调, 从海森伯在书中的分析讨论可以清楚地看出, 测量是这个原理涉及的主体, 测不准或不确定是说测量的结果, 是对测量结果的陈述, 不是对测量前体系所处状态的描述. 海森伯说的是结果的 "测不准", 不是状态的 "不确定". 事实上, 体系在测量之前肯定处在某一确定的量子态, 比如自由粒子的平面波, 或氢原子内电子的驻波. 没有进行测量, 就谈不上测不准, 也无所谓不确定. 而通过测量, 则可以准确测定体系处于什么态, 包括波函数的振幅和相位. 实际上不确定的, 只是我们头脑中的经典图像和概念. 由于出现在基本原理之中, 测量成为量子力学的核心概念. 因此, 泡利在其名著《波动力学一般原理》中, 一开始就讨论坐标与动量的测量及其精度, 还专门讨论了测量的理论. 而用词讲究准确的狄拉克, 则特别区分力学量 (dynamical variables) 和观测量 (observables), 强调并非任何力学量都是可以观测的.

还需要注意, 通常的实验测量, 无论是对同一体系的多次重复测量, 还是对大量相同体系的系综测量, 误差均来自实验安排和操作, 原则上经过改进可以减小甚至消除. 引起误差的因素来自体系之外, 往往是无规的. 统计无规的

误差分布是高斯分布, 分布宽度反映了实验的水准和精度. 而量子力学的测不准不同. 从海森伯在书中的分析可以看出, 量子力学的测不准由波函数决定, 亦即由薛定谔方程决定, 依赖于体系本身的动力学, 与实验安排和操作无关, 原则上就不可能通过改进而减小和消除, 更不一定是高斯分布, 是物理原理上的测不准或不确定. 海森伯讨论的测量, 是消除实验误差之后没有不确定度的理想测量, 测得值就是理论上的本征值. 海森伯讨论的测不准, 是观测量本征值的统计分布, 是没有测量误差的测不准, 或者说, 是没有不确定度的不确定性. 经典物理量没有这种动力学的统计分布, 没有这种原则上的测不准. 量子力学的测不准或不确定, 不是经典意义上的测不准或不确定. 把日常生活用语运用于专业领域, 或者把宏观领域的术语运用于微观领域时, 往往会引起歧义甚至误解, 需要特别加以界定.

与量子力学测量相关的, 还有一个更原则和棘手的问题. 统计概率是数学量, 不是物理量. 联系统计概率与实际物理的, 是实验测量, 这就牵涉本征值和本征态. 量子力学有一条原理, 说观测量的测得值是本征值, 在本征态上测量该观测量, 得到的就是它的本征值. 那么, 测量之后体系处在什么态呢? 最简单的猜测和回答是, 测量之后体系处于与该本征值相应的本征态. 这就是冯·诺依曼 (J. von Neumann) 著名的投影假设: 测量使体系的量子态突变到观测量的一个本征态. 原则上, 测量前体系的态是各个本征态的叠加, 测量使之突然转化为其中某一本征态. 这个过程不连续, 被称之为 "坍缩" (collapse, 亦译 "缩编") 或 "收缩" (reduction, 又译 "约化"). 海森伯当时还没有把问题提得这么清楚, 他和玻尔说得比较含糊, 只是笼统地说有实验的 "干扰". 至于如何干扰, 以及干扰的结果如何, 他们都没有进一步阐述.

让理论家棘手难办的是, 坍缩也好, 约化也好, 这也是体系波函数的变化, 对这个过程薛定谔方程能不能用? 最简单直接的回答是不能, 说这是与薛定谔方程独立无关的另一过程, 投影假设是量子力学一条独立的原理. 不过, 也一直有人尝试把测量装置与被测体系合起来, 作为一个耦合体系, 引入测量装置与被测体系的相互作用, 写出总的模型哈密顿算符来解薛定谔方程, 想算出波函数的坍缩过程. 这就是多年来一直在持续探索的一种测量理论. 问题是, 这样算出来的也是波函数, 也只是统计的概率幅. 要把它与物理实际联系起来, 仍然需要进行测量, 只不过现在是对耦合大体系的测量. 我们避不开测量, 或者形象地说, 避不开人眼的观察. 当然, 可以把人眼也算成测量装置的一部分. 不过这样一来, 人眼接受的就是连续的波函数, 坍缩发生于从人眼传输到大脑的过程, 只是把测量又推迟了一步. 这样, 可以一直把坍缩推迟到进入人的意识过程. 总之, 只要采用玻恩的统计诠释, 量子力学就避不开观测者的介入, 避不开主观意识这个可怕的幽灵! 这就是海森伯在书中所指出的区分主客观的

困难. 所以又有放弃统计诠释, 选择别的诠释甚至修改薛定谔方程的种种尝试和努力, 这就扯远了.

海森伯认同玻尔的思维模式和风格, 与之交往频繁, 自视为玻尔的学生, 他的测不准原理自然就被归之于哥本哈根学派. 玻恩的统计诠释之所以也被称为哥本哈根诠释, 则因这是测不准的观念基础, 而且玻恩一向行事谦卑低调不太计较. 只是在随后的两次索尔维 (Solvay) 会议上, 面对爱因斯坦的尖锐质疑, 玻尔高调回应, 才成了辩方的盟主. 玻尔为了协调波动与微粒这两个互不相容的经典图像, 又进一步从哲学上提出并协原理, 从而形成了一个横跨物理与哲学两界的派别. 其实玻恩自有门户, 海森伯与泡利都是从哥廷根出道, 后来才皈依玻尔. 量子力学创立之初, 从美国到欧洲留学的首选是哥廷根, 奥本海默就出自玻恩门下. 后来玻恩逃避纳粹流落英伦寄人篱下, 哥廷根学派才从历史淡出. 而且, 量子力学的创立与哥本哈根并无直接关系, 哥本哈根学派和哥本哈根诠释都是很含混的说法, 还是具体说玻恩统计诠释和海森伯测不准原理更明确妥当. 在通常说的哥本哈根诠释中, 真正属于玻尔的, 只是协调波动与粒子图像的并协原理, 和宏观仪器对微观体系的干扰. 前者哲学的意义更大于物理, 而且波粒二象性在玻恩的统计诠释里已经完美统一, 无需再来一个原理画蛇添足. 后者则实质是测量问题, 不是一个简单的 "干扰" 就能说清.

创立量子力学的这段历史, 就是这样一步一步走过来的. 倘若当初认定统计诠释是适用于系综而不是单个量子体系, 那么测不准也就不是单个体系的物理行为而是系综的统计行为, 单个体系的行为就具有经典意义上的确定性, 测不准原理也就完全可以无异议的改称为测量系综的统计不确定性原理. 当然这样一来, 爱因斯坦就不会有他的尖锐质疑, 玻尔也不会有他的并协原理, 这两位物理巨人会共同发问: 那么, 在系综的背后, 支配和描述单个量子体系的基本理论到底是什么? 因为如果是系综, 那就必然存在某种未知因素, 导致系综内各个体系的测量结果不同. 这就是冯 · 诺依曼最早研究过的隐参量问题. 但是历史没有假设, 更没有回头路. 工作在前沿第一线的物理学家其实是很保守的, 若不是万般无奈别无选择, 玻恩决不会提出他破天荒的统计诠释, 海森伯也不会有他横空出世的测不准原理. 他们走过的, 可以说是历史的短程线. 后来各种回归经典的尝试, 包括玻姆 (David Bohm) 的隐变量理论, 都是更为艰辛前途未卜的路. 被玻尔誉为物理学之良心的泡利说过, "梦想回到牛顿 – 麦克斯韦的经典格式 …… 我看是无望的, 那是走入歧途 …… 那甚至不是一个可爱的梦" (语见玻恩《我这一代的物理学》, 侯德彭. 蒋贻安译, 1964 年商务版 181 页). 在贝尔 (J. S. Bell) 以其不等式激起的新一轮对量子力学基础的关注与研究中, 是接受玻恩和海森伯, 还是追随玻姆, 确实是个两难的抉择.

统计诠释和测不准原理是互相联系、紧密相关的. 测量结果的统计特征, 就意味着存在原则上的测不准. 存在原则上的测不准, 则必然导致测量结果的统计性. 统计诠释和测不准原理是量子力学的核心, 它们把测量和概率的概念引入基本原理之中, 这就彻底颠覆了伽利略和牛顿以来物理学的传统观念和信仰. 首先, 物理学的基本规律从此具有了或然性, 而不再是拉普拉斯决定论的因果关系. 而且, 作为测量的主体, 观测者的作用隐含在基本原理的表述之中, 这就使得物理学规律的背后出现了主观的阴影.

海森伯和玻恩一样, 生活在德意志文化的黄金时代, 他们既是严谨的物理学家, 也爱深入思考更深层的观念和哲理. 玻恩在提出统计诠释的同时, 就意识到这必将在科学观念上带来一场影响深远的变革. 他在提出统计诠释的那篇论文中说: "我自己倾向于在原子世界里放弃决定论. 但这是一个哲学问题, 只靠物理学的论证是不能决定的." 物理学乃至整个近代科学的基本信仰, 是相信我们所研究的对象是独立于我们的观察和测量的外在客观世界, 物理学只是我们对它的认识, 是它在我们头脑中的反映. 这就是物质第一性的一元论的唯物论. 倘若我们对这个世界的认识依赖于我们所进行的观测, 主观的因素也参与进来, 那就成了笛卡儿的二元论, 无疑是对唯物论信仰的彻底颠覆. 这种颠覆完全超出了物理学乃至整个科学的范畴, 变成哲学问题, 进入了哲学争论的核心, 成为将近一个世纪以来物理学内外一系列争论的根源. 哥本哈根学派之所以在苏联曾受到批判和抵制, 除了玻尔把他的并协原理引申推广到社会领域的一系列言论之外, 这个主客观二元论的阴影也是一个主要的原因. 这不是在物理而是在哲学层面的批判. 海森伯在回应这种批判时, 同样说过极富哲理的话, 而其立论也不在于物理.

其实说到底, 爱因斯坦与玻尔之争不是物理之争, 而是哲学之争, 是信仰之争. 通俗点说, 大家都知道爱因斯坦的命题: 上帝玩掷骰子吗? 或薛定谔之问: 不看猫时它是死是活? 更深一层还可以问: 不看月亮时它还存在吗? 这就是争论的核心, 与物理还有直接关系吗? 是追随爱因斯坦还是玻尔, 与其说是基于物理, 还不如说是选择哲学与信仰. 换句话说, 从经典物理到量子力学, 意味着哲学与信仰的转变. 所以, 如果我们只想做纯粹的物理, 那就最好还是接受王竹溪先生半个多世纪前对我的告诫: 不要深入去碰这个测量问题, 知道是怎么回事就行了. 特别是在以唯物信仰为主的学术环境. 当然, 不深入去碰测量问题, 并不意味着在量子力学中可以避而不提测量. 测量是量子力学不能回避挥之不去的梦魇. 非但是测量问题中的这个主观的幽灵, 国外已有一些反传统的前卫学者, 尝试探索量子力学在精神甚至心灵层面的含义, 但那都是在主流之外, 而且在短期内还难以看到能够吸引人的前景.

量子力学就是这样在短短一两年中横空出世, 改变和创造了历史, 而且或

许还将继续创造新的历史. 由亲历这段历史的大师们撰写和流传下来的, 除了海森伯的这本《量子论的物理原理》, 还有冯 · 诺依曼的研究性专著《量子力学的数学基础》(J. von Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*), 狄拉克的名著《量子力学原理》(P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*), 和泡利的《波动力学一般原理》(W. Pauli, *Die allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik*). 海森伯和冯 · 诺依曼的书恰如其名, 分别讨论了量子力学的物理和数学基础, 狄拉克的书给出了狄氏关于量子力学的逻辑和形式体系, 泡利的论著则充满了他所特有的深刻分析和精辟见地. 上述量子力学的四大经典, 影响和培育了数十年来的几代物理学人. 我们从生活经验形成的宏观图像与观念, 甚至像测不准或不确定这类来自生活的语言, 要经过批判和重建才能符合与适应微观, 那一代大师们的观念历程, 他们走过的路, 特别是海森伯对经典图像与观念的批判, 将永远值得我们后来的人借鉴. 虽然今天的实验技术已经精确到可以操纵单个原子或光子, 但微观世界的基本特征主要还是波粒二象性, 海森伯的分析仍然是我们进一步探索的基础与出发点.

海森伯的这本《量子论的物理原理》, 其基础是他 1929 年在芝加哥大学的演讲. 他的讲稿经翻译整理由芝加哥大学出版, 这就是 1930 年的英文版 *The Physical Principles of Quantum Theory*. 当时在芝大的康普顿特为英文版写了前言, 这里也译出供读者参阅. 海森伯的讲稿同时在德国出版, 这则是 1930 年的德文版. 英文版之后转给 Dover 出版社一再重印, 但未再作修改. 德文版则一直由 S. Hirzel 出版, 分别于 1941、1942、1944 和 2008 年出了第二、三、四和第五版.

海森伯这本书早期在中国的传播和影响, 从杨振宁先生的一段回忆就可以看出. 在黄昆先生的 70 寿辰, 杨先生著贺文《现代物理和热情的友谊》, 忆及他和黄昆与张守廉三位在西南联大做研究生时, 经常一起辩论各种问题. 一次争论量子力学中 "测量" 的准确含义, 从茶馆一直争到住所, 晚上熄灯上床以后还继续争论, 最后为了调解分歧, 三人又从床上爬起来点亮蜡烛翻书看, 看的就是海森伯的《量子论的物理原理》.

我手边的这本, 是父亲留给我的. 他在扉页上写明 1936 年 1 月 13 日购于上海. 这是芝加哥大学出版社的英文版, 连署的有剑桥大学出版社、纽约和东京等地的出版社以及上海商务印书馆 (The Commercial Press, Limited, Shanghai), 美国印刷. 他那时大学刚刚毕业, 那两年先后在南京的云南学会和中央军校教过物理, 还在南京买了狄拉克的《量子力学原理》第二版.

后来父亲几经辗转, 到了大连工学院 (现大连理工大学). 1958 年 "大跃进", 大学扩招师资紧缺, 学校办 "师资班", 他讲授量子力学. 他留美时量子力学师

从 E. Feenberg, 带回了席夫的《量子力学》(L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*). 回国不久, 他又托在美国的同学买来了玻姆刚出版的《量子理论》(David Bohm, *Quantum Theory*). 这次授课, 除了布氏的书和这两本书, 他还特别参考了海森伯的这本书. 在备课过程中, 海森伯的书他每天译几页, 自然形成了一份译稿. 课后忙别的, 就把译稿放下了. 后来我看到, 建议他整理送出版社. 那是 1964 年前后, 我正在北大跟王竹溪先生念研究生. 记得一次在和陈难先兄去先生家时, 我还跟先生谈过这份译稿的事. 后来不知什么原因, 译稿从出版社到了我的同学许醇仁手里, 他那时任职东单附近的自然辩证法研究所. 他携稿来家找我, 问此稿是否与我有关, 因为他看到我夹在稿中忘了抽出的一个字条. 很快就开始 "文革", 这件事就放下了. "文革" 最激烈的 1967—1968 年, 许卷入两派冲突的漩涡不能自保, 以致无奈离世, 年仅 30, 唉!

"文革" 结束后, 父亲回昆明筹建云南民族学院 (现云南民族大学) 的理化专业, 译稿之事已无暇顾及, 就由我来接手. 王竹溪先生介绍我去找科学出版社物理编辑室主任钱介福先生, 事情最后落实到责任编辑周奇先生. 不久周先生说, 他们又收到一份李绍光和张虞两位先生的德译稿, 经与王竹溪先生商量, 觉得从德文版来译更合适. 于是周先生建议我正文改从德文版译, 并考虑到英文版流传更广附录较详, 附录从英文版译, 这样参照两种文本, 进一步把两份译稿统一起来. 我虽在研究生时选修了德语, 但之后十多年来一直没有用过. 这时我已成了过河的卒子, 只能向前. 所幸王竹溪先生亲自把关, 逐段逐句审阅和修改, 这样做了将近一年. 最后, 周奇先生建议请王竹溪先生写篇序. 王先生像玻恩一样数学功底极好而谦虚谨慎做人低调, 一口拒绝了: "海森伯是大科学家, 我没有资格为他的书作序." 后来出版社的运作我未再与闻, 渐渐就淡忘了. 1982 年我出国赴美前夕突然接到寄来的清样, 这就是科学出版社 1983 年出版的那本《量子论的物理原理》中文版. 这期间周奇先生调到自然科学史研究所, 责任编辑换成了张邦固先生. 这既是我亲历的一段沧桑, 也是海森伯这部名著在我国传播的又一段历史.

那个年代我国还未加入国际版权公约. 现在三十多年过去, 我们已经与世界接轨, 高等教育出版社从德方获得版权, 找到了我. 我虽已年逾古稀力所不逮, 却无法推脱, 只好勉为其难, 把那个中译本与德文新版对照审阅, 并作了一些细微的修改, 其实只能算是校订. 这次直接从德方拿到的 2008 年第五版, 又叫未改照印版, 与 1930 年的初版相同. 而 1983 年的那个译本依据的是 1944 年德文第四版, 与初版相比有几处改动. 这主要是在第三章增加了几段话, 删去了第五章第 8 节, 现都按照第五版即初版译出. 德文版数学附录中的公式编号是接着正文顺序编下来, 这里则按照英文版从头编起, 在正文中引用处顺改. 物理名词均按国标译出, 人名多数均可在文献或索引中查到, 一般就

不加注原文. 德文第五版有两位知名学者蔡林格 (Anton Zeilinger) 和弗里奇 (Harald Fritzsch) 写的前言和导读, 也都一并译出. 对他们二位的介绍可以在网上查到, 这里就不饶舌了.

现在奉献给读者的这一译本, 立足于三十多年前的那个译本, 这次完全由我一人不揣浅陋独自操刀校订. 限于学识和水平, 难免有不妥与错误, 还望海内方家识者不吝赐教指正, 在下不胜感激.

王正行

2015 年早秋初稿

2017 年仲夏修改于京北寓所

郑重声明

高等教育出版社依法对本书享有专有出版权。任何未经许可的复制、销售行为均违反《中华人民共和国著作权法》，其行为人将承担相应的民事责任和行政责任；构成犯罪的，将被依法追究刑事责任。为了维护市场秩序，保护读者的合法权益，避免读者误用盗版书造成不良后果，我社将配合行政执法部门和司法机关对违法犯罪的单位和个人进行严厉打击。社会各界人士如发现上述侵权行为，希望及时举报，本社将奖励举报有功人员。

反盗版举报电话　（010）58581999 58582371 58582488
反盗版举报传真　（010）82086060
反盗版举报邮箱　dd@hep.com.cn
通信地址　北京市西城区德外大街 4 号
　　高等教育出版社法律事务与版权管理部
邮政编码　100120