目　　录

第一章　态的迭加原理

§1. 量子理論的需要

从牛頓的时代起，經典力学已有不断的发展，并且被应用到力学系統的日益广泛的領域，包括与物質有相互作用的电磁場．一些基础性的思想与支配它們的应用的規律，形成了一个簡洁而优美的方案，使人們不禁要認为，这种方案如果不把它的吸引人的特点全部破坏，是不可能作重大的修改的．虽然如此，現在已发現有可能建立一种新的方案，称为量子力学，它更适合于描述那些原子尺度內的現象，而且在某些方面，它比經典方案更为优美，更令人滿意．这种可能性是由于新的方案所包含的变化具有十分深刻的性質，而且不与那些使經典力学如此吸引人的特点相冲突，結果經典力学的所有这些特点都能够合并到新方案中去．

实驗結果清楚地表明了背离經典力学的必要性．首先，經典电动力学中已知的各种力已不足以解释原子与分子的显著的稳定性，而沒有这种稳定性，物質材料就完全不可能有任何确定的物理性質与化学性質．引入新的假定的力也不能挽救这种情况，因为在經典力学里，存在着一些带普遍性的原理，这些原理对所有各种力都是适合的，但它們却要引起一些直接与观察不相符的結果．举例說，如果使一个原子系統从平衡位置受到任何方式的干扰，再让它不受外界影响，它就会振动，这些振动将影响周围的电磁場；这样，这些振动的頻率就可能用光譜仪观察出来．不管支配这个平衡的力的規律是什么样的，人們总期待能够把这些不同的頻率包括在一个由某些基本頻率与它們的諧頻所組成的方案中．观察的結果却不是这样．相反地，观察到的是，在这些頻率之間有出人意料的新联系，这个联系被称为“光譜学的里兹組合定律”，按照这个

定律，所有这些頻率都能表达成某些譜項之差，譜項的数目要比頻率的数目少得多．从經典观点看来，这个定律簡直是不可理解的．

有人为了克服这个困难而不背离經典力学，也許会假定光譜学上观察到的頻率的每一个都是基本頻率，各有其自由度，而力的規律应該具有使諧頻振动不出現的特点．但是，这样的理論是不行的，即令不考虑它不能解释組合定律这一事实，也还是不行的，因为它直接与比热的实驗証据相冲突．經典統計力学使我們能够在振动系集的自由度总数与其比热之間建立普遍的联系．如果假定原子的光譜頻率全部相应于不同的自由度，那么，对任何物質所得出的比热会比观察值大很多．事实上，在普通溫度下，观察得到的比热是与仅仅考虑每个原子作为单个整体运动而完全不考虑它的內部运动的理論符合得很好的．

这一点把我們引向經典力学与实驗結果之間的新矛盾．为了說明原子的光譜，在原子中肯定应有某种內部运动，但这些內部自由度由于一些經典理論难以解释的原因，对比热沒有貢献．在与眞空中电磁場振动能量有关的問題上，也发現有类似的矛盾．經典力学要求与这种能量相应的比热是无穷大的，而观察到的比热却是有限的．从实驗結果得到的一般性結論是，高頻率振动对于比热都沒有作出經典理論所要求的貢献．

我們可以把光的行为当作經典力学失敗的又一例証．一方面，我們有干涉和衍射等現象，它們只能在波动理論的基础上得到解释；而另一方面，又有諸如光电发射、自由电子对光的散射等現象，这些現象表明，光是由小的粒子所組成．这些粒子称为光子，每一个光子都具有由光的頻率决定的一定的能量与动量，并且它們看来是眞正存在的，其眞实程度与电子或物理学中已知的其他粒子一样．从未观察到不是整个的光子．

实驗已經表明，这种反常行为不是光子所特有的，而是十分普遍的．所有物質粒子都有波动性質，这种波动性質能在适当条件下表現出来．这里我們有經典力学失敗的一个很惊人的而且是普

遍性的例子——不仅是它的运动規律不准确，而且是它的概念不足以給我們提供对原子性事件的描述.

当人們要想說明物质的終极結构时，就不能不背离經典思想，这一必要性不仅可从实驗上已确立的事实看出来；而且也可从一般哲学基础上看出来. 在物质組成的經典解释中，人們要假定物质是由很大数量的小的組成部分构成的，并且人們要对这些組成部分的行为規律作出假定，从而推导出物质整体的一些規律. 但是，这样是不会使解释完全的，因为还沒有接触到組成部分的稳定性与其构造的問題. 要深入探討这个問題，必須假定每个組成部分本身又是由許多更小的部分构成，并用这些更小的部分来說明它的行为. 对于这样的程序显然是沒有止境的，所以，照这样的路綫，人們永远不能达到物质的終极結构. 只要大与小还只是相对性的概念，用小的来說明大的是沒有用处的. 因此，必須用一种方法来修改經典思想，这种方法要能給大小以絕对的含意.

問題到此变得重要的是，要記住科学所研究的只是可观察的事物，同时，只有让对象与某种外界影响互相作用，我們才能观察它. 这样，观察的动作必然地要伴随着对所观察的对象的某些干扰. 当我們观察某一对象时所伴随的干扰如果是可忽略的，我們就下定义說，这对象是大的；而当干扰不能忽略时，这对象就是小的. 这样的定义和大与小的普通含义是紧密相一致的.

通常假定，只要仔細些，我們就可以把伴随观察的干扰減少到任意所希望的程度. 大与小的概念因而純粹是相对的，是关联到我們的观察工具的細致程度，也关联到被描述的对象. 为了要給大小以絕对的含义（这是有关物质終极結构的任何理論所要求的），我們必須要假定：对我們观察力的精細程度和对伴随着的干扰的微小程度有一个限度. 这个限度是事物本质中所固有的，观察者方面改进技术或提高技巧，都不可能超越这个限度. 如果被观察的对象大到足以使这种不可避免的极限干扰可以忽略，那么，这个对象就是在絕对的含义上是大的，并且我們可以把經典力学应用到它身上. 反之，如果这种极限干扰不能忽視，則对象在絕对

意义上就是小的，我們就要用新的理論来处理它.

上述討論的一个結果是我們必須修改我們对因果性的观念，因果性仅对那些未受干扰的系統适用. 如果系統是小的，我們不能在观察它时而不产生严重的干扰，因此，我們不能期望在我們的观察結果之間找到任何因果性的联系. 我們假定因果性对于沒有受干扰的系統仍是适用的，为描述未受干扰的系統而建立起的方程是一些微分方程，它們表达出某一时刻的条件与后一时刻的条件間的因果性联系. 这些方程与經典力学中的方程紧密对应，但是它們只能間接地与观察的結果相联系. 在計算观察出的結果时就有不可避免的不确定性出現，一般說来，理論使我們能够算出的只是，当进行观察时能获得某个特定結果的几率.

§2. 光子的偏振

在上节里討論了观察所能做到的細致程度的限制，以及因之在观察的結果中引起的不确定性；这些討論并未为建立量子力学提供任何定量的基础. 为了这个目的，就要求有一套新的准确的自然規律. 其中最基本的、最突出的規律之一是态的迭加原理. 我們将通过对某些特例的研究，引出这个原理的普遍表达方式. 首先研究由光的偏振所提出的例子.

从实驗得知，当平面偏振光用于激发光电子时，电子的发射便有择优方向. 这样，光的偏振性质是与它的粒子性質紧密地相联系的，而人們必須把偏振性質归之于光子. 举例說，人們必須把在某一方向平面偏振的一束光看成是每一个都是在此方向上平面偏振的許多光子所組成的；而把一束圓偏振光看成是每一个都是圓偏振的許多光子所組成. 我們应当說，每一个光子是处于某一偏振态. 我們現在必須考慮的問題是，怎样使这些想法适合于已知的事实，这些事实是关于光分解为平面偏振的組分以及这些組分的重新組合.

让我們举一个确切的例子. 假定我們有一束光通过一个方解石晶体，这种晶体有一种性質，即只让垂直于光軸的平面偏振光通

过. 經典电动力学告訴我們，对入射光束的任意給定偏振会发生什么情况. 如果这个光束垂直于光軸偏振，則它全部通过此晶体；如果它平行于光軸偏振，則它全部不通过此晶体；如果它的偏振面与光軸成一个角 α，則将有一部分通过，通过的与全部之比为 $\sin^2\alpha$. 在光子的基础上怎样理解这些結果呢？

我們所建立的图象是：在某一方向平面偏振的光束，是由每一个都在此方向平面偏振的許多光子所組成. 对入射光束是垂直或平行于光軸的平面偏振的两种情况，这个图象不引起任何困难. 我們只要假定，垂直于光軸偏振的每个光子都无阻碍也无变化地通过此晶体，而平行于光軸偏振的每个光子都被阻止住并被吸收了. 然而，在入射光束为斜偏振时却引起了困难. 这时每个入射光子都是斜偏振的，这样的光子到达方解石时会出現什么情况，是不清楚的.

关于在一定条件下某一特定光子会发生什么情况的問題，实在是不很精确的. 为了使問題精确化，我們必須設想进行与此問題相联系的一些实驗，并探寻这些实驗的結果将是什么. 只有关于实驗結果的問題，才有眞正的意义，也正是只有这些問題，才是理論物理学所必須考虑的問題.

在我們当前的例子里，明显的实驗是用仅含有一个光子的入射光束，然后去观察在晶体背后会出現什么. 按照量子力学，这个实驗的結果是：有时候人們在晶体背后会找到一整个光子，其能量等于入射光子的能量，而另一些时候，人們找不到任何光子. 当人們找到一整个光子时，这个光子将是垂直于光軸方向偏振的. 但人們永远不会在背面仅只找到一个光子的一部分. 假如重复这种实驗很多次，在背后找到光子的次数将是实驗总次数乘以 $\sin^2\alpha$. 这样，我們可以說，光子通过方解石后，在背后出現为垂直于光軸方向偏振的几率是 $\sin^2\alpha$，而光子被吸收的几率为 $\cos^2\alpha$. 对含有大量光子的入射光束，这些几率的数値就給出正确的經典結果.

用这种方法，我們在所有情况下都保留了光子的单个性. 然而，我們所以能这样做，只是因为我們放弃了經典理論中的决定論

性质．实験的結果并不是象經典思想所要求的那样，由实験者控制下的各种条件所决定的．事先所能料定的最多是一組可能的結果以及每一个結果出現的几率．

上述关于单个斜偏振的光子入射在方解石晶体上的实験結果的討論，回答了全部能够合理地提出的問題，即当一个斜偏振的光子到达方解石时将出現什么情况．关于决定光子是否通过的因素是什么，以及当光子通过时偏振方向是怎样改变的等問題，是不能从实験中研究出来的，因而应当被認为是在科学領域之外的．虽然如此，为了使这个实験結果与光子的其他可能的一些实験結果联系起来，并使所有的結果恰当地納入一个普遍方案，那就还需要作进一步的描述．这种进一步的描述不应当被当作企图回答科学領域之外的問題，而应看成是将規律公式化，使之簡練地表达大量实験的結果的一种手段．

量子力学所提供的进一步描述如下：假定可以把对光軸斜偏振的一个光子看成部分地处于平行光軸偏振态，部分地处于垂直光軸偏振态．斜偏振态可以被認为是某种迭加过程应用于平行偏振态与垂直偏振态而得的結果．这就意味着，在各种偏振态之間存在有某种特别的关系，这种关系类似于經典光学中偏振光束間的关系，但是它現在不是应用于光束，而是应用于一个特定光子的各个偏振态．这种关系容許任一偏振态被分解为任意两个互相垂直的偏振态，或者說，可以被表达为任意两个互相垂直的偏振态的迭加．

当我們让光子遇到方解石晶体时我們就是让它接受一次观察．我們要观察它究竟是平行于光軸偏振的，还是垂直于光軸偏振的．做这种观察的效果也就是強迫光子完全进入平行偏振态，或者完全进入垂直偏振态．它必須来一个突然的跃变，从原来部分地处在每一种态中的情况改变为完全处在其中的某一种态中．它究竟跳到这两态中的哪一个，是不能預料的，只是由几率規律支配的．如果它跳入平行态，它就会被吸收了；如果它跳入垂直态，它就通过了晶体，而在另一边出現，保留着这种偏振态．

§3. 光子的干涉

本节我們来討論迭加的另一例子. 我們再以光子为例, 但不是研究它們的偏振,而是考慮它們在空間的位置与它們的动量.如果我們有大体单色的光束, 那么, 我們对相应的光子的位置与动量就知道了一些有关情况. 我們知道它們每一个都是位于光束通过的空間区域中的某个地方,每一个光子有一动量,其方向与光束一致,而大小可由光束的頻率得出, 按照爱因斯坦光电定律, 动量等于頻率乘以一个普适恆量. 当我們有了关于一个光子位置与动量的这种了解时,我們就說它是处于一个确定的平移态.

我們来討論量子力学对光子干涉提供的描述. 让我們作一个表現干涉現象的确切实驗. 假定我們令一束光通过某种干涉仪,这样就使它分裂为两个組成部分,然后使这两个組分互相干涉.如上节一样,我們可以让入射光束只包含一单个光子,我們要問, 当它通过仪器时会发生什么情况. 这就向我們呈現出光的粒子理論与波动理論之間以尖銳形式互相冲突的困难.

相应于我們在偏振情况下的描述, 現在我們必須把光子描述为部分地进入由入射光束分裂而成的两个組分中的每一个.这样,我們可以說,光子是处于一个平移态,而这个平移态是由与上述两个組分相联系的两个平移态迭加而得的. 因此,我們不得不把“平移态”这个名詞在用于光子时的意义加以扩充. 我們說一个光子处于一确定的平移态, 光子不是一定与一单个光束联系起来, 它也可以与两个或更多的光束联系起来, 亦即与原来的一个光束所分裂成的各个組分联系起来[1]. 在准确的数学理論中,每一平移态与普通波动光学中許多波函数中的一个相联系. 每一波函数可以描述一个光束, 或者也可以描述原来一个光束分裂而成的两个或更多个光束. 因而平移态是可以象波函数一样迭加的.

---

1) 迭加的思想要求我們对平移态的原有意义加以扩充, 但是, 对于上节所讲的光子的偏振态, 却并没有相应的扩充含义的必要. 这种偶然的情况并没有基础性的理论意义.

現在让我們来考虑，当我們要决定在某一組分中的能量时会发生什么样的情况. 这种决定的結果必須是：要就是一整个光子，要就是完全沒有. 这样光子必須突然变化，从部分处在一个光束，部分处在另一光束的情况变为完全处在两者中的某一个. 这个突然变化乃是由于观察必然引起对光子平移态的干扰所致. 要預料光子究竟会在这两个光束中的哪一个里出現是不可能的. 从光子原来在两个光束中的分布情况，只能計算出每一結果的几率.

人們或許提出可能不破坏組分光束而实現能量測量，例如，用一个可动的鏡面反射这一光束而观察其反冲力. 我們对于光子的这种描述可以让我們作如下推断：在这样的能量測量以后，就不会在这两个組分之間带来任何干涉了. 只有光子是部分地在一光束，部分地在另一光束时，才能在两束光迭加起来时出現干涉；而当光子由于观察而被迫完全进入两个光束之一时，干涉的可能性就消失了. 另一光束这时不再参与这个光子的描述了，因之，对于此后可能对这个光子进行的任何实驗来說，它都应当看作是象通常一样完全在一个光束中.

按照上述这些方式，量子力学就能实現光的波动性質与光的微粒性質的协調. 核心問題是，把一个光子的每一平移态同普通波动光学中的波函数之一联系起来. 这种联系的性質是不能在經典力学的基础上图象化的，而是完全新的事情. 如果把光子同与其联系的波看成有相互作用（象在经典力学中粒子与波的相互作用一样），那就大錯了. 这种联系只能統計地解释，当我們对于光子在何处进行一次观察时，波函数只能告訴我們在某一特定地点发現光子的几率.

在量子力学发現以前不久，人們就已理解到，光波与光子之間的联系必須是統計的性質. 然而，他們沒有清楚地了解到，波函数告訴我們的是一个光子在一特定位置的几率，而不是在那个位置上可能有的光子数目. 这一区别的重要性可在下面看清楚. 假定我們令由大量光子組成的光束分裂为两个強度相等的組分. 按照光束的強度与其中可能的光子数目相联系的假定，我們就会得到，

光子总数的一半分别走入每一組分. 現在，如果使这两个組分互相干涉，我們就得要求，在一个組分中的一个光子能够与另一組分中的一个光子互相干涉. 在某些情况下，这两个光子就要互相抵消，而在另一些情况下，它們就要产生四个光子. 这样一来，就会与能量守恆相矛盾了. 而新的理論把波函数与一个光子的几率联系起来，就克服了这一困难，因为这个理論認定，每一光子都是部分地走入两个組分中的每一个. 这样，每一个光子只与它自己发生干涉. 从来不会出現两个不同的光子之間的干涉.

按照近代理論，上述粒子与波的联系，不仅限于光的情况而是具有普遍的适用性. 所有各类的粒子都按这种方式与波相联系，而且反过来，所有波动也都联系于粒子. 因之，我們能使所有的粒子表現出干涉效应，而所有的波动的能量都有量子的形式. 这些普遍現象沒有更为明显地表現出来的原因是，由于在粒子的質量或能量与波的頻率之間存在着一个比例規律，其比例系数的数值使得与常見頻率的波相联系的量子极为微小，而卽令是象电子那样輕的粒子所联系的波的頻率，也是大得不容易表現出干涉現象.

§4. 迭加与不确定性

对上两节中使光子的存在与光的經典理論相适合的企图，有的讀者可能不滿意. 他們可能要爭辯說，这里引进了一个非常奇怪的想法，卽認为有可能一个光子部分地处于两个偏振态中的每一个，或者部分地处于两个不同的光束中的每一个，而且，卽令借助于这个奇怪的想法，也沒有給予基本的单光子过程以任何令人滿意的图象. 他可能进一步說，这种奇怪的思想并未对所討論的实驗提供关于实驗結果的任何新的了解，而根据光子是按籠統方式由波来引导的初等理論，也会得到同样的理解. 那么，这种奇怪的想法究竟有何用处呢？

为回答第一个批評，可以这样說，物理科学的主要目的并不是提供图象，而是以公式表达那些支配現象的規律，并利用这些規律去发現新的現象. 如果存在着图象，那当然更好；但是，是否存在

图象只是次要的問題．在一般意义上，图象这个詞就是一个基本上按經典思路起作用的模型．以原子現象而言，不能期望有任何这样的图象存在．然而，我們可以把“图象”这个詞的意义加以扩大，讓它包括任何看待基本規律的方式，这种方式使基本規律的自洽性明显化．用这样的扩充，我們可能逐漸地得到原子現象的图象，办法是熟悉量子理論中的各种規律．

至于第二个批評，可以这样說，对于有关光的許多簡单实驗，把波与光子用籠統的統計方法联系起来的初等理論，将足以說明其結果．在这些实驗中，量子力学是提供不出更多的知識．但是，在大多数实驗中，条件都是十分复杂的，以至这种初等理論难以应用，而需要某种更精巧的方案，就象量子力学所提供的那样．量子力学給出的在更复杂情况下的描述方法，对这些簡单的情况也能适用，虽然这时为說明实驗結果，量子力学并不是眞正必需的．但是，在这种簡单情况下对它的研究，也許是在一般情况下对它的研究的适当开端．

最后，人們对这整个方案还可能有一全面性的批評，那就是說，由于背离了經典理論的确定性，在对自然的描述中引进了极大的复杂性，这一点是非常令人不滿的特点．这种复杂性是不可否認的，但是，它将由于态迭加的普遍原理所提供的极大簡化而抵消．我們現在就将进入討論态迭加的普遍原理．但是，首先必須把一般原子系統的“态”这个重要概念精确化．

讓我們举出任一原子系統，它由一些粒子或物体組成，这些粒子或物体具有一些特性（質量、轉动慣量、……），它們按特定的力的規律相互作用．这些粒子或物体将有符合于力的規律的各种可能运动．每一这样的运动被称为这个系統的一个“态”．按照經典观念，我們能够对系統各組成部分在某一时刻的坐标与速度全部給出数值，从而确定了一个“态”，这样，整个运动就完全被决定了．然而，第一节中的論断表明，我們不能对小的系統观察得象經典理論所假定的那么細致．观察力的限制对能够指定到态上的数据的数目也加上了一个限制．因此，原子系統的态不能用某一时

刻的全部坐标与速度的一整套数值来确定，而必須要用比較少的一些数据，或比較不确定的一些数据来确定．在系統仅是一个单独光子的例子里，只要有按 §3 的意义上給定的平移态，加上按 §2 的意义上給定的偏振态，态就是完全确定的了．

系統的态可以定义为受許多条件或数据所制約的未受干扰的运动，条件或数据的数目要与理論上可能的一样多，而沒有互相干扰或矛盾．在实践上，这些条件可以通过适当制备系統而加上去．系統的制备过程很可能是包括訨它穿过各种不同的选择性的仪器，例如狹縫与偏振仪，系統在制备过程后就不再使它受到干扰．"态"这一詞可能用于指某一特定时刻(在制备过程以后)的态，或者也可能用于指在制备过程以后全部时間的态．为了区别这两种含意，在容易产生含混时我們将把后一种称之为"运动态"．

量子力学的普遍迭加原理，适用于任何力学系統的态，态的含义可用上述两种中的任何一种．这个原理要求我們假定，在这些态之間存在着特殊的联系，以至于每当系統是确定地处于一个态时，我們就能把它看成是分别部分地处于两个或更多的态中的每一个．原来的态必須被看成是两个或更多的新态的某种类型的迭加的結果，而迭加的方式是經典观念所不能設想的．任何一个态可以被看作其他两个或更多个态的迭加結果，而且做到这一点的确可以采取无数种方法．反过来，任何两个或更多个态可以被迭加起来产生一新的态．把一个态表示成为一些其他的态的迭加的結果，这个过程是一数学过程，它总是可以允許的，这一点不涉及任何物理条件，就象把一个波分解为其傅里叶分量的过程一样．然而，在某一特定情况下，这种过程是否有用，就得由所研究的問題的特殊物理条件来决定了．

在前两节里，我們举出的例子是把迭加原理应用于由单个光子組成的系統．§2 研究的是那些只在偏振方面有所不相同的許多态，而 §3 研究的是只在光子整体运动方面有所不同的許多态．

迭加原理所要求的存在于任一系統的各态之間的关系，其性質是属于不能用一般的物理概念来說明的一类．人們不能在經典

的意义上来图象地說明一个系統部分地处于两个态中每一个，而同时又要这一情况等同于这个系統完整地处于某一其他的态．这里包含有完全新的观念，对这种新的观念我們必須习慣，我們必須开始用它來建立严格的数学理論，而不要任何詳細的經典图象．

当一个态是由两个其他的态迭加組成时，这个态将具有一些性質，按某种不精确的說法，这些性質介于两个原来态的性質之間，并且它們与其中某一态的性質更多或更少接近，这要按照在迭加过程中与这个态相应的相对"权重"是大些还是小些而定．若原来两个态在迭加过程中的相对权重为已知，再加上一定的位相差，新态就完全由两个原来的态决定了；在一般的情况下，权重与位相的确切含意是由数学理論提供的．在一个光子偏振的情况下，它們的含意就是經典光学所提供的含义，因而举例說，当两个互相垂直的平面偏振态用相等的权重迭加时，根据位相差的不同，新态可能是左旋或右旋的圓偏振，也可能是与原来的偏振方向成 $\frac{1}{4}\pi$ 角的綫偏振，还可能是椭圓偏振的．

迭加过程的非經典性質，可用下面的例子講清楚．我們研究 A 与 B 两个态的迭加，对这两个态的要求是，存在着一种观察，它作用于处在 A 态的系統时一定得到一个特定結果，例如說是 a，而当它作用于处在 B 态的系統时，一定得到某一不同的結果，例如說是 b．当我們把这种观察作用于处在迭加态的系統时，观察的結果将会是什么呢？回答是其結果将有时为 a，有时为 b，按照由迭加过程中 A 与 B 的相对权重所决定的几率規律而定．除了 a 与 b 外，永不会有其他結果．这样，**由迭加形成的态所具有的中間性質是，通过由观察得出特定結果的几率处于原来两个态的相应几率的中間而表現出来**[1]**，而不是观察結果本身处于原来两个态的相应結果的中間．**

1）在一般情况下，当原来的各个态得到某一特定结果的几率不全是零或1时，在迭加而成的态中得到这一特定结果的几率，并不总是处于原来各态的相应几率的中间；所以，对迭加而成的态的"中间性质"一语，是有若干限制的．

这样，我們注意到，象“各态之間有迭加关系”这样突出背离一般概念的假定之所以可能，仅仅是因为承認了伴随观察的干扰的重要性以及由之而来的观察結果的不肯定性．当一种观察作用于处于給定态的任意原子系統时，一般地說，結果将是不肯定的，也就是說，如果实驗重复多次，在相同的条件下可能得出几个不同的結果．然而，自然界的規律是，如果实驗重复很多次，得到每一特定結果的次数与实驗总次数之間有一确定的比例，因之就有了得到每一特定結果的确定几率．这种几率就正是理論所要去計算的．只有在特殊情况下，卽当某一結果的几率为 1 时，实驗結果才是肯定的．

各态之間迭加关系的假定引出一种数学理論，其中决定态的方程对未知函数是綫性的．由于这一点，人們曾試图建立与某些經典力学的系統的类比，这些系統例如振动的弦与膜等，是由綫性方程支配的，从而有一个迭加原理对它們成立．这样的类比已引出了“波动力学”这个名詞，有时它成为量子力学的另一名称．虽然如此，重要的是要記住，在量子力学中出現的迭加，与任何在經典理論中出現的迭加，有根本不相同的性質，这一点可由下述事实表明，卽为了要能有可以理解的物理解释，量子力学的迭加原理要求观察結果具有不确定性．因此，这种类比是容易引起誤解的．

§5. 迭加原理的数学表达

在本世紀內，物理学者对于他們研究的对象的数学基础所持的看法，发生了深刻的变化．以前他們假定牛頓力学的原理会提供描述整个物理現象的基础，并認为理論物理学家所必要去做的事不过是适当地发展与应用这些原理．随着認識到，沒有合乎邏輯的理由来說明，为什么牛頓的原理与其它的原理应当适用于它們曾被实驗証明的領域以外；这样，人們終于理解到，背离这些原理实在是必要的．通过把新的数学形式、新的一套公理与运算規則引进到理論物理的方法中，这种背离得到了它們的表达方式．

量子力学提供了新概念的好例子．它要求力学系統的态与力

学变量，用一种相当奇怪的方式互相联系起来，这种方式从經典观点看来是不可理解的．态与力学变量必須用一些数学上的量来表示，而这些量具有与物理学中常用的量不相同的性質．当所有支配这些数学量的定理与运算規則都規定了，并且除此而外，还規定了某些把物理事实与数学公式联系起来的規則，从而由任何給定的物理条件，就可能得出这些数学量之間的方程，同时从方程也可能得出物理条件，这样新的方案就成为精确的物理理論了．在应用理論时，我們要知道某些物理知識，进而用这些数学量的方程去表示这些物理知識．然后，我們借助于定理与运算規律，推导出新的方程，并把这些新的方程解释为物理条件而得出結論．这整个方案的合理性，除了內部的协調而外，还要取决于这样推出的最后結果是否与实驗相符合．

我們将开始建立这种新方案，办法是研究力学系統在某一时刻的各态之間的数学关系，这些关系是来自迭加原理的数学表达的．迭加过程是一种相加的过程，它意味着几个态能以某种方式被加在一起而成为新的态．因此，态必須与这样一种数学量相联系，这种数学量应当能加在一起而得出同类的另外的量．这样的量中最明显的是矢量．通常的矢量，即有限維空間中的矢量，对于量子力学中的大部分力学系統說来，是不够普遍的．我們必須作一个推广，使用无限維空間中的矢量，而由于收斂性問題数学处理就变得复杂了．但是在目前，我們仅只研究矢量的某些一般性質，这些性質能在一簡单的定理方案的基础上推导出来．我們暫时不深入到收斂性問題及有关的論題上去，直到有需要时再来討論．

为描述那些与量子力学中系統的态相联系的矢量，我們希望有一特殊的名称，不管它們是在有限維空間，还是在无限維空間中．我們将把它們称为“右矢量”或者簡称“右矢”，并用一特殊的符号 $|\rangle$ 来表示一个一般的右矢．如果我們要用一个字母，例如 A，来指明它們中特定的一个，我們把这个字插在中間，写成 $|A\rangle$．当这方案发展以后，将会清楚地看出这种符号的适当性．

右矢量可以用复数来乘，也可以加在一起得出另外的右矢量，

即从两个右矢量 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$ 我們能例如得到，

$$c_1|A\rangle + c_2|B\rangle = |R\rangle, \tag{1}$$

其中 c_1 及 c_2 是任意两个复数. 我們也可用它們进行更一般的綫性运算，例如把它們的无限系列加起来，如果我們有由参量 x 标記的右矢量 $|x\rangle$，它随 x 而变，而 x 可以在某一范围內取所有的值，我們就可以把这个右矢量对 x 进行积分，从而得到另一右矢量，如

$$\int |x\rangle dx = |Q\rangle.$$

一个右矢量如能綫性地用某些其他矢量来表示，就說这个右矢量对它們是綫性相关的. 右矢量的一个集合，如果它們之中任何一个都不能綫性地用此集合中的其他的右矢量来表示，则称为“綫性无关的”.

現在我們假定，在一特定时刻力学系統的每一个态相应于一右矢量，其相应关系是这样的：如果一态是由某些其他态的迭加而得，则它的相应的右矢量能表示为与这些其他态相应的諸右矢量的綫性組合，并且，反过来也对. 因此，当相应的右矢量有(1)式的关系时，则态 R 是由态 A 与态 B 迭加的結果.

上面的假定引出迭加过程的某些性質，这些性質事实上是使“迭加”这个詞成为适当而必需的. 当两个或更多的态迭加起来，它們在迭加过程出現的次序是不重要的，所以，迭加过程在两个被迭加的态之間是对称的. 同时，我們从方程(1)看出（除了当系数 c_1 或 c_2 是零的情况以外），如果态 R 能由态 A 与态 B 迭加而成，那么，态 A 就能由态 B 与态 R 迭加而成，而态 B 也能由态 A 与态 R 迭加而成. 迭加关系在所有这三个态 A，B 与 R 之間是对称的.

一个态由某些其他态的迭加而成，则这个态就称为对这些态相关. 更一般地講，一个态称为对任何許多态的集合相关，集合中态的数目可以是有限的，也可以是无限的，只要与这个态相应的右矢量是对这一集合中各态相应的右矢量是相关的. 一个态的集合如果其中任何一个态都对其余的态不相关，就說这个集合是不相

关的.

为了把迭加原理的数学表达进行下去，我們必須引入进一步的假定，即假定我們用一个态与其本身迭加不能形成任何新的态，而只能仍得到原来的态．如果原来的态相应于右矢量 $|A\rangle$，当它与其本身迭加时，結果所得的态将相应于

$$c_1|A\rangle + c_2|A\rangle = (c_1 + c_2)|A\rangle,$$

其中 c_1, c_2 是数．現在，我們可能使 $c_1 + c_2 = 0$，在这种情况下，迭加过程的結果会是什么也沒有了，即两个組分已由干涉效应而互相抵消了．我們的新假定要求，除了这种特例以外，結果所得的态必須与原来的态相同，因而 $(c_1 + c_2)|A\rangle$ 必須与 $|A\rangle$ 相应于同一个态．現在 $(c_1 + c_2)$ 是任意的复数，从而我們得出結論：如果相应于一个态的右矢量乘以任何不为零的复数，則得到的右矢量相应于同一态．这样，一个态是由一个右矢量的方向所确定的，人們規定右矢量为任何长度是不关紧要的．力学系統的所有的态与右矢量的一切可能方向，是一一对应的，而在右矢量 $|A\rangle$ 与右矢量 $-|A\rangle$ 的方向之間也沒有任何区别．

剛才做出的假定很清楚地表明了，量子理論的迭加与任何种类的經典迭加之間的根本区别．在迭加原理成立的經典系統的情况下，例如振动的薄膜，当我們把一个态与其本身迭加，結果是得到一个不同的态，具有不同的振幅．在量子态中，沒有任何物理特性相应于經典振动的振幅，振幅与振动的音质是有区别的，因为振动的音质是用膜上不同各点的振幅之比来描述的．再者，虽然存在振幅到处都为零的經典态，即静止态，但对量子系統来說，却不存在任何与之相应的态，等于零的右矢量相应于完全沒有任何态．

有了两个态相应于右矢量 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$，由它們迭加而成的一般态相应于一个右矢量 $|R\rangle$，它由两个复数即方程 (1) 中的系数 c_1 与 c_2 决定．如果这两个系数同时被乘以相同的因子（因子本身也是复数），則右矢量 $|R\rangle$ 将被此因子所乘，而所相应的态将不变．这样，在决定态 R 时仅仅这两系数之比是有作用的．因而这个态 R 是由一个复数或两个实数参量所决定的．这样，从两个

已知态利用迭加可以得到的态数是两重无穷大.

这个結果为 §2 与 §3 討論的例子所証实. 在 §2 的例子里，对一个光子只有两种不相关的偏振态，它們可以取为两个平面偏振态，其偏振方向分别平行与垂直于某固定方向，而从这两个态迭加所能得到的偏振态数目就是两重无穷大，即是所得到的是椭圓偏振态，而一般的椭圓偏振态是要用两个参量来描述的. 再者，在 §3 的例子里，把光子的两个給定平移态迭加，可能得到的平移态数目是两重无穷大，其中一般的是要用两个参量来描述的，这两个参量可以取为两个組分波函数的振幅之比与它們的位相差. 这个証明表明了在方程 (1) 中允許复系数的必要性. 如果这些系数仅限于实数，那么，由于当 $|A\rangle$ 与 $|B\rangle$ 为已知时，为了决定合成右矢量 $|R\rangle$ 的方向，只有两个系数之比是有作用的，所以就会使从迭加可得到的态数只是一重无穷大.

§6. 左矢量与右矢量

在任何数学理論中，每当我們有一种矢量集，我們总能建立第二种矢量集，数学家称它們为对偶矢量. 下面我們討論当原来矢量是我們的右矢量的情况下建立对偶矢量的过程.

假定我們有一个数 ϕ，它是右矢量 $|A\rangle$ 的函数，就是說，对每一右矢量 $|A\rangle$ 有一数 ϕ 与之相应，并且进一步假定，此函数是綫性函数，其意义是，相应于 $|A\rangle+|A'\rangle$ 的数是相应于 $|A\rangle$ 的数与相应与 $|A'\rangle$ 的数之和，相应于 $c|A\rangle$ 的数是相应于 $|A\rangle$ 的数的 c 倍，其中 c 是任意的数字因子. 这样，相应于任何 $|A\rangle$ 的数 ϕ，就可以看成是 $|A\rangle$ 与某种新矢量的标量积，对右矢量 $|A\rangle$ 的每一綫性函数就有一个这样的新矢量. 能这样看待 ϕ 的根据是，几个新的矢量可以加在一起，也可以用数去乘，而得到另外的同类型的矢量，这一点将在后面看到(見方程(5)与(6)). 当然，这种新矢量只确定到这种程度，即它們与原来的右矢量的标量积是已知数；然而，这也就足够让我們建立有关它們的数学理論了.

我們将把这种新矢量称为“左矢量”或簡称“左矢”，并用符号

$\langle|$表示一般的左矢量，这个符号是右矢量的符号的鏡象．如果我們想要用一个标記例如 B 来指出其中特定的一个，我們就把这个字插在当中，写成 $\langle B|$．一个左矢量$\langle B|$与一个右矢量$|A\rangle$的标量积将写成$\langle B|A\rangle$，也就是写成左矢量与右矢量符号的并列，左矢量在左边，而为了簡单，把两条竪直綫縮写成一条．

我們也可把符号$\langle$与$\rangle$看成是特种的括弧．标量积$\langle B|A\rangle$这时就表現为一完整的括弧式，而左矢量$\langle B|$或右矢量$|A\rangle$就表現为不完整的括弧式．我們就有下述規則：任一完整的括弧式代表一个数，而任一不完整的括弧式代表一个矢量，是左矢量还是右矢量，要看这不完整的括弧式是括弧的左半还是右半而定．

$\langle B|$ 与 $|A\rangle$ 的标量积是 $|A\rangle$ 的綫性函数，这一条件可用符号表示为：

$$\langle B|\{|A\rangle + |A'\rangle\} = \langle B|A\rangle + \langle B|A'\rangle, \tag{2}$$

$$\langle B|\{c|A\rangle\} = c\langle B|A\rangle, \tag{3}$$

其中 c 为任意数．

当一左矢量与每个右矢量的标量积都是已知时，我們就認为它是完全肯定的了．所以，如果一左矢量与每个右矢量的标量积都为零，则这个左矢量本身一定应認为是零，用符号写出即为：

$$\left.\begin{array}{lll}\text{如果} & \langle P|A\rangle = 0, & \text{对所有的 } |A\rangle, \\ \text{则} & \langle P| \quad = 0. & \end{array}\right\} \tag{4}$$

两个左矢量$\langle B|$与$\langle B'|$的和是按下述条件定义的，即它与任一右矢量$|A\rangle$的标量积是$\langle B|$与$|A\rangle$的标量积及$\langle B'|$与$|A\rangle$的标量积之和：

$$\{\langle B| + \langle B'|\}|A\rangle = \langle B|A\rangle + \langle B'|A\rangle, \tag{5}$$

左矢量$\langle B|$与数 c 的乘积是由下述条件定义的，即它与任一右矢量$|A\rangle$的标量积是$\langle B|$与$|A\rangle$的标量积的 c 倍：

$$\{c\langle B|\}|A\rangle = c\langle B|A\rangle. \tag{6}$$

方程(2)与(5)表明，左矢量与右矢量乘积满足乘法的分配公理，方程(3)与(6)表明，用数字因子乘矢量，满足一般的代数公理．

象我們已經在此引入的左矢量，是与右矢量完全不同的另一

类矢量．而且直到现在，除了在左矢量与右矢量之間存在着标量积而外，两者之間还沒有任何联系．我們現在作一个假定：在左矢量与右矢量之間有一一对应关系，使得相应于$|A\rangle+|A'\rangle$的左矢是相应于$|A\rangle$的左矢与相应于$|A'\rangle$的左矢之和，而相应于$c|A\rangle$的左矢則是相应于$|A\rangle$的左矢乘以$\bar{c}$，$\bar{c}$是c的共軛复数．我們将用同样的标記来指明一个右矢与其相应的左矢．这样，相应与$|A\rangle$的左矢将写成$\langle A|$．

右矢量与其相应的左矢量之間的对应关系，使我們能合理地把它們称为互为共軛虛量．我們的左矢量与右矢量是复量，因为它們能乘以复数，而所得的量仍具有与前相同的性質，但是它們是一种特殊的复量，不能分成实部与虛部．通常用来得到一个复量的实部的办法是取复量本身与其复共軛之和的一半，这种办法不能应用于上述特殊的复量，因为左矢量与右矢量是不同性質的，不能加在一起．为了引起对这个区别的注意，說到数及其他能分为实部与虛部的各种复量时，我們将用“共軛复量”一詞，而說到不能分为实部与虛部的左矢与右矢时，則用“共轭虛量”一詞．对于前一类量，我們将在它們上面划一短横，来表示其共軛复量．

由于左矢量与右矢量之間是一一对应的，在特定的时刻，我們力学系統的任何态也可以用一左矢量的方向来确定，就象用一右矢量的方向来确定一样．事实上，整个理論在本質上在左矢与右矢之間是对称的．

已知任意两个右矢量$|A\rangle$与$|B\rangle$，我們能从它們得出一个数$\langle B|A\rangle$，即取$|A\rangle$与$|B\rangle$的共軛虛量作标量乘积．这个数与$|A\rangle$綫性相关，与$|B\rangle$反綫性相关，反綫性相关的意义是：由$|B\rangle+|B'\rangle$所形成的数，是$|B\rangle$所形成的数与$|B'\rangle$所形成的数之和，而由$c|B\rangle$所形成的数是$|B\rangle$所形成的数的$\bar{c}$倍．还有得到一个数的第二种办法，这个数也是与$|A\rangle$线性相关，与$|B\rangle$反綫性相关的，那就是，先用$|B\rangle$与$|A\rangle$的共軛虛量作标量积，再取这个标量积的共軛复数．我們假定，这两个数总是相等的，即是

$$\langle B|A\rangle=\overline{\langle A|B\rangle}. \tag{7}$$

如果在其中令 $|B\rangle = |A\rangle$，我們就发現数 $\langle A|A\rangle$ 应該是实数．我們作进一步的假定，除 $|A\rangle = 0$ 时外，

$$\langle A|A\rangle > 0. \tag{8}$$

在普通的空間中，我們能从任意两个矢量得出一个数——它們的标量积——它是个实数，在两个矢量之間是对称的．在左矢量的空間中，或者在右矢量的空間中，我們从任意两个矢量也能得到一个数——它們中的一个与另一个的共軛虛量的标量积——但是这个数是个复数，并且当两个矢量对换时，这个数要变成它的共軛复数．于是在这种空間里也有一种正交性，它是普通空間中的正交性的推广．如果一个左矢量与一个右矢量的标量积为零，我們就称它們为互相正交的，如果一个右矢量（或左矢量）与另一右矢量（或左矢量）的共軛虛量的标量积为零，则我們就称这两个右矢量（或两个左矢量）是正交的．进一步，如果相应于力学系統的两个态的两个矢量（左矢量或右矢量）是正交的，我們就說这两个态是正交的．

左矢量 $\langle A|$，或其共軛虛右矢量 $|A\rangle$ 的长度定义为 $\langle A|A\rangle$ 这个正数的平方根．当我們有一态，而希望建立一个左矢或右矢与之相应时，这时只是这个矢量的方向是已知的，这个矢量本身則还差一个数字因子未决定．选择这个数字因子使矢量的长度为 1 常常是方便的．这个程序就称为归一化，而如此选择的矢量称为已归一化的．即令如此，这矢量还未完全决定，因为我們还能用模量为 1 的任何复数乘它而不会改变其长度，也即能用 $e^{i\gamma}$ 形式的任意数去乘它而不会改变其长度，其中 γ 是实数．我們称这个数为相因子．

上述諸假定給出了力学系統在特定时刻的各态之間的关系的完全方案．这些关系表現为数学形式，但它們包含着物理条件，当理論进一步发展时，这些物理条件将引出許多結果，可用观察而得的知識表示出来．举例說，如果两个态是正交的，目前它只是簡单地意味着在我們的公式里的某一方程，但这个方程包含着两个态之間存在有某种肯定的物理关系，理論的进一步发展将使我們能用許多观察結果来解释这种物理关系（参看 §10）．

第二章　力学变量与可观察量

§7. 綫性算符

在前节我們考慮过一个数，它是右矢量的綫性函数，这就引出了左矢量的概念. 現在,我們将考慮一右矢量,它是右矢量的綫性函数,这就将引出綫性算符的概念.

假定我們有一右矢 $|F\rangle$, 它是右矢 $|A\rangle$ 的函数,即是說,对每一右矢 $|A\rangle$, 有一相应的右矢 $|F\rangle$; 并且进一步假定这个函数是綫性函数，其意义是，相应于 $|A\rangle+|A'\rangle$ 的 $|F\rangle$ 是相应于 $|A\rangle$ 的 $|F\rangle$ 与相应于 $|A'\rangle$ 的 $|F\rangle$ 之和，相应于 $c|A\rangle$ 的 $|F\rangle$ 是相应于 $|A\rangle$ 的 $|F\rangle$ 乘以 c, c 是任意的数值因子. 在这些条件下，我們可能把从 $|A\rangle$ 到 $|F\rangle$ 的过程, 看成是对 $|A\rangle$ 运用了一个綫性算符. 引入綫性算符的符号 α, 我們就可以写成

$$|F\rangle=\alpha|A\rangle,$$

其中 α 作用于 $|A\rangle$ 的結果写成象 α 与 $|A\rangle$ 的乘积一样. 我們規定下列規則: 在这种乘积里，右矢量必須总是放在綫性算符的右边. 上述的綫性条件,現在可以用方程表示为

$$\left.\begin{aligned}\alpha\{|A\rangle+|A'\rangle\}&=\alpha|A\rangle+\alpha|A'\rangle,\\ \alpha\{c|A\rangle\}&=c\alpha|A\rangle.\end{aligned}\right\}\qquad(1)$$

当一个綫性算符作用于每一个右矢量的結果为已知时，則这綫性算符就被認为是已完全定义了. 这样，如果一个綫性算符作用于每个右矢量的結果都为零,則它就被認为是零;当两个綫性算符作用到每个右矢量上,如果总是产生相同的結果,則这两个綫性算符就被認为是相等.

綫性算符能被加在一起，两个綫性算符之和定义为符合下述条件的一个綫性算符：它作用在任意的右矢量上，产生的右矢量

等于原来两个綫性算符分别作用于这个右矢量而得的两个右矢量之和. 即 $\alpha+\beta$ 由下式定义:

$$\{\alpha+\beta\}|A\rangle=\alpha|A\rangle+\beta|A\rangle, \tag{2}$$

对于任意的 $|A\rangle$. 方程(2)及(1)中的第一式指出，綫性算符对右矢量的乘积满足乘法的分配律.

綫性算符也能乘在一起，两个綫性算符的乘积定义为符合下述条件的一个綫性算符：它作用于任意的右矢上产生的結果与把原来的两个算符相継地作用在这个右矢量上所产生的結果相同. 这样，乘积 $\alpha\beta$ 定义为这样一个綫性算符，它作用于任意的右矢 $|A\rangle$ 上，把 $|A\rangle$ 变成另一右矢，如果我們先把 β 作用 $|A\rangle$，然后再用 α 作用于所得的結果，我們将会得到相同的結果. 用符号表示，即

$$\{\alpha\beta|A\rangle\}=\alpha\{\beta|A\rangle\}.$$

这一定义表現为对于 α,β 与 $|A\rangle$ 的三重积的結合律，因而我們可以把这三重积写为 $\alpha\beta|A\rangle$ 而不用括弧. 但是，这个三重积一般地說不同于先用 α 作用于 $|A\rangle$ 再以 β 作用所得的結果，也即是，一般地說，$\alpha\beta|A\rangle$ 不同于 $\beta\alpha|A\rangle$，因之，一般地，$\alpha\beta$ 必須不同于 $\beta\alpha$. **乘法的交換律对于綫性算符是不成立的**. 作为特例，有时可能出現两个綫性算符 ξ 与 η，使得 $\xi\eta$ 与 $\eta\xi$ 是相等的. 在这种情况下，我們說，ξ **可以同** η **对易**，或者說，ξ 与 η **是可对易的**.

反复地运用上述对于綫性算符的加法与乘法的手續，我們就能从而形成两个以上算符的乘积与和，并能开始建立它們的代数. 在这种代数中，乘法的交換律不成立，并且两个綫性算符的乘积可能为零，而其中任一因子都不为零. 但是一般代数中的所有其他公理，包括乘法的結合律与分配律，都是成立的，这一点是容易証明的.

如果我們取一数 k，并用它去乘右矢量，它就表現为一綫性算符作用在右矢量上，条件(1)中用 k 代替 α 仍能得到滿足. 于是一个数就是綫性算符的一个特例. 它有这样的性質，即它同所有的綫性算符是可对易的，这个性質使之区别于一般綫性算符.

至此，我們只考虑了綫性算符作用于右矢量的情况．我們也能給出綫性算符作用于左矢量的意义．其方法如下：取任意左矢 $\langle B|$ 与右矢 $\alpha|A\rangle$ 的标量积,这个标量积是一个数,它与 $|A\rangle$ 綫性相关,因之,从左矢量的定义，它可以被認为是 $|A\rangle$ 与某左矢的标量积，而这个左矢是与 $\langle B|$ 綫性相关的．因此，我們可以視之为某一綫性算符作用于 $\langle B|$ 的結果．这个綫性算符是由原来的綫性算符 α 唯一地决定的，并可以合理地称之为作用于左矢上的同一算符．就这样,我們的綫性算符也可以作用在左矢量上了．

当 α 作用于左矢 $\langle B|$ 上，用来表示所得的左矢量的适当符号是 $\langle B|\alpha$，因为,在这样符号下,給 $\langle B|\alpha$ 下定义的方程是

$$\{\langle B|\alpha\}|A\rangle = \langle B|\{\alpha|A\rangle\}, \tag{3}$$

对任意的 $|A\rangle$．这个式子簡单地表示乘法的結合律适用于 $\langle B|$，α 及 $|A\rangle$ 的三重积．我們因而作出了一般規則，即在左矢与綫性算符的乘积中,左矢必須总是放在左边．我們現在能把 $\langle B|$，α 及 $|A\rangle$ 的三重积，簡单地写成 $\langle B|\alpha|A\rangle$ 而不必用括弧．很容易証明,乘法的分配律对左矢与綫性算符的乘积是适用的,就如同綫性算符与右矢的乘积一样．

还有一种乘积的形式,它在我們的方案里也有意义,那即是右矢量与左矢量的乘积，其中右矢量是放在左边的，例如 $|A\rangle\langle B|$．为考察这个乘积，让我們用它乘以任意的右矢 $|P\rangle$，把此右矢放在右边，而假定乘法的結合律可用．这一乘积就是 $|A\rangle\langle B|P\rangle$，它是一另外的右矢，即 $|A\rangle$ 乘以数 $\langle B|P\rangle$，这个右矢是与右矢 $|P\rangle$綫性相关的．因此，$|A\rangle\langle B|$ 表現为一綫性算符，它能作用于右矢上．它也可能作用于左矢，它对左矢 $\langle Q|$ 的乘积($\langle Q|$ 放在左边)是 $\langle Q|A\rangle\langle B|$，这就成为用一数 $\langle Q|A\rangle$ 去乘左矢 $\langle B|$．乘积 $|A\rangle\langle B|$ 是要与同样因子具有相反次序的乘积 $\langle B|A\rangle$ 清楚地分别开的,后一乘积当然是一个数．

我們現在有一全套代数方案,涉及三种量：左矢量、右矢量以及綫性算符．它們能按上述各种方式乘在一起、而且乘法的結合律与分配律总是成立的，但乘法的交换律不成立．在这个总方案

中我們仍然有上节的符号規則，即任一 $\langle$ 在左边、$\rangle$ 在右边的完全括弧式表示一个数，而任何只包括 $\langle$ 或 $\rangle$ 的不完全括弧式表示一个矢量.

至于这个方案的物理意义，我們已經假定了左矢量与右矢量，或者宁可說是这些矢量的方向，相应于力学系統在某一特定时刻的态. 我們現在作出进一步的假定，綫性算符相应于在那个时刻的力学变量. 力学变量意指那些量，例如粒子的坐标，粒子的速度，动量与角动量的各个分量以及这些量的函数——事实上，就是經典力学借以建立起来的那些变量. 这个新假定要求，这些量将也出現在量子力学中，但是带有显著的不同，即它們現在服从一种代数，其中乘法的交換律不能成立.

对于力学变量的这种不同的代数，是量子力学不同于經典力学的最重要的方式之一. 我們在后面将看到，虽有这样的基本不同点，量子力学中的力学变量仍然有許多性质是与它們在經典力学中的对应量所共有的. 紧密地与經典理論类比而建立有关它們的理論，从而形成經典理論的一种优美的推广，这是可能的事情.

用同样的字母来代表力学变量与其所相应的綫性算符，是方便的. 事实上，我們可以認为力学变量与其相应的綫性算符两者是一回事，而不致引起混淆.

§8. 共軛关系

我們的綫性算符是复量，因为我們可以乘之以复数而得到另一同样性质的量. 因而它們一般地必須相应于复数的力学变量，即坐标、速度···等的复函数. 我們需要对理論作某些进一步的发展，才能看到哪一类綫性算符相应于实数的力学变量.

考虑一个右矢，它是 $\langle P|\alpha$ 的共軛虛量. 这个右矢与 $\langle P|$ 反綫性相关，因而与 $|P\rangle$ 綫性相关. 它因而可能被看成是某个綫性算符作用于 $|P\rangle$ 的結果. 这个綫性算符就称为 α 的共軛算符. 我們将用 $\bar{\alpha}$ 来代表它. 用这种符号，$\langle P|\alpha$ 的共軛虛量就是 $\bar{\alpha}|P\rangle$.

在第一章的(7)式中，用 $\langle P|\alpha$ 作为 $\langle A|$，用它的共軛虛量

$\bar{\alpha}|P\rangle$ 作为 $|A\rangle$，結果得

$$\langle B|\bar{\alpha}|P\rangle = \overline{\langle P|\alpha|B\rangle}. \tag{4}$$

这是一个普遍公式，它对于任意的右矢量 $|\beta\rangle$，$|P\rangle$ 与任意的綫性算符 α 都是成立的．它表示出最常用的共軛性质之一．

在(4)式中，用 $\bar{\alpha}$ 代 α，我們得到

$$\langle B|\bar{\bar{\alpha}}|P\rangle = \overline{\langle P|\bar{\alpha}|B\rangle} = \langle B|\alpha|P\rangle,$$

后一步是再次利用(4)式把 $|P\rangle$ 与 $|B\rangle$ 互換，而得的．此式对任意的 $|P\rangle$ 成立，所以我們从第一章的(4)式能得

$$\langle B|\bar{\bar{\alpha}} = \langle B|\alpha.$$

又因为这式对任意的 $\langle B|$ 成立，我們推出

$$\bar{\bar{\alpha}} = \alpha.$$

这样，一个綫性算符的共軛算符的共軛算符是原来的綫性算符．共軛算符的这种性质使它相似于一个数的共軛复数．容易驗証，在特殊情况下，即当綫性算符是一个数时，其共軛綫性算符就是这个数的共軛复数．因而假定綫性算符的共軛算符相应于力学变量的共軛复量，是合理的．綫性算符的共軛算符有了这种物理意义，我們于是也可以把綫性算符的共軛算符称为它的共軛复量．这一点与我們的符号 $\bar{\alpha}$ 相一致．

綫性算符可以等于它的共軛算符，而称这种綫性算符为“自共軛的”．它相应于实数的力学变量，所以它也可称为实綫性算符．任意的綫性算符可以分开为实部与純虚部，因此，“共軛复量”一詞可以用于綫性算符，而不用“共軛虚量”一詞．

两个綫性算符之和的共軛复量，显然即是它們的共軛复量之和．要得到两个綫性算符 α 与 β 之积的共軛复量，我們应用第一章的(7)式，而令

$$\langle A| = \langle P|\alpha, \quad \langle B| = \langle Q|\bar{\beta},$$

則有

$$|A\rangle = \bar{\alpha}|P\rangle, \quad |B\rangle = \beta|Q\rangle,$$

結果是

$$\langle Q|\bar{\beta}\bar{\alpha}|P\rangle = \overline{\langle P|\alpha\beta|Q\rangle} = \langle Q|\overline{\alpha\beta}|P\rangle,$$

后一步是由(4)式得到的．由于此式对任意的 $|P\rangle$ 与 $|Q\rangle$ 成立，

我們得

$$\bar{\beta}\,\bar{\alpha} = \overline{\alpha\beta}. \tag{5}$$

因此，两个綫性算符的乘积的共軛复量等于两个因子的共軛复量按相反次序的乘积.

作为这一結果的簡单例証，应該注意到，如果 ξ 与 η 是实算符，在一般情况下 $\xi\eta$ 不是实的. 这是同經典力学的一个重大区别. 但是，$\xi\eta + \eta\xi$ 是实算符，$i(\xi\eta - \eta\xi)$ 也是实的. 只有当 ξ 与 η 对易时，$\xi\eta$ 本身才也是实的. 还有，如 ξ 是实的，則 ξ^2 也是实的，并且，更一般地，ξ^n 也是实的，其中 n 为任意正整数.

我們連續运用关于两个綫性算符乘积的共軛复量的規則，即(5)式，就能得到三个綫性算符的乘积的共軛复量. 我們有

$$\overline{\alpha\beta\gamma} = \overline{\alpha(\beta\gamma)} = \overline{\beta\gamma}\,\bar{\alpha} = \bar{\gamma}\,\bar{\beta}\,\bar{\alpha}, \tag{6}$$

所以，三个綫性算符的乘积的共軛复量，等于各因子的共軛复量按相反次序的乘积. 这規則可以容易地推广到任意数目的綫性算符的乘积.

在上一节里，我們曾看到，乘积 $|A\rangle\langle B|$ 是一綫性算符. 我們可以得到它的共軛复量，办法是直接地引用共軛算符的定义. 用 $|A\rangle\langle B|$ 乘一般的左矢 $\langle P|$，我們得 $\langle P|A\rangle\langle B|$，它的共軛虛量是右矢

$$\overline{\langle P|A\rangle}|B\rangle = \langle A|P\rangle|B\rangle = |B\rangle\langle A|P\rangle,$$

因之

$$\overline{|A\rangle\langle B|} = |B\rangle\langle A|. \tag{7}$$

我們現在有了关于各种乘积的共軛复量与共軛虛量的几条規則，即是：第一章的(7)式，本章的(4)，(5)，(6)，(7)各式，以及 $\langle P|\alpha$ 的共軛虛量是 $\bar{\alpha}|P\rangle$ 的規則. 所有这些規則能够总結成为单一的全面的規則，即左矢量、右矢量与綫性算符的任意乘积的共軛虛量或共軛复量，是取每一因子的共軛虛量或共軛复量并反轉所有这些因子的次序相乘而得的. 容易驗証，这个規則在很一般的情况下都是成立的，对于那些上面未曾明显給出的各种情况，也都成立.

定理　如 ξ 是实綫性算符、而且对某一特定的右矢 $|P\rangle$ 有

$$\xi^m|P\rangle = 0, \tag{8}$$

式中 m 是正整数，则

$$\xi|P\rangle = 0.$$

为証明此定理，先取 $m=2$ 的特例．方程(8)就給出

$$\langle P|\xi^2|P\rangle = 0,$$

它指明，右矢量 $\xi|P\rangle$ 乘以其共軛虛量左矢 $\langle P|\xi$ 为零．由第一章(8)式的假定，用 $\xi|P\rangle$ 作为 $|A\rangle$，我們就看到 $\xi|P\rangle$ 必然为零．这样，在 $m=2$ 时，定理已經証明．

現在取 $m>2$，并令

$$\xi^{m-2}|P\rangle = |Q\rangle,$$

方程(8)就給出

$$\xi^2|Q\rangle = 0.$$

应用 $m=2$ 时的定理，我們得

$$\xi|Q\rangle = 0,$$

即

$$\xi^{m-1}|P\rangle = 0. \tag{9}$$

重复由(8)式得到(9)式的过程，我們就能相継地得到

$$\xi^{m-2}|P\rangle = 0, \qquad \xi^{m-3}|P\rangle = 0, \cdots,$$
$$\xi^2|P\rangle = 0, \qquad \xi|P\rangle = 0.$$

所以定理一般地得到了証明．

§9. 本征值与本征矢量

我們必須对綫性算符的理論作进一步的发展，这个发展在于研究方程

$$\alpha|P\rangle = a|P\rangle, \tag{10}$$

其中 α 是綫性算符，而 a 是一个数．这个方程經常表現的形式是：α 是已知綫性算符，数 a 及右矢 $|P\rangle$ 則是未知量，我們需要去試图选择这些未知量，使它們滿足(10)式，当然不考慮 $|P\rangle=0$ 的无意义解．

方程(10)的意思是，綫性算符 α 如作用于右矢 $|P\rangle$ 上，恰恰

是对这个右矢乘以数值因子而不改变它的方向，或者是用因子零乘它，这样，它就不再有方向了．这个同样的算符 α 如作用到其他右矢上，当然一般地要改变它們的长度，也要改变它們的方向．应当注意到，在方程(10)中，重要的只是 $|P\rangle$ 的方向．如果我們用任意不为零的数乘 $|P\rangle$，则将对(10)式是否满足的問題不产生任何影响．

与(10)式一起，我們还应考虑共軛虛量形式的方程

$$\langle Q|\alpha = b\langle Q|, \tag{11}$$

其中 b 是一数．这里未知量是数 b 与不为零的左矢 $\langle Q|$．方程(10)与(11)在理論上具有根本性的重要意义，因而我們希望有某种特殊的詞句来描述有关各量之間的关系．如果(10)式得到满足，我們称 a 为綫性算符 α（或其相应的力学变量）的一个**本征值**[1]，我們称 $|P\rangle$ 为綫性算符 α（或其相应力学变量）的一个**本征右矢**．还有，我們説本征右矢 $|P\rangle$ **属于**本征值 a．同样地，如果(11)式满足，我們就称 b 为 α 的一个本征值，称 $\langle Q|$ 为属于本征值 b 的一个**本征左矢**．这几个名詞：本征值、本征右矢、本征左矢，当然仅仅当联系到某一个綫性算符或力学变量时才有意义．

用这样的术語，我們就可以断言，如果 α 的一本征右矢乘以任何不为零的数，得出的右矢也是一个本征右矢，并与原来的右矢属于同一本征值．可能一个綫性算符有两个或更多的互不相关的本征右矢量属于同一本征值．例如方程(10)可能有几个解：$|P1\rangle$，$|P2\rangle$，$|P3\rangle$，$\cdots$，它們全部都对同一的值 a 成立，而这些不同的本征右矢 $|P1\rangle$，$|P2\rangle$，$|P3\rangle\cdots$互不相关．在这种情况，显然，这些本征右矢的任意綫性組合，也是属于同一本征值的另一本征右矢．例如，

$$c_1|P1\rangle + c_2|P2\rangle + c_3|P3\rangle + \cdots$$

是方程(10)的另一解，其中 c_1，c_2，c_3，$\cdots$是任意的数．

---

1) 有时用“正规”(proper)一词来代替“本征”(eigen)，但这样做法不妥当，因为“正规”与“非正规”时常用在别的含义上．举例说，在 §15 与 §46，我们就用了“非正规函数”(improper function)与“原能量”(proper energy)．

当方程(10)及(11)中的綫性算符 α 是一个数 k 时，在这种特殊情况下，显然任意的右矢 $|P\rangle$ 及左矢 $\langle Q|$ 都满足这些方程，只要 a 与 b 都等于 k 就行. 这样，一个数被当作綫性算符来看，它只有一个本征值，而任意的右矢都是它的本征右矢，任意的左矢都是它的本征左矢，都属于这个唯一的本征值.

一个綫性算符 α 如不是实算符，关于它的本征值与本征矢量的理論，在量子力学中沒有很多用处. 因此，在理論的进一步发展中，我們仅限于那些实綫性算符. 用实綫性算符 ξ 来代替 α，則方程(10)与(11)成为

$$\xi|P\rangle = a|P\rangle, \tag{12}$$

$$\langle Q|\xi = b\langle Q|. \tag{13}$$

現在可以很快推出三个重要結果.

(i) 本征值全部是实数. 为証明满足方程(12)的 a 是实数，我們用左矢 $\langle P|$ 左乘(12)式，得到

$$\langle P|\xi|P\rangle = a\langle P|P\rangle.$$

此时从方程(4)，用 $\langle P|$ 代 $\langle B|$，用实綫性算符 ξ 代 α，我們看到 $\langle P|\xi|P\rangle$ 这个数一定是实数；又从 §6 的(8)式，看到 $\langle P|P\rangle$ 一定是不为零的实数. 因而 a 是实数. 同样地，用 $|Q\rangle$ 右乘(13)式，我們就能証明 b 是实数.

假定我們有(12)式的一个解，我們作出共軛虛量的方程，它将为

$$\langle P|\xi = a\langle P|,$$

这是由于 ξ 与 a 都是实的. 这个共軛虛量的方程現在提供出(13)式的一个解，即 $\langle Q| = \langle P|$ 及 $b = a$. 因此，我們得出

(ii) 联系于本征右矢的本征值，都同时是联系于本征左矢的本征值.

(iii) 任意本征右矢的共軛虛量，都是属于同一本征值的本征左矢，反之亦然. 最后这一結果，使我們能够合理地把相应于任意本征右矢或其共軛虛量左矢的态，称之为实的力学变量 ξ 的一个本征态.

各种实的力学变量的本征值与本征矢量，在量子力学中用得非常广泛，从而人們希望有某种系統的符号来表明它們. 下述的办法适用于大多数的目的. 如果 ξ 是一实的力学变量，我們称它的本征值为 ξ', ξ'', ξ^r, 等等. 这样，我們註一个字母本身表示一实的力学变量或实綫性算符，而註同一字母在右上角加上撇或者指数，来代表一个数，卽这个字母本身所代表的实綫性算符的本征值. 一本征矢量现在就可能用它所属的本征值来标志出来. 卽 $|\xi'\rangle$ 代表一个本征矢量，它属于力学变量 ξ 的本征值 ξ'. 如果在一工作中，我們遇到不止一个本征右矢属于力学变量的同一本征值，我們可以用一附加的标記，或者还可能用不止一个附加标記去区分它們. 这样，如果我要处理两个本征右矢，它們是属于 ξ 的同一本征值 ξ' 的，則我們可以称它們为 $|\xi'1\rangle$ 与 $|\xi'2\rangle$.

定理. 实力学变量的两个本征矢量，如属于不同的本征值，則它們是正交的.

为証明此定理，註 $|\xi'\rangle$ 与 $|\xi''\rangle$ 是实力学变量 ξ 的两个本征右矢，分别属于本征值 ξ' 与 ξ''. 我們就有方程

$$\xi|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle, \tag{14}$$

$$\xi|\xi''\rangle = \xi''|\xi''\rangle. \tag{15}$$

取(14)的共軛虛量，我們得到

$$\langle\xi'|\xi = \xi'\langle\xi'|.$$

用 $|\xi''\rangle$ 右乘上式給出

$$\langle\xi'|\xi|\xi''\rangle = \xi'\langle\xi'|\xi''\rangle,$$

而用 $\langle\xi'|$ 左乘(15)式給出

$$\langle\xi'|\xi|\xi''\rangle = \xi''\langle\xi'|\xi''\rangle.$$

因之，二式相減，得

$$(\xi' - \xi'')\langle\xi'|\xi''\rangle = 0. \tag{16}$$

上式指出，如果 $\xi' \neq \xi''$, 則 $\langle\xi'|\xi''\rangle = 0$, 卽这两个本征矢量 $|\xi'\rangle$ 与 $|\xi''\rangle$ 正交. 这个定理以后将称为做正交性定理.

我們已經討論了一个实綫性算符的本征值与本征矢量的性質，但是我們尚未考虑的問題是：对已知的实綫性算符，是否有本

征値与本征矢量存在，以及如果存在，如何去找出它們，这些問题在一般情况下是很难回答的．然而，有一个有用的特殊情况，它是十分容易处理的，那即是，当綫性算符例如 ξ 满足代数方程

$$\phi(\xi) \equiv \xi^n + a_1\xi^{n-1} + a_2\xi^{n-2} + \cdots + a_n = 0 \qquad (17)$$

时，系数 a 都是数．这个方程的意义当然是，綫性算符 $\phi(\xi)$ 作用于任意的右矢量或任意的左矢量上，其結果都是零．

設(17)式为 ξ 所满足的最簡单的代数方程．那么就可以証明：

(α) ξ 的本征值的个数是 n；

(β) ξ 的本征右矢的数目足以把无論什么右矢都表示为这些本征右矢之和．

代数形式 $\phi(\xi)$ 能分解为 n 个綫性因子，結果是

$$\phi(\xi) = (\xi - c_1)(\xi - c_2)(\xi - c_3)\cdots(\xi - c_n), \qquad (18)$$

c 都是数，并不假定它們完全不一样．这种因式分解法，对于 ξ 是一綫性算符，与 ξ 是一普通代数变量的两种情况，做起来完全一样，因为在（18）式中沒有任何量是与 ξ 不对易的．当 $\phi(\xi)$ 被 $(\xi - c_r)$除时，令其商式为 $\chi_r(\xi)$，即

$$\phi(\xi) \equiv (\xi - c_r)\chi_r(\xi), \qquad (r = 1, 2, 3\cdots n),$$

因而对于任意右矢 $|P\rangle$，

$$(\xi - c_r)\chi_r(\xi)|P\rangle = \phi(\xi)|P\rangle = 0. \qquad (19)$$

現在 $\chi_r(\xi)|P\rangle$ 不能对所有的 $|P\rangle$ 都为零，因为否則 $\chi_r(\xi)$ 本身会为零，我們就有 ξ 满足一个 $n-1$ 次的代数方程，这一点与我們的假定，即（17）式为 ξ 所满足的最簡单方程这一点相矛盾．如果我們选出 $|P\rangle$ 使得 $\chi_r(\xi)|P\rangle$ 不为零，那么方程（19）指出 $\chi_r(\xi)|P\rangle$ 是 ξ 的本征右矢，属于本征値 c_r．对于 r 从 1 到 n 的各个值，这种推断都是成立的，因而每一个 c 是 ξ 的一个本征值．沒有其他的数能为 ξ 的本征值，因为如果 ξ' 是任意本征值，右矢 $|\xi'\rangle$ 属于它，則

$$\xi|\xi'\rangle = \xi'|\xi'\rangle,$$

我們能推出

$$\phi(\xi)|\xi'\rangle = \phi(\xi')|\xi'\rangle,$$

因为式子的左边为零，我們必須有 $\phi(\xi')=0$.

为完成对(α)的証明，我們必須驗証各个 c 是沒有相同的. 假定 c 不全是不相同的，例如 c_s 出現 m 次，$m>1$，那么 $\phi(\xi)$ 的形式为

$$\phi(\xi)=(\xi-c_s)^m\theta(\xi),$$

$\theta(\xi)$是 ξ 的有理整函数. 方程(17)現在給出

$$(\xi-c_s)^m\theta(\xi)|A\rangle=0, \tag{20}$$

对任意的 $|A\rangle$ 都成立. 因为 c_s 是 ξ 的本征値，它一定是实数，所以($\xi-c_s$)是实綫性算符. 方程(20)現在与方程(8)是同一形式，而是用 ($\xi-c_s$) 代替(8)中的 ξ，用 $\theta(\xi)|A\rangle$ 代替 $|P\rangle$. 利用与(8)式相联系的定理，我們就有

$$(\xi-c_s)\theta(\xi)|A\rangle=0.$$

因为右矢 $|A\rangle$ 是任意的，

$$(\xi-c_s)\theta(\xi)=0,$$

这又与(17)是 ξ 所滿足的最簡单方程这一假定相矛盾了. 因之，各个 c 沒有相同的. 而(α)就被証明了.

令 $\chi_r(c_r)$ 为在代数表达式 $\chi_r(\xi)$ 中用 c_r 代替 ξ 而得的数値. 由于 c 是完全互不相同的，$\chi_r(c_r)$ 不能为零. 現在考慮下列表式

$$\sum_r \frac{\chi_r(\xi)}{\chi_r(c_r)}-1. \tag{21}$$

如果这里用 c_s 代替 ξ，除了 $r=s$ 的一項以外，求和中每一項都为零，因为当 $r\neq s$ 时 $\chi_r(\xi)$ 包含着因子 ($\xi-c_s$)；而 $r=s$ 的一項是 1，因此整个式子等于零. 这样，当令 ξ 等于数 $c_1, c_2, \cdots, c_n$ 中的任一个时，(21)式都等于零. 而且由于它只是 ξ 的 $n-1$ 次代数式，所以它将恆等于零. 如果我們現在用綫性算符 (21) 作用于一任意的右矢 $|P\rangle$，而使其結果为零，我們得

$$|P\rangle=\sum_r \frac{1}{\chi_r(c_r)}\chi_r(\xi)|P\rangle, \tag{22}$$

这里右边求和中的每一項，按照(19)式，是 ξ 的本征右矢（如果它不为零）. 方程(22)表示，任意的右矢 $|P\rangle$ 成为 ξ 的本征右矢之

和．因之就証明了(β)．

作为一簡单例子，我們可以考虑一个实綫性算符σ，它满足方程

$$\sigma^2 = 1, \tag{23}$$

那么，σ有两个本征値$+1$与-1．任意的右矢$|P\rangle$能被表示为

$$|P\rangle = \frac{1}{2}(1+\sigma)|P\rangle + \frac{1}{2}(1-\sigma)|P\rangle.$$

容易驗証，右边的两項都是σ的本征右矢，分别属于本征値$+1$与-1，只要它們不为零．

§10. 可观察量

关于态与力学变量怎样以数学形式表現在理論中，我們已作了一些假定．这些假定本身还不是自然規律．但是，当我們作出某些进一步假定以提供理論的物理解释时，这些假定就变成了自然規律了．这类进一步假定必須采取把观察的結果同数学表达中的方程联系起来的形式．

当我們作一次观察时，我們就是測量某个力学变量．从物理上看来，这样的測量結果显然总必須是实数，所以我們应当期望，我們能測量的任意力学变量必須是实数的力学变量．有人也可能認为，他能够測量一个复数的力学变量，其办法是分别地測量它的实部与虚部．但这一来就会引起了两次測量，或者两次观察，这在經典力学中是沒有問題的，而在量子力学中却是不行的，在量子力学中，一般地說，两次观察要互相干涉——認为两次观察能严格地同时作出一般是不允許的，而如果它們是很快地相継作出的，第一次观察，通常要干扰系統的态，并引进不确定性，这种不确定性就要影响第二次观察．因此，我們必須把我們能測量的力学变量限制为实的，在量子力学中，力学变量为实的条件就是§8所給出的．然而不是每一个实的力学变量都能測量的．还需要进一步的限制，这一点我們在后面会看出来．

現在，我們对理論的物理解释作某些假定．如果力学系統是

处于实力学变量ξ的本征态,属于本征值ξ',那么,对ξ的测量就一定給出結果为数ξ'. 反过来,如果系統处于这样的态,在其中对实力学变量ξ的测量肯定給出一特定結果(而不是象一般情况那样按照几率规則給出几个可能結果中的这一个或那一个),那么,这个态就是ξ的本征态,而测量的結果就是ξ的本征值,这个本征态是属于此本征值的. 由于实算符的本征值总是实数,这些假定是合理的.

下面将写出这些假定的某些直接推論. 如果实力学变量ξ有两个或更多个本征态属于同一本征值ξ',那么,由这些本征态所迭加而成的任何态,也都是ξ的本征态,并且也属于本征值ξ'. 我們能推断,如果我們有两个或更多个态,对于它們测量ξ都肯定地給出結果ξ',那么,对于由它們迭加而成的任何态,测量ξ将仍然肯定地給出結果ξ'. 这一点使我們对态的迭加的物理意义有了某些了解. 再者,ξ的两个属于不同本征值的本征态是正交的. 我們可以推断,两个态若对它們测量ξ时肯定給出两个不同的結果,它們就是正交的. 这一点使我們对正交态的物理意义有某些了解.

当我們测量一个实的力学变量ξ时,包含在测量动作中的干扰就会引起力学系統的态的突然变化. 从物理的連續性看来,如果我們在第一次测量ξ之后,立即进行同一个力学变量ξ的测量,那么第二次测量的結果必然与第一次的結果一样.因此,在第一次测量作过以后,在第二次测量的結果里就沒有不确定性了. 这即是說,在第一次测量作过以后,系統处于力学变量ξ的本征态,它所属的本征值等于第一次测量的結果. 如果第二次测量实际上并未进行,这个結論也仍然有效. 按这样的方法,我們看到,测量总是使系統突变到所测量的力学变量的本征态,这个本征态所属的本征值等于测量的結果.

我們能推断,对于处于任意态的力学系統,测量一实的力学变量的任何結果,都是其本征值之一. 反过来,每一本征值是对系統的某一态测量此力学变量的可能結果,因为如果此态是属于这个本征值的一个本征态,則测量結果肯定地就是此本征值. 上述这

些給出了本征值的物理意义．实力学变量的本征值的集合，就恰恰是测量此力学变量的各种可能結果．因此之故，計算本征值是一个重要問題．

我們要作的与理論的物理解释有关的另一个假設是，如果对处于一特定态的系統測量了某一实力学变量 ξ，則該系統因为測量而可能突变到的那些态是这样的，即原来的态与它們是相关的．由于系統所可能突变到的这些态都是 ξ 的本征态，因而原来的态是与 ξ 的本征态相关的．但是，原来的态可以是任意的态，所以，我們得出結論：任意的态是与 ξ 的本征态相关的．如果我們定义态的完全集是这样的一个集合，使得任意的态与它們是相关的，那么，我們的結論就能表达为 ξ 的本征态組成一完全集．

不是每个实力学变量都有足够多的本征态以組成完全集的．那些其本征态不組成完全集的力学变量就不是可以測量的量．按此方式，我們又得到一条件，即一个力学变量为了与測量相容，除了它必須是实的条件外，还必須滿足这个条件．如果一个实变量的本征态組成完全集，則我們称之为可观察量．于是，任何可以測量的量都是可观察量．

現在这样的問題出来了：是不是每个可观察量都能够測量？理論上講，回答是能的．实际上，要設計出能測量某一特定可观察量的仪器，可能是很为困难的事，有时甚至是超出实驗工作者的才能的；但理論总是允許我們去設想这种測量能够进行．

讓我們从数学上来考察使实力学变量 ξ 为可观察量的条件．它的本征值可能由分立的数集（有限个，或无穷多个）所組成，或者不是这样，它們是包括在某一范围內的所有的数，例如在 a 与 b 之間的所有的数．在前一情况下，任意态与 ξ 的本征态相关的条件是，任意右矢能表示为 ξ 的本征右矢之和．在后一情况下，这个条件需要加以修改，因为我們可以用一积分代替求和，即右矢 $|P\rangle$ 可以表示为 ξ 的本征右矢的积分，

$$|P\rangle=\int|\xi'\rangle d\xi', \tag{24}$$

$|\xi'\rangle$ 是 ξ 的本征右矢，属于本征值 ξ'，积分的范围即是本征值的范围，因为这样的右矢是与 ξ 的本征右矢相关的. 然而，不是每一个与 ξ 的本征右矢相关的右矢，都能表示为(24)式右边的形式，因为本征右矢之一本身就不能这样表示，而且更一般地，任意个本征右矢之和也不能这样表示. 因此，ξ 的本征右矢組成完全集的条件应为：任意右矢 $|P\rangle$ 能表示为 ξ 的本征右矢的一个积分加一个和，即

$$|P\rangle = \int |\xi' c\rangle d\xi' + \sum_r |\xi^r d\rangle, \tag{25}$$

其中 $|\xi' c\rangle$，$|\xi^r d\rangle$ 全是 ξ 的本征右矢，标記 c 与 d 插进去是为了当本征值 ξ' 与 ξ^r 相等时区分这两个不同的本征右矢；其中积分要包括本征值的整个范围，求和是对它們作任意的选择而进行的. 当 ξ 的本征值是由一个范围內的数所組成的情况下，如果这一条件(即(25)式)满足了，那么 ξ 就是可观察量.

有时还有更一般的情况会出現，即是，ξ 的本征值可能包括一范围內連續的数，还加上在此区域外的分立的数集. 在这种情况下，ξ 是可观察量的条件仍然是，任意的右矢将表示为(25)式右边的形式，但对 r 的求和現在应当是对本征值的分立的数集求和，加上对連續的本征值中任意选出的一些求和.

要从数学上来决定一特定的实数的力学变量是否满足成为可观察量的条件，往往是很困难的；因为找出全部本征值与本征矢量的問題一般地是很困难的. 但是，我們从实驗基础上有足够的理由相信，某力学变量是可以測量的，并且我們可以合理地假定它是可观察量，虽然沒有数学証明. 在理論的发展过程中，这种事是我們常常要做的，例如，我們将假定任意力学系統的能量总是可观察量，虽然要証明这一点，除了簡单的情况而外，是超出当前数学分析的力量的.

在实数的力学变量为一个数的特殊情况下，每个态都是本征态，这个力学变量显然是可观察量. 对它的任何測量总是得出同样結果，所以它恰恰就是一个物理常数，如象电子的电荷. 这样，

在量子力学里的物理常数可以看成为具有单一本征值的可观察量，或者也可看成只是在方程中出現的一个数，这两种观点是等效的。

如果实数的力学变量满足一个代数方程，那么，上节的結果(β)表明，此力学变量是一可观察量。这样的可观察量有有限个数的本征值。反过来，任意可观察量如其本征值个数是有限的，則它滿足一代数方程，因为如果可观察量 ξ 有本征值 $\xi', \xi'', \cdots, \xi^n$，那么，

$$(\xi - \xi')(\xi - \xi'')\cdots(\xi - \xi^n)|P\rangle = 0,$$

对于 $|P\rangle$ 为 ξ 的任意本征右矢的情况是成立的，因之对任意的 $|P\rangle$ 它也成立，这是因为，由于 ξ 是可观察量，任意的右矢能表示为 ξ 的本征右矢之和。因此，

$$(\xi - \xi')(\xi - \xi'')\cdots(\xi - \xi^n) = 0. \tag{26}$$

作为一个例子，我們可考虑綫性算符 $|A\rangle\langle A|$，其中 $|A\rangle$ 是归一化的右矢。按照(7)式，这个綫性算是实的，而它的平方是

$$\{|A\rangle\langle A|\}^2 = |A\rangle\langle A|A\rangle\langle A| = |A\rangle\langle A|, \tag{27}$$

因为 $\langle A|A\rangle = 1$。这样，它的平方等于它本身，因而它滿足一代数方程，它是可观察量。它的本征值是 1 与 0，$|A\rangle$ 是它的本征右矢，属于本征值 1，所有与 $|A\rangle$ 正交的右矢是它的本征右矢，属于本征值 0。因此，如果力学系統处于相应于 $|A\rangle$ 的态，則测量此可观察量肯定地給出結果为 1；如果力学系統处于与这个态正交的任意态，則测其結果肯定为 0；所以，这个可观察量可以描述为决定系統是否处于 $|A\rangle$ 态的量。

在結束本节之前，我們应当考察一下，在(24)式中出現的一类积分在什么条件下才有意义。假定 $|X\rangle$ 与 $|Y\rangle$ 是两个右矢，它們能表示为可观察量 ξ 的本征右矢的积分：

$$|X\rangle = \int |\xi' x\rangle d\xi' \qquad |Y\rangle = \int |\xi'' y\rangle d\xi'',$$

x 与 y 是作为标記以区分这两个被积函数的。那么，我們取第一式的共軛虛量乘以第二式，就得

$$\langle X|Y\rangle = \iint \langle \xi' x|\xi'' y\rangle d\xi' d\xi''. \tag{28}$$

現在我們考慮一次积分

$$\int \langle \xi' x|\xi'' y\rangle d\xi''. \tag{29}$$

从正交定理可知，被积函数$\langle \xi' x|\xi'' y\rangle$在积分的全部范围里，除了一点 $\xi'' = \xi'$ 而外，都要为零. 如果被积函数在这一点是有限的，則积分(29)为零，而这一点是对所有的 ξ'成立的，于是我們从(28)得到 $\langle X|Y\rangle$为零. 但是因为 $\langle X|Y\rangle$一般地不为零，所以，一般地$\langle \xi' x|\xi' y\rangle$必須是这样的无穷大，使得(29)式不为零而成为有限值. 为滿足这一点所要求的无穷大形式将在 §15 內討論.

到現在为止，我們的工作中已經不言而喻的是，我們的左矢量与右矢量都具有有限长度，它們的标量乘积是有限的. 而現在我們看到，当我們研究具有連續的本征值的可观察量的本征矢量时，就有必要放寬这个条件. 如果我們不放寬它，則本征值为連續的現象就不能出現，而对大多数实际問題說来，我們的理論就太弱了.

在上式中取 $|X\rangle = |Y\rangle$，我們得到的結果是一般地 $\langle \xi' x|\xi' x\rangle$ 是无穷大. 我們将假定如果 $|\xi' x\rangle \neq 0$，則

$$\int \langle \xi' x|\xi'' x\rangle d\xi'' > 0, \tag{30}$$

对于具有无限长度的矢量，我們把上式作为相应于 §6 中的 (8) 式的定律.

当矢量只限于为有限长度和具有有限的标量积时，左矢量与右矢量的空間数学家們称之为**希耳伯空間**. 而現在我們用的左矢与右矢，則形成了一个比希耳伯空間更普遍的空間.

我們現在来看，右矢量 $|P\rangle$ 按(25)式右边的形式的展开式是唯一的，只要在求和中沒有两項或更多項是关系到同一本征値的. 要証明此結果，让我們假定 $|P\rangle$ 可能有两个不同的展开式. 然后从其中一个減去另一个，我們就得到一个方程，其形式为

$$0=\int|\xi'a\rangle d\xi'+\sum_{s}|\xi^s b\rangle, \tag{31}$$

a 与 b 用作本征矢量的新标記，而对 s 求和包括从一个求和减去另一求和所剩下的所有項. 如果在(31)式中有一項是关系到分立的本征值 ξ^s，我們用 $\langle\xi^s b|$ 左乘(31)式,并利用正交性定理,就得到

$$0=\langle\xi^s b|\xi^s b\rangle,$$

它是与 §6 的(8)式相矛盾的. 再者,如果 (31) 式中的被积函数对某一本征值 ξ'' 不为零，而 ξ'' 不等于求和中出現的任意的 ξ^s，我們用 $\langle\xi''a|$ 左乘(31)式,并利用正交定理,就得

$$0=\int\langle\xi''a|\xi'a\rangle d\xi',$$

它与(30)式矛盾. 最后,如果在 (31) 式的求和中有一項与連續的本征值 ξ^t 有关,我們用 $\langle\xi^t b|$ 左乘(31)式,得到

$$0=\int\langle\xi^t b|\xi'a\rangle d\xi'+\langle\xi^t b|\xi^t b\rangle, \tag{32}$$

再用 $\langle\xi^t a|$ 左乘(31)式,得到

$$0=\int\langle\xi^t a|\xi'a\rangle d\xi'+\langle\xi^t a|\xi^t b\rangle. \tag{33}$$

由于(33)式中的积分是有限的，所以 $\langle\xi^t a|\xi^t b\rangle$ 是有限的，从而 $\langle\xi^t b|\xi^t a\rangle$也是有限的.于是(32)中的积分必定是零,从而$\langle\xi^t b|\xi^t b\rangle$为零，我們又得到了矛盾. 因此(31)式中每一項必須为零. 而右矢$|P\rangle$按(25)式右边的形式的展开式一定是唯一的.

§ 11. 可观察量的函数

令 ξ 为可观察量. 我們能用任意实数 k 乘它而得出另一可观察量 $k\xi$. 为了使我們的理論是自洽的,就必需要求当系統处于一态,測量可观察量 ξ 肯定地給出結果 ξ' 时，則測量可观察量 $k\xi$ 应当肯定地給出結果 $k\xi'$. 容易驗証,这个条件是滿足的. 对一个态測量 ξ 肯定給出結果 ξ',則相应于这个态的右矢是 ξ 的本征右矢，即 $|\xi'\rangle$，滿足下式

$$\xi|\xi'\rangle=\xi'|\xi'\rangle.$$

此方程引出

$$k\xi|\xi'\rangle = k\xi'|\xi'\rangle,$$

表明 $|\xi'\rangle$ 是 $k\xi$ 的本征右矢，属于本征值 $k\xi'$，因之测量 $k\xi$ 将肯定地給出結果 $k\xi'$.

更一般地，我們可以取 ξ 的任意实函数，如 $f(\xi)$，而把它当作一新的可观察量，每当測量 ξ 时，也自动地測量了这个新的可观察量，因为实験所决定的 ξ 的値也提供了 $f(\xi)$ 的値. 我們不必要限制 $f(\xi)$ 为实的，那么，它的实部与虛部就是两个可观察量，当測量 ξ 时也就自动地測量了这两个可观察量. 为了理論是自洽的，必需要求当系統处于一态，測量 ξ 肯定給出結果 ξ' 时，則測量 $f(\xi)$ 的实部与虛部都将肯定地給出結果为 $f(\xi')$ 的实部与虛部. 当 $f(\xi)$ 表示为冪級数的情况下，即

$$f(\xi) = c_0 + c_1\xi + c_2\xi^2 + c_3\xi^3 + \cdots,$$

其中各个 c 是数，上述条件也能用初等代数驗証. 在 f 为更一般的函数的情况下，要驗証上述条件有时是不可能的. 这时这个条件可以用来作为 $f(\xi)$ 的定义，从数学上看来，我們还未定义过这样的 $f(\xi)$. 这样，我們就能得到可观察量的函数的更一般的定义，要比冪級数所提供的定义更一般些.

我們一般地定义 $f(\xi)$ 是滿足下式的綫性算符:

$$f(\xi)|\xi'\rangle = f(\xi')|\xi'\rangle, \tag{34}$$

对 ξ 的每一个本征右矢 $|\xi'\rangle$ 都成立，其中 $f(\xi')$ 对于每一本征値 ξ' 都是数. 容易看出，当这个定义应用于一些相关的本征右矢 $|\xi'\rangle$ 时，它是自洽的. 如果我們有一本征右矢 $|\xi'A\rangle$，与 ξ 的其它几个的本征右矢相关，那么这些其他的本征右矢必須全部属于同一本征値 ξ'，否則我們就会有一形式如 (31) 式的方程，而我們已經看到这是不可能的. 我們如把 $|\xi'A\rangle$ 表示为 ξ 的其它本征右矢的綫性組合的方程，从左边乘以 $f(\xi)$，实际上只是用数 $f(\xi')$ 乘它里面的每一項，所以，我們显然得到一个自洽方程. 还有，方程 (34) 对于完全地定义綫性算符 $f(\xi)$ 是充分的，因为要得到 $f(\xi)$ 乘任意的右矢 $|P\rangle$ 的結果，我們只需把 $|P\rangle$ 展开成 (25) 式右边的

形式，并取

$$f(\xi)|P\rangle = \int f(\xi')|\xi'c\rangle d\xi' + \sum_r f(\xi^r)|\xi^r d\rangle \tag{35}$$

即可.

$f(\xi)$ 的共轭复量 $\overline{f(\xi)}$ 是由方程(34)的共轭虚量式所定义的，即

$$\langle\xi'|\overline{f(\xi)} = \bar{f}(\xi')\langle\xi'|,$$

上式对任意的本征左矢 $\langle\xi'|$ 成立. $\bar{f}(\xi')$ 是 $f(\xi')$ 的共轭复函数. 这里让我們用 ξ'' 代替 ξ'，并用任意的右矢 $|P\rangle$ 右乘此方程. 于是利用 $|P\rangle$ 的展开式(25)，我們得

$$\begin{aligned}\langle\xi''|\overline{f(\xi)}|P\rangle &= \bar{f}(\xi'')\langle\xi''|P\rangle \\ &= \int \bar{f}(\xi'')\langle\xi''|\xi'c\rangle d\xi' + \sum_r \bar{f}(\xi'')\langle\xi''|\xi^r d\rangle \\ &= \int \bar{f}(\xi'')\langle\xi''|\xi'c\rangle d\xi' + \bar{f}(\xi'')\langle\xi''|\xi''d\rangle,\end{aligned} \tag{36}$$

这里用了正交性定理，如果 ξ'' 不是(25)式求和中各項有关的本征値之一，那么 $\langle\xi''|\xi''d\rangle$ 应被理解为零. 再者，用共轭复函数 $\bar{f}(\xi')$ 代替(35)式中的 $f(\xi')$，并左乘以 $\langle\xi''|$，我們得

$$\langle\xi''|\bar{f}(\xi)|P\rangle = \int \bar{f}(\xi')\langle\xi''|\xi'c\rangle d\xi' + \bar{f}(\xi'')\langle\xi''|\xi''d\rangle.$$

此式的右边等于(36)式的右边，因为被积函数当 $\xi' \neq \xi''$ 时都为零. 因此，

$$\langle\xi''|\overline{f(\xi)}|P\rangle = \langle\xi''|\bar{f}(\xi)|P\rangle.$$

此式对任意本征左矢 $\langle\xi''|$ 与任意右矢 $|P\rangle$ 都成立，所以

$$\overline{f(\xi)} = \bar{f}(\xi). \tag{37}$$

这即是綫性算符 $f(\xi)$ 的共轭复量是 ξ 的共轭复函数 $\bar{f}$.

作为推論，如果 $f(\xi')$ 是 ξ' 的实函数，$f(\xi)$ 就是实綫性算符. 这样 $f(\xi)$ 也是可观察量，因为它的本征态組成一完全集，ξ 的每个本征态也都是 $f(\xi)$ 的本征态.

用上述定义，我們就能給可观察量的任意函数 f 以意义，只要实变量函数 $f(x)$ 的存在区域包括这个可观察量的全部本征値. 如

果存在区域还包括这些本征值以外的其他点，那么 $f(x)$ 在那些其他点上的值就对可观察量的函数不产生任何效果. 函数不必要是解析的，也不必要是連續的. 可观察量的函数 f 的本征值，正好就是可观察量的本征值的函数 f.

重要的是要注意到，定义可观察量的函数 f 的可能性要求，当 x 取可观察量的每一个本征值时，应当存在唯一的数 $f(x)$. 因之，函数 $f(x)$ 必須是单值的. 这一点可以从下列問題說明：当我們有一可观察量 $f(A)$，它是可观察量 A 的实函数；那么，是不是可观察量 A 是可观察量 $f(A)$ 的函数呢？如果 A 的不同的本征值 A' 总給出不同的 $f(A')$ 值，則此問題的回答是肯定的. 但是，如果存在着 A 的两个不同的本征值 A' 与 A''，而有 $f(A')=f(A'')$，那么，对可观察量 $f(A)$ 的本征值 $f(A')$，就将沒有可观察量 A 的唯一的本征值与之对应，而可观察量 A 就将不是可观察量 $f(A)$ 的函数了.

用数学方法，从这个定义容易驗証，一个可观察量的两个函数的和或积，都是这个可观察量的函数，而且，可观察量的函数的函数，也是这个可观察量的函数. 也容易看出，可观察量的函数的全部理論，在左矢与右矢之間是对称的，我們如不用(34)式的形式，而代之以

$$\langle\xi'|f(\xi)=f(\xi')\langle\xi'|, \tag{38}$$

我們就能同样地进行全部論述.

我們下面討論两个有实际重要性的例子来結束这一节，即逆算符与平方根. 如果一个可观察量的本征值都不为零，則这个可观察量的逆算符存在. 如可观察量 α 沒有为零的本征值，則其逆算符我們称之为 α^{-1}，或 $1/\alpha$，将滿足

$$\alpha^{-1}|\alpha'\rangle=\alpha'^{-1}|\alpha'\rangle, \tag{39}$$

其中 $|\alpha'\rangle$ 是 α 的本征右矢，属于本征值 α'. 因而

$$\alpha\alpha^{-1}|\alpha'\rangle=\alpha\alpha'^{-1}|\alpha'\rangle=|\alpha'\rangle.$$

因为此式对任意的本征右矢 $|\alpha'\rangle$ 成立，我們必須有

$$\alpha\alpha^{-1}=1, \tag{40}$$

同样地

$$\alpha^{-1}\alpha = 1. \tag{41}$$

这两个方程中的任一个就足以完全决定 α^{-1}，只要 α 沒有为零的本征值．为証明这一点，在(40)式的情况下，令 x 为任意的綫性算符，满足方程

$$\alpha x = 1$$

并用(39)式所定义的 α^{-1} 左乘此式的两边．結果是

$$\alpha^{-1}\alpha x = \alpha^{-1},$$

从(41)式就得

$$x = \alpha^{-1}.$$

方程(40)及(41)也能用以定义一个一般的綫性算符 α 的逆算符（如果逆算符存在的話），α 甚至不一定是实算符．这时只用这两个方程中的一个就不一定是足够的了．如果任意两个綫性算符 α 与 β 都有逆算符，則它們的乘积 $\alpha\beta$ 有逆算符

$$(\alpha\beta)^{-1} = \beta^{-1}\alpha^{-1}, \tag{42}$$

它是取每个因子的逆算符并按相反次序相乘而得的．我們注意到，(42)式的右边当乘以 $\alpha\beta$ 时，无論是右乘还是左乘，都能得到 1，从而驗証了(42)式．对乘积的逆算符的規則能直接地推广到两个以上的因子，即

$$(\alpha\beta\gamma\cdots)^{-1} = \cdots\gamma^{-1}\beta^{-1}\alpha^{-1}.$$

可观察量 α 的平方根总是存在的，如果 α 沒有負的本征值，它的平方根就是实算符．我們写为 $\sqrt{\alpha}$ 或 $\alpha^{1/2}$．它滿足

$$\sqrt{\alpha}\,|\alpha'\rangle = \pm\sqrt{\alpha'}\,|\alpha'\rangle, \tag{43}$$

$|\alpha'\rangle$ 是 α 的本征右矢，属于本征值 α'．因而，

$$\sqrt{\alpha}\sqrt{\alpha}\,|\alpha'\rangle = \sqrt{\alpha'}\sqrt{\alpha'}\,|\alpha'\rangle = \alpha'|\alpha'\rangle,$$

而且因为此式对任意本征右矢 $|\alpha'\rangle$ 成立，我們一定有

$$\sqrt{\alpha}\sqrt{\alpha} = \alpha. \tag{44}$$

由于(43)式中符号的双重性，平方根就有好几个．为了固定

其中之一，我們必須对每一本征值指定一特定符号．从一个本征值到另一本征值，这个符号可以不規則地变化，而方程(43)总是定义出一綫性算符$\sqrt{\alpha}$，滿足(44)式，并形成α的一平方根函数．如果α的一个本征值联系着两个或两个以上互不相关的本征右矢，那么，按照函数的定义，我們必須对每一这样的本征右矢在(43)式中給予同样的符号．但是，如果我們取不同的符号，方程(44)仍然会成立，因而方程(44)本身是不足以定义$\sqrt{\alpha}$的，只有在特殊情況下，即当属于任何本征值只有一个独立的本征右矢时才是例外．

一个可观察量的不同的平方根的数目是2^n，其中n是不为零的本征值的总数．实际上，平方根函数仅用于那些沒有負本征值的可观察量，而有用的特定平方根是(43)式中总是取正号的那一个．这一根将称为**正平方根**．

§12. 普遍的物理解釋

在§10的开头，我們为了得到数学理論的物理解释所做的一些假定是属于比較特殊的一类，因为它們仅仅对本征态有关的問題才能应用．我們需要一个更一般性的假定，在所涉及的态即令不是本征态的情况下，它也使我們能够从数学中引出物理知識．

在經典力学中，一个可观察量对系統的任意特定的态总是“有一个值”，象我們經常所說的一样．在量子力学中，有什么相应于这一点呢？如果我們取可观察量ξ与任意两个态x与y，相应于矢量$\langle x|$与$|y\rangle$，那么，我們能組成一个数$\langle x|\xi|y\rangle$．这个数同在經典理論中可观察量能“有”的值不是很密切的类比，其原因有三，即：(i)这个数与系統的两个态有关，而經典数值总是与一个态有关；(ii)它一般地不是个实数；以及(iii)它不是由可观察量与这两个态所唯一决定的，因为矢量$\langle x|$与$|y\rangle$包括着任意的数值因子．即令我們对$\langle x|$与$|y\rangle$加上使它們归一的条件，在$\langle x|\xi|y\rangle$中仍然有一个絕对值为1的不定因子．但是，如果我們取这两个态相同，即$|y\rangle$为$\langle x|$的共軛虛量，則这三个原因就不再起作用

了. 我們这样得到的数 $\langle x|\xi|x\rangle$ 一定是实数，而且当 $\langle x|$ 已归一化时，它也是唯一地决定了的，因为如果我們用任意因子 e^{ic} 乘 $\langle x|$,其中 c 为某实数，我們必須同时用 e^{-ic} 乘 $|x\rangle$,而 $\langle x|\xi|x\rangle$ 将不变.

因此，有人可能想要作出試探性的假定，即可观察量 ξ 对于态 x，在类似于經典含义的意义下，"有一值"为 $\langle x|\xi|x\rangle$. 然而，这个假定由于下述原因不会是令人滿意的. 讓我們取第二个可观察量 η，对于同样的态 x，按上述假定，它会有值为 $\langle x|\eta|x\rangle$. 从經典类比，我們应当期望，对这个态，两个可观察量之和会有一个值，等于这两个可观察量分别有的值之和，而且，两个可观察量之积也应有一值，等于这两个可观察量分别有的值之积. 的确，这試探性的假定会給这两可观察量之和有一值为 $\langle x|\xi+\eta|x\rangle$，而这个值确是等于 $\langle x|\xi|x\rangle$ 与 $\langle x|\eta|x\rangle$ 之和；但是，对于乘积，这个假定給出的值为 $\langle x|\xi\eta|x\rangle$ 或 $\langle x|\eta\xi|x\rangle$，而这两者中任何一个都不是与 $\langle x|\xi|x\rangle$ 及 $\langle x|\eta|x\rangle$ 用任何簡单方式相联系的.

然而，由于問題仅仅出在乘积上，而沒有出在总和上，因此把 $\langle x|\xi|x\rangle$ 称之为可观察量 ξ 在态 x 中所具有的**平均值**，会是合理的. 这是因为两个量之和的平均值一定等于它們的平均值之和，而积的平均值就不必等于它們的平均值之积. 因此，我們作出普遍性的假定：**如果对处于相应于 $|x\rangle$ 的态的系統，測量可观察量 ξ 很多次，則所得全部結果的平均值将为 $\langle x|\xi|x\rangle$，只要 $|x\rangle$ 是归一化的**. 如果态 x 是某一可观察量的属于連續本征值的本征态，則 $|x\rangle$ 必然不是归一化的；如果 $|x\rangle$ 不是归一化的，上述假定就改成：測量 ξ 的平均結果与 $\langle x|\xi|x\rangle$ 成比例. 这个普遍性假定为理論的普遍的物理解释提供了基础.

一个可观察量对某一特定态"有一特定值"的說法，在量子力学中只有在特殊情况下才是允許的，即当測量这个可观察量肯定地得出这个特定值，因而这个态是这个可观察量的本征态时才行. 从代数运算可以容易地驗証，按照这个对可观察量"有一值"的严格意义，如果两个可观察量对一特定态都有值，那么，对这个态，两

个可观察量之和（如果这个和也是可观察量[1]）有一值等于这两个可观察量分别所有的值之和，而且，两个可观察量之积（如果这个积也是可观察量[2]）也有一值等于这两个可观察量分别所有的值之积.

在一般情况下，我們不能說可观察量对一特定态有值，但是我們能說它对这个态有一个平均值．我們还可以进一步說，对这个态可观察量有任一指定值的几率，意思是指当我們測量这个可观察量时得到这个指定值的几率．这个几率可从普遍性的假定得到，其方式如下．

令这个可观察量为 ξ，又令态相应于归一化的右矢 $|x\rangle$．那么，普遍性假定告訴我們，不仅 ξ 的平均值为 $\langle x|\xi|x\rangle$，而且 ξ 的任意函数，例如 $f(\xi)$ 的平均值是 $\langle x|f(\xi)|x\rangle$．取 $f(\xi)$ 是 ξ 的这样一个函数，它在 $\xi=a$ 时为1，而在 $\xi\neq a$ 时为0．根据我們关于可观察量的函数的普遍理論，这个函数是有意义的，它可以用 $\delta_{\xi a}$ 代表，这个符号与下面 § 16 中（17）式所給出的带两个下角标的 δ 符号的一般記法相符．ξ 的这个函数的平均值恰好就是 ξ 有值 a 的几率，我們用 P_a 代表．因而，

$$P_a=\langle x|\delta_{\xi a}|x\rangle. \tag{45}$$

如果 a 不是 ξ 的本征值，則 $\delta_{\xi a}$ 乘任何 ξ 的本征右矢結果为零，从而有 $\delta_{\xi a}=0$ 及 $P_a=0$．这是与 §10 的結論相符的，即測量可观察量的任何結果一定是它的本征值之一．

如果測量 ξ 可能的結果是在一个范围內連續的，那么，在大多数物理問題中，ξ 确切地有特定值的几率是为零的．这时，物理上重要的量是，ξ 有值处于一小区域內的几率，例如它在 a 与 $a+da$ 之間的几率．这个几率我們可以称之为 $P(a)da$，等于 ξ 的一个函数的平均值，这个函数如 ξ 在 a 到 $a+da$ 之間，則为 1，而如

1) 这一点并不是显然成立的，因为这个和可能没有足够的本征态，以至它的本征态不能组成一完全集；在此情况下，这个和如被看成一单独的量，就不是可以测量的．

2) 这里为实量的条件可能不能满足．（因为两个实算符的乘积可能为复算符——译者注）；本征态能组成一完全集的条件也可能不能满足．

ξ 不在这区域內，就为零．按我們对可观察量的函数的普遍理論，ξ 的这个函数是有意义的，用 $\chi(\xi)$ 代表它，我們有

$$P(a)da = \langle x|\chi(\xi)|x\rangle. \tag{46}$$

如果在范围 a 到 $a+da$ 中不包括 ξ 的任何本征值；如上面一样，我們得到 $\chi(\xi)=0$ 与 $P(a)=0$．如果 $|x\rangle$ 沒有归一化，則(45)式的右边将仍然是比例于 ξ 有值 a 的几率，而(46)式的右边則仍然是比例于 ξ 有值处于范围 a 到 $a+da$ 之間的几率．

§10 的假定，即如果系統是在 ξ 的本征态，属于本征值 ξ'，則测量 ξ 肯定会給出結果 ξ' 这一假定，是与对物理解释的这种普遍假定相融洽的，而且事实上能够从后者推出．从普遍的假定出发，我們看到，如果 $|\xi'\rangle$ 是 ξ 的本征右矢，而属于本征值 ξ'，那么，当 ξ 的本征值为分立时，

$$\delta_{\xi a}|\xi'\rangle = 0，除非\ a=\xi'，$$

而当 ξ 的本征值在一区域內时，

$\chi(\xi)|\xi'\rangle = 0$，除非 ξ' 在区域 a 到 $a+da$ 中．无論那种情况，对相应于 $|\xi'\rangle$ 的态，ξ 有任何不是 ξ' 的值的几率都等于零．

ξ 的本征态属于一連續区內的本征值 ξ'，是一个在实践上不可能严格地实现的态，因为要得到 ξ 精确地等于 ξ'，就要求有无穷大的精确程度．在实践上能达到的最高希望是，能得到 ξ 处在值 ξ' 附近的一个小区域中．这时，系統就是处于接近于 ξ 的本征态的一个态．因此，一个本征态属于連續区內的某一本征值，是实际上所能达到的情况的一种数学的理想化．虽然如此，这样的本征态在理論上起着非常有益的作用，而使我們沒有它不行．科学中有許多理論概念的例子，这些理論概念是实际上遇到的事物的极限，虽然它們在实驗上是不能实現的，但它們对于自然規律的精确表达是有用的；而这里又有了这样一个例子．很可能，相应于这些态的右矢量的長度为无穷大正是与它們的不能实現有联系的；而所有可以实現的态相应于那些能归一化的右矢量，这些右矢量組成一希耳伯空間．

§ 13. 对易性与相容性

一个态可以同时是两个可观察量的本征态. 如果这个态相应于右矢量 $|A\rangle$,而这两个可观察量为 ξ 与 η, 我們就应有下列两个方程:

$$\xi|A\rangle = \xi'|A\rangle,$$
$$\eta|A\rangle = \eta'|A\rangle,$$

其中 ξ' 是 ξ 的本征値, η' 是 η 的本征値. 我們由此可推导出

$$\xi\eta|A\rangle = \xi\eta'|A\rangle = \xi'\eta'|A\rangle = \xi'\eta|A\rangle = \eta\xi'|A\rangle = \eta\xi|A\rangle,$$

即

$$(\xi\eta - \eta\xi)|A\rangle = 0.$$

这个結果提示,如果 $\xi\eta - \eta\xi = 0$,即这两个可观察量是对易的,則共同本征态肯定存在. 如果它們是不可对易的,則共同本征态不是不可能有,就是比較少有的例外. 另一方面,如果它們的确是对易的,就将存在着这么多的共同本征态,以至这些共同本征态能組成一个完全集,現在将証明这一点.

令 ξ 与 η 为两个对易的可观察量. 取 η 的一本征右矢, 如 $|\eta'\rangle$, 属于本征值 η', 并把它按 (25) 式右边的形式展开成 ξ 的本征右矢的組合,即

$$|\eta'\rangle = \int |\xi'\eta'c\rangle d\xi' + \sum_r |\xi^r\eta'd\rangle. \tag{47}$$

这里, 在右边的 ξ 的本征右矢中已加进去 η' 作为一附加的标記, 其目的是让我們注意到, 它們是由一特殊的右矢量 $|\eta'\rangle$ 的展开而得的,而不是象在(25)式中的一般性的. 現在我們可以証明, ξ 的这些本征右矢中的每一个,也是 η 的本征右矢,属于本征値 η'. 我們有

$$0 = (\eta - \eta')|\eta'\rangle =$$
$$= \int (\eta - \eta')|\xi'\eta'c\rangle d\xi' + \sum_r (\eta - \eta')|\xi^r\eta'd\rangle. \tag{48}$$

而右矢 $(\eta - \eta')|\xi^r\eta'd\rangle$ 满足

$$\xi(\eta-\eta')|\xi^r\eta'd\rangle=(\eta-\eta')\xi|\xi^r\eta'd\rangle=(\eta-\eta')\xi^r|\xi^r\eta'd\rangle=$$
$$=\xi^r(\eta-\eta')|\xi^r\eta'd\rangle,$$

这表明它是 ξ 的本征右矢，属于本征值 ξ^r，同样地，右矢 $(\eta-\eta')|\xi'\eta'c\rangle$ 是 ξ 的本征右矢，属于本征值 ξ'. 方程(48)因此給出 ξ 的本征右矢的积分加上求和而等于零，而这种式子我們已經在方程(31)看到过，除非被积函数与求和中的每一項都为零，否則是不可能的. 因而我們得

$$(\eta-\eta')|\xi'\eta'c\rangle=0,\quad (\eta-\eta')|\xi^r\eta'd\rangle=0,$$

所以，出現在(47)式右边的所有右矢都是 η 的本征右矢，同时也是 ξ 的本征右矢. 方程(47)現在給出 $|\eta'\rangle$ 展开成 ξ 与 η 的共同本征右矢的組合. 因为任意右矢都能展开成 η 的本征右矢 $|\eta'\rangle$ 的組合，由此得出任意右矢都能展开成为 ξ 与 η 的共同本征右矢的組合，因此，共同本征态組成一个完全集.

上述 ξ 与 η 的共同本征右矢 $|\xi'\eta'c\rangle$ 与 $|\xi^r\eta'd\rangle$，是用它們所属的本征值 ξ' 与 η' 或者 ξ^r 与 η' 标記的，另外还加上标記 c 与 d，它們有时也是必要的. 用本征值作为共同本征矢量的标記的办法，我們在以后要广泛地采用，就象我們在前面对单一的可观察量的本征矢量所采用的一样.

上述定理的逆定理是，如 ξ 与 η 是两个这样的可观察量，它們的共同本征态組成一完全集，則 ξ 与 η 对易. 为証明这一定理，我們注意到，如 $|\xi'\eta'\rangle$ 是一共同本征右矢，属于本征值 ξ' 与 η'，則

$$(\xi\eta-\eta\xi)|\xi'\eta'\rangle=(\xi'\eta'-\eta'\xi')|\xi'\eta'\rangle=0. \qquad (49)$$

因为共同本征态組成一完全集，一个任意的右矢 $|P\rangle$ 可以展开成共同本征右矢 $|\xi'\eta'\rangle$ 的組合，而对每一个 $|\xi'\eta'\rangle$，(49)式都成立，因而

$$(\xi\eta-\eta\xi)|P\rangle=0,$$

所以

$$\xi\eta-\eta\xi=0.$$

共同本征态的概念可以推广到两个以上的可观察量，而且上述定理及其逆定理也仍然成立. 即如果任意一組可观察量中每一

个与其他所有的都对易，則它們的共同本征态組成一完全集．而且反过来也成立．两个可观察量情况下的論証，对于普遍的情况也是适用的．例如，如果我們有三个对易的可观察量 ξ, η, ζ，我們可以把 ξ 与 η 的任意共同本征右矢展开为 ζ 的本征右矢的組合，然后再去証明 ζ 的这些本征右矢中的每一个也是 ξ 与 η 的本征右矢．这样，ξ 与 η 的共同本征右矢就展开为 ξ, η 与 ζ 的共同本征右矢的組合，由于任何右矢都能展开为 ξ 与 η 的共同本征右矢的組合，因而它就也能展开成为 ξ, η 与 ζ 三者的共同本征右矢的組合．

应用于共同本征右矢的正交性定理告訴我們，一組对易的可观察量的两个本征矢量是正交的，只要它們所属的两組本征値有任意一点不相同．

由于两个或更多的对易的可观察量的共同本征态組成完全集，我們可以建立两个或更多的可观察量的函数的理論，其方式完全与§11中建立单个可观察量的函数的理論相同．如果 $\xi, \eta, \zeta\cdots$ 是对易的可观察量，我們定义它們的一般函数 f 为适合下式的綫性算符 $f(\xi, \eta, \zeta\cdots)$：

$$f(\xi, \eta, \zeta, \cdots)|\xi'\eta'\zeta'\cdots\rangle = f(\xi', \eta', \zeta', \cdots)|\xi'\eta'\zeta'\cdots\rangle, \quad (50)$$

其中 $|\xi'\eta'\zeta'\cdots\rangle$ 是 $\xi, \eta, \zeta, \cdots$ 的共同本征右矢，属于本征値 ξ', η', ζ', $\cdots$．这里，f 是任意函数，只要 $f(a, b, c\cdots)$ 当 $a, b, c\cdots$ 取 $\xi, \eta, \zeta\cdots$ 的所有本征値时都是有定义的．就象在(34)式中定义的单个可观察量的函数一样，我們現在能証明，$f(\xi, \eta, \zeta, \cdots)$ 是由(50)式完全决定了的，也能証明与(37)式相应的关系

$$\overline{f(\xi, \eta, \zeta, \cdots)} = \bar{f}(\xi, \eta, \zeta, \cdots),$$

并且还能証明，如 $f(a, b, c, \cdots)$ 是实函数，則 $f(\xi, \eta, \zeta, \cdots)$ 是实算符，并且是可观察量．

現在我們来把(45)式与(46)式的結果进行推广．給出一組对易的可观察量 $\xi, \eta, \zeta, \cdots$，我們可以形成它們的一个函数，在 $\xi = a$, $\eta = b$, $\zeta = c$, $\cdots$ 时，此函数为 1，其中 $a, b, c, \cdots$ 是实数，而当这些条件中有任一个不滿足时，此函数就为零．这个函数

可以写成 $\delta_{\xi a}\delta_{\eta b}\delta_{\zeta c}\cdots$，而且实际上，它的确是因子 $\delta_{\xi a}, \delta_{\eta b}, \delta_{\zeta c}, \cdots$ 按任意次序的乘积，这些因子是作为单个可观察量的函数而定义的，如果我們用这个乘积作为函数 $f(\xi, \eta, \zeta, \cdots)$ 代入(50)式的左边，就可以看到这一点。这个函数对任意态的平均值是 $\xi, \eta, \zeta, \cdots$ 对此态分别有值 $a, b, c\cdots$ 的几率 $P_{abc\cdots}$。这样，如果此态相应于归一化的右矢量 $|x\rangle$，从我們对物理解释的普遍性假定，我們得到

$$P_{abc\cdots} = \langle x|\delta_{\xi a}\delta_{\eta b}\delta_{\zeta c}\cdots|x\rangle, \tag{51}$$

除非这些数 $a, b, c\cdots$ 中每一个都是相应的可观察量的本征值，否则 $P_{abc\cdots}$ 就为零。如果这組数 $a, b, c, \cdots$ 中的任一个是相应的可观察量在一連續范围內的本征值，则 P_{abc} 通常也将为零，但在这种情况下，我們就要放弃可观察量应精确地有一值的要求，而代之以它应有一值处于一小区域內的要求；这种做法包含着不用(51)式中的 δ 因子，而代之以象方程(46)中的 $\chi(\xi)$ 那样的因子。对可观察量 $\xi, \eta, \zeta, \cdots$ 中的每一个，如果它的相应的数值 $a, b, c, \cdots$ 处于本征值的連續区域內，我們都作这样的代替，那么就将得到一个一般不为零的几率。

如果某些可观察量对易，就存在着一些态，对这些态这些可观察量全部有特定的值，这是按 §12 所說明的意义上講的。这些态即是共同本征态。这样，我們就能给出几个对易的可观察量同时有值的意义。进一步，从(51)式我們还看到，对任意态，我們能给出同时测量几个对易可观察量而得到一組特定結果的几率的含义。这个結論是一重要的新发展。一般地講，我們对处于特定态的系統进行观察，就不能不干扰这个态，不能不妨碍对它进行第二次观察的目的。我們因而不能給两个同时进行的观察以任何意义。但是，上述結論告訴我們，在特殊情况下，即当这两个可观察量对易的情况下，两次观察应当被看成是互不干涉的，或者說，是相容的，在这样的方式下，我們能給同时进行两个观察以意义，我們也能討論得到任何一組特定結果的几率。事实上，这两个观察可以看成是具有較复杂形式的单一观察，其結果可用两个数来表示而不是

用一个数．从普遍理論的观点看来，任意两个或更多的对易可观察量，可以当成单个的可观察量，对它們的測量結果包括两个或更多的数． 对它們进行这样的測量而肯定得出特定結果的那些态，都是共同本征态．

第三章　表象理論

§14. 基矢量

在前几章里，我們建立起一套代数方案，它包括三种抽象的量，即左矢量、右矢量与綫性算符，并且我們用这三种抽象的量表述了量子力学中的若干基本規律．用这些抽象量把理論継續发展下去，并用之于特定問題的应用，也会是可能的．但是，为了某些目的，更方便的是用具有类似数学性質的数字集合来代替这些抽象量，并用这些数字集合进行表述．这个程序类似于在几何学中采用坐标，它的优点在于，在数学上給我們更大的能力去解决特定問題．

抽象量被数字代替的方式不是唯一的，会有許多可能的方式，相当于几何中有許多种坐标系統．这些方式中的每一个叫做一个表象，代替抽象量的数字集合叫做在此表象中这个抽象量的表示式．这样，一个抽象量的表示式，就相当于一个几何对象的坐标．当我們有一个要在量子力学中解决的特定問題时，我們就选择一个表象，使得在問題中出現的几个最重要的抽象量在这个表象中的表示式具有尽可能簡单的形式，来減少所花的劳动．

为了在普遍方式下建立表象，我們取左矢量的一个完全集，即这样一个集，使任何左矢量都能表示为它們的綫性組合（一个和，或者一个积分，或者也可能是一个和加一个积分）．这些左矢我們称之为表象的基左矢．我們将看到，一套基左矢足以完全确定一个表象．

取任意右矢 $|a\rangle$，并同每一基左矢构成标量积．如此获得的一組数就构成了 $|a\rangle$ 的表示式．这一組数足以完全决定右矢 $|a\rangle$，因为，如果有第二个右矢 $|a_1\rangle$ 具有相同的一組数，則二者之差

$|a\rangle - |a_1\rangle$ 对任意基左矢的标量积将为零，并因之它对任意左矢的标量积为零，从而 $|a\rangle - |a_1\rangle$ 本身为零.

我們可以假定，基左矢由一个或多个参量所标記，这些参量 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots\lambda_u$，中的每一个可取一定的数值. 这样基左矢就可以写成 $\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|$，而 $|a\rangle$ 的表示式可以写成 $\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|a\rangle$. 这个表示式现在由一組数所組成，对 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots\lambda_u$ 在它們各自的范围內所可能取的每一組值，就有一个数. 这样的一組数恰恰就形成变数 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots\lambda_u$ 的一个函数. 因此，一个右矢的表示式可以看成是一組数，也可以看成是那些用以标記基左矢的变量的一个函数.

如果我們的力学系統互不相关的态的数目是有限的，例如說等于 n，那么取 n 个基左矢就够了，它們可以用单一的参量 λ 来标記，λ 取值 $1, 2, 3, \cdots n$. 任意右矢 $|a\rangle$ 的表示式现在就由一組 n 个数組成，即 $\langle 1|a\rangle, \langle 2|a\rangle, \langle 3|a\rangle, \cdots, \langle n|a\rangle$，这一組数正是在通常意义下矢量 $|a\rangle$ 在一个坐标系中的坐标. 右矢量的表示式的概念，正是普通矢量的坐标的概念的一种推广，而当右矢量空間的維数有限时，它就簡化为普通矢量的坐标的概念.

在一个一般的表象中，不需要基左矢全部互不相关. 但是在实际上使用的大多数表象中，基左矢全是互不相关的，并且满足更为严格的条件，即它們之中任何两个都是正交的. 这种表象就叫做**正交表象**.

取一正交表象，其基左矢 $\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|$ 由参量 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots\lambda_u$ 标記，这些参量的范围全都是实的. 取一右矢 $|a\rangle$ 并构成其表示式 $\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|a\rangle$，现在取一組数 $\lambda_1\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|a\rangle$，并把它們看成是一个新右矢 $|b\rangle$ 的表示式. 这是可以允許的，因为，由于基左矢是互不相关的，构成一个右矢的表示式的諸数字也是互不相关的. 右矢 $|b\rangle$ 由下列方程定义:

$$\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|b\rangle = \lambda_1\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|a\rangle.$$

右矢 $|b\rangle$ 显然为右矢 $|a\rangle$ 的綫性函数，所以它可以被看成是一綫性算符作用于 $|a\rangle$ 的結果. 如令此綫性算符为 L_1，就有

$$|b\rangle = L_1|a\rangle,$$

因而

$$\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|L_1|a\rangle = \lambda_1\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|a\rangle.$$

这一方程对任意右矢 $|a\rangle$ 成立,所以我們得

$$\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|L_1 = \lambda_1\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|. \tag{1}$$

方程(1)可以看成是綫性算符 L_1 的定义. 它指出, 每一基左矢是 L_1 的一个本征左矢,参量 λ_1 的值是所属的本征值.

从基左矢是正交的条件出发,我們能推导出 L_1 是实算符, 而且是可观察量. 令 $\lambda_1', \lambda_2', \cdots\lambda_u'$ 及 $\lambda_1'', \lambda_2'', \cdots, \lambda_u''$ 为参量 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots\lambda_u$ 的两組值. 我們用各个 λ' 代(1)式中的各个 λ, 并且用基左矢 $\langle\lambda_1''\lambda_2''\cdots\lambda_u''|$ 的共軛虛量 $|\lambda_1''\lambda_2''\cdots\lambda_u''\rangle$右乘(1)式两边,得

$$\langle\lambda_1'\lambda_2'\cdots\lambda_u'|L_1|\lambda_1''\lambda_2''\cdots\lambda_u''\rangle = \lambda_1'\langle\lambda_1'\lambda_2'\cdots\lambda_u'|\lambda_1''\lambda_2''\cdots\lambda_u''\rangle.$$

交換各个 λ' 与 λ'', 就得

$$\langle\lambda_1''\lambda_2''\cdots\lambda_u''|L_1|\lambda_1'\lambda_2'\cdots\lambda_u'\rangle = \lambda_1''\langle\lambda_1''\lambda_2''\cdots\lambda_u''|\lambda_1'\lambda_2'\cdots\lambda_u'\rangle.$$

由于基左矢是正交的, 除了对所有 r 从 1 到 u 都有 $\lambda_r' = \lambda_r''$ 以外, 这里两个式子的右边都为零, 而当 $\lambda_r' = \lambda_r''$ 时, 这两式的右边相等,并且是实数,因为 λ_1' 是实数. 因而, 不論这些 λ'' 是否等于 λ', 总有

$$\langle\lambda_1'\lambda_2'\cdots\lambda_u'|L_1|\lambda_1''\lambda_2''\cdots\lambda_u''\rangle = \overline{\langle\lambda_1''\lambda_2''\cdots\lambda_u''|L_1|\lambda_1'\lambda_2'\cdots\lambda_u'\rangle} =$$
$$= \langle\lambda_1'\lambda_2'\cdots\lambda_u'|\overline{L}_1|\lambda_1''\lambda_2''\cdots\lambda_u''\rangle,$$

上式的后一步是根据 §8 的(4)式得出的. 因为各个 $\langle\lambda_1'\lambda_2'\cdots\lambda_u'|$ 組成左矢的完全集,而各个 $|\lambda_1''\lambda_2''\cdots\lambda_u''\rangle$ 組成右矢的完全集, 我們可以推断 $L_1 = \overline{L}_1$. L_1 是可观察量所要求的另一条件,即它的本征态組成一完全集,显然是满足的,因为它有基左矢作为它的本征左矢,而基左矢是組成完全集的.

同样地, 我們能引进 $L_2, L_3, \cdots, L_u$, 办法是用因子 $\lambda_2, \lambda_3, \cdots, \lambda_u$ 依次地去乘 $\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|a\rangle$,并把結果得到的各組数分别作为右矢的表示式. 对这些算符 L 中的每一个都可以用同样的方法証明: 基左矢是它們的本征左矢,它們都是实的,而且都是可观察量. 基左矢是所有这些 L 的共同本征左矢. 因为这些共同本征左

矢組成完全集，从 §13 的一个定理可得出，这些 L 中任意两个是对易的.

現在我們来証明，如果 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_u$ 是任意一組对易的可观察量，我們就能建立一正交表象，在此表象中，基左矢是 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_u$ 的共同本征左矢. 首先，让我們假定，属于任意一組本征值 $\xi_1', \xi_2', \cdots \xi_u', \xi_1, \xi_2, \cdots \xi_u$ 的共同本征左矢不相关的只有一个. 这样，我們就可取这些共同本征左矢带上任意的数值系数，作为我們的基左矢. 由于正交性定理，它們都是互相正交的（它們之中的任意两个对这些可观察量 $\xi_1, \xi_2, \cdots \xi_u$ 的本征值中至少有一个是不相同的，这就足以使它們相互正交）. 并且，从 §13 的一个結果得知，它們足以組成一完全集. 它們可以方便地用所属的本征值 ξ_1', $\xi_2', \cdots \xi_u'$ 标記，結果它們之一就写成 $\langle\xi_1'\xi_2'\cdots\xi_u'|$.

現在我們轉到一般情况，即当 $\xi_1, \xi_2\cdots\xi_u$ 有几个不相关的共同本征左矢属于同一組本征值的情况，我們必須从属于同一組本征值 $\xi_1', \xi_2', \cdots, \xi_u'$ 的共同本征左矢中挑出一个完全的子集，在此子集中的共同本征左矢全是相互正交的（这里完全性条件的意义是，属于本征值 $\xi_1', \xi_2', \cdots, \xi_u'$ 的任意共同本征左矢能表为此子集中的共同本征左矢的綫性組合）. 我們必須对每一組本征值 $\xi_1', \xi_2'\cdots\xi_u'$ 都这样做，然后把所有子集中共同本征左矢放在一起，把它們当作这个表象的基左矢. 这些左矢全是正交的，因为如果其中两个属于不同組的本征值，则根据正交性定理，它們应正交；如果其中两个属于同一組本征值，則根据选出它們所用的特殊方法，它們也是正交的. 并且，它們在一起組成左矢的完全集，因为任意的左矢能表为共同本征左矢的綫性組合，而每一共同左矢又可表为在子集中的共同本征左矢的綫性組合. 选择这种子集的方法是无穷多的. 每一种选法提供一个正交表象.

为了标記这种一般情况下的基左矢，我們可以用它們所属的本征值 $\xi_1', \xi_2', \cdots, \xi_u'$，再加上某些附加的实变数，例如 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_v$，这些实变数是为了把那些属于同一組本征值的基矢区分开而必須引入的. 这样，一个基左矢就写成 $\langle\xi_1'\xi_2'\cdots\xi_u'\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_v|$.

相应于变数 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots \lambda_v$，我們也能用类似(1)式的方法定义出一些綫性算符 $L_1, L_2 \cdots, L_v$；并能証明，这些綫性算符以基左矢为其本征左矢；它們都是实算符，又都是可观察量；它們彼此可以对易，并且可以与各个 ξ 对易．基左矢現在就成为所有这些对易的可观察量 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_u, L_1, L_2, \cdots, L_v$ 的共同本征左矢．

让我們定义对易可观察量的完全集是这样一組可观察量，它們相互之間全是对易的，而且，对它們属于任意一組本征値的共同本征态都只有一个．这样，可观察量 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_u, L_1, L_2, \cdots L_v$ 組成一个对易可观察量的完全集，因为只有一个独立的共同本征左矢属于本征值 $\xi_1', \xi_2', \cdots, \xi_u', \lambda_1', \lambda_2', \cdots \lambda_v'$，那就是相应的基左矢．同样地，由方程(1)及其后面一段所定义的可观察量 $L_1, L_2, \cdots L_u$ 組成对易可观察量的完全集．借助于这个定义，这一节的主要結果可以簡要地表述为：

(i) 正交表象的基左矢是一个对易可观察量的完全集的共同本征左矢．

(ii) 已知一个对易可观察量的完全集，我們就可以用这个完全集的共同本征左矢为基左矢而建立一个正交表象．

(iii) 任意一个对易可观察量的集，都可以再加进某些可观察量而使之成为一个完全集．

(iv) 标記正交表象的基左矢的一个方便方法是使用对易可观察量的完全集的本征値，这个对易可观察量的完全集就是以这些基左矢为其共同本征左矢的．

我們称一个表象的基左矢的共軛虚量为此表象的基右矢．因而，如果基左矢用 $\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|$ 表示，基右矢就将用 $|\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u\rangle$ 表示．一个左矢 $\langle b|$ 的表示式就由它与每一基右矢的标量积所給出，即由 $\langle b|\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u\rangle$ 給出．象右矢的表示式一样，可以把它看成是一組数，也可看成是变数 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots \lambda_u$ 的一个函数．我們有

$$\langle b|\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u\rangle = \overline{\langle\lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_u|b\rangle},$$

上式指出，左矢的表示式是其共軛虚量右矢的表示式的共軛复数．

在一个正交表象里，若基左矢为对易可观察量的完全集，例如 ξ_1, ξ_2, $\cdots\xi_u$ 的共同本征左矢，则基右矢将是 ξ_1, ξ_2, $\cdots\xi_u$ 的共同本征右矢.

我們尚未考虑基矢量的长度問題. 对一个正交表象，自然的方法是把基矢量归一化，而不許它們的长度为任意的，这样做将对表象引入进一步的簡化. 但是，只有标記它們的参量全部都取分立值时，才有可能把它們归一化. 如果这些参量之中任意一个是連續变量，能取一区域內的全部数值，則基矢量是某一可观察量属于連續本征值的本征矢量；基矢量因而有无穷大的长度，我們从 §10 的討論中可以知道这一点(見38 頁). 这就需要某种另外的程序来确定那些应当乘到本征矢量上的数值因子. 为了获得处理这个問題的方便办法，就要求一个新的数学符号，我們将在下一节里提出它.

§ 15. δ 函数

我們在 §10 的工作要求我們去研究一些包含有某种无穷大的量. 在处理这些无穷大时为了得到一个精确的符号，我們引入一个量 $\delta(x)$，它由一个参量 x 决定，并满足下列条件:

$$\left.\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)dx = 1, \\ &\delta(x) = 0, \qquad \text{当 } x \neq 0 \text{ 时}. \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

为得到 $\delta(x)$ 的一个图象，我們取实变数 x 的一个函数，这个函数到处为零，只有在原点 $x = 0$ 附近的一个小范围內，例如其长度为 ϵ，这个函数不为零，而且，在此小范围內这个函数的值是很大的，以至它在这范围內的积分是 1. 函数在此小范围內的确切形状是无关紧要的，只要沒有不必要的过大的变化 (举例說，只要此函数总是在 ϵ^{-1} 的数量級). 这样，在 $\epsilon\to 0$ 的极限，这个函数就将成为 $\delta(x)$.

按照函数的通用的数学定义，要求一个函数在它的范围內每一点上都有一确定的值. 在这个意义下 $\delta(x)$ 就不是一个函数，而

是更一般性的某种东西，我們可以称之为一个“非正規函数”，以指出它不同于通常意义下的函数. 因此，$\delta(x)$ 不是一个能象普通函数那样一般地运用于数学分析中的函数，而是要把它的用途限制于某些显然不能引起前后矛盾的簡单的表現形式中.

作为例子可以指出，下列方程表示出 $\delta(x)$ 的最重要的性质：

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0), \tag{3}$$

其中 $f(x)$ 是 x 的任意連續函数. 我們从上述 $\delta(x)$ 的图象，就能容易地看出这个方程是对的. (3) 式的左边只取决于 $f(x)$ 非常靠近原点的值，所以我們可以用它在原点的值 $f(0)$ 来代替 $f(x)$，而不致产生重要的誤差. 因而可以从(2)的第一式得到方程(3). 我們在(3)中变换原点，就能导出公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a), \tag{4}$$

其中 a 是任意实数. 因此，用 $\delta(x-a)$ 乘 x 的一个函数，并对所有 x 积分这一过程，等效于用 a 代替 x 的过程. 如果 x 的函数不是一数字函数，而是取决于 x 的一个矢量或綫性算符，这个一般性結果也是成立的.

在(3)式与(4)式里，积分区域不必要是从 $-\infty$ 到 ∞，而可以是包括 δ 函数不为零的那个关鍵点的周围在内的任何区域. 在后面，我們一般把这种方程中的积分限省略掉，但仍应理解为积分区域是一个恰当的区域.

方程(3)与(4)表明，虽然非正規函数本身沒有明确定义的值，但当它在被积函数中作为一个因子出現时，积分却是有明确定义的值. 在量子理論中，只要出現非正規函数，它終于是要用在一个被积函数中的. 因此，应該可能把理論按一种形式重写，在这种形式里，非正規函数全部都只出現在被积函数中. 我們也就能完全消除掉非正規函数. 因而，使用非正規函数不会使理論的严格性受任何損失. 它仅仅是一个方便的符号，它使我們能把某些关系表現为一种簡明的形式，如果必要的話，我們也能把这些关系用不

含有非正規函数的形式重新写出，只不过表現的方式十分繁复，常常把推理掩盖得不易看清.

另一种定义 δ 函数的方法是，把它看成一个函数 $\epsilon(x)$ 的微商 $\epsilon'(x)$，$\epsilon(x)$ 由下式給出：

$$\left.\begin{aligned}\epsilon(x) &= 0, \quad (x<0),\\ \epsilon(x) &= 1, \quad (x>0).\end{aligned}\right\} \tag{5}$$

我們可以驗証，这个新的定义是与前面的定义等效的，办法是在(3)式的左边用 $\epsilon'(x)$ 代 $\delta(x)$，并用分部积分法积分. 我們得到，对 g_1 与 g_2 两个正数，有

$$\begin{aligned}\int_{-g_2}^{g_1} f(x)\epsilon'(x)dx &= [f(x)\epsilon(x)]_{-g_2}^{g_1} - \int_{-g_2}^{g_1} f'(x)\epsilon(x)dx\\ &= f(g_1) - \int_0^{g_1} f'(x)dx\\ &= f(0),\end{aligned}$$

与(3)式是符合的. 只要我們对一个不連續函数求微商时，就会出現 δ 函数.

关于 δ 函数，我們可以写出一些基本方程. 实质上，这些方程是含有 δ 函数的代数运算規則. 这些方程中任一个的意义是，当方程两边作为被积函数中的因子时所給出的結果相等.

这类方程的例子有

$$\delta(-x) = \delta(x), \tag{6}$$

$$x\delta(x) = 0, \tag{7}$$

$$\delta(ax) = a^{-1}\delta(x), \quad (a>0), \tag{8}$$

$$\delta(x^2-a^2) = \frac{1}{2}a^{-1}\{\delta(x-a)+\delta(x+a)\}, \ (a>0), \tag{9}$$

$$\int \delta(a-x)dx\delta(x-b) = \delta(a-b), \tag{10}$$

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a). \tag{11}$$

方程 (6) 仅說明 $\delta(x)$ 是它的变量 x 的偶函数，它的成立是浅而易見的. 要驗証(7)，我們取 x 的任意連續函数 $f(x)$，根据 (3) 式，就得

$$\int f(x) x\delta(x) dx = 0.$$

因此 $x\delta(x)$ 作为在被积函数中的因子是与零的作用相等的，而这就是(7)式的意义．(8)式与 (9) 式可用同样的初等推理験証．为験証(10)，我們取 a 的任意連續函数 $f(a)$．于是

$$\int f(a) da \int \delta(a-x) dx \delta(x-b) = \int \delta(x-b) dx \int f(a) da \delta(a-x)$$

$$= \int \delta(x-b) dx f(x) = \int f(a) da \delta(a-b).$$

因此，方程(10)的两边作为以 a 为积分变量的被积函数的因子，其作用相同．用同样方法还可証明，它們作为以 b 为积分变量的被积函数的因子，其作用也相同．所以方程(10)从两种观点来看都是对的．利用(4)式容易証明方程 (11) 从两种观点来看也都是对的．

如令 $f(x) = \delta(x-b)$，应用(4)式，就会得到方程 (10)．我們有时可以把非正規函数当成是普通連續函数来运用它，而不致得到錯誤結果，这里我們就有了一个例子．

方程(7)表明，每当我們对一方程的两边用一变数 x 去除，而 x 可以取为零的值时，我們应該在其中一边加上 $\delta(x)$ 的任意倍数．即从方程

$$A = B \tag{12}$$

我們不能推断

$$A/x = B/x,$$

而仅能推断

$$A/x = B/x + c\delta(x), \tag{13}$$

其中 c 是未知数．

作为应用 δ 函数的例子，我們可以研究 $\log x$ 的微分．通常的公式

$$\frac{d}{dx} \log x = \frac{1}{x} \tag{14}$$

在 $x = 0$ 的附近，需要再考察一下．为了使逆函数 $1/x$ 在 $x = 0$ 附近是明确定义的（按非正規函数的意义），我們必須对它加上一

个附加条件,这条件的要求是,它从$-\epsilon$到ϵ的积分为零. 有了这一附加条件,(14)的右边从$-\epsilon$到ϵ的积分为零,而(14)式左边从$-\epsilon$到$+\epsilon$的积分为$\log(-1)$,所以(14)就不是正确的方程了.为改正它,我們注意到,如取主值,$\log x$对x的負值有一純虛項$i\pi$. 当x經过零值时,这个純虛項不連續地变为零. 对此純虛項的微分所得的結果是$-i\pi\delta(x)$,所以(14)式应改为

$$\frac{d}{dx}\log x=\frac{1}{x}-i\pi\delta(x). \tag{15}$$

出現在(15)式中的逆函数与δ函数的这个特定結合,在碰撞过程的量子理論中起重要的作用(見第50节).

§16. 基矢量的性質

用δ函数的符号,我們就可以継續討論表象理論. 首先,让我們假定我們有单个的可观察量ξ,它本身組成一对易完全集,其条件是,属于任意的本征值ξ'只有ξ的一个本征态;并且让我們建立一个正交表象,其中基矢量是ξ的本征矢量,写成$\langle\xi'|$,$|\xi'\rangle$.

在ξ的本征值是分立的情况下,我們可以使基矢量归一化,那时我們有

$$\langle\xi'|\xi''\rangle=0 \quad (\xi'\neq\xi''),$$
$$\langle\xi'|\xi'\rangle=1.$$

这两个方程可以合并成单一方程

$$\langle\xi'|\xi''\rangle=\delta_{\xi'\xi''}, \tag{16}$$

其中有两个下角标的δ符号,我們今后常要用它,它的意义是

$$\left.\begin{aligned}\delta_{rs}&=0, \quad 当\ r\neq s,\\ &=1, \quad 当\ r=s.\end{aligned}\right\} \tag{17}$$

在ξ的本征值为連續的情况下,我們不能把基矢量归一化.如果这时我們考虑量$\langle\xi'|\xi''\rangle$,让ξ'固定而让ξ''变化,从与§10的(29)式相連系的討論中我們看到,这个量当$\xi'\neq\xi''$时为零,而它在ξ''的一区域內的积分是有限值,只要此区域包括ξ',令这一有限值等于c. 因此,从§10的(30)式得

$$\langle \xi' | \xi'' \rangle = c\delta(\xi' - \xi''),$$

其中 c 是一正数. 这个数可能随 ξ' 而变化, 所以, 我們应当把它写成 $c(\xi')$, 或者簡写为 c', 这样,我們有

$$\langle \xi' | \xi'' \rangle = c'\delta(\xi' - \xi''). \tag{18}$$

从另一方面,我們有

$$\langle \xi' | \xi'' \rangle = c''\delta(\xi' - \xi''), \tag{19}$$

其中 c'' 是 $c(\xi'')$ 的簡写,由于(11)式,(18)式与(19)式的右边是相等的.

让我們过渡到另一表象,它的基矢量仍是 ξ 的本征矢量,新的基矢量为原先的基矢量乘以数值因子. 我們称新的基矢量为 $\langle \xi'^* |$, $| \xi'^* \rangle$, 加上附标 $*$ 以区别于原先的基矢量,我們就有

$$\langle \xi'^* | = k' \langle \xi' |, \qquad | \xi'^* \rangle = \bar{k}' | \xi' \rangle,$$

其中 k' 是 $k(\xi')$ 的縮写,是一个由 ξ' 决定的数. 我們借助于(18)式,得到

$$\langle \xi'^* | \xi''^* \rangle = k'\bar{k}'' \langle \xi' | \xi'' \rangle = k'\bar{k}'' c' \delta(\xi' - \xi'').$$

根据(11)式,这可以写为

$$\langle \xi'^* | \xi''^* \rangle = k'\bar{k}' c' \delta(\xi' - \xi'').$$

我們可以选择 k' 使其絕对值为 $c'^{-\frac{1}{2}}$, 这是可能的, 因为 c' 是正数,我們这样选择后就有

$$\langle \xi'^* | \xi''^* \rangle = \delta(\xi' - \xi''). \tag{20}$$

現在,新基矢量的长度就这样固定下来,以便此表象尽可能地簡单化. 使这些长度固定的方法, 在某些方面类似于在分立的 ξ' 的情况下归一化基矢量的方法;方程(20)具有与方程(16)一样的形式,只是把方程(16)中的 δ 符号 $\delta_{\xi'\xi''}$ 用 δ 函数 $\delta(\xi' - \xi'')$ 来代替. 我們将継續采用这个新表象, 并为了簡化书写起見,去掉标記 $*$. 这样,(20)式就写成

$$\langle \xi' | \xi'' \rangle = \delta(\xi' - \xi''). \tag{21}$$

我們能够对分立的情况与連續的情况发展紧密平行的理論. 对分立的情况,利用(16)式,有

$$\sum_{\xi'} |\xi'\rangle\langle\xi'|\xi''\rangle = \sum_{\xi'} |\xi'\rangle\delta_{\xi'\xi''} = |\xi''\rangle,$$

其中求和遍及所有的本征值 ξ'. 此方程对任意的基右矢 $|\xi''\rangle$ 均成立,又因基右矢組成完全集,所以有

$$\sum_{\xi'} |\xi'\rangle\langle\xi'| = 1. \tag{22}$$

这是一个有用的方程,它表述了基矢量的一个重要性質,即如果将用 $\langle\xi'|$ 右乘 $|\xi'\rangle$ 所得的綫性算符对所有的 ξ' 求和，就等于单位算符 1. 方程(16)与(22)給出在分立情况下基矢量的基本性質.

同样地,对連續情况利用(21)式,我們有

$$\int |\xi'\rangle d\xi'\langle\xi'|\xi''\rangle = \int |\xi'\rangle d\xi'\delta(\xi' - \xi'') = |\xi''\rangle, \tag{23}$$

这里利用了(4)式,用一右矢代替其中的 $f(x)$, 并取本征值的区域为积分区域. 此式对任意基右矢 $|\xi''\rangle$ 成立,所以

$$\int |\xi'\rangle d\xi'\langle\xi'| = 1. \tag{24}$$

此式与(22)式有同一形式,只是用积分代替了求和. 方程(21)与(24)給出在連續情况下基矢量的基本性質.

方程(22)与(24)使我們能够把任意的左矢或右矢展开成基矢量的組合. 例如,我們在分立情况下,用 $|P\rangle$ 右乘(22)式两边而得出右矢 $|P\rangle$ 为

$$|P\rangle = \sum_{\xi'} |\xi'\rangle\langle\xi'|P\rangle, \tag{25}$$

上式給出 $|P\rangle$ 按 $|\xi'\rangle$ 展开的形式,它表明在此展开式中的系数是 $\langle\xi'|P\rangle$, 这些系数恰恰就是組成 $|P\rangle$ 的表示式的那些数. 同样地,在連續的情况下,

$$|P\rangle = \int |\xi'\rangle d\xi'\langle\xi'|P\rangle, \tag{26}$$

它給出 $|P\rangle$ 展开成对 $|\xi'\rangle$ 的积分,而在被积函数中的系数又恰恰就是 $|P\rangle$ 的表示式 $\langle\xi'|P\rangle$. 取(25)式及(26)式的共軛虚量,就会得出左矢量 $\langle P|$ 按基左矢展开的形式.

我們現在所用的数学方法,使我們能够在連續情况下把任意

右矢展成 ξ 的本征右矢的积分. 如果我們不采用 δ 函数的符号，一般的右矢的展开式将包括一个积分加一个求和，就象在 § 10 中的(25)式那样，但是 δ 函数使我們能够把上述求和用一个积分来代替,在这个积分里被积函数包括一些項,每一項含一个 δ 函数作为因子. 例如，本征右矢 $|\xi''\rangle$ 可以用本征右矢的积分代替，就象在方程(23)式中后一等式所指出的一样.

如果 $\langle Q|$ 是任意左矢，而 $|P\rangle$ 是任意右矢,进一步应用(22)与(24)式,我們对分立的 ξ' 得到

$$\langle Q|P\rangle = \sum_{\xi'} \langle Q|\xi'\rangle\langle\xi'|P\rangle, \tag{27}$$

而对連續的 ξ'，則有

$$\langle Q|P\rangle = \int \langle Q|\xi'\rangle d\xi'\langle\xi'|P\rangle. \tag{28}$$

这两个方程用 $\langle Q|$ 与 $|P\rangle$ 的表示式 $\langle Q|\xi'\rangle$ 与 $\langle\xi'|P\rangle$ 来表述 $\langle Q|$ 与 $|P\rangle$ 的标量积. 方程(27)正是用矢量的坐标来表示两矢量的标量积的通常公式,而(28)則是在 ξ' 为連續值的情况下，用积分代替求和,是这个通常的公式的自然修正.

当 ξ 既有分立本征值,又有連續本征值时,把上述工作推广到这种情况是非常直接了当的. 用 ξ^r 与 ξ^s 代表分立的本征值,ξ'与 ξ'' 代表連續本征值,我們有一組方程

$$\langle\xi^r|\xi^s\rangle = \delta_{\xi^r\xi^s}, \quad \langle\xi^r|\xi'\rangle = 0, \quad \langle\xi'|\xi''\rangle = \delta(\xi' - \xi'') \tag{29}$$

作为(16)式或(21)式的推广. 这些方程表示,基矢量全是正交的;属于分立本征值的那些基矢量是归一的；而那些属于連续本征值的基矢量則按照得到(20)式时同样的規則来得到它們的长度. 从(29)式我們能推出

$$\sum_{\xi^r} |\xi^r\rangle\langle\xi^r| + \int |\xi'\rangle d\xi'\langle\xi'| = 1, \tag{30}$$

它是(22)式或(24)式的推广. 积分的区域就是連續本征值的区域. 借助于(30)式,我們立刻可得

$$|P\rangle = \sum_{\xi^r} |\xi^r\rangle\langle\xi^r|P\rangle + \int |\xi'\rangle d\xi'\langle\xi'|P\rangle, \tag{31}$$

它是(25)式或(26)式的推广，还有

$$\langle Q|P\rangle = \sum_{\xi^r} \langle Q|\xi^r\rangle\langle\xi^r|P\rangle + \int\langle Q|\xi'\rangle d\xi'\langle\xi'|P\rangle, \quad (32)$$

它是(27)式或(28)式的推广.

現在註我过渡到一般情况，即我們有几个对易可观察量 ξ_1, ξ_2, $\cdots$, ξ_u 組成一对易完全集的情况，我們建立起一个正交表象，其中基矢量是它們全部的共同本征矢量，写成 $\langle\xi_1'\xi_2'\cdots\xi_u'|$, $|\xi_1'\xi_2'\cdots\xi_u'\rangle$. 註我們假定 $\xi_1, \xi_2, \cdots\xi_v (v \leqslant u)$ 有分立的本征値，而 $\xi_{v+1}, \xi_{v+2}\cdots, \xi_u$ 有連續本征値.

考虑这个量 $\langle\xi_1'\cdots\xi_v'\xi_{v+1}'\cdots\xi_u'|\xi_1'\cdots\xi_v'\xi_{v+1}''\cdots\xi_u''\rangle$. 根据正交性定理，除非每一个 $\xi_s'' = \xi_s' (s = v+1, \cdots, u)$，否则这个量将为零. 我們推广与 §10 的(29)式相联系的工作到几个对易可观察量的共同本征矢量，并同样推广公理(30)式，我們就会发現，这个量对每一个 ξ_s'' 在一包括 ξ_s' 在内的区域中进行积分，则它的 $(u-v)$ 重积分是有限的正数. 称这个数为 c'，这里$'$表示它是 $\xi_1', \xi_2', \cdots, \xi_v', \xi_{v+1}', \cdots, \xi_u'$ 的函数，我們用方程表述我們的結果为

$$\langle\xi_1'\cdots\xi_v'\xi_{v+1}'\cdots\xi_u'|\xi_1'\cdots\xi_v'\xi_{v+1}''\cdots\xi_u''\rangle =$$
$$= c'\delta(\xi_{v+1}' - \xi_{v+1}'')\cdots\delta(\xi_u' - \xi_u''), \quad (33)$$

上式右边对从 $v+1$ 到 u 的每一个 s 值有一个 δ 因子. 現在，我們用与得到(20)式相似的程序改变我們基矢量的长度，以使 c' 等于 1，进一步利用正交性定理，我們就最后得到

$$\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\xi_1''\cdots\xi_u''\rangle =$$
$$= \delta_{\xi_1'\xi_1''}\cdots\delta_{\xi_v'\xi_v''}\delta(\xi_{v+1}' - \xi_{v+1}'')\cdots\delta(\xi_u' - \xi_u''). \quad (34)$$

对每一有分立本征値的 ξ，上式右边有一个带两个下角标的 δ 符号，而对每一个有連續本征値的 ξ，有一个 δ 函数. 这就是(16)式或(20)式在完全集中有几个对易的可观察量的情况下的推广.

从(34)式，我們能推出(22)式或(24)式的推广，即

$$\sum_{\xi_1'\cdots\xi_v'} \int\cdots\int |\xi_1'\cdots\xi_u'\rangle d\xi_{v+1}'\cdots d\xi_u'\langle\xi_1'\cdots\xi_u'| = 1, \quad (35)$$

其中积分是 $(u-v)$ 重的，对一切有連續本征值的 ξ 积分，而求和則是对一切有分立本征值的 ξ 进行. 方程(34)与(35)給出在这种情况下的基矢量的基本性质. 从(35)式，我們能直接写出(25)式或(26)式的推广，以及(27)式或(28)式的推广.

我們刚才考虑的情况还能进一步推广，即允許这些 ξ 中某几个既有分立的本征値又有連續的本征值. 在这些方程中要求的修正是直接了当的，但这里我們不准备給出这些方程，因为若要把它們写成一般形式是頗为冗长的.

在有一些問題中，不取方程(33)中的 c' 等于 1，而取它等于这些 ξ' 的某一确定的函数反而更为方便. 我們称 ξ' 的这个函数为 ρ^{-1}，我們就得到代替(34)式的是

$$\langle \xi_1' \cdots \xi_u | \xi_1'' \cdots \xi_u'' \rangle = \\ = \rho'^{-1} \delta_{\xi_1'\xi_1''} \cdots \delta_{\xi_v'\xi_v''} \delta(\xi_{v+1}' - \xi_{v+1}'') \cdots \delta(\xi_u' - \xi_u''), \qquad (36)$$

而代替(35)式的是

$$\sum_{\xi_1' \cdots \xi_v'} \int \cdots \int |\xi_1' \cdots \xi_u'\rangle \rho' d\xi_{v+1}' \cdots d\xi_u' \langle \xi_1' \cdots \xi_u'| = 1. \qquad (37)$$

ρ' 叫做这个表象的**权重函数**，$\rho' d\xi_{v+1}' \cdots d\xi_u'$ 就是加到变量 $\xi_{v+1}' \cdots \xi_u'$ 的空間中一个小体积元上的“**权重**”.

我們以前所考虑的表象的权重函数全都是 1. 引入一个不为 1 的权重，完全是为了方便，这并不使表象的数学能力有任何的增加. 权重函数为 ρ' 的表象的基左矢 $\langle \xi_1' \cdots \xi_u'^{*}|$，与权重函数为 1 的相应表象的基左矢 $\langle \xi_1' \cdots \xi_u'|$，按下式联系起来:

$$\langle \xi_1' \cdots \xi_u'^{*}| = \rho'^{-\frac{1}{2}} \langle \xi_1' \cdots \xi_u'|, \qquad (38)$$

这一点是容易驗証的. 当我們有两个 ξ，它們是在三維空間中給出方向的极角 θ 与方位角 ϕ 时，就出現了一个权重不为 1 的有用表象的例子，并且我們取 $\rho' = \sin\theta'$. 这时，在(37)式中就出現了立体角元 $\sin\theta' d\theta' d\phi'$.

§ 17. 綫性算符的表象

在 §14 我們看到如何用一組数来表示右矢量与左矢量. 現在

我們必須对綫性算符作同样的工作，目的是要获得一个用数字集合来表述全部抽象量的完全方案．我們在 §14 曾用过的同样一套基矢量，也能用于本节的目的．

让我們假定基矢量是对易可观察量的完全集 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_u$ 的共同本征矢量．如果 α 是任意的綫性算符，我們取一般的基左矢 $\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|$ 与一般的基右矢 $|\xi_1''\cdots\xi_u''\rangle$，并組成数

$$\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\alpha|\xi_1''\cdots\xi_u''\rangle. \tag{39}$$

这些数就足以完全决定 α，因为首先它們决定了右矢 $\alpha|\xi_1''\cdots\xi_u''\rangle$（由于它們提供了这个右矢的表示式），而后者对所有基右矢 $|\xi_1''\cdots\xi_u''\rangle$ 的值就决定了 α．(39) 式的这些数就叫做綫性算符 α 或力学变量 α 的**表示式**．它們比右矢或左矢的表示式要复杂一些，复杂之处在于，它們包含标記两个基矢量的参量，而不是标記一个基矢量的参量．

让我們在簡单情况下考查这些数字的形式．首先取只有一个 ξ 自己組成对易完全集的情况，并假定它有分立的本征值 ξ'．这时 α 的表示式是分立的数字集 $\langle\xi'|\alpha|\xi''\rangle$．如果我們一定要明确地写出这些数字来，排列它們的自然方法是排成一个二維的方陣，其形式如下：

$$\begin{bmatrix} \langle\xi^1|\alpha|\xi^1\rangle & \langle\xi^1|\alpha|\xi^2\rangle & \langle\xi^1|\alpha|\xi^3\rangle & \cdots \\ \langle\xi^2|\alpha|\xi^1\rangle & \langle\xi^2|\alpha|\xi^2\rangle & \langle\xi^2|\alpha|\xi^3\rangle & \cdots \\ \langle\xi^3|\alpha|\xi^1\rangle & \langle\xi^3|\alpha|\xi^2\rangle & \langle\xi^3|\alpha|\xi^3\rangle & \cdots \\ \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots\cdots & \cdots \end{bmatrix}, \tag{40}$$

其中 $\xi^1, \xi^2, \xi^3, \cdots$ 是 ξ 的全部本征值．这样一个方陣叫做**矩陣**，而这些数叫做**矩陣元**．我們作出約定，这些矩陣元总是这样排列，使得在同一（横）行上的矩陣元总是与同一个本征左矢量有关，而在同一（竖）列上的矩陣元总是与同一本征右矢量有关．

与两个有同样标記的基矢量有关的矩陣元 $\langle\xi^1|\alpha|\xi'\rangle$ 叫做矩陣的**对角元**，因为所有这些矩陣元都在对角綫上．如果我們取 α 等于 1，我們从(16)式得到，所有对角元等于 1，而所有其他矩陣元都为零．这个矩陣就叫做**单位矩陣**．

如果 α 是实算符,我們有

$$\langle\xi'|\alpha|\xi''\rangle=\overline{\langle\xi''|\alpha|\xi'\rangle}. \tag{41}$$

这些条件对矩陣(40)式的效果是使对角元都为实数，而其他矩陣元每一个都等于对于对角綫同它处于鏡象位置上的矩陣元的共軛复数．这样的矩叫做**厄米矩陣**.

如果我們令 α 等于 ξ，我們得到一般的矩陣元为

$$\langle\xi'|\xi|\xi''\rangle=\xi'\langle\xi'|\xi''\rangle=\xi'\delta_{\xi'\xi''}. \tag{42}$$

这样，所有不在对角綫上的矩陣元都为零．这样的矩陣叫做**对角矩陣**．它的对角元恰恰等于 ξ 的本征值．更一般地，如果我們令 α 等于 ξ 的函数 $f(\xi)$，我們得到

$$\langle\xi'|f(\xi)|\xi''\rangle=f(\xi')\delta_{\xi'\xi''}, \tag{43}$$

而这个矩陣也是对角矩陣.

让我們用两个綫性算符 α 与 β 的表示式来决定它們的乘积 $\alpha\beta$ 的表示式．利用方程(22),用 ξ''' 来代其中的 ξ'，我們得到

$$\begin{aligned}\langle\xi'|\alpha\beta|\xi''\rangle&=\langle\xi'|\alpha\sum_{\xi'''}|\xi'''\rangle\langle\xi'''|\beta|\xi''\rangle\\&=\sum_{\xi'''}\langle\xi'|\alpha|\xi'''\rangle\langle\xi'''|\beta|\xi''\rangle.\end{aligned} \tag{44}$$

此式就給出我們所要求的結果．方程(44)表明，由矩陣元 $\langle\xi'|\alpha\beta|\xi''\rangle$ 所組成的矩陣,等于由矩陣元 $\langle\xi'|\alpha|\xi''\rangle$ 所組成的矩陣与由矩陣元 $\langle\xi'|\beta|\xi''\rangle$ 所組成的矩陣按照矩陣乘法的通用数学規則所得的乘积．这个規則給出，乘积矩陣的第 r 行第 s 列上的矩陣元，等于第一个因子矩陣的第 r 行的每个矩陣元分别乘以第二个因子矩陣的第 s 列的相应矩陣元所得那些乘积之和．矩陣的乘法是不对易的,如同綫性算符的乘法一样.

我們能把我們对只有一个 ξ 而它有分立的本征值的这种情况的結果总結如下:

(i) **任意綫性算符由一矩陣表示.**

(ii) **单位算符由单位矩陣表示.**

(iii) **实算符由厄米矩陣表示.**

(iv) ξ 及 ξ 的函数由对角矩陣表示.

(v) 表示两綫性算符的乘积的矩陣，是表示这两个因子的矩陣的乘积.

我們再来考虑只有一个 ξ，但它有連續本征值的情况. α 的表示式現在是 $\langle\xi'|\alpha|\xi''\rangle$，是两个能連續变化的变量 ξ' 与 ξ'' 的函数. 为了可以在分立与連續的两种情况下使用同样的术語，把这样的函数也称为"矩陣"，而在推广了的意义下使用这一名詞，是比較方便的. 一个这种广义的矩陣，当然不能象普通矩陣一样，写成为二維方陣的形式，因为它的行与列的数目是等于在一条綫上的点的数目的无穷大，而它的矩陣元的数目則是等于在一个面上的点的数目的无穷大.

我們安排我們关于这些推广的矩陣的若干定义，以便我們上面对分立情况所得的諸規則 (i)—(v) 对連續情况也都成立. 单位算符是由 $\delta(\xi'-\xi'')$ 表示的，我們就定义由这些矩陣元所組成的广义矩陣为单位矩陣. α 是实算符的条件仍为方程 (41)，而由矩陣元 $\langle\xi'|\alpha|\xi''\rangle$ 組成的广义矩陣若滿足这一条件时，我們就定义它是厄米的. ξ 是由下式表示:

$$\langle\xi'|\xi|\xi''\rangle=\xi'\delta(\xi'-\xi''),\tag{45}$$

$f(\xi)$ 由

$$\langle\xi'|f(\xi)|\xi''\rangle=f(\xi')\delta(\xi'-\xi'')\tag{46}$$

代表，而且我們定义由这些矩陣元所組成的广义矩陣为对角矩陣. 从(11)式可知，在(45)式及(46)式的右边，我們如果相应地用 ξ'' 及 $f(\xi'')$ 作为 $\delta(\xi'-\xi'')$ 的系数也完全一样. 根据(24)式，我們現在有相当于方程(44)的式子为

$$\langle\xi'|\alpha\beta|\xi''\rangle=\int\langle\xi'|\alpha|\xi'''\rangle d\xi'''\langle\xi'''|\beta|\xi''\rangle,\tag{47}$$

即用一积分代替求和，我們定义由这里右边的矩陣元所組成的广义矩陣为分别由 $\langle\xi'|\alpha|\xi''\rangle$ 与 $\langle\xi'|\beta|\xi''\rangle$ 所組成的二矩陣的乘积. 用这一系列定义，我們就保証了在分立情况与連續情况之間的完全平行性，(i)—(v) 等結果对两种情况都成立.

在連續情况下，发生了一般的对角矩陣如何定义的問題．因为到此为止，我們只是把(45)式与(46)式的右边定义为对角矩陣的例子．有人也許傾向于定义对角矩陣为：除了在 ξ' 无限地接近于 ξ'' 时以外它的 (ξ', ξ'') 矩陣元都为零的一切矩陣．但是这是不能令人滿意的．因为在分立情况下的对角矩陣有一重要性質是，它們总是相互对易的，而我們要求这个性質在連續情况下也成立．为了要使由矩陣元 $\langle\xi'|\omega|\xi''\rangle$ 所組成的矩陣在連續情况下与由(45)右边的矩陣元所組成的矩陣对易，利用(47)式的乘法，我們就必須有

$$\int\langle\xi'|\omega|\xi'''\rangle d\xi'''\xi'''\delta(\xi'''-\xi'') = \int\xi'\delta(\xi'-\xi''')d\xi'''\langle\xi'''|\omega|\xi''\rangle.$$

借助于公式(4)，此式簡化为

$$\langle\xi'|\omega|\xi''\rangle\xi'' = \xi'\langle\xi'|\omega|\xi''\rangle, \qquad (48)$$

或卽

$$(\xi'-\xi'')\langle\xi'|\omega|\xi''\rangle = 0.$$

按照由(12)式得到(13)式的規則，此式給出

$$\langle\xi'|\omega|\xi''\rangle = c'\delta(\xi'-\xi''),$$

其中 c' 是一个可以由 ξ' 决定的数．因此 $\langle\xi'|\omega|\xi''\rangle$ 具有(46)式右边的形式．为此原因，我們定义只有其矩陣元有(46)式右边的形式的那些矩陣才是对角矩陣．容易驗証，这些矩陣全是相互对易的．我們当然能够組成另外的一些矩陣，它們的 (ξ', ξ'') 矩陣元当 ξ' 显著地不同于 ξ'' 时为零，而当 ξ' 等于 ξ'' 时有另外形式的奇点［我們在后面将引进 δ 函数的微分 $\delta'(x)$，而 $\delta'(\xi'-\xi'')$ 将是一个例子，見 §22 的(19)式］，但这些另外的矩陣，按照定义就不是对角的．

現在我們开始討論另一情况，卽只有一个 ξ，而它既有分立的本征值，又有連續的本征值的情况．用 ξ^r，ξ^s 来代表分立的本征值，用 ξ'，ξ'' 代表連續的本征值，我們現在就有由四种量所組成的 α 的表示式，这四种量是 $\langle\xi^r|\alpha|\xi^s\rangle$，$\langle\xi^r|\alpha|\xi'\rangle$，$\langle\xi'|\alpha|\xi^r\rangle$ 和 $\langle\xi'|\alpha|\xi''\rangle$．这些量全部放在一起，可以被看成是組成一种更一般

性的矩陣，它既有某些分立的行与列，也有一个連續范围的行与列．我們也对这种更一般性的矩陣定义单位矩陣、厄米矩陣、对角矩陣，两个矩陣乘积等等，使上述(i)—(v)的規則仍然成立．这些詳細內容是我們上面所講过的內容的一个直接了当的推广，用不着細講了．

現在，讓我們回到一般情况，卽有几个 ξ，如 ξ_1，ξ_2，$\cdots\xi_u$ 的情况．α 的表示式，卽(39)式，仍然可以看成是組成一个矩陣，有相应于 ξ'_1，$\cdots$，ξ'_u 的各組不同値的行及相应于 ξ''_1，$\cdots$，ξ''_u 的各組不同値的列．除非所有 ξ 只有分立的本征値，这个矩陣将是推广式的，卽有連續范围的行与列．我們还要再一次安排我們的定义，以便規則(i)—(v)能够成立，而把規則(iv)推广为：

(iv′) 每一 $\xi_m(m=1,2,\cdots u)$ 以及它們的任意函数，由对角矩陣表示．

对角矩陣現在定义为一个矩陣，其一般矩陣元 $\langle\xi'_1\cdots\xi'_u|\omega|\xi''_1\cdots\xi''_u\rangle$ 在 $\xi_1\cdots\xi_v$ 具有分立本征値，而 $\xi_{v+1}\cdots\xi_u$ 具有連續本征値的情况下具有下列形式：

$$\langle\xi'_1\cdots\xi'_u|\omega|\xi''_1\cdots\xi''_u\rangle=$$
$$=c'\delta_{\xi'_1\xi''_1}\cdots\delta_{\xi'_v\xi''_v}\delta(\xi'_{v+1}-\xi''_{v+1})\cdots\delta(\xi'_u-\xi''_u),\quad(49)$$

式中 c' 为各 ξ' 的任意函数．这个定义是我們对一个 ξ 的定义的推广，它使对角矩陣总是互相对易的．其他的定义是很清楚的，用不着細講了．

現在我們的綫性算符总可以用矩陣来表示．两个綫性算符之和由表示它們的矩陣的和来表示．这一点加上規則(v)，就等于說，矩陣与綫性算符服从同样的代数关系．如果在某些綫性算符之間有任意的代数方程成立，則对代表这些綫性算符的矩陣，同样的代数方程一定也是成立的．

矩陣的方案能推广到左矢量与右矢量的表示式中．表示綫性算符的矩陣全是正方矩陣，其行数与列数相同，而且实事上在它們的行与列間存在着一一对应．我們可以把右矢 $|P\rangle$ 的表示式看成为一个单列矩陣，把所有組成这个表示式的数 $\langle\xi'_1\cdots\xi'_u|P\rangle$ 一

个放在另一个下面排起来. 这个矩陣中的行数等于表示綫性算符的正方矩陣的行数或列数. 这种单列矩陣能被表示綫性算符的正方矩陣左乘, 其規則类似于两个正方矩陣的乘法. 乘积是另一个单列矩陣,其矩陣元为

$$\sum_{\xi_1''\cdots\xi_v''}\int\cdots\int\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\alpha|\xi_1''\cdots\xi_u''\rangle d\xi_{v+1}''\cdots d\xi_u''\langle\xi_1''\cdots\xi_u''|P\rangle.$$

从(35)式看到,上式恰好等于 $\alpha|P\rangle$ 的表示式 $\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\alpha|P\rangle$. 同样地, 我們可把左矢 $\langle Q|$ 的表示式看成一个单行矩陣, 即把数 $\langle Q|\xi_1'\cdots\xi_u'\rangle$ 全部一个挨一个地排起来. 这样的单行矩陣可以被一个正方矩陣 $\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\alpha|\xi_1''\cdots\xi_u''\rangle$ 右乘, 乘积是另一单行矩陣, 它恰是 $\langle Q|\alpha$ 的表示式. 表示 $\langle Q|$ 的单行矩陣也可以被表示 $|P\rangle$ 的单列矩陣右乘, 乘积是一个只有一个矩陣元的矩陣, 等于 $\langle Q|P\rangle$. 最后,表示 $\langle Q|$ 的单行矩陣可以被表示 $|P\rangle$ 的单列矩陣左乘,乘积是一正方矩陣, 它恰好就是 $|P\rangle\langle Q|$ 的表示式. 这样, 我們所有的抽象符号,即綫性算符、左矢量与右矢量都能用矩陣表示,这些矩陣与这些抽象符号本身服从同样的代数关系.

§18. 几率幅

在量子力学的物理解释中,表象是很重要的,因为表象提供了一个方便的方法去求得可观察量具有給定值的几率. 在 §12 中, 我們得到一可观察量对一已知态有任意特定値的几率,在 §13 里, 我們把这个結果推广, 得到了一組对易可观察量对一給定态同时分別有特定値的几率. 現在, 讓我們把这一結果应用于对易可观察量的完全集, 例如用于我們已研究过的 ξ 的集合. 按照 §13 的公式(51),对相应于归一的右矢量 $|x\rangle$ 的态, 每个 ξ_r 有値 ξ_r' 的几率是

$$P_{\xi_1'\cdots\xi_u'}=\langle x|\delta_{\xi_1\xi_1'}\,\delta_{\xi_2\xi_2'}\cdots\delta_{\xi_u\xi_u'}|x\rangle. \tag{50}$$

如果各 ξ 全有分立的本征値,我們能用(35)式而令 $v=u$, 沒有积分項,得

$$
\begin{aligned}
P_{\xi_1'\cdots\xi_u'} &= \sum_{\xi_1''\cdots\xi_u''} \langle x|\delta_{\xi_1\xi_1'}\delta_{\xi_2\xi_2'}\cdots\delta_{\xi_u\xi_u'}|\xi_1''\cdots\xi_u''\rangle\langle\xi_1''\cdots\xi_u''|x\rangle \\
&= \sum_{\xi_1''\cdots\xi_u''} \langle x|\delta_{\xi_1''\xi_1'}\delta_{\xi_2''\xi_2'}\cdots\delta_{\xi_u''\xi_u'}|\xi_1''\cdots\xi_u''\rangle\langle\xi_1''\cdots\xi_u''|x\rangle \\
&= \langle x|\xi_1'\cdots\xi_u'\rangle\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|x\rangle \\
&= |\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|x\rangle|^2. \qquad (51)
\end{aligned}
$$

这样，我們得到了一个簡单結果，各个 ξ 有值 ξ' 的几率恰好是与所涉及的态相联系的归一化右矢量的相应坐标的模量的平方.

如果各个 ξ 不全是有分立的本征值，而是，$\xi_1, \cdots, \xi_v$ 有分立的本征值，$\xi_{v+1}, \cdots, \xi_u$ 有連續的本征值，那么，为了在物理上有意义，我們必須得出这样的几率，即每一 $\xi_r(r = 1, \cdots, v)$ 有一指定的值 ξ_r'，同时每一 $\xi_s(s = v + 1, \cdots u)$有一值在指定的小区域 ξ_s' 到 $\xi_s' + d\xi_s'$ 之中的几率. 为此目的，我們必須在(50)式中換掉每一因子 $\delta_{\xi_s\xi_s'}$，而代之以因子 χ_s，它是可观察量 ξ_s 的函数，当 ξ_s 在 ξ_s' 到 $\xi_s' + d\xi_s'$ 之內时，它为 1，否則它就为零. 借助于 (35) 式按以前的方法来作，我們得到这个几率为

$$
P_{\xi_1'\cdots\xi_u'}\, d\xi_{v+1}'\cdots d\xi_u' = |\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|x\rangle|^2 d\xi_{v+1}'\cdots d\xi_u'. \qquad (52)
$$

于是，在各种情况下，对各 ξ 的值的几率分布，都是由与所涉及的态相联系的归一化右矢量的表示式的模数的平方給出的.

由于这一原因，可以把組成归一右矢（或左矢）的表示式的数字称为几率幅. 几率幅的模数的平方是一个普通的几率，或者对那些有連續值的变量，它是在单位区域內的几率. 我們可能关心一个态，它的相应的右矢 $|x\rangle$ 不能归一化. 例如，如果这态是某一可观察量属于連續本征值的一个本征态，这种情况就会出現. 这样，公式(51)或(52)仍能用以給出各 ξ 有指定值或有一值在指定的小区域之中的相对几率，亦即它将正确地給出不同的 ξ' 的几率之比. 这些数 $\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|x\rangle$ 因而可以称为相对几率幅.

使上述諸結果成立的表象的特征是，基矢量是所有 ξ 的共同本征矢量. 它的特征也可用下述要求表达，即各个 ξ 都由对角矩

陣来表示，容易看出这个条件与前一个是等效的．通常后一特征表示法是更方便的．我們将把它簡单地表述为各个 ξ 在表象中是对角的．

只要这些 ξ 組成对易可观察量的完全集，除开基矢量的任意相因子之外，这一特征表示法就完全决定了表象．每一基左矢 $\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|$ 可以乘上 $e^{i\gamma'}$(其中 γ' 是 $\xi_1'\cdots\xi_u'$ 等变量的任意实函数)，而不需要改变此表象所满足的条件中的任何一个，即不需要改变各 ξ 都是对角的条件，基矢量是各 ξ 的共同本征矢量的条件，以及基矢量的基本性質即(34)式与(35)式．随着基左矢按此方式变化，右矢 $|P\rangle$ 的表示式 $\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|P\rangle$ 就被乘上因子 $e^{i\gamma'}$，左矢 $\langle Q|$ 的表示式 $\langle Q|\xi_1'\cdots\xi_u'\rangle$ 就被乘上因子 $e^{-i\gamma'}$，而綫性算符 α 的表示式 $\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\alpha|\xi_1''\cdots\xi_u''\rangle$ 则被乘上因子 $e^{i(\gamma'-\gamma'')}$．几率(51)式或相对几率(52)式，当然都是不变的．

我們在量子力学的实际間題中計算出的几率，几乎总是从几率幅或相对几率幅的模数的平方得出的．甚至当我們关心的只是对易可观察量的一个不完全集的几率时，也必需首先用引进某些附加的对易可观察量的办法来作出一个完全集，并求出这个完全集能有指定値的几率(即几率幅的模数的平方)，然后再对附加可观察量的所有可能値进行求和或积分．更直接地应用 §13 的(51)式，通常是无法实現的．

为了在实践中引进一个表象，要做到：

(i) 我們找出一些可观察量，它們是我們希望使之对角化的，这或者是因为我們关心它們的几率，或者是为了数学上簡单化的原故．

(ii) 我們必須留心，一定要它們全是对易的．这是个必要的条件，因为对角矩陣总是对易的．

(iii) 我們然后检查，它們是否組成一个完全对易集，如果不是，我們就加进某些另外的对易可观察量，使之成为完全对易集．

(iv) 我們建立一正交表象，使这个完全对易集是对角的．

这样，除了任意的相因子之外，表象就完全决定了．对大多数

目的，这些任意的相因子是不重要和无意义的，以致我們可以把表象当作是完全由在其中为对角的那些可观察量决定的。这个事实早已隐含在我們的符号中，因为在表示式中唯一指明它属于那一个表象的标記是那些代表对角可观察量的文字。

我們关心的也可能是同一力学系統的两种表象。假定在一个表象里，对易可观察量的完全集 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_u$ 是对角的，基左矢为 $\langle\xi_1'\xi_2'\cdots\xi_u'|$，而在另一个表象里，另一对易可观察量的完全集 $\eta_1, \cdots, \eta_w$ 是对角的，基左矢是 $\langle\eta_1'\cdots\eta_w'|$。現在一个右矢 $|P\rangle$ 将有两个表示式，即 $\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|P\rangle$ 与 $\langle\eta_1'\cdots\eta_w'|P\rangle$。如果 $\xi_1, \cdots, \xi_v$ 有分立本征值，$\xi_{v+1}, \cdots, \xi_u$ 有連續本征值，又如果 $\eta_1, \cdots, \eta_x$ 有分立本征值，$\eta_{x+1}, \cdots, \eta_w$ 有連續的本征值，我們从(35)式得

$$\langle\eta_1'\cdots\eta_w'|P\rangle = \\ = \sum_{\xi_1'\cdots\xi_x'}\int\cdots\int\langle\eta_1'\cdots\eta_w'|\xi_1'\cdots\xi_u'\rangle d\xi_{v+1}'\cdots d\xi_u'\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|P\rangle, \quad (53)$$

让 ξ 与 η 对换，得

$$\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|P\rangle = \\ = \sum_{\eta_1'\cdots\eta_x'}\int\cdots\int\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\eta_1'\cdots\eta_w'\rangle d\eta_{x+1}'\cdots d\eta_w'\langle\eta_1'\cdots\eta_w'|P\rangle. \quad (54)$$

这两式是变换方程，它們給出，$|P\rangle$ 的一个表示式如何用另一个表示式表示出来。它們表明，任一表示式可以表示为另一表示式的綫性組合，而其系数为下列量：

$$\langle\eta_1'\cdots\eta_w'|\xi_1'\cdots\xi_u'\rangle, \qquad \langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\eta_1'\cdots\eta_w'\rangle, \qquad (55)$$

这些量叫做**变换函数**。为联系一个左矢，或一綫性算符的两种表示式，也可以写出相类似的方程。变换函数(55)式在每一情况下，都是能使我們从一个表象过渡到另一表象的工具。变换函数中每一个是另一个的共軛复数，它們并且满足条件：

$$\sum_{\xi_1'\cdots\xi_v'}\int\cdots\int\langle\eta_1'\cdots\eta_w'|\xi_1'\cdots\xi_u'\rangle d\xi_{v+1}'\cdots d\xi_u'\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\eta_1''\cdots\eta_w''\rangle = \\ = \delta_{\eta_1'\eta_1''}\cdots\delta_{\eta_x'\eta_x''}\,\delta(\eta_{x+1}'-\eta_{x+1}'')\cdots\delta(\eta_w'-\eta_w'') \quad (56)$$

以及由 ξ 与 η 对調而得的相应条件，这可以用(35)式与(34)式及

对 η 的相应方程来驗証.

变換函数是几率幅或相对几率幅的特例. 設我們取所有 ξ 与所有 η 都有分立本征值的情况. 基右矢 $|\eta_1'\cdots\eta_w'\rangle$ 是归一的，所以它在 ξ 表象中的表示式 $\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\eta_1'\cdots\eta_w'\rangle$ 是对于一組 ξ' 的值的几率幅. 这些几率幅所关系到的态，即相应于 $|\eta_1'\cdots\eta_w'\rangle$ 的态由下述条件定出，条件是 $\eta_1, \cdots, \eta_w$ 的同时测量肯定給出結果 $\eta_1', \cdots, \eta_w'$. 因此，$|\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\eta_1'\cdots\eta_w'\rangle|^2$ 是对于各 η 肯定有值 $\eta_1', \cdots, \eta_w'$ 的态，各个 ξ 有值 $\xi_1', \cdots, \xi_u'$ 的几率. 因为

$$|\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\eta_1'\cdots\eta_w'\rangle|^2 = |\langle\eta_1'\cdots\eta_w'|\xi_1'\cdots\xi_u'\rangle|^2,$$

我們有倒易定理——对各 η 肯定有値 η' 的态，各 ξ 有値 ξ' 的几率，等于对各 ξ 肯定有値 ξ' 的态，各 η 有値 η' 的几率.

如果所有的 η 有分立本征值，而某些 ξ 有連續本征值，$|\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|\eta_1'\cdots\eta_w'\rangle|^2$ 仍然給出对 η 肯定有值 η' 的态的 ξ 值的几率分布. 如果某些 η 有連續本征值，$|\eta_1\cdots\eta_w\rangle$ 就不是归一化的，那时 $|\langle\xi_1\cdots\xi_u|\eta_1\cdots\eta_w\rangle|^2$ 只給出对 η 肯定有值 η' 的态的 ξ 值的相对几率分布.

§19. 关于可观察量函数的若干定理

我們将用表象来証明某些定理，借以說明它在数学上的价值.

定理 1　与可观察量 ξ 对易的綫性算符，必定也与 ξ 的任意函数对易.

当此函数可以表示为冪級数时，定理显然是对的. 要一般地証明它，我們令此綫性算符为 ω，所以我們有方程

$$\xi\omega - \omega\xi = 0. \tag{57}$$

設我們引进一个表象，在其中 ξ 是对角的. 如果 ξ 自己不組成可观察量的完全集，我們必須加进某些可观察量，使之在一起組成一完全集，例如說加进 β，然后取一个表象使 ξ 与各个 β 都是对角的（ξ 本身已經組成完全对易集的情况可以看成上述一般情况的特例，即 β 变量的个数为零的情况）. 在这个表象里方程(57)变成

$$\langle\xi'\beta'|\xi\omega - \omega\xi|\xi''\beta''\rangle = 0,$$

上式簡化为

$$\xi'\langle\xi'\beta'|\omega|\xi''\beta''\rangle-\langle\xi'\beta'|\omega|\xi''\beta''\rangle\xi''=0.$$

当 ξ 的本征值是分立的情况下，这个方程表明，ω 的矩陣元 $\langle\xi'\beta'|\omega|\xi''\beta''\rangle$ 除了在 $\xi'=\xi''$ 时外全部为零。当 ξ 的本征值是連續的情况下，象方程(48)一样，它表明 $\langle\xi'\beta'|\omega|\xi''\beta''\rangle$ 具有下列形式：

$$\langle\xi'\beta'|\omega|\xi''\beta''\rangle=c\delta(\xi'-\xi''),$$

其中 c 是 ξ' 各 β' 及各 β'' 的某个函数。在这两种情况下，我們都能說，表示 ω 的矩陣“对于 ξ 是对角的”。如果 $f(\xi)$ 代表按照 §11 的一般理論所定义的 ξ 的任意函数，这个定义要求对 ξ 的任意本征值 ξ'''，$f(\xi''')$ 是有定义的，那么在上述两种情况下，我們都能推导出

$$f(\xi')\langle\xi'\beta'|\omega|\xi''\beta''\rangle-\langle\xi'\beta'|\omega|\xi''\beta''\rangle f(\xi'')=0.$$

这式給出

$$\langle\xi'\beta'|f(\xi)\omega-\omega f(\xi)|\xi''\beta''\rangle=0,$$

所以

$$f(\xi)\omega-\omega f(\xi)=0,$$

于是定理得到了証明。

作为此定理的一个特例，我們可以得出：任何能与可观察量 ξ 对易的可观察量，也必然与 ξ 的任意函数对易。当我們象在§13 講的那样，把两个可观察量对易的条件等同于相应观察的相容条件时，这个結果就成为物理上所必需的。任何观察如果与可观察量 ξ 的測量相容，它就必然也与 $f(\xi)$ 的測量相容，因为 ξ 的任意測量本身就包括 $f(\xi)$ 的測量。

定理 2　綫性算符如果与对易可观察量完全集之中的每一个可观察量相对易，則它是这些可观察量的函数。

令 ω 为此綫性算符，令 $\xi_1\xi_2\cdots\xi_u$ 为对易可观察量的完全集，并建立一个使这些可观察量为对角的表象。因为 ω 与 ξ' 中的每一个对易，根据上面的定理得知，表示它的矩陣对于 ξ 中的每一个都是对角的。因而这个矩陣是一个对角矩陣，它有如 (49) 式的形

式,含有一数 c', 这个数 c' 是各 ξ' 的函数. 于是这个对角矩陣就是 ξ 的一个函数的表示式, 函数的形式与 ξ' 的函数 c' 的形式相同,因而 ω 就等于 ξ 的这个函数.

定理 3 如有一可观察量 ξ 及一綫性算符 g, 如果与 ξ 对易的任意綫性算符也与 g 对易,那么, g 就是 ξ 的函数.

这是定理 1 的逆定理. 为証明它, 我們用与定理 1 所用的同样的表象,使 ξ 是对角的. 首先, 我們注意到, g 必須与 ξ 本身对易,因而 g 的表示式一定对于 ξ 是对角的. 即是說,它一定是如下形式:

$$\langle\xi'\beta'|g|\xi''\beta''\rangle = a(\xi'\beta'\beta'')\delta_{\xi'\xi''} \text{ 或 } a(\xi'\beta'\beta'')\delta(\xi'-\xi''),$$

式中两种結果根据 ξ 是有分立本征值或是有連續本征值而定. 現在,令 ω 是任意与 ξ 对易的綫性算符, 所以, 它的表示式是如下形式:

$$\langle\xi'\beta'|\omega|\xi''\beta''\rangle = b(\xi'\beta'\beta'')\delta_{\xi'\xi''} \text{ 或 } b(\xi'\beta'\beta'')\delta(\xi'-\xi'').$$

按假定規定, ω 一定也与 g 对易,所以

$$\langle\xi'\beta'|g\omega-\omega g|\xi''\beta''\rangle = 0. \tag{58}$$

为了明确起見,如果我們假定,各 β 都有分立的本征值. 則借助于矩陣乘法的規則,从(58)式可得

$$\sum_{\beta'''}\{a(\xi'\beta'\beta''')b(\xi'\beta'''\beta'') - b(\xi'\beta'\beta''')a(\xi'\beta'''\beta'')\} = 0, \tag{59}$$

(58)式的左边等于 (59) 式的左边乘以 $\delta_{\xi'\xi''}$ 或者 $\delta(\xi'-\xi'')$. 方程(59)应对所有的函数 $b(\xi'\beta'\beta'')$ 成立. 我們能够推导出

$$a(\xi'\beta'\beta'') = 0, \qquad \text{当 } \beta' \neq \beta'',$$
$$a(\xi'\beta'\beta') = a(\xi'\beta''\beta'').$$

这两个結果中的第一式表明, 表示 g 的矩陣是对角的, 第二式表明, $a(\xi'\beta'\beta')$ 只是 ξ' 的函数. 我們現在就能断定, g 是 ξ 的函数,其形式就如 $a(\xi'\beta'\beta')$ 是 ξ' 的函数一样. 所以, 定理就被証明了. 如果某些 β 有連續本征值,証明也是相似的.

如果我們用任意的对易可观察量完全集 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_u$ 代替 ξ, 定理 1 与定理 3 仍然成立, 只是在証明中需要一些形式上的变

化.

§ 20. 符号上的发展

我們已发展的表象理論提供了标記右矢与左矢的普遍系統. 在一个对易可观察量的完全集 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_u$ 是对角的表象中，任意右矢 $|P\rangle$ 有表示式 $\langle\xi_1'\cdots\xi_u'|P\rangle$，或者簡写为 $\langle\xi'|P\rangle$. 这个表示式是变量 ξ' 的一个确定的函数,例如記为 $\psi(\xi')$. 于是,函数 ψ 就完全决定了右矢 $|P\rangle$，所以它可以用来标記这个右矢，去代替任意的标記 P. 用符号来講，

$$\left.\begin{array}{ll}\text{如果} & \langle\xi'|P\rangle = \psi(\xi'), \\ \text{我們就令} & |P\rangle = |\psi(\xi)\rangle.\end{array}\right\} \tag{60}$$

我們一定要让 $|P\rangle$ 等于 $|\psi(\xi)\rangle$，而不是 $|\psi(\xi')\rangle$，因为 $|P\rangle$ 不是由 ξ 的一組特定本征值所决定的，而是仅仅由函数 ψ 的形式所决定的.

如 $f(\xi)$ 是可观察量 $\xi_1, \cdots, \xi_u$ 的任意函数，則 $f(\xi)|P\rangle$ 的表示式为

$$\langle\xi'|f(\xi)|P\rangle = f(\xi')\psi(\xi').$$

因而按照(60)式,我們令

$$f(\xi)|P\rangle = |f(\xi)\psi(\xi)\rangle.$$

用方程(60)的第二式,我們現在得

$$f(\xi)|\psi(\xi)\rangle = |f(\xi)\psi(\xi)\rangle. \tag{61}$$

这是一个普遍結果,它对 ξ 的任意函数 f 与 ψ 是成立的,它表明用右矢的新符号,竪綫 $|$ 是不必要的——(61)式的两边都可簡单地写为 $f(\xi)\psi(\xi)\rangle$. 这样,新符号的規則变成

$$\left.\begin{array}{ll}\text{如果} & \langle\xi'|P\rangle = \psi(\xi'), \\ \text{則令} & |P\rangle = \psi(\xi)\rangle.\end{array}\right\} \tag{62}$$

我們还可把 $\psi(\xi)\rangle$ 縮写为 $\psi\rangle$，把变量 ξ 省去不写出来，如果不致因而引起含混的話.

右矢 $\psi(\xi)\rangle$ 可以被当作是綫性算符 $\psi(\xi)$ 与一个右矢的乘积，这个右矢簡单地用沒有标記的 $\rangle$ 代表. 我們称这个右矢 $\rangle$ 为标准

右矢.任意什么样的右矢都能够表示为ξ的函数去乘标准右矢.举例說,取(62)式中的$|P\rangle$为基右矢$|\xi''\rangle$,当$\xi_1\cdots\xi_v$有分立的本征值,$\xi_{v+1}\cdots\xi_u$有連續的本征值时,我們得

$$|\xi''\rangle = \delta_{\xi_1\xi_1''}\cdots\delta_{\xi_v\xi_v''}\delta(\xi_{v+1}-\xi'')\cdots\delta(\xi_u-\xi_u''))\rangle, \quad (63)$$

标准右矢的特征条件是,它的表示式$\langle\xi'|\rangle$在变量ξ'的全部区域內都为1,在(62)式中令$\psi=1$就可看出这一点.

还可以对于符号作出进一步縮写,即将标准右矢的符号$\rangle$省略不写出.一个右矢就簡单地写成可观察量ξ的一个函数$\psi(\xi)$.按这种方式代表一个右矢的可观察量ξ的函数,就叫做波函数[1].波函数提供的符号系統就是通常大多数作者用以在量子力学中进行計算的符号系統.在用它的时候,我們应当記住,每一波函数应当理解为有一个标准右矢乘在它的右边,这就使我們不能再用任何算符右乘波函数.波函数只能被算符左乘,这一点使它們区别于ξ的普通函数,ξ的普通函数是算符,并能用算符左乘或右乘它們.波函数只是右矢的表示式,这种表示式是表为可观察量ξ的函数的,不是表为它們的本征值的函数.它的模量的平方给出对所相应的态,ξ有特定值或处于特定的小区域內的几率(如果波函数沒有归一化,这里就应为相对几率).

左矢的新符号可以用对右矢的同样方法加以发展.我們把一个表示式$\langle Q|\xi'\rangle$为$\phi(\xi')$的左矢$\langle Q|$写为$\langle\phi(\xi)|$.用此符号时$|\psi(\xi)\rangle$的共軛虛量是$\langle\bar{\psi}(\xi)|$.因此,我們一直用的規則,即右矢及其共軛虛量的左矢都用同一标記,必須加以扩充成为:如果一个右矢的标記包含复数或复函数,則其共軛虛量左矢的标記应包含其共軛复数或共軛复函数.与右矢的情况一样,我們能够証明,$\langle\phi(\xi)|f(\xi)$与$\langle\phi(\xi)f(\xi)|$是相同的,所以竪綫可以省略.我們可以把$\langle\phi(\xi)$当成是綫性算符$\phi(\xi)$乘在标准左矢$\langle$上,$\langle$是标准右矢$\rangle$的共軛虛量.我們也可将标准左矢省略不写,于是一般的左

1) 这个名词的原因是,在早期的量子力学中,这些函数的全部例子都具有波的形式.从现代普遍理论的观点看来,这个名词不是形象性的

矢就写成 $\phi(\xi)$，它是波函数的共軛复量. 波函数的共軛复量可以被任意綫性算符右乘，但不能被任何綫性算符左乘. 我們还能建立形如 $\langle f(\xi)\rangle$ 的三量积. 这个三量积是一个数，等于 $f(\xi)$ 对 ξ 的本征值的全部区域求和或积分，当 $\xi_1\cdots\xi_v$ 有分立的本征值，而 $\xi_{v+1}\cdots\xi_u$ 有連續的本征值的情况下，$\langle f(\xi)\rangle$ 为

$$\langle f(\xi)\rangle = \sum_{\xi_1'\cdots\xi_v'}\int\cdots\int f(\xi')d\xi_{v+1}'\cdots d\xi_u'. \tag{64}$$

标准右矢与标准左矢是相对于某一个表象而定义的. 如果我們在对易可观察量完全集 η 为对角的另一个表象中进行上述工作，或者如果我們就在 ξ 为对角的表象里，仅仅只改变相因子，我們都应当得到不同的标准右矢与标准左矢. 在一件工作中，如果有不止一个标准右矢或标准左矢出現时，我們就应給它們加上标記以区分它們.

現在我們討論符号的进一步进展，这一进展在处理复杂的力学系統时是极为重要的. 假定我們有一力学系統，它可用一些力学变量来描述，这些力学变量全部可以分为两个集，例如集 A 与集 B，使得集 A 中的任意一力学变量，与集 B 中的任意力学变量对易. 一般的力学变量一定可表示为 A 变量与 B 变量的共同函数. 我們可以考虑另一力学系統，在此系統里，力学变量全都是 A 变量，就让我們称此力学系統为 A 系統. 同样地，我們可以考虑第三个力学系統，在其中力学变量全都是 B 变量，称之为 B 系統. 原来的系統就能被看成是 A 系統与 B 系統按照下述数学方案而得到的一种組合.

让我們对 A 系統取任意右矢 $|a\rangle$，对 B 系統取任意右矢 $|b\rangle$. 我們假定它們有一乘积 $|a\rangle|b\rangle$，对这种乘积还假定乘法的交換律与分配律成立，即

$$|a\rangle|b\rangle = |b\rangle|a\rangle,$$

$$\{c_1|a_1\rangle + c_2|a_2\rangle\}|b\rangle = c_1|a_1\rangle|b\rangle + c_2|a_2\rangle|b\rangle,$$

$$|a\rangle\{c_1|b_1\rangle + c_2|b_2\rangle\} = c_1|a\rangle|b_1\rangle + c_2|a\rangle|b_2\rangle,$$

其中的各 c 都是数. 对任意 A 变量作用于乘积 $|a\rangle|b\rangle$ 上，我們可

以給予意义，办法是假定A变量只作用于因子 $|a\rangle$ 上而与因子 $|b\rangle$ 对易；同样地，对任意B变量作用于这个乘积，我們也可以給予意义，办法为假定B变量只作用于因子 $|b\rangle$ 上而与因子 $|a\rangle$ 对易(这一点使每一A变量与每一B变量对易). 这样，原来系統的任意力学变量都能作用在乘积 $|a\rangle|b\rangle$ 之上，所以，这个乘积可以看成是原来系統的一个右矢，因而可以写成 $|ab\rangle$，a 与 b 这两个标記，就足以确定这一右矢. 按此方式，我們得到基本方程

$$|a\rangle|b\rangle = |b\rangle|a\rangle = |ab\rangle. \tag{65}$$

这里这种乘积的性質与前面在理論中出現的那些乘积很不相同. 右矢量 $|a\rangle$ 与右矢量 $|b\rangle$ 是在两个不同的矢量空間中，而它們的乘积是在第三个矢量空間中，这第三个矢量空間可以叫做前两个矢量空間的乘积. 乘积空間的維数等于每个因子空間的維数的乘积. 在乘积空間中的一般右矢量不是(65)式的形式，而是这个形式的一些右矢的和或积分.

让我們对A系統取一表象，其中A系統的对易可观察量完全集 ξ_A 是对角的. 我們对A系統就有基左矢 $\langle\xi'_A|$. 同样地，对B系統取可观察量 ξ_B 为对角的表象，我們就有对B系統的基左矢 $\langle\xi'_B|$. 乘积

$$\langle\xi'_A|\langle\xi'_B| = \langle\xi'_A\xi'_B| \tag{66}$$

就将提供对原来系統的一个表象的基左矢，在此表象里，ξ_A 与 ξ_B 将都是对角的. 这些 ξ_A 与 ξ_B 在一起将組成对原来系統的对易可观察量的完全集. 从(65)式与(66)式，我們得到

$$\langle\xi'_A|a\rangle\langle\xi'_B|b\rangle = \langle\xi'_A\xi'_B|ab\rangle, \tag{67}$$

上式表明，$|ab\rangle$ 的表示式等于 $|a\rangle$ 与 $|b\rangle$ 在它們各自有关的表象中的表示式的乘积.

我們可以例如对A系統相关于 ξ_A 为对角的表象引进标准右矢，称为 $\rangle_A$；也可以对B系統相关于 ξ_B 为对角的表象引进标准右矢 $\rangle_B$. 它們的乘积 $\rangle_A\rangle_B$ 就是原来系統相关于 ξ_A 与 ξ_B 为对角的表象的标准右矢. 原来系統的任意右矢可以表示为

$$\psi(\xi_A\xi_B)\rangle_A\rangle_B. \tag{68}$$

有可能在某一計算中我們希望对 B 系統用一特定的表象，例如上述的 ξ_B 是对角的表象，而不希望对 A 系統引进任何特定表象．这时，对 B 系統用标准右矢 $\rangle_B$，而对 A 系統不用标准右矢，会是方便的．在这种情况下，我們对原来的系統可以写出任一右矢为

$$|\xi_B\rangle\rangle_B, \tag{69}$$

其中 $|\xi_B\rangle$ 是对 A 系統的一个右矢，也是 ξ_B 的函数，即对于 ξ_B 的每一組值，它是 A 系統中的一个右矢．事实上，如我們取

$$|\xi_B\rangle = \psi(\xi_A\xi_B)\rangle_A,$$

則(69)式等于(68)式．我們可以把(69)式中的标准右矢 $\rangle_B$ 省略不写出，而这样对原来系統的一般右矢就表現为 $|\xi_B\rangle$，它是对 A 系統的右矢，又是 B 系統的变量 ξ_B 的波函数．这种符号的例子将在§66 与 §79 中用到．

上述工作能够直接地推广到由許多力学变量所描述的力学系統，这些力学变量能分成三个或更多的集 A，B，$C\cdots$，使得在一个集中的任意可观察量与另一个集中的任意可观察量对易．方程(65)的推广成为

$$|a\rangle|b\rangle|c\rangle\cdots = |abc\cdots\rangle,$$

左边的因子是各个組分系統的右矢，右边的右矢是原来系統的右矢．用同样方法，方程(66)(67)与(68)也能推广到多数因子的情况中去．

第四章　量子条件

§21. 泊松括号

至此为止，在我們的工作中已建立了一个普遍的数学方案，这个方案联系着量子力学中的态与可观察量. 这个方案的显著特点之一是，可观察量及一般的力学变量，在此方案中表現为不服从乘法交換律的量. 現在，我們就有必要去求出一些代替乘法交換律的方程，卽当 ξ 与 η 是任意可观察量或力学变量时，这些方程将告訴我們 $\xi\eta-\eta\xi$ 的值. 只有当这种方程知道了，我們才有一个完整的力学方案来代替經典力学. 这些新方程就称为量子条件或者称为对易关系.

寻找量子条件的問題，与那些我們到此为止所涉及的問題不一样，它不是具有一般性質的問題. 相反的，它是随着我們要去研究的每个特定問題而出現的特殊問題. 然而，也有一个相当普遍的办法来求得量子条件，它适用于很大一类力学系統. 这就是經典类比法，这个方法将組成本章的主題. 这个方法不能适用的那些力学系統就必須个別地处理，并且对每个例子要作特殊的考慮.

經典类比法在发展量子力学中的意义是由下述事实决定的，卽經典力学在某些条件下提供力学系統的正确描述，这些条件卽是，組成系統的粒子与物体具有足够大的質量，使得伴随观察而来的干扰可以忽略. 經典力学因而必定是量子力学的一个极限情况. 因此，我們应当期望，在經典力学中可以找到一些重要概念，它們是与量子力学中的重要概念相当的；并且，根据对經典力学与量子力学之間的类比的普遍性質的了解，我們可能希望得到量子力学中的一些規則与定理，它們表現为經典力学中一些周知的結

果的簡单推广；特别是，我們可以希望得到量子条件，它們表現为所有力学变量都对易的經典規則的簡单推广.

設我們取一力学系統，它由处于相互作用下的一些粒子所組成. 为处理这个系統，我們可用所有这些粒子的直角坐标及粒子速度的相应分量作为独立的力学变量. 但是，更方便的是不用速度分量，而用动量分量代替它. 設我們称坐标为 q_r（r 从 1 到粒子数的三倍），而称相应的动量分量为 p_r. 这些 q 与 p 就叫做正則坐标与正則动量.

拉格朗日运动方程的方法包含用更普遍的方式引进坐标 p_r 与动量 q_r，它也适用于不是由粒子組成的系統（例如一个包含着一些剛体的系統）. 这种更普遍的 q 与 p 也叫正則坐标与正則动量. 任意的力学变量都可以用一組正則坐标与正則动量表示出来.

在一般力学理論中，有一个重要的概念，就是泊松括号. 任意两个力学变量 u 及 v 有一个泊松括号，我們用 $[u,v]$ 代表它，定义为

$$[u, v] = \sum_r \left\{ \frac{\partial u}{\partial q_r} \frac{\partial v}{\partial p_r} - \frac{\partial u}{\partial p_r} \frac{\partial v}{\partial q_r} \right\}, \tag{1}$$

这里，为了进行微分，把 u 及 v 看成为一組正則坐标 q_r 与正則动量 p_r 的函数. (1)式的右边是与用那一組正則坐标与正則动量无关的，这是正則坐标与正則动量一般定义的結果，所以泊松括号 $[u, v]$ 是完全定义了的.

从泊松括号的定义，即(1)式，立刻就可得到泊松括号的主要性質为

$$[u, v] = -[v, u], \tag{2}$$

$$[u, c] = 0 \tag{3}$$

其中 c 是数（它可被当成是力学变量的特例），

$$\left.\begin{aligned} [u_1 + u_2, v] &= [u_1, v] + [u_2, v], \\ [u, v_1 + v_2] &= [u, v_1] + [u, v_2], \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

$$[u_1 u_2, v] = \sum_r \left\{ \left(\frac{\partial u_1}{\partial q_r} u_2 + u_1 \frac{\partial u_2}{\partial q_r} \right) \frac{\partial v}{\partial p_r} - \left(\frac{\partial u_1}{\partial p_r} u_2 + u_1 \frac{\partial u_2}{\partial p_r} \right) \frac{\partial v}{\partial q_r} \right\}$$

$$\left.\begin{aligned} &= [u_1, v]u_2 + u_1[u_2, v], \\ [u, v_1 v_2] &= [u, v_1]v_2 + v_1[u, v_2]. \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

还有很容易証明的恆等式

$$[u, [v, w]] + [v, [w, u]] + [w, [u, v]] = 0. \tag{6}$$

方程(4)表示，泊松括号$[u, v]$綫性地包含着u和v，而方程(5)則与对乘积微分的一般規則相对应。

让我們試图引进量子的泊松括号，它将与經典的泊松括号类似。我們假定量子的泊松括号满足(2)—(6)各式的全部条件，現在就必須要求，在方程(5)的第一式中，因子u_1与u_2的次序应当在整个方程中不变，就象我們这里所写出的一样，对方程(5)的第二式中的v_1与v_2也有同样要求。这些条件已經足够唯一地决定量子的泊松括号的形式，这一点可从下面的推理看出。我們能够用两种不同的方法算出泊松括号$[u_1 u_2, v_1 v_2]$，因为我們可以先用两个(5)式中的任一个，即是

$$\begin{aligned} [u_1u_2, v_1v_2] &= [u_1, v_1v_2]u_2 + u_1[u_2, v_1v_2] \\ &= \{[u_1, v_1]v_2 + v_1[u_1, v_2]\}u_2 + u_1\{[u_2, v_1]v_2 + v_1[u_2, v_2]\} \\ &= [u_1, v_1]v_2u_2 + v_1[u_1, v_2]u_2 + u_1[u_2, v_1]v_2 + u_1v_1[u_2, v_2], \end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned} [u_1u_2, v_1v_2] &= [u_1u_2, v_1]v_2 + v_1[u_1u_2, v_2] \\ &= [u_1, v_1]u_2v_2 + u_1[u_2, v_1]v_2 + v_1[u_1, v_2]u_2 + v_1u_1[u_2, v_2]. \end{aligned}$$

令这两个結果相等，我們得到

$$[u_1, v_1](u_2v_2 - v_2u_2) = (u_1v_1 - v_1u_1)[u_2, v_2].$$

因为此条件对u_1与v_1永远成立，与u_2及v_2完全无关，我們必然有

$$u_1v_1 - v_1u_1 = i\hbar[u_1, v_1]$$

$$u_2v_2 - v_2u_2 = i\hbar[u_2, v_2]$$

其中$\hbar$必然既与u_1和v_1无关，也与u_2和v_2无关，并且还必然与$(u_1v_1 - v_1u_1)$对易。由此得知，$\hbar$必定是簡单的数。我們希望两个实变数的泊松括号是实的，象在經典理論中一样；而这就要求，根据§8所講的理由，当这里引进了系数i时，$\hbar$应为一实数。于是，我們得出，任意两变量u与v的量子泊松括号$[u, v]$的下列定义，

$$uv - vu = i\hbar[u,v], \tag{7}$$

其中，$\hbar$ 是一个新的普适恆量. 它的量綱是作用量. 为使理論可能与实驗一致，我們必須取 $\hbar$ 等于 $h/2\pi$，其中 h 是由普朗克提出的普适恆量，一般称之为普朗克恆量. 容易驗証，量子泊松括号满足所有(2)，(3)，(4)，(5)与(6)式等条件.

寻找量子条件的問題，現在簡化为在量子力学中决定泊松括号的問題. (7)式所定义的量子的泊松括号与(1)式所定义的經典泊松括号之間的強烈类似性，使我們作出假定，量子的泊松括号，或者至少是其中的較簡单的，与相应的經典泊松括号有相同的值. 最簡单的泊松括号是那些包含正則坐标与正則动量本身的泊松括号，它們在經典理論中有值如下：

$$\left.\begin{array}{c}[q_r, q_s] = 0,\ [p_r, p_s] = 0,\\ [q_r, p_s] = \delta_{rs}.\end{array}\right\} \tag{8}$$

因而我們假定，相应的量子的泊松括号也有(8)式給出之值. 借助(7)式消去量子的泊松括号，我們就得到方程

$$\left.\begin{array}{c}q_r q_s - q_s q_r = 0,\ p_r p_s - p_s p_r = 0,\\ q_r p_s - p_s q_r = i\hbar\delta_{rs},\end{array}\right\} \tag{9}$$

这些就是**基本量子条件**. 它們指明，在正則坐标与正則动量之間，不对易性在于何处. 它們也为計算其他力学变量間的对易关系提供了一个基础. 例如，如果 ξ 与 η 是 q 与 p 的任意两个函数，并可表示为冪級数，我們就可重复地运用(2)，(3)，(4)与(5)式的規則而把 $\xi\eta - \eta\xi$ 或$[\xi, \eta]$表为(8)式給出的基本泊松括号，并从而計算出来. 在簡单的情况下，結果常常与經典結果是相同的，或者与經典結果的区別仅在于要求在乘积中各因子有一特殊的次序，这种次序在經典理論中当然是不重要的. 即令当 ξ 与 η 是 q 与 p 的更一般的函数，不能表示为冪級数，方程(9)仍然足以决定 $\xi\eta-\eta\xi$ 的值，这一点从下面的工作中就明显了. 因此，对于所有那些有經典类比并能用正則坐标与正則动量来描述的力学系統，方程(9)給出了寻找量子条件問題的解答. 但是这样的系統并未包括量子力学中全部可能的系統.

方程 (7) 与 (9) 为量子力学与經典力学之間的类比提供了基础. 它們表明,經典力学可以看成是,量子力学当 $\hbar$ 趋于零时的极限情况. 在量子力学中泊松括号是一純粹的代数概念，因而是比經典泊松括号更为基本的概念，經典泊松括号只能对于一組正則坐标与正則动量来定义. 为此原因，正則坐标与正則动量在量子力学中的重要性就要比在經典力学中小些,事实上,我們在量子力学里可以有一个正則坐标与正則动量不存在的系統，而我們仍能給泊松括号以意义. 这样的系統会是一个沒有經典类比的系統，我們当然不能用这里描述的方法来得到它的量子条件.

从方程(9),我們看到，有不同下角标 r 与 s 的两个变量总是对易的. 由此得出，当 r 与 s 不相同时, q_r 和 p_r 的任意函数将与 q_s 和 p_s 的任意函数互相对易. r 的不同值相应于力学系統的不同自由度,所以,我們得到結果为，联系于不同自由度的力学变量都是对易的. 这个規則因为我們是从(9)式推导出的,仅仅在力学系統有經典类比时才是証明了的；但是，我們假定它一般地成立. 这样我們就对于不存在正則坐标与正則动量的力学系統寻求量子条件的問題，作出了一个开端，只要我們能对不同的自由度給以意义卽可，而借助于物理了解，我們有时是能够做到这一点的.

在前一节里，我們討論了把力学变量划分成几个集合，每一集合中的任意力学变量与另一集合的任意力学变量相对易,現在,我們看到了这种划分的物理意义了. 每一集合相应于某些自由度，或者可能就是相应于一个自由度. 这个划分可能相应于把力学系統分解成它的組成部分的物理过程，其中每一組成部分能够本身自成一物理系統，而几个組成部分必須放在一起相互作用以产生原来的系統. 另外一种可能是，这种划分也可能仅仅是一数学过程，它把力学系統分解为在物理上不能分开的自由度,例如,由有內部結构的粒子組成的系統，就可能分为描述粒子中心运动的自由度与那些描述內部結构的自由度.

§ 22. 薛定諤表象

討我們研究一个具有 n 个自由度而又有經典类比的力学系統，因而可以用正則坐标与正則动量 q_r，$p_r(r=1,2,\cdots,n)$ 来描述. 我們假定，坐标 q_r 全是可观察量，并有連續范围的本征值，从 q 的物理意义上看，这些假定是合理的. 討我們建立 q 为对角的表象. 对这种力学系統，产生了 q 是否組成完全对易集的問題. 一眼看上去，它們是組成完全对易集这一点似乎是很显然的. 这里，我們将假定它們的确如此，这个假定将在以后証实[見(28)式后的文字]. 由于 q 組成完全对易集，这个表象就固定了，只是其中还有任意的相因子.

首先，討我們考虑 $n=1$ 的情况，这时只有一个 q 与一个 p，满足

$$qp-pq=i\hbar. \tag{10}$$

任意右矢可以写成标准右矢的符号 $\psi(q)\rangle$. 由它我們可以組成另一右矢 $d\psi/dq\rangle$，其表示式是原来右矢表示式的微商. 这一新右矢是原来右矢的綫性函数，并因而是某一綫性算符作用于原来右矢上的結果. 我們称此綫性算符为 d/dq，就有

$$\frac{d}{dq}\psi\rangle=\frac{d\psi}{dq}\rangle. \tag{11}$$

对所有函数 ψ 成立的方程(11)定义了綫性算符 d/dq. 我們有

$$\frac{d}{dq}\rangle=0. \tag{12}$$

討我們按照 §7 的綫性算符的普遍理論来处理綫性算符 d/dq. 于是，我們应当能够把它作用于一个左矢 $\langle\phi(q)$ 上，按 §7 的(3)式，乘积 $\langle\phi d/dq$ 由下式定义:

$$\left\{\langle\phi\frac{d}{dq}\right\}\psi\rangle=\langle\phi\left\{\frac{d}{dq}\psi\rangle\right\}, \tag{13}$$

它对所有函数 $\psi(q)$ 成立，取表示式，我們得

$$\int\langle\phi\frac{d}{dq}|q'\rangle dq'\psi(q')=\int\phi(q')dq'\frac{d\psi(q')}{dq'}. \tag{14}$$

我們用分部积分法把右边进行变換，得

$$\int\langle\phi\frac{d}{dq}|q'\rangle dq'\psi(q')=-\int\frac{d\phi(q')}{dq'}dq'\psi(q'), \tag{15}$$

只要积分上下限的貢献为零．这一点給出

$$\langle\phi\frac{d}{dq}|q'\rangle=-\frac{d\phi(q')}{dq'},$$

乜表明

$$\langle\phi\frac{d}{dq}=-\langle\frac{d\phi}{dq}. \tag{16}$$

因此，$\frac{d}{dq}$向左边作用于波函数的共軛复量，其意义为对 q 进行微分幷加一負号.

这个結果的正确性取决于我們是否能够使(14)式过渡到(15)式，这一点要求我們必須限制在那些左矢与右矢，使乜們相应于那些滿足适当的边界条件的波函数．通常在实际上成立的边界条件是，乜們在边界上为零(在下节将給出多少更为普遍的条件)．这些条件幷不限制理論在物理上的应用，而是正相反，乜們通常也正是从物理基础出发所要求的．举例說，如果 q 是一个粒子的直角坐标，乜的本征值包括从 $+\infty$ 到 $-\infty$，粒子处于无穷远点的几率为零这一物理上的要求，就产生了波函数在 $q=\pm\infty$ 时为零的条件.

从(16)式知$\frac{d}{dq}\psi\rangle$ 或 $d\psi/dq\rangle$ 的共軛虛量是 $\langle d\bar{\psi}/dq$ 或 $-\langle\bar{\psi}\,d/dq$，注意到这一点我們就能計算出綫性算符 d/dq 的共軛复量．由此得 d/dq 的共軛复量是 $-d/dq$，所以，d/dq 是一个純虛的綫性算符.

为得到 d/dq 的表示式，我們注意到，应用 §20 的公式(63)，就有

$$|q''\rangle=\delta(q-q'')\rangle, \tag{17}$$

所以

$$\frac{d}{dq}|q''\rangle = \frac{d}{dq}\delta(q-q''))\rangle, \tag{18}$$

因而

$$\langle q'\left|\frac{d}{dq}\right|q''\rangle = \frac{d}{dq'}\delta(q'-q''). \tag{19}$$

$\frac{d}{dq}$的表示式中包含有 δ 函数的微分.

讓我們計算 d/dq 与 q 的对易关系，我們有

$$\frac{d}{dq}\,q\psi\rangle = \frac{dq\psi}{dq}\rangle = q\frac{d}{dq}\psi\rangle + \psi\rangle. \tag{20}$$

因为此式对任意右矢 $\psi\rangle$ 成立，我們有

$$\frac{d}{dq}q - q\frac{d}{dq} = 1. \tag{21}$$

把此結果与(10)式比較，我們看到 $-i\hbar d/dq$ 与 q 的对易关系和 p 与 q 的对易关系是相同的.

我們把上述工作推广到任意 n 的情况，把一般右矢写为 $\psi(q_1\cdots q_n)\rangle = \psi\rangle$，并引进 n 个綫性算符 $\frac{\partial}{\partial q_r}(r=1,\cdots n)$，它們能按照下列公式作用于右矢 $\psi\rangle$，

$$\frac{\partial}{\partial q_r}\psi\rangle = \frac{\partial\psi}{\partial q_r}\rangle, \tag{22}$$

此式相当于(11)式. 我們也有

$$\frac{\partial}{\partial q_r}\rangle = 0 \tag{23}$$

相当于(12)式. 如果我們限制于研究那些左矢与右矢，它們相应于满足适当边界条件的波函数，則这些綫性算符也能按照公式

$$\langle\phi\frac{\partial}{\partial q_r} = -\langle\frac{\partial\phi}{\partial q_r} \tag{24}$$

作用于左矢，此式相当于(16)式. 因此，$\frac{\partial}{\partial q_r}$ 能向左边作用于波函数的共軛复量，此时，它的意义是对 q_r 的偏微分并加一負号. 与前面一样，我們发現，每个 $\frac{\partial}{\partial q_r}$ 都是純虛的綫性算符. 相当于(21)

式，我們有对易关系

$$\frac{\partial}{\partial q_r} q_s - q_s \frac{\partial}{\partial q_r} = \delta_{rs}. \tag{25}$$

我們还有

$$\frac{\partial}{\partial q_r}\frac{\partial}{\partial q_s}\psi\rangle = \frac{\partial^2 \psi}{\partial q_r \partial q_s}\rangle = \frac{\partial}{\partial q_s}\frac{\partial}{\partial q_r}\psi\rangle, \tag{26}$$

它表明

$$\frac{\partial}{\partial q_r}\frac{\partial}{\partial q_s} = \frac{\partial}{\partial q_s}\frac{\partial}{\partial q_r}. \tag{27}$$

把(25)式和(27)式与(9)式比較，我們看到，綫性算符 $-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial q_r}$ 与 q 的对易关系和 p 与 q 的对易关系相同；它們自己之間的对易关系也与各 p 之間的对易关系相同.

我們可以取

$$p_r = -i\hbar\partial/\partial q_r \tag{28}$$

而不引起任何前后矛盾. 这种可能性使我們看到，q 一定組成可观察量的完全对易集，因为这就意味着 q 与 p 的任何函数都可以看成是 q 与 $-i\hbar\partial/\partial q$ 的函数，因而除非它是只含 q 的函数，否則它就不能与所有的 q 对易.

方程(28)并非必然成立的. 但在任何情况下，这些量 $p_r + i\hbar\partial/\partial q_r$ 每一个都与所有的 q 对易，所以它們每一个都是 q 的函数，从 §19 的定理 2 得到

$$p_r = -i\hbar\partial/\partial q_r + f_r(q). \tag{29}$$

因为 p_r 和 $-i\hbar\partial/\partial q_r$ 都是实的，$f_r(q)$ 必定是实的. 对 q 的任意函数 f，我們有

$$\frac{\partial}{\partial q_r} f\psi\rangle = f\frac{\partial}{\partial q_r}\psi\rangle + \frac{\partial f}{\partial q_r}\psi\rangle,$$

它表明

$$\frac{\partial}{\partial q_r} f - f\frac{\partial}{\partial q_r} = \frac{\partial f}{\partial q_r} \tag{30}$$

現在借助于(29)式，我們可以推导出普适公式

$$p_r f - f p_r = -i\hbar\frac{\partial f}{\partial q_r}. \tag{31}$$

这个公式也可以用泊松括号的符号写为

$$[f, p_r] = \partial f/\partial q_r. \tag{32}$$

此时它与在經典理論中从(1)式得到的完全一样. 用 $(-i\hbar)^2$ 乘(27)式,并将 $-i\hbar\partial/\partial q_r$ 与 $-i\hbar\partial/\partial q_s$ 用(29)式中給出的值代替,我們就得

$$(p_r - f_r)(p_s - f_s) = (p_s - f_s)(p_r - f_r),$$

借助于量子条件 $p_r p_s = p_s p_r$, 此式簡化为

$$p_r f_s + f_r p_s = p_s f_r + f_s p_r;$$

借助于(31)式,上式又簡化为

$$\partial f_s/\partial q_r = \partial f_r/\partial q_s, \tag{33}$$

它表明,函数 f_r 的形式都是

$$f_r = \partial F/\partial q_r, \tag{34}$$

其中 F 与 r 无关. 方程(29)现在变成

$$p_r = -i\hbar\partial/\partial q_r + \partial F/\partial q_r. \tag{35}$$

我們一直应用了一个表象,这个表象只确定到一定的程度,即 q 一定是对角的,但还包括着任意的相因子. 如果相因子变了,算符 $\partial/\partial q_r$ 也应发生变化. 現在我們来証明,把相因子作适当变化,能使(35)式中的 F 为零,从而能使方程(28)成立.

用星号来表明对应于有新相因子的新表象的量,我們就将得到新的基左矢与以前的基左矢之間的关系为

$$\langle q_1' \cdots q_n'{}^* | = e^{i\gamma'} \langle q_1' \cdots q_n' | \tag{36}$$

其中 $\gamma' = \gamma(q')$ 是 q' 的实函数. 一个右矢的新表示式是原来表示式乘以 $e^{i\gamma'}$, 表明 $e^{i\gamma}\psi\rangle^* = \psi\rangle$, 所以我們得到新的标准右矢与原来标准右矢之間的联系为

$$\rangle^* = e^{-i\gamma}\rangle. \tag{37}$$

与(22)式相对应,新的綫性算符 $(\partial/\partial q_r)^*$ 滿足

$$\left(\frac{\partial}{\partial q_r}\right)^* \psi\rangle^* = \frac{\partial\psi}{\partial q_r}\rangle^* = e^{-i\gamma}\frac{\partial\psi}{\partial q_r}\rangle,$$

这里用了(37)式. 利用(22)式,上式就給出

$$\left(\frac{\partial}{\partial q_r}\right)^* \psi\rangle^* = e^{-i\gamma}\frac{\partial}{\partial q_r}\psi\rangle = e^{-i\gamma}\frac{\partial}{\partial q_r}e^{i\gamma}\psi\rangle^*,$$

这表明

$$\left(\frac{\partial}{\partial q_r}\right)^* = e^{-i\gamma}\frac{\partial}{\partial q_r}e^{i\gamma} \tag{38}$$

或者借助于(30)式，有

$$\left(\frac{\partial}{\partial q_r}\right)^* = \frac{\partial}{\partial q_r} + i\frac{\partial\gamma}{\partial q_r}. \tag{39}$$

选择 γ，使

$$F = \hbar\gamma + 常数, \tag{40}$$

(35)式就变成

$$p_r = -i\hbar(\partial/\partial q_r)^*. \tag{41}$$

方程(40)决定了 γ，只是还有一任意常数，所以这个表象是确定到一个任意常数的相因子。

按此方式我們看到，建立一个使 q 是对角的，同时使方程(28)成立的表象是可能的. 这个表象对許多問題是非常有用的表象. 它将被称为**薛定諤表象**，因为薛定諤在 1926 年作出他对量子力学的最初表达式时正是使用了这种表象的. 只要我們有正則坐标 q 与正則动量 p，就有薛定諤表象存在，而且这个表象为这些 q 与 p 所完全决定，只差到一个任意的常数相因子. 它有很方便之处，原因是它容許我們把形式为 p 的冪級数的 q 与 p 的任意代数函数直接地表示为微分算符，例如，如果 $f(q_1,\cdots,q_n,p_1,\cdots,p_n)$ 是这样的函数，我們就有

$$f(q_1,\cdots,q_n,p_1,\cdots,p_n) \\ = f(q_1,\cdots,q_n,-i\hbar\partial/\partial q_1,\cdots -i\hbar\partial/\partial q_n), \tag{42}$$

只要我們在用 $-i\hbar\partial/\partial q_r$ 代替 p_r 时保持乘积中因子的次序不变.

从(23)式与(28)式，我們有

$$p_r\rangle = 0. \tag{43}$$

因此，在薛定諤表象中的标准右矢的特征是下述条件，即它是所有动量的共同本征右矢，属于本征值零. 还可以指出薛定諤表象的基矢量的某些性質. 方程(22)給出

$$\langle q_1'\cdots q_n'|\frac{\partial}{\partial q_r}\psi\rangle=\langle q_1'\cdots q_n'|\frac{\partial\psi}{\partial q_r}\rangle=\frac{\partial\psi(q_1'\cdots q_n')}{\partial q_r'}=$$

$$=\frac{\partial}{\partial q_r}\langle q_1'\cdots q_n'|\psi\rangle.$$

因而

$$\langle q_1'\cdots q_n'|\frac{\partial}{\partial q_r}=\frac{\partial}{\partial q_r'}\langle q_1'\cdots q_n'|,\tag{44}$$

所以

$$\langle q_1'\cdots q_n'|p_r=-i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r'}\langle q_1'\cdots q_n'|.\tag{45}$$

同样地,方程(24)导出

$$p_r|q_1'\cdots q_n'\rangle=i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r'}|q_1'\cdots q_n'\rangle.\tag{46}$$

§23. 动量表象

让我們取一个自由度为 1 并可以用 q 与 p 描述的系統，q 的本征值从 $-\infty$ 到 $+\infty$，并让我們取 p 的一个本征右矢 $|p'\rangle$. 它在薛定諤表象中的表示式 $\langle q'|p'\rangle$ 满足

$$p'\langle q'|p'\rangle=\langle q'|p|p'\rangle=-i\hbar\frac{d}{dq'}\langle q'|p'\rangle,$$

这是把(45)式用于自由度为 1 的情况中而得的. 这是 $\langle q'|p'\rangle$ 的一个微分方程,其解为

$$\langle q'|p'\rangle=c'e^{ip'q'/\hbar},\tag{47}$$

其中 $c'=c(p')$ 是与 q' 无关的,但可以含 p'.

表示式 $\langle q'|p'\rangle$ 不满足在 $q'=\pm\infty$ 时为零的边界条件. 这一点引起某些困难,这个困难最直接的表現是不符合正交性定理.如果我們取 p 的第二个属于另一本征值 p'' 的本征右矢 $|p''\rangle$,其表示式为

$$\langle q'|p''\rangle=c''e^{ip''q'/\hbar},$$

我們将有

$$\langle p'|p''\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\langle p'|q'\rangle dq'\langle q'|p''\rangle=\overline{c'}c''\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-i(p'-p'')q'/\hbar}dq'.\tag{48}$$

按照通用的收斂定义，这个积分不是收斂的．为了整頓这个理論，我們对范围扩展到无穷大的积分的收斂采取一个新的定义，这个新定义类似于希賽罗(Cesàro)对无穷級数求和的定义．按此新定义，一个积分如果它对上限 q' 的値形如 $\cos aq'$ 或 $\sin aq'$ (a 是一不为零的实数)，則当 q' 趋于无穷大时这个値就被当作是零，也就是，我們取振动的平均値，并且对 q' 的下限趋于負无穷大时采用同样办法．这样的定义就使(48)式的右边当 $p'' \neq p'$ 时为零，因而使正交性定理恢复有效．此外，当 $\langle\phi$ 与 $\psi\rangle$ 是 p 的本征矢量时，这样定义也使(13)式的右方与(14)式的右方相等，所以 p 的本征矢量就成为可以用算符 d/dq 作用的矢量．就这样，可容許的左矢或右矢的表示式所必須滿足的边界条件就变寬了，卽允許这个表示式在 q' 趋于正无穷大或負无穷大时象 $\cos aq'$ 或 $\sin aq'$ 一样振蕩．

当 p'' 很接近 p' 时，(48)式的右边包含 δ 函数．为計算出它，我們需要对于实数 a 的下列公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{iax}dx = 2\pi\delta(a), \tag{49}$$

这可以証明如下．此式对不为零的 a 显然成立，因为两边这时都为零．进一步，对任意連續函数 $f(a)$，当 g 趋于无穷大的极限时我們有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(a)da\int_{-g}^{g} e^{iax}dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f(a)da2a^{-1}\sin ag = 2\pi f(0).$$

比較复杂些的推理表明，如果我們不用 g 与 $-g$ 作积分限，而代之以 g_1 与 $-g_2$，并让 g_1 与 g_2 以不相同的方式(不是相差太大的方式)趋于无穷大，我們也得到相同的結果．这就表明，(49)式的两边作为被积函数的因子是等效的，这也就証明了这个公式．

借助于(49)式，(48)式就变为

$$\begin{aligned}\langle p'|p''\rangle &= \overline{c'}c''2\pi\delta[(p'-p'')/\hbar] = \overline{c'}c''h\delta(p'-p'') \\ &= |c'|^2h\delta(p'-p'').\end{aligned} \tag{50}$$

我們已經得到 p 的一个属于任意实本征値 p' 的本征右矢，它的表示式由(47)式給出．任意右矢 $|X\rangle$ 能够展成 p 的这些本征右矢

之和，因为它的表示式 $\langle q'|X\rangle$ 能用傅里叶分析展开成表示式(47)之和. 由此得出，动量 p 是可观察量，这是与动量可以被观察到的实验結果相一致的.

在 p 与 q 之間，現在显出了对称性. 它們二者都是可观察量，本征値都从 $-\infty$ 到 $+\infty$，并且，如果我們把 q 与 p 互換，同时把 i 写为 $-i$，則方程(10)，即联系 p 与 q 的对易关系，保持不变. 我們已建立了一个表象，其中 q 是对角的，而 $p=-i\hbar d/dq$. 从对称性推出，我們也可以建立另一个表象，其中 p 是对角的，而

$$q=i\hbar d/dp, \tag{51}$$

定义算符 d/dp 的程序与用来定义 d/dq 的程序是一样的. 这个表象将称为动量表象. 比起前面的薛定諤表象，动量表象的用途較小，因为薛定諤表象使我們能够把那些是 p 的冪級数的 p 与 q 的任意函数，表示为微分算符，而动量表象則使我們能够把那些是 q 的冪級数的 p 与 q 的任意函数，表示为微分算符，可是力学里重要的量几乎总是 p 的冪級数，而往往不是 q 的冪級数. 虽然如此，动量表象对某些問題还是有价値的(参見 §50).

訨我們計算联系这两个表象的变换函数 $\langle q'|p'\rangle$. 动量表象的基右矢 $|p'\rangle$ 都是 p 的本征右矢，它們的薛定諤表示式 $\langle q'|p'\rangle$ 由(47)式給出，其中系数 c' 需要作适当的选择. 这些基右矢的相因子必須选择得能使(51)式成立. 实現这个条件的最容易方法是利用上面所講的 p 与 q 之間的对称性，按照这种对称性，如果我們交換 p' 与 q' 并用 $-i$ 代 i，則 $\langle q'|p'\rangle$ 必須变成 $\langle p'|q'\rangle$. 由于 $\langle q'|p'\rangle$ 等于(47)式的右边，而 $\langle p'|q'\rangle$ 等于其共軛复量，所以 c' 必須与 p' 无关. 因此，c' 就是一个数 c. 再者，我們一定有

$$\langle p'|p''\rangle=\delta(p'-p''),$$

与(50)式比較，它表明 $|c|=h^{-\frac{1}{2}}$. 我們可以在两个表象中选择适当的任意常数相因子，使 $c=h^{-\frac{1}{2}}$，我們就得到变换函数为

$$\langle q'|p'\rangle=h^{-\frac{1}{2}}e^{ip'q'/\hbar}. \tag{52}$$

上述工作很容易推广到有 n 个自由度的系統，它可以用 n 个 p 与 n 个 q 来描述，每个 q 的本征値从 $-\infty$ 到 $+\infty$. 这时，每个 p

就将是一个可观察量，其本征值从$-\infty$到$+\infty$，而且在q的集合与p的集合之間具有对称性，如果我們交換每个q_r与相应的p_r，并用i代替$-i$，对易关系保持不变．我們也能建立一个动量表象，其中p是对角的．而每一个q_r为

$$q_r = i\hbar\partial/\partial p_r. \tag{53}$$

联系动量表象与薛定諤表象的变換函数，将等于把每一自由度分别考虑而得的各变換函数之积，这一点已有§20的公式(67)表明，因此将为

$$\begin{aligned}\langle q_1' q_2' \cdots q_n' | p_1' p_2' \cdots p_n' \rangle &= \langle q_1' | p_1' \rangle \langle q_2' | p_2' \rangle \cdots \langle q_n' | p_n' \rangle \\ &= h^{-n/2} e^{i(p_1' q_1' + p_2' q_2' + \cdots p_n' q_n')/\hbar}.\end{aligned} \tag{54}$$

§24. 海森伯測不准原理

对于自由度为1的系統，一个右矢$|X\rangle$的薛定諤表示式与动量表示式之間的关系为

$$\left.\begin{aligned}\langle p' | X \rangle &= h^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ip'q'/\hbar} dq' \langle q' | X \rangle, \\ \langle q' | X \rangle &= h^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip'q'/\hbar} dp' \langle p' | X \rangle.\end{aligned}\right\} \tag{55}$$

这两个公式有簡单的意义．它們表明，除了数值系数而外，这两个表示式中任一个等于另一个的傅里叶分量的振幅．

如果一个右矢的薛定諤表示式由所謂波包組成，則把(55)式应用在这个右矢上是值得討論的．波包是一个函数，此函数在一定区域外任何地方的值都很小，区域有一定的寬度，如$\Delta q'$，在这区域內，这个函数是近似地周期性的，有一确定的頻数[1]．如果对这样的波包进行傅里叶分析，則除了在此确定頻数的邻近区域的振幅以外，所有傅里叶分量的振幅都将很小．那些振幅不是很小的分量将充满一个頻数带，其寬度的数量級为$1/\Delta q'$，因为頻数相差为这个量的两个分量，如果在区域Δq的中点上位相一致，将在这个区域的两个端点上恰恰位相相反并相互干涉掉．現在，在方

1) 頻数在这里的意思是波长的倒数．

程(55)中的第一式里，变量 $(2\pi)^{-1}p'/\hbar = p'/h$ 起频数的作用. 因此，如$\langle q'|X\rangle$具有波包的形式，則由此波包的傅里叶分量的振幅所組成的函数 $\langle p'|X\rangle$ 将在 p' 空間某一区域以外到处都很小，此区域的寬度为 $\Delta p' = h/\Delta q'$.

現在計我們应用物理解释，即把右矢表示式的模量的平方当作一个几率. 我們发現，我們的波包表示一个态，对此态測量 q 时几乎肯定得到結果为在寬度 $\Delta q'$ 的一个区域內的值，而測量 p 时几乎肯定得到結果为在寬度 $\Delta p'$ 的一个区域內的值. 我們可以說，对于此态，q 有一确定的值，其誤差的数量級为 $\Delta q'$，p 也有一确定的值，其誤差的数量級为 $\Delta p'$. 这两个誤差的乘积是

$$\Delta q'\Delta p' = h. \tag{56}$$

因此在变量 q 与 p 中任一个越是精确地有一确定值，則另一个有一确定值就越不精确. 对于一个有几个自由度的系統，方程(56)分别适用于每一个自由度.

方程(56)被称为**海森伯測不准原理**. 它清楚地表明，当两个不对易的可观察量是正則坐标与正則动量时，对任意的特定态同时給这两个可观察量賦与数值的可能性所受的限制；它提供了明白的例証，說明在量子力学中可观察量如何可能不相容. 它也表明，当 h 可以看成小到足以忽略不計时，經典力学(它假定对所有可观察量都能同时賦与数值)怎样可以是一个正确的近似. 方程(56)只是在最有利的情况下成立，当态的表示式是波包形式时出現最有利的情况. 对表示式的其他形式会得出 $\Delta q'$ 与 $\Delta p'$ 的乘积是大于 h 的.

海森伯測不准原理表明，在极限情况下，当 p 或 q 中任一个完全确定时，另一个就完全不确定了. 此結果也能由变換函数$\langle q'|p'\rangle$直接得到. 按照§18結尾所說的，对于 p 肯定有值 p' 的态，$|\langle q'|p'\rangle|^2dq'$ 比例于 q 有値在 q' 与 $q'+dq'$ 之間的几率，从(52)式知，这个几率对給定的 dq' 是与 q' 无关的. 因此，如果 p 肯定有确定值 p'，則 q 的所有値将是等几率的. 同样地，如果 q 肯定有确定值 q'，p 的所有值是等几率的.

从物理上看，显然，对 q 的所有値是等几率的态，或者对 p 的所有値是等几率的态，实际上都是不能够达到的，对第一种情况是因为尺寸的限制，对第二种情况是因为能量的限制。因此 p 的本征态或 q 的本征态，实际上不可能达到。§12 結尾的推理，已經表明这种本征态是不可达到的，因为建立它們所需的精确度是无限大的，現在我們用另一推理得到了同一結論。

§ 25. 位移算符

对位移算符作一研究，我們便能对某些量子条件的意义得到新的了解。当我們考虑到下述情况时，理論中就出現了这些位移算符：第二章里講的，态与力学变量之間的关系的方案，基本上是一个物理的方案，所以，如果某些态与力学变量是由某一关系相联系着的話，那么，在我們把它們全部以一定方式位移时(例如，把它們全部沿直角坐标的 x 軸方向位移一个距离 δx)，新的态与力学变量应該仍旧由同一关系相联系。

态或可观察量的位移，在物理上是完全确定的过程。因此，要把态或可观察量沿 x 軸方向位移一个距离 δx，我們只需要把用来制备此态的全部仪器，或者为测量此可观察量所需的全部仪器，沿着 x 軸方向位移一个距离 δx，已被位移的仪器就会决定位移后的态或位移后的可观察量。力学变量的位移必须确定到刚好与可观察量的位移同样的程度，这是由于力学变量与可观察量之間有紧密的数学联系。位移前的态或力学变量，加上位移的方向与大小，就唯一地决定了位移后的态或力学变量。

但是，右矢量的位移却不是这样确定的事。如果我們取某一右矢量，它将表示某一态，我們可以对这个态进行位移而得到一个完全确定的新态，但是这个新态并不能决定我們位移后的右矢，而只是决定了我們位移后的右矢的方向。我們如要求位移后的右矢与位移前的右矢有相同的长度，就有助于确定位移后的右矢，但是卽令如此，它仍然沒有完全决定，而是仍然可能乘以任意的相因子。乍看之下，有人会認为，我們作位移的每个右矢会有不同的任

意相因子，然而，借助于下列推理可知，对所有这些右矢，这个任意相因子是相同的．我們利用的法則是，各态之間的迭加关系在位移下保持不变．各态之間的迭加关系在数学上表示为相应于这些态的右矢間的綫性方程，例如

$$|R\rangle = c_1|A\rangle + c_2|B\rangle, \tag{57}$$

其中 c_1 与 c_2 是数；而且，迭加关系的不变性要求，位移后的各态相应的右矢之間有同样的綫性方程——在我們的例子里，如果位移后的态相应于 $|Rd\rangle$，$|Ad\rangle$，$|Bd\rangle$，則它們滿足

$$|Rd\rangle = c_1|Ad\rangle + c_2|Bd\rangle. \tag{58}$$

我們取这些右矢为我們位移后的右矢，而不取将它們乘以任意互不相关的各相因子以后所得的右矢；若按后一取法，則位移后的右矢会滿足一个系数 c_1 与 c_2 与前不同的綫性方程．現在，在位移后的右矢里留下的唯一任意性在于，对所有的位移后的右矢，可乘以单一的任意相因子．

右矢間的綫性方程在位移时保持不变，亦即只要(57)式成立，就有(58)式一类的相应方程成立，这个条件的意义是，位移后的右矢是位移前的右矢的綫性函数，因而每个位移后的右矢 $|Pd\rangle$ 是某个綫性算符作用于相应的位移前的右矢 $|P\rangle$ 的結果．用符号表示为

$$|Pd\rangle = D|P\rangle, \tag{59}$$

其中 D 是与 $|P\rangle$ 无关的綫性算符，它只由位移决定．可以有一个任意相因子乘在所有位移后的右矢之上这一点，导致 D 也只决定到含有模数为 1 的任意数值因子的程度．

与右矢的位移按上述方式成为确定的同时，左矢的位移通过左矢是右矢的共軛虛量的关系，当然也在同样程度上成为确定的了．我們現在可以断言，右矢、左矢以及力学变量之間的任何符号的方程，当其中出現的每个符号都进行位移时，必須保持为不变式，原因是这样的方程有某种物理意义，在位移时，这种物理意义不会发生变化．

取方程

$$\langle Q|P\rangle = c$$

为例,其中 c 是一数. 这时,我們必然有

$$\langle Qd|Pd\rangle = c = \langle Q|P\rangle. \tag{60}$$

利用(59)式的共軛虛量,用 Q 代替 P,得

$$\langle Qd| = \langle Q|\bar{D}. \tag{61}$$

因而(60)式給出

$$\langle Q|\bar{D}D|P\rangle = \langle Q|P\rangle.$$

因为此式对任意的 $\langle Q|$ 与 $|P\rangle$ 成立,我們一定有

$$\bar{D}D = 1, \tag{62}$$

这結果給出一个 D 所必須滿足的普遍条件.

作为第二个例子,取方程

$$v|P\rangle = |R\rangle,$$

其中 v 是任意力学变量. 用 v_d 代表位移后的力学变量,我們必然有

$$v_d|Pd\rangle = |Rd\rangle.$$

借助于(59)式,我們得

$$v_d|Pd\rangle = D|R\rangle = Dv|P\rangle = DvD^{-1}|Pd\rangle.$$

因为 $|Pd\rangle$ 可以是任何右矢,我們必須有

$$v_d = DvD^{-1}. \tag{63}$$

此式表明, 綫性算符 D 与右矢和左矢的情况一样也决定了力学变量的位移, 注意在 D 中的模数为 1 的任意数値因子不影响 v_d, 也不影响(62)式的成立.

让我們轉到无穷小的位移, 即取位移为沿着 x 軸的方向移过距离 δx, 并使 $\delta x \to 0$. 根据物理的連續性我們应当期望, 位移后的右矢 $|Pd\rangle$ 趋向于原来的右矢 $|P\rangle$,我們进一步可以期望,极限

$$\lim_{\delta x \to 0} \frac{|Pd\rangle - |P\rangle}{\delta x} = \lim_{\delta x \to 0} \frac{D-1}{\delta x}|P\rangle$$

是存在的. 这一点要求极限

$$\lim_{\delta x \to 0} (D-1)/\delta x \tag{64}$$

应当存在．这个极限是一个綫性算符，我們将称之为 x 方向的位移算符，并用 d_x 代表它．我們可以把乘在 D 上的任意数值因子 $e^{i\gamma}$（γ 是实数）当 $\delta x \to 0$ 时必須让它趋于 1，这样，它在 d_x 中也引入一个任意性，即是 d_x 可以代换为

$$\lim_{\delta x \to 0} (De^{i\gamma} - 1)/\delta x = \lim_{\delta x \to 0} (D - 1 + i\gamma)/\delta x = d_x + ia_x,$$

其中 a_x 是 $\gamma/\delta x$ 的极限．因此，d_x 包含一个可任意加上去的純虚数．

当 δx 很小时，

$$D = 1 + \delta x d_x, \tag{65}$$

代入(62)式，我們得

$$(1 + \delta x \bar{d}_x)(1 + \delta x d_x) = 1$$

略去 δx^2，此式簡化为

$$\delta x(\bar{d}_x + d_x) = 0$$

因此，d_x 是一純虛的綫性算符．把(65)式代入(63)式中，略去 δx^2，我們又得到，

$$v_d = (1 + \delta x d_x)v(1 - \delta x d_x) = v + \delta x(d_x v - v d_x) \tag{66}$$

它表明

$$\lim_{\delta x \to 0} (v_d - v)/\delta x = d_x v - v d_x. \tag{67}$$

我們可以用下列力学变量描述任意的力学系統，这些变量是：系統质心的直角坐标 x, y, z，系統的总动量的各分量 p_x, p_y, p_z（它們分别是与 x, y, z 共軛的正則动量）以及任何为描述系統的內部自由度所必需的力学变量．如果我們假定，为測量 x 而建立起的一部仪器在 x 軸的方向上被位移一个距离 δx 后，它将測量出 $x - \delta x$，那么

$$x_d = x - \delta x.$$

取(66)式中的 $v = x$，与上式比較，得

$$d_x x - x d_x = -1. \tag{68}$$

这就是联系 d_x 与 x 的量子条件．从类似的推理我們发現，y, z, p_y, p_z 以及內部力学变量，它們是不受此位移影响的，一定与 d_x 对易．把这些結果与(9)式比較，我們看到，$i\hbar d_x$ 满足的量子条件恰

好就是 p_x 所满足的量子条件. 它們的差 $p_x - i\hbar d_x$ 与所有的力学变量对易,因而一定是一个数. 这个数还必然是实数, 因为 p_x 与 $i\hbar d_x$ 都是实算符. 适当选择可以加于 d_x 上的任意純虛数 ia, 我們就可以使这个数$(p_x - i\hbar d_x)$为零. 我們得結果为

$$p_x = i\hbar d_x, \tag{69}$$

即系統的总动量的 x 分量是位移算符 d_x 乘以 $i\hbar$.

这是一个基本結果,它給予位移算符新的意义. 当然,对于 y 与 z 方向上的位移算符 d_y 与 d_z, 也有相应的結果. 表明 p_x, p_y 与 p_z 互相对易的量子条件, 現在看起来是与下列事实相联系的, 即在不同方向上进行位移是先后次序可以交換的作用.

§26. 么正变換

令 U 是任意有逆算符 U^{-1} 的綫性算符,并考虑方程

$$\alpha^* = U\alpha U^{-1}, \tag{70}$$

α 是一任意綫性算符. 这个方程可以看成是表示一个变換, 从任意綫性算符 α 变換到相应的綫性算符 α^*, 而且,按这样看法,它有很值得注意的性質. 首先,应当注意, 每个 α^* 与相应的 α 有同样的本征值,因为,如果 α' 是 α 的任意本征值, $|\alpha'\rangle$ 是属于它的本征右矢,我們有

$$\alpha|\alpha'\rangle = \alpha'|\alpha'\rangle$$

并因而有

$$\alpha^*U|\alpha'\rangle = U\alpha U^{-1}U|\alpha'\rangle = U\alpha|\alpha'\rangle = \alpha'U|\alpha'\rangle,$$

它表明 $U|\alpha'\rangle$ 是 α^* 的一个本征右矢,属于同样的本征值 α', 并且同样地,也可以証明 α^* 的任何本征值都是 α 的本征值. 再者, 如果我們取几个 α, 把它們用代数方程联系起来,并按照(70)式全部加以变換,相应的几个 α^* 将被相同的代数方程联系起来. 这个結果由下述事实得出,即基本代数过程,加法与乘法, 在(70)式的变換下保持不变,而这一事实則由下列方程証明:

$$(\alpha_1 + \alpha_2)^* = U(\alpha_1 + \alpha_2)U^{-1} = U\alpha_1U^{-1} + U\alpha_2U^{-1} = \alpha_1^* + \alpha_2^*,$$
$$(\alpha_1\alpha_2)^* = U\alpha_1\alpha_2U^{-1} = U\alpha_1U^{-1}U\alpha_2U^{-1} = \alpha_1^*\alpha_2^*.$$

让我們来看，如果要求任意实算符 α 变换到实的 α^* 則在 U 上应該加上什么条件．方程(70)可以写成

$$\alpha^* U = U\alpha. \tag{71}$$

按 §8 的(5)式，取上式两边的共軛复量，我們发现，如果 α 与 α^* 都是实算符，則

$$\bar{U}\alpha^* = \alpha\bar{U}. \tag{72}$$

方程(71)給出

$$\bar{U}\alpha^* U = \bar{U}U\alpha,$$

而方程(72)給出

$$\bar{U}\alpha^* U = \alpha\bar{U}U.$$

因而

$$\bar{U}U\alpha = \alpha\bar{U}U.$$

因此，$\bar{U}U$ 与任意实綫性算符对易，并因而也与无論什么样的綫性算符对易，因为任意綫性算符能表示为一个实綫性算符加上 i 乘另一实綫性算符．所以 $\bar{U}U$ 是一个数．显然，它是实数，因为按照 §8 的(5)式，它的共軛复数就是它本身；它还必須是正数，因为对任意右矢 $|P\rangle$，$\langle P|\bar{U}U|P\rangle$ 是正数，$\langle P|P\rangle$ 也是正数．我們可以假設它是 1，而无損于(70)式的变换的任何普遍性．这样，我們有

$$\bar{U}U = 1. \tag{73}$$

方程(73)等效于下列各式中的任一个

$$U = \bar{U}^{-1},\ \bar{U} = U^{-1},\ U^{-1}\bar{U}^{-1} = 1. \tag{74}$$

满足(73)式与(74)式的矩陣或綫性算符 U 称为**么正矩陣**和**么正算符**，而具有么正算符 U 的变换(70)称为**么正变换**．么正变换把实綫性算符变换成实綫性算符，并且保持綫性算符之間的代数方程不变．么正变换也可以当作是按照下列方程作用于右矢与左矢的：

$$|P^*\rangle = U|P\rangle,\ \langle P^*| = \langle P|\bar{U} = \langle P|U^{-1}, \tag{75}$$

并且这时它使綫性算符、右矢与左矢之間的任意代数方程保持不变．么正变换把 α 的本征矢量变换成 α^* 的本征矢量．从这一点，我們容易推导出，么正变换把可观察量变换成可观察量，而且它使

可观察量之間的任意函数关系（以 §11 給出的函数的普遍定义为基础）保持不变.

么正变换的逆变换也是么正变换，因为从(74)式看，如果 U 是么正的，U^{-1} 也是么正的. 再者，如果两个么正变换相继作用，結果还是么正变换. 这一点可以驗証如下，令这两个么正变换是(70)式与

$$\alpha^{\dagger} = V\alpha^{*}V^{-1},$$

$\alpha^{\dagger}$ 与 α 之間的关系就是

$$\alpha^{\dagger} = VU\alpha U^{-1}V^{-1} = (VU)\alpha(VU)^{-1}, \tag{76}$$

这是从 §11 的(42)式得到的. 現在 VU 是么正的，因为

$$\overline{VU}VU = \bar{U}\bar{V}VU = \bar{U}U = 1,$$

因而(76)式是么正变换.

上节給出的变换，即从位移前的各量到位移后的各量之間的变换，是么正变换的一个例子. 这一点可以用方程(62)与(63)（它們相当于方程(73)与(70)）以及方程(59)与(61)（它們相当于方程(75)）来証明.

在經典力学里，我們可以作一变换，从正則坐标与正則动量 q_r, p_r $(r = 1, \cdots, n)$ 变换到一組新的变量 q_r^*, p_r^* $(r = 1, \cdots, n)$，使它們滿足 q 与 p 所滿足的同样的泊松括号关系（即 §21 的方程(8)用 q^* 与 p^* 代替其中的 q 与 p），并且，能把所有的力学变量用 q^* 与 p^* 表示. 于是，这些 q^* 与 p^* 也称为正則坐标与正則动量，而这个变换称为**切变换**(Contact transformation). 容易驗証，任意两个力学变量 u 与 v 的泊松括号正确地由 §21 的公式(1)用 q^* 与 p^* 代替 q 与 p 而給出，所以，泊松括号关系是在切变换中的不变量. 这一点的結果是，新的正則坐标与正則动量，对一般力学理論中許多目的，与原来的正則坐标与正則动量具有同等的資格，即令新的坐标 q_r^* 可能不是一組拉格朗日坐标，而是拉格朗日坐标与速度的函数，也是一样.

現在我們来証明，对于有經典类比的量子的力学系統，**在量子理論中的么正变换是經典力学中的切变换的类比**. 么正变换比切

变换更为普遍，因为么正变换能作用于量子力学中一些沒有經典类比的系統，而对于量子力学中那些仍以正則坐标与正則动量描述的系統，两种变换間的类比是成立的．为建立这种类比，我們注意，么正变换作用到量子变量 q_r，p_r 給出新变量 q_r^*，p_r^*，它們滿足同样的泊松括号关系，因为泊松括号关系等于 §21 中的代数关系(9)，而代数关系在么正变换中是保持不变的．反过来，任何实变量 q_r^*，p_r^*，如滿足正則坐标与正則动量的泊松括号关系，則它們与 q_r，p_r 可以用么正变换联系起来，这一点可由下述推理証明．

我們用薛定諤表象，把基右矢 $|q_1' \cdots q_n'\rangle$ 簡写为 $|q'\rangle$．因为我們已假定，q_r^*，p_r^* 滿足正則坐标与正則动量的泊松括号关系，我們能建立对于它們的薛定諤表象，其中 q_r^* 都为对角的，而每个 p_r^* 等于 $-i\hbar\partial/\partial q_r^*$．在这后一个薛定諤表象中的基右矢将是 $|q_1^{*\prime} \cdots q_n^{*\prime}\rangle$，我們簡写为 $|q^{*\prime}\rangle$．现在引入綫性算符 U，其定义为

$$\langle q^{*\prime}|U|q'\rangle = \delta(q^{*\prime} - q'), \tag{77}$$

其中 $\delta(q^{*\prime} - q')$ 是下式的簡写：

$$\delta(q^{*\prime} - q') = \delta(q_1^{*\prime} - q_1')\delta(q_2^{*\prime} - q_2')\cdots\delta(q_n^{*\prime} - q_n'). \tag{78}$$

(77)式的共軛复量为

$$\langle q'|\bar{U}|q^{*\prime}\rangle = \delta(q^{*\prime} - q'),$$

因此[1]

$$\begin{aligned}\langle q'|\bar{U}U|q''\rangle &= \int \langle q'|\bar{U}|q^{*\prime}\rangle dq^{*\prime}\langle q^{*\prime}|U|q''\rangle \\ &= \int \delta(q^{*\prime} - q')dq^{*\prime}\delta(q^{*\prime} - q'') \\ &= \delta(q' - q''),\end{aligned}$$

所以

$$\bar{U}U = 1,$$

因此，U 是么正算符．我們进一步有

$$\langle q^{*\prime}|q_r^* U|q'\rangle = q_r^{*\prime}\delta(q^{*\prime} - q'),$$

与

1) 我们用由一个积分号及一个 $dq^{*\prime}$ 的符号来表示对所有的变量 $q_1^{*\prime}$，$q_2^{*\prime}$，…，$q_n^{*\prime}$ 的积分．这种缩写也将在以后使用．

$$\langle q^{*\prime}|Uq_r|q'\rangle = \delta(q^{*\prime} - q')q'_r.$$

由于 §15 中 δ 函数的性質(11)式，这两个方程的右边是相等的，因此，

$$q_r^* U = Uq_r,$$

或

$$q_r^* = Uq_rU^{-1}.$$

再者，从(45)式与(46)式，得

$$\langle q^{*\prime}|p_r^*U|q'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r^{*\prime}}\delta(q^{*\prime} - q'),$$

$$\langle q^{*\prime}|Up_r|q'\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial q'_r}\delta(q^{*\prime} - q').$$

这两个方程的右边显然是相等的，因之

$$p_r^* U = Up_r,$$

或

$$p_r^* = Up_rU^{-1}.$$

这样，所有么正变换的条件都已驗証了.

我們在(70)式中取 U 与单位算符相差一无穷小，就得到一个无穷小的么正变换. 令

$$U = 1 + i\epsilon F,$$

其中 ϵ 是无穷小，所以它的平方可以略去，这样，

$$U^{-1} = 1 - i\epsilon F.$$

么正条件(73)式或(74)式要求 F 应是实算符. 变换方程(70)現在取下列形式

$$\alpha^* = (1 + i\epsilon F)\alpha(1 - i\epsilon F),$$

此式給出

$$\alpha^* - \alpha = i\epsilon(F\alpha - \alpha F). \tag{79}$$

此式可以用泊松括号的符号写成

$$\alpha^* - \alpha = \epsilon\hbar[\alpha, F]. \tag{80}$$

如果 α 是一个正則坐标或正則动量，在形式上，(80)式与經典的无穷小切变换是相同的.

第五章　运动方程

§27. 运动方程的薛定諤形式

从 §5 到这里，我們所研究的都是在某一时刻的間題．对于在某一时刻的力学系統，我們得出了各个态与各个力学变量之間的关系的普遍方案．为了得到力学的完整理論，我們还必須研究不同时刻之間的联系．当我們对力学系統作一次观察时，系統的态就以不能預料的方式变化了，但是，在两次观察之間因果性是适用的，这一点在量子力学里与在經典力学里是一样的，系統是由运动方程所支配的，运动方程可以由在某一时刻的态决定在另一較后时刻的态．我們現在开始研究这些运动方程．只要力学系統保持不受任何观察或类似过程的干扰[1]，运动方程就能适用．我們可以从第一章的态迭加原理推导出运动方程的一般形式．

让我們研究在系統不受干扰的整段时間里的一个特定的运动态．我們将令在任意时刻 t 的这个态相应于某一右矢，这一右矢依賴于 t，可以写成 $|t\rangle$．如果我們处理几个这样的运动态，我們就用一个标記，例如 A 来区分它們，我們就把相应于在时刻 t 的这些态的右矢中的一个写成 $|At\rangle$．一个时刻的态决定另一时刻的态，这个要求的意义就是 $|At_0\rangle$ 决定 $|At\rangle$，除了还有一数值因子未定以外．在系統不受干扰的全部时間內，迭加原理适用于这些运动态，这一点的意义是，如果我們取一个迭加关系，它对在时刻 t_0 时的某些态成立，并在相应的右矢之間造成一个綫性方程，例如，

$$|Rt_0\rangle = c_1|At_0\rangle + c_2|Bt_0\rangle,$$

则在系統不受干扰的全部时間里，同样的迭加关系一定要在这些

1) 一个态的制备就是这种类型的过程．态的制备采取的形式常常是作一观察，并且当观察结果成为是某一预定的数时来选定这个系统．

运动态間成立,即一定得出在任意时間 t（在不受干扰的时間間隔內）相应于这些态的右矢之間也有同样的方程成立,即是方程

$$|Rt\rangle = c_1|At\rangle + c_2|Bt\rangle,$$

成立，只要适当选择可以乘在这些右矢上的任意数值因子即可。由此得出，$|Pt\rangle$是$|Pt_0\rangle$的綫性函数，而每个$|Pt\rangle$是某綫性算符作用在$|Pt_0\rangle$上的結果。用符号表示为

$$|Pt\rangle = T|Pt_0\rangle, \tag{1}$$

其中T是与P无关的綫性算符,它只取决于t（以及 t_0）。

現在我們假定，每个$|Pt\rangle$与相应的$|Pt_0\rangle$具有相同的长度。选择可以乘在$|Pt\rangle$上的任意数值因子，并不一定可能做到这一点，而不破坏$|Pt\rangle$对$|Pt_0\rangle$的綫性相关性，所以这个新的假定是一个物理假定，而不只是符号的問題。这一假定包含着对迭加原理的一种加強作用。在$|Pt\rangle$中的任意性現在变成只有一个相因子，这个相因子必須与P无关，才能使$|Pt\rangle$对$|Pt_0\rangle$的綫性相关可能保持。对任意复数c_1、c_2来說，从$c_1|Pt\rangle+c_2|Qt\rangle$的长度等于$c_1|Pt_0\rangle + c_2|Pt_0\rangle$的长度这一条件，我們可以推导出

$$\langle Qt|Pt\rangle = \langle Qt_0|Pt_0\rangle. \tag{2}$$

$|Pt\rangle$与$|Pt_0\rangle$之間的联系，在形式上类似于我們在 §25 里所說的位移后的右矢与位移前的右矢之間的联系，只是用时間移动的过程代替了 §25 中的空間位移。方程 (1) 与 (2) 起着 §25 的方程 (59) 与 (60) 的作用。我們可以如 §25 中一样，发展这些方程的推論，并能推导出T包括一个模数为 1 的任意数值因子，而且滿足

$$\bar{T}T = 1, \tag{3}$$

这相当于 §25 的(62)式，所以T是么正的。我們过渡到无限小的情况，令 $t \to t_0$，并从物理連續性上来假定极限

$$\lim_{t\to t_0}\frac{|Pt\rangle - |Pt_0\rangle}{t - t_0}$$

存在。这个极限正好就是$|Pt_0\rangle$对t_0的导数。根据(1)式，此极限等于

$$\frac{d|Pt_0\rangle}{dt_0} = \left\{\lim_{t\to t_0} \frac{T-1}{t-t_0}\right\}|Pt_0\rangle. \tag{4}$$

这里出現的极限算符与 §25 的(64)式相似，是一个純虚綫性算符，并且有一个可任意加上去的純虚数未完全决定．令这个极限算符乘以 $i\hbar$ 后等于 H，或者更好些，令它等于 $H(t_0)$，因为它可能是 t_0 的函数，当把(4)式对一般的 t 写出时，就成为

$$i\hbar\frac{d|Pt\rangle}{dt} = H(t)|Pt\rangle. \tag{5}$$

方程 (5) 給出与任意时刻的态相应的右矢随时間变化的一般規律．它是运动方程的薛定諤形式． 它仅包含一个实綫性算符 $H(t)$，$H(t)$ 必然由所研究的力学系統的特征决定．我們假定 $H(t)$ 是系統的总能量．認为这个假定合理有两个理由：(i)类比于經典力学，这一点将在下一节討論；(ii)我們有 $H(t)$ 表現为 $i\hbar$ 乘上时間移动算符，与 §25 里的在 x，y，z 方向上的位移算符类似，所以，相当于 §25 中的(69)式，我們应当認 $H(t)$ 等于总能量，因为在相对論中能量对时間的关系与动量对距离的关系是相同的．

根据物理上的理由，我們假定系統的总能量总是可观察量．对于一个孤立的系統，总能量是恆量，可以写成 H．甚至当它不是恆量时，我們也常把它簡单地写成 H，而不明写出它对 t 的相关性．如果能量是 t 的函数，其意义即是有外力作用于系統．这种作用应当区别于由观察过程所引起的干扰，因为这种作用是与因果性和运动方程相容的，而观察所引起的干扰則不是这样．

我們能够得到 $H(t)$ 与方程(1)中的 T 之間的联系，办法是用方程(1)給出的 $|Pt\rangle$ 的值代入(5)式，这样就得

$$i\hbar\frac{dT}{dt}|Pt_0\rangle = H(t)T|Pt_0\rangle.$$

因为 $|Pt_0\rangle$ 可以是任意右矢，我們就有

$$i\hbar\frac{dT}{dt} = H(t)T. \tag{6}$$

方程(5)对一些实际問題非常重要，在这些問題里，它通常与

一个表象联系起来运用．引进一个表象，使对易可观察量的完全集 ξ 是对角的，并令 $\langle\xi'|Pt\rangle$ 等于 $\psi(\xi't)$，轉換到标准右矢的符号，我們就有

$$Pt\rangle=\psi(\xi t)\rangle.$$

現在方程(5)变为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\xi t)\rangle=H\psi(\xi t)\rangle. \tag{7}$$

方程(7)就称为薛定諤波动方程，而它的解 $\psi(\xi t)$ 就是与时間相关的波函数．每个解相应于系統的一个运动态，而它的模数的平方給出 ξ 在任意时間 t 有特定值的几率．对于可用正則坐标与正則动量描述的系統，我們可用薛定諤表象，并能按照 §22 的(42)式取 H 为一个微分算符．

§ 28. 运动方程的海森伯形式

在上节里，我們建立了不受干扰的运动态的图象，办法是使这些运动态的每一个相应于一个运动的右矢，在任意时間的态相应于在此时間的右矢．我們将称这种图象为薛定諤图象．让我們对这种右矢作么正变换，这个么正变换使每个右矢 $|a\rangle$ 变换成

$$|a^*\rangle=T^{-1}|a\rangle. \tag{8}$$

这个变换有 §26 (75)式給出的形式，用 T^{-1} 代其中的 U，但它依賴于时間 t，因为 T 依賴于 t．因之，这个变换应当图象地看成是一个連續的运动(包括旋轉与均匀的变形)作用于整个右矢空間．原来是固定的右矢变成一个运动的右矢，它的运动由(8)式給出，其中 $|a\rangle$ 是与 t 无关的．另一方面，原来按方程(1)运动而相应于一个不受干扰的运动态的右矢就变成固定的，因为在(8)式中用 $|Pt\rangle$ 代替 a，我們就得到 $|a^*\rangle$ 与 t 无关．所以，这个变换使相应于不受干扰的运动态的右矢变成靜止的．

这个么正变换也必須能够作用于左矢与綫性算符，才能使在各种量之間的方程保持不变．此变换作用于左矢，由(8)式的共軛虛量就得出了；而作用于綫性算符，則由 §26 的(70)式中以 T^{-1}

代替U而得出，即是

$$\alpha^* = T^{-1}\alpha T. \tag{9}$$

原来是固定的綫性算符一般变换成运动的綫性算符. 既然一个力学变量相应于原来是固定的綫性算符(因为它完全与 t 无关)，在經过这样的变换后，它就相应于运动的算符了. 就这样，这个变换使我們得出运动的一个新图象，在此新图象里，态相应于固定的矢量，而力学变量相应于运动的綫性算符. 我們将称此图象为海森伯图象.

在任意时刻力学系統的物理条件包含着力学变量与态之間的一个关系，而物理条件随时間的变化可以归之于态的变化，而让力学变量保持固定，这就給出薛定諤图象；或者也可以归之于力学变量的变化而让态是固定的，这就給出海森伯图象.

在海森伯图象里，就有力学变量的运动方程. 取一个力学变量，相应于在薛定諤图象中的固定綫性算符 v. 在海森伯图象里，它相应于一个运动的綫性算符，这个綫性算符我們写成 v_t 来代替 v^*，用以突出它与 t 的相关性，并且它由下式給出：

$$v_t = T^{-1}vT, \tag{10}$$

或即

$$Tv_t = vT.$$

对 t 进行微分，我們得

$$\frac{dT}{dt}v_t + T\frac{dv_t}{dt} = v\frac{dT}{dt}.$$

借助于(6)式，此式給出

$$HTv_t + i\hbar T\frac{dv_t}{dt} = vHT,$$

或即

$$i\hbar\frac{dv_t}{dt} = T^{-1}vHT - T^{-1}HTv_t = v_tH_t - H_tv_t, \tag{11}$$

其中

$$H_t = T^{-1}HT. \tag{12}$$

方程(11)可以用泊松括号的符号写成

$$\frac{dv_t}{dt} = [v_t, H_t]. \tag{13}$$

方程(11)或(13)表明，在海森伯图象里任意力学变量如何随时間而变化，它給出了运动方程的海森伯形式．这些运动方程决定于一个綫性算符 H_t，它正是运动方程的薛定諤形式中出現的綫性算符 H 的变换，它相应于在海森伯图象中的能量．我們把在海森伯图象中随时間变化的力学变量称为海森伯力学变量，以区别于薛定諤图象中的固定的力学变量，后者我們将称为薛定諤力学变量．每个海森伯力学变量与相应的薛定諤力学变量由方程(10)联系起来．由于这个联系是一个么正变换，所有的代数关系与函数关系对两类力学变量都是相同的．当 $t = t_0$ 时我們有 $T = 1$，所以 $v_t = v$，卽任意海森伯力学变量在 $t = t_0$ 时等于相应的薛定諤力学变量．

方程(13)可以与經典力学比較，在經典力学里我們也有随时間变化的力学变量，經典力学的运动方程可以写成哈密頓形式:

$$\frac{dq_r}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_r}, \quad \frac{dp_r}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_r}, \tag{14}$$

其中 q 与 p 是一組正则坐标与正则动量，H 是表为 p 与 q 的函数的能量，它也可能是 t 的函数．按此方式表达的能量就称为哈密頓量．方程(14)給出，对不明显含时間 t 的 q 与 p 的任意函数 v，有

$$\begin{aligned}\frac{dv}{dt} &= \sum_r \left\{\frac{\partial v}{\partial q_r}\frac{dq_r}{dt} + \frac{\partial v}{\partial p_r}\frac{dp_r}{dt}\right\} \\ &= \sum_r \left\{\frac{\partial v}{\partial q_r}\frac{\partial H}{\partial p_r} - \frac{\partial v}{\partial p_r}\frac{\partial H}{\partial q_r}\right\} \\ &= [v, H],\end{aligned} \tag{15}$$

其中用了泊松括号的經典定义，卽 §21 中的(1)式．此式在形式上与量子力学中的方程(13)相同．这样我們得到，在哈密頓形式的經典运动方程与海森伯形式的量子运动方程之間有一个类比．我

們曾在上一节里把那里引入的綫性算符H假定为量子力学中系統的能量,这一类比就为我們上述的假定提供了理由.

在經典力学里,一个力学系統,只要其哈密頓量为已知,即当能量以一組正則坐标与正則动量給出时,这个力学系統在数学上就被确定了,因为这样就足以决定其运动方程.在量子力学里,一个力学系統,只要其能量能以一組对易关系为已知的力学变量給定时,这个力学系統在数学上就被确定了,因为这样就足以决定其运动方程(包括薛定諤形式和海森伯形式).我們需要有下述两者之一,或者是以薛定諤力学变量所表示的H,或者是以相应的海森伯力学变量所表示的H_t,在两种情况下函数关系当然是相同的.我們把按这种方式表达的能量称为量子力学中力学系統的**哈密頓量**,以保持与經典力学相类比.

在量子力学里,系統总有哈密頓量,不管系統是否有經典类比,也不管它是否能用正則坐标与正則动量来描述.但是,如果系統确有經典类比,它与經典力学的联系就特别密切,对于这种系統,我們通常可以假定哈密頓量作为正則坐标与正則动量的函数,在經典理論里与在量子理論里是完全一样的[1].当然,如果經典哈密頓量包含几个因子的乘积,而这些因子的量子力学类比又不是对易的,则在这里会有一定困难,因为我們不知道在量子力学的哈密数量中这些因子取什么次序.然而,这一情况对大多数初等的力学系統不会发生,而在原子物理中重要的事正是这些初等力学系統的研究.由此而来的結果是,我們能够大量地应用与經典理論中相同的語言来描述量子力学中的力学系統(例如,能够說具有一定質量的粒子在已知的力場中运动),当經典力学中給定一个系統时,我們通常能在量子力学中給出“同样的”系統的意义.

方程(13)对不明显含时間的海森伯力学变量的任意函数v_t成

1) 在实践中发现,只有当力学坐标与动量对应于直角坐标轴时,这个假定的应用才是成功的,但不能用于更一般的曲线坐标.

立，即对薛定諤图象中的任意恆量綫性算符 v 成立．它表明这样的函数 v_t，如果它与 H_t 对易，或者說如果 v 与 H 对易，則这是一恆量．我們有

$$v_t = v_{t_0} = v,$$

并称 v_t 或 v 为运动恆量．必需的是，v 应在全部时間內与 H 对易，这一点通常只在 H 为恆量时才有可能．在这种情况下，我們可用 H 作为 v 代入(13)式，并推导出 H_t 是恆量，这表明 H 本身就是一个运动恆量．因此，如果哈密頓量在薛定諤图象中是恆量，則它在海森伯图象中也是恆量．

对一孤立系統即不受任何外力作用的系統，总有某些运动恆量．这些恆量之一就是总能量，或即哈密頓量．由 §25 的位移理論提供了其他的一些运动恆量．物理上显然的是，如果所有的力学变量按某一方式进行位移，总能量也一定保持不变，所以 §25 的(63)式在 $v_d = v = H$ 时一定成立．因此，D 与 H 对易，因而是一个运动恆量．轉到无穷小位移的情况，我們看到，位移算符 d_x，d_y 与 d_z 都是运动恆量，因而从 §25 的(69)式得到，总动量是一个运动恆量．还有，如果所有的力学变量受某一旋轉作用，总能量也一定保持不变．这一情况引起的結果为，总角动量是一个运动恆量，我們在 §35 将予以証明．对于孤立的系統来說，能量、动量与角动量的守恆定律，在量子力学中的海森伯图象里与在經典力学中一样，都是成立的．

現在已得出量子力学中的运动方程的两种形式．在这两种形式中，薛定諤形式是对于实际問題更有用的形式，因为它提供出更簡单的方程．薛定諤波动方程中的未知数是那些組成一个右矢量表示式的数，而力学变量的海森伯运动方程如果用表象来表达，就会包含組成力学变量表示式的那些数作为未知数，而后者是多得多的，因此，它們比薛定諤未知数更难于計算．海森伯形式的运动方程之所以有价值，在于它提供了与經典力学直接的类比，它使我們能够看到，經典理論中的許多特点，例如上述的各守恆律，是怎样轉移到量子力学中去的．

§ 29. 定态

在这一节內，我們来研究能量为恆量的力学系統. 对这种情况，有某些特别簡单的关系成立. 方程(6)可以积分[1]，积分后得出

$$T = e^{-iH(t-t_0)/\hbar},$$

积分时利用了起始条件，卽当 $t = t_0$ 时 $T = 1$. 把这結果代入(1)式，得出

$$|Pt\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}|Pt_0\rangle, \tag{16}$$

这是薛定諤运动方程(5)的积分，将它代入(10)式，就得出

$$v_t = e^{iH(t-t_0)/\hbar} v e^{-iH(t-t_0)/\hbar}, \tag{17}$$

这是海森伯运动方程(11)的积分，H_t 現在等于 H. 这样，我們就有了运动方程的形式簡单的解. 但是，这些解沒有很大的实际意义，因为除非 H 特别簡单，否則算出算符 $e^{iH(t-t_0)/\hbar}$ 是很困难的. 因而对于实际目的，我們通常都必須回到薛定諤波动方程.

让我們考虑这样一个运动态，在时刻 t_0 它是能量的本征态. 在这一时刻相应于它的右矢 $|Pt_0\rangle$ 必定是 H 的本征右矢. 如果 H' 是它所属的本征值，方程(16)给出

$$|Pt\rangle = e^{-iH'(t-t_0)/\hbar}|Pt_0\rangle,$$

这表明 $|Pt\rangle$ 与 $|Pt_0\rangle$ 不同之处仅仅是一个相因子. 因此，这个态总是保持为能量的本征态，而且它完全不随时間而改变，因为右矢 $|Pt\rangle$ 的方向不随时間改变. 这样的态就称为**定态**. 对定态观察到任何特定結果的几率是与观察时間无关的. 从能量是一个可观察量的假定可得出，定态的数目多到足以使任意的态与它們相关.

代表具有能量 H' 的一个定态的时間相关的波函数 $\psi(\xi t)$，按下列規則随时間变化:

$$\psi(\xi t) = \psi_0(\xi) e^{-iH't/\hbar}, \tag{18}$$

---

1) 积分时可把 H 当成是一个普通的代数变量而不当成线性算符，因为在这里并沒有任何量与 H 不对易.

而它的薛定諤波动方程(7)簡化为

$$H'\psi_0\rangle = H\psi_0\rangle. \tag{19}$$

这个方程仅仅肯定，由 ψ_0 代表的态是 H 的本征态. 我們称满足(19)式的函数 ψ_0 为 H 的**本征函数**，属于本征值 H'.

在海森伯图象里，定态相应于能量的固定的本征矢量. 我們能建立一个表象，其中所有的基矢量都是能量的本征矢量，因而都相应于海森伯图象中的定态. 我們称这样的表象为**海森伯表象**. 海森伯在 1925 年发現的量子力学的最初形式，就是用这种表象表达出的. 能量在这种表象里是对角的. 任何别的对角力学变量一定与能量对易，因而是运动恆量. 因此，建立海森伯表象的問題，簡化为寻找对易可观察量完全集的問題，在此集中每个可观察量是一个运动恆量，然后使这些可观察量成为对角的. 从 §19 的定理 2 得知，能量一定是这些可观察量的函数. 有时取能量本身为这些可观察量中的一个是方便的.

令 α 代表在海森伯表象中对易可观察量完全集，于是基矢量写成 $\langle\alpha'|$, $|\alpha''\rangle$. 能量是这些可观察量 α 的函数，写成 $H = H(\alpha)$. 从(17)式，我們得到

$$\begin{aligned}\langle\alpha'|v_t|\alpha''\rangle &= \langle\alpha'|e^{iH(t-t_0)/\hbar}ve^{-iH(t-t_0)/\hbar}|\alpha''\rangle\\ &= e^{i(H'-H'')(t-t_0)/\hbar}\langle\alpha'|v|\alpha''\rangle,\end{aligned} \tag{20}$$

其中 $H' = H(\alpha')$, $H'' = H(\alpha'')$. 这里右边的因子 $\langle\alpha'|v|\alpha''\rangle$ 是与 t 无关的，是代表固定綫性算符 v 的矩陣的一个矩陣元. 公式(20)表明，任意海森伯力学变量的海森伯矩陣元怎样随时間变化，而且它使 v_t 满足运动方程(11)，这是容易驗証的. (20)式給出的变化是簡单地周期性的变化，其頻率为

$$|H' - H''|/2\pi\hbar = |H' - H''|/h, \tag{21}$$

它只决定于这个矩陣元所关联的两个定态的能量差. 这个結果紧密地联系于光譜学的組合定律与玻尔的頻率条件，按此条件，当系統受輻射影响在两个定态 α' 与 α'' 之間跃迁时，放出或吸收的电磁輻射的頻率就是(21)式，H 的本征值就是波尔能級. 这个問題将在 §45 中研究.

§ 30. 自由粒子

量子力学中最根本的最初等的应用，是对仅由一个自由粒子，或者說一个不受任何力作用的粒子所組成的系統的应用．为研究这个系統，我們用三个直角坐标 x, y, z 与它們的共軛动量 p_x, p_y, p_z 作为力学变量．按照牛頓力学，哈密頓量等于粒子的动能，即

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2), \tag{22}$$

其中 m 是質量．这个公式只在假設粒子速度比光速 c 为很小时才有效．对于一个快速运动的粒子，就象我們在原子理論中时常必須研究的情况，(22)式应該代之以相对論公式:

$$H = c(m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{\frac{1}{2}}. \tag{23}$$

p_x, p_y, p_z 的值小时，(23)式变成(22)式，只是多了一个常数項 mc^2，它相当于粒子在相对論中的靜止能量，它对运动方程沒有影响．公式(22)与(23)能够直接地轉到量子理論中去，(23)式中的平方根現在应理解为在 §11 末尾所定义的正平方根．在 p_x, p_y, p_z 为小量时，(23)式与(22)式相差的常数項 mc^2 仍然沒有物理效应，因为在量子力学中，按 §27 所引入的哈密頓量是未完全确定的，可以加上任意的实常数．

这里我們将用更正确的公式(23)来研究．首先，我們解海森伯运动方程．从 §21 的(9)式得，p_x 与 p_y 和 p_z 对易，因而，按照 §19 的定理 1（已推广到对易可观察量的集），p_x 应对易于 p_x, p_y, p_z 的任意函数，因此对易于 H．由此得出，p_x 是运动恆量．同样地，p_y 与 p_z 也都是运动恆量．这些結果是与經典理論中一样的．再者，按照(11)式，坐标例如 x_t 的运动方程应为

$$i\hbar\dot{x}_t = i\hbar\frac{dx_t}{dt} = x_tc(m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{\frac{1}{2}} -$$

$$-c(m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{\frac{1}{2}}x_t.$$

上式右边能够計算出来，方法是用 §22 的(31)式，令其中坐标与动量互相对换，所以它成为

$$q_r f - f q_r = i\hbar \partial f/\partial p_r, \tag{24}$$

現在 f 是 p 的任意函数. 这就得出

$$\left.\begin{aligned} \dot{x}_t &= \frac{\partial}{\partial p_x}\, c(m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{\frac{1}{2}} = \frac{c^2 p_x}{H}. \\ &\text{同样地,} \\ \dot{y}_t &= \frac{c^2 p_y}{H}, \quad \dot{z}_t = \frac{c^2 p_z}{H}. \end{aligned}\right\} \tag{25}$$

速度的絕对值是

$$v = (\dot{x}_t^2 + \dot{y}_t^2 + \dot{z}_t^2)^{\frac{1}{2}} = c^2(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)^{\frac{1}{2}}/H. \tag{26}$$

方程(25)与(26)都恰恰与在經典理論中的情况一样.

让我們考虑一个态,它是动量的本征态,属于本征值p'_x, p'_y, p'_z. 这个态一定是哈密頓量的本征态,属于本征值

$$H' = c(m^2c^2 + p_x'^2 + p_y'^2 + p_z'^2)^{\frac{1}{2}}, \tag{27}$$

因而一定是定态. H' 可能有的値是从 mc^2 到∞的全部数, 这一点也与在經典理論中一样. 在薛定諤表象中, 在任意时間代表此态的波函数 $\psi(xyz)$ 一定滿足

$$p'_x\psi(xyz)\rangle = p_x\psi(xyz)\rangle = -i\hbar\,\frac{\partial\psi(xyz)}{\partial x}\rangle,$$

对 p_y 与 p_z 也有类似的方程. 这些方程表明, $\psi(xyz)$的形式为

$$\psi(xyz) = a e^{i(p'_x x + p'_y y + p'_z z)/\hbar}, \tag{28}$$

其中 a 与 x, y, z 无关. 从(18)式, 我們現在看到,与时間有关的波函数 $\psi(xyzt)$ 的形式为

$$\psi(xyzt) = a_0 e^{i(p'_x x + p'_y y + p'_z z - H't)/\hbar}, \tag{29}$$

其中 a_0 是与 x, y, z 及 t 无关的.

x, y, z 和 t 的函数(29) 描述在时空中的平面波. 我們从这个例子中看到"波函数"和"波动方程"等名詞的适当性. 波的頻率为

$$\nu = H'/h, \tag{30}$$

其波长为

$$\lambda = h/(p_x'^2 + p_y'^2 + p_z'^2)^{\frac{1}{2}} = h/P', \tag{31}$$

P' 是矢量(p'_x, p'_y, p'_z)的长度，这些波的运动是沿着矢量(p'_x, p'_y, p'_z)所确定的方向，其波速为

$$\lambda\nu = H'/P' = c^2/v', \tag{32}$$

v' 是相应于动量(p_x, p_y, p_z)的粒子的速度，它由公式(26)式得出．容易看出，方程(30)，(31)与(32)是在所有的洛仑兹参考系中成立的，事实上，如果把 p'_x, p'_y, p'_z 与 H' 作为一个四維矢量的分量，则(29)式的右边的表达式是相对論不变的．这些具有相对論不变性的性质，使德布罗意在量子力学发現以前就假定存在着形如(29)式的波伴随着任意粒子的运动．因此，它們就称为德布罗意波．

在极限情况下，令质量 m 趋于零时，粒子的經典速度 v 变成 c，因而从(32)式得出，波速也变成 c．这样的波就象光波伴随着光子，不同之点在它們沒有涉及偏振化，而且包含一个复数指数項而非正弦与余弦．但对于光子，公式(30)与(31)仍然有效，它們把光波的頻率与光子的能量联系起来，把光波的波长与光子的动量联系起来．

对于(29)式所代表的态，当对粒子位置作观察时，在任意特定的小体积中发現有粒子的几率与此体积位于何处无关．这一点提供了海森伯測不准原理的一个例子，这个态是动量准确地給出的态，因而对于它位置完全是未知的．当然，这样的态是一个极限情况，实际上是不会出現的．实际上通常遇到的那些态，是由波包代表的态，这些波包可能是由許多(29)式类型的波迭加而成，这些波属于略有不同的(p'_x, p'_y, p'_z)值，这一点曾在 §24 討論过．对这样的波包的速度即波的羣速在流体力学中的一般公式是

$$\frac{d\nu}{d(1/\lambda)} \tag{33}$$

利用(30)式与(31)式，上式給出

$$\frac{dH'}{dP'} = c\frac{d}{dP'}(m^2c^2 + P'^2)^{\frac{1}{2}} = \frac{c^2P'}{H'} = v'. \tag{34}$$

这恰恰就是粒子的速度．波包的运动方向与速度都与粒子在經典力学中的运动相同．

§ 31. 波包的运动

刚才对自由粒子推导出的結果是一个普遍原理的例子. 对任意有經典类比的力学系統,如果一个态的經典描述近似地成立,則在量子力学中这个态就由一个波包代表, 所有坐标与动量都有近似的数値,其精确度为海森伯測不准原理所限制. 現在,薛定諤波动方程决定了这样的波包如何随时間变化,所以,为了使經典描述保持有效,波包应当保持为波包, 并应按照經典力学的規律运动. 我們現在来驗証,情况的确如此.

我們取一个有經典类比的力学系統,令其哈密頓量为$H(q_r, p_r)$ $(r = 1, 2\cdots, n)$. 相应的經典力学系統的哈密頓量是 $H_c(q_r, p_r)$, 它是在 $H(q_r, p_r)$ 中用普通的代数变量代替 q_r 与 p_r 并使 $\hbar \to 0$ (如果它出現于$H(q_r p_r)$中)而得到的. 經典哈密頓量 H_c 当然是它的变量的实函数. 通常它是动量p_r的二次函数,但不总是如此,自由粒子的相对論理論就是一个并非这样的例子. 对 H_c 为 p 的任意代数函数的情况,下列推理都是有效的.

我們假定在薛定諤表象中与时間有关的波函数是

$$\psi(qt) = Ae^{iS/\hbar}, \tag{35}$$

其中A与S是q与t的实函数, 它在其变量变化时不是很快地变化. 这样,波函数是波的形式,而A决定了振幅,S决定了位相.薛定諤波动方程(7)給出

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}Ae^{iS/\hbar}\rangle = H(q_r, p_r)Ae^{iS/\hbar}\rangle,$$

或即

$$\left\{i\hbar\frac{\partial A}{\partial t} - A\frac{\partial S}{\partial t}\right\}\rangle = e^{-iS/\hbar}H(q_r, p_r)Ae^{iS/\hbar}\rangle. \tag{36}$$

現在 $e^{-iS/\hbar}$ 显然是么正綫性算符, 可以用作为§26(70)式中的U而給出一个么正变换. 在此变换中 q_r 保持不变,每个 p_r 变换成

$$e^{-iS/\hbar}p_r e^{iS/\hbar} = p_r + \frac{\partial S}{\partial q_r},$$

这里利用了 §22 的(31)式,而H变换为

$$e^{-iS/\hbar}H(q_r, p_r)e^{iS/\hbar} = H(q_r, p_r + \partial S/\partial q_r),$$

这是因为在变换中代数关系是不变的. 因此,(36)式变成

$$\left\{i\hbar\frac{\partial A}{\partial t} - A\frac{\partial S}{\partial t}\right\}\rangle = H(q_r, p_r + \partial S/\partial q_r)A\rangle. \tag{37}$$

让我們現在假定可以把 $\hbar$ 看成小量，并在(37)式中略去包含 $\hbar$ 的項. 这一点包含略去(37)式的 H 中出現的 p_r，因为每一个 p_r 等效于算符 $-i\hbar\partial/\partial q_r$ 作用在其右边的 q 的函数上. 剩下的項給出

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H_c\left(q_r, \frac{\partial S}{\partial q_r}\right). \tag{38}$$

这是位相函数 S 所必須滿足的微分方程. 这一方程由經典哈密頓函数 H_c 决定，这个方程在經典力学中称为哈密頓-雅可俾方程. 它容許 S 是实函数，这样就表明了(35)式的波的形式的假定不致引起矛盾.

为了得到 A 的方程,我們必須保留(37)式中的 $\hbar$ 的綫性項,看它們給出什么結果. 在 H 为一般函数的情况下，直接計算出这些項是比較麻煩的,但我們能更容易地得到所要求的結果,办法是先用左矢量 $\langle Af$ 乘(37)式的两边，其中 f 是 q 的任意实函数. 这就給出

$$\langle Af\left\{i\hbar\frac{\partial A}{\partial t} - A\frac{\partial S}{\partial t}\right\}\rangle = \langle AfH\left(q_r, p_r + \frac{\partial S}{\partial q_r}\right)A\rangle.$$

其共軛复量的方程为

$$\langle Af\left\{-i\hbar\frac{\partial A}{\partial t} - A\frac{\partial S}{\partial t}\right\}\rangle = \langle AH\left(q_r, p_r + \frac{\partial S}{\partial q_r}\right)fA\rangle.$$

二式相減并除以 $i\hbar$,我們得到

$$2\langle Af\frac{\partial A}{\partial t}\rangle = \langle A\left[f, H\left(q_r, p_r + \frac{\partial S}{\partial q_r}\right)\right]A\rangle. \tag{39}$$

我們現在要去計算这个泊松括号

$$\left[f, H\left(q_r, p_r + \frac{\partial S}{\partial q_r}\right)\right].$$

我們假定 $\hbar$ 可以看作小量，这使我們能把 $H\left(q_r, p_r + \frac{\partial S}{\partial q_r}\right)$ 展开

成为 p 的幂級数．零級項对泊松括号沒有貢献．p 的一級項对泊松括号有貢献，它能够很容易地利用 §21 的經典公式 (1) 計算出来(如果 u 与 p 无关，而 v 是 p 的綫性函数，則这个經典公式在量子理論中也是成立的)．这个貢献的大小是

$$\sum_s \frac{\partial f}{\partial q_s}\left[\frac{\partial H(q_r, p_r)}{\partial p_s}\right]_{p_r=\partial S/\partial q_r},$$

这里的符号的意义为：我們在 q 与 p 的函数[ ]中对每个 p_r 要用 $\partial S/\partial q_r$ 代替，这样我們就得到一个只含 q 的函数．p 的高級項对泊松括号給出的貢献当 $\hbar \to 0$ 时都为零．这样一来，在(39)式中略去含 $\hbar$ 的項(这一点等效于在 (37) 式中略去 $\hbar^2$ 項)，(39) 式就变成

$$\langle f\frac{\partial A^2}{\partial t}\rangle = \langle A^2\sum_s \frac{\partial f}{\partial q_s}\left[\frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial p_s}\right]_{p_r=\partial S/\partial q_r}\rangle. \tag{40}$$

現在，如果 $a(q)$ 与 $b(q)$是 q 的两个任意函数，則只要 $a(q)$与$b(q)$ 滿足适当的边界条件，§20 的(64)式就給出

$$\langle a(q)b(q)\rangle = \int a(q')dq'b(q'),$$

因而就有

$$\langle a(q)\frac{\partial b(q)}{\partial q_r}\rangle = -\langle\frac{\partial a(q)}{\partial q_r}b(q)\rangle, \tag{41}$$

这一点在 §22 与§23 中討論过．因之，(40)式可以写成

$$\langle f\frac{\partial A^2}{\partial t}\rangle = -\langle f\sum_s \frac{\partial}{\partial q_s}\left\{A^2\left[\frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial q_s}\right]_{p_r=\partial S/\partial q_r}\right\}\rangle.$$

由于此式对任意实函数 f 成立，我們一定有

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} = -\sum_s \frac{\partial}{\partial q_s}\left\{A^2\left[\frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial q_s}\right]_{p_r=\partial S/\partial q_r}\right\}. \tag{42}$$

这就是波函数的振幅 A 的方程．为了了解它的意义，让我們假定我們有一流体，在变量 q 的空間中运动，在任意点任意时刻流体的密度是 A^2，而其速度为

$$\frac{dq_s}{dt} = \left[\frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial p_s}\right]_{p_r=\partial S/\partial q_r}. \tag{43}$$

这样一来，方程(42)恰恰就是对这样的流体的守恆方程．流体的运动决定于满足(38)式的函数 S，对 (38) 式的每一解就有一种可能的运动．

对一给定的 S，訨我們取(42)式的一个解，对这个解在某一确定时刻，密度 A^2 除在某一小区域外到处为零．我們可以假定这个小区域随着流体运动，在每一点它的速度由(43)式給出，这时守恆方程(42)将要求，在此小区域外密度总是为零．对这个小区域可能小到怎样程度有一个限制，这个限制是由我們在(39)式中略去 $\hbar$ 所作的近似而产生的．这个近似仅在

$$\hbar \frac{\partial}{\partial q_r} A \ll \frac{\partial S}{\partial q_r} A,$$

或即

$$\frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial q_r} \ll \frac{1}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial q_r}$$

时成立．这个条件要求：如果在 q 的某一区域内 S 变化了 $\hbar$ 的許多倍，即这一区域包含了波函数(35)的很多波长，则在这一区域中 A 只能改变它本身的一个不大的分数．这时，我們的解就是 §24 所討論的类型的波包，而且在全部时間內都保持为这样．

这样，我們得到一个代表一个运动态的波函数，对这个态，坐标与动量在全部时間內都有近似的数值．在量子理論里这样的运动态相当經典理論所研究的态，我們的波包的运动由方程 (38) 与(43)决定．将 p_s 定义为 $\partial S/\partial q_s$，从这些方程我們得到

$$\begin{aligned}\frac{dp_s}{dt} &= \frac{d}{dt} \frac{\partial S}{\partial q_s} = \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial q_s} + \sum_u \frac{\partial^2 S}{\partial q_u \partial q_s} \frac{dq_u}{dt} \\ &= -\frac{\partial}{\partial q_s} H_c\left(q_r, \frac{\partial S}{\partial q_r}\right) + \sum_u \frac{\partial^2 S}{\partial q_u \partial q_s} \frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial p_u} \\ &= -\frac{\partial H_c(q_r, p_r)}{\partial q_s},\end{aligned} \tag{44}$$

其中在最后一行在进行偏微分以前，p 是看作与 q 无关的．方程(43)与(44)恰就是經典运动方程的哈密頓形式，它們表明波包按照經典力学的規律运动．我們按此方式看到，經典运动方程怎样

可作为一极限情况而从量子理論推出来。

利用波动方程的更精确的解能够証明，坐标与动量同时有数值的准确性不能长期保持为海森伯测不准原理所允許的限制，即§24 的方程(56)中的最有利的情况，而是如果它在开始时是这样，它将变得越来越不准确，因为波包要发生扩展[1]。

§ 32. 作用量原理[2]

方程(10)表明，在时刻 t 的海森伯力学变量 v_t 与它們在时刻 t_0 的值 v_{t_0} 或即 v 由一个么正变換相联系。在时刻 $t+\delta t$ 的海森伯力学变量与它們在 t 时刻的值由一个无穷小么正变換联系起来。这一点由运动方程(11)或(13)表明，它們給出 $v_{t+\delta t}$ 与 v_t 之間联系的形式为 §26 的(79)式或(80)式，其中用 H_t 作为 F，$\delta t/\hbar$ 作为 ϵ。海森伯力学变量随时間的变化，就这样可以看作是么正变換的連續展开。在經典力学里，在时刻 $t+\delta t$ 的力学变量与其在时刻 t 的值的联系是无穷小的切变換，全部运动可以看成是切变換的連續展开。这里我們有了经典运动方程与量子运动方程之間的类比的数学基础，我們可以发展这个基础，以求出經典力学理論的所有主要特性的量子类比。

假定我們有一个表象，其中对易可观察量的完全集 ξ 是对角的，这样基左矢就是 $\langle\xi'|$。我們能引进第二个表象，其中基左矢是

$$\langle\xi'^*| = \langle\xi'|T. \tag{45}$$

这个新的基左矢依賴于时間 t，并給出一个运动的表象，类似于在普通矢量空間中的运动坐标系統。把(45)式与(8)式的共軛虚量比較，我們看到，新的基矢量恰恰就是把原来在薛定諤图象中的基矢量变換到海森伯图象的結果，因此，它們与海森伯力学变量 v_t 的关系一定与原来的基矢量与薛定諤力学变量 v 的关系相同。例如，每个$\langle\xi'^*|$一定是 ξ_t 的本征左矢，属于本征值 ξ'。因此，它可

---

1) 参见 Kennard, Z. f. Physik, **44** (1927), 344; Darwin, Proc. Roy. Soc. **A'** **117** (1927), 258.

2) 对那些不特别关心高等动力学的读者，这一节可以略去。

以写为$\langle\xi'_t|$，只要認为数ξ'_t是ξ_t的本征值，其值与ξ的本征值ξ'相等．从(45)式，我們得

$$\langle\xi'_t|\xi''\rangle=\langle\xi'|T|\xi''\rangle \tag{46}$$

它表明变換函数就是T在原来的表象中的表示式．

将(45)式对t微分，并应用(6)式，我們得

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\xi'_t|=i\hbar\langle\xi'|\frac{dT}{dt}=\langle\xi'|HT=\langle\xi'_t|H_t,$$

这里还利用了(12)式．右乘以任意与时間无关的右矢$|a\rangle$，如果为了确切起見，我們取ξ有連續本征值的情况，則得

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\xi'_t|a\rangle=\langle\xi'_t|H_t|a\rangle=\int\langle\xi'_t|H_t|\xi''_t\rangle d\xi''_t\langle\xi''_t|a\rangle. \tag{47}$$

現在，方程(5)如用表示式写出来，就是

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\xi'|Pt\rangle=\int\langle\xi'|H|\xi''\rangle d\xi''\langle\xi''|Pt\rangle. \tag{48}$$

因为$\langle\xi'_t|H_t|\xi''_t\rangle$作为变量$\xi'_t$与$\xi''_t$的函数，其形式与$\langle\xi'|H|\xi''\rangle$作为$\xi'$与$\xi''$的函数相同．方程(47)与(48)的形式完全相同，方程(47)中的变量ξ'_t，ξ''_t起着(48)式中的变量ξ'与ξ''的作用，而函数$\langle\xi'_t|a\rangle$起函数$\langle\xi'|Pt\rangle$的作用．这样，我們就能把(47)式当成薛定諤波动方程的一种形式，而把变量ξ'_t的函数$\langle\xi'_t|a\rangle$当作为波函数．在这种方式下，**薛定諤波动方程表現出新的意义，它被当成是：在海森伯力学变量ξ_t为对角的运动的表象里，一个固定的右矢如果要与海森伯表象中的态相对应，它的表示式所必須滿足的条件．**函数$\langle\xi'_t|a\rangle$把它随时間的变化归之于它的左因子$\langle\xi'_t|$，相反地，函数$\langle\xi'|Pt\rangle$把它随时間的变化归之于它的右因子$|Pt\rangle$．

如果我們在(47)式中令$|a\rangle=|\xi''\rangle$，我們得

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\xi'_t|\xi''\rangle=\int\langle\xi'_t|H|\xi'''_t\rangle d\xi'''_t\langle\xi'''_t|\xi''\rangle, \tag{49}$$

此式表明，变換函数$\langle\xi'_t|\xi''\rangle$滿足薛定諤波动方程．既然$\xi_{t_0}=\xi$，所以我們一定有

$$\langle\xi'_{t_0}|\xi''\rangle=\delta(\xi'_{t_0}-\xi''), \tag{50}$$

这里 δ 函数应理解为一些因子的乘积，对每一 ξ 变量有一个 δ 因子，就象在 §16 方程 (34) 的右边对变量 $\xi_{v+1}, \cdots, \xi_u$ 所出現的因子一样．因此，变换函数 $\langle\xi'_t|\xi''\rangle$ 是薛定諤波动方程的一个解，对这个解，ξ 在时刻 t_0 肯定有值为 ξ''．如果 ξ 在时間 t_0 肯定有值 ξ''，則它們在时間 $t > t_0$ 有值 ξ'_t 的相对几率就是变换函数的模数的平方 $|\langle\xi'_t|\xi''\rangle|^2$．我們可以把 $\langle\xi'_t|\xi''\rangle$ 写成 $\langle\xi'_t|\xi''_{t_0}\rangle$，并把它当成是 t_0 与 t 的函数．要得到它对 t_0 的关系，我們取方程(49)的共軛复量，交换 t 与 t_0，也交换单撇与双撇．这就給出

$$-i\hbar\frac{d}{dt_0}\langle\xi'_t|\xi''_{t_0}\rangle = \int\langle\xi'_t|\xi'''_{t_0}\rangle d\xi'''_{t_0}\langle\xi'''_{t_0}|H_{t_0}|\xi''_{t_0}\rangle. \qquad (51)$$

关于变换函数 $\langle\xi'_t|\xi''\rangle$ 的上述討論，在 ξ 为任意对易可观察量完全集时都有效．这些方程是对 ξ 有連續本征值的情况下写出来的，但是，如果 ξ 中任意几个有分立的本征值，只要在公式中作了必要的形式上的变更，这些方程仍然有效．現在設我們取一个有經典类比的力学系統，并設我們取 ξ 为坐标 q．令

$$\langle q'_t|q''\rangle = e^{iS/\hbar}, \qquad (52)$$

这样就定义了变量 q'_t 与 q'' 的函数 S．这个函数也是 t 的显函数．(52)式是薛定諤波动方程的一个解，而且，如果 $\hbar$ 可以看为小量，就能按处理(35)式的同样方式处理这个解．(52)式中的 S 与(35)式中的 S 的不同点在于在(52)式中沒有 A，这一点使(52)式中的 S 复杂化了，但这个 S 的实部等于(35)式中的 S，而它的虚部的数量級为 $\hbar$．因此，在 $\hbar\to 0$ 的极限下，(52)式的 S 将等于(35)式中的 S，并因此滿足相应于(38)式的下式

$$-\partial S/\partial t = H_c(q'_{rt}, p'_{rt}), \qquad (53)$$

其中

$$p'_{rt} = \partial S/\partial q'_{rt}, \qquad (54)$$

而 H_c 是我們的量子力学系統的經典类比的哈密頓量．但是(52)式也是(51)式的一个解，式中用 q 代替 ξ，(51)式是变量 q'' 或 q''_{t_0} 的薛定諤波动方程的共軛复量．这一点使 S 也滿足[1)]

1) 关于变换函数与经典理论的更准确的对比，参看文献：Van Vleck, Proc. Nat. Acad. **14**. 178.

$$\partial S/\partial t_0 = H_c(q_r'', p_r'') \tag{55}$$

其中

$$p_r'' = -\frac{\partial S}{\partial q_r''} \tag{56}$$

哈密頓-雅可俾方程(53),(55)的解，是对时間間隔 t_0 到 t 的經典力学的作用量函数,即它是拉格朗日函数 L 的时間积分

$$S = \int_{t_0}^{t} L(t')dt'. \tag{57}$$

这样,由(52)式定义的 S 是經典作用量函数的量子类比,它在 $\hbar \to 0$ 的极限下等于經典作用量函数. 为要得到經典的拉格朗日函数的量子力学类比,我們考虑无穷小的时間間隔,令 $t = t_0 + \delta t$; 我們就有 $\langle q'_{t_0+\delta t} | q''_{t_0}\rangle$ 作为 $e^{iL(t_0)\delta t/\hbar}$ 的类比. 为了类比起見，我們应当把 $L(t_0)$ 看为时刻 $t_0 + \delta t$ 的坐标 q' 与时刻 t_0 的坐标 q'' 的函数,而不是象一般作法那样,把它当成在时刻 t_0 的坐标与速度的函数.

經典力学中的最小作用量原理指出，对系統的軌迹的微小变化只要不改变端点,也就是保持 q_{t_0} 与 q_t 固定,对在 t_0 与 t 之間的所有中間时刻的 q 的微小变化，作用量函数 (57) 保持为稳定的. 让我們看看在量子力学中这一原理相应于什么.

令

$$\exp\left\{i\int_{t_a}^{t_b} L(t)dt/\hbar\right\} = \exp\{iS(t_b, t_a)/\hbar\},$$
$$= B(t_b, t_a) \tag{58}$$

这样，$B(t_b, t_a)$相应于量子力学中的$\langle q'_{t_b} | q'_{t_a}\rangle$(我們这里允許 q'_{t_a} 与 q'_{t_b} 代表 q_{t_a} 与 q_{t_b} 的不同本征值，以免把大量的撇引进到公式中去). 現在假定引进一系列中間时刻 $t_1, t_2, \cdots, t_m$，把时間間隔 $t_0 \to t$ 分成为大量的小时間間隔 $t_0 \to t_1$，$t_1 \to t_2$，$\cdots$，$t_{m-1} \to t_m$，$t_m \to t$. 于是

$$B(t, t_0) = B(t, t_m)B(t_m, t_{m-1})\cdots B(t_2, t_1)B(t_1, t_0). \tag{59}$$

相应的量子方程是 §16 的基矢量的性質(35)式的結果,即

$$\langle q'_t | q'_0\rangle = \iint\cdots\int \langle q'_t | q'_m\rangle dq'_m \langle q'_m | q'_{m-1}\rangle dq'_{m-1} \cdots \langle q'_2 | q'_1\rangle dq'_1 \langle q'_1 | q'_0\rangle, \tag{60}$$

其中 q'_k 是 q'_{t_k} 的簡写. 初看之下，在(59)式与(60)式之間似乎沒

有很紧密的对应之处．但是，我們必需要更仔細地分析(59)式的意义．我們必需把每个因子 B 当作在它所关系到的时間間隔的两个端点的 q 的函数．这就使(59)式的右边成为不仅是 q_t 与 q_0 的函数，而且也是所有中間时間的函数．只有当我們把右边的中間 q 代以它們在实际軌迹上的值时，方程(59)才能成立．在实际軌迹上的值的微小变化将使 S 为稳定的，并且从(58)式得知，因而它們也使 $B(t, t_0)$稳定．正是把这些值代替中間的各 q 的过程相应于在(60)式中对各中間的 q 的所有值进行积分．这样，作用量原理的量子力学类比归結为合成規則(60)式，經典要求中間的 q 的值应使 S 稳定，这相应于量子力学中的条件：中間的 q 的所有值都是重要的，其重要程度与它們对(62)式中积分的貢献成正比．

让我們来看一看，当 $\hbar$ 小时(59)式怎样能成为(60)式的极限情况．我們必需假定，(60)式中的被积函数具有 $e^{iF/\hbar}$ 的形式，其中 F 是 $q_0', q_1', q_2', \cdots, q_m', q_t$ 的函数，这个函数在 $\hbar$ 趋于零时仍然是連續的，所以，当 $\hbar$ 是小量时，被积函数是一个快速振蕩的函数．这样的快速振蕩函数的积分将是极端小的，其例外的是，在积分区域中有一个范围，在此范围內 q_k' 的比較大的变化仅仅使 F 有很小的变化，因此这个范围对积分的貢献是不小的．这样的范围一定在 F 对 q_k' 的小变化是稳定的那一点的邻域．因此，(60)式的积分基本上决定于被积函数在一点的值，在这一点被积函数对中間的 q 的小变化是稳定的，所以，(60)式就变成了(59)式．

方程(54)与(56)表示，变量 q_t', p_t' 与变量 q'', p'' 是由切变換相联系的，并且是切变換方程的写法的标准形式之一．量子力学中么正变換的方程的写法也有一个类比的形式．从(52)式，借助于 §22 的(45)式，我們得到

$$\langle q_t'|p_{rt}|q''\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_{rt}'}\langle q_t'|q''\rangle = \frac{\partial S(q_t', q'')}{\partial q_{rt}'}\langle q_t'|q''\rangle. \quad (61)$$

同样地，借助于 §22 的(46)式，得

$$\langle q_t'|p_r|q''\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial q_r''}\langle q_t'|q''\rangle = -\frac{\partial S(q_t', q'')}{\partial q_r''}\langle q_t'|q''\rangle. \quad (62)$$

从对易可观察量的函数的普遍定义，我們有

$$\langle q_t'|f(q_t)g(q)|q''\rangle = f(q_t')g(q'')\langle q_t'|q''\rangle, \tag{63}$$

其中 $f(q_t)$ 与 $g(q)$ 分别是 q_t 与 q 的函数. 令 $G(q_t, q)$ 是 q_t 与 q 的任意函数，由形为 $f(q_t)g(q)$ 的各項的一个求和或积分組成，并使得 G 中所有的 q_t 都出現在所有的 q 的左边. 这样的函数我們称为**良序的**. 把(63)式应用于 G 中每一項，并相加或者积分，我們得到

$$\langle q_t'|G(q_t,q)|q''\rangle = G(q_t',q'')\langle q_t'|q''\rangle.$$

現在让我們假定每个 p_{rt} 与 p_r 能表示为 q_t 与 q 的良序函数，并把这些函数写成 $p_{rt}(q_t, q)$, $p_r(q_t, q)$. 用这些函数代替 G，我們得

$$\langle q_t'|p_{rt}|q''\rangle = p_{rt}(q_t', q'')\langle q_t'|q''\rangle,$$
$$\langle q_t'|p_r|q''\rangle = p_r(q_t', q'')\langle q_t'|q''\rangle.$$

把这些方程分别与(61)式和(62)式比較，我們看到

$$p_{rt}(q_t', q'') = \frac{\partial S(q_t', q'')}{\partial q_{rt}'}, \quad p_r(q_t', q'') = -\frac{\partial S(q_t', q'')}{\partial q_r''},$$

只要(64)式的右边能写成良序函数，这就意味着

$$p_{rt} = \frac{\partial S(q_t, q)}{\partial q_{rt}}, \quad p_r = -\frac{\partial S(q_t, q)}{\partial q_r}. \tag{64}$$

这些方程与(54)式和(56)式有相同的形式，但所关系的不是一般代数变量 q_t', q''，而是不对易的量子变量 q_t, q. 它們表明，量子变量之間有么正变换的条件，怎样类比于經典变量之間有切变换的条件. 但是，这个类比是不完全的，因为經典的 S 必須是实函数，而(64)式的 S 則沒有簡单的条件相应于这一点.

§33. 吉布斯系綜

在到此为止的工作中，我們一直假定了在每一时刻我們的力学系統都是处于确定的态內，这即是說，只要不与理論的一般原則相矛盾，系統的运动都被尽可能完全地和准确地确定了. 在經典理論里，这一点的意思当然是，所有坐标与动量都有确定的值. 現在，我們来討論一种运动，其确定的程度要小于这种最大可

能的准确程度．这一节将闡述在这样的情况下所采用的方法．

在經典力学里的这个程序就是要引入所謂吉布斯系綜，其意义如下：我們把所有的力学坐标与动量当成在某一空間中的直角坐标，这个空間称为相空間，它的維数是系統的自由度的两倍．系統的任意态就能用在此空間中的一点来代表．这个点将按照經典运动方程(14)运动．現在假定我們已知的不是系統在任意时刻处于肯定的态，而只是系統按一定的几率規則处于許多可能的态中的这个态或那个态．这样，我們就应当能用相空間的流体来代表它，在相空間任意体积中流体的質量，是系統处于代表点在此体积内的任意态的总几率．这种流体的每一質点按运动方程(14)运动．如果我們引入流体在任意点的密度 ρ，它等于系統处于相应态的邻近的单位相空間体积内的几率，我們就将有守恆方程

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\sum_r \left\{\frac{\partial}{\partial q_r}\left(\rho \frac{dq_r}{dt}\right) + \frac{\partial}{\partial p_r}\left(\rho \frac{dp_r}{dt}\right)\right\} \\
&= -\sum_r \left\{\frac{\partial}{\partial q_r}\left(\rho \frac{\partial H}{\partial p_r}\right) - \frac{\partial}{\partial p_r}\left(\rho \frac{\partial H}{\partial q_r}\right)\right\} \\
&= -[\rho, H]. \qquad (65)
\end{aligned}
$$

此式可以看成是流体的运动方程，因为如果开始时 ρ 作为 q 与 p 的函数是已知的，则此方程就可以决定所有时間的密度 ρ．除了一个負号以外，此式的形式与一个力学变量的普通运动方程(15)相同．

要求系統处于任意态的几率的总和等于 1 这个条件，給出对于 ρ 的归一化条件

$$\iint \rho dq dp = 1. \qquad (66)$$

积分是对整个相空間进行的，单一的微分符号 dq 或 dp 是写来代表所有各个 dq 或 dp 的乘积的．如果 β 代表力学变量的任意函数，β 的平均值将是

$$\iint \beta \rho dq dp. \qquad (67)$$

有时我們采用的密度 ρ 与上述的定义相差一个正的常数因子，例

如 k，那时我們就用

$$\iint \rho dqdp = k$$

代替(66)式，这只是使理論发生了一个无所謂的改变，但有时却使討論更为便利. 用这样的密度，我們能够用流体的图象代表 k 个相同的力学系統，所有这些系統都按照它們自身的运动相互无关地通过同一位置，沒有任何相互干扰或相互作用. 这样，在任意点的密度就会是系統处于任意态的邻近的，单位相空間体积內的可能数或平均数，而表达式(67)式就会給出对所有系統的 β 值的平均数. 这样一組力学系統，即吉布斯提出的系綜，通常在实际上除了作为一个粗浅的近似外，是不可能实現的，但是，即令如此，它仍然形成为一个有用的理論上的抽象.

現在我們将看到，在量子力学里存在着相应的密度 ρ，它有許多性质类似上面所講的. 这密度是首先由馮·諾依曼 (von Neumann)提出的. 由于在量子力学里不可能同时对 q 与 p 賦予数值，相空間在量子力学中沒有意义，从这种事实出发，相应的密度 ρ 的存在确是相当令人惊异的.

我們来研究一个力学系統，它在某一时刻，按照某种已知的几率規則，处于許多可能的态中的这一个或那一个中. 这些态可能是一个分立集，也可能是一个連續范围，也可能两种情况都有. 这里为了明确起見，我們取其为分立集的情况，并假定它們由一个参量 m 来标記. 令相应于它們的归一化右矢为 $|m\rangle$，系統处于 m 态的几率为 P_m. 我們就定义量子密度 ρ 如下式：

$$\rho = \sum_m |m\rangle P_m \langle m|. \tag{68}$$

令 ρ' 为 ρ 的任意本征值，$|\rho'\rangle$是属于此本征值的一个本征右矢，于是

$$\sum_m |m\rangle P_m \langle m|\rho'\rangle = \rho|\rho'\rangle = \rho'|\rho'\rangle,$$

所以

$$\sum_m \langle\rho'|m\rangle P_m \langle m|\rho'\rangle = \rho'\langle\rho'|\rho'\rangle,$$

或即

$$\sum_m P_m |\langle m|\rho'\rangle|^2 = \rho'\langle\rho'|\rho'\rangle.$$

現在 P_m 是一个几率，总不会是負数. 由此得出 ρ' 不能为負数. 因此，ρ 沒有負本征值，这一点可与經典密度 ρ 不会是負数的事实相类比.

現在，計我們求量子 ρ 的运动方程. 在薛定諤图象中，(68)式中的右矢与左矢将分别按照薛定諤方程 (5) 及其共軛虛量而随时間变化，而 P_m 則将保持为常数，因为此系統只要它未受干扰，不会从相应于滿足薛定諤方程的一个右矢的态变到相应于别的右矢的态. 这样，我們就有

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d\rho}{dt} &= \sum_m i\hbar\left\{\frac{d|m\rangle}{dt}P_m\langle m| + |m\rangle P_m\frac{d\langle m|}{dt}\right\} \\ &= \sum_m\{H|m\rangle P_m\langle m| - |m\rangle P_m\langle m|H\} \\ &= H\rho - \rho H. \end{aligned} \tag{69}$$

这是經典的运动方程(65)的量子类比. 我們的量子密度 ρ 与經典密度相似，如果开始时为已知，則在全部时間內就被决定了.

从 §12 的假定，当系統处在 m 态时，任意可观察量 β 的平均值是 $\langle m|\beta|m\rangle$. 因而，如果系統是按照几率規則 P_m 分布在几个 m 态中，則 β 的平均值就将是 $\sum_m P_m\langle m|\beta|m\rangle$. 如果我們引进具有分立集的基右矢 $|\xi'\rangle$ 的表象，这个平均值就等于

$$\begin{aligned} \sum_{m\xi'} P_m\langle m|\xi'\rangle\langle\xi'|\beta|m\rangle &= \sum_{\xi' m}\langle\xi'|\beta|m\rangle P_m\langle m|\xi'\rangle \\ &= \sum_{\xi'}\langle\xi'|\beta\rho|\xi'\rangle = \sum_{\xi'}\langle\xi'|\rho\beta|\xi'\rangle, \end{aligned} \tag{70}$$

用 §17 的方程 (44) 即矩陣乘法規則，容易驗証这里的最后一步. 表达式(70)是經典理論中的表达式(67)的类比. 在經典理論中我們要用 ρ 乘 β，并取此乘积在所有相空間中的积分，而在量子理論中，我們就要用 ρ 乘 β（此二因子的次序任意），并取此乘积在一个表象中的对角和. 如果此表象包含有連續范围的基矢量 $|\xi'\rangle$，則我們得到代替(70)式的是

$$\int \langle\xi'|\beta\rho|\xi'\rangle d\xi' = \int \langle\xi'|\rho\beta|\xi'\rangle d\xi', \qquad (71)$$

这就是我們要采用"沿对角綫积分"的手續来代替将对角元求和. 我們将把(71)式定义为在連續情况下的$\beta\rho$的对角和. 从§18(56)式的变换函数的性质,容易驗証,对于所有的表象,对角和是一样的.

从$|m\rangle$都是归一化的这一条件,在ξ是分立时,我們得到

$$\sum_{\xi'} \langle\xi'|\rho|\xi'\rangle = \sum_{\xi' m} \langle\xi'|m\rangle P_m \langle m|\xi'\rangle = \sum_m P_m = 1, \quad (72)$$

因为系統处于任意态的总几率是1. 这是方程(66)的类比. 系統处于态$|\xi'\rangle$的几率, 即可观察量ξ(它在此表象中是对角的)有值为ξ'的几率,按照 §18 中解释右矢表示式的规則(51)式,就是

$$\sum_m |\langle\xi'|m\rangle|^2 P_m = \langle\xi'|\rho|\xi'\rangle, \qquad (73)$$

此式給出了(72)式左边求和中每一項的意义.对于連續的ξ',(73)式的右边給出ξ有值在ξ'附近ξ'的单位变域内的几率.

如在經典理論中一样,我們可以取密度等于上述ρ的k倍,并把它当作为代表k个相同力学系統的吉布斯系綜, 在这些相同系統間沒有互相干扰, 也沒有相互作用. 于是(72)式的右边将为k, 而(70)式或(71)式将給出对于系綜中所有系統的β的总平均值, (73)式則給出对于系綜中一个系統其ξ有值等于ξ'(或者是ξ有值在ξ'附近ξ'的单位变域内)的总几率.

吉布斯系綜的一个重要应用是应用到一个与其周围已知温度为T的环境处于热力学平衡的力学系統. 吉布斯証明了这样一个系統在經典力学里用下述密度表示:

$$\rho = c e^{-H/kT}, \qquad (74)$$

H是哈密頓量,現在它是与时間无关的, k是玻耳兹曼常数, 而c是选来使归一化条件(66)式成立的数字. 这个公式可以原样地搬到量子力学中来. 在高温下(74)式变成 $\rho = c$, 代入(73)式的右边后,这在ξ'为分立的情况下,就給出 $c\langle\xi'|\xi'\rangle = c$. 这表明在高温下所有的分立态是等几率的.

第六章　初等应用

§34. 諧振子

量子力学中力学系統的一个簡单而有意义的例子是諧振子．这个例子对普遍理論有重要意义，因为它形成了輻射理論的基础．为描述这个系統所需的力学变量只是一个坐标 q 与其共軛动量 p．在經典力学里，其哈密頓量是

$$H = \frac{1}{2m}(p^2 + m^2\omega^2q^2), \tag{1}$$

式中 m 是振动的粒子的質量，而 ω 是頻率乘以 2π．我們假定，在量子力学里有同样的哈密頓量．这个哈密頓量加上 §22 的(10)式的量子条件，就把此系統完全决定了．

海森伯运动方程是

$$\left.\begin{aligned} \dot{q}_t &= [q_t, H] = p_t/m, \\ \dot{p}_t &= [p_t, H] = -m\omega^2 q_t. \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

为了方便起見，引进无量綱的复数力学变量

$$\eta = (2m\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}(p + im\omega q). \tag{3}$$

运动方程(2)給出

$$\dot{\eta}_t = (2m\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}(-m\omega^2 q_t + i\omega p_t) = i\omega\eta_t.$$

这个方程积分后給出

$$\eta_t = \eta_0 e^{i\omega t}, \tag{4}$$

式中 η_0 是与 t 无关的綫性算符，等于 $t=0$ 时的 η_t 值．上述各方程全部与在經典理論中一样．

我們可以用 η 及其共軛复量 $\bar{\eta}$ 表示出 p 与 q，因而可以完全采用 η 与 $\bar{\eta}$ 来討論問題．我們有

$$\hbar\omega\eta\bar{\eta} = (2m)^{-1}(p + im\omega q)(p - im\omega q) =$$

$$= (2m)^{-1}[p^2 + m^2\omega^2q^2 + im\omega(qp - pq)] =$$

$$= H - \frac{1}{2}\hbar\omega, \tag{5}$$

同样地，

$$\hbar\omega\bar{\eta}\eta = H + \frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{6}$$

因此，

$$\bar{\eta}\eta - \eta\bar{\eta} = 1. \tag{7}$$

方程(5)或(6)把H表示成为η与$\bar{\eta}$的函数，而方程(7)给出η与$\bar{\eta}$的对易关系．由(5)式得

$$\hbar\omega\bar{\eta}\eta\bar{\eta} = \bar{\eta}H - \frac{1}{2}\hbar\omega\bar{\eta},$$

由(6)式得

$$\hbar\omega\bar{\eta}\eta\bar{\eta} = H\bar{\eta} + \frac{1}{2}\hbar\omega\bar{\eta}.$$

因此

$$\bar{\eta}H - H\bar{\eta} = \hbar\omega\bar{\eta}. \tag{8}$$

从(7)式也可推出，对任意正整数n，

$$\bar{\eta}\eta^n - \eta^n\bar{\eta} = n\eta^{n-1}, \tag{9}$$

这一点可用数学归納法驗証，因为如用η左乘(9)式，我們能推导出以$n+1$代n的(9)式．

令H'为H的一个本征值，而$|H'\rangle$为属于此本征值的本征右矢．从(5)式得

$$\hbar\omega\langle H'|\eta\bar{\eta}|H'\rangle = \langle H'|H - \frac{1}{2}\hbar\omega|H'\rangle =$$

$$= \left(H' - \frac{1}{2}\hbar\omega\right)\langle H'|H'\rangle.$$

由于$\langle H'|\eta\bar{\eta}|H'\rangle$是右矢$\bar{\eta}|H'\rangle$的长度的平方，因而

$$\langle H'|\eta\bar{\eta}|H'\rangle \geqslant 0$$

相等的情况只出現于$\bar{\eta}|H'\rangle = 0$时．同时$\langle H'|H'\rangle > 0$，因此

$$H' \geqslant \frac{1}{2}\hbar\omega, \tag{10}$$

相等的情况只出現于 $\bar{\eta}|H'\rangle=0$ 时. 从(1)式中H的形式是平方和,我們应当预料它的本征値都是正数或零(因为对任意态H的平均值一定是正数或零). 我們現在有了更严格的条件(10)式.

从(8)式得

$$H\bar{\eta}|H'\rangle=(\bar{\eta}H-\hbar\omega\bar{\eta})|H'\rangle=(H'-\hbar\omega)\bar{\eta}|H'\rangle. \qquad (11)$$

如果 $H'\neq\frac{1}{2}\hbar\omega$, 则$\bar{\eta}|H'\rangle$不为零,那么,按照(11)式,$\bar{\eta}|H'\rangle$是$H$的本征右矢,属于本征値 $H'-\hbar\omega$. 这样, 如H'是H的任意本征值, 又不等于$\frac{1}{2}\hbar\omega$时, $H'-\hbar\omega$就是H的另一本征値. 我們可以重复这个推理而断言,如果 $H'-\hbar\omega\neq\frac{1}{2}\hbar\omega$, $H'-2\hbar\omega$ 就是H的另一本征值. 按此方法継續下去, 我們得到一系列本征值, 即 $H', H'-\hbar\omega, H'-2\hbar\omega, H'-3\hbar\omega, \cdots$,此系列不能无限地延长,因为如果无限地推下去,它会包括与(10)式矛盾的本征值,因而这个系列只能結束于$\frac{1}{2}\hbar\omega$. 再者,从方程(8)的共轭复量,可得

$$H\eta|H'\rangle=(\eta H+\hbar\omega\eta)|H'\rangle=(H'+\hbar\omega)\eta|H'\rangle,$$

此式表明, 除非 $\eta|H'\rangle=0$, 则$H'+\hbar\omega$ 是H的另一本征値, 以$\eta|H'\rangle$作为属于它的本征右矢. $\eta|H'\rangle=0$ 的情况是可以去掉的, 因为它会引出

$$0=\hbar\omega\bar{\eta}\eta|H'\rangle=\left(H+\frac{1}{2}\hbar\omega\right)|H'\rangle=\left(H'+\frac{1}{2}\hbar\omega\right)|H'\rangle,$$

这个結果与(10)式矛盾. 因此,$H'+\hbar\omega$总是H的另一本征值,而且,$H+2\hbar\omega, H+3\hbar\omega\cdots$ 也都是H的本征値. 于是, H的本征值是一系列数,即

$$\frac{1}{2}\hbar\omega, \frac{3}{2}\hbar\omega, \frac{5}{2}\hbar\omega, \frac{7}{2}\hbar\omega, \cdots, \qquad (12)$$

一直延长到无穷大. 这些数就是諧振子能量的可能值.

令$|0\rangle$为H的本征右矢,属于最小的本征值$\frac{1}{2}\hbar\omega$,所以

$$\bar{\eta}|0\rangle=0, \qquad (13)$$

并組成一系列右矢:

$$|0\rangle,\ \eta|0\rangle,\ \eta^2|0\rangle,\ \eta^3|0\rangle,\cdots, \tag{14}$$

这些右矢全是H的本征右矢,分别属于(12)式中的一系列本征值. 从(9)式与(13)式得,对任意非負整数n,有

$$\bar{\eta}\eta^n|0\rangle = n\eta^{n-1}|0\rangle. \tag{15}$$

因此,右矢集合(14)式是这样,如果η或$\bar{\eta}$作用在此集合中的任一右矢都会給出一个与此集合相关的右矢. 既然在我們的問題里,所有的力学变量都能用η与$\bar{\eta}$表示出,所以(14)式的右矢一定組成完全集(否則就会还有某些力学变量). 对于H的本征值(12)式中的每一个,只有一个本征右矢,所以,H就只它自己組成一个对易可观察量完全集. (14)式的各个右矢相应于振子的不同的定态. 能量为$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$的定态相应于$\eta^n|0\rangle$的态,这个态就称为第$n$級量子态.

右矢$\eta^n|0\rangle$的长度的平方是

$$\langle 0|\bar{\eta}^n\eta^n|0\rangle = n\langle 0|\bar{\eta}^{n-1}\eta^{n-1}|0\rangle,$$

这是借助于(15)式而得的. 用归納法,我們发現只要$|0\rangle$是归一化的,就有

$$\langle 0|\bar{\eta}^n\eta^n|0\rangle = n!. \tag{16}$$

因此,(14)式的各右矢乘以系数$n!^{-\frac{1}{2}}$,分别使$n=0,1,2,\cdots$,就可以組成一个表象的基右矢,这个表象卽是使H为对角的表象. 任意右矢$|x\rangle$能展开为

$$|x\rangle = \sum_0^\infty x_n\eta^n|0\rangle, \tag{17}$$

其中x_n是数. 按此方法,我們使右矢$|x\rangle$相应于变量η的冪級数$\sum x_n\eta^n$,这个冪級数中的不同項相应于不同的定态. 如果$|x\rangle$是归一的,它定义一个态,对于这个态,振子在第n級量子态的几率,亦卽H有值为$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$的几率是

$$P_n = n!\,|x_n|^2, \tag{18}$$

这一点可利用得出 §18 的(51)式的同样推理而得.

我們可以把右矢$|0\rangle$当作一个标准右矢,而把 η 的这个幂級数当作是波函数，因为任意右矢可以表示为这样的波函数乘在这个标准右矢上. 于是我們得到一种波函数,它不同于由§20方程(62)所引进的通常一类的波函数，其不同之点在于，这里的波函数是复数力学变量 η 的函数，而不是可观察量的函数. 它是由福克(Фок)首先提出的，所以我們将称这种表象为福克表象. 对許多目的，它是描述諧振子的态的最方便的表象. 标准右矢 $|0\rangle$ 满足(13)式的条件，它代替了 §22 中(43)式对薛定諤表象标准右矢的条件.

让我們引进薛定諤表象，使 q 为对角的，并求各定态的表示式. 从(13)式与(3)式得

$$(p - im\omega q)|0\rangle = 0,$$

所以

$$\langle q'|p - im\omega q|0\rangle = 0.$$

借助于 §22 的(45)式,此式給出

$$\hbar\frac{\partial}{\partial q'}\langle q'|0\rangle + m\omega q'\langle q'|0\rangle = 0. \tag{19}$$

这个微分方程的解是

$$\langle q'|0\rangle = (m\omega/\pi\hbar)^{\frac{1}{4}}e^{-m\omega q'^2/2\hbar}, \tag{20}$$

这里的数值系数是这样选定的,使得$|0\rangle$成为归一化的. 这里我們得到了基态的表示式(具有最低能量的态叫基态). 其他定态的表示式可以由基态的表示式得到. 从(3)式,我們有

$$\begin{aligned}\langle q'|\eta^n|0\rangle &= (2m\hbar\omega)^{-n/2}\langle q'|(p + im\omega q)^n|0\rangle \\ &= (2m\hbar\omega)^{-n/2}i^n\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial q'} + m\omega q'\right)^n\langle q'|0\rangle \\ &= i^n(2m\hbar\omega)^{-n/2}(m\omega/\pi\hbar)^{\frac{1}{4}}\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial q'} + m\omega q'\right)^n e^{-m\omega q'^2/2\hbar}.\end{aligned} \tag{21}$$

对于 n 值不大时，上式可以很容易地算出来. 所得結果是形式为 $e^{-m\omega q'^2/2\hbar}$ 乘以 q' 的 n 次幂級数. 还有一个因子 $n!^{\frac{1}{2}}$ 一定要放进

(21)式，以便得到第 n 級量子态的归一化的表示式. 相因子 i^n 可以去掉.

§35. 角动量

設我們研究一个粒子，它由三个直角坐标 x, y, z 与其共軛动量 p_x, p_y, p_z 所描述. 如在經典理論中一样，它对原点的角动量定义为

$$m_x = yp_z - zp_y,\quad m_y = zp_x - xp_z,\quad m_z = xp_y - yp_x, \qquad (22)$$

或者用矢量方程

$$\mathbf{m} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}.$$

我們必須計算出角动量各分量与力学变量 x, $p_x \cdots$ 等之間的泊松括号以及角动量各分量彼此之間的泊松括号. 我們能做到这一点的最方便方法是，借助于 §21 中的規則(4)式与(5)式，这样就得到

$$\left.\begin{aligned} [m_z, x] &= [xp_y - yp_x, x] = -y[p_x, x] = y, \\ [m_z, y] &= [xp_y - yp_x, y] = x[p_y, y] = -x, \end{aligned}\right\} \qquad (23)$$

$$[m_z, z] = [xp_y - yp_x, z] = 0, \qquad (24)$$

类似地可得

$$[m_z, p_x] = p_y,\quad [m_z, p_y] = -p_x, \qquad (25)$$

$$[m_z, p_z] = 0, \qquad (26)$$

对于 m_x 与 m_y 有相应的关系. 再有

$$\left.\begin{aligned} [m_y, m_z] &= [zp_x - xp_z, m_z] = z[p_x, m_z] - [x, m_z]p_z \\ &= -zp_y + yp_z = m_x, \\ [m_z, m_x] &= m_y,\quad [m_x, m_y] = m_z. \end{aligned}\right\} \qquad (27)$$

这些結果全都与經典理論中的結果相同. (23), (25)与(27)式等結果中的符号可以用下述規則来記忆，即三个力学变量(包括左边泊松括号中的二个，右边的一个)当它們是按照循环序列(xyz)时就取＋号，否則就取－号. 方程(27)可以写成矢量形式

$$\mathbf{m} \times \mathbf{m} = i\hbar\mathbf{m}. \qquad (28)$$

現在假定我們有几个粒子具有角动量 $\mathbf{m}_1$, $\mathbf{m}_2$, $\cdots$. 这些角动量矢量中每一个应滿足(28)式. 因之，

$$\mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_r = i\hbar\mathbf{m}_r,$$

而且它們之中任一个将与任意其他一个对易，所以

$$\mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_s + \mathbf{m}_s \times \mathbf{m}_r = 0, \quad (r \neq s).$$

因此，如果 $\mathbf{M} = \sum_r \mathbf{m}_r$ 是总角动量，则

$$\begin{aligned}\mathbf{M} \times \mathbf{M} = \sum_{rs} \mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_s &= \sum_r \mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_r + \\ &+ \sum_{r<s} (\mathbf{m}_r \times \mathbf{m}_s + \mathbf{m}_s \times \mathbf{m}_r) \\ &= i\hbar \sum_r \mathbf{m}_r = i\hbar\mathbf{M}.\end{aligned} \tag{29}$$

这个結果与(28)式有同一形式，所以，任意数目的粒子的总角动量的各分量所满足的对易关系，与单个粒子的角动量各分量的对易关系相同。

令 A_x, A_y, A_z 代表任意一个粒子的三个坐标，或者是代表一个粒子的动量的三个分量。 这些 A 将与其他粒子的角动量对易，因之，从(23)，(24)，(25)以及(26)各式得

$$[M_z, A_x] = A_y, \ [M_z, A_y] = -A_x, \ [M_z, A_z] = 0. \tag{30}$$

如果 B_x, B_y, B_z 是另一組三个量，代表一个粒子的坐标或动量分量，它們将满足与(30)式类似的关系。 这时我們有

$$\begin{aligned}&[M_z, A_xB_x + A_yB_y + A_zB_z] \\ &= [M_z, A_x]B_x + A_x[M_z, B_x] + [M_z, A_y]B_y + A_y[M_z, B_y] \\ &= A_yB_x + A_xB_y - A_xB_y - A_yB_x \\ &= 0.\end{aligned}$$

这样，标量积 $A_xB_x + A_yB_y + A_zB_z$ 与 M_z 对易，类似地也与 M_x 及 M_y 对易。 引进矢量乘积

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \mathbf{C},$$

或即

$$A_yB_z - A_zB_y = C_x, \quad A_zB_x - A_xB_z = C_y,$$
$$A_xB_y - A_yB_x = C_z.$$

我們有

$$[M_z, C_x] = -A_xB_z + A_zB_x = C_y,$$

同样地有

$$[M_z,\ C_y] = -C_x,\ [M_z,\ C_z] = 0.$$

这些方程又是(30)式的形式，其中用 **C** 代替了 **A**. 从这个工作我們能得出結論，形如(30)式的方程，对我們能从力学变量組成的任意矢量的三个分量，都是成立的，并且任意的标量乘积与 **M** 对易.

我們可以引进对原点的旋轉算符 R，其方法与 §25 对位移引进綫性算符 D 所用的方法相同. 取一个繞 z 軸的旋轉，旋轉的角度为 $\delta\phi$，并使 $\delta\phi$ 为无穷小，与 §25 的(64)式相应，我們可以得到綫性算符

$$\lim_{\delta\phi\to 0}(R-1)/\delta\phi,$$

我們将称此算符为繞 z 軸的旋轉算符，并以 r_z 表示之. 与位移算符相似，r_z 是純虛綫性算符，并且是未完全决定的，含有任意的相加純虛数. 与 §25 的(66)式相应，由繞 z 軸旋轉一个小角 $\delta\phi$ 引起的任意力学变量 v 的变化，在 $\delta\phi$ 的一級近似下，为

$$\delta\phi(r_z v - v r_z). \tag{31}$$

現在将繞 z 軸的旋轉（右旋）$\delta\phi$ 作用于全部测量仪器，在矢量的三个分量 A_x, A_y, A_z 上所产生的变化分别为 $\delta\phi A_y$, $-\delta\phi A_x$, 0，而任意的标量則不因此旋轉而变化. 令这些变化与(31)式相等，我們发現

$$r_z A_x - A_x r_z = A_y,\ r_z A_y - A_y r_z = -A_x,$$
$$r_z A_z - A_z r_z = 0,$$

而且 r_z 与任意的标量对易. 把这些結果与(30)式比較，我們看到 $i\hbar r_z$ 滿足的对易关系与 M_z 相同. 它們的差 $M_z - i\hbar r_z$ 与所有的力学变量对易，因而一定是一个数. 这个数必然是实数，因为 M_z 与 $i\hbar r_z$ 都是实的，只要适当地选择 r_z 的可任意加上去的純虛数，就可以使这个数为零. 这样，我們得下列結果：

$$M_z = i\hbar r_z, \tag{32}$$

对 M_x 与 M_y，有类似的方程成立. 它們是 §25 的(69)式的类比. 这样，总角动量与旋轉算符的关系与总动量与位移算符的关系相同. 这个結論对任意点作为原点都是有效的.

上述推理也适用于由許多粒子的运动所引起的角动量，后者对每一粒子是按（22）式定义的．在原子理論中出現另一种角动量，即自旋角动量．通常把前一种角动量称为軌道角动量，以与之相区别．一个粒子的自旋角动量可以想象为由于粒子的某种內部运动而引起的，所以，它所联系的自由度与那些描述粒子整体运动的自由度不同，因而，描述自旋的力学变量一定与 x，y，z，p_x，p_y 及 p_z 对易．在經典力学中，沒有什么事物与自旋很密切地相对应，所以經典类比的方法不适用于研究自旋．但是，我們簡单地从下列假定出发，就能建立起自旋的理論，即假定自旋角动量的各分量与旋轉算符的关系，与我們上面所述的軌道角动量各分量与旋轉算符的关系相同，也卽是在(32)式中取 M_z 作为一个粒子的自旋角动量的 z 分量，并用 r_z 作为与此粒子的自旋态相关的繞 z 軸的旋轉算符，此式仍旧成立．用了这一假定，自旋角动量 $\mathbf{M}$ 与相关于自旋的任意矢量 $\mathbf{A}$ 之間的对易关系，一定是有(30)式的标准形式．因之，如取 $\mathbf{A}$ 为自旋角动量本身，我們得出，方程(29)对于自旋也同样成立．現在我們得到，方程(29)相当普遍地成立，卽对自旋与軌道角动量之任意和也成立；(30)式也将普遍地成立，卽当 $\mathbf{M}$ 为全部自旋与軌道角动量，$\mathbf{A}$ 为力学变量的任意矢量时，它也成立；而且，角动量与旋轉算符的关系也总是成立的．

作为这种关系的直接結果，我們可以推导出角动量守恆定律．对一孤立系統，哈密頓量一定不因繞原点的任何旋轉而变，换言之，它一定是一个标量，所以它一定与繞原点的角动量对易．因此角动量是运动恆量．对此推理而言，原点可以为任何点．

作为第二个直接結果，我們可推导得，总角动量为零的态是球对称的．这个态相应于一个右矢，例如 $|S\rangle$，满足

$$M_x|S\rangle = M_y|S\rangle = M_z|S\rangle = 0,$$

因之，

$$r_x|S\rangle = r_y|S\rangle = r_z|S\rangle = 0.$$

此式表明，在无穷小旋轉时右矢 $|S\rangle$ 不变，因此，在有限旋轉时它也不变，因为有限旋轉能由許多无穷小旋轉构成．因此这个态是球

对称的. 它的逆定理: 球对称态的总角动量为零,也是对的,虽然其証明不这样简单. 球对称态相应于一个方向不因任意旋轉而变的右矢$|S\rangle$. 因此, 由旋轉算符 r_x, r_y 或 r_z 所引起的$|S\rangle$的变化,一定是$|S\rangle$乘以数,例如,

$$r_x|S\rangle = c_x|S\rangle, \; r_y|S\rangle = c_y|S\rangle, \; r_z|S\rangle = c_z|S\rangle,$$

其中 c 都是数. 这就給出

$$M_x|S\rangle = i\hbar c_x|S\rangle, \; M_y|S\rangle = i\hbar c_y|S\rangle,$$
$$M_z|S\rangle = i\hbar c_z|S\rangle. \tag{33}$$

这些方程与 M_x, M_y, M_z 的对易关系(29)式不能协調, 除非 $c_x = c_y = c_z = 0$. 在此情况下,这个态就有为零的总角动量. 在(33)式中,我們有一个右矢同时是三个不对易的綫性算符 M_x, M_y, M_z 的本征右矢的例子,而这一点只有这三个本値全为零才是可能的.

§36. 角动量的性质

角动量有某些普遍性质, 只要从其三个分量的对易关系就可推导出. 这些性质一定对自旋与軌道角动量同样地成立. 令 m_x, m_y, m_z 为一个角动量的三个分量,并引进量 β 定义为

$$\beta = m_x^2 + m_y^2 + m_z^2.$$

因为 β 是一个标量, 它一定与 m_x, m_y 及 m_z 对易. 让我們假定有一力学系統, m_x, m_y, m_z 是这个系統仅有的力学变量. 这样, β 与全部力学变量对易, 它一定是一个数. 我們可以沿着大体上与§34 研究諧振子的路綫相同的路綫去研究这个力学系統.

令

$$m_x - im_y = \eta,$$

从对易关系(27)式,我們得到

$$\begin{aligned}\bar{\eta}\eta = (m_x + im_y)(m_x - im_y) &= m_x^2 + m_y^2 - i(m_xm_y - m_ym_x)\\ &= \beta^2 - m_z^2 + \hbar m_z,\end{aligned} \tag{34}$$

同样地

$$\eta\bar{\eta} = \beta^2 - m_z^2 - \hbar m_z, \tag{35}$$

因此

$$\bar{\eta}\eta - \eta\bar{\eta} = 2\hbar m_z. \tag{36}$$

还有

$$m_z\eta - \eta m_z = i\hbar m_y - \hbar m_x = -\hbar\eta. \tag{37}$$

我們假定角动量的分量是可观察量，这样 m_z 就有本征値. 令 m_z' 是本征値之一，$|m_z'\rangle$为一属于 m_z' 的本征右矢，从(34)式得

$$\langle m_z'|\bar{\eta}\eta|m_z'\rangle = \langle m_z'|\beta - m_z^2 + \hbar m_z|m_z'\rangle =$$
$$= (\beta - m_z'^2 + \hbar m_z')\langle m_z'|m_z'\rangle.$$

这里左边是右矢 $\eta|m_z'\rangle$的长度的平方，因而大于或等于零，等于零的情况必須而且只須 $\eta|m'\rangle = 0$. 因之

$$\beta - m_z'^2 + \hbar m_z' \geqslant 0,$$

或即

$$\beta + \frac{1}{4}\hbar^2 \geqslant \left(m_z' - \frac{1}{2}\hbar\right)^2. \tag{38}$$

因此

$$\beta + \frac{1}{4}\hbar^2 \geqslant 0.$$

用下式定义数 k:

$$\left(k + \frac{1}{2}\hbar\right) = \left(\beta + \frac{1}{4}\hbar^2\right)^{\frac{1}{2}} =$$
$$= \left(m_x^2 + m_y^2 + m_z^2 + \frac{1}{4}\hbar^2\right)^{\frac{1}{2}}, \tag{39}$$

所以 $k \geqslant -\frac{1}{2}\hbar$,不等式(38)变成

$$k + \frac{1}{2}\hbar \geqslant |m_z' - \frac{1}{2}\hbar|,$$

或即

$$k + \hbar \geqslant m_z' \geqslant -k, \tag{40}$$

出現相等的情况必須而且只須 $\eta|m_z'\rangle = 0$. 同样地从(35)式得

$$\langle m_z'|\eta\bar{\eta}|m_z'\rangle = (\beta - m_z'^2 - \hbar m_z')\langle m_z'|m_z'\rangle,$$

这表明

$$\beta - m_z'^2 - \hbar m_z' \geqslant 0,$$

或即

$$k \geqslant m_z' \geqslant -k - \hbar,$$

其中有一个等式出现，必須而且只須 $\bar{\eta}|m_z'\rangle = 0$. 这个結果与(40)式合在一起，表明 $k \geqslant 0$，并且

$$k \geqslant m_z' \geqslant -k, \tag{41}$$

其中如果 $\bar{\eta}|m_z'\rangle = 0$，則 $m_z' = k$；如果 $\eta|m_z'\rangle = 0$，則 $m_z' = -k$.

从(37)式得

$$m_z\eta|m_z'\rangle = (\eta m_z - \hbar\eta)|m_z'\rangle = (m_z' - \hbar)\eta|m_z'\rangle.$$

如果 $m_z' \neq -k$，$\eta|m_z'\rangle$ 就不是零，而 $\eta|m_z'\rangle$ 就是 m_z 的一个本征右矢，属于本征值 $m_z' - \hbar$. 同样地，如 $m_z' - \hbar \neq -k$，$m_z' - 2\hbar$ 是 m_z 的另一本征值，以此类推. 按此方法，我們得到一系列本征值：m_z'，$m_z' - \hbar$，$m_z' - 2\hbar$，$\cdots$，从(41)看出，这一系列一定要有一个結束，而且它仅能結束于值 $-k$. 再者，从方程(37)的共軛复量得到

$$m_z\bar{\eta}|m_z'\rangle = (\bar{\eta}m_z + \hbar\bar{\eta})|m_z'\rangle = (m_z' + \hbar)\bar{\eta}|m_z'\rangle,$$

这表明 $m_z + \hbar$ 是 m_z 的另一本征值，除非 $\bar{\eta}|m_z'\rangle = 0$，而在 $\bar{\eta}|m_z'\rangle = 0$ 的情况下，m_z' k. 按此方法继續下去，我們得到一系列本征值. m_z'，$m_z' + \hbar$，$m_z' + 2\hbar$， ，从(41)式看，此系列也一定要有一个結束，而且仅能結束于值 k. 我們从此得到結論，$2k$ 是 $\hbar$ 的整数倍，而 m_z 的本征值是

$$k,\ k - \hbar,\ k - 2\hbar,\ \cdots,\ -k + \hbar,\ -k. \tag{42}$$

从对称性得知，m_x 与 m_y 的本征值也是这些. 这些本征值全是 $\hbar$ 的整数倍或半奇数倍，按照 $2k$ 是 $\hbar$ 的偶数倍或奇数倍而定.

令 $|\max\rangle$ 为 m_z 的本征右矢，属于最大本征值 k，所以

$$\bar{\eta}|\max\rangle = 0, \tag{43}$$

再組成一系列右矢：

$$|\max\rangle,\ \eta|\max\rangle,\ \eta^2|\max\rangle,\ \cdots,\ \eta^{2k/\hbar}|\max\rangle. \tag{44}$$

这些右矢全是 m_z' 的本征右矢，分别属于(42)式中的一系列本征值. 右矢的集合(44)式是这样的，如果算符 η 作用于其中任一个就給出一个与此集合相关的右矢(η 作用于最后一个右矢給出結果为零)，而且从(36)式与(43)式，我們看到，$\bar{\eta}$ 作用于此集合中任一

右矢也給出与此集相关的右矢. 对我們現在所研究的系統說来, 全部力学变量都可以用 η 与 $\bar{\eta}$ 表示出来,所以,右矢的集合(44)式是一个完全集. 对 m_z 的本征值(42)式中的每一个,只有一个这样的右矢,所以,只 m_z 本身就組成了对易可观察量的完全集.

为了方便起見,把角动量矢量 $\mathbf{m}$ 的絕对值定义为(39)式給出的 k,而不用 $\beta^{\frac{1}{2}}$,因为 k 的可能值是

$$0, \frac{1}{2}\hbar, \hbar, \frac{3}{2}\hbar, 2\hbar, \cdots, \tag{45}$$

一直延續到无穷大,而 $\beta^{\frac{1}{2}}$ 的可能值則是更复杂的一組数.

对于在 m_x, m_y, m_z 以外还包含其他力学变量的力学系統, 就可能有些变量与 β 不能对易. 于是, β 就不再是一个数,而是一个一般的綫性算符. 这种情况出現于任意軌道角动量(22)式, 因为 x, y, z, p_x, p_y, 与 p_z 并不与 β 对易. 我們将假定 β 总是可观察量, 这时 k 可由(39)式定义, 其中取正的平方根函数, k 也是可观察量. 在一般情况下, 我們将把如此定义的 k 称为角动量矢量 $\mathbf{m}$ 的絕对值. 如果我們用对易可观察量 k 与 m_z 的共同本征右矢 $|k'm_z'\rangle$ 来代換 $|m_z'\rangle$,則我們用以得到 m_z 的本征值的上述分析仍然有效,从而得出結果为: k 的可能的本征值是(45)式的各数,而对于 k 的每一本征值 k', m_z 的本征值是(42)式的各数,其中用 k' 代換 k. 这里我們有以前未曾遇到的一种現象的一个例子,这种現象即是,有两个对易可观察量,其中一个的本征值要决定于我們給另一个指定的本征值. 这种現象可以理解为, 这两个可观察量不是完全互不相关的,而是部分地互为函数的. 屬于本征值 k' 与 m_z' 的 k 与 m_z 的独立的共同本征右矢的个数一定与 m_z' 无关, 因为对每一独立的 $|k'm_z'\rangle$,我們对系列(42)中的任意的 m_z'', 都能够得到一个独立的 $|k'm_z''\rangle$,办法是用 η 或 $\bar{\eta}$ 的适当冪来乘 $|k'm_z'\rangle$.

作为一个例子, 設我們来研究有两个角动量 $\mathbf{m}_1$ 与 $\mathbf{m}_2$ 的力学系統, $\mathbf{m}_1$ 与 $\mathbf{m}_2$ 相互对易. 如果沒有其他力学变量, 則所有的力学变量与 $\mathbf{m}_1$ 与 $\mathbf{m}_2$ 的絕对值 k_1 与 k_2 对易,所以 k_1 与 k_2 是数. 但是, 合成角动量 $\mathbf{M}=\mathbf{m}_1+\mathbf{m}_2$ 的絕对值 K 不是一个数(它与 $\mathbf{m}_1$ 与

$\mathbf{m}_2$ 的各分量不能对易)，算出 K 的本征值是有意义的．做到这一点的最簡单方法是計算独立右矢的数目．m_{1z} 与 m_{2z} 有一个独立的共同本征右矢属于任意的本征值 m'_{1z} 与 m'_{2z}，而 m'_{1z} 可取 k_1, $k_1-\hbar$, $k_1-2\hbar$, $\cdots$, $-k_1$ 中的任一值，m'_{2z} 可取 k_2, $k_2-\hbar$, $k_2-2\hbar$, $\cdots$, $-k_2$ 中的任一值，而这个共同本征右矢也是 M_z 的本征右矢，属于本征值 $M'_z=m'_{1z}+m'_{2z}$．M'_z 的可能值因此是 k_1+k_2, $k_1+k_2-\hbar$, $k_1+k_2-2\hbar$, $\cdots$, $-k_1-k_2$，它們之中每一个出現的次数按下列方案給出(我們为了明确起見，假定 $k_1\geqslant k_2$)，

$$\left.\begin{array}{l}k_1+k_2, k_1+k_2-\hbar, k_1+k_2-2\hbar, \cdots, k_1-k_2, k_1-k_2-\hbar, \quad \cdots\\ \quad 1, \qquad 2, \qquad\qquad 3, \qquad\qquad \cdots\ 2k_2+1, \qquad 2k_2+1, \qquad \cdots\\ \qquad\qquad \cdots -k_1+k_2, \ -k_1+k_2-\hbar, \ \cdots, \ -k_1-k_2\\ \qquad\qquad \cdots\ \ 2k_2+1, \qquad 2k_2, \qquad \cdots, \qquad 1.\end{array}\right\}\tag{46}$$

現在 K 的每一本征值 K' 与 M_z 的本征值 $K', K'-\hbar, K'-2\hbar, \cdots, -K'$ 相联系，对它們之中的每一个，K 与 M_z 独立的共同本征右矢的数目也是一个．属于任意本征值 M'_z 的独立本征右矢的总数是一样的，不管我們把它們取作为 m_{1z} 与 m_{2z} 的共同本征右矢，或者取作为 K 与 M 的共同本征右矢，亦即此数目总是由方案(46)式給出的．由此得出，K 的本征值为

$$k_1+k_2,\ k_1+k_2-\hbar,\ k_1+k_2-2\hbar,\ \cdots,\ k_1-k_2,\tag{47}$$

而且对 K 的这些本征值中的每一个，以及与之一起出現的 M_z 的一个本征值，K 与 M_z 的独立共同本征右矢只有一个．

应当提到旋轉对角动量变量的本征右矢的作用．取任意力学系統的总角动量的 z 分量的任意本征右矢 $|M'_z\rangle$，并且对它施加一个繞 z 軸旋轉 $\delta\phi$ 角的小旋轉．它将变成

$$(1+\delta\phi r_z)|M'_z\rangle=(1-i\delta\phi M_z/\hbar)|M'_z\rangle,$$

这里用了(32)式．此式等于

$$(1-i\delta\phi M'_z/\hbar)|M'_z\rangle=e^{-i\delta\phi M'_z/\hbar}|M'_z\rangle,$$

这里取 $\delta\phi$ 的一級近似．这样，$|M'_z\rangle$ 被乘上了数值因子 $e^{-i\delta\phi M'_z/\hbar}$．用一系列这样的小旋轉相継作用，我們发現，繞 z 軸的旋轉角为 ϕ 的有限旋轉的作用引起 $|M'_z\rangle$ 被乘上 $e^{-i\phi M'_z/\hbar}$．令 $\phi=2\pi$，我們发現，

繞 z 軸一周的作用是，如果本征值 M'_z 是 $\hbar$ 的整数倍，则 $|M'_z\rangle$ 不变；如果本征值 M'_z 是 $\hbar$ 的半奇数倍，则 $|M'_z\rangle$ 变一符号．現在来考慮总角动量的絕对值 K 的本征右矢 $|K'\rangle$． 如果本征值 K' 是 $\hbar$ 的整数倍，则 M_z 的可能的本征值全是 $\hbar$ 的整数倍，繞 z 軸旋轉一周的作用一定使 $|K'\rangle$ 不变．相反地，如果 K' 是 $\hbar$ 的半奇数倍，则 M_z 的可能的本征值全是 $\hbar$ 的半奇数倍，旋轉一周一定改变 $|K'\rangle$ 的符号．根据对称性，繞任意軸旋轉一周的作用对 $|K'\rangle$ 的效果一定是与繞 z 軸旋轉一周的作用相同．因此，我們得到普遍的結果：繞任意軸旋轉一周的作用使一个右矢不变，或者变一符号，按照这个右矢所属的总角动量絕对值的本征值是 $\hbar$ 的整数倍还是半奇数倍而定．当然，在这样旋轉一周时，态总是不变的，因为相应于它的右矢改变符号时，态是不变的．

对只含軌道角动量的力学系統，繞一軸旋轉一周肯定不会使右矢改变，因为我們能建立薛定諤表象，使所有粒子的坐标为对角的，右矢的薛定諤表示式在旋轉一周时将回到它原来的值．由此得出，軌道角动量的絕对值的本征值总是 $\hbar$ 的整数倍．軌道角动量的分量的本征值也总是 $\hbar$ 的整数倍．对于自旋角动量，薛定諤表象不存在，两种本征值都是可能的．

§ 37. 电子的自旋

电子有自旋，其絕对值为 $\frac{1}{2}\hbar$，某些其他基本粒子（质子，中子）也是如此．这一点是从实驗中发現的，同时也有理論上的理由表明，自旋值为 1/2 是比任何其他值更基本，甚至比自旋值为零还要基本一些（参看第十一章）．因此研究这个特定的自旋是特别重要的。

为了研究絕对值为 $\frac{1}{2}\hbar$ 的角动量 $\mathbf{m}$，方便的办法是令

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}. \tag{48}$$

从(27)得知，矢量 $\boldsymbol{\sigma}$ 的分量满足

$$\left.\begin{aligned} \sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y &= 2i\sigma_x, \\ \sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z &= 2i\sigma_y, \\ \sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x &= 2i\sigma_z. \end{aligned}\right\} \tag{49}$$

m_z 的本征值为 $\frac{1}{2}\hbar$ 与 $-\frac{1}{2}\hbar$，所以 σ_z 的本征值是 $+1$ 与 -1，而 σ_z^2 只有一个本征值 1. 由此得出，σ_z^2 一定等于 1，对 σ_x^2 与 σ_y^2，也是一样，即

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1. \tag{50}$$

我們能够得到(49)式与(50)式的更簡单形式，方法是用某些直接的不对易代数．从(50)式得

$$\sigma_y^2\sigma_z - \sigma_z\sigma_y^2 = 0,$$

或即

$$\sigma_y(\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y) + (\sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y)\sigma_y = 0,$$

即

$$\sigma_y\sigma_x + \sigma_x\sigma_y = 0,$$

此式中用了方程(49)中的第一式．这式的意思即是 $\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x$. 两个力学变量或綫性算符，如果是象这样，除了一个負号就滿足乘法的对易律，就称为是**反对易的**．这样，σ_x 与 σ_y 反对易．从对称性得知，σ_x, σ_y, σ_z 这三个力学变量中的每一个一定与另外任意一个反对易．現在方程(49)可以写成

$$\left.\begin{aligned} \sigma_y\sigma_z = i\sigma_x &= -\sigma_z\sigma_y, \\ \sigma_z\sigma_x = i\sigma_y &= -\sigma_x\sigma_z, \\ \sigma_x\sigma_y = i\sigma_z &= -\sigma_y\sigma_x, \end{aligned}\right\} \tag{51}$$

并且从(50)式也可得

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = i. \tag{52}$$

方程(50)，(51)，(52)是描述絕对值为$\frac{1}{2}\hbar$的自旋的各自旋变量 σ 所滿足的基本方程．

让我們来建立各 σ 的矩陣表示式，設我們取 σ_z 为对角的．如果在我們的力学系統中除了各 m 或各 σ 以外，沒有別的独立的力学变量，那么，只 σ_z 本身就可以組成对易可观察量的完全集，因为

(50)与(51)式的形式使我們不能从 σ_x, σ_y 与 σ_z 中找出任何新的与 σ_z 对易的力学变量. 表示 σ_z 的矩陣的对角元是 σ_z 的本征值 $+1$ 与 -1, 此矩陣本身就是

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

令 σ_x 的表示式为

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{pmatrix}.$$

这个矩陣一定是厄米的,所以 a_1 与 a_4 一定是实数,而 a_2 与 a_3 是共軛复数. 方程 $\sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z$ 給出

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ -a_3 & -a_4 \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} a_1 & -a_2 \\ a_3 & -a_4 \end{pmatrix},$$

所以 $a_1 = a_4 = 0$, 因而 σ_x 由下列形式的矩陣表示:

$$\begin{pmatrix} 0 & a_2 \\ a_3 & 0 \end{pmatrix}.$$

現在方程 $\sigma_x^2 = 1$ 表明, $a_2a_3 = 1$. 因此, a_2 与 a_3 旣是共軛复数, 必然分别取 $e^{i\alpha}$ 与 $e^{-i\alpha}$ 的形式,其中 α 是实数, 所以, σ_x 由下列形式的矩陣表示:

$$\begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix}.$$

同样可以表明, σ_y 也由同一形式的矩陣表示. σ_z 是对角的这一条件并未完全确定这一表象,用适当选定此表象中的相因子的方法, 我們能使 σ_x 的表示式成为矩陣

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

在这时, σ_y 的表示式就由方程 $\sigma_y = i\sigma_x\sigma_z$ 决定了. 这样,我們最后得到三个矩陣为

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{53}$$

它們分别地代表 σ_x, σ_y 与 σ_z, 这些矩陣滿足全部代数方程(49), (50), (51)与(52)各式. 在方向余弦 l, m, n 所确定的任意方向

上，矢量 σ 的分量，即 $l\sigma_x + m\sigma_y + n\sigma_z$ 的表示式为

$$\begin{pmatrix} n & l-im \\ l+im & -n \end{pmatrix}. \tag{54}$$

右矢的表示式将只包含两个数，分别与 σ_z' 的两个值 $+1$ 与 -1 相对应．这两个数組成变量 σ_z' 的一个函数，变量 σ_z' 的变域仅仅包括两点，即 $+1$ 与 -1．σ_z 有值为 1 的态由函数 $f_\alpha(\sigma_z')$ 代表，它由两个数 1 与 0 組成，而 σ_z 有值为 -1 的态由函数 $f_\beta(\sigma_z')$ 代表，它由两个数 0 与 1 組成．变量 σ_z' 的任意函数，即由两个数組成的任意数对，都能够表示为这两个函数的綫性組合．因此，任意的态可由 σ_z 分别等于 $+1$ 和 -1 的两个态迭加而得．例如，由(54)式代表的 σ 在方向 l, m, n 上的分量有值为 1 的态，就由满足下式的两个数 a 与 b 所表示：

$$\begin{pmatrix} n & l-im \\ l+im & -n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

或即

$$na + (l-im)b = a,$$
$$(l+im)a - nb = b,$$

因此

$$\frac{a}{b} = \frac{l-im}{1-n} = \frac{1+n}{l+im}.$$

这个态可以看为 σ_z 等于 $+1$ 与 -1 的两个态的迭加，在此迭加过程中的相对权重为

$$|a|^2 : |b|^2 = |l-im|^2 : (1-n)^2 = (1+n) : (1-n). \tag{55}$$

为了完全描述一个电子(或自旋为 $\frac{1}{2}\hbar$ 的其他粒子)，除了直角坐标 x, y, z 与动量 p_x, p_y, p_z 而外，我們还需要自旋力学变量 σ，它与自旋角动量的关系由(48)式給出．自旋力学变量与这些坐标与动量对易．这样，由单一电子所組成的系統的一个对易可观察量的完全集将是 x, y, z, σ_z．在一个使 x, y, z, σ_z 为对角的表象中，任意态的表示式是四个变量 x', y', z', σ_z' 的函数．因为

σ'_z的变域只由$+1$与-1两点組成，这个四变量的函数与两个三变量的函数是相同的，即与下列两个函数相同：

$$\begin{aligned}\langle x'\, y'\, z'|\rangle_+ &= \langle x',\ y',\ z',\ +1|\rangle, \\ \langle x'y'z'|\rangle_- &= \langle x',\ y',\ z',\ -1|\rangle.\end{aligned} \tag{56}$$

因此，自旋的存在可以看成是在态的表示式中引进了一个新变量，也可以看成是給这个表示式两个分量.

§ 38. 在有心力場中的运动

原子是由一个質量大的带正电荷的核以及在其周围运动的一些电子組成的. 这些电子受核的吸引力及它們之間的相互排斥力的作用. 这个力学系統的严格处理是一个非常困难的数学問題. 但是，我們能用下述粗略的近似方法对此系統的主要特点有所了解，即認为每个电子是独立地在某有心力場中运动，此有心力場是原子核（假定为静止的）的力加上由其他电子而来的力的某种平均. 因此，我們現在的問題，即粒子在有心力場运动的問題，形成原子理論中的一个基础.

令x, y, z是粒子的直角坐标，这个坐标是联系于一个以力的中心作原点的坐标軸系統的，并令p_x, p_y, p_z为相应的动量分量. 在非相对論近似下，哈密頓量将是下式

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V, \tag{57}$$

其中V是势能，仅是$(x^2 + y^2 + z^2)$的函数. 为发展此理論，引进极坐标力学变量是方便的. 首先，我們引进矢径r，定义为如下的正平方根：

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}.$$

它的本征值从0直到∞. 如果我們計算它与p_x, p_y, p_z的泊松括号，则借助于§22的(32)式，我們得

$$[r, p_x] = \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{x}{r},\quad [r, p_y] = \frac{y}{r},\quad [r, p_z] = \frac{z}{r},$$

这是与在經典理論中的情况一致的. 我們再引进力学变量p_r，定

义为

$$p_r = r^{-1}(xp_x + yp_y + zp_z). \tag{58}$$

它与 r 的泊松括号由下式給出:

$$\begin{aligned} r[r, p_r] &= [r, rp_r] = [r, xp_x + yp_y + zp_z] \\ &= x[r, p_x] + y[r, p_y] + z[r, p_z] \\ &= x\cdot x/r + y\cdot y/r + z\cdot z/r = r, \end{aligned}$$

因而

$$[r, p_r] = 1,$$

或即

$$rp_r - p_r r = i\hbar,$$

r 与 p_r 之間的对易关系恰是正則坐标与正則动量之間的对易关系,即 §22 的方程(10). 这一点使 p_r 象是与坐标 r 共軛的动量,但它不是正好等于这个动量,因为它不是实的,它的共軛复量是

$$\begin{aligned} \bar{p}_r &= (p_x x + p_y y + p_z z)r^{-1} = (xp_x + yp_y + zp_z - 3i\hbar)r^{-1} \\ &= (rp_r - 3i\hbar)r^{-1} = p_r - 2i\hbar r^{-1}. \end{aligned} \tag{59}$$

因此, $p_r - i\hbar r^{-1}$ 是实的,并且是 r 的眞正共軛动量.

粒子对于原点的角动量 $\mathbf{m}$ 由 (22) 式給出, 而其絕对值 k 由 (39)式給出. 由于 r 与 p_r 是标量,它們与 $\mathbf{m}$ 对易, 也从而与 k 对易.

我們能用 r, p_r 与 k 表示出哈密頓量. 如果用 $\sum_{xyz}$ 代表对下标 x, y, z 的輪換求和,則我們有

$$\begin{aligned} k(k+\hbar) &= \sum_{xyz} m_z^2 = \sum_{xyz}(xp_y - yp_x)^2 \\ &= \sum_{xyz}(xp_y xp_y + yp_x yp_x - xp_y yp_x - yp_x xp_y) \\ &= \sum_{xyz}(x^2p_y^2 + y^2p_x^2 - xp_x p_y y - yp_y p_x x + x^2p_x^2 - xp_x p_x x - 2i\hbar xp_x) \\ &= (x^2+y^2+z^2)(p_x^2+p_y^2+p_z^2) - (xp_x + yp_y + zp_z)\times \\ &\quad \times (p_x x + p_y y + p_z z + 2i\hbar) \\ &= r^2(p_x^2+p_y^2+p_z^2) - rp_r(\bar{p}_r r + 2i\hbar) \\ &= r^2(p_x^2+p_y^2+p_z^2) - rp_r^2 r, \end{aligned}$$

这是由(59)式而得的. 因此,

$$H=\frac{1}{2m}\left(\frac{1}{r}p_r^2r+\frac{k(k+\hbar)}{r^2}\right)+V. \qquad (60)$$

H的这种形式使得 k 不仅与H对易(这是必然的,因为 k 是运动恆量),而且还与出現在H中的每一个力学变量,即 r, p_r 以及只是 r 的函数的V对易. 因之,可能有一个簡单的处理方法,即是我們可以研究 k 的属于本征值 k' 的本征态, 然后我們在(60)式中以k'代替 k, 而得到一个只有一个自由度 r 的問題.

讓我們引进一个使 x, y, z 为对角的薛定諤表象. 这时 p_x, p_y, p_z 分别等于算符$-i\hbar\partial/\partial x$, $-i\hbar\partial/\partial y$, $-i\hbar\partial/\partial z$. 一个态就由滿足 §27 的薛定諤波动方程 (7) 的波函数 $\psi(xyzt)$ 来表示, 采用(57)式給出的H,薛定諤波动方程現在成为

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V\right\}\psi. \qquad (61)$$

我們可用下列方程从直角坐标 x, y, z 变换到极坐标 r, θ, ϕ,

$$\left.\begin{aligned}x&=r\sin\theta\cos\phi,\\y&=r\sin\theta\sin\phi,\\z&=r\cos\theta.\end{aligned}\right\} \qquad (62)$$

我們也可以用为极坐标表示波函数, 这样它就成为 $\psi(r\theta\phi t)$. 方程(62)給出算符的方程

$$\frac{\partial}{\partial r}=\frac{\partial x}{\partial r}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial y}{\partial r}\frac{\partial}{\partial y}+\frac{\partial z}{\partial r}\frac{\partial}{\partial z}=$$

$$=\frac{x}{r}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{y}{r}\frac{\partial}{\partial y}+\frac{z}{r}\frac{\partial}{\partial z},$$

与(58)式比較之下,此式表明 $p_r=-i\hbar\partial/\partial r$. 因此,用(60)式作为$H$,薛定諤波动方程成为

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{k(k+\hbar)}{\hbar^2r^2}\right)+V\right\}\psi. \qquad (63)$$

这里 k 是某一綫性算符,由于它与 r 及 $\dfrac{\partial}{\partial r}$ 对易, 它只能含 θ, ϕ,

$\frac{\partial}{\partial\theta}$ 与 $\frac{\partial}{\partial\phi}$. 从由(39)式得出的公式

$$k(k+\hbar)=m_x^2+m_y^2+m_z^2 \tag{64}$$

与(62)式,我們能求出 $k(k+\hbar)$ 的形式,我們发現

$$\frac{k(k+\hbar)}{\hbar^2}=-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}. \tag{65}$$

这个算符在数学物理中是熟知的,它的本征函数称为球諧函数,它的本征值是 $n(n+1)$,其中 n 是整数. 因此,球諧函数的理論提供了另一方法,来証明 k 的本征值是 $\hbar$ 的整数倍.

对于属于本征值 $n\hbar$ (n 是不負的整数)的 k 的一个本征态,波函数如下式:

$$\psi=r^{-1}\chi(rt)S_n(\theta\phi), \tag{66}$$

其中 $S_n(\theta\phi)$ 满足

$$k(k+\hbar)S_n(\theta\phi)=n(n+1)\hbar^2S_n(\theta\phi), \tag{67}$$

即是从(65)式知, S_n 是 n 阶的球諧函数. 把因子 r^{-1} 放进(66)式中是为了方便. 把(66)式代入(63)式中,我們得到 χ 的方程为

$$i\hbar\frac{\partial\chi}{\partial t}=\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{n(n+1)}{r^2}\right)+V\right\}\chi. \tag{68}$$

如果此态是属于能量值 H' 的定态, χ 将取下列形式:

$$\chi(rt)=\chi_0(r)e^{-iH't/\hbar},$$

而(68)式就簡化为

$$H'\chi_0=\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{n(n+1)}{r^2}\right)+V\right\}\chi_0. \tag{69}$$

这个方程可以用来决定系統的能級 H'. 每个給定的 n 决定(69)式的一个解 χ_0, 而对于每一个 χ_0 有$(2n+1)$个独立的状态,因为(67)式有$(2n+1)$个独立的解,相应于角动量的一个分量例如 m_z 所能取的$(2n+1)$个不同的值.

粒子处于体积元 $dx\,dy\,dz$ 中的几率正比于 $|\psi|^2dx\,dy\,dz$. 取 ψ 为(66)式,这就变为 $r^{-2}|\chi|^2|S_n|^2dx\,dy\,dz$. 那么,粒子处于 r 与 $r+dr$ 之間的球壳中的几率正比于 $|\chi|^2dr$. 現在变得清楚了的是,

在解方程(68)或(69)时，我們一定对函数 χ 在 $r=0$ 时加上一个边界条件，即是这个函数一定得使积分 $\int_0 |\chi|^2 dr$ 在原点收斂. 假定这个积分是不收斂的，波函数就会代表一个态，对此态粒子处于原点的机会是无穷大，这样一个态在物理上是不会容許的.

但是，从上述对几率的考虑而得的在 $r=0$ 时的边界条件不是充分严格的. 要得到一个更为严格的条件，可以去驗証由解极坐标中的波动方程(63)所得到的波函数的确满足直角坐标中的波动方程(61). 訃我們取 $V=0$ 的情况，这就是自由粒子的問題. 方程(61)应用于能量 $H'=0$ 的定态，得出

$$\nabla^2\psi = 0, \tag{70}$$

其中 ∇^2 代表拉普拉斯算符 $\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$，而方程(63)給出

$$\left(\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{k(k+\hbar)}{\hbar^2 r^2}\right)\psi = 0. \tag{71}$$

对 $k=0$ (71)式的一个解是 $\psi = r^{-1}$. 此式不满足(70)式，因为虽然 $\nabla^2 r^{-1}$ 对 r 的任意有限值均为零，但它对一个包含原点在內的体积的积分是 -4π (这一点可用高斯定理把这个体积分变换为面积分而驗証)，因之

$$\nabla^2 r^{-1} = -4\pi\delta(x)\delta(y)\delta(z). \tag{72}$$

因此，并不是(71)式的每一个解都給出(70)式的一个解，而且更普遍地，并不是(63)式的每一个解都是(61)式的一个解. 我們一定要对(63)式的解加上一个条件，即当 $r\to 0$ 时它应当不能与 r^{-1} 一样快地趋于无穷大，这是为了当把它代入(61)式时它不应在右边給出象(72)式右边那样的 δ 函数. 只有当方程(63)由这个条件补充时它才能与方程(61)等效. 这样，我們就有了边界条件，即当 $r\to 0$ 时，$r\psi\to 0$ 或 $\chi\to 0$.

在 $r=\infty$，波函数也有边界条件. 如果我們只关心于"閉合"态，即粒子不走向无穷远的那些态，則我們一定要限制到无穷大的积分 $\int^\infty |\chi(r)|^2 dr$ 是收斂的. 然而，这些閉合态并不是物理上容許的

全部的态，因为我們也能有一些态，其中粒子从无穷远来到，受有心力場散射后再走向无穷远．对这些态，波函数当 $r \to \infty$ 时保持为有限．我們将在第八章"碰撞問題"的标題下討論这种态．在任何情况下，当 $r \to \infty$ 时波函数一定不应趋于无穷大，否则它将代表沒有物理意义的态．

§39. 氫原子的能級

只要不考虑相对論力学和电子的自旋，上述分析就可以用于氫原子的問題．現在势能 V 是[1] $-e^2/r$，所以方程(69)变成

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2}-\frac{n(n+1)}{r^2}+\frac{2me^2}{\hbar^2}\frac{1}{r}\right\}\chi_0=-\frac{2mH'}{\hbar^2}\chi_0. \quad (73)$$

这个方程的彻底的探討已由薛定諤給出[2]．我們这里将用初等方法去求它的本征值 H'．

引入一个新的函数 $f(r)$ 是方便的，令

$$\chi_0=f(r)e^{-r/a}, \quad (74)$$

其中 a 是下列平方根中的一个：

$$a=\pm\sqrt{(-\hbar^2/2mH')}. \quad (75)$$

方程(73)現在变成

$$\left\{\frac{d^2}{dr^2}-\frac{2}{a}\frac{d}{dr}-\frac{n(n+1)}{r^2}+\frac{2me^2}{\hbar^2}\frac{1}{r}\right\}f(r)=0. \quad (76)$$

我們寻求这个方程的一个冪級数形式的解

$$f(r)=\sum_s c_s r^s, \quad (77)$$

其中相継的 s 值相差为 1，虽然这些值本身不必要是整数．在把(77)式代入(76)式后，我們得到

$$\sum_s c_s\{s(s-1)r^{s-2}-(2s/a)r^{s-1}-n(n+1)r^{s-2}+$$
$$+(2me^2/\hbar^2)r^{s-1}\}=0,$$

令 r^{s-2} 的系数等于零，此式給出相継的系数 c_s 之間的下述关系：

---

1) 这里的 e 代表电子电荷的负值，当然，与代表指数基的 e 不同．

2) Schrödinger, Ann, d. Physik, **79** (1926), 361.

$$c_s[s(s-1)-n(n+1)]=c_{s-1}[2(s-1)/a-2me^2/\hbar^2]. \quad (78)$$

在上节里我們看到,只有随 r 趋于 0 的那些本征函数 χ 是容許的,因此,从(74)式得知,$f(r)$也必須随 r 趋于零. 級数(77)式因此一定在 s 小的这一边中断,而最小的 s 值一定得大于零. 現在,最小的 s 値只可能是使(78)式 c_s 的系数为零的那些值,即 $n+1$ 与 $-n$,而这些值的第二个是負的或者是零. 因此,最小的 s 値必定是 $n+1$. 因为 n 总是整数,s 的値也全是整数. 級数(77)式一般地也会在 s 增大的一边延伸至无穷大.对于 s 的大值,按照(78)式,相継項的比为

$$\frac{c_s}{c_{s-1}}r=\frac{2r}{sa}.$$

因此,級数(77)总是收斂的,因为高次項之間的比与下列級数相同:

$$\sum_s \frac{1}{s!}\left(\frac{2r}{a}\right)^s, \quad (79)$$

而此級数是收斂的,其极限为 $e^{2r/a}$.

我們現在必須考察,我們的解 χ_0 在 r 的値大时如何变化. 我們必須区别开 H' 为正数与 H' 为負数的两种情况. 对負数的 H',(75)式給出的 a 是实数. 假定我們取 a 为正値,則当 $r\to\infty$ 时,級数(77)式的和将按照与級数(79)式的和一样的規則,即按照規則 $e^{2r/a}$ 趋于无穷大. 这样,从(74)式得知,χ_0 将按規則 $e^{r/a}$ 趋于无穷大,因而不代表物理上可能的态. 因此,一般地講,对負值的 H',(73)式沒有可容許的解. 但是,例外的情形是有的,即只要当級数(77)式在 s 大的一边中断,边界条件就完全滿足了. 这种社級数中断的条件是,在下标 $s-1$ 的值不小于它的最小値 $n+1$ 的某値时,(78)式中 c_{s-1} 的系数为零,这个条件与下面的条件相同,即对某一不小于 $n+1$ 的整数 s,

$$\frac{s}{a}-\frac{me^2}{\hbar^2}=0.$$

借助于(75)式,此条件变成

$$H'=-\frac{me^4}{2s^2\hbar^2}, \quad (80)$$

因而是对能級 H' 的一个条件. 由于 s 可以是任意正整数，公式(80)給出氫原子負能級的分立集. 这是与实驗相符合的. 对于这些能級中每一个(除最低能級 $s=1$ 以外)都有好几个独立态，因为 n 有好几个可能値，即 n 可以为小于 s 的任意正整数或零. 属于一个能級的态的这种多重性，是在上节所說由角动量分量的各可能値所引起的多重性之外出現的，后一种多重性在任意有心力場中都出現. 而 n 的多重性只在力服从反平方定律时才出現，而且即令这样，当我們考慮到相对論力学时，n 的多重性也将被消去，这一点将在第十一章中講到. 当 H' 满足(80)式时，(73)式的解 χ_0 当 $r\to\infty$ 时指数地趋于零，因而它代表閉合态(相当于玻尔理論中的椭圓軌道).

对 H' 的任意正値，由(75)式得出的 a 是純虛数. 当 r 大时級数(77)式与級数(79)式一样，現在(77)式有一个和，这个和当 $r\to\infty$ 时仍是有限的. 因此，由(74)式得出的 χ_0 現在当 $r\to\infty$ 时仍是有限的，因而将是(73)式的可容許解，它給出当 $r\to\infty$ 时按照規则 r^{-1} 趋于零的波函数 ψ. 因此，除了(80)式的負能級的分立集外，所有的正能級都是允許的. 正能級的态不是閉合的，因为对于这种态到无穷远的积分 $\int^{\infty}|\chi_0|^2dr$ 并不收斂(这些态相当于玻尔理論中的双曲綫軌道).

§40. 选择定則

如果一个力学系統处在某一定态，則只要它不受外来力的作用，它将保留在此定态不变. 但是，实际上任意原子系統时常受到外电磁場的作用，在其影响下，原子系統常是不再处于一个定态，而发生到另一态的跃迁. 关于这种跃迁的理論，将在 §44 与 §45 中发展. 这个理論的一个結果是，如果在包含这两个定态作为两个基态的海森伯表象中，系統的总电位移 $\mathbf{D}$ 的表示式內有关这两个态的矩陣元为零，那么，在电磁輻射的影响下不可能出現这两个态之間的跃迁，这一点是高度精确的. 現在对許多原子系統出現

的情况是，在海森伯表象中，**D** 的大多数矩陣元的确为零，因而就有对跃迁可能性的严格限制. 表示这些限制的規則就称为选择定則.

更詳細地应用 §44 与 §45 的理論，能够把选择定則的概念更精确化，按照这一理論，矢量 **D** 的不同的直角分量的矩陣元与电磁輻射的不同极化态相联系. 这种联系的性質就是，如果我們把矩陣元，或者宁可說是它們的实部，当成某些諧振子的振幅，这些諧振子与輻射場按照經典电动力学相互作用，那么我們就会得到这种联系.

为得到所有的选择定則，有一个一般方法如下. 計我們把在海森伯表象中为对角的那些运动恆量都称之为 α，而令 D 为 **D** 的分量之一. 我們必須得到一个联系 D 与 α 的代数方程，它不包含 D 与 α 以外的任何力学变量，而且它对 D 言是綫性的. 这样的方程形为

$$\sum_r f_r D g_r = 0, \tag{81}$$

其中 f_r 与 g_r 是只含 α 的函数. 如果将此方程用表示式表示，則給出

$$\sum_r f_r(\alpha')\langle\alpha'|D|\alpha''\rangle g_r(\alpha'') = 0,$$

或即

$$\langle\alpha'|D|\alpha''\rangle \sum_r f_r(\alpha')g_r(\alpha'') = 0,$$

这表明 $\langle\alpha'|D|\alpha''\rangle = 0$，除非有

$$\sum_r f_r(\alpha')g_r(\alpha'') = 0. \tag{82}$$

这最后的方程給出了为使 $\langle\alpha'|D|\alpha''\rangle$ 可能不为零所必需的 α' 与 α'' 之間的联系，这就組成了与 **D** 的分量 D 有关的选择定則.

我們在 §34 中关于諧振子的工作提供了选择定則的一个例子. 方程(8)具有(81)式的形式，用 $\bar{\eta}$ 作为 D，而 H 起 α 的作用，它表明 $\bar{\eta}$ 的矩陣元 $\langle H'|\bar{\eta}|H''\rangle$，除了满足 $H''-H' = \hbar\omega$ 的那些矩陣元以外全都为零. 这个結果的复数共軛是，η 的矩陣元 $\langle H'|\eta|H''\rangle$，除了满足 $H'' - H' = -\hbar\omega$ 的那些矩陣元以外，也全都为零. 由

于 q 是 $\eta-\bar{\eta}$ 乘以数值，它的矩阵元，除了 $H''-H'=\pm\hbar\omega$ 的那些矩阵元而外，全都是零。如果諧振子是带有电荷的，它的电位移 D 将与 q 成正比。选择定則这时就是，只有能量 H 改变一单个光子 $\hbar\omega$ 的跃迁方能实現。

現在我們对一个在有心力場中运动的电子的 m_z 与 k 求选择定則。在这里电位移的分量与直角坐标 x, y, z 成正比。首先取 m_z，我們有 m_z 与 z 对易，即

$$m_z z - z m_z = 0,$$

这就是所要求的形如(81)式的方程，它給出对电位移的 z 分量的选择定則

$$m_z' - m_z'' = 0.$$

又从方程(23)，我們有

$$[m_z, [m_z, x]] = [m_z, y] = -x,$$

或即

$$m_z^2 x - 2m_z x m_z + x m_z^2 - \hbar^2 x = 0.$$

它又是形如(81)式的公式，給出对电位移的 x 分量的选择定則

$$m_z'^2 - 2m_z' m_z'' + m_z''^2 - \hbar^2 = 0,$$

或即

$$(m_z' - m_z'' - \hbar)(m_z' - m_z'' + \hbar) = 0.$$

对 y 分量的选择定則是相同的。因此，我們对 m_z 的选择定則是：一个輻射，如其偏振相当于在 z 方向的电偶极矩，則在与之相联系的跃迁中，m_z' 不可能改变；而如偏振相当于在 x 方向或 y 方向上的电偶极矩，則在与之相联系的跃迁中，m_z 一定要增加或減少 $\hbar$。

我們可以更精确地决定 m_z' 增加或減少 $\hbar$ 的跃迁所联系的輻射的偏振态，办法是考虑 $x+iy$ 与 $x-iy$ 的矩陣元不为零的条件。我們有

$$[m_z, x+iy] = y - ix = -i(x+iy),$$

或即

$$m_z(x+iy) - (x+iy)(m_z+\hbar) = 0,$$

这又是形如(81)式的公式，它給出 $\langle m_z'|x+iy|m_z''\rangle$ 不为零的条件

为

$$m'_z - m''_z - \hbar = 0.$$

同样地$\langle m'_z|x - iy|m''_z\rangle$不为零的条件为

$$m'_z - m''_z + \hbar = 0.$$

因而

$$\langle m'_z|x - iy|m'_z - \hbar\rangle = 0,$$

或即

$$\langle m'_z|x|m'_z - \hbar\rangle = i\langle m'_z|y|m'_z - \hbar\rangle = (a + ib)e^{i\omega t},$$

a, b与ω都是实数. 此式的共軛复数是

$$\langle m'_z - \hbar|x|m'_z\rangle = -i\langle m'_z - \hbar|y|m'_z\rangle = (a - ib)e^{i\omega t}.$$

因此，决定 $m''_z = m'_z - \hbar$ 的跃迁所联系的輻射的偏振的矢量 $1/2\ \{\langle m'_z|\mathbf{D}|m'_z - \hbar\rangle + \langle m'_z - \hbar|\mathbf{D}|m'_z\rangle\}$,有下列三个分量:

$$\left.\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\{\langle m'_z|x|m'_z - \hbar\rangle + \langle m'_z - \hbar|x|m'_z\rangle\}\\
&\quad = \frac{1}{2}\{(a + ib)e^{i\omega t} + (a - ib)e^{-i\omega t}\} =\\
&\quad = a\cos\omega t - b\sin\omega t,\\
&\frac{1}{2}\{\langle m'_z|y|m'_z - \hbar\rangle + \langle m'_z - \hbar|y|m'_z\rangle\}\\
&\quad = \frac{1}{2}i\{-(a + ib)e^{i\omega t} + (a - ib)e^{-i\omega t}\} =\\
&\quad = a\sin\omega t + b\cos\omega t,\\
&\frac{1}{2}\{\langle m'_z|z|m'_z - \hbar\rangle + \langle m'_z - \hbar|z|m'_z\rangle\} = 0.
\end{aligned}\right\} \tag{83}$$

从这些分量的形式我們看出，所联系的輻射如在 z 方向运动就会是圓偏振的;如在 xy 平面上任意方向运动，則是在此平面上綫偏振的;如果在中間方向运动,則是椭圓偏振的. 在 z 方向运动的輻射的圓偏振方向是由 ω 是正或負而决定的，而这一点又决定于两个态$|m'_z\rangle$与$|m''_z\rangle = |m'_z - \hbar\rangle$中哪一个能量較大.

現在我們来决定 k 的选择定則. 我們有

$$[k(k + \hbar), z] = [m_x^2, z] + [m_y^2, z]$$

$$= -ym_x - m_xy + xm_y + m_yx$$
$$= 2(m_yx - m_xy + i\hbar z)$$
$$= 2(m_yx - ym_x) = 2(xm_y - m_xy).$$

相同地，

$$[k(k+\hbar), x] = 2(ym_z - m_yz),$$

以及

$$[k(k+\hbar), y] = 2(m_xz - xm_z).$$

因此

$$\begin{aligned}
&[k(k+\hbar), [k(k+\hbar), z]] \\
&\quad = 2[k(k+\hbar), m_yx - m_xy + i\hbar z] \\
&\quad = 2m_y[k(k+\hbar), x] - 2m_x[k(k+\hbar), y] + \\
&\qquad + 2i\hbar[k(k+\hbar), z] \\
&\quad = 4m_y(ym_z - m_yz) - 4m_x(m_xz - xm_z) + \\
&\qquad + 2\{k(k+\hbar)z - zk(k+\hbar)\} \\
&\quad = 4(m_xx + m_yy + m_zz)m_z - 4(m_x^2 + m_y^2 + m_z^2)z + \\
&\qquad + 2\{k(k+\hbar)z - zk(k+\hbar)\}.
\end{aligned}$$

从(22)式得

$$m_xx + m_yy + m_zz = 0, \tag{84}$$

因而有

$$[k(k+\hbar), [k(k+\hbar), z]] = -2\{k(k+\hbar)z + zk(k+\hbar)\},$$

这就給出

$$k^2(k+\hbar)^2z - 2k(k+\hbar)zk(k+\hbar) + zk^2(k+\hbar)^2 - - 2\hbar^2\{k(k+\hbar)z + zk(k+\hbar)\} = 0. \tag{85}$$

对 x 与 y 有类似的方程成立． 这些方程有所要求的(81)的形式，它們給出选择定则

$$k'^2(k'+\hbar)^2 - 2k'(k'+\hbar)k''(k''+\hbar) + + k''^2(k''+\hbar)^2 - 2\hbar^2k'(k'+\hbar) - 2\hbar^2k''(k''+\hbar) = 0,$$

此式簡化为

$$(k'+k''+2\hbar)(k'+k'')(k'-k''+\hbar)(k'-k''-\hbar) = 0.$$

只要这四个因子中有一个为零，在两个态 k' 与 k'' 之間就能出現跃迁.

这里第一个因子 $(k'+k''+2\hbar)$ 总不为零，因为 k 的本征值全是正数或零. 第二个因子 $(k'+k'')$ 只在 $k'=0$ 和 $k''=0$ 时才能为零. 但是对 k 有这样的值的两个态之間的跃迁是不能出現的，这是由于另外的选择定則，这一点可由下列推理看出. 如果两个态（分别用单撇与双撇标記）是能使 $k'=0$ 与 $k''=0$，那么从(41)式以及对 m_x 与 m_y 的相应結果可得，$m_x'=m_y'=m_z'=0$ 以及 $m_x''=m_y''=m_z''=0$. 此时，对 m_z 的选择定則表明，联系于这两个态的 x 与 y 的矩陣元必为零，因为 m_z 的值在此跃迁中不变；对 m_x 或 m_y 的同样选择定則表明，z 的矩陣元也为零. 这样，这两个态之間的跃迁不能出現. 我們对 k 的选择定則現在簡化为

$$(k'-k''+\hbar)(k'-k''-\hbar)=0,$$

它表明 k 一定增減 $\hbar$. 这个选择定則可以写成

$$k'^2-2k'k''+k''^2-\hbar^2=0,$$

并且由于这就是矩陣元 $\langle k'|z|k''\rangle$ 不为零的条件，我們得到方程

$$k^2z-2kzk+zk^2-\hbar^2z=0,$$

或即

$$[k,[k,z]]=-z, \tag{86}$$

这个結果用更直接方法是不容易得到的.

作为最后的例子，我們来求出一般原子系統的总角动量 $\mathbf{M}$ 的絕对值 K 的选择定則. 令 x, y, z 为某个电子的坐标. 我們必須去求 x, y 或 z 的 (K', K'') 矩陣元不为零的条件. 显然，这条件与 λ_1, λ_2 或 λ_3 的 (K', K'') 矩陣元不为零的条件相同，其中 $\lambda_1\,\lambda_2\,\lambda_3$ 是 x, y, z 的任意三个互不相关的綫性函数，其中的系数是数字，或者更普遍些講，是可与 K 对易的任意量，因而对于 K 可表示为对角的矩陣. 令

$$\lambda_0=M_xx+M_yy+M_zz,$$
$$\lambda_x=M_yz-M_zy-i\hbar x,$$
$$\lambda_y=M_zx-M_xz-i\hbar y,$$

$$\lambda_z = M_x y - M_y x - i\hbar z.$$

我們根据(29)有

$$M_x\lambda_x + M_y\lambda_y + M_z\lambda_z = \sum_{xyz}(M_xM_yz - M_xM_zy - i\hbar M_xx)$$

$$= \sum_{xyz}(M_xM_y - M_yM_x - i\hbar M_z)z = 0. \tag{87}$$

这样，$\lambda_x\lambda_y$ 与 λ_z 不是 xy 与 z 的綫性无关的函数，但是它們之中任何两个，加上 λ_0，就是 x，y 与 z 的三个綫性无关的函数，并且可以当成上述的 λ_1, λ_2 与 λ_3，因为其系数 M_x, M_y, M_z 全都与K对易．我們的問題就簡化为要找出 λ_0，λ_x，λ_y 与 λ_z 的(K', K'')矩陣元不为零的条件．这些 λ 的物理意义是，λ_0 正比于矢量(x, y, z)在矢量 $\mathbf{M}$ 的方向上的分量，而 λ_x，λ_y，λ_z 則与矢量(x, y, z)垂直于 $\mathbf{M}$ 的那一部分的三个分量成正比．

由于 λ_0 是标量，它一定与K对易．由此得出，只有 λ_0 的对角元$\langle K'|\lambda_0|K'\rangle$可以不为零，所以选择定則是：只与 λ_0 有关，則K不能改变．把(30)式应用于矢量 λ_x，λ_y，λ_z，我們就有

$$[M_z, \lambda_x] = \lambda_y, \ [M_z, \lambda_y] = -\lambda_x, \ [M_z, \lambda_z] = 0.$$

在 M_z 与 λ_x，λ_y，λ_z 之間的这些关系，其形式完全与 m_x 与 x，y，z 之間的关系(23)式与(24)式相同，而(87)式也与(84)式有相同形式．因此，这些力学变量 λ_x，λ_y，λ_z 与角动量 $\mathbf{M}$ 的关系，性質上和 x，y，z 与 $\mathbf{m}$ 的关系相同．所以，当电位移与(x, y, z)成正比时我們对 k 的选择定則的推导，可以全部取来用于推导当电位移与$(\lambda_x, \lambda_y, \lambda_z)$成正比时的$K$的选择定則．按此方法，我們发現，与 λ_x，λ_y，λ_z 有关的K的选择定則是：它一定增減 $\hbar$．

把上述結果归結起来，我們得到K的选择定則为：它一定增減 $\hbar$ 或不变．我們已研究了只是某个电子产生的电位移，但是，对每个电子，完全一样的选择定則是成立的，因而对总电位移，这个选择定則也是成立的．

§41. 氫原子的塞曼效应

現在我們来研究均匀磁場中的一个氫原子的系統．带有 $V=$

$-e^2/r$ 的哈密頓量(57)式描述沒有外場的氫原子，由于磁場，它将要有所修改，按照經典力学，这种修改是用 $p_x + e/c \cdot A_x, p_y + e/c \cdot A_y, p_z + e/c \cdot A_z$ 来代替动量分量 p_x, p_y, p_z，其中 A_x, A_y, A_z 是描述外場的矢势的分量. 对于在 z 方向上絕对值为 $\mathscr{H}$ 的均匀磁場，我們就可取 $A_x = -\frac{1}{2}\mathscr{H}_y$，$A_y = \frac{1}{2}\mathscr{H}_x$，$A_z = 0$. 其經典哈密頓量成为

$$H = \frac{1}{2m}\left\{\left(p_x - \frac{1}{2}\frac{e}{c}\mathscr{H}_y\right)^2 + \right.$$
$$\left. + \left(p_y + \frac{1}{2}\frac{e}{c}\mathscr{H}_x\right)^2 + p_z^2\right\} - \frac{e^2}{r}.$$

这个經典哈密頓量可以取来用在量子理論中，只要我們在它上面加上給出电子自旋效应的一項. 根据实驗証据，也按照第十一章的理論，电子有一磁矩为 $-e\hbar/2mc \cdot \boldsymbol{\sigma}$，其中 $\boldsymbol{\sigma}$ 是 §37 中的自旋矢量. 这个磁矩在磁場中的能量是 $e\hbar\mathscr{H}/2mc \cdot \sigma_z$. 因此，总的量子哈密頓量为

$$H = \frac{1}{2m}\left\{\left(p_x - \frac{1}{2}\frac{e}{c}\mathscr{H}_y\right)^2 + \right.$$
$$\left. + \left(p_y + \frac{1}{2}\frac{e}{c}\mathscr{H}_x\right)^2 + p_z^2\right\} - \frac{e^2}{r} + \frac{e\hbar\mathscr{H}}{2mc}\sigma_z. \qquad (88)$$

严格地講，在这哈密頓量中还应有别的項，它們給出电子磁矩与原子核的电場之間的相互作用，然而这种效应是很小的，与我們在考虑相对論力学后所得的修正的数量級相同，因而在这里我們忽略了这一項. 在第十一章給出的电子的相对論理論中，将計入这一項.

如果磁場不是太強，我們可以略去包含 $\mathscr{H}^2$ 的項，这样，哈密頓量(88)式就簡化为

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{e^2}{r} + \frac{e\mathscr{H}}{2mc}(xp_y - yp_x) + \frac{e\hbar\mathscr{H}}{2mc}\sigma_z$$
$$= \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{e^2}{r} + \frac{e\mathscr{H}}{2mc}(m_z + \hbar\sigma_z). \qquad (89)$$

由于磁場而引起的外加項現在是 $e\mathscr{H}/2mc\cdot(m_z+\hbar\sigma_z)$. 但是此外加項与整个哈密頓量对易，因而是运动恆量．这一点使問題变得非常容易．系統的定态即哈密頓量(89)式的本征态，将既是沒有外場下的哈密頓量的本征态，同时又是可观察量 m_z 与 σ_z 的本征态，或者至少是可观察量 $m_z+\hbar\sigma_z$ 的本征态，而系統的能級将是由(80)式給出的沒有外場时的系統的能級（如果我們只考慮閉合态）加上 $e\mathscr{H}/2mc\cdot(m_z+\hbar\sigma_z)$ 的本征值．因此，在沒有外場时系統的定态（对这些态 m_z 有数值 m'_z 为 $\hbar$ 的整数倍，σ_z 也有数值 $\sigma'_z=\pm 1$)，当外場加上时将仍为定态．它們的能量将增加一个量，这量由两部分之和組成，一部分为 $e\mathscr{H}/2mc\cdot m'_z$，是由軌道运动引起的，这一部分可以認为是由于有一軌道磁矩 $-em'_z/2mc$ 而引起的；另一部分为 $e\mathscr{H}/2mc\cdot\hbar\sigma_z$ 是由自旋引起的．軌道磁矩与軌道角动量 m'_z 的比是 $-e/2mc$，它等于自旋磁矩与自旋角动量之比的一半．这个事实有时称为自旋的磁矩反常．

由于現在能級包含 m_z，上节求出的 m_z 的选择定則就变得能直接与实驗比較了．我們取一海森伯表象，其中 m_z 与 σ_z 与其他运动恆量都是对角的．m_z 的选择定則現在要求 m_z 的变化为 $\hbar$, 0，或者 $-\hbar$，而 σ_z 則由于它与电位移对易，将完全不变．因此，在跃迁过程中参与的两个态之間的能量差将与它在沒有磁場时的值相差一个量 $e\hbar\mathscr{H}/2mc$，0，或 $-e\hbar\mathscr{H}/2mc$． 因而从玻尔頻率条件得知，所伴随的电磁輻射的頻率将与沒有磁場时的頻率相差 $e\mathscr{H}/4\pi mc$，0，或 $-e\mathscr{H}/4\pi mc$． 这一点的意义是，沒有磁場时的每条光譜綫由于有磁場而分裂为三个組分．如果我們研究在 z 方向运动的輻射，那么按(83)式，两个外边的組分将是圓偏振的，而中間的未曾位移的組分的強度为零．这些結果是与实驗相符合的，也与塞曼效应的經典理論相符合．

第七章　微扰理論

§42. 概述

在上一章里，对量子理論中的某些簡单力学系統給出了严格的处理. 但是，用現有的数学工具，大多数量子問題是不能严格地解出的，因为这些量子問題导致的方程的解，是不能用通常的分析函数表示为有限項的. 对这样一些問題我們时常用微扰法. 这个方法在于把哈密頓量分成两部分，其中一部分必須是簡单的，而另一部分則必須是小的. 第一部分可以看成是簡化了的系統（或未受微扰的系統）的哈密頓量，这个系統可以严格地处理，而加上哈密頓量的第二部分就将要求在未受微扰的系統的解中，加上一个小的具有微扰性質的修正項. 第一部分应該是簡单的这一条件，在实际上要求它应当不显含时間. 如果第二部分包括一个小的数値因子 ϵ，我們就可以求得微扰后的系統的方程的解，其形式为 ϵ 的冪級数，此冪級数只要是收斂的，将对我們的問題作出解答，这个解答具有任意所希望的精确程度. 即令当此級数并不收斂时，用这种方法得到的一級近似通常也是相当精确的.

在微扰論中有两种不同的方法. 其中一种是把微扰当作对未微扰系統的运动态引起修改. 在另一种方法中，我們并不認为对未微扰系統的态作了任何修改，而是我們假定受微扰的系統在微扰的影响下，不是永久保持在这些态中的一个，而是不断地从一个态变到另一个态，也即是說发生跃迁. 在任意特定的情况下究竟采用哪一个方法，决定于要解决的問題的性質. 只有当微扰能量（即对未微扰系統的哈密頓量的修改）不显含时間时，第一个方法通常才是有用的，而且这时这个方法就用在定态上. 它可以被用来計算一些不与任何一定时間相关的事物，例如計算受微扰系統

的定态的能級，或者，在碰撞問題的情况中計算按一已知角散射的几率. 另一方面，为了解决所有包含时間的問題，就一定要用第二种方法，例如，当微扰突然加上时出現的与跃迁現象有关的那些問題，或者，微扰按任何方式随时間变化的那些更普遍的問題（卽是微扰能量显含时間的那些問題）. 还有，在碰撞問題中，只要我們所希望的是計算吸收几率与发射几率，卽令微扰能量此时并不显含时間，也一定要用第二种方法，因为这些几率与散射几率不同，若不联系于随时間变化的事件的状态，就不能定义了.

我們把区别这两种方法的特性总結如下： 用第一种方法时，我們是把未微扰系統的定态与受微扰系統的定态相比較； 用第二种方法时，我們是取未微扰系統的一个定态，并研究它在微扰影响下如何随时間而变化.

§43. 微扰引起的能級变化

現在把上述方法的第一种用来計算微扰所引起的系統能級的变化. 我們假定微扰能和未微扰系統的哈密頓量都不显含时間. 当然，只有未微扰系統的能級是分立的，而且能級間的差距比起微扰引起的能級变化要大时，我們的問題才有意义. 这种情况是因为用第一种方法处理微扰时有某些特点要按照未微扰系統的能級是分立的还是連續的而有所不同.

令受微扰系統的哈密頓量为

$$H = E + V, \tag{1}$$

E 是未微扰系統的哈密頓量，而 V 是小的微扰能量. 按照假定，H 的每个本征值 H' 很接近于 E 的一个而且只接近一个本征值 E'. 我們将用一样多的撇数来标記 H 的任意本征值与很接近于它的 E 的本征值. 这样，我們将有 H'' 与 E'' 相差一个数量級为 V 的小量，而 H'' 与 E' 則相差一个不小的量，除非 $E' = E''$. 我們現在一定总要注意，要用不同的撇数来标記那些我們不要求两者非常接近的 H 与 E 的本征值.

为得到 H 的本征值，我們必須解方程

$$H|H'\rangle = H'|H'\rangle,$$

或即

$$(H' - E)|H'\rangle = V|H'\rangle. \tag{2}$$

令$|0\rangle$为E的本征右矢，属于本征值E'，假定满足(2)式的$|H'\rangle$及H'与$|0\rangle$及E'之差是一个小量，而$|H'\rangle$及H'可表示为

$$\left.\begin{aligned}|H'\rangle &= |0\rangle + |1\rangle + |2\rangle + \cdots,\\ H' &= E' + a_1 + a_2 + \cdots,\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

其中$|1\rangle$与a_1是一級小量(即与V同数量級)，而$|2\rangle$与a_2是二級小量，以此类推．把这些表式代入(2)式，我們得

$$\{E' - E + a_1 + a_2 + \cdots\}\{|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle + \cdots\} = \\ = V\{|0\rangle + |1\rangle + \cdots\}.$$

如果我們現在分出零級項、一級項、二級項……等等，我們就得出下列一組方程：

$$\left.\begin{aligned}&(E' - E)|0\rangle = 0,\\ &(E' - E)|1\rangle + a_1|0\rangle = V|0\rangle,\\ &(E' - E)|2\rangle + a_1|1\rangle + a_2|0\rangle = V|1\rangle,\\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\end{aligned}\right\} \tag{4}$$

这些方程中的第一个告訴我們的就是我們已經假定的，即$|0\rangle$是E的本征右矢，属于本征值E'．而其余的各式使我們能計算出各个修正項$|1\rangle, |2\rangle, \cdots, a_1, a_2, \cdots$.

为进一步討論这些方程，引进E为对角的表象是方便的，即是对未微扰的系統引进一个海森伯表象，并取E本身作为以其本征值标記表示式的可观察量之一．在必需有其他可观察量的情形下，例如当E有不止一个本征态属于任一本征值的情况下，則令其他可观察量为β．这样，基左矢就是$\langle E''\beta''|$．由于$|0\rangle$是E的本征右矢属于本征值E'，我們有

$$\langle E''\beta''|0\rangle = \delta_{E''E'}f(\beta''), \tag{5}$$

其中$f(\beta'')$是变量β''的某一函数．借助于此結果，方程(4)中的第二个如用表示式写出，就成为

$$(E' - E'')\langle E''\beta''|1\rangle + a_1\delta_{E''E'}f(\beta'') =$$

$$= \sum_{\beta'} \langle E''\beta''|V|E'\beta'\rangle f(\beta'). \tag{6}$$

这里令 $E''=E'$; 我們得到

$$a_1 f(\beta'') = \sum_{\beta'} \langle E'\beta''|V|E'\beta'\rangle f(\beta'). \tag{7}$$

如只考慮变量 β',则方程(7)具有在本征值理論中的标准方程的形式. 它表明 a_1 的各种可能值是矩陣 $\langle E'\beta''|V|E'\beta'\rangle$ 的本征值. 这个矩陣是未微扰系統的海森伯表象中微扰能量的表示式的一部分,即是由那些在其行和列上联系于同一未微扰能級 E' 的矩陣元所組成的一部分. 在一級近似下,a_1 的这些值中的每一个給出受微扰系統的(靠近未微扰系統能級 E' 的)一个能級[1]. 因此, 可能有受微扰系統的几个能級都接近于未微扰系統的一个能級 E',其数目可以是不超过未微扰系統属于能級 E' 的独立态数的任何数. 按此方法,微扰可能引起那些在未微扰系統中重合在 E' 处的能級的分开,或部分地分开.

方程(7)在零級近似下也决定了受微扰系統的(属于接近于 E' 的能級的)定态的表示式 $\langle E''\beta''|0\rangle$, 即将方程(7)的任意解 $f(\beta')$ 代入(5)式, 就給出一个这样的表示式. 受微扰系統的这些定态中的每一个接近于未微扰系統各定态中的一个,但是,如果反过来講,未微扰系統的每一定态接近于受微扰系統的定态之一,则是不正确的, 因为未微扰系統属于能量 E' 的一般定态是由(5)式的右边表示的,其中包含一任意函数 $f(\beta'')$. 要找到未微扰系統的那一个定态接近于受微扰系統的定态的問題,也即是要找出(7)式的解 $f(\beta')$ 的問題, 相当于經典力学中的“久期微扰”的問題. 应当指出, 上述結果与微扰能量的联系于未微扰系統的两个不同能級的所有那些矩陣元之值无关.

1) 为了使这些能级彼此区分开来, 我们应该要求某种更精致的符号, 因为按目前的符号, 它们一定全都用同样数目的撇来表出, 也即是用表明它们所来自的未微扰系统能级的撇数来表出. 但是, 对于我们目前的目的, 这种更精致的符号还是不需要的.

我們来研究在特别簡单情况下，即当未微扰系統中属于每一能級只有一个定态时[1]上述結果将如何变化．在此情况下，E 单独就能固定表象，而不需要 β．在(7)式中的求和現在簡化为单独一項，我們得

$$a_1 = \langle E'|V|E'\rangle. \tag{8}$$

在未微扰系統的任意能級附近，只有一个受微扰系統的能級，而且能量变化的一級近似等于未微扰系統的海森伯表象中微扰能量的相应对角矩陣元，或即微扰能量对于相应的未微扰态的平均值．上述結果的后一表达法是与在經典力学中当未微扰系統是多周期时的表达法是一样的．

我們将进而計算当未微扰系統是非簡并的情况下能級的二次修正項 a_2．在这种情况下，方程(5)成为

$$\langle E''|0\rangle = \delta_{E''E'},$$

略去了一个不重要的数値因子，而方程(6)成为

$$(E' - E'')\langle E''|1\rangle + a\delta_{E''E'} = \langle E''|V|E'\rangle.$$

此式中当 $E'' \neq E'$ 时給出$\langle E''|1\rangle$的值，即

$$\langle E''|1\rangle = \frac{\langle E''|V|E'\rangle}{E' - E''}. \tag{9}$$

方程(4)中的第三个用表示式写出来，就是

$$(E' - E'')\langle E''|2\rangle + a_1\langle E''|1\rangle + a_2\delta_{E''E'} = \\ = \sum_{E'''}\langle E''|V|E'''\rangle\langle E'''|1\rangle.$$

这里令 $E'' = E'$，我們得

$$a_1\langle E'|1\rangle + a_2 = \sum_{E'''}\langle E'|V|E'''\rangle\langle E'''|1\rangle,$$

借助于(8)式，此式就簡化为

$$a_2 = \sum_{E''\neq E'}\langle E'|V|E''\rangle\langle E''|1\rangle.$$

---

1) 一个系统如属于每个能级只有一个定态，则常称为“非简并的”．而一个系统有两个或更多定态属于一个能级的，则称为“简并的”．虽然这些词从近代的观点看来不是很恰当的．

用(9)式得出的$\langle E''|1\rangle$代入后，我們最后得

$$a_2 = \sum_{E''\neq E'} \frac{\langle E'|V|E''\rangle\langle E''|V|E'\rangle}{E'-E''},$$

这就給出二級近似下的总能量变化为

$$a_1 + a_2 = \langle E'|V|E'\rangle + \sum_{E''\neq E'} \frac{\langle E'|V|E''\rangle\langle E''|V|E'\rangle}{E'-E''}. \quad (10)$$

如果需要，这个方法还可以发展到計算更高級近似．玻恩、海森伯与約旦(Jordan)[1]曾經得到普遍的遞推公式，用較低級的改正項表示出 n 級的改正項．

§ 44. 引起跃迁的微扰

我們現在来研究 §42 中所述的两种微扰方法中的第二种方法．我們重新假定，我們有一未微扰系統由不显含时間的哈密頓量 E 所支配，还有一微扰能量 V，在这里它可以是时間的任意函数．受微扰系統的哈密頓量还是 $H=E+V$．对于目前的方法而言，未微扰系統的能級，即 E 的本征值，是分立的集合还是連續的集合的問題，不引起任何本質上的差异．然而，为了明确起見，我們取分立的情况．我們还是要在未微扰系統的海森伯表象中来进行研究，但是，取 E 本身作为以其本征值标記表示式的可观察量之一，这时已沒有什么优点，我們假定，我們有一般的集合 α 来标記表示式．

让我們假定，在起始时刻 t_0，系統处于一个使 α 肯定地有值 α' 的态．相应于此态的右矢是基右矢 $|\alpha'\rangle$．如果沒有微扰，即如果哈密頓量为 E，则这个态将是定态．微扰引起此态变化．在时刻 t，根据 §27 的方程 (1) 得相应于此态的右矢在薛定諤图象中将为 $T|\alpha'\rangle$．α 此时有值 α''的几率是

$$P(\alpha'\alpha'') = |\langle\alpha''|T|\alpha'\rangle|^2. \quad (11)$$

对于 $\alpha''\neq\alpha'$，$P(\alpha'\alpha'')$ 是在时間 $t_0\rightarrow t$ 之間发生从态 α' 到态 α'' 的跃迁的几率．而 $P(\alpha'\alpha')$是完全不发生跃迁的几率．$P(\alpha'\alpha'')$对

1) Z. f. Physik, **35** (1925), 565.

所有 α'' 的总和当然等于 1.

让我們假定,开始时系統不是肯定地处于一个态 α',而是处于許多态中的这一个或那一个,对每个态有一几率 $P_{\alpha'}$. 相应于这种分布的吉布斯密度 §33 的(68)式应为

$$\rho=\sum_{\alpha'}|\alpha'\rangle P_{\alpha'}\langle\alpha'|. \tag{12}$$

在时刻 t,每个右矢 $|\alpha'\rangle$ 变为 $T|\alpha'\rangle$,而每个左矢 $\langle\alpha'|$ 变为 $\langle\alpha'|\bar{T}$,所以,ρ 变成

$$\rho_t=\sum_{\alpha'}T|\alpha'\rangle P_{\alpha'}\langle\alpha'|\bar{T}. \tag{13}$$

这时 α 有值为 α'' 的几率,按 §33 的(72)式为

$$\begin{aligned}\langle\alpha''|\rho_t|\alpha''\rangle&=\sum_{\alpha'}\langle\alpha''|T|\alpha'\rangle P_{\alpha'}\langle\alpha'|\bar{T}|\alpha''\rangle\\&=\sum_{\alpha'}P_{\alpha'}P(\alpha'\alpha''),\end{aligned} \tag{14}$$

这里用了(11)式. 这个結果表示,在时刻 t 系統处于态 α'' 的几率,是系統开始时处于任意态 $\alpha'\neq\alpha''$ 并发生从态 α' 到态 α'' 的跃迁的几率与系統开始时即处于态 α'' 而沒有发生跃迁的几率之和. 这样,各种跃迁几率按照普通的几率規則彼此互不相关地起着作用.

計算跃迁的全部問題因而簡化为决定几率振幅 $\langle\alpha''|T|\alpha'\rangle$. 这些振幅能由 T 的微分方程算出,即 §27 的方程(6),或者

$$i\hbar dT/dt=HT=(E+V)T. \tag{15}$$

利用变换

$$T^*=e^{iE(t-t_0)/\hbar}T, \tag{16}$$

可使計算簡化,此时我們有

$$\begin{aligned}i\hbar dT^*/dt&=e^{iE(t-t_0)/\hbar}(-ET+i\hbar dT/dt)\\&=e^{iE(t-t_0)/\hbar}VT=V^*T^*,\end{aligned} \tag{17}$$

其中

$$V^*=e^{iE(t-t_0)/\hbar}Ve^{-iE(t-t_0)/\hbar}, \tag{18}$$

即 V^* 是某一么正变换作用于 V 的結果. 方程(17)具有比方程

(15)更为方便的形式，因为(17)式可以使 T^* 的变化完全决定于微扰 V，而当 $V=0$ 时，(17)式会使 T^* 等于它的初值，即是 1. 从(16)式我們有

$$\langle\alpha''|T^*|\alpha'\rangle = e^{iE''(t-t_0)/\hbar}\langle\alpha''|T|\alpha'\rangle,$$

所以

$$P(\alpha'\alpha'') = |\langle\alpha''|T^*|\alpha'\rangle|^2, \tag{19}$$

它表明，对决定跃迁几率来說，T^* 与 T 是等效的.

至此为止，我們的討論一直是严格的. 現在我們假定 V 是一級小量，并将 T^* 表示为

$$T^* = 1 + T_1^* + T_2^* + \cdots, \tag{20}$$

其中 T_1^* 是一級小量，T_2^* 是二級小量，以此类推. 把(20)式代入(17)式，并令同級項相等，我們得

$$\left.\begin{aligned} i\hbar dT_1^*/dt &= V^*, \\ i\hbar dT_2^*/dt &= V^*T_1^*, \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \end{aligned}\right\} \tag{21}$$

从这些方程中的第一式，我們得

$$T_1^* = -i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} V^*(t')dt', \tag{22}$$

从第二式，我們得

$$T_2^* = -\hbar^{-2}\int_{t_0}^{t} V^*(t')dt'\int_{t_0}^{t'} V^*(t'')dt'', \tag{23}$$

以此类推. 对許多实际問題，只保留第一項 T_1^* 就足够精确了，这就給出在 $\alpha'' \neq \alpha'$ 时跃迁几率 $P(\alpha'\alpha'')$ 为

$$\left.\begin{aligned} P(\alpha'\alpha'') &= \hbar^{-2}\left|\langle\alpha''|\int_{t_0}^{t} V^*(t')dt'|\alpha'\rangle\right|^2 \\ &= \hbar^{-2}\left|\int_{t_0}^{t}\langle\alpha''|V^*(t')|\alpha'\rangle dt'\right|^2. \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

这样，我們就得到精确到二級小量的跃迁几率. 这个結果只决定于 $V^*(t')$ 对于两个有关态的矩陣元 $\langle\alpha''|V^*(t')|\alpha'\rangle$，其中 t' 从 t_0 变到 t. 由于 V^* 与 V 一样是实的，所以

$$\langle\alpha''|V^*(t')|\alpha'\rangle = \overline{\langle\alpha'|V^*(t')|\alpha''\rangle},$$

因而，在二級近似下，

$$P(\alpha'\alpha'') = P(\alpha''\alpha'). \tag{25}$$

有时我們关心的是使矩陣元 $\langle\alpha''|V^*|\alpha'\rangle$ 为零或者是比起 V^* 的其他矩陣元为小量的跃迁 $\alpha' \to \alpha''$. 这时,就必須求到更高級近似. 如果我們只保留两項 T_1^* 与 T_2^*, 对 $\alpha'' \neq \alpha'$, 我們得到,

$$
\begin{aligned}
P(\alpha'\alpha'') = \hbar^{-2}\Big| \int_{t_0}^{t} \langle\alpha''|V^*(t')|\alpha'\rangle dt' - \\
- i\hbar^{-1} \sum_{\alpha''' \neq \alpha', \alpha''} \int_{t_0}^{t} \langle\alpha''|V^*(t')|\alpha'''\rangle dt' \times \\
\times \int_{t_0}^{t'} \langle\alpha'''|V^*(t'')|\alpha'\rangle dt'' \Big|^2.
\end{aligned} \tag{26}
$$

$\alpha''' = \alpha'$ 与 $\alpha''' = \alpha''$ 的各項从求和中略去了,因为它們比起求和中其他各項来是小量,这是由于$\langle\alpha''|V|\alpha'\rangle$是小量. 为解释(26)式的結果,我們可以假定,第一項

$$
\int_{t_0}^{t'} \langle\alpha''|V^*(t')|\alpha'\rangle dt' \tag{27}
$$

引起从态 α' 到 α'' 的直接跃迁,而第二项

$$
-i\hbar^{-1}\int_{t_0}^{t} \langle\alpha''|V^*(t')|\alpha'''\rangle dt' \int_{t_0}^{t'} \langle\alpha'''|V^*(t'')|\alpha'\rangle dt'' \tag{28}
$$

引起从态 α' 到态 α''' 的跃迁, 継而从态 α''' 跃迁到 α''. 在这个解释中态 α''' 称为**中間态**. 我們必須在(27)式的項上加上相应于各不同的中間态的(28)式的各項,然后取此和的模数的平方,这样作法的意思是, 在不同的跃迁过程——一个直接的跃迁过程与包含中間态的那些跃迁过程——之間存在有干涉, 我們不能給出这些过程中单独任一个的几率的意义. 然而,对这些过程中的每一个,都有一个几率振幅. 如果我們把此微扰法进行到更高的精确度,我們得到的一个結果, 借助于包含一系列中間态的更复杂跃迁过程,能同样地加以解释.

§ 45. 对輻射的应用

在上一节中,我們討論了关于原子系統的微扰的普遍理論,其中微扰能量能以任意方式随时間而变化. 实际上, 如把入射电磁輻射加在系統上, 就能实现这样一种微扰. 让我們来看一看在此情况下,(24)式的結果将簡化成什么样子.

如果我們略去入射輻射的磁場效应，又如果我們再假定，这个輻射的各个諧分量的波长与原子系統的尺度比起来全都是大的，那么，微扰能量就簡单地是标量乘积

$$V = (\mathbf{D}, \mathscr{E}) \tag{29}$$

其中 $\mathbf{D}$ 是系統的总电位移，而 $\mathscr{E}$ 是入射輻射的电場．我們假定 $\mathscr{E}$ 为时間的已知函数．假若为了簡化起見，我們取入射輻射是平面偏振的，其电場矢量在一定方向上，并註 D 表示 $\mathbf{D}$ 在此方向的投影，則表示 V 的(29)式就簡化为普通乘积

$$V = D\mathscr{E},$$

其中 $\mathscr{E}$ 是矢量 $\mathscr{E}$ 的絕对值．V 的矩陣元为

$$\langle\alpha''|V^*|\alpha'\rangle = \langle\alpha''|D|\alpha'\rangle\mathscr{E},$$

因为 $\mathscr{E}$ 是一个数．矩陣元 $\langle\alpha''|D|\alpha'\rangle$ 是与时間 t 无关的．从(18)式可得

$$\langle\alpha''|V^*(t)|\alpha'\rangle = \langle\alpha''|D|\alpha'\rangle e^{i(E''-E')(t-t_0)/\hbar}\mathscr{E}(t),$$

因而，表示跃迁几率的(24)式变成

$$P(\alpha'\alpha'') = \hbar^{-2}|\langle\alpha''|D|\alpha'\rangle|^2\left|\int_{t_0}^{t} e^{i(E''-E')(t'-t_0)/\hbar}\mathscr{E}(t')dt'\right|^2. \tag{30}$$

如果在时間間隔 t_0 到 t 中，入射輻射分解为傅里叶分量，按照經典电动力学，在頻率 ν 附近每单位頻率范围內流过单位面积的能量为

$$E_\nu = \frac{c}{2\pi}\left|\int_{t_0}^{t} e^{2\pi i\nu(t'-t_0)}\mathscr{E}(t')dt'\right|^2. \tag{31}$$

把此式与(30)式比較，我們得到

$$P(\alpha'\alpha'') = 2\pi c^{-1}\hbar^{-2}|\langle\alpha''|D|\alpha'\rangle|^2E_\nu, \tag{32}$$

其中

$$\nu = |E'' - E'|/h. \tag{33}$$

从这个結果我們首先看到，跃迁几率只决定于入射輻射的頻率为 ν 的傅里叶分量，而 ν 与能量变化的关系由(33)式給出．这就給出了**玻尔的頻率条件**，并表明曾是量子力学的前驅的玻尔原子理論的思想，能与量子力学相适合．

目前的初等理論还不能說明关于輻射場能量的任何情況．但

是，假定在跃迁过程中原子系統所吸收(或放出)的能量，是来自(或进入)輻射中頻率 ν 为(33)式所給出的分量，这应該是合理的．第十章所要講的輻射的更完整理論将証明这个假定．这样，(32)式的結果就应解释如下：如果开始时系統处于較低能量的态，(32)式就是系統吸收輻射而被帶到較高能态去的几率；如果开始时系統处于較高能态，(32)式就是系統受到入射輻射的激发而发射出輻射，并落到較低能态的几率．目前的理論不能說明的实驗事实是，如果系統处于較高能态而沒有入射輻射，系統能自发地发射出輻射而落入較低能态，但是，这个事实也将由第十章的更完整理論解释．

在量子力学还未出現以前很久，爱因斯坦[1]就从原子与滿足普朗克定律的黑体輻射場之間的統計平衡的研究中，提出了存在受激发射的現象．爱因斯坦曾指出，受激发射的跃迁几率一定等于在同样两个态之間的吸收跃迁几率，这是与現在的量子理論相符的，并且他还推导出了联系这个跃迁几率与自发发射的跃迁几率的一个关系，此关系也符合于第十章的理論．

(32)式中的矩陣元 $\langle\alpha''|D|\alpha'\rangle$ 所起的作用，相当于与輻射相互作用的多周期系統的經典理論中 D 的傅里叶分量之一的振幅．事实上，引起海森伯在1925年发現量子力学的，正是这种用矩陣代替經典的傅里叶分量的思想．海森伯假定，在量子理論中，表述系統与輻射相互作用的公式可由經典公式得到，办法是把系統的总电位移的傅里叶分量都用相应的矩陣元代替．把这个假定应用于自发发射，当一个具有电矩为 $\mathbf{D}$ 的系統处于态 α' 时，将以一定的速率自发地发射出頻率为 $\nu=(E'-E'')/h$ 的輻射，其中 E'' 是某一态 α'' 的能級，比 E' 为小，发射的速率为

$$\frac{4}{3}\frac{(2\pi\nu)^4}{c^3}\,|\langle\alpha''|\mathbf{D}|\alpha'\rangle|^2. \tag{34}$$

这个輻射在不同发射方向上的分布和它在每个方向的偏振态，都

1) Einstein, Phys. Zeits. **18** (1917), 121.

将与一个极矩等于 $\langle\alpha''|D|\alpha'\rangle$ 的实部的經典电偶极子所发出的輻射相同. 为把这个发射輻射能量的速率解释为跃迁几率，我們必須除以这个頻率的能量的量子，卽除以 $h\nu$，而把它称为在每单位时間內原子系統自发地发射出这种量子并同时落到較低能量的态 α'' 的几率. 目前的輻射理論用第十章中的自发跃迁理論补充后，就証明了海森伯的这些假定.

§46. 与时間无关的微扰引起的跃迁

当微扰能量 V 不显含时間 t 时，§44 的微扰法也仍然有效. 由于总哈密頓量 H 在此情况下不显含 t，我們現在如果愿意的話，也可以用 §43 的微扰法来研究这个系統，并求出它的定态. 这个方法是否方便，决定于我們对此系統要去求出的是什么. 如果我們所要去計算的是与时間有明显关系的，例如，如果我們要去計算的是，当我們已知系統在某一时刻肯定地处于某个态而求在另一时刻系統在某一态的几率，则 §44 的方法会是較方便的方法.

讓我們来看一看当 V 不显含 t 时，跃迁几率(24)式的結果会变成怎样，我們取 $t_0=0$ 以簡化写法. 現在，矩陣元 $\langle\alpha''|V|\alpha'\rangle$ 与 t 无关，而且从(18)式得

$$\langle\alpha''|V^*(t')|\alpha'\rangle=\langle\alpha''|V|\alpha'\rangle e^{i(E''-E')t'/\hbar}, \tag{35}$$

所以，如果 $E''\neq E'$，则

$$\int_0^t\langle\alpha''|V^*(t')|\alpha'\rangle dt'=\langle\alpha''|V|\alpha'\rangle\frac{e^{i(E''-E')t/\hbar}-1}{i(E''-E')/\hbar}.$$

因此，跃迁几率(24)式变成

$$\begin{aligned}P(\alpha'\alpha'')&=|\langle\alpha''|V|\alpha'\rangle|^2[e^{i(E''-E')t/\hbar}-1]\times\\&\qquad\times[e^{-i(E''-E')t/\hbar}-1]/(E''-E')^2\\&=2|\langle\alpha''|V|\alpha'\rangle|^2[1-\cos\{(E''-E')t/\hbar\}]/(E''-E')^2.\end{aligned} \tag{36}$$

如果 E'' 与 E' 相差相当大，这个跃迁几率就是很小的，而且对于 t 的所有值，它保持为小量. 这个結果是能量守恆定律所要求的. 总能量 H 是恆量，因而原能量 E（卽略去了由微扰而来的部分 V 以后的能量）近似地等于 H，必定是近似地为恆量. 这一点的

意思是，如果在开始时 E 有数值 E'，则在以后任何时間，E 有数值与 E' 相差相当大的几率一定只能是小的.

另一方面，如果初态 α' 是这样，以致存在着另一个态 α''，它与 α' 有相同或很接近相同的原能量 E，则跃迁到終态 α'' 的几率可能是相当大的. 現在具有物理意义的情况是，在一連續范围內有許多終态 α''，α'' 的原能級 E'' 具有連續范围，这个范围包含初态的原能量值 E'. 初态不一定是終态的連續范围內的一个态，而可能是一个单独的分立态，也可能是态的另一連續范围內的一个态. 如果我們回忆起 §18 中解释在态的連續范围情况的几率振幅的規则，我們現在就得到，如果始态 α' 是分立的，则跃迁到一个处于小范围 α'' 到 $\alpha''+d\alpha''$ 中的終态的几率为 $P(\alpha'\alpha'')d\alpha''$[$P(\alpha'\alpha'')$ 具有值为(36)式]；如果始态 α' 是一連續范围中的一个值，则該几率正比于 $P(\alpha'\alpha'')d\alpha''$.

我們可以假定，描述終态的这些 α 包括 E 及一些其他的力学变量 β，所以我們得到一个表象，类似于 §43 中簡并情况下的表象(但是，对于始态 α'，β 不需要一定有意义). 为明确起見，我們假定，β 只有分立的本征值. 跃迁到 β 有值 β'' 而 E 有任意值的終态 α'' 的总几率(其中 E 有值靠近起始值 E' 的几率将特别大)将为(或正比于)

$$
\begin{aligned}
\int P(\alpha'\alpha'')dE''
&= 2\int_{-\infty}^{+\infty}|\langle E''\beta''|V|\alpha'\rangle|^2[1-\cos\{(E''-\\
&\qquad -E')t/\hbar\}]/(E''-E')^2dE'' \qquad (37)\\
&= 2t\hbar^{-1}\int_{-\infty}^{+\infty}|\langle E'+\hbar x/t,\beta''|V|\alpha'\rangle|^2[1-\cos x]/x^2dx,
\end{aligned}
$$

后一步中我們作了代换 $(E''-E')t/\hbar=x$. 对于 t 值很大时，此式簡化为

$$
\begin{aligned}
2t\hbar^{-1}|\langle E'\beta''|V|\alpha'\rangle|^2\int_{-\infty}^{+\infty}[1-\cos x]/x^2dx\\
= 2\pi t\hbar^{-1}|\langle E'\beta''|V|\alpha'\rangle|^2. \qquad (38)
\end{aligned}
$$

因此，到时刻 t 系統跃迁到 β 有值 β'' 的終态的总几率正比于 t.所

以，对所研究的跃迁过程，有一个确定的几率系数，即每单位时間的几率，其值为

$$2\pi\hbar^{-1}|\langle E'\beta''|V|\alpha'\rangle|^2. \tag{39}$$

它与联系于这个跃迁的微扰能量的矩陣元的模量平方成正比。

如果矩陣元 $\langle E'\beta''|V|\alpha'\rangle$ 比 V 的其他矩陣元为小，我們就必須用更精确的公式(26)。从(35)式我們得

$$\begin{aligned}
&\int_0^t \langle\alpha''|V^*(t')|\alpha'''\rangle dt' \int_0^{t'} \langle\alpha'''|V^*(t'')|\alpha'\rangle dt'' \\
&= \langle\alpha''|V|\alpha'''\rangle\langle\alpha'''|V|\alpha'\rangle \int_0^t e^{i(E''-E''')t'/\hbar}dt' \int_0^{t'} e^{i(E'''-E')t''/\hbar}dt'' \\
&= \frac{\langle\alpha''|V|\alpha'''\rangle\langle\alpha'''|V|\alpha'\rangle}{i(E'''-E')/\hbar} \int_0^t \{e^{i(E''-E')t'/\hbar} - e^{i(E''-E''')t'/\hbar}\}dt'.
\end{aligned}$$

由于 E'' 接近 E'，在这里只有被积函数中的第一项才引起有物理意义的跃迁几率，而第二項可以去掉。把此結果用于(26)式，我們得

$$\begin{aligned}
&P(\alpha'\alpha'') \\
&= 2\left|\langle\alpha''|V|\alpha'\rangle - \sum_{\alpha'''\neq\alpha',\alpha''} \frac{\langle\alpha''|V|\alpha'''\rangle\langle\alpha'''|V|\alpha'\rangle}{E'''-E'}\right|^2 \times \\
&\qquad \times \frac{1-\cos\{(E''-E')t/\hbar\}}{(E''-E')^2},
\end{aligned}$$

此式代替了(36)式。与前面一样作法，我們得到系統跃迁到 β 有值 β'' 而 E 有值接近于其初值 E' 的終态的每单位时間的跃迁几率为

$$\frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle E'\beta''|V|\alpha'\rangle - \sum_{\alpha'''\neq\alpha',\alpha''} \frac{\langle E'\beta''|V|\alpha'''\rangle\langle\alpha'''|V|\alpha'\rangle}{E'''-E'}\right|^2. \tag{40}$$

这个公式說明，与始态及終态不相同的中間态在决定几率系数中怎样起作用。

为了使在推导(39)式与(40)式中所用的近似是正确的，时間 t 一定不能太小，也不能太大。它一定要与原子系統的周期相比是大的，才能使由积分(37)推出結果(38)式的近似計算正确，然而同时它一定不能太大，否則普遍公式(24)式或(26)式就将失效

了．事实上，我們如取 t 够大，就可能使几率(38)式大于1．决定 t 的上限的条件为：(24)式或(26)式所代表的几率，或者 t 乘上(39)式或(40)式后与1相比必須为一小量．只要微扰能量 V 足够小，取 t 同时满足这些条件是不困难的．

§47. 反常塞曼效应

§43的微扰方法的最簡单例子之一，是計算由均匀磁場所引起的原子能級的一級变化．氫原子在均匀磁場中的問題已經在§41中研究过了，它是如此簡单，以致不必要用微扰理論．当我們作一些近似，以致能建立原子的簡单模型时，一般原子的情况也就不是太复杂了．

首先，我們研究沒有磁場时的原子，我們来找出一些运动恆量，或者找出一些近似为运动恆量的量．原子的总角动量即矢量 $\mathbf{j}$，肯定就是一个运动恆量．这个角动量可以看成是两部分之和，一部分是所有电子的总軌道角动量，称为 $\mathbf{l}$，另一部分是总自旋角动量，称为 $\mathbf{s}$．这样，我們有 $\mathbf{j}=\mathbf{l}+\mathbf{s}$．这里，自旋磁矩对电子运动的影响比起庫仑力的效应来說是小量，在一級近似下可以略去．在这样的近似下，每个电子的自旋角动量是运动恆量，因为沒有力去改变它的取向．因此，$\mathbf{s}$ 将是运动恆量，从而 $\mathbf{l}$ 也是运动恆量．$\mathbf{l}$, $\mathbf{s}$ 与 $\mathbf{j}$ 的絕对值 l, s, j 将由下式給出：

$$l+\frac{1}{2}\hbar=\left(l_x^2+l_y^2+l_z^2+\frac{1}{4}\hbar^2\right)^{\frac{1}{2}},$$

$$s+\frac{1}{2}\hbar=\left(s_x^2+s_y^2+s_z^2+\frac{1}{4}\hbar^2\right)^{\frac{1}{2}},$$

$$j+\frac{1}{2}\hbar=\left(j_x^2+j_y^2+j_z^2+\frac{1}{4}\hbar^2\right)^{\frac{1}{2}},$$

这相当于§36的方程(39)．它們互相对易，又从§36的(47)式，我們看到，如 l 和 s 为已知数值时，j 的可能数值为

$$l+s,\ l+s-\hbar,\ \cdots,\ |l-s|.$$

让我們研究一个定态，其中 l, s 与 j 有符合于上述方案的确定数

值．这个态的能量将决定于 l，但有人可能想到，既然略去自旋磁矩，它应該与 s 无关，也应該与矢量 $\mathbf{s}$ 相对于 $\mathbf{l}$ 的方向无关，并因而与 j 无关．但是，我們在第九章将发現，虽然我們略去自旋磁矩时能量与矢量 $\mathbf{s}$ 的方向无关，可是能量与它的絕对值 s 关系很大，这是由于电子彼此之間是不可区分的这一事实所引起的某些現象的結果． 这样，对 l 与 s 每組不相同的值，系統就有不同的能級．这一点的意义是，l 与 s 是能量的函数（按照 §11 中提出的函数的普遍定义），因为当一个定态的能量决定时，它的 l 与 s 也决定了．

現在，我們計入自旋磁矩的效应，把它当作一个小的微扰，按 §43 的方法进行处理． 未微扰系統的能量将仍然近似地是运动恆量，因而 l 与 s 作为这个能量的函数，也仍然近似地为运动恆量．但是，矢量 $\mathbf{l}$ 与 $\mathbf{s}$ 的方向不是未微扰能量的函数，因而現在就不一定近似地为运动恆量，而可能有大的角度变化．由于矢量 $\mathbf{j}$ 是恆量，$\mathbf{l}$ 与 $\mathbf{s}$ 唯一可能的变化是围繞矢量 $\mathbf{j}$ 的进动．因此，我們得到一个原子的近似模型，它包括两个长度为恆量的矢量 $\mathbf{l}$ 与 $\mathbf{s}$ 围繞着它們的和 $\mathbf{j}$ 而进动，$\mathbf{j}$ 是一固定的矢量．能量主要决定于 $\mathbf{l}$ 和 $\mathbf{s}$ 的絕对值，而与它們的相对方向（由 j 确定）只有較小的关系．因此，具有相同的 l 与 s 而 j 不同的各态，其能級只相差很小，它們組成所謂多重項．

让我們取这样的原子模型作为我們的未微扰系統，并假定它受到一个均匀磁場的作用，磁場的絕对值为 $\mathscr{H}$，在 z 軸方向．由此磁場引起的能量增加将包括一項

$$e\mathscr{H}/2mc\cdot(m_z+\hbar\sigma_z), \tag{41}$$

它象 §41 的(89)式的最后一項一样，由每个电子所貢献的，因而加在一起，就是

$$\begin{aligned} e\mathscr{H}/2mc\cdot\sum(m_z+\hbar\sigma_z) &= e\mathscr{H}/2mc\cdot(l_z+2s_z) \\ &= e\mathscr{H}/2mc\cdot(j_z+s_z). \end{aligned} \tag{42}$$

这就是我們的微扰能量 V．我們現在用 §43 的方法来决定这个 V 所引起的能級变化．只有假設磁場很小，以致 V 比起多重态之間的能量差来是小量，这个方法才是合理的．

我們的未微扰系統是簡并的，因为矢量 $\mathbf{j}$ 的方向是未定的．因此，我們要从未微扰系統的海森伯表象中 V 的表示式中取出那些行与列联系于一个特定能級的矩陣元，并求得这样組成的矩陣的本征值．我們能做到这一点的最好方法是，首先把 V 分为两部分，其中一部分是未微扰系統的运动恆量，因而它的表示式只含有行与列联系于同一未微扰能級的矩陣元；而另一部分的表示式則只含行与列联系于两个不同未微扰能級的矩陣元，因而这第二部分不影响一級微扰．在(42)式中含 j_z 的項是未微扰系統的运动恆量，因而完全属于第一部分．至于含 s_z 的項，我們有

$$s_z(j_x^2 + j_y^2 + j_z^2) = j_z(s_xj_x + s_yj_y + s_zj_z) + \\ + (s_zj_x - j_zs_x)j_x + (s_zj_y - j_zs_y)j_y,$$

或即

$$s_z = \frac{j_z}{j(j+\hbar)}\frac{1}{2}[j(j+\hbar) - l(l+\hbar) + s(s+\hbar)] - \\ - [\gamma_yj_x - \gamma_xj_y]\frac{1}{j(j+\hbar)}, \tag{43}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} \gamma_x &= s_zj_y - j_zs_y = s_zl_y - l_zs_y = l_ys_z - l_zs_y, \\ \gamma_y &= j_zs_x - s_zj_x = l_zs_x - s_zl_x = l_zs_x - l_xs_z. \end{aligned}\right\} \tag{44}$$

(43)式中的第一項是未微扰系統的运动恆量，因而完全属于第一部分，而我們現在将看到，第二項完全属于第二部分．

相应于(44)式，我們可以引进

$$\gamma_z = l_xs_y - l_ys_x.$$

容易驗証

$$j_x\gamma_x + j_y\gamma_y + j_z\gamma_z = 0,$$

并从 §35 的(30)式得

$$[j_z, \gamma_x] = \gamma_y, [j_z, \gamma_y] = -\gamma_x, [j_z, \gamma_z] = 0.$$

这些 j_x, j_y, j_z 与 $\gamma_x, \gamma_y, \gamma_z$ 之間的关系，在形式上与 §40 中計算 k 为对角的表象中 z 的矩陣元选择定則时 m_x, m_y, m_z 与 x, y, z 之間的关系相同．在那里我們得到的結果是，除了联系于两个 k 值相差为 $\pm\hbar$ 的矩陣元以外，所有 z 的其他矩陣元都为零，从而可

以推断，所有 γ_z 的矩陣元，类似地还有 γ_x 与 γ_y 的矩陣元，在一个使 j 为对角的表象中，除了那些联系于 j 的两个相差为 $\pm\hbar$ 的值的矩陣元外，都应为零. (43) 式右边的第二項中 γ_x 与 γ_y 的系数与 j 对易，所以，整个这一項的表示式将只含那些联系于 j 的两个相差为 $\pm\hbar$ 的值的矩陣元，也就是联系于未微扰系統的两个不同能級的矩陣元.

因此，当我們略去能量 V 中其表示式只含联系于两个不同的未微扰能級的矩陣元的那一部分时，微扰能量 V 变成

$$\frac{e\mathscr{H}}{2mc}j_z\left\{1+\frac{j(j+\hbar)-l(l+\hbar)+s(s+\hbar)}{2j(j+\hbar)}\right\}. \qquad (45)$$

此式的本征値就是能級的一級变化. 我們选择一个表象使 j_z 是对角的，就能使此式的表示式为对角的，这时，此表示式就直接給出由磁場引起的能級的一級变化. 此表达式称为朗德公式.

只在假設微扰能量 V 与多重态之間的能差相比是小量时，(45) 式的結果才能成立. 对于較大的 V 値，要求更复杂的理論. 但是，对于很強的磁場，即 V 比起多重态之間的能差是大量时，理論又是很簡单的了. 这时，我們可以对沒有外場的原子完全忽略自旋磁矩能量，因而对于未微扰系統，$\mathbf{l}$ 与 $\mathbf{s}$ 本身都是运动恆量，而不只是它們的絕对値为运动恆量. 我們的微扰能量 V 仍是 $e\mathscr{H}/2mc\cdot(j_z+s_z)$，这时是未微扰系統的运动恆量，所以，它的本征値直接給出能級的变化. 这些本征値是 $e\mathscr{H}\hbar/2mc$ 的整数倍或半奇数倍，按照原子中电子的数目是偶数或奇数而定.

第八章　碰撞問題

§48. 概述

来自无限远处的一个粒子，与某原子系統相遇或碰撞，在被散射偏轉了一定角度以后，又走向无穷远处，在本章里，我們就来研究与这样的粒子有关的許多問題. 我們将把进行散射的原子系統簡称为散射中心. 这样，我們就有一个由彼此相互作用着的入射粒子与散射中心所組成的力学系統. 我們一定要按照量子力学規則来研究此系統，特別是，我們对此必須計算出偏轉任意已知角度的散射几率. 通常假定散射中心具有无穷大的質量，在整个散射过程中是不动的. 此問題首先是由玻恩解决的，他的方法实質上等效于下节所述的方法. 散射中心本身作为一个系統，可能有許多个不同的定态；如果粒子从无限远到达，在开始时散射中心处在这些态中的一个，而当粒子又走向无穷远去时，散射中心可能留在另一个不同的态，我們一定要考虑到这种可能性. 碰撞粒子可能在散射中心內部引起跃迁.

散射中心加上粒子这一整个系統的哈密頓量将不显含时間，所以，这整个系統将有定态，这些定态可由薛定諤波动方程的周期解来代表. 要正确地理解这些定态的意义需要仔細一点. 显然，对此系統的任意运动态，粒子在几乎全部时間內是在无穷远处，所以，粒子处于任意有限体积內的几率对时間的平均值将为零. 現在，对一个定态，粒子处于一給定有限体积內的几率，与其他任何观察結果一样，一定是与时間无关的，因而这个几率将等于它的时間平均值，而我們已看到，时間平均值是等于零的. 因此，只有粒子处于不同有限体积內的相对几率才有物理意义，它們的絕对值全都是零. 系統的总能量有連續的本征值，因为粒子的起始能量

可以是任意的．这样，相应于一个定态的右矢，例如$|s\rangle$，是总能量的本征右矢，它一定有无穷大的长度．我們能看出这一点的物理原因是：因为如果$|s\rangle$是归一化的，又如果取Q代表这样一个可观察量(粒子位置的某一函数)，当粒子处在一給定的有限体积內时它等于1，否則就等于零，那么$\langle s|Q|s\rangle$就会为零，这意味着Q的平均値，卽粒子处于給定体积內的几率为零．用这样一个右矢$|s\rangle$去討論問題是不方便的．但是，如果取$|s\rangle$为具有无穷长度的右矢，則$\langle s|Q|s\rangle$就可能是有限的，从而給出粒子在給定体积內的相对几率．

一个右矢$|x\rangle$若不是归一化的，而滿足$\langle x|x\rangle = n$，則在描述相应于它的系統的态时，方便的办法是我們假定有n个相同的系統，全都占据同样的空間，而在它們之間沒有相互作用，每一个按照自己的方式运动，而与其他的无关，就象我們在§33中的吉布斯系綜理論中所講的一样．这样，我們就能把$\langle x|\alpha|x\rangle$(其中$\alpha$是任意可观察量)直接地解释为对全部$n$个系統的$\alpha$的总値．把这些思想应用于上述的有无穷长度的$|s\rangle$，卽相应于散射中心加上碰撞粒子这一系統的定态的右矢，則我們应当描繪出无穷多个这样的系統，所有的散射中心都位于同一点上，而粒子則連續地分布于全部空間．在一給定有限体积內的粒子数目就可以表示为$\langle s|Q|s\rangle$，Q是上面定义的可观察量，卽当粒子在此給定体积內时它的値为1，否則它为零．如果表示此右矢的薛定諤波函数包含粒子的直角坐标，那么，此波函数的模量平方就能直接地被解释为此图象中的粒子密度．但是，我們一定要記住，这些粒子中的每一个有其自己单独的散射中心．不同粒子可能属于不同狀态下的散射中心．因此，对于散射中心的每一个态，将有一个粒子密度，卽属于在此态中的散射中心的那些粒子的密度．在波函数中除了包含描述粒子位置的变量而外，还包含描述散射中心的变量，由此就能把这一点考虑在內．

为了决定散射系数，我們必須探討散射中心加粒子这一整个系統的定态．例如，当散射中心开始时处于一已知定态，入射粒子

开始时在給定方向有一給定速度，如果我們要去决定在各个方向的散射几率,则我們一定要研究整个系統的定态,按上述方法,这个定态的图象包括在离开散射中心所在点很远处的一些粒子，它們以給定的初速与方向运动，其中每一个都属于处在給定的初始定态的散射中心,再加上从散射中心所在点向外运动的一些粒子,可能属于不同定态的散射中心. 这个图象密切地相当于决定散射系数的实验中的实际情况，不同之点是此图象实际上所描述的只是一个散射中心加粒子的实际系統. 在此图象中，向无穷远处运动的粒子的分布立刻告訴我們，可由实驗得到的全部有关散射系数的知識. 为了对由此图象所描述的定态进行实际計算，我們可以采用微扰法，即类似于 §43 中的方法,例如,可以取散射中心与粒子之間无相互作用的系統作为未微扰系統.

在研究碰撞間題时还需要考虑的另一种可能性是，散射中心有时能够吸收粒子，并再发射出粒子. 当整个系統存在有一个或多个吸收态时,这种可能性就会出現,系統的吸收态是一个近似的定态,它在 §38 末尾的意义下是閉合的(即对这个态，粒子离散射中心的距离大于 r 的几率当 $r\rightarrow\infty$ 时趋于零). 由于一个吸收态只是近似的定态,它为閉合的性質也仅是暂时的,在一足够长的时間后，粒子走向无穷远将有有限几率. 物理上这就意味着粒子的自发发射有一有限几率. 在叙述出現吸收与发射現象所要求的条件时,我們不得不采用“近似”一詞,这个事实表明，这些条件是不能用严格的数学語言来表述的. 我們只有采用微扰法說明，才能給出这些現象的意义. 当未微扰系統(由散射中心加粒子組成)有閉合的定态，这些現象就将出現. 引入了微扰就破坏了这些态的定态性質,从而引起自发发射与其相反的吸收.

为了計算吸收与发射几率，必需研究系統的非定态. 这是与計算散射几率的情形正相反的,所以必須采用 §44 的方法. 因此,为了計算发射系数,我們一定要考虑上面描述的不稳定的吸收态. 再者,由于一个吸收总是有一个重新发射跟着,在任何包含稳定事态(即相应于系統的定态)的实驗中,它就不能与散射区分开.要做

出这种区分，只有与不稳定事态相联系，才能做到，例如，用一束有尖銳的开端（即其流密度由零突然增至有限值——譯者注）的入射粒子，这样，被散射的粒子将在入射粒子遇到散射中心后立刻出現，而那些曾被吸收又发射出的粒子，则仅在稍后一些时間才会出現。这种粒子束应該是用以計算吸收系数的某一无限长右矢的图象。

§ 49. 散射系数

的情况，这意思即是，我們的未微扰系統沒有閉合的定态。我們可以方便地取这个未微扰系統为粒子与散射中心之間沒有相互作用的系統。这样，它的哈密頓量的形式为

$$E = H_s + W, \tag{1}$$

其中 H_s 是单有散射中心时的哈密頓量，而 W 为单有粒子时的哈密頓量，如不考虑相对論力学，后者就是

$$W = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2). \tag{2}$$

微扰能量 V 假定为小量，現在是粒子的直角坐标 x, y, z 的函数，

属于一个能級 E'，恰好等于我們受微扰定态的能級 H'. 这样，§43 的方程(3)的第二式中所引进的那些 a，現在全是零，而那里的方程(4)中的第二式現在成为

$$(E' - E)|1\rangle = V|0\rangle. \tag{3}$$

同样地，§43 方程(4)的第三式現在成为

$$(E' - E)|2\rangle = V|1\rangle. \tag{4}$$

現在我們去解方程(3)，并求出一級近似的散射系数． 我們将在 §51 中用到方程(4).

令 α 为描述散射中心的对易可观察量的完全集，当只有散射中心时，这些可观察量都是运动恆量，因而可以用来标記散射中心的定态. 这一点就要求 H_s 与各 α 对易，并且是各 α 的函数． 現在，我們可以取整个系統的一个表象，其中各 α 及粒子的坐标 x，y，z 都是对角的. 这也就使 H_s 成为对角的. 令 $|0\rangle$ 在此表象中的表示式为 $\langle\mathbf{x}\alpha'|0\rangle$，$|1\rangle$ 的表示式为 $\langle\mathbf{x}\alpha'|1\rangle$，其中单个变量 $\mathbf{x}$ 是写来代表 x，y，z 的，而且为了簡单起見，$\mathbf{x}$ 上的撇也略去了. 另外还用单一的微分 d^3x 写来代表乘积 $dxdydz$. 借助于 (1) 式与 (2) 式，把方程(3)用表示式写出来，变为

$$\begin{aligned}\{E' - H_s(\alpha') + \hbar^2/2m\cdot\nabla^2\}\langle\mathbf{x}\alpha'|1\rangle &= \\ &= \sum_{\alpha''}\int\langle\mathbf{x}\alpha'|V|\mathbf{x}''\alpha''\rangle d^3x''\langle\mathbf{x}''\alpha''|0\rangle.\end{aligned} \tag{5}$$

假定入射粒子的动量为 $\mathbf{p}^0$，而散射中心的起始定态是 α^0. 我們未微扰系統的定态現在就是 $\mathbf{p} = \mathbf{p}^0$, $\alpha = \alpha^0$ 的态，因而它的表示式为

$$\langle\mathbf{x}\alpha'|0\rangle = \delta_{\alpha'\alpha''}e^{i(\mathbf{p}^0\mathbf{x})/\hbar}. \tag{6}$$

这就使方程(5)簡化为

$$\begin{aligned}\{E' - H_s(\alpha') + \hbar^2/2m\cdot\nabla^2\}\langle\mathbf{x}\alpha'|1\rangle &= \\ &= \int\langle\mathbf{x}\alpha'|V|\mathbf{x}^0\alpha^0\rangle d^3x^0 e^{i(\mathbf{p}^0\mathbf{x}^0)/\hbar},\end{aligned}$$

或即

$$(k^2 + \nabla^2)\langle\mathbf{x}\alpha'|1\rangle = F, \tag{7}$$

其中

$$k^2 = 2m\hbar^{-2}\{E' - H_s(\alpha')\}, \tag{8}$$

而

$$F = 2m\hbar^{-2}\int\langle\mathbf{x}\alpha'|V|\mathbf{x}^0\alpha^0\rangle d^3x^0 e^{i(\mathbf{p}^0,\mathbf{x}^0)/\hbar}, \tag{9}$$

F 是 x, y, z 与 α 的确定的函数. 我們也一定有

$$E' = H_s(\alpha^0) + \mathbf{p}^{02}/2m. \tag{10}$$

現在我們的問題是求出(7)式的一个解 $\langle x\alpha'|1\rangle$, 对于远离散射中心的点的 x, y, z 值, 这个解只代表向外运动的粒子. 当入射粒子的密度为 $|\langle\mathbf{x}\alpha^0|0\rangle|^2$ 而此值为 1 时, 于是这解的模数平方 $|\langle\mathbf{x}\alpha'|1\rangle|^2$ 給出属于 α' 态散射中心的受散射粒子的密度. 如果我們变換到极坐标 r, θ, ϕ, 方程(7)变为

$$\left\{k^2 + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}\times \langle r\theta\phi\alpha'|1\rangle = F. \tag{11}$$

根据物理上的要求,当 $r\to\infty$ 时,这里的 F 必須趋于零,因为当散射中心与粒子的距离趋于无穷大时, 它們之間的相互作用能量一定趋于零. 如果我們完全略去方程(11)中的 F, 則当 r 值很大时的漸近解是

$$\langle r\theta\phi\alpha'|1\rangle = u(\theta\phi\alpha')r^{-1}e^{ikr}, \tag{12}$$

其中 u 是 θ, ϕ 与 α' 的任意函数, 因为这个表示式代入(11)的左边就給出一个数量級为 r^{-3} 的結果. 如果我們不略去 F, 当 r 大时(11)式的解仍然为(12)式的形式,只要当 $r\to\infty$ 时 F 足够快地趋于零, 但这时函数 u 就是确定的了, 而由当 r 值較小时的解所决定.

α 有一些值 α' 能使(8)式中定义的 k^2 为正,对这些值,在(12)式中的 k 一定要选擇为 k^2 的正平方根, 才能使(12)式可以代表只向外运动的粒子,也即是代表其动量的径向分量[按(38)式此分量等于 $p_r - i\hbar r^{-1}$ 或 $-i\hbar(\partial/\partial r + r^{-1})$]有正值的那些粒子. 我們在这里得出, 属于 α' 态散射中心的受散射粒子的密度, 等于(12)式的模量平方, 当 r 增加时按反平方規則而下降, 这一点正是物理上所必需的;这些受散射粒子的角分布是由 $|u(\theta\phi\alpha')|^2$ 給出的. 还有,这些受散射粒子的动量的絕对值 P' 一定等于 $k\hbar$, 而当 r 值

大时，此动量为径向的，所以受散射粒子的能量就等于

$$\frac{P'^2}{2m}=\frac{k^2\hbar^2}{2m}=E'-H_s(\alpha')=H_s(\alpha^0)-H_s(\alpha')+\frac{\mathbf{p}^{0^2}}{2m},$$

这里用了(8)式与(10)式．这恰恰就是入射粒子的能量 $\mathbf{p}^{0^2}/2m$ 减去散射中心的能量增加 $H_s(\alpha')-H_s(\alpha^0)$ 的結果，这是与能量守恆定律一致的．对于 α 的那些使 k^2 为負值的値 α'，就不存在受散射的粒子，因为起始能量不足以使散射中心最后留在 α' 态．

現在我們必須对使 k^2 为正的一組 α 値 α' 計算出 $u(\theta\phi\alpha')$，并求出属于散射中心为 α' 态的受散射粒子的角分布．只要計算出极坐标的极軸方向卽 $\theta=0$ 的方向上的 u 就够了，因为这个方向可以任意选取．我們利用格林(Green)定理，这个定理說，对位置的任意两个函数 A 与 B，在任意体积內的体积分 $\int(A\nabla^2B-B\nabla^2A)d^3x$ 等于在这个体积的边界面上的面积分 $\int A\partial B/\partial n-B\partial A/\partial n)dS$，其中 $\frac{\partial}{\partial n}$ 代表沿着此面法綫的微分．我們取

$$A=e^{-ikr\cos\theta},\quad B=\langle r\theta\phi\alpha'|1\rangle,$$

并把此定理应用于一个以原点为心的大球上．这样，体积分的被积函数是

$$\begin{aligned}&e^{-ikr\cos\theta}\nabla^2\langle r\theta\phi\alpha'|1\rangle-\langle r\theta\phi\alpha'|1\rangle\nabla^2e^{-ikr\cos\theta}\\&\quad=e^{-ikr\cos\theta}(\nabla^2+k^2)\langle r\theta\phi\alpha'|1\rangle=e^{-ikr\cos\theta}F,\end{aligned}$$

这是从(7)式或(11)式而得的，借助于(12)式，可得面积分的被积函数为

$$\begin{aligned}&e^{-ikr\cos\theta}\frac{\partial}{\partial r}\langle r\theta\phi\alpha'|1\rangle-\langle r\theta\phi\alpha'|1\rangle\frac{\partial}{\partial r}e^{-ikr\cos\theta}\\&=e^{-ikr\cos\theta}u\left(-\frac{1}{r^2}+\frac{ik}{r}\right)e^{ikr}+i\frac{u}{r}e^{ikr}k\cos\theta e^{-ikr\cos\theta}\\&=ikur^{-1}(1+\cos\theta)e^{ikr(1-\cos\theta)},\end{aligned}$$

这里略去了 r^{-2} 的項．因而我們得到

$$\int e^{-ikr\cos\theta}Fd^3x=\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^{\pi}r^2\sin\theta d\theta ikur^{-1}(1+\cos\theta)e^{ikr(1-\cos\theta)},$$

此式左边的体积分对整个空間进行．右边在对 θ 进行分部积分后成为

$$\int_0^{2\pi} d\phi \left\{ \left[u(1+\cos\theta)e^{ikr(1-\cos\theta)} \right]_{\theta=0}^{\theta=\pi} - \right.$$

$$\left. -\int_0^{\pi} e^{ikr(1-\cos\theta)} \frac{\partial}{\partial\theta}[u(1+\cos\theta)]d\theta \right\}.$$

在括号{ }内第二項的数量級为 r^{-1}，这一点可由再次进行分部积分而显示出来，因而可以忽略它．我們因此只剩下

$$\int e^{-ikr\cos\theta} F d^3x = -2\int_0^{2\pi} d\phi u(0\phi\alpha') = -4\pi u(0\phi\alpha'),$$

它給出在 $\theta=0$ 方向上的 $u(\theta\phi\alpha')$ 之値．

因为 $P'=k\hbar$，这个結果可以写成

$$u(0\phi\alpha') = -(4\pi)^{-1}\int e^{-iP'r\cos\theta/\hbar} F d^3x. \tag{13}$$

如果矢量 $\mathbf{p}'$ 代表沿某一方向离开的受散射粒子的动量（因而它的絕对値为 P'），則在此方向的 u 値为

$$u(\theta'\phi'\alpha') = -(4\pi)^{-1}\int e^{-i(\mathbf{p}',\mathbf{x})/\hbar} F d^3x,$$

这是从(13)式得出的，只要我們取此方向为极坐标的极軸．当我們作一个变換，卽从粒子的坐标 $\mathbf{x}$ 变換到粒子的动量 $\mathbf{p}$，利用 §23 的变換函数(54)，則借助于(9)式，上式变成

$$\begin{aligned} u(\theta'\phi'\alpha') &= -(2\pi)^{-1}m\hbar^{-2}\iint e^{-i(\mathbf{p}',\mathbf{x})/\hbar}d^3x\langle\mathbf{x}\alpha'|V|\mathbf{x}^0\alpha^0\rangle d^3x^0 e^{i(\mathbf{p}^0,\mathbf{x}^0)/\hbar} \\ &= -2\pi mh\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle, \end{aligned} \tag{14}$$

这里用一个字母 $\mathbf{p}$ 作为动量三个分量的标記．

現在已得出属于散射中心在 α' 态的受散射粒子的密度为 $|u(\theta'\phi'\alpha')|^2/r^2$．由于它們的速度是 P'/m，这些粒子在围繞矢量 $\mathbf{p}'$ 的方向的每单位立体角中出現的几率为 $P'/m\cdot|u(\theta'\phi'\alpha')|^2$．我們已經看到，入射粒子的密度是 1，所以，每单位时間穿过单位面积的入射粒子数等于它們的速度 P^0/m，其中 P^0 是 $\mathbf{p}^0$ 的絕对値．因此，为了要在受散射后使粒子在 $\mathbf{p}'$ 方向上的单位立体角內而且属于散射中心的 α' 态，則入射粒子所必需击中的有效面积为

$$P'/P^0\cdot|u(\theta'\phi'\alpha')|^2 = 4\pi^2m^2h^2P'/P_0\cdot|\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|\mathbf{p}_0\alpha_0\rangle|^2. \quad (15)$$

这就是对于散射中心的 $\alpha^0\to\alpha'$ 跃迁的散射系数. 它决定于微扰能量 V 的矩陣元 $\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle$,此矩陣元的行 $\mathbf{p}^0\alpha^0$ 与列 $\mathbf{p}'\alpha'$ 分别相关于未微扰系統的初态与終态, 散射跃迁过程就是在这两个态之間进行的. 因此,(15)式的結果在某种方式上与§44的結果(24)式相似,虽然由于两个跃迁过程的性質不同,在两种情况下数値因子是不相同的.

§50. 动量表象中的解

散射系数的結果(15)式只涉及动量 $\mathbf{p}$ 是对角的表象. 因此, 人們期望能够得到对此結果的更直接証明, 卽全部在 $\mathbf{p}$ 表象中研究, 而不是象在 §49 中所做的那样, 先在 $\mathbf{x}$ 表象中研究, 再在結束时变换到 $\mathbf{p}$ 表象. 乍看起来,这可能不是一个很大的改进,因为 $\mathbf{x}$ 表象方法的不够直接的缺点, 可能会被它可以更直接地应用这一优点抵消掉, 卽我們可以把一个态的 $\mathbf{x}$ 表示式的模量平方图象地看成是在受散射过程中粒子流的密度. 但是, $\mathbf{x}$ 表象方法还有其他更严重的缺点. 碰撞理論的主要应用之一是以光子作为入射粒子的情况. 而光子不是一个簡单的粒子, 它是有偏振的. 从經典电磁理論显然得知,有确定动量的光子,卽有确定頻率在确定方向上运动的光子, 可以有一个确定的偏振态(綫偏振, 圓偏振…等),而有确定位置的光子应該被图象地看作是被限制在一个很小体积內的电磁扰动, 是不可能有任何确定的偏振的. 这些事实的意义是,光子的偏振可观察量与它的动量对易,而不与它的位置对易. 这一点的結果是, $\mathbf{p}$ 表象方法可直接应用于光子的情况, 只要把偏振变量引进表示式中, 按照描写散射中心的各 α 一样处理卽可,而 $\mathbf{x}$ 表象方法则是不能应用的. 还有,在研究光子时必需計入相对論力学. 这一点在 $\mathbf{p}$ 表象方法中容易做到, 而在 $\mathbf{x}$ 表象方法中却难以做到.

用了相对論力学,方程(3)仍然成立,但此时 W 由下式給出:

$$W^2/c^2 = m^2c^2 + P^2 = m^2c^2 + p_x^2 + p_y^2 + p_z^2, \quad (16)$$

而不是由(2)式給出了. 用 $\mathbf{p}$ 表示式写出来,方程(3)給出

$$\{E' - H_s(\alpha') - W\}\langle \mathbf{p}\alpha' | 1\rangle = \langle \mathbf{p}\alpha' | V | 0\rangle,$$

为了簡单起見，我們用 $\mathbf{p}$ 代替 $\mathbf{p}'$. 而 W 应了解为由（16）式給出的 p_x, p_y, p_z 的一个确定函数. 此式又可以写为

$$(W' - W)\langle \mathbf{p}\alpha' | 1\rangle = \langle \mathbf{p}\alpha' | V | 0\rangle, \qquad (17)$$

其中

$$W' = E' - H_s(\alpha'), \qquad (18)$$

W' 是对一个属于散射中心为 α' 态的受散射粒子按能量守恆定律所要求的能量. 右矢 $|0\rangle$ 在 $\mathbf{x}$ 表象中由(6)式表示,而基右矢 $|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle$ 的表示式为

$$\langle \mathbf{x}\alpha' | \mathbf{p}^0\alpha^0\rangle = \delta_{\alpha'\alpha^0}\langle \mathbf{x} | \mathbf{p}^0\rangle = \delta_{\alpha'\alpha^0} h^{-\frac{3}{2}} e^{i(\mathbf{p}^0,\mathbf{x})/\hbar},$$

这是由 §23 的变换函数(54)式得出的. 因此,

$$|0\rangle = h^{\frac{3}{2}} |\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle, \qquad (19)$$

而方程(17)可以写成

$$(W' - W)\langle \mathbf{p}\alpha' | 1\rangle = h^{\frac{3}{2}}\langle \mathbf{p}\alpha' | V | \mathbf{p}^0\alpha^0\rangle. \qquad (20)$$

現在我們作一个变换,即从 $\mathbf{p}$ 的直角坐标 p_x, p_y, p_z 变换到它的极坐标 P, ω, χ, 它們由下式給出:

$$p_x = P\cos\omega, \quad p_y = P\sin\omega\cos\chi, \quad p_z = P\sin\omega\sin\chi.$$

如果在新的表象中我們取权重函数为 $P^2\sin\omega$, 那么，与 $\mathbf{p}$ 空間中任意体积联系的权重将与前面的 $\mathbf{p}$ 表象一样，所以这个变換簡单地意味着矩陣的行与列的重新标記，而沒有引起矩陣元的任何改变. 因此,在此新的表象中,(20)式变为

$$(W' - W)\langle P\omega\chi\alpha' | 1\rangle = h^{\frac{3}{2}}\langle P\omega\chi\alpha' | V | P^0\omega^0\chi^0\alpha^0\rangle, \qquad (21)$$

W 这时是单一变量 P 的函数.

$\langle P\omega\chi\alpha' | 1\rangle$ 的系数即 $W' - W$, 这时簡单地是一个相乘因子，而不是象它在 $\mathbf{x}$ 表象方法中那样是一个微分算符. 因而，我們能用此因子去除而得到 $\langle P\omega\chi\alpha' | 1\rangle$ 的明显表达式. 但是,当 α 的值使得由(18)式定义的 W' 大于 mc^2 时，对于变量 P 的变域內某一点，这个因子有零值,这一点即是由(16)式中用 W' 表示出的 $P = P'$. 于是，函数 $\langle P\omega\chi\alpha' | 1\rangle$ 将在这一点有一个奇点. 这个奇点表明

$\langle P\omega\chi\alpha'|1\rangle$ 表示无穷多个粒子在离开散射中心很远处运动，它們具有无限接近 W' 的能量，因此这个奇点正是我們必須要去研究的,以求得粒子在无穷远的角分布.

按照 §15 的(13)式,将(21)式除以因子 $W'-W$ 的結果为

$$\langle P\omega\chi\alpha'|1\rangle = h^{\frac{3}{2}}\langle P\omega\chi\alpha'|V|P^0\omega^0\chi^0\alpha^0\rangle/(W'-W) + \\ + \lambda(\omega\chi\alpha')\delta(W'-W), \qquad (22)$$

其中 λ 是 ω, χ 与 α' 的任意函数. 为了給出(22)式右边第一項的意义,我們作一个約定,把在包括 P' 値的一个范围內对 P 的积分,約定为把小区域 $P'-\epsilon$ 到 $P'+\epsilon$ 从这个范围內除掉而得的积分在 $\epsilon\to 0$ 时的极限. 这个約定足以使(22)式的意义精确化,因为当表象有連續范围的行与列时，从效果上看对我們有意义的只是态的表示式的积分. 我們看到，由于在(21)式中出現了任意函数 λ,方程(21)不足以完全决定表示式 $\langle P\omega\chi\alpha'|1\rangle$. 我們必須如此选择这个 λ, 使$\langle P\omega\chi\alpha'|1\rangle$代表的只是向外运动的粒子，因为我們要求只有相应于$|0\rangle$的粒子向內运动.

让我們首先取普遍的情况,即粒子的态的表示式$\langle P\omega\chi|\rangle$滿足如下型式的方程:

$$(W'-W)\langle P\omega\chi|\rangle = f(P\omega\chi), \qquad (23)$$

其中 $f(P\omega\chi)$ 是 P, ω 与 χ 的任意函数，而 W' 是大于 mc^2 的一个数,所以$\langle P\omega\chi|\rangle$形为

$$\langle P\omega\chi|\rangle = f(P\omega\chi)/(W'-W) + \lambda(\omega\chi)\delta(W'-W), \qquad (24)$$

現在让我們来决定,为使 $\langle P\omega\chi|\rangle$ 能够代表只有向外运动的粒子，λ 必須是怎样的. 我們能做到这一点的办法是,把$\langle P\omega\chi|\rangle$变换到 $\mathbf{x}$ 表象,或者应該說变换到$(r\theta\phi)$表象，并把它与(12)式在 r 值大时作一比較. 变换函数是

$$\langle r\theta\phi|P\omega\chi\rangle = h^{-\frac{3}{2}}e^{i(\mathbf{p},\mathbf{x})/\hbar} = \\ = h^{-\frac{3}{2}}e^{iPr(\cos\omega\cos\theta+\sin\omega\sin\theta\cos(\chi-\phi))/\hbar}.$$

对 $\theta=0$ 的方向,我們求得

$$\langle r0\phi|\rangle = h^{-\frac{3}{2}}\int_0^\infty P^2dP\int_0^{2\pi}d\chi\int_0^\pi \sin\omega d\omega e^{iPr\cos\omega/\hbar}\langle P\omega\chi|\rangle$$

$$= h^{-\frac{3}{2}}\int_0^\infty P^2dP\int_0^{2\pi} d\chi \left\{-\left[\frac{e^{iPr\cos\omega/\hbar}}{iPr/\hbar}\langle P\omega\chi|\rangle\right]_{\omega=0}^{\omega=\pi} + \right.$$

$$\left. + \int_0^\pi d\omega \frac{e^{iPr\cos\omega/\hbar}}{iPr/\hbar}\frac{\partial}{\partial\omega}\langle P\omega\chi|\rangle\right\}.$$

在括号{ }中的第二项的数量級为 r^{-2}，这一点可用进一步对 ω 的分部积分来驗証，因而这一項可以略去，剩下的是

$$\langle r0\phi|\rangle = ih^{-\frac{1}{2}}(2\pi r)^{-1}\int_0^\infty PdP\int_0^{2\pi} d\chi \times$$

$$\times\{e^{-iPr/\hbar}\langle P\pi\chi|\rangle - e^{iPr/\hbar}\langle P0\chi|\rangle\}$$

$$= ih^{-\frac{1}{2}}r^{-1}\int_0^\infty PdP\{e^{-iPr/\hbar}\langle P\pi\chi|\rangle - e^{iPr/\hbar}\langle P0\chi|\rangle\}. \quad (25)$$

当我們把 $\langle P\omega\chi|\rangle$ 用(24)式所給出的値代入时，(25)式的被积函数的第一項給出

$$ih^{-\frac{1}{2}}r^{-1}\int_0^\infty PdPe^{-iPr/\hbar}\{f(P\pi\chi)/(W'-W) +$$

$$+ \lambda(\pi\chi)\delta(W'-W)\}. \quad (26)$$

当我們利用从(16)式得出的关系式 $PdP = WdW/c^2$，則这里包含 $\delta(W'-W)$的項可以直接积分出来，从而得

$$ih^{-\frac{1}{2}}c^{-2}r^{-1}\int_{mc^2}^\infty WdWe^{-iPr/\hbar}\lambda(\pi\chi)\delta(W'-W)$$

$$= ih^{-\frac{1}{2}}c^{-2}r^{-1}W'\lambda(\pi\chi)e^{-iP'r/\hbar}. \quad (27)$$

为了把(26)式中另一項积分，我們用公式

$$\int_0^\infty g(P)\frac{e^{-iPr/\hbar}}{P'-P}dP = g(P')\int_0^\infty\frac{e^{-iPr/\hbar}}{P'-P}dP, \quad (28)$$

其中略去了含 r^{-1} 的項，此式对任意連續函数 $g(P)$ 成立，是由于对任意連續函数 $K(P)$，$\int_0^\infty K(P)e^{-iPr/\hbar}dP$ 的数量級为 r^{-1}，而且又由于差

$$g(P)/(P'-P) - g(P')/(P'-P)$$

是連續的. (28)式右边的計算当略去含 r^{-1} 的項同时也略去积分区域中的小区域 $P'-\epsilon$ 到 $P'+\epsilon$ 时就給出

$$g(P')\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-iPr/\hbar}}{P'-P}\,dP = g(P')e^{-iP'r/\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{i(P'-P)r/\hbar}}{P'-P}\,dP$$

$$= ig(P')e^{-iP'r/\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin(P'-P)r/\hbar}{P'-P}\,dP = i\pi g(P')e^{-iP'r/\hbar}. \quad (29)$$

在我們現在的例子中，$g(P)$是

$$g(P) = ih^{-\frac{1}{2}}r^{-1}Pf(P\pi\chi)(P'-P)/(W'-W),$$

当 $P = P'$ 时，此式的极限值为

$$g(P') = ih^{-\frac{1}{2}}r^{-1}P'f(P'\pi\chi)W'/P'c^2 = ih^{-\frac{1}{2}}c^{-2}r^{-1}W'f(P'\pi\chi).$$

把此式代入(29)式，加在表达式(27)上，我們得到积分(26)式的值如下：

$$h^{-\frac{1}{2}}c^{-2}r^{-1}W'\{-\pi f(P'\pi\chi) + i\lambda(\pi\chi)\}e^{-iP'r/\hbar}. \quad (30)$$

同样地，(25)式积分的第二項給出

$$h^{-\frac{1}{2}}c^{-2}r^{-1}W'\{-\pi f(P'0\chi) - i\lambda(0\chi)\}e^{iP'r/\hbar}. \quad (31)$$

这两个表达式之和就是当 r 很大时$\langle r0\phi|\rangle$的值.

我們要求$\langle r0\phi|\rangle$应表示只向外运动的粒子，因而，它一定具有 $e^{iP'r/\hbar}$ 的倍数的形式. 因此，(30)式一定为零，所以有

$$\lambda(\pi\chi) = -i\pi f(P'\pi\chi). \quad (32)$$

按此方法，我們看到，在 $\theta = 0$ 的方向 $\langle r\theta\phi|\rangle$只应表示向外运动的粒子的条件，就决定了在相反方向即 $\theta = \pi$ 时的 λ 值. 由于我們的极坐标的极軸方向($\theta = 0$，或 $\omega = 0$)在任何方面都并不是特出的，我們能够把(32)式推广为

$$\lambda(\omega\chi) = -i\pi f(P'\omega\chi), \quad (33)$$

这就給出了任意方向的 λ 值. 这个值代入(24)式給出的結果可以写成

$$\langle P\omega\chi|\rangle = f(P\omega\chi)\{1/(W'-W) - i\pi\delta(W'-W)\}, \quad (34)$$

这是因为在一个包含 $\delta(W'-W)$ 項的系数中，我們可以用 P 代替 P' 作为因子而不会改变这項的值. 因此，$\langle P\omega\chi|\rangle$只表示向外运动的粒子的条件是它应該包括下列因子：

$$\{1/(W'-W) - i\pi\delta(W'-W)\}. \quad (35)$$

值得指出的是，这个因子的形式与§15中方程(15)的右边相同.

利用(33)式給出的 λ，表达式 (30) 变为零，而对于 r 大时的 $\langle r0\phi|\rangle$ 值由(31)式单独給出，于是

$$\langle r0\phi|\rangle = -2\pi h^{-\frac{1}{2}}c^{-2}r^{-1}W'f(P'0\chi)e^{iP'r/\hbar}.$$

此式可以推广为

$$\langle r\theta\phi|\rangle = -2\pi h^{-\frac{1}{2}}c^{-2}r^{-1}W'f(P'\omega\chi)e^{iP'r/\hbar},$$

它給出用 $f(P'\omega\chi)$ 表示的在任意方向 θ, ϕ 上 $\langle r\theta\phi|\rangle$ 的値，其中 ω, χ 与 θ, ϕ 代表同一方向. 如果取

$$u(\theta\phi) = -2\pi h^{-\frac{1}{2}}c^{-2}W'f(P'\omega\chi),$$

上式就是(12)式的形式了，因此，它代表动量为 P' 的向外运动的粒子的分布，在每单位时間、每单位立体角內这些粒子的数目为

$$\frac{c^2P'}{W'}|u|^2 = \frac{4\pi^2W'P'}{hc^2}|f(P'\omega\chi)|^2. \tag{36}$$

这个分布就是(34)式的 $\langle P\omega\chi|\rangle$ 所表示的分布.

从这个普遍結果我們可以推断，每当我們有一个表示式 $\langle P\omega\chi|\rangle$ 只代表向外运动的粒子，并满足形如(23)式的方程，則在每单位时間、每单位立体角內的这些粒子的数目就由 (36) 式給出. 如果在入射粒子数为每单位体积一个的問題中出現了这个 $\langle P\omega\chi|\rangle$，則与它相应的散射系数値为

$$\frac{4\pi^2W^0W'P'}{hc^4P^0}|f(P'\omega\chi)|^2. \tag{37}$$

重要的只是函数 $f(P\omega\chi)$ 在 $P = P'$ 这一点上的値.

如果現在我們把此普遍理論应用于我們方程(21)与(22)，我們就有

$$f(P\omega\chi) = h^{\frac{3}{2}}\langle P\omega\chi\alpha'|V|P^0\omega^0\chi^0\alpha^0\rangle,$$

因此，从(37)式得散射系数为

$$4\pi^2h^2W^0W'P'/c^4P^0\cdot|\langle P'\omega\chi\alpha'|V|P^0\omega^0\chi^0\alpha^0\rangle|^2. \tag{38}$$

如果我們不考虑相对論，而令 $W^0W'/c^4 = m^2$，此結果就簡化为在上节用格林定理所得的結果(15).

§ 51. 色散散射

現在我們来决定入射粒子能被吸收时的散射，也即是，我們的

散射中心加粒子的未微扰系統具有粒子被吸收的閉合定态时的散射.我們发現未微扰系統的这些閉合态的存在,对受微扰系統的散射有相当大的效应,实际上,是与入射粒子的能量很有关系的一个效应,当取入射粒子为光子时,这个效应引起光学中的色散現象.

我們采用一个表象,它的基右矢相应于未微扰系統的定态,就象上节中 $\mathbf{p}$ 表象的情况一样. 我們取这些定态为粒子有一确定动量 $\mathbf{p}'$ 而散射中心处于确定态 α' 的那些态 $(\mathbf{p}'\alpha')$ 再加上那些閉合态如 k,它組成另外一个分立集;并且假定这些态全是互不相关的,全是正交的. 当粒子为一个电子或原子核时,这个假定是不精确的,因为在这种情况下,对一个吸收态 k,粒子仍将肯定地在某一地方,所以,人們会期望能够把 $|k\rangle$ 展开为 x, y, z 与 α 的本征右矢 $|\mathbf{x}'\alpha'\rangle$ 的綫性組合,因而也能展开为 $|\mathbf{p}'\alpha'\rangle$ 的綫性組合. 另一方面,当粒子是光子时,对于吸收态,粒子将不再存在,吸收态这时肯定是与有粒子存在的各个态 $(\mathbf{p}'\alpha')$ 互不相关,并且是正交的.因此,在这种情况,此假定是有效的,而这种情况是一个重要的实际情况.

因为我們关心的是散射,我們仍然必須研究整个系統的定态. 但是,我們必須用二級近似的精确度来进行,所以不能只用一級的方程(3),而一定也要用(4)式. 当用我們目前的表象中的表示式写出时,方程(3)变为

$$\left.\begin{aligned}(W'-W)\langle\mathbf{p}\alpha'|1\rangle &= \langle\mathbf{p}\alpha'|V|0\rangle,\\(E'-E_k)\langle k|1\rangle &= \langle k|V|0\rangle,\end{aligned}\right\}\tag{39}$$

其中 W' 是由(18)式給出的 α 与 E 的函数. 而 E_k 是未微扰系統的定态 k 的能量. 同样,方程(4)变成

$$\left.\begin{aligned}(W'-W)\langle\mathbf{p}\alpha'|2\rangle &= \langle\mathbf{p}\alpha'|V|1\rangle,\\(E'-E_k)\langle k|2\rangle &= \langle k|V|1\rangle,\end{aligned}\right\}\tag{40}$$

用矩陣乘法把右边展开,我們得到

$$\begin{aligned}(W'-W)\langle\mathbf{p}\alpha'|2\rangle = \sum_{\alpha''}\int\langle\mathbf{p}\alpha'|V|\mathbf{p}''\alpha''\rangle d^3p''\langle\mathbf{p}''\alpha''|1\rangle + \\ + \sum_{k''}\langle\mathbf{p}\alpha'|V|k''\rangle\langle k''|1\rangle,\end{aligned}$$

$$\left.\begin{aligned}(E'-E_k)\langle k|2\rangle &= \sum_{\alpha''}\int\langle k|V|\mathbf{p}''\alpha''\rangle d^3p''\langle\mathbf{p}''\alpha''|1\rangle + \\ &+\sum_{k''}\langle k|V|k''\rangle\langle k''|1\rangle.\end{aligned}\right\}\tag{41}$$

右矢$|0\rangle$仍然由(19)式給出，所以，(39)式可写成

$$(W'-W)\langle\mathbf{p}\alpha'|1\rangle = h^{\frac{3}{2}}\langle\mathbf{p}\alpha'|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle,\tag{42}$$

$$(E'-E_k)\langle k|1\rangle = h^{\frac{3}{2}}\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle.\tag{43}$$

我們可以假定，V的矩陣元$\langle k'|V|k''\rangle$为零，因为这些矩陣元对所研究現象不是主要的，而且，如果它們卽使不为零，这也只簡单地意味着吸收态k未曾选择得恰当．我們将进一步假定，当矩陣元$\langle k'|V|\mathbf{p}''\alpha''\rangle$，$\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k''\rangle$都取为一級小量，則矩陣元$\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|\mathbf{p}''\alpha''\rangle$是二級小量．这个假定将在§64中对光子的情况加以証明．从(43)式与(42)式，我們現在得到，如果E'并不靠近分立的能級E_k中的一个，則$\langle k|1\rangle$是一級小量，而$\langle\mathbf{p}\alpha'|1\rangle$是二級小量．因此，从方程(41)中的第一式得到，二級近似的$\langle\mathbf{p}\alpha'|2\rangle$的值由下式給出：

$$(W'-W)\langle\mathbf{p}\alpha'|2\rangle = h^{\frac{3}{2}}\sum_{k''}\langle\mathbf{p}\alpha'|V|k''\rangle\langle k''|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle/(E'-E_{k''}).$$

波函数的全部二級修正，卽$\langle\mathbf{p}\alpha'|1\rangle$加$\langle\mathbf{p}\alpha'|2\rangle$，因而滿足

$$\begin{aligned}&(W'-W)\{\langle\mathbf{p}\alpha'|1\rangle + \langle\mathbf{p}\alpha'|2\rangle\}\\ &= h^{\frac{3}{2}}\{\langle\mathbf{p}\alpha'|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle + \sum_k\langle\mathbf{p}\alpha'|V|k\rangle\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle/(E'-E_k)\}.\end{aligned}$$

如果α'是能使$W'>mc^2$的，卽α'作为散射中心的終态不与能量守恆定律相矛盾，則这个方程是(23)式形式的．因此我們能从(37)式的普遍結果推断，散射系数为

$$\frac{4\pi^2h^2W^0W'P'}{c^4P^0}\left|\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle + \sum_k\frac{\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k\rangle\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle}{E'-E_k}\right|^2.\tag{44}$$

此散射現在可以当作是由两部分組成的，一部分是由微扰能量的矩陣元$\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle$引起的，一部分是由矩陣元$\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k\rangle$

与$\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle$引起的．第一部分与我們以前得到的結果(38)式相同，可以称为直接散射．第二部分可以看成是先把入射粒子吸收进某个 k 态，立即跟着向不同方向重新发射的过程所引起的；这一部分类似于 §44 中研究过的經过中間态的跃迁．我們必須在取模量平方以前先把这两項加起来，这一事实代表这两种散射之間的干涉．沒有实驗方法能够分开这两种散射，它們之間的区别只是数学上的．

§ 52. 共振散射

我們假定入射粒子的能量連續地变化，而散射中心的初态 α^0 保持不变，这样，总能量 E' 或 H' 就連續地变化．这时，公式(44)表明，当 E' 趋近于分立能級 E_k 中之一时，散射变得很大． 事实上，如按照公式(44)，当 E' 恰好等于一个 E_k 时，散射应为无限大．当然，散射系数为无限大在物理上是不可能的．所以我們可以断言，当 E' 靠近一个 E_k 时，用来推导(44)式的漸近方法不再是合理的．因此，为研究在此情况下的散射，我們必須回到精确方程：

$$(E'-E)|H'\rangle = V|H'\rangle,$$

即 §43 中的方程(2)，但用 E' 代替了其中的 H'，而且要用不同的方法来求它的近似解．这个精确的方程用类似于(41)式的表示式写出来，就变成

$$\left.\begin{aligned}
&(W'-W)\langle\mathbf{p}\alpha'|H'\rangle \\
&\qquad=\sum_{\alpha''}\int\langle\mathbf{p}\alpha'|V|\mathbf{p}''\alpha''\rangle d^3p''\langle\mathbf{p}''\alpha''|H'\rangle+ \\
&\qquad\quad+\sum_{k''}\langle\mathbf{p}\alpha'|V|k''\rangle\langle k''|H'\rangle, \\
&(E'-E_k)\langle k|H'\rangle \\
&\qquad=\sum_{\alpha''}\int\langle k|V|\mathbf{p}''\alpha''\rangle d^3p''\langle\mathbf{p}''\alpha''|H'\rangle+ \\
&\qquad\quad+\sum_{k''}\langle k|V|k''\rangle\langle k''|H'\rangle.
\end{aligned}\right\}\tag{45}$$

让我們取一特定的 E_k，并研究当 E' 接近于它的情况．这时，

散射系数(44)式中的大項来自表示V的矩陣的那些在k行或k列的矩陣元，即来自那些形为$\langle k|V|\mathbf{p}\alpha'\rangle$或$\langle \mathbf{p}\alpha|V|k\rangle$的矩陣元. 由$V$的其他矩陣元所引起的散射具有較小的数量級. 这一点提示出在我們的精确方程(45)中,我們应当作一近似,即忽略掉V的其他矩陣元，只保留那些形如$\langle\mathbf{p}\alpha'|V|k\rangle$或$\langle k|V|\mathbf{p}\alpha'\rangle$的重要矩陣元，其中$\alpha'$是散射中心的一个态，它的能量不是太大，以致按能量守恆定律,还容許它作为終态. 于是,这些方程簡化为

$$\left.\begin{aligned}(W'-W)\langle\mathbf{p}\alpha'|H'\rangle &= \langle\mathbf{p}\alpha'|V|k\rangle\langle k|H'\rangle,\\ (E'-E_k)\langle k|H'\rangle &= \sum_{\alpha'}\int\langle k|V|\mathbf{p}\alpha'\rangle d^3p\langle\mathbf{p}\alpha'|H'\rangle,\end{aligned}\right\}\tag{46}$$

对α'求和包括使(18)式給出的$W'>mc^2$的那些α'的值. 現在这些方程已十分簡单,我們能够精确地求解它們,而不用再取近似了.

从方程(46)的第一式,用除法我們得

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{p}\alpha'|H'\rangle = \langle\mathbf{p}\alpha'|V|k\rangle\langle k|H'\rangle/(W'-W)+\\ +\lambda\delta(W'-W).\end{aligned}\tag{47}$$

其中λ可能为动量$\mathbf{p}$与α'的任意函数，我們应当这样来选择它，使(47)式表示相应于$|0\rangle$即$h^{\frac{3}{2}}|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle$的入射粒子加上只向外运动的粒子. [$h^{\frac{3}{2}}|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle$的表示式实际上为$\lambda\delta(W'-W)$的形式，因为它不为零的条件$\alpha'=\alpha^0$, $\mathbf{p}=\mathbf{p}^0$, 导致$W'=E'-H_s(\alpha')=E'-H_s(\alpha^0)=W^0=W$]. 因此,(47)式一定是

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{p}\alpha'|H'\rangle &= h^{\frac{3}{2}}\langle\mathbf{p}\alpha'|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle+\\ &+\langle\mathbf{p}\alpha'|V|k\rangle\langle k|H'\rangle\{1/(W'-W)-i\pi\delta(W'-W)\},\end{aligned}\tag{48}$$

从普遍公式(37)得知,散射系数为

$$4\pi^2W^0W'P'/hc^4P^0\cdot|\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k\rangle|^2|\langle k|H'\rangle|^2.\tag{49}$$

剩下的問題是决定$\langle k|H'\rangle$的值.我們把(48)式給出的$\langle\mathbf{p}\alpha'|H'\rangle$值代入方程(46)的第二式,就能做到这一点. 这样得出

$$\begin{aligned}(E'-E_k)\langle k|H'\rangle &= h^{\frac{3}{2}}\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle+\\ &+\langle k|H'\rangle\sum_{\alpha'}\int|\langle k|V|\mathbf{p}\alpha'\rangle|^2\{1/(W'-W)-i\pi\delta(W'-W)\}d^3p\end{aligned}$$

$$= h^{\frac{3}{2}}\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle + \langle k|H'\rangle(a - ib),$$

其中

$$a = \sum_{\alpha'}\int|\langle k|V|\mathbf{p}\alpha'\rangle|^2 d^3p/(W' - W), \tag{50}$$

而

$$\begin{aligned} b &= \pi\sum_{\alpha'}\int|\langle k|V|\mathbf{p}\alpha'\rangle|^2\delta(W' - W)d^3p \\ &= \pi\sum_{\alpha'}\iiint|\langle k|V|P\omega\chi\alpha'\rangle|^2\delta(W' - W)P^2 dP\sin\omega d\omega d\chi \\ &= \pi\sum_{\alpha'}P'W'c^{-2}\iint|\langle k|V|P'\omega\chi\alpha'\rangle|^2\sin\omega d\omega d\chi. \end{aligned} \tag{51}$$

因此，

$$\langle k|H'\rangle = h^{\frac{3}{2}}\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle/(E' - E_k - a + ib). \tag{52}$$

注意，a 与 b 都是实数，而且 b 是正数.

$\langle k|H'\rangle$的这个值代入(49)式，就給出散射系数为

$$\frac{4\pi^2h^2W^0W'P'}{c^4P^0}\frac{|\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k\rangle|^2|\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle|^2}{(E' - E_k - a)^2 + b^2}. \tag{53}$$

我們能够求得为了被散射到所有地方入射粒子所必須击中的全部有效面积，求法是把(53)式对所有散射方向积分，即对矢量 $\mathbf{p}'$ 的所有方向积分，而使其絕对值保持为 P'，然后对所有应考虑的 α' 求和（即是，对所有使 $W' > mc^2$ 的 α' 求和）. 这样，借助于(51)式，就得出結果为

$$\frac{4\pi h^2W^0}{c^2P^0}\frac{b|\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle|^2}{(E' - E_k - a)^2 + b^2}. \tag{54}$$

如果我們假定 E' 連續地变化，幷通过 E_k 值，则(53)式或(54)式的主要变化是由小分母 $(E' - E_k - a)^2 + b^2$ 所产生的. 如果我們忽略(53)与(54)式中其他因子与 E' 的关系，那么，当 E' 有值为 $E_k + a$ 时，将出現最大散射，而当 E 与此值相差为 b 时，散射将为其最大值的一半. 在入射粒子的能量值使 E' 接近等于 E_k 时出現的大量散射，引起一条吸收綫的現象. 吸收綫的中心偏离入射粒子的共振能（即使总能量恰为 E_k 的入射粒子的能量）一个量 a，而量 b 就是我們有时称之为綫的半寬度的量.

§ 53. 发射与吸收

为了研究发射与吸收，我們必須考虑系統的非定态，并且必須用§44的微扰法. 为要决定自发发射的系数，我們必須取粒子被吸收了的起始态相应于一个右矢$|k\rangle$，并去决定在某一較后的时間粒子以一确定的动量走向无限远处的几率. 这里就可以用到§46的方法了. 从那一节的結果(39)式我們看到，使散射中心留在态α'而在每单位时間、在ω与χ的每单位范围內粒子按任意方向ω'，χ'发射出的几率为

$$2\pi\hbar^{-1}|\langle W'\omega'\chi'\alpha'|V|k\rangle|^2, \tag{55}$$

当然，只要α'使(18)式所給出的粒子能量W'大于mc^2. 对于那些不滿足这个条件的α'的值，就沒有发射的可能. 这里的矩陣元$\langle W'\omega'\chi'\alpha'|V|k\rangle$必須与一个$W$, ω, χ与α都是对角的表象相关，而表象的权重函数为1. 在前三节中出現的V的矩陣元所相关的表象是，p_x, p_y, p_z是对角的，权重函数为1，或者P, ω, χ是对角的，权重函数为$P^2\sin\omega$. 因此，它們所相关的表象是W, ω, χ, 为对角的表象，其权重函数为$dP/dW\cdot P^2\sin\omega = WP/c^2\cdot\sin\omega$. 所以，在(55)式中的矩陣元$\langle W'\omega'\chi'\alpha'|V|k\rangle$等于$(W'P'/c^2\cdot\sin\omega')^{\frac{1}{2}}$乘上我們前面的矩陣元$\langle W'\omega'\chi'\alpha'|V|k\rangle$或即$\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k\rangle$，所以，(55)式等于

$$\frac{2\pi}{\hbar}\frac{W'P'}{c^2}\sin\omega'|\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k\rangle|^2.$$

在每单位时間、每单位立体角內发射粒子而同时使散射中心落到α'态的几率因此成为

$$\frac{2\pi}{\hbar}\frac{W'P'}{c^2}|\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k\rangle|^2. \tag{56}$$

为要求得散射中心的終态是任意的，而在单位时間內粒子向任意方向发出的总几率，我們必須把(56)式对所有角度ω', χ'积分，并对所有其能量$H(\alpha')$能使$H_s(\alpha')+mc^2<E_k$的态α'求和. 結果刚好是$2b/\hbar$，其中b是由(51)式定义的. 因此，在总发射系

数与吸收綫的半寬度 b 之間，有这样一个簡单的关系.

現在，討我們来考虑吸收. 这就要求我們应取一个初态，其中粒子肯定未被吸收而是按确定动量射入的. 因此，相应于初态的右矢一定是(19)式的形式. 我們現在必須决定在时間 t 后粒子被吸收的几率. 由于我們的終态 k 不是有連續范围的态，我們不能直接用§46的結果(39)式. 然而，如果我們取

$$|0\rangle = |\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle \tag{57}$$

作为相应于初态的右矢，則 §44 与 §46 的分析仍然可以采用，一直可用到方程(36)，并且表明在时間 t 以后粒子被吸收到 k 态的几率为

$$2|\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle|^2[1-\cos\{(E_k-E')t/\hbar\}]/(E_k-E')^2.$$

此式相应于入射粒子密度为 h^{-3} 的分布，这是由于(57)式与(19)式相比略去了一个因子 $h^{\frac{3}{2}}$. 因此，当每单位时間穿过单位面积有一个入射粒子时，在时間 t 后有一个吸收的几率为

$$\begin{aligned}2h^3W^0/c^2P^0\cdot|\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle|^2[1-\\-\cos\{(E_k-E')t/\hbar\}]/(E_k-E')^2.\end{aligned} \tag{58}$$

为求得吸收系数，我們必須考虑，入射粒子不全有同样的能量 $W^0=E'-H_s(\alpha^0)$，而是有一个围繞在吸收所需的正确值 $E_k-H_s(\alpha^0)$附近的能量值分布. 如果我們取一束入射粒子，在每单位时間、每单位能量范围內有一个粒子穿过单位面积，則在时間 t 后有一个被吸收的几率将由(58)式对 E' 的积分給出. 这个积分可按§46(37)式同样的方法求出，等于

$$4\pi^2h^2W^0t/c^2P^0\cdot|\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle|^2.$$

因之，当入射粒子束在每单位能量范围、每单位时間、每单位面积內有一个粒子时，每单位时間出現一个吸收的几率为

$$4\pi^2h^2W^0/c^2P^0\cdot|\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle|^2, \tag{59}$$

这就是吸收系数.

应当注意到吸收系数(59)式、发射系数(56)式与上节算出的共振散射系数之間的联系. 若入射粒子束不是全部由具有相同能量的粒子組成，而是由每单位时間通过单位面积的粒子在每单位

能量范围內有一个这种分布的粒子所組成，則能量在吸收綫附近的受到散射的入射粒子的总数为(54)式对 E' 的积分． 如果我們略去(54)式的分子对 E' 的关系，則由于

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{b}{(E' - E_k - a)^2 + b^2} dE' = \pi,$$

这个积分就刚好为(59)式．因此，在吸收綫邻域中受散射的粒子总数等于被吸收的粒子总数．因而，我們可以認为，所有这些受散射的粒子都是被吸收的粒子，它們是随后在不同方向被重新发射出来的．还有，在吸收綫的邻域內，在围繞一已知方向(由 $\mathbf{p}'$ 表示)的每单位立体角內受到散射并属于 α' 态散射中心的粒子数目，可由(53)式对 E' 的积分得出，按同样方法，这个积分之值为

$$\frac{4\pi^2 h^2 W^0 W' P'}{c^4 P^0} \frac{\pi}{b} |\langle \mathbf{p}'\alpha' | V | k \rangle|^2 |\langle k | V | \mathbf{p}^0 \alpha^0 \rangle|^2.$$

这刚好是吸收系数（59）式乘上发射系数（56）式除以总发射系数 $2b/\hbar$．这是与下述观点相符合的，卽認为共振散射的粒子是那些被吸收又重新发射的粒子，而吸收与发射过程各自独立地受它本身的几率規則所支配；因为按此观点，围繞一已知方向每单位立体角內重新发射出的被吸收的粒子数与粒子总数之比，应刚好为此方向的发射系数除以总发射系数．

第九章　包含許多相同粒子的系統

§ 54. 对称态与反对称态

如果在原子物理中的一个系統包含几个同类粒子，例如，几个电子，則这几个粒子就是彼此間絕对不可区分的. 当它們之間任意两个互换时，不会造成任何可观察到的变化. 这种情况在量子力学中引起某些在經典理論中沒有类比的特有現象，这些現象是由下面的事实引起的，卽在量子力学里可能出現一种跃迁，其結果只是两个相同粒子的互换，这种跃迁不能由任何观察方法检查出来. 当然，一个令人滿意的理論必須要把从观察上看来不可区分的两个态看作为同一个态，并且否認两个相同粒子交换位置时出現任何跃迁. 我們发現有可能把理論加以改造，使之能够如此.

假定我們有一个包含 n 个相同粒子的系統. 我們可以取作为力学变量的有：描述第一个粒子的一組变量 ξ_1，描述第二个粒子的相应一組变量 ξ_2，这样类推，一直到描述第 n 个粒子的一組 ξ_n. 于是我們应当有，在 $r \neq s$ 时各 ξ_r 与各 ξ_s 对易（我們可能要求有某些額外的变量，来描述除了 n 个相同粒子以外系統中所包含的其他事物，但是在本章里沒有必要把它們明显地講出来）. 描述此系統的运动的哈密頓量現在可以表示为 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n$ 的函数. 粒子是相同的这一事实要求，哈密頓量应为这些 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_n$ 的对称函数，也就是說，当变量組 ξ_r 对换或以任何方式重新排列时，哈密頓量应保持不变. 不管对此系統作用什么微扰，这个条件一定要成立. 事实上，任何有物理意义的量一定是这些 ξ 的对称函数.

令 $|a_1\rangle, |b_1\rangle, \cdots$ 为只把第一个粒子当作单独的力学系統时的右矢. 对单独的第二个粒子，有相应的右矢 $|a_2\rangle, |b_2\rangle, \cdots$，以此类推. 我們可以取每个单独粒子的右矢之积，从而得到此系集

(assembly)的一个右矢，例如用 §20 (65)式的符号，有

$$|a_1\rangle|b_2\rangle|c_3\rangle\cdots|g_n\rangle = |a_1b_2c_3\cdots g_n\rangle. \tag{1}$$

这个右矢(1)式相应于系集的一个特殊种类的态，描述这个态的方法是，說出每个粒子处于它本身的一个态，分别相应于(1)式左边的有关因子. 此系集的一般右矢是类似(1)式的諸右矢的和或积分，对它所相应的系集的态，我們不能說每个粒子处在它自己的某个态，而只能說每个粒子部分地处在几个态，以一种方式与部分地处在几个态的其他粒子互相关联. 如果右矢$|a_1\rangle$, $|b_1\rangle$, $\cdots$是只有单独第一个粒子时的一組基右矢，$|a_2\rangle$, $|b_2\rangle\cdots$是只有单独第二个粒子时的一組基右矢，余以此类推，则右矢(1)式就为系集的一組基右矢. 由系集的这种基右矢所提供的表象，我們称为**对称表象**，因为它以同样的地位处理所有这些粒子.

在(1)式中我們可以交换头两个粒子的右矢，而得到系集的另一右矢，即是

$$|b_1\rangle|a_2\rangle|c_3\rangle\cdots|g_n\rangle = |b_1a_2c_3\cdots g_n\rangle.$$

更普遍地講，我們可以交换头两个粒子在系集的任意右矢中的作用，而得到系集的另一右矢. 交换头两个粒子的过程，是可以作用于系集右矢上的算符，而且显然是綫性算符，其形式我們在 §7 中已研究过. 同样地，交换任意一对粒子的过程是一綫性算符，而且，重复地作用这些交换，我們得到粒子的任何重新排列都表現为作用于系集右矢的綫性算符. 如果一个排列可以由偶数个交换組成，则称为**偶排列**；如果一个排列可以由奇数个交换組成，则称为**奇排列**.

系集的右矢$|X\rangle$如果不因任何排列而变化，也即是，如果对于任意的排列 P，

$$P|X\rangle = |X\rangle, \tag{2}$$

则$|X\rangle$ 称为**对称的**. 如果它不因任何偶排列而变化，同时因任意奇排列而改变它的符号，也即是如果

$$P|X\rangle = \pm\ |X\rangle \tag{3}$$

(＋号或－号按 P 是偶排列或奇排列而定)，则称$|X\rangle$为**反对称的**.

相应于对称右矢的态称为对称态，相应于反对称右矢的态称为反对称态. 在一对称表象中，对称右矢的表示式是不同粒子的变量的对称函数，而反对称右矢的表示式是这些变量的反对称函数.

在薛定諤图象中，与系集的态相对应的右矢按薛定諤运动方程随时間而变化. 如果它开始时是对称的，则它一定总是保持为对称的，因为由于哈密頓量是对称的，沒有任何事物干扰对称性. 同样地，如果右矢开始时是反对称的，它一定总是保持为反对称的. 因此，开始时为对称的态总是保持为对称的，开始为反对称的态，一定总是保持为反对称的. 因此，有可能对一特定种类的粒子，在自然界中只出現对称态，或者在自然界中只出現反对称态. 如果这两种可能性之一成立，則对所討論的粒子，会引出某些特殊現象.

让我們首先假定，在自然界中只出現反对称态. 右矢(1)式并不是反对称的，因而它不相应于自然界出現的态. 一般地，我們能从(1)式組成一个反对称右矢，办法是用所有可能的排列作用于它，并在那些由奇排列引起的項前插入系数-1，而把結果相加起来，这样就得到

$$\sum_P \pm P\,|a_1 b_2 c_3 \cdots g_n\rangle, \tag{4}$$

按照P是偶排列或奇排列而取$+$号或$-$号. 右矢(4)式可以写成行列式的形式：

$$\begin{vmatrix} |a_1\rangle & |a_2\rangle & |a_3\rangle & \cdots & |a_n\rangle \\ |b_1\rangle & |b_2\rangle & |b_3\rangle & \cdots & |b_n\rangle \\ |c_1\rangle & |c_2\rangle & |c_3\rangle & \cdots & |c_n\rangle \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ |g_1\rangle & |g_2\rangle & |g_3\rangle & \cdots & |g_n\rangle \end{vmatrix}, \tag{5}$$

而它在对称表象中的表示式是一行列式. 右矢(4)式或(5)式不是一般的反对称右矢，而是一个特殊簡单的反对称右矢. 它相应于系集的一个态，对于这个态，我們可以說某些单粒子态即态$a, b, c, \cdots g$是占滿了的，但我們不能說，哪一个粒子处于哪一个态，每个

粒子处于任一态的可能性是相等的. 如果粒子态 $a, b, c, \cdots g$ 中有两个是相同的,右矢(4)式或(5)式就为零,而不相应于系集的任何态. 因此,两个粒子不能占相同的态. 更普遍地讲,被占据的态一定是全部互不相关的,否则(4)式或(5)式就为零. 这是那些在自然界只出現反对称态的粒子的一个重要特征. 它导至一种特殊的統計,这种統計是由費米首先研究的,所以我們把那些在自然界只出現反对称态的粒子称为費米子.

現在让我們假定,在自然界只出現对称态. 除了一个特殊情况即当所有粒子态 $a, b, c, \cdots g$ 全都是相同以外,右矢(1)式不是对称的,但是,我們总能够从它得到一个对称右矢,办法是用所有可能的排列作用于它,并把結果相加,这样就得到

$$\sum_P P|a_1b_2c_3\cdots g_n\rangle. \tag{6}$$

右矢(6)式不是一般的对称右矢,而是特别簡单的对称右矢. 它相应于系集的一个态,对于此态,我們可以說某些粒子态即态 $a, b, c, \cdots g$ 被占据,而不能說哪一个粒子处于哪个态. 現在态 $a, b, c, \cdots g$ 中有两个或更多个相同是可能的,所以两个或更多个粒子可以处于同样的态. 虽然如此,粒子的統計却与經典理論中通常的統計不同. 这种新的統計是由玻色首先研究的,因而,我們把在自然界中只出現对称态的那些粒子叫做玻色子.

我們可以看出玻色統計与通常統計的差別,为此只要研究一个特殊例子——只有两个粒子,每一粒子只有两个独立态 a 与 b. 按照經典力学,如果此两粒子的系集在高温下处于热力学平衡,则每个粒子处于任一态是等几率的. 因此,两个粒子都处于 a 态的几率是 1/4,两个粒子都处于 b 态的几率也是 1/4,而在每个态有一个粒子的几率为 1/2. 在量子理論中,对于一对粒子通常有三个独立的对称态,相应于对称右矢 $|a_1\rangle|a_2\rangle$, $|b_1\rangle|b_2\rangle$ 与 $|a_1\rangle|b_2\rangle + |a_2\rangle|b_1\rangle$ 它們分别描述两个粒子都在 a 态,两个粒子都在 b 态以及每个态有一个粒子的情况. 在高温下处于热力学平衡时,这三个态是等几率的,这一点我們已在 §33 中加以証明,所以两个粒子

都处于 a 态的几率是 1/3，两个粒子都处于 b 态的几率是 1/3，而每个态有一粒子的几率也是 1/3. 因此，按玻色統計，两个粒子处于相同态的几率比按經典統計要大些. 玻色統計与經典統計的差别，是与費米統計正相反的，在費米統計中，两个粒子处于同样态的几率为零.

在按 §38 开头所述的路綫建立原子理論时，为了与实驗符合一致，我們一定要假定永远不会有两个电子处于同一个态. 这个規則称为泡利不相容原理. 它指明了电子是費米子. 普朗克輻射定律表明，光子是玻色子，因为对于光子，只有玻色統計才能导出普朗克定律. 同样地，对于物理中已知的其他各种粒子的每一种，都有实驗証据表明它們或者是費米子，或者是玻色子. 質子，中子，正电子是費米子；而 α 粒子是玻色子. 看来出現在自然界的所有粒子，不是費米子就是玻色子，因而对相同粒子的系集，实际上所遇到的只会是对称态或反对称态. 在数学上可能还有其他更复杂的对称类型，但它們不适用于任何已知的粒子. 对特定种类的粒子，只允許反对称态，或者只允許对称态，在这样的理論中，人們就不能区分相差仅为粒子的排列的两个态，所以在本节开头所說的跃迁就不出現了.

§ 55. 排列作为力学变量

現在我們来建立包含 n 个相同粒子的系統的普遍理論，其中允許有任意种对称性質的态出現，即不限制于仅为对称态或反对称态. 此时一般态将不是对称态或反对称态，当 $n>2$ 时，它也不能被表示为对称态与反对称态的綫性組合. 这种理論不能直接应用于自然界出現的任何粒子，虽是这样，但是为了对电子系集建立一种近似的处理，它还是有用的. 这一点将在 §58 中加以証明.

我們已知，n 个粒子的每一排列 P 是一个綫性算符，它能作用于系集的任意右矢. 因此，我們可以把 P 看作是我們 n 粒子系統中的力学变量. 存在有 $n!$ 个排列，其中每一个能看成是一个力学变量，其中之一如 P_1 是恆同排列，它等于 1. 任何两个排列之积

是第三个排列，因而排列的任意函数可以簡化为它們的綫性函数。任意排列 P 有一个逆排列 P^{-1}，它满足

$$PP^{-1} = P^{-1}P = P_1 = 1.$$

排列 P 可以作用于系集的左矢 $\langle X|$ 而給出另一左矢，我們暂时用 $P\langle X|$ 表示之. 如果 P 作用于乘积 $\langle X|Y\rangle$ 的两个因子，此乘积一定不变，因为它仅是一个数，是与粒子的任何次序无关的. 因此有

$$(P\langle X|)P|Y\rangle = \langle X|Y\rangle,$$

这表明

$$P\langle X = \langle X|P^{-1}. \tag{7}$$

既然 $P\langle X|$ 是 $P|X\rangle$ 的共軛虛量，因而应等于 $\langle X|\bar{P}$，所以从(7)式得知

$$\bar{P} = P^{-1}. \tag{8}$$

因此，排列一般不是实力学变量，它的共軛复量等于它的逆排列.

数目字 1, 2, 3, $\cdots$, n 的任意排列可以用輪換符号表示，例如，在 $n = 8$ 时，

$$P_a = (143)(27)(58)(6), \tag{9}$$

其中每个数要被括号中它后面的数代替，除非这个数是括号中的最后一个数，这时它就要被此括号中的第一个数来代替了. 这样 P_a 把数字 12345678 变为 47138625. 任意排列的类型是由数目 n 的一种分割来标記，而这种分割就是每个括号中数字的数目. 因而 P_a 的类型就由分割 $8 = 3 + 2 + 2 + 1$ 所标記. 同一类型的排列相应于同一分割的排列，我們将称之为相似的. 这样，例如，(9)式中的 P_a 就与

$$P_b = (871)(35)(46)(2) \tag{10}$$

相似. $n!$ 个可能的排列的全部可以分为由相似排列組成的許多集合，每个这样的集合称之为一类. 排列 $P_1 = 1$ 自己組成一类. 任何排列都与它的逆排列相似.

当两个排列 P_a 与 P_b 相似时，其中任一个 P_b 可以由在 P_a 中作某种排列 P_x 而得到. 例如，在我們的例子(9)式与(10)

式中，我們可取 P_x 为变 14327586 为 87135462 的排列，也即是排列

$$P_x = (18623)(475).$$

用輪换符号写出 P_a 与 P_b 的不同方法，会得出不同的 P_x. 这些 P_x 中任一个作用于乘积 $P_a|X\rangle$ 会把它变为 $P_b \cdot P_x|X\rangle$，即

$$P_xP_a|X\rangle = P_bP_x|X\rangle.$$

因而

$$P_b = P_xP_aP_x^{-1}, \tag{11}$$

此式把 P_a 与 P_b 相似的条件表示成代数方程. 满足(11)式的任意 P_x 的存在，就充分地表明 P_a 与 P_b 是相似的.

§56. 排列作为运动恒量

全部粒子的力学变量的任意对称函数 V，不因任意排列 P 的作用而变化，所以，P 作用于乘积 $V|X\rangle$ 时只对因子 $|X\rangle$ 有作用，因而

$$PV|X\rangle = VP|X\rangle.$$

从而有

$$PV = VP, \tag{12}$$

这表明，力学变量的对称函数与每个排列对易. 哈密頓量是力学变量的对称函数，因而与每个排列对易. 由此得出，每个排列是一运动恆量. 这一点甚至在哈密頓量并非恆量时也成立. 如果 $|Xt\rangle$ 是薛定諤运动方程的任何一个解，$P|Xt\rangle$ 就是另一个解.

在处理量子力学中的任意系統时，若我們已經找出一个运动恆量 α，我們就知道，如果开始时 α 对任意运动态有值 α'，則它总有此值，所以，我們能对不同的态指定不同的数 α'，而这样来得到态的一种分类. 但是，当我們有几个不互相对易的运动恆量 α 时，这个程序就不是这样簡明直接了，因为我們一般不能对所有的 α 同时对任意态指定数值(对于排列 P，情况就是这样). 首先，让我們取哈密頓量不显含时間的系統的情形. 那么，不相互对易的几个运动恆量 α 的存在，就是系統为簡并的标志. 这是因为对非簡

并系統，哈密頓量H单独就組成了对易可观察量的完全集，从而按§19的定理2，每个α都是H的函数，所以应与其他任意的α对易.

現在，我們必須找出这些α的一个函数β，这个函数β对所有那些属于一个能級H'的态，有一个相同的数值β'，所以我們可以用β来对系統的能級进行分类. 我們可以把β的这个条件表述为β一定是H的函数，因而一定要与每一个同H对易的力学变量对易，也即是，与每一个运动恆量对易. 如果这些α是仅有的运动恆量，或者如果它們是与所有其他独立的运动恆量都对易的一組运动恆量，則我們的問題就化为去找α的一个函数β，它与所有这些α对易. 这样，我們就能对系統的每个能級指定β的一个数值β'. 如果我們能找出几个这样的函数β，則它們一定全是相互对易的，所以，我們能够对它們全部同时給予数值. 这样，我們就得到能級的一个分类. 当哈密頓量显含时間时，我們不能談到能級，但是，这些β仍然将給出态的分类.

我們按照这个方法来处理我們的排列P. 我們必須找出P的一个函数χ，使对每个P能有$P\chi P^{-1}=\chi$. 显然，一个可能的χ是某一类c中所有的排列之和$\sum P_c$，也即是相似排列集合之和，因为$\sum PP_cP^{-1}$一定是由同样的一些排列按不同次序求和所組成. 对于每个类，一定有一个这样的χ. 而且不能有另外的独立的χ，因为任何一个P的函数都可以表示为这些P各乘以适当系数的綫性組合，而除非其中各相似的P的系数全都相同，否則这个函数就不会与每个P对易. 因此，我們得到了能用来把态分类的全部函数χ. 把每个χ定义为一个平均值而不定义为和是方便的，于是

$$\chi_c=n_c^{-1}\sum P_c,$$

其中n_c是类c中的P的个数. χ_c的另一表示式是

$$\chi_c=(n!)^{-1}\sum_P PP_cP^{-1}, \tag{13}$$

这里求和是遍及全部$n!$个排列P，容易驗証，这个和中类c的每个排列出現的次数是相同的. 对每一排列P就有一个函数χ，例如写成$\chi(P)$，它等于所有相似于P的排列的平均. 其中有一个

χ 是 $\chi(P_1)=1$.

用这样方法得到的运动恆量 $\chi_1, \chi_2, \cdots \chi_m$, 对于系統的每一定态，都有肯定的数値，在哈密頓量不显含时間的情况以及在一般情况下，都能用它們来把态进行分类，对 χ 的每一組允許数値 $\chi'_1, \chi'_2, \cdots \chi'_m$，就有态的一个集合. 由于这些 χ 总是运动恆量，这些态的集合是閉絕的，即总不会出现从某一集合的一个态到另一集合的一个态的跃迁. 在这些 χ 之間存在代数关系这一事实，限制了我們可以給予这些 χ 可允許的値的集合 χ'. 任意两个 χ 的乘积 $\chi_p\chi_q$，当然可以表示为 P 的綫性函数，并且由于它与每个 P 对易，它一定可以表示为 χ 的綫性函数，因此

$$\chi_p\chi_q = a_1\chi_1 + a_2\chi_2 + \cdots + a_m\chi_m, \tag{14}$$

其中 a 是数. 我們給予这些 χ 的任意数値 χ' 一定是 χ 的本征值，它們一定满足同样的代数方程. 对这些方程的每个解 χ' 就有态的一个閉絕集合. 一个解显然是对每个 χ_p 有 $\chi'_p=1$，它給出对称态的集合. 第二个明显的解給出反对称态的集合，它是 $\chi'_p=\pm1$，其中取＋号或－号按照类 p 的排列是偶排列还是奇排列而定. 在任何特殊情况下，其余的解可以用普通代数方法求得，因为考虑到 χ 有关的排列的类型，可以直接求出(14)式中的系数 a. 任意解除了相差某一因子外，在羣論中称为排列羣(即置換羣)的特征标. 这些 χ 全是实的力学变量，因为每个 P 与其共軛复量 P^{-1} 是相似的，所以在任何 χ 的定义中是加在一起而出現的，因此 χ' 一定全是实数.

方程(14)可能有的解的数目是容易定出的，因为它必須等于 χ 的任意函数 B 的不同的本征值的数目. 借助于方程(14)，我們可以把 B 表示成 χ 的綫性函数，即

$$B = b_1\chi_1 + b_2\chi_2 + \cdots + b_m\chi_m. \tag{15}$$

同样地，我們能把 $B^2, B^3, \cdots B^m$ 等量中的每一个都表示成 χ 的綫性函数. 从这样得到的 m 个方程連同方程 $\chi(P_1)=1$，我們可以消去这 m 个未知量 $\chi_1, \chi_2, \cdots, \chi_m$，結果得到一个 B 的 m 次代数方程

$$B^m + c_1B^{m-1} + c_2B^{m-2} + \cdots + c_m = 0.$$

这个方程的 m 个解給出 B 的 m 个可能本征值，其中每一个按照(15)式，将为 $b_1, b_2, \cdots b_m$ 的綫性函数，其系数就是一組可以允許的 $\chi_1', \chi_2' \cdots \chi_m'$ 之值．这样得到的 χ' 的各組值一定全是不相同的，因为对于这些 χ，如果不同的可允許的 χ' 值的組数少于 m，則就会存在一个 χ 的綫性函数，它的每一个本征值都是零，这就意味着此綫性函数本身为零，而这些 χ 就不是綫性无关的了．因此，χ' 值的可允許的組数恰好等于 m，它是排列的类的数目，也即是 n 的不同分割的数目．因而这个数是态的閉絕集合的数目．

所有有物理意义的力学变量以及所有可观察量在各粒子間都是对称的，因而与所有的排列 P 对易．所以，P 的函数中有物理意义的只是这些 χ．相应于 $|\chi'\rangle$ 的态与相应于 $f(P)|\chi'\rangle$ 的态(其中 $|\chi'\rangle$ 是 χ 的任意本征右矢，属于本征值 χ'，$f(P)$ 是 P 的任意函数，只要求 $f(P)|\chi'\rangle \neq 0$)在观察上是不可区分的，因而是物理上等效的．用 P 的函数乘 $|\chi'\rangle$ 所能够組成的独立的右矢有一个确定的数目，例如写成 $n(\chi')$，这个数只决定于 χ'．在使每个 χ 等于 χ' 的一个 P 的矩陣表象里，行与列的数目就是这个数．如果 $|\chi'\rangle$ 相应于一个定态，$n(\chi')$ 就是它的簡并度(只考虑由粒子間的对称性引起的簡并)．在粒子間对称的任意微扰，都不能使这种簡并性去掉．

§57. 能級的决定

讓我們采用 §43 的微扰方法，并取一級近似，来計算哈密頓量不显含时間的情况下的能級．我們假定，在我們的系集的未微扰定态中，相同粒子中的每一个都有它自己的单独的态．在有 n 个粒子时，我們有 n 个这样的态，相应于 n 个右矢，如 $|\alpha^1\rangle, |\alpha^2\rangle, \cdots, |\alpha^n\rangle$，我們暫且假定它們全是正交的．系集的右矢就为

$$|X\rangle = |\alpha_1^1\rangle |\alpha_2^2\rangle |\alpha_3^3\rangle \cdots |\alpha_n^n\rangle. \tag{16}$$

就是用 $\alpha^1, \alpha^2 \cdots$ 代替 $a, b, \cdots$ 的(1)式．如果我們用任意排列 P 作用于它，我們得到另一右矢

$$P|X\rangle = |\alpha_r^1\rangle|\alpha_s^2\rangle\cdots|\alpha_z^n\rangle, \tag{17}$$

$r, s, \cdots z$ 为数字 1, 2, $\cdots n$ 的某种排列，这个右矢相应于系集的有相同能量的另一定态. 因此，如果我們假定不存在其他的簡并原因，具有这个能量的未微扰态共有 $n!$ 个. 按照 §43 的方法，当未微扰系統为簡并时，我們必須考虑联系于相同能量的两个态的表示微扰能量 V 的矩陣元，即考虑形如 $\langle X|P_a V P_b|X\rangle$ 的那些矩陣元. 这些矩陣元将組成一个 n 行 n 列的矩陣，这个矩陣的本征值是能級的一級修正.

現在，我們必須引入另一种排列算符，它能作用于形如(17)式的右矢上，也即是引入作用在这些 α 的下标上的排列算符. 我們用 P^α 表示这样的排列算符. P 与 P^α 的主要差别可以由下列方法看出. 让我們在一般意义上考虑一个由 2 与 3 互換組成的排列. 这可以解释为或者是对象 2 与对象 3 互換，或者是处在位置 2 与位置 3 的两个对象互換，这两个作用一般地产生很不同的結果. 这两个解释的第一个是我們給予算符 P 的解释，有关对象即是相同粒子. 排列 P 能作用于系集的任意右矢上. 但是，采用第二个解释的排列要有意义，只有作用于形如(17)式的右矢(其中每个粒子处于由一个 α 所标記的"位置")或形如(17)式的右矢之和才行. 排列 P 可以当作是一个普通的力学变量. 而排列 P^α 可以当作是一种狹义的力学变量，即当我們只研究由(17)式的不同态迭加而得的态时它才可当作力学变量. 在我們現在的微扰問題中，情况正是如此.

我們可以組成 P^α 的代数函数，它們是另一些可以作用于形如(17)式的右矢上的算符. 特别是，我們可以組成 $\chi(P_c^\alpha)$，即在某一类 c 中全部 P^α 的平均. 它必定等于 $\chi(P_c)$，即在同一类中的排列算符 P 的平均，因为在一給定类中，不管排列是作用于粒子，还是作用于粒子所处的位置，所有排列的总集合显然是相同的. 任意的 P 与任意的 P^α 对易，即

$$P_a P_b^\alpha = P_b^\alpha P_a. \tag{18}$$

用标記粒子的同样数字 1, 2, 3, $\cdots n$ 来标記 α，我們就建立

了 α 与粒子間的一一相应关系，因而如果給定了作用于粒子的任意排列 P_a，我們就可以給出作用于 α 的同一排列 P_a^α 的意义. 这个意义是这样的,对由(16)式給出的右矢$|X\rangle$,有

$$P_a^\alpha P_a|X\rangle = |X\rangle. \tag{19}$$

由于不同的右矢 $|\alpha^1\rangle, |\alpha^2\rangle, \cdots$ 是正交的，所以,$|X\rangle$与$P|X\rangle$也是正交的,除非 $P = 1$. 由此得出，如果$|X\rangle$是归一化的，对任意系数 c_P,有

$$\sum_P c_P\langle X|P^\alpha P_a|X\rangle = c_{P_a}, \tag{20}$$

求和遍及所有的 $n!$ 个排列 P 或 P^α，而令 P_a 固定. 現在定义 V_P 如下:

$$V_P = \langle X|VP|X\rangle. \tag{21}$$

这样,我們对任意两个排列 P_x 与 P_y,就有

$$\langle X|P_xVP_y|X\rangle = \langle X|VP_xP_y|X\rangle = V_{P_xP_y} =$$

$$= \sum_P V_P\langle X|P^\alpha P_xP_y|X\rangle,$$

这里用了(20)式. 从(18)式得知,此式給出

$$\langle X|P_xVP_y|X\rangle = \sum_P V_P\langle X|P_xP^\alpha P_y|X\rangle. \tag{22}$$

我們可把此結果写成

$$V \approx \sum_P V_PP^\alpha, \tag{23}$$

其中符号≈的意义是指狹义下的等式，即两边的算符只在它們与形如 $P|X\rangle$ 的右矢以及其共軛虛量左矢一起用的时候才是相等的.

公式(23)表明,微扰能量 V 在狹义下等于排列算符 P^α 的一个綫性函数,其系数 V_P 由(21)式給出. 这种狹义的方法在計算能級的一級修正上是适用的，因为这种計算只涉及(22)式所給出的 V 的那些矩陣元. 公式(23)是很方便的公式，因为在它右边的表示式是易于处理的.

作为(23)式的应用的例子，我們現在来决定由未微扰态(16)

式所引起的属于一个閉絕集的所有那些态的平均能量．这就要求我們对那些 χ 有指定数值 χ' 的那些态（17）来計算 V 的平均本征值．現在，对这些态中任一个 P_a^α 的平均本征值等于 $P^\alpha P_a^\alpha(P^\alpha)^{-1}$（$P^\alpha$ 任意）的平均本征值，因而就等于 $n!^{-1}\sum_{P^\alpha} P^\alpha P_a^\alpha(P^\alpha)^{-1}$ 的平均本征值，这就是 $\chi'(P_a^\alpha)$或即 $\chi'(P_a)$． 因此，V 的平均本征值是 $\sum_P V_P\chi'(P)$．可以用同样方法計算 V 的任意函数的平均本征值，只需要用 $\chi'(P)$ 去代替每个 P^α，就可以实現平均．

由未微扰系統的一已知态所引起的在一个閉絕集 $\chi=\chi'$ 中的能級数目，等于(23)式右边与方程 $\chi=\chi'$ 不矛盾的本征值数目． 这个数就是上节末尾所引入的数 $n(\chi')$，因此即是在此集中态的簡并度．

我們曾經假定，按(16)式决定未微扰态的各个单独右矢 $|\alpha^1\rangle$，$|\alpha^2\rangle\cdots$全是正交的．我們的理論能容易地推广到另一种情况，即这些右矢中某几个是相等的，任意两个不相等的仍然限制为正交的．現在我們有某些排列 P^α，能使 $P^\alpha|X\rangle=|X\rangle$，也即那些只包含相等的 α 相互交換的排列．方程(20)仍然成立，只要求和仅包括那些使 $P^\alpha|X\rangle$不相同的 P． 用了这种对 $\sum_P$ 的意义的改变，则所有上述方程仍然成立，其中包括結果(23)式．对目前的 $|X\rangle$，对 χ 的可能数值有若干限制．例如，它們不能有相当于 $|X\rangle$ 为反对称的那些值．

§ 58. 对电子的应用

讓我們考虑相同粒子为电子时的情况．根据 §54 所討論的泡利不相容原理，这就要求我們只考虑反对称态．現在，必需明显地表明电子有自旋的事实，电子自旋是通过角动量与磁矩表現出的．对于一个电子在电磁場中的运动来說，自旋的影响不是很大的．由于它的磁矩，有附加的力作用于电子，从而要求在哈密頓量中有附加的項．自旋角动量对电子的运动的确沒有直接作用，但是当

有些力趋向于轉动此磁矩时,自旋角动量就要起作用了,因为磁矩与角动量总是限制在同一方向的. 在沒有強磁場时, 这些效应全是小的,其数量級与相对論力学所要求的修正項相同,在非相对論理論中沒有理由考虑它們. 自旋的重要性不在于它們对于电子运

态, 相应于在某一指定方向上自旋分量的两个可能的值, 这就引起电子的独立态的数目加倍. 这个事实与泡利不相容原理合并起来,就有深远的效果.

在处理电子系集时, 我們有两种力学变量. 第一种我們可以称为**軌道变量**,包括所有电子的坐标 x, y, z 及它們的共軛动量 p_x, p_y, p_z. 第二种包括所有电子的自旋变量,即 §37 中引入的变量 σ_x, σ_y、σ_z. 这两种变量属于不同的自由度. 按照 §20 与 §21,决定整

的 P^x 排列. 如果我們略去哈密頓量中由自旋力引起的各項，这些 P^σ 就是运动恆量，因为这样作的結果使哈密頓量中完全不含自旋力学变量 $\boldsymbol{\sigma}$. 这样，这些 P^x 也一定是运动恆量. 現在，我們可以引入一些新的 χ，它們等于在每个类中全部 P^x 的平均值，并可以断言，对于这些 χ 的任意一組可允許的数值 χ'，将有一个态的閉絕集. 因此，对包含許多电子的系統，存在着态的閉絕集，甚至当我們只考虑那些滿足泡利原理的态时也如此. 这时态的集合的閉絕性当然只是近似的，因为只有我們略去了自旋力时这些 χ 才是恆量. 实际上，从属于一个集的态跃迁到另一集的态有一个小的几率.

方程(25)給出 P^x 与 P^σ 之間的簡单联系，其意义为，我們可以研究力学变量 P^σ，而不研究力学变量 P^x，就能得到我們所需要的結果，例如特征标 χ'. 由于每个电子只有两个独立的自旋态，研究 P^σ 要容易得多. 这个事实的結果是，σ 变量的排列羣要比一般排列羣有較少的特征标 χ'，因为这个事实，使自旋变量的右矢不能对两个以上的自旋变量成为反对称的.

我們可以把 P^σ 表示为力学变量 $\boldsymbol{\sigma}$ 的代数函数，这个事实使得 P^σ 的研究特别容易. 考虑这样一个量

$$O_{12}=\frac{1}{2}\{1+\sigma_{x1}\sigma_{x2}+\sigma_{y1}\sigma_{y2}+\sigma_{z1}\sigma_{z2}\}=\frac{1}{2}\{1+(\boldsymbol{\sigma}_1,\ \boldsymbol{\sigma}_2)\}.$$

用 §37 的方程(50)与(51)，我們容易見到

$$(\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2)^2=(\sigma_{x1}\sigma_{x2}+\sigma_{y1}\sigma_{y2}+\sigma_{z1}\sigma_{z2})^2=3-2(\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2),\quad(26)$$

因而得到

$$O_{12}^2=\frac{1}{4}\{1+2(\boldsymbol{\sigma}_1,\ \boldsymbol{\sigma}_2)+(\boldsymbol{\sigma}_1,\ \boldsymbol{\sigma}_2)^2\}=1.\qquad(27)$$

还有，我們求得

$$O_{12}\sigma_{x1}=\frac{1}{2}\{\sigma_{x1}+\sigma_{x2}-i\sigma_{z1}\sigma_{y2}+i\sigma_{y1}\sigma_{z2}\},$$

$$\sigma_{x2}O_{12}=\frac{1}{2}\{\sigma_{x2}+\sigma_{x1}+i\sigma_{y1}\sigma_{z2}-i\sigma_{z1}\sigma_{y2}\}$$

因而有

$$O_{12}\sigma_{x1}=\sigma_{x2}O_{12}.$$

对 σ_{y1} 与 σ_{z1} 有类似的关系成立，所以我們有

$$O_{12}\boldsymbol{\sigma}_1 = \boldsymbol{\sigma}_2 O_{12},$$

或即

$$O_{12}\boldsymbol{\sigma}_1 O_{12}^{-1} = \boldsymbol{\sigma}_2.$$

从这一点，利用(27)式，我們可以得到

$$O_{12}\boldsymbol{\sigma}_2 O_{12}^{-1} = \boldsymbol{\sigma}_1.$$

O_{12} 与 $\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2$ 的对易关系恰恰就是由交换电子 1 与 2 的自旋变量所組成的排列 P_{12}^{σ} 与 $\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2$ 的对易关系. 因此，我們可以令

$$O_{12} = cP_{12}^{\sigma},$$

其中 c 是一个数. 方程(27)表明 $c = \pm 1$. 为要决定 c 的这两个值中哪一个是对的，我們注意到 P_{12}^{σ} 的本征值是 1,1,1, −1, 相当于对两个电子的自旋变量存在着三个独立的对称态与一个反对称态，即是用 §37 的符号，它們是由三个对称函数 $f_{\alpha}(\sigma'_{z1})f_{\alpha}(\sigma'_{z2})$, $f_{\beta}(\sigma'_{z1})f_{\beta}(\sigma'_{z2})$, $f_{\alpha}(\sigma'_{z1})f_{\beta}(\sigma'_{z2}) + f_{\beta}(\sigma'_{z1})f_{\alpha}(\sigma'_{z2})$所表示的态，以及一个反对称函数 $f_{\alpha}(\sigma'_{z1})f_{\beta}(\sigma'_{z2}) - f_{\beta}(\sigma'_{z1})f_{\alpha}(\sigma'_{z2})$ 所表示的态. 因此，P_{12}^{σ} 的平均本征值为 1/2. 既然$(\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2)$ 的平均本征值显然为零，则 O_{12}的平均本征值是 1/2. 因此我們一定有 $c = +1$，这样，我們就可以令

$$P_{12}^{\sigma} = \frac{1}{2}\{1 + (\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2)\}. \tag{28}$$

按这样的方法，簡单地由一个交換所組成的任意排列 P^{σ}，能表示为两个 $\boldsymbol{\sigma}$ 的代数函数. 任意其他的排列 P^{σ}，能表示为許多交換之积，因此也能表示为这些 $\boldsymbol{\sigma}$ 的函数. 借助于(25)式，現在我們还能把 P^{x} 表示为 $\boldsymbol{\sigma}$ 的代数函数，并从討論中把 P^{σ} 消掉. 由于当这些排列是可交換时，在(25)式中一定取負号，又由于交換的平方是1，我們就得

$$P_{12}^{x} = -\frac{1}{2}\{1 + (\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2)\}. \tag{29}$$

公式(29)可以方便地用于計算决定态的閉絕集的各特征标 χ'. 例如，对于由交換組成的排列，我們有

$$\chi_{12} = \chi(P_{12}^{x}) = -\frac{1}{2}\left\{1 + \frac{2}{n(n-1)}\sum_{r<t}(\boldsymbol{\sigma}_r, \boldsymbol{\sigma}_t)\right\}.$$

如果我們按§36的(39)式,通过公式

$$s(s+1)=\left(\frac{1}{2}\sum_r \boldsymbol{\sigma}_r, \frac{1}{2}\sum_t \boldsymbol{\sigma}_t\right)$$

引进力学变量 s 来描述以 $\hbar$ 为单位的总自旋角动量$\frac{1}{2}\sum \boldsymbol{\sigma}_r$的絕对值,則我們就有

$$2\sum_{r<t}(\boldsymbol{\sigma}_r, \boldsymbol{\sigma}_t)=\left(\sum_r \boldsymbol{\sigma}_r, \sum_t \boldsymbol{\sigma}_t\right)-\sum_r(\boldsymbol{\sigma}_r, \boldsymbol{\sigma}_r)$$
$$=4s(s+1)-3n.$$

因而

$$\chi_{12}=-\frac{1}{2}\left\{1+\frac{4s(s+1)-3n}{n(n-1)}\right\}=-\frac{n(n-4)+4s(s+1)}{2n(n-1)}. \quad (30)$$

这样,χ_{12} 可表示为力学变量 s 与电子数 n 的函数. 任意其他的 χ 能按同样路綫計算出来,并一定是只含 s 与 n 的函数,因为再沒有对全部 $\boldsymbol{\sigma}$ 力学变量的对称函数包括在其中了. 因此, 对 s 的每一个本征值 s', 就有 χ 的一組数值 χ',因而也就有一个态的閉絕集. s 的本征值是

$$\frac{1}{2}n, \frac{1}{2}n-1, \frac{1}{2}n-2, \cdots,$$

此数列終止于 0 或 1/2.

这样,我們看到,有几个电子的系統的每个定态,是 s (以 $\hbar$ 为单位的总自旋角动量$\frac{1}{2}\sum_r \boldsymbol{\sigma}_r$ 的絕对值)的一个本征态,属于一个确定的本征值 s'. 对任意已知的 s', 总自旋矢量在任意方向的分量将有 $2s'+1$ 个可能值,而这些就相应于有同样能量的 $2s'+1$ 个独立的定态. 如我們不略去因自旋磁矩而来的力,则这 $2s'+1$ 个态一般将分裂为能量略有不同的 $2s'+1$ 个态,因而組成一个多重态,其多重性为 $2s'+1$. 当略去自旋力时,s' 有变化的跃迁,即从一个多重态到另一个多重态的跃迁,不能出現;而当不略去自旋力时,这种跃迁也只以很小的几率出現.

我們应用上节理論让右矢 $|\alpha'\rangle$ 只关系于軌道变量,并利用公式(23), 就能在一級近似下决定有几个电子的系統的能級. 如果

我們只考慮电子間的庫仑力，則相互作用能 V 由几个部分之和組成，每一部分只关系到两个电子，其結果是除了 P^x 是恆同排列或两个电子的簡单交換的那些矩陣元外，V_P 的所有矩陣元都为零. 因此(23)式簡化为

$$V \approx V_1 + \sum_{r<s} V_{rs} P^a_{rs}, \tag{31}$$

V_{rs} 是关联于电子 r 与 s 的交換的矩陣元. 由于 P^a 与 P^x 有相同性質，P^a 的任意函数与 P^x 的相应函数有相同的本征值，所以，(31)式的右边将与下式有相同的本征値

$$V_1 + \sum_{r<s} V_{rs} P^x_{rs},$$

根据(29)式，上式卽是

$$V_1 - \frac{1}{2}\sum_{r<s} V_{rs}\{1 + (\boldsymbol{\sigma}_r, \boldsymbol{\sigma}_s)\}. \tag{32}$$

(32)式的本征值是能級的一級修正. (32)式的形式表明，假定在不同电子的自旋之間有一耦合能量为 $-\frac{1}{2}V_{rs}(\boldsymbol{\sigma}_r, \boldsymbol{\sigma}_s)$（对在 r 与 s 軌道态的电子）的一个模型，会有相当的成就. 这个耦合能量比自旋磁矩之間的耦合能大得多. 原子的这种模型，早在量子力学的这种証明得出以前，就已在使用了.

在未微扰系統的軌道态中，可能有两个是同样的，卽右矢 $|\alpha^r\rangle$ 在两个电子的軌道变量上可能是同样的. 假定 $|\alpha^1\rangle$ 与 $|\alpha^2\rangle$ 是相同的. 这时，我們必須只取(31)式的与 $P^a_{12} = 1$ 相协調的那些本征值，或只取(32)式的与 $P^x_{12} = -1$ 或 $P^\sigma_{12} = -1$ 相协調的那些本征值. 从(28)式得知，这个条件給出 $(\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2) = -3$，因而 $(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)^2 = 0$. 这样，两个自旋 $\boldsymbol{\sigma}_1$ 与 $\boldsymbol{\sigma}_2$ 的合成矢量是零，这一点可以解释为自旋 $\boldsymbol{\sigma}_1$ 与自旋 $\boldsymbol{\sigma}_2$ 是反平行的. 因此，我們可以說，在同一軌道态的两个电子的自旋是反平行的. 电子多于两个时不能处于同一个的軌道态.

第十章　輻射理論

§59. 玻色子系集

我們考虑由 u' 个相同粒子組成的力学系統. 我們来建立一个单粒子表象,使它具有分立的基右矢 $|\alpha^{(1)}\rangle$, $|\alpha^{(2)}\rangle$, $|\alpha^{(3)}\rangle$, $\cdots$. 这时, 就象在 §54 中所說明的一样, 我們可以得到 u' 个粒子的系集的一个对称表象,办法是取乘积

$$|\alpha_1^a\rangle|\alpha_2^b\rangle|\alpha_3^c\rangle\cdots|\alpha_{u'}^g\rangle = |\alpha_1^a\alpha_2^b\alpha_3^c\cdots\alpha_{u'}^g\rangle \tag{1}$$

为基右矢,在此乘积中, 对每个粒子有一因子, α 的下角标 1, 2, 3, $\cdots$, u' 是粒子的标記,指标 a, b, c, $\cdots g$ 代表单粒子的基右矢中的指标 $^{(1)}$, $^{(2)}$, $^{(3)}$, $\cdots$. 如果粒子是玻色子,因而在自然界只出現对称态, 那么, 我們只需研究可以由右矢(1)式所构成的对称右矢.相应于这些对称右矢的态,組成玻色子系集的态的完全集. 我們可以建立它們的理論如下.

我們引进綫性算符 S, 定义为

$$S = u'!^{\frac{1}{2}}\sum P, \tag{2}$$

这里的求和遍及 u' 个粒子的全部 $u'!$ 个排列. 于是, S 作用于系集的任意右矢,都能得出一个对称右矢. 因此,我們可称 S 为**对称化算符**. 从 §55 的(8)式可知, S 是实算符. S 作用于右矢(1)就得到

$$u'!^{-\frac{1}{2}}\sum P|\alpha_1^a\alpha_2^b\alpha_3^c\cdots\alpha_{u'}^g\rangle = S|\alpha^a\alpha^b\alpha^c\cdots\alpha^g\rangle, \tag{3}$$

在上式的右边已把粒子的标記略去了, 因为它們不再是有意义的了. 右矢(3)式相应于 u' 个玻色子的系集的一个态, 在这个态中, 玻色子在不同的玻色子态中有一确定的分布, 但沒有指明任何特定玻色子在任何特定态. 如果我們指明了在每个玻色子态中有多少个玻色子,则玻色子的分布就已指明了. 令 n_1', n_2', n_3', $\cdots$ 分别

为按着这种分布在态 $\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)}, \alpha^{(3)}, \cdots$ 中的玻色子数目. 这些 n 在代数上由下式定义:

$$\alpha^a + \alpha^b + \alpha^c + \cdots + \alpha^g = n_1'\alpha^{(1)} + n_2'\alpha^{(2)} + n_3'\alpha^{(3)} + \cdots. \quad (4)$$

当然,这些 n' 之和就是 u'. n' 的个数等于基右矢 $|\alpha^{(r)}\rangle$ 的数目,在理論的大多数应用中它比 u' 大很多,所以这些 n' 中的大多数将为零. 如果 $\alpha^a, \alpha^b, \alpha^c, \cdots, \alpha^g$ 全不相同,即如果这些 n' 全是 0 或 1,则右矢(3)是归一化的,因为在此情况下,(3)式的左边各項全是相互正交的,每一項对此右矢的长度的平方的貢献为 $u!^{-1}$. 但是,如果 $\alpha^a, \alpha^b, \alpha^c, \cdots, \alpha^g$ 不全是不同的,则在(3)式的左边,那些仅由交換相同态上玻色子的排列 P 所引起的各項将是相等的. 相等項的数目将为 $n_1'!\, n_2'!\, n_3'! \cdots$,所以右矢(3)的长度的平方为

$$\langle\alpha^a\alpha^b\alpha^c\cdots\alpha^g|S^2|\alpha^a\alpha^b\alpha^c\cdots\alpha^g\rangle = n_1'!n_2'!n_3'!\cdots. \quad (5)$$

为处理此系集的一般态,我們可以分别引进在态 $\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)}, \alpha^{(3)} \cdots$ 中的玻色子数目 $n_1, n_2, n_3, \cdots$,并把这些 n 作为力学变量或可观察量. 它們的本征值为 $0, 1, 2, \cdots, u'$. 右矢(3)式是所有这些 n 的共同本征右矢,属于本征值 $n_1', n_2', n_3', \cdots$. 各种右矢(3)式組成含有 u' 个玻色子的力学系統的一个完全集,所以,这些 n 全是互相对易的(見 §13 的定理的逆定理). 再者,只有一个独立的右矢(3)属于本征值的任意一組集合 $n_1', n_2', n_3' \cdots$. 因而,这些 n 組成对易可观察量的完全集. 如果我們使右矢(3)式归一化,并用它們所属的 n 的本征值来标記所得的右矢,即如果我們令

$$(n_1'!n_2'!n_3'!\cdots)^{-\frac{1}{2}}S|\alpha^a\alpha^b\alpha^c\cdots\alpha^g\rangle = |n_1'n_2'n_3'\cdots\rangle, \quad (6)$$

则我們得到一組右矢 $|n_1'n_2'n_3'\cdots\rangle$,式中这些 n' 取全部其和为 u' 的非負整数值,这些右矢組成使这些 n 为对角的表象的基右矢.

这些 n 可以表示为决定个别玻色子的基右矢的可观察量 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \cdots \alpha_{u'}$ 的函数,其办法是利用下列方程:

$$n_a = \sum_r \delta_{\alpha_r \alpha_r^a}, \quad (7)$$

或用对任意函数 f 成立的方程

$$\sum_a n_a f(\alpha^a) = \sum_r f(\alpha_r). \quad (8)$$

現在让我們假定，在此系集中玻色子的数目不是給定的，而是可变的．这个数目此时就是一个力学变量，或一个可观察量 u，它有本征值为 0，1，2，…，而右矢(3)式是 u 的本征右矢，属于本征值 u'．为得到我們力学系統的右矢的一个完全集，現在我們必須对 u' 的所有值取所有的对称右矢(3)式．我們可以安排次序如下：

$$|\rangle,\ |\alpha^a\rangle,\ S|\alpha^a\alpha^b\rangle,\ S|\alpha^a\alpha^b\alpha^c\rangle,\ \cdots, \tag{9}$$

其中第一个是沒有标記的右矢，相应于沒有玻色子存在的态，然后接着来的是相应于有一个玻色子出現的态，再其次是相应于有两个玻色子的态，以此类推．一般态相应于为(9)式各种右矢之和的右矢．(9)式的这些右矢全是互相正交的，联系于玻色子数目相同的两个右矢，与以前一样是正交的，而联系于玻色子数目不同的两个右矢也是正交的，因为它們是 u 的本征右矢，而分属于不同的本征值．把(9)式中所有的右矢归一化，我們得到一組右矢，类似于(6)式，而对这些 n' 不再有限制(卽每个 n' 可取所有的非負整数值)，而且，对于含有可变个数玻色子的力学系統，这一組右矢組成一个使各 n 为对角的表象的基右矢．

如果在这些玻色子之間沒有相互作用，又如果基右矢 $|\alpha^{(1)}\rangle$，$|\alpha^{(2)}\rangle$，$\cdots$ 相应于单玻色子的定态，则(9)式中的各右矢相应于玻色子系集的定态．玻色子的数目 u 現在对时間而言是恆量，但是它不必是一个特定数，卽一般态是具有不同 u 值的各态的迭加．如果一个玻色子的能量是 $H(\alpha)$，則根据(8)式，系集的能量为

$$\sum_r H(\alpha_r) = \sum_a n_a H^a, \tag{10}$$

其中 H^a 是数 $H(\alpha^a)$ 的縮写．此式給出系集的哈密頓量为力学变量 n 的函数．

§60. 玻色子与振子之間的联系

在 §34 中我們已研究过諧振子，卽可用正則坐标 q 与正則动量 p 描述的只有一个自由度的力学系統，这样，哈密頓量是 q 与 p 的带有数字系数的平方和．在数学上，我們定义一个一般的振子

为可用正則坐标 q 与正則动量 p 描述的只有一个自由度的力学系統，而哈密頓量是 q 与 p 的冪級数，并且如果系統受任何方式的微扰，它仍保持为 q 与 p 的冪級数．現在我們要研究由几个这样的振子組成的力学系統．我們可以不用 q 与 p 描述每一个振子，而采用一个复力学变量 η（象 §34 的 η）及其共軛复量 $\bar{\eta}$，它們滿足 §34(7) 式的对易关系．我們用 1, 2, 3, ⋯ 标記不同的振子，因而这些振子的整个集合可用力学变量 $\eta_1, \eta_2, \eta_3, \cdots, \bar{\eta}_1, \bar{\eta}_2, \bar{\eta}_3, \cdots$ 来描述，这些力学变量满足的对易关系为

$$\left.\begin{aligned} \eta_a\eta_b - \eta_b\eta_a &= 0, \\ \bar{\eta}_a\bar{\eta}_b - \bar{\eta}_b\bar{\eta}_a &= 0, \\ \bar{\eta}_a\eta_b - \eta_b\bar{\eta}_a &= \delta_{ab}. \end{aligned}\right\} \tag{11}$$

令

$$\eta_a\bar{\eta}_a = n_a, \tag{12}$$

就有

$$\bar{\eta}_a\eta_a = n_a + 1. \tag{13}$$

这些 n 是互相对易的可观察量，而 §34 的工作表明，它們之中每一个都以全部非負整数为其本征値．对第 a 个振子，有一个福克表象的标准右矢 $|0_a\rangle$，它是 n_a 的一个归一化的本征右矢，属于本征値 0．把所有这些标准右矢乘在一起，我們得到福克表象中一組振子的标准右矢为

$$|0_1\rangle|0_2\rangle|0_3\rangle\cdots, \tag{14}$$

它是所有这些 n 的一个共同本征右矢，所属的本征値全为零．我們簡单地用 $|0\rangle$ 表示它．从 §34 的(13)式得知，对任意的 a，有

$$\bar{\eta}_a|0\rangle = 0. \tag{15}$$

§34 的工作也表明，如果 $n_1', n_2', n_3', \cdots$ 是任意的非負整数，則

$$\eta_1^{n_1'}\eta_2^{n_2'}\eta_3^{n_3'}\cdots|0\rangle \tag{16}$$

是所有 n 的一个共同本征右矢，分别地属于本征値 $n_1', n_2', n_3', \cdots$．在(16)式中取一切不同的 n' 所得的各个右矢，組成一个右矢的完全集，它們全是相互正交的，其中一个的长度平方是（从§34的(16)式得到）$n_1'!\, n_2'!\, n_3'! \cdots$．从这一点我們看到（記住(5)式的結果），右矢(16)式与右矢(9)式正好有相同的性質，所以，我們可以令每

个右矢(16)式等于 n' 値相同的右矢(9) 式，而不致引起任何不协調．这就包含着令

$$S|\alpha^a\alpha^b\alpha^c\cdots\alpha^g\rangle = \eta_a\eta_b\eta_c\cdots\eta_g|0\rangle. \tag{17}$$

标准右矢 $|0\rangle$ 成为右矢(9)式中的第一个，相应于不存在玻色子的态．

方程(17)的效果是，把玻色子系集的态与一組振子的态等同起来．这一点的意义是，由相同的玻色子系集組成的力学系統等效于由一組振子組成的力学系統——这两个系統恰恰是从两种不同观点来看待的同一个系統．每一个独立的玻色子态伴随着一个振子．这里我們有了量子力学最基本的結果之一，它使光的波动理論与微粒理論的統一得以实現．

上一节我們的工作是建立在玻色子的基矢的分立集 $|\alpha^a\rangle$ 上的．我們可以轉而研究基矢的另一个分立集 $|\beta^A\rangle$，而以它們为基础来建立一个类似的理論．这时，系集的基右矢就不是(9)式，而是

$$|\rangle,\ |\beta^A\rangle,\ S|\beta^A\beta^B\rangle,\ S|\beta^A\beta^B\beta^C\rangle,\cdots. \tag{18}$$

右矢(18)式的第一个联系于沒有玻色子存在的态，与右矢(9)式的第一个是相同的．(18)式中联系于有一个玻色子的右矢，是(9)式中联系于有一个玻色子的右矢的綫性函数，即是

$$|\beta^A\rangle = \sum_a |\alpha^a\rangle\langle\alpha^a|\beta^A\rangle, \tag{19}$$

而且一般地，(18)式中联系于有 u' 个玻色子的右矢，是(9)式中联系于有 u' 个玻色子的那些右矢的綫性函数．伴随着玻色子的新基态 $|\beta^A\rangle$，就有新的一組振子变量 η_A，相当于(17)式，我們有

$$S|\beta^A\beta^B\beta^C\cdots\rangle = \eta_A\eta_B\eta_C\cdots|0\rangle. \tag{20}$$

因此，一个有 u' 个因子 $\eta_A, \eta_B, \cdots$ 的右矢 $\eta_A\eta_B\cdots|0\rangle$ 一定是有 u' 个因子 $\eta_a, \eta_b, \cdots$ 的右矢 $\eta_a\eta_b\cdots|0\rangle$ 的綫性函数．由此得出，每个綫性算符 η_A 一定是这些 η_a 的綫性函数．方程(19)給出

$$\eta_A|0\rangle = \sum_a \eta_a|0\rangle\langle\alpha^a|\beta^A\rangle,$$

因而

$$\eta_A = \sum_a \eta_a \langle \alpha^a | \beta^A \rangle. \tag{21}$$

因此，这些 η 变换所按照的规则，与一个玻色子的基右矢的变换规则相同．变换后的 η 及其共轭复量，满足和原来的 η 及其共轭复量所满足的相同对易关系(11)式．变换后的 η 与原来的 η 处于同样的地位，因此，当我們把力学系統看成一組振子时，不同的自由度没有不变的意义．

各个 $\bar{\eta}$ 变换所按照的規則，与一个玻色子基左矢的变换规则相同，因而也与組成态 x 的表示式的各数 $\langle \alpha^a | x \rangle$ 的变换規則相同．人們常常用下列說法来描述这种相同性，即这些 $\bar{\eta}$ 是由二次量子化的过程作用于 $\langle \alpha^a | x \rangle$ 而得到的，这意味着在我們已經建立了单粒子的量子理論，因而引进了表示粒子的态的数 $\langle \alpha^a | x \rangle$ 以后，我們可以把这些数看成綫性算符，令它們与其共軛复量满足如(11)式的正确对易关系，然后我們就有了适当的数学基础，来处理粒子的系集，只要粒子是玻色子就成．对費米子也有相应的程序，将在§65 中討論．

由于玻色子的系集与一組振子相同，用振子的变量 η 与 $\bar{\eta}$ 来表示玻色子的变量的任何对称函数必定是可能的．这样做法的一个例子是在方程(10)中以 $\eta_a\bar{\eta}_a$ 代替 n_a．让我們来看一看，在一般情况下如何这样做．首先，取玻色子变量的函数为

$$U_T = \sum_r U_r \tag{22}$$

的情况，其中每个 U_r 是只含第 r 个玻色子的力学变量的函数，所以它有一个表示式 $\langle \alpha_r^a | U_r | \alpha_r^b \rangle$ 联系于第 r 个玻色子的基右矢 $| \alpha_r^a \rangle$．为了要使 U_T 是对称的，这个表示式必須对所有的 r 是相同的，所以，它只能决定于两个由 a 与 b 标記的本征值．因此我們可以把它簡写成

$$\langle \alpha_r^a | U_r | \alpha_r^b \rangle = \langle \alpha^a | U | \alpha^b \rangle = \langle a | U | b \rangle. \tag{23}$$

我們有

$$U_r | \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \cdots \rangle = \sum_a | \alpha_1^{x_1} \alpha_2^{x_2} \cdots \alpha_r^a \cdots \rangle \langle a | U | x_r \rangle. \tag{24}$$

把这个方程对 r 的所有值求和，并用对称化算符 S 作用于两边，我們得到

$$SU_T|\alpha_1^{x_1}\alpha_2^{x_2}\cdots\rangle=\sum_r\sum_a S|\alpha_1^{x_1}\alpha_2^{x_2}\cdots\alpha_r^a\cdots\rangle\langle a|U|x_r\rangle. \qquad (25)$$

由于 U_T 是对称的，我們可以用 U_TS 代替 SU_T，然后把(25)式中的对称右矢用(17)式的值代入．按此方法，我們得到

$$U_T\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle=\sum_a\sum_r \eta_a\eta_{x_r}^{-1}\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle\langle a|U|x_r\rangle$$

$$=\sum_{ab}\eta_a\sum_r \eta_{x_r}^{-1}\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle\delta_{bx_r}\langle a|U|b\rangle. \qquad (26)$$

$\eta_{x_r}^{-1}$ 的意义是因子 η_{x_r} 必须抵消掉．现在，从（15）式与对易关系（11)式得知

$$\bar{\eta}_b\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle=\sum_r \eta_{x_r}^{-1}\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle\delta_{bx_r} \qquad (27)$$

（注意，$\bar{\eta}_b$ 与偏微分算符 $\partial/\partial\eta_b$ 类似)．所以，(26)式变成

$$U_T\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle=\sum_{ab}\eta_a\bar{\eta}_b\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle\langle a|U|b\rangle. \qquad (28)$$

右矢 $\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle$ 組成一个完全集，因而我們可以从(28)式断定有下列算符方程：

$$U_T=\sum_{ab}\eta_a\langle a|U|b\rangle\bar{\eta}_b. \qquad (29)$$

这就把 U_T 表示为 η 与 $\bar{\eta}$ 变量与矩陣元$\langle a|U|b\rangle$的函数．

现在託我們取玻色子变量的一个对称函数，它是由对每一項联系于两个玻色子的許多項求和而得的：

$$V_T=\sum_{r,s\neq r}V_{rs}. \qquad (30)$$

我們不必要假定 $V_{rs}=V_{sr}$．相当于(23)式，V_{rs} 的矩陣元可簡写为

$$\langle\alpha_r^a\alpha_s^b|V_{rs}|\alpha_r^c\alpha_s^d\rangle=\langle ab|V|cd\rangle. \qquad (31)$$

按以前一样进行，相当于(25)式，我們得到

$$SV_T|\alpha_1^{x_1}\alpha_2^{x_2}\cdots\rangle=\sum_{r,s\neq r}\sum_{ab}S|\alpha_1^{x_1}\alpha_2^{x_2}\cdots\alpha_r^a\cdots\alpha_s^b\cdots\rangle\langle ab|V|x_rx_s\rangle, \qquad (32)$$

相当于(26)式的是

$$V_T\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle=\sum_{abcd}\eta_a\eta_b\times$$

$$\times\sum_{r,s\neq r}\eta_{x_r}^{-1}\eta_{x_s}^{-1}\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle\delta_{cx_r}\delta_{dx_s}\langle ab|V|cd\rangle. \tag{33}$$

作为(27)式的推广，我們可以推导出

$$\bar{\eta}_c\bar{\eta}_d\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle=\sum_{r,s\neq r}\eta_{x_r}^{-1}\eta_{x_s}^{-1}\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle\delta_{cx_r}\delta_{dx_s}, \tag{34}$$

所以，(33)式变成

$$V_T\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle=\sum_{abcd}\eta_a\eta_b\bar{\eta}_c\bar{\eta}_d\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle\langle ab|V|cd\rangle,$$

由此式得到算符方程

$$V_T=\sum_{abcd}\eta_a\eta_b\langle ab|V|cd\rangle\bar{\eta}_c\bar{\eta}_d. \tag{35}$$

这个方法可以立即推广到玻色子变量的任意对称函数，把它表示为 η 与 $\bar{\eta}$ 的函数。

上述理論容易推广而应用到与某些其他力学系統有相互作用的玻色子系集，我們为了明确起見，把这里的其他力学系統称为原子。我們必須对单独的原子引进一組基右矢 $|\zeta'\rangle$。我們把这些右矢 $|\zeta'\rangle$ 的每一个乘入右矢(9)式中的每一个，就可以得到原子与玻色子在一起的整个系統的基右矢的集合。我們可以把这些右矢写成

$$|\zeta'\rangle,\ |\zeta'\alpha^a\rangle,\ S|\zeta'\alpha^a\alpha^b\rangle,\ S|\zeta'\alpha^a\alpha^b\alpha^c\rangle,\cdots. \tag{36}$$

我們可以把此系統看成是由原子与一組振子相互作用所組成，所以，可以用原子变量与振子变量 η_a, $\bar{\eta}_a$ 描述它。我們再次用这組振子的标准右矢 $|0\rangle$，我們有

$$S|\zeta'\alpha^a\alpha^b\alpha^c\cdots\rangle=\eta_a\eta_b\eta_c\cdots|0\rangle|\zeta'\rangle \tag{37}$$

作为用振子变量表示的基右矢(36)式，相当于(17)式。

原子变量与玻色子变量的任意函数（在所有玻色子之間是对称的）可表示为原子变量与这些 η 与 $\bar{\eta}$ 的函数。首先考虑形如(22)式的函数 U_T，而設 U_r 为只含原子变量与第 r 个玻色子的变量的函数，这样，它的表示式为 $\langle\zeta'\alpha_r^a|U_r|\zeta''\alpha_r^b\rangle$。这个表示式一定要与

r 无关，才能使 U_T 可能在所有玻色子之間是对称的，所以我們可把它写成 $\langle\zeta'\alpha^a|U|\zeta''\alpha^b\rangle$. 现在让我們定义 $\langle a|U|b\rangle$ 是表示式为 $\langle\zeta'\alpha^a|U|\zeta''\alpha^b\rangle$的原子变量的函数，这样相当于(23)式，我們有

$$\langle\zeta'\alpha_r^a|U_r|\zeta''\alpha_r^b\rangle = \langle\zeta'\alpha^a|U|\zeta''\alpha^b\rangle = \langle\zeta'|\langle a|U|b\rangle|\zeta''\rangle. \quad (38)$$

方程(24)—(28)式可以取过来应用于現在的工作，只要在所有这些方程的两边右乘上$|\zeta'\rangle$，其結果是公式(29)仍然成立. 我們可以同样地处理形如(30)式的对称函数 V_T，而令 V_{rs} 是只含原子变量与第 r 个及第 s 个玻色子变量的函数. 定义$\langle ab|V|cd\rangle$是表示式为

$$\langle\zeta'\alpha_r^a\alpha_s^b|V_{rs}|\zeta''\alpha_r^c\alpha_s^d\rangle$$

的原子变量的函数，我們发現，公式(35)仍然成立.

§ 61. 玻色子的发射与吸收

我們假定上节中的振子是諧振子，并且在它們之間沒有相互作用. 这样，从§34的(5)式得到第 a 个振子的能量为

$$H_a = \hbar\omega_a\eta_a\bar{\eta}_a + \frac{1}{2}\hbar\omega_a.$$

我們略去常数項$\frac{1}{2}\hbar\omega_a$，它是振子在最低态的能量——即所謂“零点能”. 这一省略的确沒有任何力学效果（这在 §30 开头已說明过），而仅仅是意味着 H_a 的重新定义. 現在全部振子的总能量是

$$H_T = \sum_a H_a = \sum_a \hbar\omega_a\eta_a\bar{\eta}_a = \sum_a \hbar\omega_a n_a, \quad (39)$$

这里用了(12)式. 此式与(10)式有相同形式，只是用 $\hbar\omega_a$ 作为H^a. 因此，一組諧振子与一个玻色子系集等效，其中玻色子間无相互作用，并都处于定态. 如果在这組諧振子中有一个是在它的第 n' 个量子态，則在所伴随的玻色子态中有 n' 个玻色子.

一般地講，这組諧振子的哈密頓量为变量 η_a, $\bar{\eta}_a$ 的冪級数，即

$$H_T = H_P + \sum_a (U_a\eta_a + \bar{U}_a\bar{\eta}_a) + \sum_{ab} (U_{ab}\eta_a\bar{\eta}_b + V_{ab}\eta_a\eta_b + \bar{V}_{ab}\bar{\eta}_a\bar{\eta}_b) + \cdots, \quad (40)$$

其中 H_P, U_a, U_{ab}, V_{ab} 是一些数，H_P 是实数，而 $U_{ab} = \bar{U}_{ba}$. 如

果这組振子是与一个原子相互作用的，就象我們在上节末尾已得到的一样，总哈密頓量仍然为(40)式的形式，只是 H_P, U_a, U_{ab}, V_{ab} 等为原子变量的函数，其中特别是 H_P 为单个原子的哈密頓量．这个力学系統的普遍性的处理是比較复杂的，在实际应用时我們假定下列項

$$H_P + \sum_a U_{aa}\eta_a\bar{\eta}_a \tag{41}$$

比其他的項为大，它們单独构成一个未微扰系統，剩下的項被看成是一种微扰，按照§44的理論，它引起在未微扰系統中的跃迁．如果再进一步假定，U_{aa} 是与原子变量无关的，則哈密頓量为(41)式的未微扰系統只包括一个原子（其哈密頓量为 H_P）和处于定态的一个玻色子系集[其哈密頓量为(39)式]，它們之間沒有相互作用．

我們考慮由(40)式中各項微扰所引起的跃迁有哪些种．我們取未微扰系統中的一个定态，对这个态，原子是处于一个定态 ζ'，而玻色子是出現在玻色子定态 a, b, $c\cdots$中．如(37)式一样，未微扰系統的这个定态相应于右矢

$$\eta_a\eta_b\eta_c\cdots|0\rangle|\zeta'\rangle. \tag{42}$$

如果(40)式的一項 $U_x\eta_x$ 作用于这个右矢，所得到的結果是一个类似于

$$\eta_x\eta_a\eta_b\eta_c\cdots|0\rangle|\zeta''\rangle \tag{43}$$

的右矢的綫性組合，ζ'' 表示这原子的任意定态．右矢(43)联系的态比右矢(42)的态多一个玻色子，多出的玻色子处于 x 态．因此，微扰項 $U_x\eta_x$ 所引起的跃迁是一个玻色子发射到 x 态，而原子作一任意的跃迁．如果(40)式的另一項 $\bar{U}_x\bar{\eta}_x$ 作用于(42)式，如(42)式不含因子 η_x，則結果为零，如(42)含有因子 η_x，則結果是一个类似于

$$\eta_x^{-1}\eta_a\eta_b\eta_c\cdots|0\rangle|\zeta''\rangle$$

的各右矢的綫性組合，它联系一个在 x 态中少一个玻色子的态．因此，微扰項 $\bar{U}_x\bar{\eta}_x$ 所引起的跃迁是从 x 态吸收掉一个玻色子，原子也作一任意跃迁．同样地，我們发現，微扰項 $U_{xy}\eta_x\bar{\eta}_y(x \neq y)$ 引起的过程为从 y 态吸收一个玻色子，同时有一个玻色子发射到 x

态，或者説，一个玻色子作了从 y 态到 x 态的跃迁，这两种説法在物理上是一回事．在微扰能量中，类似(22)式与(29)式中的 U_T 的一項，会产生这种过程，只要对角矩陣元 $\langle a|U|a\rangle$ 为零．还有，微扰項 $V_{xy}\eta_x\eta_y$，$\overline{V}_{xy}\overline{\eta}_x\overline{\eta}_y$ 所引起的过程分别为两个玻色子被发射出或被吸收掉，对更复杂的項也可依此类推．对于这些发射与吸收过程的任一个，原子都可以作任意的跃迁．

让我們来决定这些跃迁过程每一个出現的几率怎样依賴于原来存在于各玻色子态的玻色子数目．从 §44 与 §46 得知，跃迁几率总是与联系到两个有关态的微扰能的矩陣元的模量平方成正比．因此，一个玻色子发射到 x 态而原子从 ζ' 态跃迁到 ζ'' 态的几率与

$$|\langle\zeta''|\langle n_1'n_2'\cdots(n_x'+1)\cdots|U_x\eta_x|n_1'n_2'\cdots n_x'\cdots\rangle|\zeta'\rangle|^2 \tag{44}$$

成正比，其中各 n 是开始时存在于各玻色子态的玻色子数目．現在，从(6)式与(17)式，并参考(4)式，有

$$|n_1'n_2'n_3'\cdots\rangle=(n_1'!n_2'!n_3'!\cdots)^{-\frac{1}{2}}\eta_1^{n_1'}\eta_2^{n_2'}\eta_3^{n_3'}\cdots|0\rangle, \tag{45}$$

所以

$$\eta_x|n_1'n_2'\cdots n_x'\cdots\rangle=(n_x'+1)^{\frac{1}{2}}|n_1'n_2'\cdots(n_x'+1)\cdots\rangle. \tag{46}$$

因而(44)式等于

$$(n_x'+1)|\langle\zeta''|U_x|\zeta'\rangle|^2, \tag{47}$$

这就表明**一个玻色子发射到 x 态的跃迁的几率，与原来在 x 态的玻色子数目加 1 成正比．**

一个玻色子从 x 态被吸收而原子从 ζ' 态跃迁到 ζ'' 态的几率与

$$|\langle\zeta''|\langle n_1'n_2'\cdots(n_x'-1)\cdots|\overline{U}_x\overline{\eta}_x|n_1'n_2'\cdots n_x'\cdots\rangle|\zeta'\rangle|^2 \tag{48}$$

成正比，这些 n 还是开始时存在于各不同玻色子态的玻色子数目．从(45)式得

$$\overline{\eta}_x|n_1'n_2'\cdots n_x'\cdots\rangle=n_x'^{\frac{1}{2}}|n_1'n_2'\cdots(n_x'-1)\cdots\rangle, \tag{49}$$

所以(48)式等于

$$n_x'|\langle\zeta''|\overline{U}_x|\zeta'\rangle|^2. \tag{50}$$

因此，**一个玻色子从 x 态被吸收的跃迁几率与原来在 x 态的玻色**

子数目成正比.

同样方法可以运用到更复杂的过程，并表明一个玻色子从 y 态跃迁到 x 态($x \neq y$)的过程的几率与 $n'_y(n'_x+1)$ 成正比. 更普遍地,在一个过程中玻色子从态 $x,y,\cdots$被吸收,并发射到态 $a,b,\cdots$,这样过程的几率与

$$n'_x n'_y \cdots (n'_a+1)(n'_b+1)\cdots \tag{51}$$

成正比，这些 n 是在每个情况下原来存在的玻色子数目. 这些結果不仅对直接跃迁过程成立，而且对于那些經过一个或更多的中間态而实現的跃迁过程(按照 §44 末尾的解释),也是成立的.

§ 62. 对光子的应用

由于光子是玻色子，上述理論可以应用于光子. 当光子是在动量的一个本征态时，它就是处于一个定态. 这时它有两个独立的偏振态，这两个偏振态可以取为互相正交的两个綫性偏振态. 描述这些定态所需的力学变量这时是动量 $\mathbf{p}$(它是一个矢量)和一个偏振变量 $\mathbf{l}$(是垂直于 $\mathbf{p}$ 的一个单位矢量). 变量 $\mathbf{p}$ 与 $\mathbf{l}$ 即取代了我們前面所用的 α. $\mathbf{p}$ 的本征值包括对 $\mathbf{p}$ 的三个直角分量的每一个取从 $-\infty$ 到 ∞ 的全部数值,而对每个 $\mathbf{p}$ 的本征值 $\mathbf{p}'$, $\mathbf{l}$ 只有两个本征值，即两个任意选择的正交于 $\mathbf{p}$ 并彼此正交的矢量. 由于 $\mathbf{p}$ 的本征值組成一連續范围,就有連續范围的定态,使我們有連續的基右矢 $|\mathbf{p}'\mathbf{l}'\rangle$. 但是,前述理論是建立在用玻色子的分立基右矢 $|\alpha'\rangle$ 上的. 为克服这个分歧,我們可用两种方式.

第一种方式在于把 $\mathbf{p}$ 的本征值的連續三維分布代之以一个大数目的分立点,这些点靠得很近,形成遍布于整个三維 $\mathbf{p}$ 空間的粉末. 令 $s_{\mathbf{p}'}$ 为在任意点 $\mathbf{p}'$ 附近的这种粉末的密度(即每单位体积的点数). 这样，$s_{\mathbf{p}'}$ 一定是大的，并且是正的，但另一方面，它是 $\mathbf{p}'$ 的任意函数. 在 $\mathbf{p}$ 空間的一个积分可以换成对这个粉末的各点求和，即按照下面的公式来进行:

$$\iiint f(\mathbf{p}')dp'_x dp'_y dp'_z = \sum f(\mathbf{p}')s_{\mathbf{p}'}^{-1}, \tag{52}$$

这个公式提供了从連續 $\mathbf{p}'$ 值过渡到分立值（以及反过来）的基础．任何問題可以先用分立的 $\mathbf{p}'$ 值算出（为此可用 §§59—61的理論），而把結果变换回到連續的 $\mathbf{p}'$ 值．这时任意的密度 $s_{\mathbf{p}'}$ 应当不出現在結果中．

第二方式在于改造 §§59—61 的理論中的方程，使它們适用于基右矢 $|\alpha'\rangle$ 有連續范围的情况，其办法是，只要关系到有連續本征值的变量，就把求和代之以积分，把对易关系（11）式中的 δ 符号代之以 δ 函数．这两种方式的每一种都有某些优点，也都有某些缺点．第一种通常对物理討論較为方便，而第二种則对数学推演較为方便．在这里两种都加以使用，而采用那一种，則按照当时那一种較为适合而定．

描述与原子有相互用的玻色子系集的哈密頓量，是（40）式的一般形式，其系数 H_P, U_a, U_{ab}, V_{ab} 等都含有原子变量．这个哈密頓量可以写成

$$H_T = H_P + H_Q + H_R, \tag{53}$$

其中 H_P 是单个原子的能量，H_R 是光子系集单独存在的能量：

$$H_R = \sum_{\mathbf{p}'\mathbf{l}'} n_{\mathbf{p}'\mathbf{l}'} h\nu_{\mathbf{p}'}, \tag{54}$$

$\nu_{\mathbf{p}'}$ 是动量为 $\mathbf{p}'$ 的光子的頻率，而 H_Q 为相互作用能，它可以从与經典理論类比而計算出来，这一点将在下节指出．整个系統可以用上节所討論的微扰方法处理，H_P 与 H_R 提供未微扰系統的能量（41）式，而 H_Q 为微扰能量，它引起的跃迁过程是发射与吸收光子，以及原子从一个定态跃迁到另一定态．

在上节里我們看到，吸收过程的几率是与原来在玻色子被吸收以前的态中的玻色子数目成正比．从此我們可以推断，在入射到原子的一束輻射中有一个光子被吸收的几率与光束的強度成正比．我們也看到，一个发射过程的几率与原来在有关态中的玻色子数目加 1 成正比．要解释这个結果，我們一定要仔細地研究用分立集代替光子态連續范围时所包含的关系．

让我們暂且略去偏振变量 $\mathbf{l}$．令 $|\mathbf{p}'D\rangle$ 为相应于分立的光子态

$\mathbf{p}'$ 的归一化右矢. 則从 §16 的(22)式得

$$\sum_{\mathbf{p}'} |\mathbf{p}'D\rangle\langle\mathbf{p}'D| = 1,$$

根据(52)式,此式成为

$$\int |\mathbf{p}'D\rangle\langle\mathbf{p}'D| s_{\mathbf{p}'} d^3p' = 1, \tag{55}$$

d^3p' 为 $dp'_x dp'_y dp'_z$ 的簡写. 現在如果 $|\mathbf{p}'\rangle$ 是相应于連續态 $\mathbf{p}'$ 的基右矢,我們按照 §16 的(24)式得到

$$\int |\mathbf{p}'\rangle\langle\mathbf{p}'| d^3p' = 1,$$

此式与(55)相比,表明,

$$|\mathbf{p}'\rangle = |\mathbf{p}'D\rangle s_{\mathbf{p}'}^{\frac{1}{2}}. \tag{56}$$

$|\mathbf{p}'\rangle$ 与 $|\mathbf{p}'D\rangle$ 之間的关系,类似于 §16 (38)式所証明的我們变更表象的权重函数时右矢之間的关系.

有 $n'_{\mathbf{p}'}$ 个光子在每个分立光子态 $\mathbf{p}'$ 时,按照 §33 的(68)式,光子系集的吉布斯密度 ρ 应为

$$\begin{aligned} \rho = \sum_{\mathbf{p}'} |\mathbf{p}'D\rangle n'_{\mathbf{p}'}\langle\mathbf{p}'D| &= \int |\mathbf{p}'D\rangle n'_{\mathbf{p}'}\langle\mathbf{p}'D| s_{\mathbf{p}'} d^3p' \\ &= \int |\mathbf{p}'\rangle n'_{\mathbf{p}'}\langle\mathbf{p}'| d^3p', \end{aligned} \tag{57}$$

这里用了(56)式. 在任意点 $\mathbf{x}'$ 附近每单位体积的光子数, 这时按 §33 的(73)式,就为 $\langle\mathbf{x}'|\rho|\mathbf{x}'\rangle$. 从(57)式得知,此式等于

$$\langle\mathbf{x}'|\rho|\mathbf{x}'\rangle = \int \langle\mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle n'_{\mathbf{p}'}\langle\mathbf{p}'|\mathbf{x}'\rangle d^3p' = \int h^{-3} n'_{\mathbf{p}'} d^3p'. \tag{58}$$

只要我們用 §23 (54)式所給出的变換函数 $\langle\mathbf{x}'|\mathbf{p}'\rangle$ 之値代入卽可得到上式. 方程(58)把每单位体积內的光子数表示为在动量空間的一个积分,所以,(58)式中的被积函数可以解释为在每单位相空間中的光子数. 这样, 我們得到的結果为每单位相空間的光子数等于 h^{-3} 乘以每分立态上的光子数,換句話說,相空間中体积为 h^3 的一个相格相应于一个分立态. 这个結果是一个普遍性的結果, 对任何种类的粒子都成立. 如果光子的偏振变量不被忽略, 这个結果对两个独立偏振态的每一个都成立.

一个頻率为 ν 的光子的动量的絕对値为 $h\nu/c$，所以，动量空間的体积元为

$$dp_x dp_y dp_z = h^3 c^{-3} \nu^2 d\nu d\omega,$$

其中 $d\omega$ 为在矢量 $\mathbf{p}'$ 的方向上的立体角元．因此，每个分立态上有 $n'_{\mathbf{p}'}$ 个光子的分布（等效于在体积元 d^3x 与动量空間元 d^3p 中有 $h^{-3}n'_{\mathbf{p}'}d^3p d^3x$ 光子的分布），等于在体积元 d^3x 和頻段 $d\nu$ 以及运动方向 $d\omega$ 中有光子数为 $n'_{\mathbf{p}'}c^{-3}\nu^2 d\nu d\omega d^3x$ 的分布．这就相应于每单位立体角、每单位頻段的能量密度为 $n'_{\mathbf{p}'}hc^{-3}\nu^3$，或者說，相应于每单位頻段的強度（即是每单位頻段每单位时間穿过单位面积的能量）为

$$I_\nu = n'_{\mathbf{p}'}h\nu^3/c^2. \tag{59}$$

光子发射的几率与 $n'_{\mathbf{p}'\mathbf{l}'} + 1$（$n'_{\mathbf{p}'\mathbf{l}'}$ 是原来存在的有关分立态的光子数)成正比，这个結果現在可以解释为此几率正比于 $I_{\nu\mathbf{l}'} + h\nu^3/c^2$，其中 $I_{\nu\mathbf{l}'}$ 是在发射出的光子頻率附近每单位頻段入射輻射的強度，此入射輻射有和发射出的光子相同的偏振 $\mathbf{l}'$．因此，在沒有入射輻射时，仍然有某一定量的发射，但是，与发射出的輻射有同样頻率与偏振并在同样方向上的入射輻射会增加或激起发射．这样，这里的輻射理論給出了受激輻射与自发輻射，从而就使 §45 的不完全理論成为完整的了．从这个理論得到的两种輻射之比，即 $I_{\nu'\mathbf{l}'}:h\nu^3/c^2$，与 §45 所說的爱因斯坦統計平衡理論相符合．

一个光子从态 $\mathbf{p}'\mathbf{l}'$ 被散射到态 $\mathbf{p}''\mathbf{l}''$ 的几率，与 $n_{\mathbf{p}'\mathbf{l}'}(n_{\mathbf{p}''\mathbf{l}''}+1)$ 成正比，这些 n 是原来处于有关分立态的光子数．我們可以解释这些結果为：此几率正比于

$$I_{\nu'\mathbf{l}'}(I_{\nu''\mathbf{l}''} + h\nu''^3/c^2). \tag{60}$$

同样地，对一个有几个光子发射与吸收的更普遍的輻射过程，其几率与一个乘积成正比，乘积中对每个被吸收的光子有一因子 $I_{\nu\mathbf{l}}$，而对每个发射出的光子有一因子 $I_{\nu\mathbf{l}} + h\nu^3/c^2$．因此，与发射光子中任一个有相同頻率、相同偏振、并在相同方向上的入射輻射，对这个过程都有激发的作用．

§ 63. 光子与原子間的相互作用能

現在，我們从一个原子与輻射場的相互作用能的經典表示，用类比的方法来决定一个原子与光子系集的相互作用能，也即是，决定方程(53)中的 H_Q. 为了簡便起見，我們假定，这个原子由在靜电力場中运动的单个电子构成. 輻射場可以用一个标量势与一个矢量势描述. 这些势有一定程度的任意性，可以选择得使标量势为零. 这样場就完全由矢量势 A_x, A_y, A_z 或者 $\mathbf{A}$ 描述. 在描述原子的哈密頓量中，場的存在所引起的变化，就象在 §41 的开头所已說明的一样，应为

$$H_Q = \frac{1}{2m}\left\{\left(\mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2-\mathbf{p}^2\right\} = \frac{e}{mc}(\mathbf{p},\mathbf{A})+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2. \quad (61)$$

这就是經典的相互作用能. 这里出現的 $\mathbf{A}$ 应为矢量势在电子每时刻所在之点上的值. 但是，如果我們取这个 $\mathbf{A}$ 为在原子中某一固定点(例如核)上的矢量势，只要我們所研究的輻射的波长比起原子的尺寸来是大的，这个取法就是足够好的近似了.

讓我們首先用經典方法考慮輻射場，并忽略它与原子的相互作用. 按照麦克斯韦理論，矢量势 $\mathbf{A}$ 滿足下列方程：

$$\Box\mathbf{A} = 0, \ \operatorname{div}\mathbf{A} = 0, \quad (62)$$

其中 $\Box$ 是 $\partial^2/c^2\partial t^2 - \partial^2/\partial x^2 - \partial^2/\partial y^2 - \partial^2/\partial z^2$ 的縮写. 这些方程中第一个表明，$\mathbf{A}$ 可以分解为傅里叶分量，其形式为

$$\mathbf{A} = \int\{\mathbf{A}_{\mathbf{k}}e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x})+2\pi i\nu_{\mathbf{k}}t} + \bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x})-2\pi i\nu_{\mathbf{k}}t}\}d^3k, \quad (63)$$

每个傅里叶分量代表一列波，以光速运动，由一个矢量 $\mathbf{k}$ 来描述，$\mathbf{k}$ 的方向表明波运动的方向，其絕对值 $|\mathbf{k}|$ 与波的頻率 $\nu_{\mathbf{k}}$ 的关系为

$$2\pi\nu_{\mathbf{k}} = c|\mathbf{k}|. \quad (64)$$

矢量 $\mathbf{k}$ 恰是按量子理論与这些波相伴随的光子的动量除以 $\hbar$. 对 $\mathbf{k}$ 的每个值，我們有一振幅 $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}$，它一般是个复矢量，在(63)式中的积分遍及整个三維 $\mathbf{k}$ 空間. 方程(62)的第二式給出

$$(\mathbf{k}, \mathbf{A}_{\mathbf{k}}) = 0, \quad (65)$$

这表明对 $\mathbf{k}$ 的每个值，$\mathbf{A_k}$ 是正交于 $\mathbf{k}$ 的．这就表示，这些波是横波．$\mathbf{A_k}$ 可以由它在两个互相正交并与 $\mathbf{k}$ 正交的方向上的分量来决定，这两个分量相当于两个独立的綫偏振态．

輻射的总能量由下列体积分給出：

$$H_R = (8\pi)^{-1}\int(\mathscr{E}^2 + \mathscr{H}^2)d^3x, \tag{66}$$

积分是对整个空間进行的，其中輻射的电場 $\mathscr{E}$ 与磁場 $\mathscr{H}$ 由下式得到：

$$\mathscr{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathscr{H} = \operatorname{curl}\mathbf{A}. \tag{67}$$

利用矢量分析的标准公式，并用(62)式中的第二式，我們得到

$$\begin{aligned}\operatorname{div}[\mathbf{A}\times\mathscr{H}] &= (\mathscr{H}, \operatorname{curl}\mathbf{A}) - (\mathbf{A}, \operatorname{curl}\mathscr{H})\\ &= \mathscr{H}^2 - (\mathbf{A}, \operatorname{curl}\operatorname{curl}\mathbf{A}) = \mathscr{H}^2 + (\mathbf{A}, \nabla^2\mathbf{A}).\end{aligned}$$

因此(66)式变成（略去可以轉变为在无穷远处的面积分的一項）

$$H_R = (8\pi)^{-1}\int\left\{\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right) - (\mathbf{A}, \nabla^2\mathbf{A})\right\}d^3x. \tag{68}$$

把这里的 $\mathbf{A}$ 代之以由(63)式得出的值，我們可以得到以傅里叶振幅 $\mathbf{A_k}$ 表示的輻射能量．輻射能量为恆量（因为我們现在忽略了輻射与原子的相互作用），所以在此計算中，我們可以取 $t=0$．这就意味着取

$$\mathbf{A} = \int(\mathbf{A_k} + \overline{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}})e^{-i(\mathbf{kx})}d^3k, \tag{69}$$

$$\nabla^2\mathbf{A} = -\int\mathbf{k}^2(\mathbf{A_k} + \overline{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}})e^{-i(\mathbf{kx})}d^3k,$$

$$\partial\mathbf{A}/\partial t = ic\int|\mathbf{k}|(\mathbf{A_k} - \overline{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}})e^{-i(\mathbf{kx})}d^3k. \tag{70}$$

把这些表式代入(68)式，并用§23的公式(49)，我們得到

$$\begin{aligned}H_R = (8\pi)^{-1}\iiint\{&\mathbf{k}'^2(\mathbf{A_k} + \overline{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}}, \mathbf{A_{k'}} + \overline{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}'}) -\\ &- |\mathbf{k}||\mathbf{k}'|(\mathbf{A_k} - \overline{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}}, \mathbf{A_{k'}} - \overline{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}'})\}e^{-i(\mathbf{kx})}e^{-i(\mathbf{k'x})}d^3kd^3k'd^3x\\ = \pi^2\iint\{&\mathbf{k}'^2(\mathbf{A_k} + \overline{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}}, \mathbf{A_{k'}} + \overline{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}'}) -\\ &- |\mathbf{k}||\mathbf{k}'|(\mathbf{A_k} - \overline{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}}, \mathbf{A_{k'}} - \overline{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}'})\}\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')d^3kd^3k',\end{aligned}$$

其中 $\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')$ 是三个因子的乘积，对 $\mathbf{k}$ 的每个分量有一个. 因而，

$$\begin{aligned} H_R &= \pi^2\int \mathbf{k}^2\{(\mathbf{A}_{\mathbf{k}}+\bar{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}},\mathbf{A}_{-\mathbf{k}}+\bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}})- \\ &\qquad -(\mathbf{A}_{\mathbf{k}}-\bar{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}},\ \mathbf{A}_{-\mathbf{k}}-\bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}})\}d^3k \\ &= 2\pi^2\int \mathbf{k}^2\{(\mathbf{A}_{\mathbf{k}},\bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}})+(\mathbf{A}_{-\mathbf{k}},\bar{\mathbf{A}}_{-\mathbf{k}})\}d^3k \\ &= 4\pi^2\int \mathbf{k}^2(\mathbf{A}_{\mathbf{k}},\bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}})d^3k. \end{aligned} \tag{71}$$

我們可以把 $\mathbf{k}$ 值的連續分布代之以分立 $\mathbf{k}$ 值的粉末，就象我們在上节对 $\mathbf{p}$ 值所做的一样. 这样，(71)式的积分就按照公式(52)变为求和:

$$H_R = 4\pi^2\sum_{\mathbf{k}}\mathbf{k}^2(\mathbf{A}_{\mathbf{k}},\ \bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}})s_{\mathbf{k}}^{-1},$$

$s_{\mathbf{k}}$ 为分立 $\mathbf{k}$ 值的密度. 我們也可把此式写为

$$H_R = 4\pi^2\sum_{\mathbf{kl}}\mathbf{k}^2A_{\mathbf{kl}}\bar{A}_{\mathbf{kl}}s_{\mathbf{k}}^{-1}, \tag{72}$$

$A_{\mathbf{kl}}$ 是 $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}$ 在一个正交于 $\mathbf{k}$ 的方向 $\mathbf{l}$ 上的分量，而对 $\mathbf{l}$ 的求和要取两个互相正交的方向 $\mathbf{l}$. 因此，光子的每个独立的定态，在(72)式中有一項与之相对应.

在任意点 $\mathbf{x}$ 上的場量 $\mathscr{E}$ 与 $\mathscr{H}$，可以看成是力学变量. 下述的量

$$A_{\mathbf{kl}t} = A_{\mathbf{kl}}e^{2\pi i\nu_{\mathbf{k}}t},\quad \bar{A}_{\mathbf{kl}t} = \bar{A}_{\mathbf{kl}}e^{-2\pi i\nu_{\mathbf{k}}t},$$

也是在时刻 t 的力学变量，因为它們与时刻 t 在各不同点 $\mathbf{x}$ 上的 $\mathscr{E}$ 与 $\mathscr{H}$ 的联系是不含 t 的方程，这一点可由(63)式与(67)得出. $A_{\mathbf{kl}}$ 是恆量，所以 $A_{\mathbf{kl}t}$ 按照簡諧定律随时間 t 而变化. 因此，$A_{\mathbf{kl}t}$ 类似于由§34(3)式定义的諧振子的 η_t，振子的頻率 ω 为 $2\pi\nu_{\mathbf{k}}$. 我們可以取每个 $A_{\mathbf{kl}t}$ 与某一諧振子的 η_t 成正比，而这时輻射場就变成一組諧振子.

現在趾我們轉到量子理論，并取 $A_{\mathbf{kl}t}$, $\bar{A}_{\mathbf{kl}t}$ 为在海森伯图象中的力学变量. 能量的表达式(72)式可以保留不变，在那里出現的因子 $A_{\mathbf{kl}}$, $\bar{A}_{\mathbf{kl}}$ 的次序是正确的次序，以致得到的是沒有零点能

的情况．这时 $A_{\mathbf{kl}t}$ 仍然是按照 $e^{i\omega t}$ 的规則随时間而变化，而且仍然可以取它与簡諧振子的 η_t 成正比．为求出比例因子，我們可以令(72)式等于能量表达式(39)，并以两个标記 $\mathbf{k}$ 与 $\mathbf{l}$ 代替标記 a，以 $h\nu_{\mathbf{k}}$ 代替 $\hbar\omega_a$．这就給出

$$4\pi^2\sum_{\mathbf{kl}}\mathbf{k}^2A_{\mathbf{kl}t}\bar{A}_{\mathbf{kl}t}s_{\mathbf{k}}^{-1}=\sum_{\mathbf{kl}}h\nu_{\mathbf{k}}\eta_{\mathbf{kl}t}\bar{\eta}_{\mathbf{kl}t},$$

插入下角标 t 是为了表明,我們研究的是海森伯力学变量(当我們把經典理論的方程轉換到量子理論中去时,我們就应当如此)．因而,利用(64)式,并略去一个不重要的任意相因子,就可得

$$4\pi^2A_{\mathbf{kl}t}=ch^{\frac{1}{2}}\nu_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{2}}\eta_{\mathbf{kl}t}s_{\mathbf{k}}^{\frac{3}{2}}. \tag{73}$$

按此方法,就引入了海森伯力学变量 $\eta_{\mathbf{kl}t}$，它把輻射場描述为一組振子．这些 $\eta_{\mathbf{kl}t}$ 与 $\bar{\eta}_{\mathbf{kl}t}$ 的对易关系是已知的，也就是(11)式，所以,方程(73)决定了这些 $A_{\mathbf{kl}t}$ 与 $\bar{A}_{\mathbf{kl}t}$ 之間的对易关系．因此，它也就决定了在时刻 t 在各不同点 $\mathbf{x}$ 上的場量 $\mathscr{E}$ 与 $\mathscr{H}$ 及势 $\mathbf{A}$ 之間的对易关系(在偶然的情况下,当 $A_{\mathbf{kl}}$, $\bar{A}_{\mathbf{kl}}$ 的对易关系固定时，不同时刻的势或場量的对易关系也可能跟着固定下来)．

当計及輻射場与原子間的相互作用时，我們仍然可以用(73)式．这就包含着假定此相互作用不影响給定时刻場量与势之間的对易关系． 这一相互作用使得 $\eta_{\mathbf{kl}t}$ 不再是按簡諧規則变化,并使振子不再是諧振子．因此，它可能影响不同时刻的两个場量或势之間的对易关系．

現在,我們把相互作用能(61)式搬入量子理論,用 $\mathbf{p}_t$ 代 $\mathbf{p}$，以表明它是海森伯变量．取原子核为原点,在(63)式中取 $\mathbf{x}=0$，并代入(61)式,我們就得到

$$H_{Qt}=\frac{e}{mc}\int(\mathbf{p}_t,\mathbf{A}_{\mathbf{k}t}+\bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}t})d^3k+$$

$$+\frac{e^2}{2mc^2}\iint(\mathbf{A}_{\mathbf{k}t}+\bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}t},\mathbf{A}_{\mathbf{k}'t}+\bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}'t})d^3kd^3k'$$

$$=\frac{e}{mc}\sum_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}_t,\mathbf{A}_{\mathbf{k}t}+\bar{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}t})s_{\mathbf{k}}^{-1}+$$

$$+\frac{e^2}{2mc^2}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\mathbf{A}_{\mathbf{k}t}+\overline{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}t},\ \mathbf{A}_{\mathbf{k}'t}+\overline{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}'t})s_{\mathbf{k}}^{-1}s_{\mathbf{k}'}^{-1},$$

后一等式是从連續的 $\mathbf{k}$ 值过渡到分立的 $\mathbf{k}$ 值的情况. 因此,

$$H_{Qt}=\frac{e}{mc}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{l}}p_{\mathbf{l}t}(A_{\mathbf{k}\mathbf{l}t}+\overline{A}_{\mathbf{k}\mathbf{l}t})s_{\mathbf{k}}^{-1}+$$

$$+\frac{e^2}{2mc^2}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{l}\mathbf{l}'}(A_{\mathbf{k}\mathbf{l}t}+\overline{A}_{\mathbf{k}\mathbf{l}t})(A_{\mathbf{k}'\mathbf{l}'t}+\overline{A}_{\mathbf{k}'\mathbf{l}'t})(\mathbf{l}\mathbf{l}')s_{\mathbf{k}}^{-1}s_{\mathbf{k}'}^{-1},$$

其中 $p_{\mathbf{l}t}$ 是 $\mathbf{p}_t$ 在 $\mathbf{l}$ 方向上的分量. 借助于(73)式,我們可以用 $\eta_{\mathbf{k}\mathbf{l}t}$ 与 $\overline{\eta}_{\mathbf{k}\mathbf{l}t}$ 来表示出 H_Q, 于是我們可以除掉下角标 t (这意味着轉換到薛定諤力学变量),这样我們最后得到

$$H_Q=\frac{eh^{1/2}}{4\pi^2m}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{l}}p_{\mathbf{l}}\nu_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{2}}(\eta_{\mathbf{k}\mathbf{l}}+\overline{\eta}_{\mathbf{k}\mathbf{l}})s_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{2}}+$$

$$+\frac{e^2h}{32\pi^4m}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{l}\mathbf{l}'}\nu_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{2}}\nu_{\mathbf{k}'}^{-\frac{1}{2}}(\eta_{\mathbf{k}\mathbf{l}}+\overline{\eta}_{\mathbf{k}\mathbf{l}})(\eta_{\mathbf{k}'\mathbf{l}'}+\overline{\eta}_{\mathbf{k}'\mathbf{l}'})(\mathbf{l}\mathbf{l}')s_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{2}}s_{\mathbf{k}'}^{-\frac{1}{2}}. \qquad (74)$$

按照我們現在使用的原子模型, 相互作用能表現为 η 与 $\overline{\eta}$ 的一个綫性函数加上一个二次函数. 綫性項引起发射与吸收过程,而二次項引起散射过程以及同时发射两个光子或吸收两个光子的过程. 在二次項中, 因子 η 与 $\overline{\eta}$ 的次序不能从經典理論的工作过程中决定,但是这个次序是不重要的,因为次序的变更只是使 H_Q 改变一个恆量.

一个光子发射到分立态 $\mathbf{k}\mathbf{l}$ (或者也可以标記为分立态 $\mathbf{p}'\mathbf{l}$) 并使原子从 α^0 态跃迁到 α' 态,联系于这个过程的 H_Q 的矩陣元为

$$\langle\mathbf{p}'D\mathbf{l}\alpha'|H_Q|\alpha^0\rangle=\frac{eh^{\frac{1}{2}}}{4\pi^2m\nu'^{\frac{1}{2}}}\langle\alpha'|p_{\mathbf{l}}|\alpha^0\rangle s_{\mathbf{k}}^{-\frac{1}{2}}$$

$$=\frac{e}{mh(2\pi\nu')^{\frac{1}{2}}}\langle\alpha'|p_{\mathbf{l}}|\alpha^0\rangle s_{\mathbf{p}}^{-\frac{1}{2}},$$

因为 $s_{\mathbf{k}}=s_{\mathbf{p}}h^3$. 这里出現的表示电子动量的 $p_{\mathbf{l}}$, 当然是完全与另一字 $\mathbf{p}$ 不同,后者是表示发射的光子的动量. 为避免混淆起見,我們把电子动量 $\mathbf{p}$ 代之以 $m\dot{\mathbf{x}}$, 这两个力学变量对未微扰的原子是相同的. 利用方程(56)的共軛虛量轉入到連續光子态, 我們就得

$$\langle\mathbf{p}'\mathbf{l}\alpha'|H_Q|\alpha^0\rangle=\frac{e}{h(2\pi\nu')^{\frac{1}{2}}}\langle\alpha'|\dot{x}_{\mathbf{l}}|\alpha_0\rangle. \qquad (75)$$

同样地，联系于从連續态 $\mathbf{p}^0\mathbf{l}$ 吸收一个光子并使原子从态 α^0 跃迁到态 α' 的 H_Q 的矩陣元是

$$\langle\alpha'|H_Q|\mathbf{p}^0\mathbf{l}\alpha^0\rangle = \frac{e}{h(2\pi\nu^0)^{\frac{1}{2}}}\langle\alpha'|\dot{x}_1|\alpha^0\rangle, \tag{76}$$

联系于一个光子从連續态 $\mathbf{p}^0\mathbf{l}^0$ 散射到連續态 $\mathbf{p}'\mathbf{l}'$ 并使原子从态 α^0 跃迁到态 α' 的矩陣元是

$$\langle\mathbf{p}'\mathbf{l}'\alpha'|H_Q|\mathbf{p}^0\mathbf{l}^0\alpha^0\rangle = \frac{e^2}{2\pi h^2 m\nu^{0\frac{1}{2}}\nu'^{\frac{1}{2}}}(\mathbf{l}'\mathbf{l}^0)\delta_{\alpha'\alpha^0}, \tag{77}$$

在(74)式中有两项对此式有貢献. 这些矩陣元将在下节用到. 联系于两个光子同时吸收或发射的矩陣元，可以用同样方式写下来，但是它們引起的物理效应太小，以致沒有实际重要性.

§64. 輻射的发射、吸收与散射

現在我們可以直接决定輻射的发射、吸收与散射的系数，办法是把由(75)、(76)与(77)式給出的各矩陣元之値代入第八章的各公式中.

为了决定发射几率，我們可以用 §53 的公式(56). 这表明对于一个在 α^0 态的原子，它自发地发射一个光子，并落到一个低能量的态 α'，每单位时間每单位立体角的几率是

$$\frac{4\pi^2}{h}\frac{WP}{c^2}\left|\frac{e}{h}\frac{1}{(2\pi\nu)^{\frac{1}{2}}}\langle\alpha'|\dot{x}_1|\alpha^0\rangle\right|^2. \tag{78}$$

現在，頻率为 ν 的光子的能量与动量为

$$W = h\nu, \quad P = h\nu/c,$$

还有，从 §29 的海森伯規則(20)式得

$$\langle\alpha'|\dot{x}_1|\alpha^0\rangle = -2\pi i\nu(\alpha^0\alpha')\langle\alpha'|x_1|\alpha^0\rangle,$$

其中 $\nu(\alpha^0\alpha')$ 是联系于从态 α^0 到态 α' 的跃迁的頻率，在現在的情况下，它恰就是发射出的輻射的頻率 ν. 这些結果代入(78)式后，就使发射系数化为

$$\frac{(2\pi\nu)^3}{hc^3}|\langle\alpha'|ex_1|\alpha^0\rangle|^2. \tag{79}$$

为了求得在一指定偏振方向每一单位立体角中能量的发射率，我

們必須把此式乘上 $h\nu$. 这就給出在所有方向的总能量发射率为

$$\frac{4}{3}\frac{(2\pi\nu)^4}{c^3}|\langle\alpha'|e\mathbf{x}|\alpha_0\rangle|^2, \tag{80}$$

这与 §45 的表达式(34)符合，此式証实了海森伯为解释他的矩陣元而作的假定.

按同样方法,由§53的公式(59)給出的吸收系数对于光子变成

$$\frac{4\pi^2h^2W}{c^2P}\left|\frac{e}{h}\frac{1}{(2\pi\nu)^{\frac{1}{2}}}\langle\alpha'|\dot{x}_1|\alpha^0\rangle\right|^2=\frac{8\pi^3\nu}{c}|\langle\alpha'|ex_1|\alpha^0\rangle|^2.$$

这个吸收系数所联系的入射光束是每单位能量范围每单位时間穿过单位面积有一个光子. 如果我們不取能量范围而取每单位頻段穿过单位面积有一个光子(通常处理輻射时正是这样)，則吸收系数变为

$$\frac{8\pi^3\nu}{hc}|\langle\alpha'|ex_1|\alpha^0\rangle|^2.$$

这个結果与 §45 的(32)式相同,只要我們把那里的 E_ν 換成单个光子的能量 $h\nu$. 因此,从 §45 中把輻射場当作外来微扰处理的初等理論,可得出吸收系数的正确值.

初等理論与目前理論的一致性，可以由一般推理来得到. 这两个理論之区别只在于：在初等理論中,場量全部互相对易,而在現在的理論中,場量滿足一定的对易关系. 在強場时,这个差別变得不重要了. 因此,当与強場有关时,这两个理論一定給出同样的吸收系数与发射系数. 由于两个理論給出的吸收率都是与入射束的強度成正比,这种一致性在吸收的情况下，对弱場也一定成立. 根据同样理由，在目前的理論中发射的受激部分一定与初等理論中的发射相同.

現在让我們考虑散射. 直接散射系数由 §50 的公式 (38) 給出. 光子的这种散射不伴随有原子态的任何改变，这是由于在矩陣元的表达式(77)中有因子 $\delta_{\alpha'\alpha^0}$. 因此，光子的終态能量 W' 等于它开始的能量 W^0. 而散射系数化为

$$e^4/m^2c^4\cdot(\mathbf{l}'\mathbf{l}^0)^2.$$

此式与經典力学給出的輻射在自由电子上的散射結果相同．因此，我們看到，輻射在原子中一个电子上的直接散射与原子无关，幷可以由經典理論正确地算出．应当記住，这个結果只在輻射的波长远大于原子尺寸时才能成立．

直接散射是一个数学概念，在实驗上它不能从总的散射［見§51(44)式］分出来．我們来看一看，这个总的散射在光子情况下是什么．我們应用§51的(44)式时一定要仔細．在此公式中的求和$\sum_k$可以看成是代表双重跃迁对散射的貢献，双重跃迁是首先从始态到k态再从k态到終态的跃迁．第一个跃迁可能是吸收入射光子，而第二个是发射所要求的散射光子，但也可能是第一个跃迁是发射光子，而第二个是吸收光子．从推导§51(44)式所用的方法的普遍性質看来，当此公式应用于光子时，这两种双重跃迁显然一定都包括在此求和$\sum_k$之中的，虽然在§51給出的实际推导中，只有第一种跃迁出現，这是因为在那里沒有計入粒子的产生与消失的可能性．

我們用零、单撇及双撇来分别表明原子的始态，終态及中間态，而用零及单撇分别表示被吸收的与被发射的光子．这样，对先吸收后发射的双重跃迁，我們必須将§51公式(44)中的矩陣元

$$\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle,\ \langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k\rangle$$

取为

$$\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle=\langle\alpha''|H_Q|\mathbf{p}^0\mathbf{l}^0\alpha^0\rangle,$$
$$\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k\rangle=\langle\mathbf{p}'\mathbf{l}'\alpha'|H_Q|\alpha''\rangle.$$

还有

$$E'-E_k=h\nu^0+H_P(\alpha^0)-H_P(\alpha'')=h[\nu^0-\nu(\alpha''\alpha^0)],$$

其中

$$h\nu(\alpha''\alpha^0)=H_P(\alpha'')-H_P(\alpha^0).$$

同样地，对先发射后吸收的双重跃迁，我們必須取

$$\langle k|V|\mathbf{p}^0\alpha^0\rangle=\langle\mathbf{p}'\mathbf{l}'\alpha''|H_Q|\alpha^0\rangle,$$
$$\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k\rangle=\langle\alpha'|H_Q|\mathbf{p}^0\mathbf{l}^0\alpha''\rangle,$$

以及

$$E' - E_k = h\nu^0 + H_P(\alpha^0) - H_P(\alpha'') - h\nu^0 - h\nu' =$$
$$= -h[\nu' + \nu(\alpha''\alpha^0)],$$

現在，在中間态中有頻率为 ν^0 与 ν' 的两个光子存在． 在 §51 的(44)式中代入由(75)、(76)与(77)給出的矩陣元之値，我們得到散射系数为

$$\frac{e^4}{h^2c^4}\frac{\nu'}{\nu^0}\left|\frac{h}{m}(\mathrm{l'l^0})\delta_{\alpha'\alpha^0} + \right.$$
$$+ \sum_{\alpha''}\left\{\frac{\langle\alpha'|\dot{x}_{\mathrm{l'}}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|\dot{x}_{\mathrm{l^0}}|\alpha^0\rangle}{\nu^0 - \nu(\alpha''\alpha^0)} - \right.$$
$$\left.\left. - \frac{\langle\alpha'|\dot{x}_{\mathrm{l^0}}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|\dot{x}_{\mathrm{l'}}|\alpha^0\rangle}{\nu' + \nu(\alpha''\alpha^0)}\right\}\right|^2. \tag{81}$$

如果我們不用 $\dot{x}$ 而用 x 把(81)式写出，我們得

$$\frac{(2\pi e)^4}{h^2c^4}\frac{\nu'}{\nu^0}\left|\frac{\hbar}{2\pi m}(\mathrm{l'l^0})\delta_{\alpha'\alpha^0} - \sum_{\alpha''}\nu(\alpha'\alpha'')\nu(\alpha''\alpha^0)\times\right.$$
$$\times\left\{\frac{\langle\alpha'|x_{\mathrm{l'}}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|x_{\mathrm{l^0}}|\alpha^0\rangle}{\nu^0 - \nu(\alpha''\alpha^0)} - \right.$$
$$\left.\left. - \frac{\langle\alpha'|x_{\mathrm{l^0}}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|x_{\mathrm{l'}}|\alpha^0\rangle}{\nu' + \nu(\alpha''\alpha^0)}\right\}\right|^2. \tag{82}$$

我們可用量子条件簡化(82)式．我們有

$$x_{\mathrm{l'}}x_{\mathrm{l^0}} - x_{\mathrm{l^0}}x_{\mathrm{l'}} = 0,$$

这就得出

$$\sum_{\alpha''}\{\langle\alpha'|x_{\mathrm{l'}}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|x_{\mathrm{l^0}}|\alpha^0\rangle - \langle\alpha'|x_{\mathrm{l^0}}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|x_{\mathrm{l'}}|\alpha^0\rangle\} = 0, \tag{83}$$

并且还有

$$x_{\mathrm{l'}}\dot{x}_{\mathrm{l^0}} - \dot{x}_{\mathrm{l^0}}x_{\mathrm{l'}} = 1/m(x_{\mathrm{l'}}p_{\mathrm{l^0}} - p_{\mathrm{l^0}}x_{\mathrm{l'}}) = i\hbar/m(\mathrm{l'l^0}),$$

此式給出

$$\sum_{\alpha''}\{\langle\alpha'|x_{\mathrm{l'}}|\alpha''\rangle\nu(\alpha''\alpha^0)\langle\alpha''|x_{\mathrm{l^0}}|\alpha^0\rangle -$$
$$- \nu(\alpha'\alpha'')\langle\alpha'|x_{\mathrm{l^0}}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|x_{\mathrm{l'}}|\alpha^0\rangle\}$$
$$= \frac{1}{2\pi i}\frac{i\hbar}{m}(\mathrm{l'l^0})\delta_{\alpha'\alpha^0} = \frac{\hbar}{2\pi m}(\mathrm{l'l^0})\delta_{\alpha'\alpha^0}. \tag{84}$$

以 ν' 乘(83)式,并与(84)式相加,我們得到

$$\sum_{\alpha''}\{\langle\alpha'|x_{\mathrm{l}'}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|x_{\mathrm{l}^0}|\alpha^0\rangle[\nu'+\nu(\alpha''\alpha^0)]-$$
$$-\langle\alpha'|x_{\mathrm{l}^0}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|x_{\mathrm{l}'}|\alpha^0\rangle[\nu'+\nu(\alpha'\alpha'')]\}=$$
$$=\hbar/2\pi m\cdot(\mathrm{l}'\mathrm{l}^0)\delta_{\alpha'\alpha^0},$$

如果我們把 $\hbar/2\pi m\cdot(\mathrm{l}'\mathrm{l}^0)\delta_{\alpha'\alpha^0}$ 的这个表达式代入(82)式,在利用这些 ν 之間的恆等关系作直接簡化以后,我們得到

$$\frac{(2\pi e)^4}{h^2c^4}\nu^0\nu'^3\left|\sum_{\alpha''}\left\{\frac{\langle\alpha'|x_{\mathrm{l}'}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|x_{\mathrm{l}^0}|\alpha^0\rangle}{\nu^0-\nu(\alpha''\alpha^0)}-\right.\right.$$
$$\left.\left.-\frac{\langle\alpha'|x_{\mathrm{l}^0}|\alpha''\rangle\langle\alpha''|x_{\mathrm{l}'}|\alpha^0\rangle}{\nu'+\nu(\alpha''\alpha^0)}\right\}\right|^2. \tag{85}$$

这就給出了散射系数，其形式为对散射的每单位立体角一个光子必須射中的有效面积．此式称为克拉默斯-海森伯（Kramers-Heisenberg）公式，这个公式是由这些作者通过与散射的經典理論相类比而首先得出的．

在(82)式中各項能合并起来給出(85)式的結果，这一事实証实了在推导 §51 的公式(44)所作的假定，卽相互作用能的矩陣元 $\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|\mathbf{p}''\alpha''\rangle$，与矩陣元 $\langle\mathbf{p}'\alpha'|V|k\rangle$ 相比是二級小量，至少是当被散射的粒子为光子时是这样．

§ 65. 費米子系集

費米子的系集可以用与 §59, §60 中用以研究玻色子的方法相类似的方法来研究．对右矢(1)式，我們可以用反对称化算符 A，其定义为

$$A=u'!^{-\frac{1}{2}}\sum\pm P, \tag{2'}$$

求和遍及所有的排列 P，按照 P 是偶排列或奇排列而取＋号或－号．把它作用于右矢(1)式,就得到

$$u!^{-\frac{1}{2}}\sum\pm P|\alpha_1^a\alpha_2^b\alpha_3^c\cdots\alpha_{u'}^g\rangle=A|\alpha^a\alpha^b\alpha^c\cdots\alpha^g\rangle, \tag{3'}$$

所得的右矢相应于有 u' 个費米子的系集的一个态．如果这些个別的費米子右矢 $|\alpha^a\rangle, |\alpha^b\rangle, \cdots$ 全不相同,則右矢(3′)是归一化的,否則它就是零．在这方面,右矢(3′)比右矢(3)簡单些．但是,(3′)式

比(3)更复杂之点在于,(3′)式与其中 α^a, α^b, α^c, $\cdots$ 出現的次序有关，如果一个奇排列作用于这些次序，(3′) 式就要因而变一个符号.

与前面一样，我們可以引入在态 $\alpha^{(1)}$, $\alpha^{(2)}$, $\alpha^{(3)}\cdots$ 中的費米子数目 n_1, n_2, n_3, $\cdots$，并把它們当作力学变量或可观察量. 它們每一个的本征值都只有两个，即 0 或 1. 它們組成費米子系集的对易可观察量的完全集. 使这些 n 为对角的表象的基右矢可以取为通过下列方程与右矢(3′)式相联系的右矢:

$$A|\alpha^a\alpha^b\alpha^c\cdots\alpha^g\rangle = \pm|n_1'n_2'n_3'\cdots\rangle. \qquad (6')$$

此式相当于(6)式,这些 n 与变量 α^a, α^b, $\alpha^c\cdots$ 的关系为方程(4). 在(6′)中需要有±号,这是因为当各 n' 已知时,被占据的态 α^a, α^b, α^c, $\cdots$ 虽然固定了,但它們的次序則沒有固定,因而(6′)式的左边的符号是沒有固定的. 为了建立一条規則去决定(6′)式中的符号，我們必須把一个費米子的所有态 α 任意地排成某个标准次序. 在(6′)式左边出現的这些 α，是从全部 α 中选出来的,全部 α 的标准次序就会給出这些选出来的 α 的一个标准次序. 現在我們作出下列規則：如果在左边的这些 α 可以經过偶排列而变为它們的标准次序,則应当在(6′)中出現+号,如果需要奇排列，則应出現－号. 由于这个規則很复杂，以 $|n_1'n_2'n_3'\cdots\rangle$ 为基右矢的表象不是很有用的.

如果在此系集中的費米子的数目是可变的，我們可以建立右矢的完全集为

$$|\rangle,\ |\alpha^a\rangle,\ A|\alpha^a\alpha^b\rangle,\ A|\alpha^a\alpha^b\alpha^c\rangle, \cdots, \qquad (9')$$

此式相当于(9)式. 一般的右矢現在可以表示成 (9′)式中若干右矢之和.

为了繼續討論下去,我們引入一組綫性算符 $\eta, \bar{\eta}$，相应于每个費米子态 α^a 有一对 η_a, $\bar{\eta}_a$，它們滿足的对易关系为

$$\left.\begin{aligned} \eta_a\eta_b + \eta_b\eta_a &= 0, \\ \bar{\eta}_a\bar{\eta}_b + \bar{\eta}_b\bar{\eta}_a &= 0, \\ \bar{\eta}_a\eta_b + \eta_b\bar{\eta}_a &= \delta_{ab}. \end{aligned}\right\} \qquad (11')$$

这些关系类似于(11)式,而在左边以+号代替了一号. 它們表明、如果 $a \neq b$, η_a 与 $\bar{\eta}_a$ 分别与 η_b 与 $\bar{\eta}_b$ 反对易, 如果 $b = a$, 它們成为

$$\eta_a^2 = 0,\ \bar{\eta}_a^2 = 0,\ \bar{\eta}_a\eta_a + \eta_a\bar{\eta}_a = 1. \tag{11''}$$

为了驗証(11')式的各关系是相容的,我們注意到, 满足(11')式条件的綫性算符 η, $\bar{\eta}$ 能够按下列方法建立. 对每个态 α^a, 我們取一組綫性算符 σ_{xa}, σ_{ya}, σ_{za}, 就象在 §37 引入的 σ_x, σ_y, σ_z 一样, 用它們来描述一个电子的自旋, 并且在 $b \neq a$ 时使 σ_{xa}, σ_{ya}, σ_{za} 与 σ_{xb}, σ_{yb}, σ_{zb} 对易. 我們再取綫性算符的一个独立集 ζ_a, 对每个态 α^a 有一个 ζ_a, 它們全部互相反对易,它們的平方都是 1,并且都与所有 σ 变量对易. 那么,令

$$\eta_a = \frac{1}{2}\zeta_a(\sigma_{xa} - i\sigma_{ya}),\quad \bar{\eta}_a = \frac{1}{2}\zeta_a(\sigma_{xa} + i\sigma_{ya}),$$

我們就能使(11')式的全部条件都得到满足.

从(11'')式可知,

$$(\eta_a\bar{\eta}_a)^2 = \eta_a\bar{\eta}_a\eta_a\bar{\eta}_a = \eta_a(1 - \eta_a\bar{\eta}_a)\bar{\eta}_a = \eta_a\bar{\eta}_a.$$

这是 $\eta_a\bar{\eta}_a$ 的代数方程,表明 $\eta_a\bar{\eta}_a$ 是一个具有 0 与 1 为本征值的可观察量. 并且,对 $b \neq a$, $\eta_a\bar{\eta}_a$ 与 $\eta_b\bar{\eta}_b$ 对易. 这些結果允許我們令

$$\eta_a\bar{\eta}_a = n_a, \tag{12'}$$

这是与(12)式一样的. 从(11'')式,我們現在得到

$$\bar{\eta}_a\eta_a = 1 - n_a, \tag{13'}$$

此方程相当于(13)式.

让我們把所有这些 n 的属于本征值零的共同归一化本征右矢写成 $|0\rangle$. 这样

$$n_a|0\rangle = 0,$$

所以,从(12')式得知

$$\langle 0|\eta_a\bar{\eta}_a|0\rangle = 0.$$

因此,象(15)式一样,

$$\bar{\eta}_a|0\rangle = 0. \tag{15'}$$

还有

$$\langle 0|\bar{\eta}_a\eta_a|0\rangle = \langle 0|(1-n_a)|0\rangle = \langle 0|0\rangle = 1,$$

这表明 $\eta_a|0\rangle$ 是归一化的，并且有

$$n_a\eta_a|0\rangle = \eta_a\bar{\eta}_a\eta_a|0\rangle = \eta_a(1-n_a)|0\rangle = \eta_a|0\rangle,$$

这表明 $\eta_a|0\rangle$是 n_a 的一个本征右矢，属于本征值 1. 它也是其他的 n 的本征右矢，但属于本征値零，因为其他 n 与 η_a 对易. 推广这个論断，我們看到，$\eta_a\eta_b\eta_c\cdots\eta_g|0\rangle$ 是归一化的，并且是所有这些 n 的共同本征右矢，对 $n_a, n_b, n_c, \cdots n_g$ 属于本征値 1，对其他的 n 属于本征値零. 这就使我們可以令

$$A|\alpha^a\alpha^b\alpha^c\cdots\alpha^g\rangle = \eta_a\eta_b\eta_c\cdots\eta_g|0\rangle, \tag{17'}$$

两边都是对标記 $a, b, c, \cdots g$ 反对称的. 这里我們有(17)式的类比.

如果我們轉入另一組单費米子的基右矢$|\beta^A\rangle$，我們可以引入新的一組綫性算符 η_A 相应于它們. 这时用与玻色子的情况一样的推理，我們发現新的 η 与原来的 η 的关系为(21)式. 这就表明，对費米子也有一个二次量子化的程序，类似于玻色子的二次量子化，唯一的不同在于对費米子必須用反对易关系(11′)式，以代替玻色子的对易对系(11)式.

形如(22)式的对称綫性算符 U_T 可以用 η、$\bar{\eta}$ 表示出来，其方法与用于玻色子的方法类似. 方程(24)仍然成立，(25)式在用 A 代替 S 后也成立. 現在，代替(26)式的是

$$U_T\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle = \sum_a\sum_r(-)^{r-1}\eta_a\eta_{x_r}^{-1}\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle\langle a|U|x_r\rangle$$

$$= \sum_{ab}\eta_a\sum_r(-)^{r-1}\eta_{x_r}^{-1}\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle\delta_{bx_r}\langle a|U|b\rangle, \tag{26'}$$

$\eta_{x_r}^{-1}$ 的意义是因子 η_{x_r} 必須消掉，而在消掉它以前不許它在其他的 η_x 之中的位置改变. 代替(27)式的是

$$\bar{\eta}_b\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle = \sum_r(-)^{r-1}\eta_{x_r}^{-1}\eta_{x_1}\eta_{x_2}\cdots|0\rangle\delta_{bx_r}, \tag{27'}$$

所以(28)式可以不改变地成立，因而(29)式也不改变地成立. 在

费米子情况下，U_T 的最后形式(29)与在玻色子的情况相同．同样地，形如(30)式的对称綫性算符 V_T 可以表示为

$$V_T = \sum_{abcd} \eta_a \eta_b \langle ab | V | cd \rangle \bar{\eta}_d \bar{\eta}_c, \tag{35'}$$

这与(35)式的一个写法相同．

上述工作表明，在费米子理論与玻色子理論之間有一个深刻的类比，当我們从其中一种轉換到另一种时，在一般的表达方程中，只需有微小的变更．

但是，费米子的理論有一个发展是与玻色子沒有类比的．对费米子，只有两种可能性，即一个态被占据或不被占据，而且，在这两种可能当中存在着对称性．我們可以从数学上演示出这种对称性，办法是作一个变换，使"被占据"与"不被占据"这两个概念对换，即是

$$\eta_a^* = \bar{\eta}_a, \quad \bar{\eta}_a^* = \eta_a,$$
$$n_a^* = \eta_a^* \bar{\eta}^* = 1 - n_a.$$

沒有星号的变量的产生算符，就是有星号的变量的消灭算符，反之亦然．現在可以看出，有星号的变量与沒有星号的变量满足相同的量子条件，并且具有全部相同的性質．

如果只有少数未被占据的态，方便的标准右矢就是每个态都被占据的右矢，即 $|0^*\rangle$，它满足

$$n_a |0^*\rangle = |0^*\rangle.$$

因此，它满足

$$n_a^* |0^*\rangle = 0,$$

或即

$$\bar{\eta}_a^* |0^*\rangle = 0.$$

系集的其他态現在表示为

$$\eta_a^* \eta_b^* \eta_c^* \cdots |0^*\rangle,$$

其中出現的变量关联于未被占据的费米子态 $a, b, c, \cdots$．我們可以把这些未被占据的费米子态看成在已被占据的各态中的空穴，而把变量 η^* 看成是这种空穴的产生算符．这种空穴也是物理对象，正如原来的粒子为物理对象一样，并且也是费米子．

第十一章　电子的相对論性理論

§66. 粒子的相对論性处理

到此为止，我們已經建立起的理論，基本上是非相对論性的理論．我們在全部时間內都是在一个特定的洛伦兹参考系統中工作，并建立了作为經典的非相对論性力学的类比的理論．現在，让我們試图使这个理論成为在洛伦兹变换下不变的，这样它就合乎特殊相对論的原理了．为了要使理論有可能应用到高速粒子，这是必需的．沒有必要使理論合乎广义相对論，因为只有当我們研究引力場时，才要求用到广义相对論，而在原子現象中，引力場是完全不重要的．

让我們来看一看，量子理論的基本思想怎样能适应于相对論的观点，即应当把时空四維同样地对待．第一章所說的态的迭加的一般原理是一个相对論性的原理，因为它适用于具有相对論时空意义的态．但是，可观察量的一般概念就不适合了，因为一个可观察量可能包含在某一时刻在分开得很远的各点上的物理事物．結果是如果我們用一个联系于任意的对易可观察量的完全集的一般表象，理論就不能显出相对論所要求的空間与时間的对称性．在相对論性量子力学中，我們一定要用一个能显示出这种对称性的表象，才算是滿意的．这样，我們才有可能变换到联系于洛伦兹参考系的其他表象（如果在一特定計算中，这样做是有用的話）．

对于单个粒子的問題，为了显示出时間与空間之間的对称性，我們必須用薛定諤表象．我們令 x_1, x_2, x_3 代替 x, y, z，而用 x_0 代 ct．那么，与时間有关的波函数就成为 $\psi(x_0x_1x_2x_3)$，它給我們提供一个同等地对待四个 x 的基础．

我們应当用相对論符号把这四个 x 写成 $x_\mu(\mu=0, 1, 2, 3)$．

任意的时空矢量有四个分量，它們在洛伦兹变换中如四維元dx_μ一样变换，这样的矢量将写如 a_μ，用一个希腊字母为下角标．我們可以按下列規則提升角标：

$$a^0 = a_0,\quad a^1 = -a_1,\quad a^2 = -a_2,\quad a^3 = -a_3. \tag{1}$$

这些 a_μ 就称为矢量 a 的反变分量，而 a^μ 称为协变分量．两个矢量 a_μ 与 b_μ 有一个洛伦兹不变的标量积：

$$a_0b_0 - a_1b_1 - a_2b_2 - a_3b_3 = a^\mu b_\mu = a_\mu b^\mu,$$

重复的角标表示求和．基本张量 $g^{\mu\nu}$ 定义为

$$g^{00} = 1,\ g^{11} = g^{22} = g^{33} = -1,\ g^{\mu\nu} = 0\ (\mu \neq \nu). \tag{2}$$

借助于(1)式，联系协变分量与反变分量之間的規則可以写成

$$a^\mu = g^{\mu\nu}a_\nu.$$

在薛定諤表象中，动量（其分量現在应写成 p_1, p_2, p_3 以代替 p_x, p_y, p_z)等于下列算符：

$$p_r = -i\hbar\partial/\partial x_r,\ (r = 1, 2, 3). \tag{3}$$

現在四个算符 $\partial/\partial x_\mu$ 組成一个四維矢量的协变分量，其反变分量写成 $\partial/\partial x^\mu$．因此，要把(3)式变成相对論性的理論，我們必須首先把它的角标平衡后写成

$$p_r = i\hbar\partial/\partial x^r,$$

然后把它扩充到完全的四維矢量方程

$$p_\mu = i\hbar\partial/\partial x^\mu. \tag{4}$$

因此，我們必須引进一个新的力学变量 p_0，它等于算符 $i\hbar\partial/\partial x_0$．由于当它与动量 p_r 合并时組成一个四維矢量，它的物理意义一定是粒子的能量除以 c．我們象对四个 x 一样同等地对待这四个 p，这样就能繼續发展我們的理論．

这里要发展的电子理論中，我們必須再引进描述电子的內部运动的一个自由度．因此，波函数就必須包含四个 x 以外的另一变量．

§ 67. 电子的波动方程

我們首先考虑一个电子在沒有电磁場时的运动情况．这样，問

題就簡单地成为自由粒子的問題,就象 §30 中研究过的一样,这粒子可能带有附加的內部自由度. 經典力学所提供的这个系統的相对論性哈密頓量是 §30 的(23)式,从而得到的波动方程为

$$\{p_0 - (m^2c^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2)^{\frac{1}{2}}\}\psi = 0 \tag{5}$$

其中这些 p 按照(4)式解释为算符. 方程(5)虽然考慮到相对論所要求的能量与动量的关系,但从相对論的观点看来,仍是不能滿意的,因为它在 p_0 与其余的 p 之間是很不对称的,这种不对称就使我們不能在相对論方式下把它推广到有場存在的情況. 因而,我們必須找出一个新的波动方程.

如果我們把波动方程(5)左乘以算符 $\{p_0+(m^2c^2 + p_1^2 + p_2^2 + p_3^2)^{\frac{1}{2}}\}$,我們得到方程

$$\{p_0^2 - m^2c^2 - p_1^2 - p_2^2 - p_3^2\}\psi = 0, \tag{6}$$

它有相对論不变性的形式,因而可以更方便地取作为相对論理論的基础. 方程(6)不完全等效于方程(5),因为虽然方程(5)的每个解都是方程(6)的解,但反过来却不一定对. 方程(6)的解中只有那些屬于 p_0 取正値的解,才同时也是方程(5)的解.

波动方程(6)由于它是 p_0 的二次式,不是量子理論的普遍規則所要求的形式. 在 §27 中,我們从相当普遍的推理得出,波动方程必須是算符 $\partial/\partial t$ 或 p_0 的綫性式,就象該节的方程(7)那样. 因而我們要找出一个为 p_0 的綫性式的波动方程,并且要它大体上等效于(6)式. 为要使这个波动方程在洛伦兹变換中以簡单方式变換,我們試图这样来安排:它应为 p_1, p_2, p_3 的有理式和綫性式,也应为 p_0 的有理式和綫性式,这样就具有下列形式:

$$\{p_0 - \alpha_1p_1 - \alpha_2p_2 - \alpha_3p_3 - \beta\}\psi = 0, \tag{7}$$

其中这些 α 与 β 都是与 p 无关的. 由于我們所考慮的是沒有場的情況,在时空中所有的点一定是等效的,所以,在波动方程中的算符一定不含 x. 因此,这些 α 与 β 也一定与 x 无关,所以,它們一定与 p 和 x 都对易. 因此它們描写某个新的自由度,屬于电子的某种內部运动. 我們将在后面看到,它們带来了电子的自旋.

对(7)式左乘以算符 $\{p_0 + \alpha_1p_1 + \alpha_2p_2 + \alpha_3p_3 + \beta\}$,我們得到

$$\left\{p_0^2-\sum_{123}\left[\alpha_1^2p_1^2+(\alpha_1\alpha_2+\alpha_2\alpha_1)p_1p_2+(\alpha_1\beta+\beta\alpha_1)p_1\right]-\beta^2\right\}\psi=0,$$

其中$\sum\limits_{123}$表示对下角标 1, 2, 3 的輪換排列取和. 如果这些 α 与 β 滿足关系式

$$\alpha_1^2=1,\ \alpha_1\alpha_2+\alpha_2\alpha_1=0,$$
$$\beta^2=m^2c^2,\ \alpha_1\beta+\beta\alpha_1=0,$$

再加上把下角标 1, 2, 3 排列后而得的各关系式, 則上式就与(6)式相同了. 如果我們写成

$$\beta=\alpha_m mc,$$

則这些关系式可以归結为一个式子,即

$$\alpha_a\alpha_b+\alpha_b\alpha_a=2\delta_{ab}\ (a,b=1,2,3\text{ 或 }m). \tag{8}$$

这四个 α 全是互相反对易的,每一个的平方都是 1.

因此,在我們給这些 α 与 β 以适当的性质后,我們就能使波动方程(7)等效于(6)式, 只要所考慮的是电子整体的运动. 現在我們可以假定 (7) 式是沒有場时电子运动的正确的相对論波动方程. 但是, 这就引起一个困难, 因为(7)式如(6)式一样, 不是严格地等效于(5)式,而是允許有相当于 p_0 的正値与負値的解. p_0 为負値的那些解, 当然不相应于任何实际上可观察到的电子运动. 我們暫时只考慮正能量的解, 有关負能量的解的討論将放在 §73 中进行.

我們容易得到这四个 α 的一个表象. 它們与 §37 中引进的 σ 有相同的代数性质, 而那些 σ 能用两行两列的矩陣来表示. 只要我們还保持用两行两列的矩陣, 我們就不能得到超过三个的反对易量的表象;为了得到这四个反对易的 α 的表象,我們必須用四行四列的矩陣. 方便的做法是: 首先用三个 σ 以及第二組类似的三个反对易变量(其平方为 1) ρ_1, ρ_2, ρ_3 来表示这些 α, 这些 ρ 与 σ 无关,并与 σ 对易. 除了其他的可能性外,我們可取

$$\alpha_1=\rho_1\sigma_1,\ \alpha_2=\rho_1\sigma_2,\ \alpha_3=\rho_1\sigma_3,\ \alpha_m=\rho_3, \tag{9}$$

这样,这些 α 滿足所有的关系式(8),这是容易驗証的. 現在,如我們取一个表象,其中 ρ_3 与 σ_3 为对角的,我們就得到下列矩陣方案:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

应当注意到，ρ 与 σ 全是厄米的，这就使 α 也全是厄米的.

相应于四行四列，波函数 ψ 一定包括一个可取四个値的变量，才能使矩陣可以用来乘它．另一办法是，我們也可把波函数看成有四个分量，每一个分量只是四个 x 的函数．在 §37 我們曾說过，电子的自旋要求波函数有两个分量．在我們目前的理論中，波函数有四个分量，这一事实是由于波动方程(7)的解的数目是它們应有的数目的两倍，其中一半相应于具有負能量的态.

借助于(9)式，波动方程(7)可以用三維矢量的符号写成

$$\{p_0 - \rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) - \rho_3 mc\}\psi = 0. \tag{10}$$

为了把这个方程推广到有电磁場存在的情况，我們按經典規則，把 p_0 与 $\mathbf{p}$ 代之以 $p_0 + e/c \cdot A_0$ 与 $\mathbf{p} + e/c \cdot \mathbf{A}$，其中 A_0 与 $\mathbf{A}$ 是电子所在之处的場的标量势与矢量势．这就得出方程

$$\left\{p_0 + \frac{e}{c} A_0 - \rho_1\left(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) - \rho_3 mc\right\} \psi = 0, \tag{11}$$

这就是电子的相对論性理論的基本波动方程.

(10)式或(11)式中 ψ 的四个分量，应当按下列方法图象化，即把一个放在另一个下面写出来，組成一个单列的矩陣．这时，正方矩陣 ρ 与 σ 可以按照矩陣乘法去乘这个单列的矩陣 ψ，乘积在每

种情况都得另一个单列的矩陣．代表一个左矢的 ψ 的共軛虛量波函数，应当图象为化一个分量放在另一个分量之旁，这样組成一个单行的矩陣，可以用正方矩陣 ρ 或 σ 右乘它，得到另一单行矩陣．我們把这个共軛虛量波函数图象化为用 $\overline{\Psi}^{\dagger}$ 代表的单行矩陣，用符号 † 代表任意矩陣的轉置矩陣，即代表行与列对換的結果．这样，方程(11)的共軛虛量就是

$$\overline{\Psi}^{\dagger}\left\{p_0+\frac{e}{c}A_0-\rho_1\left(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)-\rho_3 mc\right\}=0, \qquad (12)$$

在此式中，算符 p 向左边作用．一个微分算符向左边作用，一定要按 §22 的(24)式来解释．

§ 68. 洛伦兹变換下的不变性

在开始討論波动方程(11)或(12)式的物理后果以前，我們首先来驗証，我們的理論的确是在洛伦兹变換下不变的，或者講得更确切一些，此理論所导出的物理結果与所用的洛伦兹参考系无关．这一点决不是从波动方程(11)的形式就可以显而易見的．我們必須加以驗証，如果我們在不同的洛伦兹参考系中写下波动方程，則新方程的解能够与原来方程的解一一对应，使得可以假定相对应的解代表同一个态．对每个洛伦兹系，波函数模量的平方，在对四个分量上求和之后，应当給出在該洛伦兹系中电子处于某一位置每单位体积的几率．我們可以称之为**几率密度**．在不同洛伦兹系中对代表同一态的波函数計算而得的几率密度的各个値是互相有关的，它們的关系应当象某一四維矢量在这些洛伦兹系中的时間分量的关系一样．还有，这个四維矢量的四維散度应当为零，其意义是电子守恆，或者說，电子如不通过边界，就不能出現或消失．

为了簡化起見，方便的是引入符号 $\alpha_0=1$，并假定四个 $\alpha_\mu(\mu=0, 1, 2, 3)$ 的下角标能按照(1)式的規則提升，虽然这四个 α 不是一个四維矢量的分量．現在我們可以把波动方程(11)写成

$$\left\{\alpha^{\mu}\left(p_{\mu}+\frac{e}{c}A_{\mu}\right)-\alpha_m mc\right\}\psi=0. \qquad (13)$$

这四个 α^μ 满足

$$\alpha^\mu\alpha_m\alpha^\nu + \alpha^\nu\alpha_m\alpha^\mu = 2g^{\mu\nu}\alpha_m, \tag{14}$$

$g^{\mu\nu}$ 用(2)式的定义，我們可以分几种情况驗証上式，卽分别地取 μ 与 ν 都为 0 的情况、它們之中有一个为 0 的情况以及它們都不为 0 的情况.

让我們运用一个无穷小的洛伦兹变换，并用星号来标明联系于新参考系的各个量. 则四維矢量 p_μ 的分量按下列形式的方程变换：

$$p_\mu^* = p_\mu + a_\mu{}^\nu p_\nu, \tag{15}$$

其中 $a_\mu{}^\nu$ 是一級的小数. 我們将把这些 a 的二次量,因而是二級量略去. 洛伦兹变换的条件是

$$p_\mu^* p^{\mu *} = p_\mu p^\mu,$$

这就得出

$$a_\mu{}^\nu p_\nu p^\mu + p_\mu a^{\mu\nu} p_\nu = 0,$$

从而推导出

$$a^{\mu\nu} + a^{\nu\mu} = 0. \tag{16}$$

A_μ 的分量也按同样規則变换,所以我們有

$$p_\mu + \frac{e}{c}A_\mu = p_\mu^* + \frac{e}{c}A_\mu^* - a_\mu{}^\nu\left(p_\nu^* + \frac{e}{c}A_\nu^*\right).$$

因此,波动方程(13)变成

$$\left\{(\alpha^\mu - \alpha^\lambda a_\lambda{}^\mu)\left(p_\mu^* + \frac{e}{c}A_\mu^*\right) - \alpha_m mc\right\}\psi = 0. \tag{17}$$

定义

$$M = \frac{1}{4}a_{\rho\sigma}\alpha^\rho\alpha_m\alpha^\sigma. \tag{18}$$

于是从(14)式得

$$\begin{aligned}\alpha^\mu\alpha_m M - M\alpha_m\alpha^\mu &= \frac{1}{4}a_{\rho\sigma}\{(\alpha^\mu\alpha_m\alpha^\rho + \alpha^\rho\alpha_m\alpha^\mu)\alpha_m\alpha^\sigma - \\ &\quad - \alpha^\rho\alpha_m(\alpha^\mu\alpha_m\alpha^\sigma + \alpha^\sigma\alpha_m\alpha^\mu)\} \\ &= \frac{1}{2}a_{\rho\sigma}(g^{\mu\rho}\alpha^\sigma - \alpha^\rho g^{\mu\sigma}) \\ &= -a_\rho{}^\mu\alpha^\rho,\end{aligned}$$

这里用了(16)式，因而有

$$\alpha^{\mu}(1+\alpha_m M)=(1+M\alpha_m)(\alpha^{\mu}-a_{\rho}{}^{\mu}\alpha^{\rho}). \tag{19}$$

因此，用$(1+M\alpha_m)$左乘(17)式，我們得

$$\left\{\alpha^{\mu}(1+\alpha_m M)\left(p_{\mu}^{*}+\frac{e}{c}A_{\mu}^{*}\right)-(\alpha_m+M)mc\right\}\psi=0.$$

所以，如果我們令

$$(1+\alpha_m M)\psi=\psi^{*}, \tag{20}$$

則我們得到

$$\left\{\alpha^{\mu}\left(p_{\mu}^{*}+\frac{e}{c}A_{\mu}^{*}\right)-\alpha_m mc\right\}\psi^{*}=0. \tag{21}$$

这就是与(13)式一样的形式，其中全是带星号的变量 $p_{\mu}^{*}, A_{\mu}^{*}, \psi^{*}$，这就表明，只要$\psi$受到由(20)給出的正确变换，則(13)式在一无穷小的洛伦兹变换下是不变的．一个有限的洛伦兹变换可由許多无穷小的变换所組成，所以在一个有限的洛伦兹变换下，波动方程(13)也是不变的．注意到矩陣 α^{μ} 完全不变．

上面証明的不变性的意义是，原来波动方程(13)的各解ψ与新波动方程(21)的各解ψ^{*}一一对应，相应的解之間的关系是(20)式．我們假定，相应的解代表同一个物理态．現在我們必須驗証，相应的各解(联系于它們各自的洛伦兹参考系)的物理解释是一致的．这一点要求 $\bar{\psi}^{\dagger}\psi$ 应当是联系于原来参考系的几率密度，而 $\bar{\psi}^{*\dagger}\psi^{*}$ 則为联系于新参考系的几率密度．让我們考察这些量之間的关系．$\bar{\psi}^{\dagger}\psi$ 与 $\bar{\psi}^{\dagger}\alpha^{0}\psi$ 相同，并組成四个量 $\bar{\psi}^{\dagger}\alpha^{\mu}\psi$ 之一，这四个量应当一齐处理．

方程(18)与(16)表明，M是純虛量．因此，方程(20)的共軛虛量是

$$\bar{\psi}^{*\dagger}=\bar{\psi}^{\dagger}(1-M\alpha_m).$$

因而从(19)式得到

$$\begin{aligned}\bar{\psi}^{*\dagger}\alpha^{\mu}\psi^{*}&=\bar{\psi}^{\dagger}(1-M\alpha_m)\alpha^{\mu}(1+\alpha_m M)\psi\\&=\bar{\psi}^{\dagger}(1-M\alpha_m)(1+M\alpha_m)(\alpha^{\mu}-a_{\nu}{}^{\mu}\alpha^{\nu})\psi,\end{aligned}$$

此式簡化为

$$\overline{\psi}^{*\dagger}\alpha^{\mu}\psi^{*} = \overline{\psi}^{\dagger}(\alpha^{\mu} - a_{\nu}{}^{\mu}\alpha^{\nu})\psi$$
$$= \overline{\psi}^{\dagger}\alpha^{\mu}\psi + a_{\nu}{}^{\mu}\overline{\psi}^{\dagger}\alpha^{\nu}\psi,$$

这里用了(16)式. 如果我們把这里的上角标 μ 放下来，我們得到一个与(15)式同一形式的方程,这个方程表明，四个量 $\overline{\psi}^{\dagger}\alpha_{\mu}\psi$ 变换时与一个四維矢量的反变分量相同. 因此，$\overline{\psi}^{\dagger}\psi$ 的变换与一个四維矢量的时間分量相同，这就是几率密度的变换規則. 这个四維矢量的空間分量，即 $\overline{\psi}^{\dagger}\alpha_{r}\psi$，如果乘以 c，就是几率流，即电子每单位时間穿过单位面积的几率.

应当注意，$\overline{\psi}^{\dagger}\alpha_{m}\psi$ 是不变量，这是因为

$$\overline{\psi}^{*\dagger}\alpha_{m}\psi^{*} = \overline{\psi}^{\dagger}(1 - M\alpha_{m})\alpha_{m}(1 + \alpha_{m}M)\psi$$
$$= \overline{\psi}^{\dagger}\alpha_{m}\psi.$$

最后，我們还必須驗証守恆定律，即散度

$$\frac{\partial}{\partial x_{\mu}}(\overline{\psi}^{\dagger}\alpha_{\mu}\psi) \tag{22}$$

为零. 为了証明这一点，用 $\overline{\psi}^{\dagger}$ 左乘方程(13)，其結果为

$$\overline{\psi}^{\dagger}\alpha^{\mu}\left(i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x^{\mu}} + \frac{e}{c}A_{\mu}\psi\right) - \overline{\psi}^{\dagger}\alpha_{m}mc\psi = 0.$$

其共軛虚量方程为

$$\left(-i\hbar\frac{\partial\overline{\psi}^{\dagger}}{\partial x^{\mu}} + \overline{\psi}^{\dagger}\frac{e}{c}A_{\mu}\right)\alpha^{\mu}\psi - \overline{\psi}^{\dagger}\alpha_{m}mc\psi = 0.$$

两式相减，并除以 $i\hbar$，我們得到

$$\overline{\psi}^{\dagger}\alpha^{\mu}\frac{\partial\psi}{\partial x^{\mu}} + \frac{\partial\overline{\psi}^{\dagger}}{\partial x^{\mu}}\alpha^{\mu}\psi = 0,$$

这恰恰就是表示(22)式为零. 按这样方法，我們完全証明了，我們的理論在它所应用的任何参考系中都給出互相协調的結果.

§69. 自由电子的运动

按照上述理論，在海森伯图象中考虑自由电子的运动，并研究海森伯运动方程，是有意义的. 这些运动方程能够严格地积分，这是由薛定諤首先做出来的[1]. §28的符号要求把海森伯图象中随时

1) Schrödinger, *Sitzungsb. d. Berlin. Akad.*, 1930, p. 418.

間变化的力学变量都加上一个下角标 t，为了簡化起見，我們将省去这个下角标 t.

我們应取一个表达式 cp_0 作为哈密頓量，当我們令(10)式中作用于 ψ 上的算符为零时，即可得出 cp_0，即

$$H = c\rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) + \rho_3 mc^2 = c(\boldsymbol{\alpha}, \mathbf{p}) + \rho_3 mc^2. \tag{23}$$

我們馬上看出，动量与 H 对易，因而是一个运动恆量. 还有，速度的 x_1 分量是

$$\dot{x}_1 = [x_1, H] = c\alpha_1. \tag{24}$$

这个結果是頗令人惊奇的，因为它的意思是速度与动量之間有完全不同于經典力学中所有的关系. 但是，它与几率流分量的表达式 $\bar{\psi}^{\dagger}c\alpha_1\psi$ 有联系. (24)式所得出的 $\dot{x}$ 有本征值为 $\pm c$，相当于 α_1 的本征值 ± 1. 因为 $\dot{x}_2$ 与 $\dot{x}_3$ 是类似的，我們可以作出結論：测量自由电子的速度分量肯定得出结果为 $\pm c$. 容易看出，当有場存在时，这个結論也成立.

由于实际上电子被观察到的速度要比光速小得多，似乎这里有与实驗相矛盾之处. 然而，这个矛盾不是眞实的，因为在上述結論中的理論速度是在某一特定时刻的速度，而被观察到的速度却总是在相当的时間間隔中的平均速度. 在进一步考察运动方程的基础上，我們将发現，速度完全不是恆量，而是在一个平均值周围迅速振动的，这个平均值符合于观察得到的值.

只要簡单地应用§24的测不准原理，就容易地驗証，在相对論理論中，测量速度的一个分量一定得出結果为 $\pm c$. 为了测量速度，我們应当测量在稍微不同的两个时刻的位置，然后把位置的变化除以时間間隔(去测量动量然后用公式来計算速度是不行的，因为速度与动量之間的通常关系是不成立的). 为了使我們所测出的速度可能接近于瞬时速度，在两次测量位置之間的时間間隔一定要很短，因而位置的测量一定是很精确的. 在此时間間隔中，我們以很大的精确度知道了电子的位置，但按照测不准原理，这一定要引起电子在动量上几乎完全不确定. 这一点的意义是，几乎所有的动量值都是等几率的，所以，动量几乎肯定是无穷大. 动量的

分量值为无穷大，相当于相应的速度分量值为$\pm c$.

現在我們考察，电子的速度如何随时間变化. 我們有

$$i\hbar\dot{\alpha}_1 = \alpha_1 H - H\alpha_1.$$

現在，由于α_1与H中除了$c\alpha_1 p_1$外的所有各項反对易，因而

$$\alpha_1 H + H\alpha_1 = \alpha_1 c\alpha_1 p_1 + c\alpha_1 p_1 \alpha_1 = 2cp_1,$$

从而

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\dot{\alpha}_1 &= 2\alpha_1 H - 2cp_1, \\ &= -2H\alpha_1 + 2cp_1. \end{aligned}\right\} \tag{25}$$

由于H与p_1都是恆量，从方程(25)中的第一式得到

$$i\hbar\ddot{\alpha}_1 = 2\dot{\alpha}_1 H. \tag{26}$$

这个$\dot{\alpha}$的微分方程可以立即积分，結果为

$$\dot{\alpha}_1 = \dot{\alpha}_1^0 e^{-2iHt/\hbar}, \tag{27}$$

其中$\dot{\alpha}_1^0$是恆量，等于$t=0$时的$\dot{\alpha}_1$值. 在(27)式中因子$e^{-2iHt/\hbar}$一定要放在因子$\dot{\alpha}_1^0$的右边，因为H在(26)式中出現于$\dot{\alpha}_1$的右边. 按同样方法，(25)式的第二式推导出結果为

$$\dot{\alpha}_1 = e^{2iHt/\hbar}\dot{\alpha}_1^0.$$

現在我們可以容易地完成运动方程对x_1的积分. 从(27)式与方程(25)的第一式得到

$$\alpha_1 = \frac{1}{2} i\hbar\dot{\alpha}_1^0 e^{-2iHt/\hbar} H^{-1} + cp_1 H^{-1}, \tag{28}$$

因此方程(24)的时間积分为

$$x_1 = -\frac{1}{4} c\hbar^2 \dot{\alpha}_1^0 e^{-2iHt/\hbar} H^{-2} + c^2 p_1 H^{-1} t + a_1, \tag{29}$$

其中a_1为一恆量.

从(28)式我們看到，速度的x_1分量即$c\alpha_1$包括两部分，即一个恆量部分$c^2 p_1 H^{-1}$（它与动量的关系是經典相对論公式）以及一个振蕩部分

$$\frac{1}{2} ic\hbar\dot{\alpha}_1^0 e^{-2iHt/\hbar} H^{-1},$$

它的頻率$2H/h$是很高的，它至少是$2mc^2/h$. 在实际測量速度时，

只有恆量部分会被观察到，这样的测量給出在一个比 $h/2mc^2$ 大得多的时間間隔中的平均速度. 振蕩部分保証了 $\dot{x}_1$ 的瞬时值应有本征值为 $\pm c$. x_1 的振蕩部分是小的，按照(29)式，这部分为

$$-\frac{1}{4}c\hbar^2\dot{\alpha}_1^0 e^{-2iHt/\hbar}H^{-2}=\frac{1}{2}ic\hbar(\alpha_1-cp_1H^{-1})H^{-1},$$

它的数量級为 $\hbar/mc$，因为 $(\alpha_1-cp_1H^{-1})$ 的数量級为 1.

§ 70. 自旋的存在

在 §67 中我們已看到，沒有电磁場时电子的正确波动方程，即方程(7)或(10)，等效于从与經典理論类比而提出的波动方程(6). 当有場存在时这种等效性便不再成立了. 在这种情况下，与經典理論的类比所期望的波动方程为

$$\left\{\left(p_0+\frac{e}{c}A_0\right)^2-\left(\mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2-m^2c^2\right\}\psi=0, \tag{30}$$

在此式中，算符恰恰是經典的相对論性哈密頓量. 如果我們用某个因子左乘(11)式，使它尽可能地类似于(30)式，也即是用因子

$$p_0+\frac{e}{c}A_0+\rho_1\left(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)+\rho_3 mc,$$

来乘，我們就得到

$$\begin{aligned}\Bigg\{\left(p_0+\frac{e}{c}A_0\right)^2-\left(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2-m^2c^2-\\ -\rho_1\Bigg[\left(p_0+\frac{e}{c}A_0\right)\left(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)-\\ -\left(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\left(p_0+\frac{e}{c}A_0\right)\Bigg]\Bigg\}\psi=0.\end{aligned} \tag{31}$$

現在我們用一个一般的公式，即如果 $\mathbf{B}$ 与 $\mathbf{C}$ 是与 $\boldsymbol{\sigma}$ 对易的任意两个三維矢量，则

$$(\boldsymbol{\sigma},\mathbf{B})(\boldsymbol{\sigma},\mathbf{C})=\sum_{123}\{\sigma_1^2B_1C_1+\sigma_1\sigma_2B_1C_2+\sigma_2\sigma_1B_2C_1\},$$

求和对下角标 1, 2, 3 輪換排列进行，或为

$$(\boldsymbol{\sigma},\mathbf{B})(\boldsymbol{\sigma},\mathbf{C})=(\mathbf{B},\mathbf{C})+i\sum_{123}\sigma_3(B_1C_2-B_2C_1)$$

$$= (\mathbf{B}, \mathbf{C}) + i(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{B} \times \mathbf{C}). \tag{32}$$

取 $\mathbf{B} = \mathbf{C} = \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}$，由于

$$\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \times \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) = \frac{e}{c}\{\mathbf{p} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{p}\}$$

$$= -i\hbar\frac{e}{c}\operatorname{curl}\mathbf{A} = -i\hbar\frac{e}{c}\mathscr{H},$$

其中 $\mathscr{H}$ 是磁場，我們得到

$$\left(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 = \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + \frac{\hbar e}{c}(\boldsymbol{\sigma}, \mathscr{H}). \tag{33}$$

我們还有

$$\left(p_0 + \frac{e}{c}A_0\right)\left(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) - \left(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\left(p_0 + \frac{e}{c}A_0\right)$$

$$= \frac{e}{c}(\boldsymbol{\sigma}, p_0\mathbf{A} - \mathbf{A}p_0 + A_0\mathbf{p} - \mathbf{p}A_0)$$

$$= \frac{i\hbar e}{c}\left(\boldsymbol{\sigma}, \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + \operatorname{grad}A_0\right) = -i\frac{\hbar e}{c}(\boldsymbol{\sigma}, \mathscr{E}),$$

其中 $\mathscr{E}$ 是电場．因此，(31)式变为

$$\left\{\left(p_0 + \frac{e}{c}A_0\right)^2 - \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 - m^2c^2 - \right.$$
$$\left. - \frac{\hbar e}{c}(\boldsymbol{\sigma}, \mathscr{H}) + i\rho_1\frac{\hbar e}{c}(\boldsymbol{\sigma}, \mathscr{E})\right\}\psi = 0. \tag{34}$$

这个方程与(30)式的不同在于算符中多出了两項．多出的这两項包含某种新的物理效应，但是由于它們不是实量，不能就它們本身很直接地給出物理解释．

为得到(34)式与(30)式之間的差异所包含的物理特性的了解，較好的方法是用海森伯图象工作，这个图象，对于經典力学与量子力学的比較說来，总是較为适合的图象．海森伯运动方程决定于哈密頓量

$$H = -eA_0 + c\rho_1\left(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + \rho_3 mc^2, \tag{35}$$

这就是把(23)式推广到有場时的情况．方程(35)給出

$$\left(\frac{H}{c}+\frac{e}{c}A_0\right)^2=\left\{\rho_1\left(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)+\rho_3 mc\ \right\}^2$$

$$=\left(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+m^2c^2$$

$$=\left(\mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+m^2c^2+\frac{\hbar e}{c}(\boldsymbol{\sigma},\ \mathscr{H}),\tag{36}$$

这里用了(33)式. 此处我們有(34)式中增加項的实数部分，它在沒有純虛部分的情况下出現. 对于緩慢运动的电子（即动量小的电子)，我們可以期望海森伯运动方程决定于一个 mc^2+H_1 形式的哈密頓量，其中 H_1 比起 mc^2 来为小量. 以 mc^2+H_1 作为 H 代入(36)式，并略去 H_1^2 及其他包含 c^{-2} 的各項，在除以 $2m$ 后，我們得到

$$H_1+eA_0=\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}+\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+\frac{\hbar e}{2mc}(\boldsymbol{\sigma},\ \mathscr{H}).\tag{37}$$

由(37)式得出的哈密頓量 H_1 与慢电子的經典哈密頓量相比，只差最后一項

$$\frac{\hbar e}{2mc}(\boldsymbol{\sigma},\ \mathscr{H}).$$

这一項可以看成是，一个慢电子在量子理論中所具有的一个附加势能，可以解释为由于电子有一磁矩 $-\hbar e/2mc\cdot\boldsymbol{\sigma}$ 所引起的. 这个磁矩就是我們在 §41 与 §47 中为研究塞曼效应而假定的磁矩，它是与实驗相符合的.

自旋角动量不引起任何势能，因而在前面的計算結果中不出現. 表明自旋角动量存在的最簡单方法是，取自由电子运动的情况，或取一个电子在有心力場中运动的情况，而去决定角动量积分. 这就意味着用(23)式的哈密頓量，或用(35)式的哈密頓量而令 $\mathbf{A}=0$，A_0 只为向径 r 的函数，即

$$H=-eA_0(r)+c\rho_1(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p})+\rho_3 mc^2,\tag{38}$$

并且去求角动量的海森伯运动方程. 无論用这两种哈密頓量中的哪一个，我們借助于 §35 的对易关系，都可以得到軌道角动量的 x_1 分量 $m_1=x_2p_3-x_3p_2$ 的变化率为

$$
\begin{aligned}
i\hbar\dot{m}_1 &= m_1H - Hm_1 \\
&= c\rho_1\{m_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) - (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})m_1\} \\
&= c\rho_1(\boldsymbol{\sigma}, m_1\mathbf{p} - \mathbf{p}m_1) \\
&= i\hbar c\rho_1\{\sigma_2p_3 - \sigma_3p_2\}.
\end{aligned}
$$

因此 $\dot{m}_1 \neq 0$,卽軌道角动量不是运动恆量．这个結果可以从积分后的运动方程(29)預料到，这里出現的运动的振蕩部分引起在角动量中有一个振蕩項.

我們进一步还有

$$
\begin{aligned}
i\hbar\dot{\sigma}_1 &= \sigma_1H - H\sigma_1 \\
&= c\rho_1\{\sigma_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) - (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})\sigma_1\} \\
&= c\rho_1(\sigma_1\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}\sigma_1, \mathbf{p}) \\
&= 2ic\rho_1\{\sigma_3p_2 - \sigma_2p_3\},
\end{aligned}
$$

这里用了 §37 的方程(51)．因而

$$\dot{m}_1 + \frac{1}{2}\hbar\dot{\sigma}_1 = 0,$$

所以,矢量 $\mathbf{m} + \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$ 是运动恆量． 我們可以把这个結果解释为电子有一个自旋角动量 $\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$，一定要把它加在軌道角动量 $\mathbf{m}$ 上，才能得到一个运动恆量． 另一方面，自旋角动量也可以按照 §35 的普遍方法从自旋态的旋轉运算得出.

同一矢量 $\boldsymbol{\sigma}$ 决定了自旋磁矩与自旋角动量两者的方向．如果一个电子在某自旋态在一个特定方向上有自旋角动量 $\frac{1}{2}\hbar$,則它在同样方向上有自旋磁矩 $-e\hbar/2mc$.

我們用一个只是依賴于量子理論及相对論的一般原理的推理,就可得到电子的自旋値为 $\frac{1}{2}\hbar$. 我們可以把同样推理应用到其他种类的基本粒子,可以得到同样的結論,卽自旋角动量是半个量子．对于質子与中子,这一点是滿意的,但是也有某些种类的基本粒子(例如光子及某种介子)，已从实驗上得知它們的自旋与 $\frac{1}{2}\hbar$

不同，这样，在理論与实驗之間还有分歧.

回答要从我們工作中隐藏着的假定里去寻找. 只有在假定了粒子的位置是可观察量的情况下，我們的推理才是有效的. 如果这个假定成立，粒子一定有自旋角动量为半个量子. 对于有不同自旋的那些粒子，这个假定可能不成立，而引进来描述粒子位置的任意力学变量 x_1, x_2, x_3，按照我們的一般理論，不可能是可观察量. 对于这种粒子，沒有真正的薛定諤表象. 我們也許可以引入一个包含力学变量 x_1, x_2, x_3 的准波函数，但是它不会具有一个波函数的正确的物理解释——模量的平方应为几率密度. 对于这种粒子，仍然有动量表象，这对于实际目的已足够了.

§ 71. 过渡到极坐标变量

为进一步研究电子在有心力場中的运动[其哈密頓量为(38)式]，方便的办法是变换到极坐标，就象在 §38 对非相对論情况所作的一样. 我們可以象过去一样引入 r 与 p_r，但是，我們現在不能用軌道角动量 $\mathbf{m}$ 的絕对值 k($\mathbf{m}$ 不再是运动恆量)，而要用总角动量 $\mathbf{M}=\mathbf{m}+\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$ 的絕对值. 我們令

$$j^2\hbar^2 = M_1^2 + M_2^2 + M_3^2 + \frac{1}{4}\hbar^2. \tag{39}$$

m_3 的本征值是 $\hbar$ 的整数倍，$\frac{1}{2}\hbar\sigma_3$ 的本征值是 $\pm\frac{1}{2}\hbar$，因而 M_3 的本征值一定是 $\hbar$ 的半奇数倍. 从 §36 的理論得到，$|j|$ 的本征值一定是大于零的整数.

如果在公式(32)中，取 $\mathbf{B}=\mathbf{C}=\mathbf{m}$，我們就得到

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})^2 &= \mathbf{m}^2 + i(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}\times\mathbf{m})\\ &= \mathbf{m}^2 - \hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})\\ &= \left(\mathbf{m}+\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}\right)^2 - 2\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) - \frac{3}{4}\hbar^2,\end{aligned}$$

因而

$$\{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) + \hbar\}^2 = \mathbf{M}^2 + \frac{1}{4}\hbar^2.$$

所以，$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})+\hbar$ 是一个量，其平方为 $\mathbf{M}^2+\frac{1}{4}\hbar^2$，为与方程(39)相一致，我們可以定义 $j\hbar$ 为$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})+\hbar$. 但是这不是 j 的最方便的定义，因为我們希望 j 是一个运动恆量，而 $(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})+\hbar$ 不是恆量. 事实上，我們应用(32)式可得

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})=i(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}\times\mathbf{p}),$$

以及

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})=i(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}\times\mathbf{m}),$$

所以

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})&(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})+(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})=\\ &=i\sum_{123}\sigma_1\{m_2p_3-m_3p_2+p_2m_3-p_3m_2\}\\ &=i\sum_{123}\sigma_1\cdot 2i\hbar p_1=-2\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}),\end{aligned}$$

或即

$$\{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})+\hbar\}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})+(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})\{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})+\hbar\}=0.$$

因此，$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})+\hbar$ 与H的表达式(38)中的一項 $c\rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})$反对易，而与其它两項对易. 由此得出，$\rho_3\{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})+\hbar\}$ 与H中的所有三項都对易，是一个运动恆量. 而 $\rho_3\{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})+\hbar\}$的平方也是 $M^2+\frac{1}{4}\hbar^2$. 因而我們可以取

$$j\hbar=\rho_3\{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})+\hbar\}, \tag{40}$$

这就給我們一个方便合理的 j 的定义，它符合于(39)式，而且使 j 为运动恆量. 这个 j 的本征值全部是正的与負的整数，但不为零.

进一步应用(32)式，我們得

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})&=(\mathbf{x}, \mathbf{p})+i(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})\\ &=rp_r+i\rho_3 j\hbar-i\hbar,\end{aligned} \tag{41}$$

这里还用了(40)式与§38 的(58)式. 我們引入綫性算符 ϵ，其定义为

$$r\epsilon=\rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) \tag{42}$$

由于 r 与 ρ_1 和$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})$都对易，它一定也与 ϵ 对易. 因此我們有

$$r^2\epsilon^2=[\rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})]^2=(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})^2=\mathbf{x}^2=r^2,$$

或即

$$\epsilon^2 = 1.$$

既然 $\rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})$ 与 i 对易，又因就角动量而言，$\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{p}$ 之間有对称性，所以 $\rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})$也一定与 i 对易．因而 ϵ 也与 i 对易．还有，ϵ 一定与 p_r 对易，因为我們有

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})(\mathbf{x}, \mathbf{p}) - (\mathbf{x}, \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) = \\ = (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) - (\mathbf{x}, \mathbf{p})\mathbf{x}) = i\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}),$$

此式給出

$$r\epsilon r p_r - r p_r r \epsilon = i\hbar r\epsilon$$

或即

$$r^2\epsilon p_r - r^2 p_r \epsilon = 0.$$

从(41)式与(42)式，我們得到

$$r\epsilon\rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) = r p_r + i\rho_3 j\hbar - i\hbar$$

或

$$\rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) = \epsilon(p_r - i\hbar/r) + i\epsilon\rho_3 j\hbar/r.$$

因此，(38)式变成

$$H/c = -\frac{e}{c}A_0 + \epsilon(p_r - i\hbar/r) + i\epsilon\rho_3 j\hbar/r + \rho_3 mc.$$

这就把我們的哈密頓量用极坐标变量表示出来了．应当注意，ϵ 和 ρ_3 与所有在H中出現的其他变量对易，并互相反对易．这一点的意义是，我們可以取一个表象，使 ρ_3 为对角的，而在此表象中 ϵ 与 ρ_3 分别由下列矩陣表示：

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{43}$$

如果 r 在此表象中也是对角的，則一个右矢的表示式 $\langle r'\rho_3'|\rangle$ 有两个分量，即 $\langle r', 1|\rangle = \psi_a(r')$ 与 $\langle r', -1|\rangle = \psi_b(r')$，分别联系于(43)式矩陣的两个行与列．

§72. 氫原子能級的精細結构

現在我們取氫原子的情况(对氫原子，$A_0 = e/r$)，并求出它

的能級，即H的本征值H'.决定这些本征值的方程$(H'-H)|\rangle=0$，当用上面討論的表象[其中ϵ与ρ以矩陣(43)代表]中的表示式写出时，就有下列方程

$$\left(\frac{H'}{c}+\frac{e^2}{cr}\right)\psi_a+\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\psi_b+\frac{j\hbar}{r}\psi_b-mc\psi_a=0,$$

$$\left(\frac{H'}{c}+\frac{e^2}{cr}\right)\psi_b-\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\psi_a+\frac{j\hbar}{r}\psi_a+mc\psi_b=0.$$

如果我們令

$$\frac{\hbar}{mc-H'/c}=a_1,\ \frac{\hbar}{mc+H'/c}=a_2, \tag{44}$$

这些方程就簡化为

$$\left.\begin{aligned}\left(\frac{1}{a_1}-\frac{\alpha}{r}\right)\psi_a-\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{j+1}{r}\right)\psi_b=0,\\ \left(\frac{1}{a_2}+\frac{\alpha}{r}\right)\psi_b-\left(\frac{\partial}{\partial r}-\frac{j-1}{r}\right)\psi_a=0,\end{aligned}\right\} \tag{45}$$

其中 $\alpha=e^2/\hbar c$，它是一个小数. 我們現在来解这些方程，所用的方法与§39中解方程(73)所用的方法类似.

令

$$\psi_a=r^{-1}e^{-r/a}f,\ \psi_b=r^{-1}e^{-r/a}g, \tag{46}$$

这里引进r的两个新函数f与g，而

$$a=(a_1a_2)^{\frac{1}{2}}=\hbar(m^2c^2-H'^2/c^2)^{-\frac{1}{2}}. \tag{47}$$

方程(45)变成

$$\left.\begin{aligned}\left(\frac{1}{a_1}-\frac{\alpha}{r}\right)f-\left(\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{a}+\frac{j}{r}\right)g=0,\\ \left(\frac{1}{a_2}+\frac{\alpha}{r}\right)g-\left(\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{a}-\frac{j}{r}\right)f=0.\end{aligned}\right\} \tag{48}$$

現在，我們取一个試解，其中f与g都是冪級数的形式：

$$f=\sum_s c_s r^s,\quad g=\sum_s c'_s r^s, \tag{49}$$

其中相継的s的值相差为1，虽然这些值不必要是整数. 把f与g的这些表达式代入(48)式，并取出r^{s-1}的系数，我們得到

$$\left.\begin{aligned} c_{s-1}/a_1 - \alpha c_s - (s+j)c'_s + c'_{s-1}/a = 0, \\ c'_{s-1}/a_2 + \alpha c'_s - (s-j)c_s + c_{s-1}/a = 0. \end{aligned}\right\} \tag{50}$$

把上面两个方程中的第一个乘以 a，第二个乘以 a_2，然后相减，我們就消去了 c_{s-1} 及 c'_{s-1}，因为从(47)式得知 $a/a_1 = a_2/a$. 我們剩下的是

$$[a\alpha - a_2(s-j)]c_s + [a_2\alpha + a(s+j)]c'_s = 0, \tag{51}$$

这个关系表明了有撇的 c 与沒有撇的 c 之間的联系.

在 $r = 0$ 处的边界条件要求，当 $r \to 0$ 时 $r\psi_a$ 与 $r\psi_b \to 0$，所以，从(46)式知，当 $r \to 0$ 时 f 与 $g \to 0$. 因此，(49)式的級数一定在 s 小的一边有結束. 如果 s_0 是 c_s 与 $c_{s'}$ 不全为零的 s 的最小值，我們令 $s = s_0$ 与 $c_{s_0-1} = c'_{s_0-1} = 0$，就从(50)式得到

$$\left.\begin{aligned} \alpha c_{s_0} + (s_0 + j)c'_{s_0} = 0, \\ \alpha c'_{s_0} - (s_0 - j)c_{s_0} = 0, \end{aligned}\right\} \tag{52}$$

这就給出

$$\alpha^2 = -s_0^2 + j^2.$$

由于边界条件要求 s 的最小值应当大于零，我們必須取

$$s_0 = +\sqrt{(j^2 - \alpha^2)}.$$

为了考察級数(49)式的收斂性，我們来决定当 s 值大时的比 c_s/c_{s-1}. 当 s 是大数时，方程(51)及方程(50)中的第二式近似地給出

$$a_2 c_s = a c'_s,$$

及

$$s c_s = c_{s-1}/a + c'_{s-1}/a_2.$$

因而

$$c_s/c_{s-1} = 2/as.$$

因此級数(49)式象級数

$$\sum_s \frac{1}{s!}\left(\frac{2r}{a}\right)^s$$

或即 $e^{2r/a}$ 一样地收斂. 这个結果与在 §39 所得的結果相似，它允許我們断言，象在 §39 中一样，使 a 为純虛数，也即是按(47)式使 $H' > mc^2$ 的所有 H' 值都是允許的，而对 $H' < mc^2$，我們取 a 为正数，然后发現，只有使級数(49)式在 s 大的一边有結束的那些 H' 的

值，才是允許的.

如果級数(49)終止于 c_s 与 c_s' 項，因而 $c_{s+1}=c_{s+1}'=0$，則我們从(50)式用 $s+1$ 作为 s 代入，可得

$$\left.\begin{aligned} c_s/a_1 + c_s'/a = 0, \\ c_s'/a_2 + c_s/a = 0. \end{aligned}\right\} \qquad (53)$$

由于(47)式，这两个方程是等效的. 它們在与(51)式合并后給出

$$a_1[a\alpha - a_2(s-j)] = a[a_2\alpha + a(s+j)],$$

此式化簡为

$$2a_1a_2s = a(a_1 - a_2)\alpha,$$

或者是

$$\frac{s}{a} = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{a_2} - \frac{1}{a_1}\right)\alpha = \frac{H'}{c\hbar}\alpha,$$

这里用了(44)式. 把它平方，并用(47)式，我們得

$$s^2(m^2c^2 - H'^2/c^2) = \alpha^2H'^2/c^2,$$

因之

$$\frac{H'}{mc^2} = \left(1 + \frac{\alpha^2}{s^2}\right)^{-\frac{1}{2}}.$$

这里的 s 标明級数的最后一項，一定比 s_0 大，其差为某个不小于零的整数. 令这个整数为 n，我們就有

$$s = n + \sqrt{j^2 - \alpha^2},$$

因而

$$\frac{H'}{mc^2} = \left\{1 + \frac{\alpha^2}{\{n + \sqrt{j^2-\alpha^2}\}^2}\right\}^{-\frac{1}{2}}. \qquad (54)$$

这个公式給出氫原子能譜的分立能級，是由索末菲用玻尔軌道理論首先得出的. 这里含有两个量子数 n 与 j，但是，因为 α^2 是非常小的量，能量几乎完全决定于 $n+|j|$. 給出同样的 $n+|j|$ 的各組 n 与 $|j|$ 的值引起一組彼此非常靠近的能級，并且靠近 §39 的非相对論公式(80)取 $s = n + |j|$ 所得出的能級，只是相差一个常数項 mc^2.

我們曾用过方程(53)，是把它們与(51)式合并，但是这样做还沒有充分利用(53)式，因为在(51)式中 c_s 与 c_s' 的系数可以都为

零. 在这种情况下，我們用 a_1 乘第一个系数，用 a 乘第二个系数，相加后得

$$a(a_1 + a_2)\alpha + 2a_1a_2j = 0.$$

因此，在这种情况下，j 一定是負数. 借助于(44)式与(47)式，我們进一步得到

$$-\frac{2j}{a} = \frac{a}{a_2} + \frac{a}{a_1} = \frac{2mca}{\hbar} = \frac{2mc}{(m^2c^2 - H'^2/c^2)^{\frac{1}{2}}},$$

或即

$$\frac{H'^2}{m^2c^4} = 1 - \frac{\alpha^2}{j^2}.$$

由于 H' 一定是正数，这就得到

$$\frac{H'}{mc^2} = \frac{\sqrt{j^2 - \alpha^2}}{|j|}, \tag{55}$$

这就是 $n = 0$ 时(54)式所給出的 H' 值. $n = 0$ 而 j 为負数的情况因而需要进一步考察，需要看一看这时条件(53)式是否满足.

在 $n = 0$ 时，s 的最大值与最小值相同，所以，方程(53)中以 s_0 代替 s 后应該与(52)式一致. 現在，利用(44)式与(47)式，(55)式給出

$$\frac{1}{a_1} = \frac{mc}{\hbar}\left(1 - \frac{\sqrt{j^2 - \alpha^2}}{|j|}\right), \quad \frac{1}{a} = \frac{mc}{\hbar}\frac{\alpha}{|j|},$$

所以，方程(53)的第一式以 s_0 代替 s 后就給出

$$c_{s_0}\{|j| - \sqrt{j^2 - \alpha^2}\} + c'_{s_0}\alpha = 0.$$

只当 j 是正数时，上式与方程(52)的第二式相符合. 我們可以作出結論如下：$n = 0$ 时，j 一定是一个正整数，而当 n 为其他值时，j 可以为所有的非零的整数值.

§ 73. 正电子理論

在 §67 中已經講过，电子的波动方程允許的解的数目是它应有的解的两倍，这些解的一半联系于动能 $cp_0 + eA_0$ 为負值的态. 一旦我們从方程(5)轉到方程(6)时，就会产生这个困难. 在任何相对論理論中，这个困难是固有的. 在經典相对論理論中也出現

这个困难,但是这并不严重,其原因是：由于所有經典力学变量的变化是連續的，如果动能 $cp_0 + eA_0$ 原来是正的（它一定大于或等于 mc^2），它后来就不能为負的（小于或等于 $-mc^2$）. 但是,在量子理論中,不連續的跃迁可能出現,所以，如果开始时电子处于动能为正的态,它可以作一跃迁而跳到动能为負的态. 因此,不能再象在經典理論中一样,簡单地忽視負能态.

我們更仔細地来考察下列方程的負能解:

$$\left\{\left(p_0+\frac{e}{c}A_0\right)-\alpha_1\left(p_1+\frac{e}{c}A_1\right)-\right.$$

$$\left.-\alpha_2\left(p_2+\frac{e}{c}A_2\right)-\alpha_3\left(p_3+\frac{e}{c}A_3\right)-\alpha_m mc\right\}\psi=0. \quad (56)$$

为了这个目的,方便的是采用 α 的一个表象，其中所有代表 α_1, α_2 与 α_3 的矩陣元都是实的，而所有代表 α_m 的矩陣元是純虛的或零. 这样的表象是可以得到的，例如，从 §67 的表象交换(9)式中 α_2 与 α_m 的表达式就可得到. 如果方程(56)表示为在此表象中的矩陣方程，并且我們在整个式中用 $-i$ 作为 i, 我們就得到［注意到(4)式中的 i］

$$\left\{\left(-p_0+\frac{e}{c}A_0\right)-\alpha_1\left(-p_1+\frac{e}{c}A_1\right)-\right.$$

$$\left.-\alpha_2\left(-p_2+\frac{e}{c}A_2\right)-\alpha_3\left(-p_3+\frac{e}{c}A_3\right)+\alpha_m mc\right\}\bar{\psi}=0. \quad (57)$$

因此，波动方程(56)的每个解 ψ 的共軛复量 $\bar{\psi}$ 是波动方程(57)的一个解. 还有，如果(56)式的解 ψ 属于 $cp_0 + eA_0$ 的負值,則相应的(57)式的解 $\bar{\psi}$ 将属于 $cp_0 - eA_0$ 的正值. 但是,在(57)式中的算符恰恰就是把(56)式的算符中的 e 代以 $-e$ 而得到的. 由此得出,(56)式的每个負能解,是(56)式中以 $-e$ 代 e 而得的波动方程的正能解的共軛复量，这个解代表在已知电磁場中运动的带电荷为 $+e$ 的电子（不是 $-e$，象至今为止所用的那样）. 因此,(56)式中不希望要的解是联系于带电荷为 $+e$ 的电子的运动的（当然,对一个任意的电磁場,不可能把(56)式的解明确地分为联系于 cp_0+

eA_0 的正值的那些解与联系于 $cp_0 + eA_0$ 的負值的那些解. 因为这样的划分意味着从一种解到另一种解的跃迁不出現. 因此，上述討論仅是一个粗略的討論，只有当这样的划分近似地可能时这个討論才是适用的).

我們按此方法推导而得到的(56)式的負能解，联系于一种新的粒子的运动,这种粒子的質量等于电子的質量,电荷符号与电子相反. 这样的粒子在实驗上已經观察到,称为正电子. 但是,我們不能簡单地説,負能解代表正电子,因为这样説会使力学关系全都不对了. 例如,説一个正电子有負的动能,肯定是不对的. 因而我們必須在多少不同的立足点上建立正电子的理論. 我們假定，几乎所有的負能态都被占据,按照泡利不相容原理,每个态上有一个电子. 一个未被占据的負能态現在就会表現为有正能量的某种事物,因为要使它消失,即要把它填充起来，我們必須对它加上一个有負能的电子. 我們假定,这些未被占据的負能态是正电子.

这些假定要求，在世界上各处都有一密度为无限大的电子分布. 完全真空是这样一个区域,所有的那些正能态都未被占据,所有的那些負能态都被占据了. 在完全真空中,麦克斯韦方程

$$\operatorname{div}\mathscr{E} = 0$$

当然必須是成立的. 这一点的意义是，負能电子的无限分布对电場沒有貢献. 只有在真空中对这种分布的偏离，才对麦克斯韦方程中的电密度 j_0 有貢献,即

$$\operatorname{div}\mathscr{E} = 4\pi j_0. \tag{58}$$

因此,对每个被占据的正能态,就有一个貢献为 $-e$,而对每个未被占据的負能态,就有一个貢献为 $+e$.

不相容原理的作用使一个正能电子不能象通常一样跃迁到負能态. 但是，这样的一个电子落到未被占据的負能态，还是可能的. 在这种情况下,我們应当有一个电子与一个正电子同时消失,它們的能量以輻射形式放出来. 其逆过程就是从电磁輻射产生一个电子与一个正电子.

从 §65 末尾所討論的被占据的与未被占据的費米子态間的对

称性可得，我們現在的理論在电子与正电子之間基本上是对称的。如果我們假定正电子为基本的粒子，用形如(11)式的波动方程以$-e$代e来描述它，然后还假定，几乎所有的正电子的負能态全都填滿，則在負能正电子的分布中的一个空穴就可解释为一个普通的电子；在这样的假定下，我們应当有一个等效的理論．理論可以在下列假設之下协調地发展起来，卽物理規律在正負电荷之間是对称的。

第十二章　量子电动力学

§ 74. 沒有物质的电磁場

第十章所建立的輻射理論，在处理輻射与物质的相互作用时包含着某种近似. 本章的目的在于去掉这些近似，尽可能地得到关于电磁場与物质相互作用的精确理論，所受到的限制是物质只包括电子与正电子. 关于其他形式的物质,质子、中子等，我們所知道的太少了，以致現在还不能得到关于它們与电磁場相互作用的精确理論. 然而,关于电子与正电子已有了一个精确的理論,如在上一章所講的，我們能够利用这个理論来建立关于电磁場与这种形式的物质間的相互作用的精确理論. 这个理論一定要带来电子与正电子彼此間通过庫仑力的相互作用以及它們与电磁輻射的相互作用，同时这个理論当然一定要符合于特殊相对論. 为了簡化起見,我們在这一章里取 $c = 1$.

首先，我們必須考虑沒有与物质相互作用的电磁場. 在 §63 中,我們首先建立了沒有与物质相互作用的輻射場的处理方法.在那里引进了力学变量来描述場,建立了它們的对易关系,并且找出了一个哈密頓量，它使这些力学变量正确地随时間而变化. 在这些工作中,沒有作任何近似. 因此,如果不是在所得的理論中有一个特点，即我們曾取标量势为零,那么,所得的理論就会是沒有与物质相互作用的輻射的一个令人滿意的精确理論. 但上述特点破坏了理論的相对論形式，使它不适宜于作为一个用来发展与物质相互作用的电磁場的精确理論的出发点.

因此,我們来扩展 §63 的处理方法,办法是把 A_0 普遍化,并把它与其他的势 A_1, A_2, A_3 一齐放进我們的研究工作中. 这样，我們就有四个 A_μ,作为 §63 的(62)式的推广,它們滿足

$$\Box A_\mu = 0, \tag{1}$$

$$\partial A_\mu/\partial x_\mu = 0. \tag{2}$$

暫时我們不考虑这些方程中的第二个，而只从第一个开始工作.

方程(1)表明，每个 A_μ 能够分解为以光速前进的波. 因此，相当于§63的(63)式，有

$$A_\mu(x) = \int(A_{\mu\mathbf{k}}e^{ik\cdot x} + \bar{A}_{\mu\mathbf{k}}e^{-ik\cdot x})d^3k, \tag{3}$$

其中 $k\cdot x$ 代表四維的标量乘积

$$k\cdot x = k_0x_0 - (\mathbf{k}, \mathbf{x}),$$

k_ν 是四維矢量，它的空間分量与 §63 的三維矢量 $\mathbf{k}$ 的分量相同，而它的时間分量为 $k_0 = |\mathbf{k}|$，而 d^3k 代表 $dk_1dk_2dk_3$，就象在 §63 中一样.

傅里叶分量 $A_{\mu\mathbf{k}}$ 有一部分 $A_{0\mathbf{k}}$ 来自 $A_0(x)$，还有一部分是 $A_{r\mathbf{k}}$ $(r = 1, 2, 3)$，它是一个三維矢量. 后一部分 $A_{r\mathbf{k}}$ 能分解成两部分：一个在 $\mathbf{k}$ 方向即在波的运动方向的縱向部分，以及一个与 $\mathbf{k}$ 正交的横向部分. 縱向部分是 $k_rk_s/k_0^2\cdot A_{s\mathbf{k}}$. 横向部分为

$$(\delta_{rs} - k_rk_s/k_0^2)A_{s\mathbf{k}} = \mathscr{A}_{r\mathbf{k}}, \tag{4}$$

它滿足

$$k_r\mathscr{A}_{r\mathbf{k}} = 0. \tag{5}$$

从光的麦克斯韦理論得知，在給出电磁輻射方面，只有横向部分是有效的. 第十章所研究的就只是这个横向部分，§63 的 $A_{r\mathbf{k}}$ 与現在的 $\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}$ 相同，§63 的方程(65)相当于現在的方程(5). 虽然如此，在电动力学的完整理論中，縱向部分不能忽略，因为它与庫仑力有联系，这一点将在后面加以証明.

現在，我們可以把三維矢量 $A_r(x)$ 分解为两个部分：一个横向部分，它只有横向的傅里叶分量，和一个縱向部分，它只有縱向的傅里叶分量. 横向部分是

$$\mathscr{A}_r(x) = \int(\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}e^{ik\cdot x} + \bar{\mathscr{A}}_{r\mathbf{k}}e^{-ik\cdot x})d^3k,$$

并滿足

$$\partial\mathscr{A}_r(x)/\partial x_r = 0. \tag{6}$$

纵向部分可以表为一个标量 V 的陡度 $\partial V/\partial x_r$，V 由下式决定:

$$V = i\int k_s/k_0^2 \cdot (A_{s\mathbf{k}}e^{ik\cdot x} - \overline{A}_{s\mathbf{k}}e^{-ik\cdot x})d^3k. \tag{7}$$

因此

$$A_r = \mathscr{A}_r + \partial V/\partial x_r. \tag{8}$$

磁場决定于 A_r 的横向部分:

$$\mathscr{H} = \mathrm{curl}\mathbf{A} = \mathrm{curl}\mathscr{A}.$$

把 $A_0(x)$ 算作纵向部分是方便的，这样，完整的势 $A_\mu(x)$ 被分为一个横向部分 $\mathscr{A}_r(x)$ 和一个纵向部分 $A_0, \partial V/\partial x_r$. 当然，这个划分联系于一个特定的洛伦兹参考系，当我們要使我們的方程保持为相对論形式时，这个划分一定不能使用.

在(3)式中，每个傅里叶系数 $A_{\mu\mathbf{k}}$ 是与时間因子 $e^{ik_0x_0}$ 結合起来出現的. 乘积

$$A_{\mu\mathbf{k}}e^{ik_0x_0} = A_{\mu\mathbf{k}t} \tag{9}$$

在經典力学里組成一个哈密頓力学变量，而在量子力学里組成一个海森伯力学变量. 我們現在必須求得联系这些变量的泊松括号.

§63 的工作为我們給出了 $A_{\mu\mathbf{k}t}$ 的横向部分的泊松括号关系. 为了与那里的工作联系起来，我們轉向三維 $\mathbf{k}$ 空間的分立 $\mathbf{k}$ 値，并取例如一个特定的分立 $\mathbf{k}$ 値，其中 $k_1 = k_2 = 0$，$k_3 = k_4 > 0$. 这时，偏振变量 $\mathbf{l}$ 能取两个値，联系于两个方向 1 与 2，由 §63 的方程(73)，借助于 η 与 $\overline{\eta}$ 的对易关系，即§60的方程(11)，可得到

$$[\overline{A}_{1\mathbf{k}t}, A_{1\mathbf{k}t}] = [\overline{A}_{2\mathbf{k}t}, A_{2\mathbf{k}t}] = -is_{\mathbf{k}}/4\pi^2k_0. \tag{10}$$

§63 的工作沒有給出关于 $A_{3\mathbf{k}t}$ 与 $A_{0\mathbf{k}t}$ 的任何知識.

但是，現在我們能从相对論得出 $A_{3\mathbf{k}t}$ 与 $A_{0\mathbf{k}t}$ 的泊松括号关系. 必須建立一个包括方程(10)在內的相对論性的集合，这样做的唯一簡单方法是在(10)式上加上两个新的方程

$$[\overline{A}_{3\mathbf{k}t}, A_{3\mathbf{k}t}] = -[\overline{A}_{0\mathbf{k}t}, A_{0\mathbf{k}t}] = -is_{\mathbf{k}}/4\pi^2k_0, \tag{11}$$

这样，这四个方程即(10)式及(11)式再加上 $\overline{A}_{\mu\mathbf{k}t}$ 与 $A_{\nu\mathbf{k}t}$ 在 $\mu \neq \nu$ 时相互对易的条件(由于它們联系于不同的自由度，它們一定是这样)，就合并而成单一的张量方程

$$[\bar{A}_{\mu\mathbf{k}t},\ A_{\nu\mathbf{k}t}] = ig_{\mu\nu}s_{\mathbf{k}}/4\pi^2k_0. \tag{12}$$

这样，我們得到了所有力学变量的泊松括号关系．方程(12)能扩充为

$$[\bar{A}_{\mu\mathbf{k}t},\ A_{\nu\mathbf{k}'t}] = ig_{\mu\nu}s_{\mathbf{k}}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}/4\pi^2k_0. \tag{13}$$

現在，让我們回到連續的 $\mathbf{k}$ 值．为把 $\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ 轉换到連續 $\mathbf{k}$ 値，我們注意到，对一个在三維 $\mathbf{k}$ 空間的一般函数 $f(\mathbf{k})$，有

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = f(\mathbf{k}') = \int f(\mathbf{k})\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')d^3k, \tag{14}$$

其中 $\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ 是三維 δ 函数

$$\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') = \delta(k_1-k_1')\delta(k_2-k_2')\delta(k_3-k_3').$$

为了要使(14)式符合于联系求和与积分的标准公式，即 §62 的方程(52)，我們一定要有

$$s_{\mathbf{k}}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \tag{15}$$

因此，(13)式成为

$$[\bar{A}_{\mu\mathbf{k}t},\ A_{\nu\mathbf{k}'t}] = ig_{\mu\nu}/4\pi^2k_0\cdot\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'). \tag{16}$$

这个方程加上方程

$$[A_{\mu\mathbf{k}t},\ A_{\nu\mathbf{k}'t}] = [\bar{A}_{\mu\mathbf{k}t},\ \bar{A}_{\nu\mathbf{k}'t}] = 0, \tag{17}$$

就提供了有連續 $\mathbf{k}$ 値的理論中的泊松括号关系．应当指出，如果角标 t 从这些式子中略去，这些泊松括号关系仍然成立，所以它們也对常数的傅里叶系数 $\bar{A}_{\mu\mathbf{k}}$，$A_{\nu\mathbf{k}}$ 成立．

現在，我們必須求得一个哈密頓量，它使每个力学变量 $A_{\mu\mathbf{k}t}$ 在海森伯图象中随时間 $t=x_0$ 的变化，是按照规則(9)式进行的，而其中 $A_{\mu\mathbf{k}}$ 为恆量．称这个哈密頓量为 H_F，我們要求有

$$[A_{\mu\mathbf{k}t},\ H_F] = dA_{\mu\mathbf{k}t}/dx_0 = ik_0A_{\mu\mathbf{k}t}. \tag{18}$$

容易看出，下面的 H_F 满足此式

$$H_F = -4\pi^2\int k_0^2A_{\mu\mathbf{k}t}\bar{A}^{\mu}_{\mathbf{k}t}d^3k. \tag{19}$$

因此，我們取(19)式(或者可能加上一个不含任何力学变量的任意数值項)作为沒有物質的电磁場的哈密頓量．

在 §63 中我們曾利用关于哈密頓量的横向部分的知識，求得横向变量的泊松括号．現在我們对縱向变量运用了相反的手續，

利用了我們有关泊松括号的知識(这是从相对論推理而得的)，找出了哈密頓量中与纵向变量有关的部分，使得能与(18)式一致.

如果我們写出哈密頓量(19)式，它成为

$$H_F = 4\pi^2\int k_0^2(A_{1\mathbf{k}t}\bar{A}_{1\mathbf{k}t} + A_{2\mathbf{k}t}\bar{A}_{2\mathbf{k}t} + A_{3\mathbf{k}t}\bar{\mathbf{A}}_{3\mathbf{k}t} - A_{0\mathbf{k}t}\bar{A}_{0\mathbf{k}t})d^3k.$$

这里，被积函数中的前三項有一横向部分，它恰等于 §63 (71)式所給出的横向能量. 被积函数的最后一項带有負号，它是 H_F 中与标量势 A_0 相关的部分. 这个負号是相对論所要求的，它的意思是由变量 $A_{0\mathbf{k}t}$, $\bar{A}_{0\mathbf{k}t}$ 所組成的力学系統是具有負能量的諧振子. 令人相当惊奇的是，象負能量这样的沒有物理意义的观念竟在理論中以这种方式出現. 在 §77 中我們将看到，伴随着与 A_0 有关的自由度的負能量，总是被伴随着另一纵向自由度的正能量所补償；所以，負能量在实际上从不表現出来.

§ 75. 量子条件的相对論形式

上节的理論有相对論的場方程，也即是方程(1). 为了确定理論是完全相对論性的，我們必須进一步証明，这些泊松括号关系是相对論性的. 这一点完全不是从(16)式就可以一目了然的，在(16)式中它們是以傅里叶分量写出的. 我們去求这些泊松括号的一个相对論性的形式，办法是：对时空中的两个任意点 x 与 x'，求出$[A_\mu(x), A_\nu(x')]$. 但是，我們必須先研究存在于时空中的某个不变的奇异函数.

函数 $\delta(x_\mu x^\mu)$ 显然是洛伦兹不变的. 除了在以原点为頂点的光錐上(即在三維空間 $x_\mu x^\mu = 0$ 中)以外，它到处都为零. 这个光錐包括两个有明显区别的部分：一个将来部分即 $x_0 > 0$，一个过去部分，即 $x_0 < 0$. 另一个函数，在光錐的将来部分等于 $\delta(x_\mu x^\mu)$，在光錐的过去部分等于$-\delta(x_\mu x^\mu)$，也是洛伦兹不变的. 这个函数等于 $\delta(x_\mu x^\mu)x_0/|x_0|$，在場的动力学理論中起重要的作用，所以，我們給它一个特殊符号. 我們定义

$$\Delta(x) = 2\delta(x_\mu x^\mu)x_0/|x_0|. \tag{20}$$

这个定义給出了Δ函数作用于任意四維矢量的意义. 借助于§15的(9)式,我們可以把$\delta(x_\mu x^\mu)$表示为

$$\delta(x_\mu x^\mu)=\frac{1}{2}|\mathbf{x}|^{-1}\{\delta(x_0-|\mathbf{x}|)+\delta(x_0+|\mathbf{x}|)\}, \quad (21)$$

$|\mathbf{x}|$是x_μ的三維部分的长度,这样,$\Delta(x)$为

$$\Delta(x)=|\mathbf{x}|^{-1}\{\delta(x_0-|\mathbf{x}|)-\delta(x_0+|\mathbf{x}|)\}. \quad (22)$$

$\Delta(x)$在原点之値定义为零,并且显然有$\Delta(-x)=-\Delta(x)$.

让我們作出$\Delta(x)$的傅里叶分析. 用d^4x代表$dx_0dx_1dx_2dx_3$,用d^3x代表$dx_1dx_2dx_3$,我們对任意四維矢量k_μ,有

$$\int\Delta(x)e^{ik\cdot x}d^4x=\int|\mathbf{x}|^{-1}\{\delta(x_0-|\mathbf{x}|)-\delta(x_0+|\mathbf{x}|)\}e^{i[k_0x_0-(\mathbf{kx})]}d^4x$$

$$=\int|\mathbf{x}|^{-1}\{e^{ik_0|\mathbf{x}|}-e^{-ik_0|\mathbf{x}|}\}e^{-i(\mathbf{kx})}d^3x.$$

在三維$x_1x_2x_3$空間引进极坐标$|\mathbf{x}|$, θ, ϕ, 以k_μ的三維部分的方向为极軸,我們得到

$$\begin{aligned}\int\Delta(x)e^{ik\cdot x}d^4x&=\iiint\{e^{ik_0|\mathbf{x}|}-e^{-ik_0|\mathbf{x}|}\}e^{-i|\mathbf{k}||\mathbf{x}|\cos\theta}|\mathbf{x}|\sin\theta d\theta d\phi d|\mathbf{x}|\\&=2\pi\int_0^\infty\{e^{ik_0|\mathbf{x}|}-e^{-ik_0|\mathbf{x}|}\}d|\mathbf{x}|\int_0^\pi e^{-i|\mathbf{k}||\mathbf{x}|\cos\theta}|\mathbf{x}|\sin\theta d\theta\\&=2\pi i|\mathbf{k}|^{-1}\int_0^\infty\{e^{ik_0|\mathbf{x}|}-e^{-ik_0|\mathbf{x}|}\}d|\mathbf{x}|\{e^{-i|\mathbf{k}||\mathbf{x}|}-e^{i|\mathbf{k}||\mathbf{x}|}\}\\&=2\pi i|\mathbf{k}|^{-1}\int_{-\infty}^{+\infty}\{e^{i(k_0-|\mathbf{k}|)a}-e^{i(k_0+|\mathbf{k}|)a}\}da\\&=4\pi^2i|\mathbf{k}|^{-1}\{\delta(k_0-|\mathbf{k}|)-\delta(k_0+|\mathbf{k}|)\}\\&=4\pi^2i\Delta(k).\end{aligned} \quad (23)$$

因此,由傅里叶分析又得到同样的函数,带上系数$4\pi^2i$。 交换(23)式中的k与x, 我們得

$$\Delta(x)=-i/4\pi^2\cdot\int\Delta(k)e^{ik\cdot x}d^4k. \quad (24)$$

从$\Delta(x)$的傅里叶分解能够容易地推导出$\Delta(x)$的某些重要性质. 首先,方程(24)表明,$\Delta(x)$能分解为一些波,它們全以光速前进. 为了得到这个結果的方程,我們把算符$\Box$作用于(24)式的两边,这样就有

$$\Box\Delta(x) = -i/4\pi^2 \cdot \int \Delta(k)\Box e^{ik\cdot x}d^4x =$$
$$= i/4\pi^2 \cdot \int k_\mu k^\mu \Delta(k) e^{ik\cdot x}d^4k.$$

既然 $k_\mu k^\mu \Delta(k) = 0$,因而

$$\Box\Delta(x) = 0. \tag{25}$$

这个方程在整个时空中成立. 我們能給出 $\Delta(x)$ 为奇异的一点上的 $\Box\Delta(x)$ 的意义,办法是取 $\Box\Delta(x)$ 在围繞这一点的一个小的四維空間范围內的积分,并用高斯定理把此积分变换成三維面积分. 方程(25)告訴我們,这个三維面积分总为零.

在三維面 $x_0 = 0$ 上所有各点, 函数 $\Delta(x)$ 都为零. 我們来决定在此面上的 $\partial\Delta(x)/\partial x_0$ 值. 除了在 $x_1 = x_2 = x_3 = 0$ 这一点以外,此値显然到处为零,在 $x_1 = x_2 = x_3 = 0$ 的这一点上, 它有一个奇异点, 在这点的情况可以計算如下. 将(24)式的两边对 x_0 微分,我們得到

$$\partial\Delta(x)/\partial x_0 = \frac{1}{4\pi^2}\int k_0\Delta(k)e^{ik\cdot x}d^4k$$
$$= 1/4\pi^2 \cdot \int k_0|\mathbf{k}|^{-1}\{\delta(k_0 - |\mathbf{k}|) - \delta(k_0 + |\mathbf{k}|)\}e^{ik\cdot x}d^4k$$
$$= 1/4\pi^2 \cdot \int\{\delta(k_0 - |\mathbf{k}|) + \delta(k_0 + |\mathbf{k}|)\}e^{ik\cdot x}d^4k.$$

令两边 $x_0 = 0$, 我們就得到

$$[\partial\Delta(x)/\partial x_0]_{x_0=0} = 1/4\pi^2 \cdot \int\{\delta(k_0 - |\mathbf{k}|) + \delta(k_0 + |\mathbf{k}|)\}e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x})}d^4k$$
$$= 1/2\pi^2 \cdot \int e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x})}d^3k$$
$$= 4\pi\delta(x_1)\delta(x_2)\delta(x_3) = 4\pi\delta(\mathbf{x}). \tag{26}$$

因此,出現于 $x_1 = x_2 = x_3 = 0$ 这一点的是通常的 δ 奇异点, 并带有系数 4π.

現在我們来計算$[A_\mu(x), A_\nu(x')]$. 从(3)、(16)与(17)式, 我們有

$$[A_\mu(x), A_\nu(x')]$$
$$= \iint[A_{\mu\mathbf{k}}e^{ik\cdot x} + \bar{A}_{\mu\mathbf{k}}e^{-ik\cdot x}, A_{\nu\mathbf{k}'}e^{ik'\cdot x'} + \bar{A}_{\nu\mathbf{k}'}e^{-ik'\cdot x'}]d^3kd^3k'$$

$$= ig_{\mu\nu}/4\pi^2 \cdot \iint k_0^{-1}\{e^{-ik\cdot x}e^{ik'\cdot x'} - e^{ik\cdot x}e^{-ik'\cdot x'}\}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')d^3k d^3k'$$

$$= ig_{\mu\nu}/4\pi^2 \cdot \int k_0^{-1}\{e^{-ik\cdot(x-x')} - e^{ik\cdot(x-x')}\}d^3k. \tag{27}$$

这里 k_0 定义为等于$|\mathbf{k}|$，因此总是正的．用$-\mathbf{k}$代替被积函数中第二部分的$\mathbf{k}$,我們发現,(27)式等于四維积分

$$ig_{\mu\nu}/4\pi^2 \cdot \int |\mathbf{k}|^{-1}\{\delta(k_0 - |\mathbf{k}|) - \delta(k_0 + |\mathbf{k}|)\}e^{-ik\cdot(x-x')}d^4k$$

$$= ig_{\mu\nu}/4\pi^2 \cdot \int \Delta(k)e^{-ik(x-x')}d^4k,$$

在此式中 k_0 取所有的值,包括正的及負的. 借助于(24)式計算出此式,我們最終得到

$$[A_\mu(x), A_\nu(x')] = g_{\mu\nu}\Delta(x-x'), \tag{28}$$

这个結果表明,泊松括号关系在洛伦兹变換中是不变的.

公式(28)的意义是,在时空中两点上的势总是对易的,除非联結这两点的綫是零綫(即光綫的軌迹). 此公式与場方程 $\Box A_\mu(x) = 0$ 是相容的,因为由(25)式知,$\Box$作用于(28)式的右边为零.

§76. 薛定諤力学变量

为建立量子場論的洛伦兹不变性，海森伯图象是比較适合的图象．它也是我們在上两节所用的图象．但是我們仍然需要薛定諤图象去計算特殊的例子．薛定諤形式的理論在表現形式上远不是相对論性的,因为它研究在一个时刻的态,并且討論这个态如何随时間变化,所以,它在基本方法上是联系于一个特定的洛伦兹参考系的．但是,我們旣然已經检驗了海森伯形式,并得知理論是相对論性的；我們就不要因薛定諤形式的非相对論性的表現形式而煩恼,因为我們知道这两种形式是等效的.

为了用薛定諤形式工作，我們必須用适当的力学变量来描述在某一时刻的場.在已知的x_0对所有 x_1, x_2, x_3 的 $A_\mu(x)$, $\partial A_\mu/\partial x_0$ 两个量,就足以从場方程(1)决定在全部时間的 A_μ，所以,这些量可以取为在某一时刻的力学变量，因而是薛定諤图象中的力学变

量. 让我們令

$$B_\mu = \partial A_\mu / \partial x_0. \tag{29}$$

这时,我們有 $A_{\mu\mathbf{x}}$, $B_{\mu\mathbf{x}}$ ($\mathbf{x}$ 代表 x_1, x_2, x_3) 作为薛定諤力学变量.

这些变量的傅里叶分解,从(3)式与(9)式得出为

$$\left.\begin{aligned} A_{\mu\mathbf{x}} &= \int (A_{\mu\mathbf{k}t} + \overline{A}_{\mu-\mathbf{k}t}) e^{-i(\mathbf{kx})} d^3k, \\ B_{\mu\mathbf{x}} &= i \int k_0 (A_{\mu\mathbf{k}t} - \overline{A}_{\mu-\mathbf{k}t}) e^{-i(\mathbf{kx})} d^3k. \end{aligned}\right\} \tag{30}$$

我們可用逆傅里叶变换把 $(A_{\mu\mathbf{k}t} + \overline{A}_{\mu-\mathbf{k}t})$ 与 $(A_{\mu\mathbf{k}t} - \overline{A}_{\mu-\mathbf{k}t})$ 分別用 $A_{\mu\mathbf{x}}$ 与 $B_{\mu\mathbf{x}}$ 表出. 因此 $A_{\mu\mathbf{k}t}$ 与 $\overline{A}_{\mu\mathbf{k}t}$ 决定于所有点 $\mathbf{x}$ (在已知 x_0) 的 $A_{\mu\mathbf{x}}$、$B_{\mu\mathbf{x}}$, 因而 $A_{\mu\mathbf{k}t}$, $\overline{A}_{\mu\mathbf{k}t}$ 也能被取为在某一时刻的力学变量,能够用来提供另一套薛定諤力学变量.

如果我們用变量 $A_{\mu\mathbf{x}}$, $B_{\mu\mathbf{x}}$ 进行研究, 我們需要知道它們的泊松括号关系. 从傅里叶展开(30)加上(16)与(17)式, 或者从一般的泊松括号关系(28), 我們都可以求得这些泊松括号关系. 后一方法給出所需要的結果更快. 在(28)式中令 $x_0' = x_0$, 我們得

$$[A_{\mu\mathbf{x}}, A_{\nu\mathbf{x}'}] = 0. \tag{31}$$

把(28)式对 x_0 微分,然后令 $x_0' = x_0$,借助于(26)式,我們得到

$$[B_{\mu\mathbf{x}}, A_{\nu\mathbf{x}'}] = 4\pi g_{\mu\nu} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \tag{32}$$

把(28)式对 x_0 与 x_0' 两者进行微分,然后令 $x_0' = x_0$, 我們得到

$$[B_{\mu\mathbf{x}}, B_{\nu\mathbf{x}'}] = 0, \tag{33}$$

这是因为 $x_0 = 0$ 时, $\partial^2 \Delta(x)/\partial x^2 = 0$. 方程(31),(32)与(33)給出变量 $A_{\mu\mathbf{x}}$, $B_{\mu\mathbf{x}}$ 之間的全部泊松括号关系. 它們表明, 除了数字系数而外, $A_{\mu\mathbf{x}}$ 可以看成是一組力学坐标,而 $B_{\mu\mathbf{x}}$ 可以看成是它們的共軛动量,(32)式右边有一个 δ 函数,而不是一个有两个角标的 δ 符号,因为自由度数目是一个連續的无穷大.

我們可以把 $A_{r\mathbf{x}}$ 分解为一个横向部分与一个縱向部分, 这一点已由方程(8)与(6)表明. 对 $B_{r\mathbf{x}}$ 我們也能同样做,而得到

$$B_r = \mathscr{B}_r + \partial U / \partial x_r \tag{34}$$

而

$$\partial \mathscr{B}_r / \partial x_r = 0. \tag{35}$$

从(7)式，在被积函数的第二项中以 $-\mathbf{k}$ 代替 $\mathbf{k}$，就得到

$$V = i\int k_s k_0^{-2}(A_{s\mathbf{k}t} + \bar{A}_{s-\mathbf{k}t})e^{-i(\mathbf{kx})}d^3k. \tag{36}$$

由于 $U = \partial V/\partial x_0$，对 U 的相应方程是

$$U = -\int k_s k_0^{-1}(A_{s\mathbf{k}t} - \bar{A}_{s-\mathbf{k}t})e^{-i(\mathbf{kx})}d^3k. \tag{37}$$

电場由下式給出：

$$\mathscr{E}_r = -B_r - \frac{\partial A_0}{\partial x_r} = -\mathscr{B}_r - \frac{\partial(A_0 + U)}{\partial x_r}. \tag{38}$$

因此

$$\operatorname{div}\mathscr{E} = -\frac{\partial B_r}{\partial x_r} - \nabla^2 A_0 = -\nabla^2(A_0 + U). \tag{39}$$

显然，任意縱向变量与任意横向变量对易. 現在，可以求出某些有用的泊松括号关系了. 对任意場函数 $f_{\mathbf{x}}$，我們將使用下列符号：

$$\frac{\partial f_{\mathbf{x}}}{\partial x_r} = f_{\mathbf{x}}^r, \quad \frac{\partial f_{\mathbf{x}'}}{\partial x_r'} = f_{\mathbf{x}'}^{r'}. \tag{40}$$

如果在(32)式中我們令 $\mu = r$, $\nu = s$，并且把这个方程对 x_r 微分，我們得到

$$[B_{r\mathbf{x}}^r, A_{s\mathbf{x}'}] = 4\pi g_{rs}\delta^r(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -4\pi\delta^s(\mathbf{x} - \mathbf{x}'),$$

或者从(39)式得

$$[\operatorname{div}\mathscr{E}_{\mathbf{x}}, A_{s\mathbf{x}'}] = 4\pi\delta^s(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \tag{41}$$

既然(39)式表明，$\operatorname{div}\mathscr{E}$ 是只包含縱向变量的函数，所以，(41)式給出

$$[\operatorname{div}\mathscr{E}_{\mathbf{x}}, V_{\mathbf{x}'}^{s'}] = 4\pi\delta^s(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -4\pi\delta^{s'}(\mathbf{x} - \mathbf{x}').$$

对 x_s' 进行积分，我們得到

$$[\operatorname{div}\mathscr{E}_{\mathbf{x}}, V_{\mathbf{x}'}] = -4\pi\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \tag{42}$$

这里沒有积分常数，因为場函数 $\mathscr{E}_{\mathbf{x}}$ 与 $V_{\mathbf{x}}$ 是由波长不为零的波組成的. 从(42)式与(39)式得

$$\nabla^2[U_{\mathbf{x}}, V_{\mathbf{x}'}] = 4\pi\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}').$$

借助于 §38 的公式(72)进行积分，我們得到

$$[U_{\mathbf{x}}, V_{\mathbf{x}'}] = -|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-1}, \tag{43}$$

这里右边沒有积分常数,也沒有其他在无穷远处不为零的項,因为 $U_{\mathbf{x}}$ 与 $V_{\mathbf{x}}$ 是由波长不为零的波組成的. 从(38)式与(43)式，我們得到

$$[\mathscr{E}_{r\mathbf{x}}, V_{\mathbf{x}'}] = -[U_{\mathbf{x}}^{r}, V_{\mathbf{x}'}] = -(x_r - x_r')|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|^{-3}. \quad (44)$$

我們現在来求以变量 $A_{\mu\mathbf{x}}$ 与 $B_{\mu\mathbf{x}}$ 表示的哈密頓量. 从方程(30)的第二式,我們有

$$\int B_{\mu\mathbf{x}} B_{\mathbf{x}}^{\mu} d^3x$$

$$= -\iiint k_0 k_0' (A_{\mu\mathbf{k}t} - \overline{A}_{\mu-\mathbf{k}t})(A_{\mathbf{k}'t}^{\mu} - \overline{A}_{-\mathbf{k}'t}^{\mu}) e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x})} e^{-i(\mathbf{k}'\mathbf{x})} d^3k d^3k' d^3x$$

$$= -8\pi^3 \iint k_0 k_0' (A_{\mu\mathbf{k}t} - \overline{A}_{\mu-\mathbf{k}t})(A_{\mathbf{k}'t}^{\mu} - \overline{A}_{-\mathbf{k}'t}^{\mu}) \delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}') d^3k d^3k'$$

$$= -8\pi^3 \int k_0^2 (A_{\mu\mathbf{k}t} - \overline{A}_{\mu-\mathbf{k}t})(A_{-\mathbf{k}t}^{\mu} - \overline{A}_{\mathbf{k}t}^{\mu}) d^3k.$$

同样地,从方程(30)的第一式得到

$$\int A_{\mu\mathbf{x}}^{r} A_{\mathbf{x}}^{\mu r} d^3x$$

$$= -\iiint k_r k_r' (A_{\mu\mathbf{k}t} + \overline{A}_{\mu-\mathbf{k}t})(A_{\mathbf{k}'t}^{\mu} + \overline{A}_{-\mathbf{k}'t}^{\mu}) e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x})} e^{-i(\mathbf{k}'\mathbf{x})} d^3k d^3k' d^3x$$

$$= 8\pi^3 \int k_0^2 (A_{\mu\mathbf{k}t} + \overline{A}_{\mu-\mathbf{k}t})(A_{-\mathbf{k}t}^{\mu} + \overline{A}_{\mathbf{k}t}^{\mu}) d^3k.$$

两式相加,并除以 -8π,我們得到

$$-(8\pi)^{-1} \int (B_{\mu} B^{\mu} + A_{\mu}{}^{r} A^{\mu r}) d^3x$$

$$= -2\pi^2 \int k_0^2 (A_{\mu\mathbf{k}t} \overline{A}_{\mathbf{k}t}^{\mu} + \overline{A}_{\mu-\mathbf{k}t} A_{-\mathbf{k}t}^{\mu}) d^3k.$$

此式等于由(19)式得出的 H_F，相差一个无穷大的数字項. H_F 的公式(19)已經包含有一个任意的数字項,所以,我們可以取

$$H_F = -(8\pi)^{-1} \int (B_{\mu} B^{\mu} + A_{\mu}{}^{r} A^{\mu r}) d^3x, \quad (45)$$

它有一个与(19)式不同的任意数字項.

哈密頓量(45)当然可以用来給出海森伯运动方程，它的任意数字項沒有任何效果. 用(31),(32)与(33)式,我們可以容易地驗

証

$$\left.\begin{aligned}\partial A_\mu/\partial x_0 &= [A_\mu, H_F] = B_\mu,\\ \partial B_\mu/\partial x_0 &= [B_\mu, H_F] = \nabla^2 A_\mu,\end{aligned}\right\}\tag{46}$$

它們与(29)及(1)式一致. 哈密頓量(45)式也給出薛定諤运动方程为

$$i\hbar d|P\rangle/dx_0 = H_F|P\rangle,$$

其中右矢$|P\rangle$代表在薛定諤图象中的一个态. 在这里任意数字項的效果为改变$|P\rangle$的相因子,这是沒有物理上的重要性的.

我們可以把H_F的表达式(45)分解为一个横向部分H_{FT}与一个縱向部分H_{FL}. 从(34)式,我們得

$$\begin{aligned}\int B_rB_rd^3x &= \int(\mathscr{B}_r + U^r)(\mathscr{B}_r + U^r)d^3x\\ &= \int \mathscr{B}_r\mathscr{B}_rd^3x + \int U^rU^rd^3x,\end{aligned}$$

因为交叉項为零,而这是由于从(35)式可得

$$\int U^r\mathscr{B}_rd^3x = -\int U\mathscr{B}^r_rd^3x = 0.$$

同样地,从(8)式我們得到

$$\int A^s_rA^s_rd^3x = \int \mathscr{A}^s_r\mathscr{A}^s_rd^3x + \int V^{rs}V^{rs}d^3x,$$

交叉項又是为零. 因此,(45)式变成

$$H_F = H_{FT} + H_{FL}$$

其中

$$H_{FT} = (8\pi)^{-1}\int(\mathscr{B}_r\mathscr{B}_r + \mathscr{A}^s_r\mathscr{A}^s_r)d^3x,\tag{47}$$

$$H_{FL} = (8\pi)^{-1}\int(U^rU^r + V^{rs}V^{rs} - B_0B_0 - A^r_0A^r_0)d^3x.\tag{48}$$

应当注意,在H_{FT}中的項

$$(8\pi)^{-1}\int\mathscr{A}^s_r\mathscr{A}^s_rd^3x$$

可以变换为

$$\begin{aligned}-(8\pi)^{-1}\int\mathscr{A}_r\mathscr{A}^{ss}_rd^3x &= -(8\pi)^{-1}\int\mathscr{A}_r(\mathscr{A}^{ss}_r - \mathscr{A}^{rs}_s)d^3x\\ &= (8\pi)^{-1}\int\mathscr{A}^s_r(\mathscr{A}^s_r - \mathscr{A}^r_s)d^3x\end{aligned}$$

$$= (16\pi)^{-1}\int(\mathscr{A}^s_r - \mathscr{A}^r_s)(\mathscr{A}^s_r - \mathscr{A}^r_s)d^3x$$

$$= (8\pi)^{-1}\int\mathscr{H}^2 d^3x,$$

所以，这一項就是磁能. 再进行某些分部积分，我們得到

$$\int V^{rs}V^{rs}d^3x = \int V^{rr}V^{ss}d^3x,$$

所以，(48)式可以写为

$$H_{FL} = (8\pi)^{-1}\int\{(U-A_0)^r(U+A_0)^r + (V^{rr}-B_0)(V^{ss}+B_0)\}d^3x. \tag{49}$$

§77. 补充条件

現在我們回到麦克斯韦方程(2)，到此为止，我們一直忽略了它. 我們不能把这个方程取来直接用到量子理論中而不引起矛盾. 按照量子条件(28)，这个方程的左边与 $A_\nu(\mathbf{x}')$ 不对易，所以(2)式的左边不能为零. 解决这个困难的方法是費米[1]指出的. 这一方法采取一个要求不那么严格的方程，即

$$(\partial A_\mu/\partial x_\mu)|P\rangle = 0, \tag{50}$$

并假定此式对在自然界实际出現的态所相应的任意右矢 $|P\rangle$ 都成立. 对时空中每一点都有一个方程(50)，这些方程对相应于实际出現的态的任意右矢必須全部成立.

一个右矢必須滿足(50)式才相应于一个实际态，我們称象(50)式这样的条件为补充条件. 理論中存在补充条件，决不意味着背离或修改量子力学的普遍原理. 当有补充条件时，态的迭加原理和全部关于状态、力学变量与可观察量的普遍理論(如第二章中所得的)仍旧适用，只是要对綫性算符加上一条新要求，它才可以代表一个可观察量. 我們定义一个綫性算符是物理的，如果它有下列性质：当它作用于滿足补充条件的任意右矢，所产生的另一个右矢也滿足补充条件. 为了使一个綫性算符可以代表一个可观察

1) Fermi. Reviews of Modern Physics. **4** (1932), 125.

量，显然除了 §10 的一些要求之外，它一定要满足是物理的这个要求。

在包括許多相同粒子的系統的理論中，我們曾有过补充条件的一个例子。只有对称的（或只有反对称的）波函数才代表实际能在自然界出現的态，这个条件正是与条件(50)式同一类型的，也卽是我們現在称之为补充条件的。在这个理論中，綫性算符应为物理的这一要求，就是要求綫性算符应当在相同粒子之間对称。

当我們把补充条件引进理論中时，我們必須驗証它們是协調的，卽它們不是严格到根本不允許有任何右矢满足它們。如果我們有不止一个补充条件，我們能从它們推导出新的补充条件，办法是取这些条件中的算符的泊松括号。例如，如果我們有

$$U|P\rangle = 0, \quad V|P\rangle = 0, \tag{51}$$

我們就能推导出

$$[U, V]|P\rangle = 0, \quad [U, [U, V]]|P\rangle = 0, \tag{52}$$

等等。要驗証它們是协調的，我們就要考察由这个手續所得出的全部新补充条件是否都能得到满足，我們通常能做到这一点的方法是去証明，在某一点以后新得到的补充条件全都成为或者恆等地被满足，或者是以前的补充条件的重复。

我們也必須驗証补充条件是否符合于运动方程。在海森伯图象中，在(51)式中的右矢 $|P\rangle$ 是固定的，因而对不同时間我們有不同的补充条件，它們彼此必須全是按上面討論的方式相协調的。在薛定諤图象中，右矢 $|P\rangle$ 按照薛定諤方程随时間变化，我們要求如果 $|P\rangle$ 开始时满足补充条件，它应总是满足补充条件。这一点的意义是，$d|P\rangle/dt$ 一定满足补充条件，或者說 $H|P\rangle$ 一定满足补充条件，或者說 H 一定是物理的。

当我們有一补充条件 $U|P\rangle = 0$ 时，方便的是写成

$$U \approx 0, \tag{53}$$

并称(53)式为一个弱方程，以区别于普通的方程，卽强方程。如果一个弱方程被任意因子左乘，将得出另一个弱方程，但是，如果被一个因子右乘，一般不能得出有效的方程。因此，一个弱方程不

能用以計算泊松括号. 用这种講法，补充条件彼此为协調的要求(52)式，变成要求在这些补充条件中的算符的泊松括号应当在弱方程的意义下为零.

一个力学变量 ξ 为物理的条件是:对每个补充条件 $U|P\rangle=0$，我們有

$$U\xi|P\rangle = 0,$$

因而

$$[U, \xi]|P\rangle = 0.$$

因此,这个条件是:这个力学变量与补充条件中每个算符的泊松括号应在弱方程的意义下为零.

讓我們現在回到电动力学,我們取方程(2)为一个弱方程，这样,它应写成

$$\partial A_\mu/\partial x_\mu \approx 0. \tag{54}$$

在海森伯图象里，对每一点 x 有一个这样的方程. 为了检查它們的协調性,我們在时空中取任意两点 x 与 x',并組成泊松括号

$$\left[\frac{\partial A_\mu(x)}{\partial x_\mu}, \frac{\partial A_\nu(x')}{\partial x'_\nu}\right] = \frac{\partial^2}{\partial x_\mu \partial x'_\nu}[A_\mu(x), A_\nu(x')].$$

用(28)式計算上式,我們从(25)式得到

$$g_{\mu\nu}\frac{\partial^2\Delta(x-x')}{\partial x_\mu \partial x'_\nu} = -\Box\Delta(x-x') = 0.$$

所以,协調的要求在強方程的意义下滿足了. 因为我們已經驗証,在海森伯图象中，补充条件在全部时間是协調的,我們就已驗証,它們是符合运动方程的.

由于(54)式只是一个弱方程,在普通麦克斯韦理論中,(54)式的任何推論在量子理論中都是只作为弱方程而成立的. 方程

$$\mathrm{div}\mathscr{H} = 0, \quad \partial\mathscr{H}/\partial t = -\mathrm{curl}\mathscr{E},$$

是从用势表示的 $\mathscr{E}$ 与 $\mathscr{H}$ 的定义直接得到的,所以它們在量子理論中是作为強方程而成立的. 对于眞空的其他麦克斯韦方程,即

$$\mathrm{div}\mathscr{E} \approx 0, \quad \partial\mathscr{E}/\partial t \approx \mathrm{curl}\mathscr{H}, \tag{55}$$

在量子理論中是弱方程,因为在推导它們时,除了利用(1)式之外,

我們还需要用(54)式.

场量 $\mathscr{E}$ 与 $\mathscr{H}$ 是反对称张量 $\partial A^\nu/\partial x_\mu - \partial A^\mu/\partial x_\nu$ 的分量.这个张量与在一般点 x' 的(54)式的算符之間的泊松括号是

$$\left[\frac{\partial A^\nu(x)}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A^\mu(x)}{\partial x_\nu}, \frac{\partial A_\sigma(x')}{\partial x'_\sigma}\right] =$$

$$= g^\nu_\sigma \frac{\partial^2 \Delta(x - x')}{\partial x_\mu \partial x'_\sigma} - g^\mu_\sigma \frac{\partial^2 \Delta(x - x')}{\partial x_\nu \partial x'_\sigma} = 0.$$

由此得出，$\mathscr{E}$ 与 $\mathscr{H}$ 是物理的. 势 A_μ 不是物理的.

影响特定时間的力学变量的补充条件是，

$$\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu} \approx 0, \quad \frac{\partial}{\partial x_0}\frac{\partial A_\mu}{\partial x_\mu} \approx 0. \tag{56}$$

对 x_0 的更高次微分不給出独立的方程，給出的方程是上述方程与强方程(1)的推論. 因此，用 §76 的薛定諤变量表示，补充条件是

$$B_0 + A^r_r \approx 0, \tag{57}$$

以及

$$(A^r_0 + B_r)^r \approx 0. \tag{58}$$

方程(58)与方程(55)中第一式相同，从(39)式看，它也可以写成

$$\nabla^2(A_0 + U) \approx 0.$$

由于此式在全部三維空間成立，由它推出

$$A_0 + U \approx 0. \tag{59}$$

注意到 $A^r_r = V^{rr}$，我們現在可以从(49)式看出

$$H_{FL} \approx 0. \tag{60}$$

因此，对于自然界出現的态沒有纵场能量.

为了建立一个方便的表象，我們引进一个标准右矢 $|0_F\rangle$，它滿足下列补充条件:

$$(B_0 + A^r_r)|0_F\rangle = 0, \quad (A_0 + U)|0_F\rangle = 0, \tag{61}$$

并且也滿足

$$\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}|0_F\rangle = 0. \tag{62}$$

这些条件是协調的，因为 $\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}$ 与(61)式中的算符对易，它們足以完全决定 $|0_F\rangle$，只差一个数字因子，因为我們有的独立力学

变量只有 A_0, B_0, U, A_r', $\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}$, $\bar{\mathscr{A}}_{r\mathbf{k}}$, 在这些变量中, A_0+U, B_0+A_r', $\bar{\mathscr{A}}_{r\mathbf{k}}$ 組成一个对易完全集. 用这个标准右矢, 我們可把任意右矢表示为

$$\Psi(A_0, B_0, \mathscr{A}_{r\mathbf{k}})|0_F\rangle. \tag{63}$$

就横向力学变量 $\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}$ 与 $\bar{\mathscr{A}}_{r\mathbf{k}}$ 而言, 我們的表象正是福克表象, 所以 Ψ 一定是变量 $\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}$ 的冪級数,在此級数中不同的項相应于存在不同数目的光子. 出現在 Ψ 中的变量数目是一个連續无穷大, 这样, Ψ 就是数学家所称的"泛函".

如果右矢(63)式满足补充条件, Ψ 一定与 A_0 和 B_0 无关,因而只是 $\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}$ 的函数. 这样,物理的态由下列的右矢代表:

$$\Psi(\mathscr{A}_{r\mathbf{k}})|0_F\rangle, \tag{64}$$

其中 Ψ 是变量 $\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}$ 的冪級数. 标准右矢 $|0_F\rangle$ 本身代表沒有光子存在的物理态——完全眞空.

我們的哈密頓量 H_F 以及它的两部分 H_{FL}, H_{FT}, 至此为止包含任意的数字項. 方便的是选择这些数字項使 H_{FL}, H_{FT} 在完全眞空都为零. (60)式的結果表明, (48)或(49)式給出的 H_{FL} 中的任意数字項已經正确地选好, 使得 H_{FL} 对完全眞空及每个其他物理态都为零. 我們必須取 H_{FT} 为

$$H_{FT} = 4\pi^2\int k_0^2 \mathscr{A}_{r\mathbf{k}t} \bar{\mathscr{A}}_{r\mathbf{k}t} d^3k, \tag{65}$$

即(19)式的横向部分,这样才能使其中的数字項选择得正确,以使光子沒有零点能. (47)式与(65)式相差一个无穷大的数字項, 这个数字項是由每个光子态有半个量子的能量所組成的.

§ 78. 电子与正电子

現在, 我們研究沒有电磁場时的电子与正电子. 如在第十一章所述,一个电子的态可用有四个分量 ψ_a ($a=1, 2, 3, 4$)的波函数 ψ 来描述, ψ 满足下列波动方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x_0} = -i\hbar\alpha_r\frac{\partial\psi}{\partial x_r} + \alpha_m m\psi. \tag{66}$$

为了得到多电子理論,我們运用 §65 的二次量子化的方法,这个方法包含把单电子波函数改变成一組满足某些反对易关系的算符.

当我們研究給定时刻在不同位置的 ψ 时，我們可以把它写成 $\psi_{\mathbf{x}}$,其中 $\mathbf{x}$ 代表 x_1, x_2, x_3。它的分量就是 $\psi_{a\mathbf{x}}$。我們通过一个三維傅里叶分解来轉入波函数为 $\psi_{\mathbf{p}}$ 的动量表象:

$$\psi_{\mathbf{x}} = h^{-\frac{3}{2}}\int e^{i(\mathbf{xp})/\hbar}\psi_{\mathbf{p}}d^3p, \quad \psi_{\mathbf{p}} = h^{-\frac{3}{2}}\int e^{-i(\mathbf{xp})/\hbar}\psi_{\mathbf{x}}d^3x. \tag{67}$$

$\psi_{\mathbf{p}}$ 有四个分量 $\psi_{a\mathbf{p}}$，相应于 $\psi_{\mathbf{x}}$ 的四个分量. 在这个表象中，能量算符是

$$p_0 = \alpha_r p_r + \alpha_m m,$$

其中动量算符 p_r 是相乘因子.

我們可以把 ψ 分开为正能部分 ξ 与負能部分 ζ:

$$\psi = \xi + \zeta,$$

ξ 与 ζ 的每一个都象 ψ 一样有四个分量. 在动量表象中它們由下式給出

$$\xi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}\left\{1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}\psi_{\mathbf{p}},$$

$$\zeta_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}\left\{1 - \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}\psi_{\mathbf{p}}, \tag{68}$$

因为这些方程引出

$$p_0\xi_{\mathbf{p}} = (\alpha_r p_r + \alpha_m m)\xi_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2}\{\alpha_r p_r + \alpha_m m + (\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}\}\psi_{\mathbf{p}}$$
$$= (\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}\xi_{\mathbf{p}},$$

同样地

$$p_0\zeta_{\mathbf{p}} = -(\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}\zeta_{\mathbf{p}},$$

它們表明 $\xi_{\mathbf{p}}$ 与 $\zeta_{\mathbf{p}}$ 都是 p_0 的本征函数,其本征值分别为 $(\mathbf{p}^2+m^2)^{\frac{1}{2}}$ 与 $-(\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}$. 当我們采用算符

$$\frac{1}{2}\left\{1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}, \quad \frac{1}{2}\left\{1 - \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}$$

时,我們应当注意,它們的平方分别等于它們自己，而它們两者的乘积无論按什么次序都为零.

二次量子化使这些ψ成为算符,象 §65 的$\bar{\eta}$一样, 满足象 §65 (11′)式一样的反对易关系. 用反对易子的符号

$$MN + NM = [M, N]_+, \tag{69}$$

我們就得

$$\left.\begin{aligned}&[\psi_{a\mathbf{x}}, \psi_{b\mathbf{x}'}]_+=0,\ [\bar{\psi}_{a\mathbf{x}}, \bar{\psi}_{b\mathbf{x}'}]_+=0,\\&[\psi_{a\mathbf{x}}, \bar{\psi}_{b\mathbf{x}'}]_+ = \delta_{ab}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}').\end{aligned}\right\} \tag{70}$$

在后一式中出現的函数 $\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ 是由于 $\mathbf{x}$ 取連續范围的值. 按照(67)式变换到 $\mathbf{p}$ 表象时,我們得到

$$\left.\begin{aligned}&[\psi_{a\mathbf{p}}, \psi_{b\mathbf{p}'}]_+ = 0,\ [\bar{\psi}_{a\mathbf{p}}, \bar{\psi}_{b\mathbf{p}'}]_+ = 0,\\&[\psi_{a\mathbf{p}}, \bar{\psi}_{b\mathbf{p}'}]_+ = \delta_{ab}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}').\end{aligned}\right\} \tag{71}$$

再用(68)式所定义的ξ与ζ, 方程(71)中的最后一个給出

$$\begin{aligned}[\xi_{a\mathbf{p}}, \bar{\xi}_{b\mathbf{p}'}]_+ &= \frac{1}{2}\left\{1+\frac{\alpha_r p_r+\alpha_m m}{(\mathbf{p}^2+m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}_{ac}\times\\&\times[\psi_{c\mathbf{p}}, \bar{\psi}_{d\mathbf{p}'}]_+\frac{1}{2}\left\{1+\frac{\alpha_s p'_s+\alpha_m m}{(\mathbf{p}'^2+m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}_{db}\\&= \frac{1}{2}\left\{1+\frac{\alpha_r p_r+\alpha_m m}{(\mathbf{p}^2+m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}_{ab}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'),\end{aligned} \tag{72}$$

同样地,有

$$[\zeta_{a\mathbf{p}}, \zeta_{b\mathbf{p}'}]_+ = \frac{1}{2}\left\{1-\frac{\alpha_r p_r+\alpha_m m}{(\mathbf{p}^2+m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}_{ab}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'), \tag{73}$$

以及

$$[\xi_{a\mathbf{p}}, \bar{\zeta}_{b\mathbf{p}'}]_+ = [\bar{\xi}_{a\mathbf{p}}, \zeta_{b\mathbf{p}'}]_+ = 0.$$

按照 §65 的解释, 算符 $\psi_{a\mathbf{p}}$ 是动量为 $\mathbf{p}$ 的一个电子的湮灭算符, 而 $\bar{\psi}_{a\mathbf{p}}$ 是动量为 $\mathbf{p}$ 的一个电子的产生算符. 为了避免沒有物理意义的負能电子的概念, 我們必須轉到以 §73 的正电子理論为基础的新解释. 一个負能电子的湮灭应該理解为在負能电子的大海中产生一个空穴, 或者是理解为产生一个正电子. 所以, 算符 $\zeta_{a\mathbf{p}}$ 变成一个正电子的产生算符. 这个正电子的动量是$-\mathbf{p}$, 因为湮灭的动量是 $\mathbf{p}$. 同样地, $\bar{\zeta}_{a\mathbf{p}}$ 变为具有动量为$-\mathbf{p}$ 的一个正电子的湮灭算符. $\xi_{a\mathbf{p}}$ 与 $\bar{\xi}_{a\mathbf{p}}$ 分别为动量为 $\mathbf{p}$ 的一个普通的正能电子的湮灭算符与产生算符.

应当指出，虽然 $\xi_{\mathbf{p}}$ 有四个分量，但只有两个分量是独立的，因为这四个分量之間有一个关系

$$\left\{1-\frac{\alpha_r p_r+\alpha_m m}{(\mathbf{p}^2+m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}\xi_{\mathbf{p}}=0,$$

此式包含着两个独立方程. $\xi_{\mathbf{p}}$ 的两个独立的分量分别相应于在两个独立的自旋态中湮灭一个电子. 同样地，$\zeta_{\mathbf{p}}$ 也只有两个独立分量，这是由于方程

$$\left\{1+\frac{\alpha_r p_r+\alpha_m m}{(\mathbf{p}^2+m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}\zeta_{\mathbf{p}}=0,$$

这两个独立分量分别相应于在两个独立自旋态中有一个正电子产生.

沒有电子和正电子的眞空态用右矢 $|0_P\rangle$ 表示，$|0_P\rangle$ 满足

$$\xi_{a\mathbf{p}}|0_P\rangle=0,\quad \zeta_{a\mathbf{p}}|0_P\rangle=0. \tag{74}$$

我們可以用这个右矢作为一个表象的标准右矢. 于是，我們就可以把任意右矢表示为

$$\Psi(\bar{\xi}_{a\mathbf{p}},\ \zeta_{a\mathbf{p}})|0_P\rangle,$$

其中函数，或者应該說泛函 Ψ，是变量 $\bar{\xi}_{a\mathbf{p}}$，$\zeta_{a\mathbf{p}}$ 的冪級数. Ψ 的每一項类似于 §65 的(17′)式. 它所包含的任意变量的冪必定不超过一次. 每一項相应于存在着某些(正能量的)电子与某些正电子，处于由出現在其中的变量的标記所指定的态.

根据 §65 的(12′)式，电子的总数是 $\int\bar{\psi}_{a\mathbf{p}}\psi_{a\mathbf{p}}d^3p$ 对 a 求和. 我們可以把它用 §67 的方程(12)的符号写成 $\int\bar{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\psi_{\mathbf{p}}d^3p$. 用(67)式把此式变换到 $\mathbf{x}$ 表象中，我們就得

$$h^{-3}\iiint e^{i(\mathbf{x},\mathbf{p})/\hbar}e^{-i(\mathbf{x}',\mathbf{p})/\hbar}\,\bar{\psi}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\psi_{\mathbf{x}}d^3x d^3x' d^3p=\int\bar{\psi}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\psi_{\mathbf{x}}d^3x,$$

这表明电子密度是 $\bar{\psi}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\psi_{\mathbf{x}}$. 这个結果包括一个无穷大的常数，代表負能电子的大海的密度.

如果我們取总电荷 Q 为正能电子数减去空穴或正电子数并整个乘以 $-e$，我們就得到一个更有物理意义的量. 这样，

$$Q = -e\int(\bar{\xi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\xi_{\mathbf{p}} - \zeta_{\mathbf{p}}^{\dagger}\bar{\zeta}_{\mathbf{p}})d^3p. \tag{75}$$

我們可用(68)式来計算此式。用(68)式中第二个的轉置，即

$$\zeta_{\mathbf{p}}^{\dagger} = \frac{1}{2}\psi_{\mathbf{p}}^{\dagger}\left\{1 - \frac{\alpha_r^{\dagger}p_r + \alpha_m^{\dagger}m}{(\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\},$$

我們得到

$$Q = -e\int\left\{\bar{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\frac{1}{2}\left(1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}}\right)\psi_{\mathbf{p}} - \right.$$

$$\left. - \psi_{\mathbf{p}}^{\dagger}\frac{1}{2}\left(1 - \frac{\alpha_r^{\dagger}p_r + \alpha_m^{\dagger}m}{(\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}}\right)\bar{\psi}_{\mathbf{p}}\right\}d^3p.$$

現在，对于对角和为零的任意矩陣 α，反对易关系(71)式給出

$$\bar{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\alpha\psi_{\mathbf{p}'} + \psi_{\mathbf{p}'}^{\dagger}\alpha^{\dagger}\bar{\psi}_{\mathbf{p}} = \alpha_{ab}(\bar{\psi}_{a\mathbf{p}}\psi_{b\mathbf{p}'} + \psi_{b\mathbf{p}'}\bar{\psi}_{a\mathbf{p}})$$
$$= \alpha_{aa}\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') = 0, \tag{76}$$

我們在 $\mathbf{p}' = \mathbf{p}$ 时仍可假定这个結果是成立的. 于是，Q 的表达式簡化为

$$Q = -e\int\frac{1}{2}(\bar{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\psi_{\mathbf{p}} - \psi_{\mathbf{p}}^{\dagger}\bar{\psi}_{\mathbf{p}})d^3p.$$

如前面一样，把它变换到 $\mathbf{x}$ 表象，我們得到

$$Q = -e\int\frac{1}{2}(\bar{\psi}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\psi_{\mathbf{x}} - \psi_{\mathbf{x}}^{\dagger}\bar{\psi}_{\mathbf{x}})d^3x,$$

它表明电荷密度是

$$j_{0\mathbf{x}} = -\frac{1}{2}e(\bar{\psi}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\psi_{\mathbf{x}} - \psi_{\mathbf{x}}^{\dagger}\bar{\psi}_{\mathbf{x}}). \tag{77}$$

由 §68 的单电子波函数的解释，不仅得出了几率密度 $\bar{\psi}^{\dagger}\psi$，也得出了几率流 $\bar{\psi}^{\dagger}\alpha_r\psi$. 用二次量子化，我們相应地有一个电子流，由算符 $\bar{\psi}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\alpha_r\psi_{\mathbf{x}}$ 給出. 从对称性得到，負能电子的大海产生的合成电子流为零，所以电流为

$$j_{r\mathbf{x}} = -e\bar{\psi}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\alpha_r\psi_{\mathbf{x}}. \tag{78}$$

从第十章的公式(29)(这个公式对費米子也成立)，电子的总能量是

$$H_{P'} = \int\bar{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}p_0\psi_{\mathbf{p}}d^3p = \int\bar{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}(\alpha_r p_r + \alpha_m m)\psi_{\mathbf{p}}d^3p. \tag{79}$$

当把它变换到 $\mathbf{x}$ 表象时，它变成

$$H_{P'}=\int\bar{\psi}_{\mathbf{x}}^{\dagger}(-i\hbar\alpha_r\psi_{\mathbf{x}}^{r}+\alpha_m m\psi_{\mathbf{x}})d^3x. \tag{80}$$

这个总能量包括一个无穷大的数字项，代表負能电子海的能量。

如果我們以眞空能量作为零，而把所有电子与正电子的能量加在一起，我們就得到一个更有物理意义的量。这个量是

$$H_P=\int(\mathbf{p}^2+m^2)^{\frac{1}{2}}(\bar{\xi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\xi_{\mathbf{p}}+\zeta_{\mathbf{p}}^{\dagger}\bar{\zeta}_{\mathbf{p}})d^3p \tag{81}$$

$$=\int(\mathbf{p}^2+m^2)^{\frac{1}{2}}\left\{\bar{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\frac{1}{2}\left(1+\frac{\alpha_r p_r+\alpha_m m}{(\mathbf{p}^2+m^2)^{\frac{1}{2}}}\right)\psi_{\mathbf{p}}+\right.$$

$$\left.+\psi_{\mathbf{p}}^{\dagger}\frac{1}{2}\left(1-\frac{\alpha_r^{\dagger}p_r+\alpha_m^{\dagger}m}{(\mathbf{p}^2+m^2)^{\frac{1}{2}}}\right)\bar{\psi}_{\mathbf{p}}\right\}d^3p$$

$$=\int\frac{1}{2}\{\bar{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}(\alpha_r p_r+\alpha_m m)\psi_{\mathbf{p}}-\psi_{\mathbf{p}}^{\dagger}(\alpha_r^{\dagger}p_r+\alpha_m^{\dagger}m)\bar{\psi}_{\mathbf{p}}\}d^3p+$$

$$+\int(\mathbf{p}^2+m^2)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{2}(\bar{\psi}_{\mathbf{p}}^{\dagger}\psi_{\mathbf{p}}+\psi_{\mathbf{p}}^{\dagger}\bar{\psi}_{\mathbf{p}})d^3p. \tag{82}$$

从(76)式知，(82)式中的第一项与(79)式相同，就是 $H_{P'}$。第二項是一个无穷大的恆量，是在眞空分布中的所有負能电子的能量乘上一1.

我們可以取 H_P 为哈密頓量，或者也可取 $H_{P'}$ 为哈密頓量。因此，$\psi_{a\mathbf{x}}$ 的海森伯运动方程为

$$\partial\psi_{a\mathbf{x}}/\partial x_0=[\psi_{a\mathbf{x}},H_P]=[\psi_{a\mathbf{x}},H_{P'}],$$

如果我們把此式算出来，我們就又得到 ψ 的波动方程，即(66)式.

現在，我們必須考察，理論是否是相对論性的問題。这理論是从滿足場方程(66)的算符 ψ 建立起来的。这些方程与单电子波函数的波动方程相同，只要 ψ 按第十一章的規則(20)式变换，我們已知这些方程是在洛伦兹变换下不变的。我們目前的理論超过了单

$$K_{ab}(x, x') = \psi_a(x)\overline{\psi}_b(x') + \overline{\psi}_b(x')\psi_a(x). \tag{83}$$

我們可以直接从 ψ 与 $\overline{\psi}$ 的傅里叶分量的反对易关系 (71) 式来計算. 一个更簡单的方法是，注意到 $K_{ab}(x, x')$ 必然具有的某些性質，即

(i) 它含 x_μ 与 x'_μ 只是通过它們的差 $x_\mu - x'_\mu$;

(ii) 由于 $\psi(x)$ 满足(66)式，$K_{ab}(x, x')$满足波动方程

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_0} + i\hbar\alpha_r\frac{\partial}{\partial x_r} - \alpha_m m\right)_{ab} K_{bc}(x, x') = 0; \tag{84}$$

(iii) 在 $x_0 = x'_0$ 时，$K_{ab}(x, x')$有值为 $\delta_{ab}\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$,这是从方程(70)的第三式得出的.

这些性質足以完全决定 $K_{ab}(x, x')$,因为(iii)决定了它在 $x_0 = x'_0$ 时的值，(ii)表明它与 x_0 的关系，而(i)又表明它与 x'_0 的关系. 容易看出这个解为

$$K_{ab}(x, x') = h^{-3}\int\sum\frac{1}{2}\{1 + (\alpha_r p_r + \alpha_m m)/p_0\}_{ab} e^{-i(x-x')\cdot p/\hbar} d^3p, \tag{85}$$

其中求和$\sum$的意义是，在 p_1, p_2, p_3 的特定值时，对 p_0 的两个值 $\pm(p^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}$求和. (85)式是满足条件(ii)的，因为(84)式中的算符在(85)式的被积函数中产生因子$(p_0 - \alpha_r p_r - \alpha_m m)$，这个因子左乘到因子$\{\ \}$上就得結果为零. (85)式也是滿足条件(iii)的，因为在 $x_0 = x'_0$ 时，对 p_0 的求和使$\{\ \}$中的第二項对消掉了.

在 §68 中得出的，ψ 与 $\overline{\psi}$ 的变换规则的效果为，使量 $\overline{\psi}^\dagger(x')\alpha_\mu\psi(x)$ 按四維矢量的四个分量的規則变换，而使量 $\overline{\psi}^\dagger(x')\alpha_m\psi(x)$ 为不变量. 因此，当 l^μ 为任意四維矢量，S 为任意标量时

$$l^\mu\overline{\psi}^\dagger(x')\alpha_\mu\psi(x) + S\overline{\psi}^\dagger(x')\alpha_m\psi(x) \tag{86}$$

是不变量. (86) 式的不变性必然足以保証 ψ 与 $\overline{\psi}$ 的正确变换規則，因为它使我們能推出 ψ 的波动方程的不变性，办法是取 $l^\mu = i\hbar\partial/\partial x_\mu$, $S = -m$.

(86)式的不变性导致下式的不变性:

$$(l^\mu\alpha_\mu + S\alpha_m)_{ab}\{\overline{\psi}_a(x')\psi_b(x) + \psi_b(x)\overline{\psi}_a(x')\}.$$

因此，

$$(l^\mu \alpha_\mu + S\alpha_m)_{ab} K_{ba}(x, x') \tag{87}$$

应当是不变量，式中 $K_{ab}(x, x')$ 由(85)給出. 而且(87)式的不变性必然足以保証反对易关系的不变性. 从(87)式我們得到

$$h^{-3}\int\sum \frac{1}{2}(l^\mu\alpha_\mu + S\alpha_m)_{ab}(p_0 + \alpha_r p_r + \alpha_m m)_{ba} e^{-i(x-x')\cdot p/\hbar} p_0^{-1} d^3p$$

$$= h^{-3}\int\sum \frac{1}{2}\{(l_0 - l_s\alpha_s + S\alpha_m)(p_0 + \alpha_r p_r + \alpha_m m)\}_{aa} e^{-i(x-x')\cdot p/\hbar} p_0^{-1} d^3p$$

$$= h^{-3}\int\sum 2(l_0 p_0 - l_r p_r + Sm) e^{-i(x-x')\cdot p/\hbar} p_0^{-1} d^3p. \tag{88}$$

这是洛伦兹不变量，因为微分元 $p_0^{-1}d^3p$ 是洛伦兹不变量. 这样，就証明了理論的相对論不变性.

§79. 相互作用

电子和正电子与电磁場有相互作用时的完全的哈密頓量是

$$H = H_F + H_P + H_Q, \tag{89}$$

其中 H_F 是只有电磁場的哈密頓量，由(19)式或(45)式給出，H_P 是只有电子与正电子的哈密頓量，由(80)式或(81)式給出，而 H_Q 是相互作用能，它包含着电子与正电子的力学变量，也包含电磁場的力学变量. 我們取

$$H_Q = \int A^\mu j_\mu d^3x, \tag{90}$$

其中 j_μ 由(77)式与(78)式給出，因为我們将看到，这个哈密頓量得出正确的运动方程. 这样，在略去无穷大的数字項以后，就有

$$H = \int\{\overline{\psi}^\dagger \alpha_r(-i\hbar\psi^r - eA^r\psi) + \overline{\psi}^\dagger\alpha_m m\psi -$$

$$- \frac{1}{2} eA^0(\overline{\psi}^\dagger\psi - \psi^\dagger\overline{\psi})\} d^3x -$$

$$- (8\pi)^{-1}\int(B_\mu B^\mu + A^r_\mu A^{\mu r}) d^3x. \tag{91}$$

让我們用哈密頓量(91)式来計算海森伯运动方程. 我們有

$$i\hbar\,\partial\psi_{a\mathbf{x}}/\partial x_0 = \psi_{a\mathbf{x}}H - H\psi_{a\mathbf{x}} = \psi_{a\mathbf{x}}(H_P + H_Q) - (H_P + H_Q)\psi_{a\mathbf{x}}$$

$$= \int[\psi_{a\mathbf{x}}, \overline{\psi}_{b\mathbf{x}'}]_+\{\alpha_r(-i\hbar\psi^r_{\mathbf{x}'} - eA^r_{\mathbf{x}'}\psi_{\mathbf{x}'}) +$$

$$+\alpha_m m\psi_{\mathbf{x}'} - eA^0_{\mathbf{x}'}\psi_{\mathbf{x}'}\}_b d^3x$$
$$=\{\alpha_r(-i\hbar\psi^r_{\mathbf{x}} - eA^r_{\mathbf{x}}\psi_{\mathbf{x}}) + \alpha_m m\psi_{\mathbf{x}} - eA^0_{\mathbf{x}}\psi_{\mathbf{x}}\}_a.$$

因此

$$\left\{\alpha_\mu\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial x_\mu} + eA^\mu\right) - \alpha_m m\right\}\psi = 0. \qquad (92)$$

这式与第十一章的单电子波动方程(11)式一致. 由于H是实的, $\bar{\psi}$ 的运动方程就是 ψ 的运动方程的共軛. 因而与第十一章的(12)式一致. 因此，相互作用(90)式正确地給出場对电子与正电子的作用. 再者,我們利用(46)式中的泊松括号关系,可得

$$\partial A_\mu/\partial x_0 = [A_\mu, H] = [A_\mu, H_F] = B_\mu, \qquad (93)$$

以及

$$\partial B_{\mu\mathbf{x}}/\partial x_0 = [B_{\mu\mathbf{x}}, H] = [B_{\mu\mathbf{x}}, H_F] + [B_{\mu\mathbf{x}}, H_Q]$$
$$= \nabla^2 A_{\mu\mathbf{x}} + \int [B_{\mu\mathbf{x}}, A^\nu_{\mathbf{x}'}] j_{\nu\mathbf{x}'} d^3x'$$
$$= \nabla^2 A_{\mu\mathbf{x}} + 4\pi j_{\mu\mathbf{x}}. \qquad (94)$$

从(93)与(94)可推导出

$$\Box A_\mu = 4\pi j_\mu, \qquad (95)$$

这与麦克斯韦理論一致，表明(90)式正确地給出电子与正电子对場的作用.

为了使理論完整，我們还必須考虑补充条件(54)式. 我們必須驗証，它們与运动方程是否一致. §77 所用的方法在于証明在海森伯图象中不同时刻的补充条件是相互协调的，这时不再能用了,因为在不同时刻的力学变量間的量子条件,由于相互作用而发生了变化,而变化的方式过于复杂，以致不能計算出来. 所以,我們来求对同一时刻的力学变量有影响的全部补充条件，并检查它們是否互相协調.

我們又有方程(56). 再对 x_0 微分一次得

$$\Box\, \partial A_\mu/\partial x_\mu \approx 0. \qquad (96)$$

与 §68 中一样,由 ψ 的运动方程即(92)式得出

$$\partial(\bar{\psi}^+\alpha_\mu\psi)/\partial x_\mu = 0,$$

此式卽为

$$\partial j_\mu / \partial x_\mu = 0, \tag{97}$$

因为 $-e\bar{\psi}^+\psi$ 与 j_0 之差是一个与时間无关的恆量，虽然这个差是无穷大的．根据(95)式，我們現在看到(96)式是作为強方程而成立的．因此，方程(56)是对在某一时刻的力学变量有作用的仅有的独立的补充方程．它們之中的第一个給出(57)式，这与前面一样，而第二个現在可借助于 $\mu = 0$ 的(95)式給出

$$(A_0' + B_r)^r + 4\pi j_0 \approx 0, \tag{98}$$

此式可以写成

$$(A_0 + U)^{rr} + 4\pi j_0 \approx 0, \tag{99}$$

或者，从(39)式得

$$\operatorname{div}\mathscr{E} - 4\pi j_0 \approx 0, \tag{100}$$

这正是麦克斯韦方程之一．

我們不用詳細計算就可以看到，对同一时刻的任意两点 x 与 x'，有

$$[j_{0\mathbf{x}}, j_{0\mathbf{x}'}] = 0,$$

因为从(70)式的形式知，泊松括号一定是 $\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ 的倍数，不能含 $\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ 的导数，并且还必須在 $\mathbf{x}$ 与 $\mathbf{x}'$ 之間反对称．因此，方程(98) 与相应的方程(58)比較之下多出的項 $4\pi j_{0\mathbf{x}}$，对不同的 $\mathbf{x}$ 值互相对易，并且与出現在(58)与(57)式中的全部其它力学变量对易．由此得出，这个多出的項不会破坏(58)式与(57)式的协調性，因而(98)式与(57)式是协調的．

我們把相互作用引进理論的方法不是相对論性的，因为相互作用能(90)式包含了在某一洛伦茲系中某一特定时刻的力学变量．因此有相互作用的理論是不是相对論性的理論，是成問題的．我們的場方程卽(92)式与(95)式，显然是相对論性的，补充条件(54)也是相对論性的．还未肯定的是，量子条件是不是洛伦兹不变量．

我們已知道了在一給定时刻 x_0 的全部力学变量 $A_{\mu\mathbf{x}}, B_{\mu\mathbf{x}}, \psi_{a\mathbf{x}}, \bar{\psi}_{a\mathbf{x}}$ 之間的量子条件．如前面已講过的，我們不能求出在时空中

任意两点的力学变量之間的一般量子条件，因为相互作用使这样做成为太复杂了．因此，我們将作一个无穷小的洛伦兹变换，求出在新参考系中同一时刻的量子条件．如果我們能得出量子条件在无穷小的洛伦兹变换下是不变量，则它們在有限的洛伦兹变换下的不变性就可从而得出了．

令 x_0^* 为新参考系中的时間坐标．它与原来的各坐标之間的关系为

$$x_0^* = x_0 + \epsilon v_r x_r \tag{101}$$

其中 ϵ 是个无穷小的数，而 v_r 是一个三維矢量，ϵv_r 就是两个参考系的相对速度，我們略去数量級为 ϵ^2 的各項．

在新参考系中在时間 x_0^* 在地点 $\mathbf{x}$ 的場量 κ 的值为，

$$\begin{aligned}\kappa(\mathbf{x}, x_0^*) &= \kappa(\mathbf{x}, x_0) + (x_0^* - x_0)\partial\kappa_{\mathbf{x}}/\partial x_0 = \\ &= \kappa(\mathbf{x}, x_0) + \epsilon v_r x_r[\kappa_{\mathbf{x}}, H].\end{aligned} \tag{102}$$

它与另外的这种場量 $\lambda(\mathbf{x}', x_0^*)$ 的泊松括号为

$$\begin{aligned}[\kappa(\mathbf{x}, x_0^*), \lambda(\mathbf{x}', x_0^*)] &= [\kappa(\mathbf{x}, x_0) + \\ &\quad + \epsilon v_r x_r[\kappa_{\mathbf{x}}, H], \lambda(\mathbf{x}', x_0) + \epsilon v_s x_s'[\lambda_{\mathbf{x}'}, H]] \\ &= [\kappa(\mathbf{x}, x_0), \lambda(\mathbf{x}', x_0)] + \epsilon v_s x_s'[\kappa_{\mathbf{x}}, [\lambda_{\mathbf{x}'}, H]] + \\ &\quad + \epsilon v_r x_r[[\kappa_{\mathbf{x}}, H], \lambda_{\mathbf{x}'}] \\ &= [\kappa(\mathbf{x}, x_0), \lambda(\mathbf{x}', x_0)] + \epsilon v_r(x' - x)[\kappa_{\mathbf{x}}, [\lambda_{\mathbf{x}'}, H]] + \\ &\quad + \epsilon v_r x_r[[\kappa_{\mathbf{x}}, \lambda_{\mathbf{x}'}], H].\end{aligned} \tag{103}$$

如果 κ 与 λ 是 ψ 或 $\overline{\psi}$ 变量，我們应当关心的是它們的反对易子，而不是它們的泊松括号．用反对易子的符号(69)式，我們有

$$\begin{aligned}&[\kappa(\mathbf{x}, x_0^*), \lambda(\mathbf{x}', x_0^*)]_+ \\ &\quad = [\kappa(\mathbf{x}, x_0), \lambda(\mathbf{x}', x_0)]_+ + \epsilon v_r x_r'[\kappa_{\mathbf{x}}, [\lambda_{\mathbf{x}'}, H]]_+ + \\ &\qquad + \epsilon v_r x_r[[\kappa_{\mathbf{x}}, H], \lambda_{\mathbf{x}'}]_+ \\ &\quad = [\kappa(\mathbf{x}, x_0), \lambda(\mathbf{x}', x_0)]_+ + \epsilon v_r(x_r' - x_r)[\kappa_{\mathbf{x}}, [\lambda_{\mathbf{x}'}, H]]_+ + \\ &\qquad + \epsilon v_r x_r[[\kappa_{\mathbf{x}}, \lambda_{\mathbf{x}'}]_+, H],\end{aligned} \tag{104}$$

其中 κ 与 λ 是基本变量 A_μ, B_μ, ψ_a, $\overline{\psi}_a$ 中的任意两个，泊松括号 $[\kappa_{\mathbf{x}}, \lambda_{\mathbf{x}'}]$ 或者反对易子 $[\kappa_{\mathbf{x}}, \lambda_{\mathbf{x}'}]_+$（按情况而定）是一个数，所以在(103)式或(104)式中的最后一項为零．剩下的是

$$
\begin{aligned}
[\kappa(\mathbf{x}, x_0^*), \lambda(\mathbf{x}', x_0^*)]_\pm &= [\kappa(\mathbf{x}, x_0), \lambda(\mathbf{x}', x_0)]_\pm + \\
&+ \epsilon v_r(x_r' - x_r)[\kappa_{\mathbf{x}}, [\lambda_{\mathbf{x}'}, H_P + H_F]_\pm + \\
&+ \epsilon v_r(x_r - x_r')[\kappa_{\mathbf{x}}, [\lambda_{\mathbf{x}'}, H_Q]_\pm,
\end{aligned} \tag{105}
$$

其中 $[\kappa, \lambda]_\pm$ 代表泊松括号或反对易子，按情况决定. 从(90)式中 H_Q 的形式,我們看到,$[\lambda_{\mathbf{x}'}, H_Q]$只能包含力学变量 $A_{\mu\mathbf{x}'}$, $\psi_{a\mathbf{x}'}$, $\bar{\psi}_{a\mathbf{x}'}$,而不能包含这些变量的任何导数.由此得出,$[\kappa_{\mathbf{x}},[\lambda_{\mathbf{x}'}, H_Q]]_\pm$ 如果不为零,将是 $\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ 的倍数而不会有含有 $\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$的导数的項. 因而，(105)式的最后一項为零. 我們可以作出結論，$[\kappa(\mathbf{x}, x_0^*), \lambda(\mathbf{x}', x_0^*)]_\pm$ 的值与沒有相互作用时之值相同，因此，按我們前面的討論,它是洛伦兹不变量.

应当指出，对上述証明可能有一个反对意見. 在好几处地方,我們用了 ϵ 的冪級数的表达式,并略去了 ϵ^2. 当两个时空中的一般点 x 与 x' 靠得很近，以致 $x_\mu - x_\mu'$ 与 ϵ 有同一数量級时,用这种程序計算 $[\kappa(x), \lambda(x')]_\pm$ 就不能是合理的了，因为計算結果应当是$(x_\mu - x_\mu')$的一个函数,当四維矢量 $x - x'$ 在光錐上时，这个函数应有一个奇异点,而这样的函数当然不能展开成$(x_\mu - x_\mu')$的冪級数.

为使这个推理有效，我們应当把它改写，从而避免使用 δ 函数. 我們不去計算$[\kappa(\mathbf{x}, x_0^*), \lambda(\mathbf{x}', x_0^*)]_\pm$,而应当去計算

$$
\left[\int a_{\mathbf{x}}\kappa(\mathbf{x}, x_0^*)d^3x, \int b_{\mathbf{x}'}\lambda(\mathbf{x}', x_0^*)d^3x'\right]_\pm, \tag{106}
$$

其中 $a_{\mathbf{x}}$ 与 $b_{\mathbf{x}}$ 是 x_1, x_2, x_3 的两个任意連續函数. 于是,我們需要展开成 ϵ 的冪級数的量全是連續变化的，而在时間軸方向的变化都是連續的，因而展开就成为合理的了. 我們現在所得的方程是前面推理中的方程乘以 $a_{\mathbf{x}}b_{\mathbf{x}'}d^3xd^3x'$, 并且积分. 我們达到了同样的結論——泊松括号或反对易子之值与沒有相互作用时之值相同.

可以看到，相互作用不影响量子条件的理由是因为相互作用是很簡单的,只包含基本力学变量,而不包含它們的导数. 泊松括号与反对易子之值与沒有相互作用时的值相同，而这要有一个条

件，即它所联系的在时空中两点的变量，必須对某一观察者来說是同时的，这意思是說，这两点必須互相在对方的光錐之外，而且当这两点趋于重合时只許沿着光錐外面的路径接近.

§ 80. 物理的变量

代表一个物理态的右矢$|P\rangle$，一定滿足补充条件

$$(B_0 + A_r{}')|P\rangle = 0, \ (\operatorname{div}\mathscr{E} - 4\pi j_0)|P\rangle = 0. \qquad (107)$$

如果一个力学变量当它乘在滿足这些条件的任意右矢上时就得出另一个滿足这些条件的右矢，那么，这个力学变量就是物理的力学变量. 这一点要求它应与下列各量对易:

$$B_0 + A_r{}^r, \ \operatorname{div}\mathscr{E} - 4\pi j_0. \qquad (108)$$

让我們看看，有哪些簡单力学变量有这样的性质.

横向場变量 $\mathscr{A}_r$, $\mathscr{B}_r$ 显然与(108)式的各量对易，因而是物理的变量. 变量 ψ_a 与(108)式中第一个量对易，而与第二个不对易，因而不是物理的变量. 我們有

$$\begin{aligned} i\hbar[\psi_{a\mathbf{x}}, \bar{\psi}_{b\mathbf{x}'}\cdot\psi_{b\mathbf{x}'}] &= (\psi_{a\mathbf{x}}\bar{\psi}_{b\mathbf{x}'} + \bar{\psi}_{b\mathbf{x}'}\psi_{a\mathbf{x}})\psi_{b\mathbf{x}'} \\ &= \delta_{ab}\,\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\psi_{b\mathbf{x}'} = \psi_{a\mathbf{x}}\,\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \end{aligned}$$

因此

$$[\psi_{a\mathbf{x}}, j_{0\mathbf{x}'}] = ie/\hbar\cdot\psi_{a\mathbf{x}}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'). \qquad (109)$$

从(42)式得

$$[e^{ieV\mathbf{x}/\hbar}, \operatorname{div}\mathscr{E}_{\mathbf{x}'}] = 4\pi ie/\hbar\cdot e^{ieV\mathbf{x}/\hbar}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}').$$

因而

$$\begin{aligned} [e^{ieV\mathbf{x}/\hbar}\psi_{a\mathbf{x}}, \operatorname{div}\mathscr{E}_{\mathbf{x}'} - 4\pi j_{0\mathbf{x}'}] &= [e^{ieV\mathbf{x}/\hbar}, \operatorname{div}\mathscr{E}_{\mathbf{x}'}]\psi_{a\mathbf{x}} - \\ &- 4\pi e^{ieV\mathbf{x}/\hbar}[\psi_{a\mathbf{x}}, j_{0\mathbf{x}'}] = 0. \end{aligned}$$

因此，如果我們令

$$\psi^*_{a\mathbf{x}} = e^{ieV\mathbf{x}/\hbar}\psi_{a\mathbf{x}}, \qquad (110)$$

则 $\psi^*_{a\mathbf{x}}$ 与(108)式的两个表达式都对易，因而是物理的. 相同地，$\bar{\psi}^*_{a\mathbf{x}}$ 也是物理的. 变量 $\mathscr{A}_r$, $\mathscr{B}_r$, ψ^*_a, $\bar{\psi}^*_a$ 是除了(108)式本身以外的仅有的独立物理变量.

我們有

$$j_0 = -\frac{1}{2}e(\overline{\psi}^{*\dagger}\psi^* - \psi^{*\dagger}\overline{\psi}^*),\ j_r = -e\overline{\psi}^{*\dagger}\alpha_r\psi^*. \quad (111)$$

因此，电荷密度与电流是物理的变量．也容易看到，$\mathscr{E}$ 与 $\mathscr{H}$ 是物理的变量，就象在沒有电子与正电子存在的情况一样．在麦克斯韦理論中，不受电磁势中的任意性所影响的那些力学变量，全都是物理的变量．

算符 $\psi_{a\mathbf{x}}$ 代表在位置 $\mathbf{x}$ 产生一个正电子或湮灭一个电子．让我們来看一看，算符 $\psi^*_{a\mathbf{x}}$ 的物理意义是什么．从(44)式得

$$i\hbar[e^{icV_{\mathbf{x}}/\hbar}, \mathscr{E}_{r\mathbf{x}'}] = ee^{icV_{\mathbf{x}}/\hbar}(x_r - x_r')|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-3},$$

因而

$$i\hbar[\psi^*_{a\mathbf{x}}, \mathscr{E}_{r\mathbf{x}'}] = e\psi^*_{a\mathbf{x}}(x_r - x_r')|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^{-3},$$

或即

$$\mathscr{E}_{r\mathbf{x}'}\psi^*_{a\mathbf{x}} = \psi^*_{a\mathbf{x}}\{\mathscr{E}_{r\mathbf{x}'} + e(x_r' - x_r)|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^{-3}\}. \quad (112)$$

取一个态 $|P\rangle$，其中 $\mathscr{E}_r$ 在某一点 $\mathbf{x}'$ 肯定地有数字值 c_r，这样就有

$$\mathscr{E}_{r\mathbf{x}'}|P\rangle = c_r|P\rangle.$$

然后从(112)式得

$$\mathscr{E}_{r\mathbf{x}'}\psi^*_{a\mathbf{x}}|P\rangle = \{c_r + e(x_r' - x_r)|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^{-3}\}\psi^*_{a\mathbf{x}}|P\rangle,$$

所以，对于态 $\psi^*_{a\mathbf{x}}|P\rangle$，$\mathscr{E}_r$ 在点 $\mathbf{x}'$ 肯定地有值为

$$c_r + e(x_r' - x_r)|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^{-3}.$$

这一点的意义是，算符 $\psi^*_{a\mathbf{x}}$ 除了在 $\mathbf{x}$ 点产生一个正电子或湮灭一个电子外，还对 $\mathbf{x}$ 点的电場增加 $e(x_r' - x_r)|\mathbf{x}' - \mathbf{x}|^{-3}$，它恰好就是位于 $\mathbf{x}$ 点的电荷为 e 的一个正电子在 $\mathbf{x}'$ 点所产生的經典庫仑电場．因此，算符 $\psi^*_{a\mathbf{x}}$ 在 $\mathbf{x}$ 点产生一个正电子，同时产生它的庫仑場，或者湮灭在 $\mathbf{x}$ 点的一个电子，同时消灭它的庫仑場．

对于与电磁場相互作用的电子与正电子，相应于电子与正电子的产生与湮灭的物理过程的，不是变量 ψ, $\overline{\psi}$，而是变量 ψ^*, $\overline{\psi}^*$，因为这些过程一定总是伴随着适当的庫仑場的变化，这些变化是在粒子产生与消失的地点周围的．容易看出，变量 $\psi^*_{a\mathbf{x}}$, $\overline{\psi}^*_{a\mathbf{x}}$ 满足的反对易关系与沒有星号的变量所满足的(70)式相同．当我們过渡到动量表象时，重要的量将不是由(67)式定义的非物理的变量 $\psi_{\mathbf{p}}$,

而是物理的变量 $\psi_{\mathbf{p}}^*$，它的定义为

$$\psi_{\mathbf{x}}^* = h^{-\frac{3}{2}}\int e^{i(\mathbf{x}\mathbf{p})/\hbar}\psi_{\mathbf{p}}^* d^3p,\ \psi_{\mathbf{p}}^* = h^{-\frac{3}{2}}\int e^{-i(\mathbf{x}\mathbf{p})/\hbar}\psi_{\mathbf{x}}^* d^3x. \tag{113}$$

現在我們必須把(68)式代之以

$$\xi_{\mathbf{p}}^* = \frac{1}{2}\left\{1 + \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}\psi_{\mathbf{p}}^*,$$

$$\zeta_{\mathbf{p}}^* = \frac{1}{2}\left\{1 - \frac{\alpha_r p_r + \alpha_m m}{(\mathbf{p}^2 + m^2)^{\frac{1}{2}}}\right\}\psi_{\mathbf{p}}^*,$$

并取 $\xi_{\mathbf{p}}^*$ 代表具有动量 $\mathbf{p}$ 的一个电子的湮灭，$\bar{\xi}_{\mathbf{p}}^*$ 代表具有动量 $\mathbf{p}$ 的一个电子的产生，$\zeta_{\mathbf{p}}^*$ 代表具有动量 $-\mathbf{p}$ 的一个正电子的产生，$\bar{\zeta}_{\mathbf{p}}^*$ 代表具有动量 $-\mathbf{p}$ 的一个正电子的湮灭． 这些变量 $\psi_{\mathbf{p}}^*$, $\bar{\psi}_{\mathbf{p}}^*$, $\xi_{\mathbf{p}}^*$, $\bar{\xi}_{\mathbf{p}}^*$, $\zeta_{\mathbf{p}}^*$ 与 $\bar{\zeta}_{\mathbf{p}}^*$ 满足的反对易关系，全部与沒有星号的相应变量所满足的反对易关系相同．

我們可以完全用物理变量表示出哈密頓量． 我們有

$$\psi^{*r} = e^{ieV/\hbar}(\psi^r + ie/\hbar\cdot V^r\psi).$$

因此，

$$\begin{aligned} H_P + H_Q &= \int\{(\bar{\psi}^\dagger\alpha_r[-i\hbar\psi^r - e(\mathscr{A}^r - V^r)\psi] + \\ &\quad + \bar{\psi}^\dagger\alpha_m m\psi + A^0 j_0\}d^3x \\ &= \int\{\bar{\psi}^{*\dagger}\alpha_r(-i\hbar\psi^{*r} - e\mathscr{A}^r\psi^*) + \\ &\quad + \bar{\psi}^{*\dagger}\alpha_m m\psi^* + A^0 j_0\}d^3x. \end{aligned}$$

这里在被积函数中的最后一項，应当与 H_{FL} 合并． 从(49)式与(57)式得

$$\begin{aligned} H_{FL} &\approx -(8\pi)^{-1}\int(U - A_0)(U + A_0)^{rr}d^3x \\ &\approx \frac{1}{2}\int(U - A_0)j_0 d^3x, \end{aligned}$$

这是用了(99)式的． 因此

$$H_{FL} + \int A^0 j_0 d^3x \approx \frac{1}{2}\int(U + A_0)j_0 d^3x.$$

积分(99)式，并利用 §38 的公式(72)，我們得到

$$A_{0\mathbf{x}} + U_{\mathbf{x}} \approx \int \frac{j_{0\mathbf{x}'}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x',$$

因此,

$$H_{FL} + \int A^0 j_0 d^3x \approx \frac{1}{2} \iint \frac{j_{0\mathbf{x}} j_{0\mathbf{x}'}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x d^3x'.$$

因此,我們得到

$$H \approx H^*,$$

其中

$$H^* = \int \{ \bar{\psi}^{*\dagger} \alpha_r (-i\hbar \psi^{*r} - e\mathscr{A}^r \psi^*) + \bar{\psi}^{*\dagger} \alpha_m m \psi^* \} d^3x +$$

$$+ H_{FT} + \frac{1}{2} \iint \frac{j_{0\mathbf{x}} j_{0\mathbf{x}'}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d^3x d^3x'. \tag{114}$$

对一个代表物理态的右矢$|P\rangle$,在薛定諤方程中,我們可以用H^*代替H,因为对这样一个右矢,我們有

$$i\hbar d|P\rangle / dx_0 = H|P\rangle = H^*|P\rangle. \tag{115}$$

H^*只含物理变量. 縱場变量不在哈密頓量中出現. 代替它們的是(114)式中的最后一項,它就是所出現的所有电荷的庫仑相互作用能. 在相对論性的理論中,出現这样一项是相当奇怪的,因为它是伴随着力的瞬时传播的能量. 这一項的出現是我們已把理論从海森伯表象变换得相当远的結果,在海森伯形式中,理論是显示出相对論不变性的.

我們可以取标准右矢为只有电磁場时的标准右矢$|0_F\rangle$[即由(61)式与(62)式得的]乘以只有电子与正电子时的标准右矢$|0_P\rangle$[由(74)式得出的]来建立一个表象. 但是,这个表象不是一个方便的表象,因为它的标准右矢不满足补充条件(107)式的第二式.

如果我們取另外一个标准右矢$|0_Q\rangle$满足下列条件:

$$(B_0 + A_r^r)|0_Q\rangle = 0, \ (\operatorname{div}\mathscr{E} - 4\pi j_0)|0_Q\rangle = 0, \tag{116}$$

$$\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}|0_Q\rangle = 0, \ \xi^*_{a\mathbf{p}}|0_Q\rangle = 0, \ \zeta^*_{a\mathbf{p}}|0_Q\rangle = 0. \tag{117}$$

則我們得到一个比較方便的表象. 这些条件是协調的,因为在这些式子中作用于$|0_Q\rangle$的各算符,全是互相对易或反对易的,并且这些条件足以完全决定$|0_Q\rangle$,只剩下一个数字因子,因为它們的数目与对$|0_F\rangle|0_P\rangle$的条件一样多. 条件(116)表明,$|0_Q\rangle$满足补充条件,

因而它代表一个物理态．条件(117)表明，$|0_Q\rangle$ 代表一个沒有光子、沒有电子、沒有正电子存在的态．

满足补充条件(107)式因而代表一个物理态的任意右矢 $|P\rangle$ 可以表示为某个物理的变量乘上 $|0_Q\rangle$．作用于 $|0_Q\rangle$ 时所得結果不为零的唯一独立的物理变量是 $\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}, \bar{\xi}^*_{a\mathbf{p}}, \zeta^*_{a\mathbf{p}}$ 这几个．因而

$$|P\rangle = \Psi(\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}, \bar{\xi}^*_{a\mathbf{p}}, \zeta^*_{a\mathbf{p}})|0_Q\rangle. \tag{118}$$

因此，$|P\rangle$ 为含变量 $\mathscr{A}_{r\mathbf{k}}, \bar{\xi}^*_{a\mathbf{p}}, \zeta^*_{a\mathbf{p}}$ 的波泛函 Ψ 所代表．这个泛函是这些变量的冪級数，其中不同的項相应于数目不同的光子、电子、正电子的存在，而在电子与正电子周围还有庫仑場．

在用表象(118)式連同哈密頓量 H^* 时，我們可以略去条件(116)式，因为它們在解薛定諤方程(115)中不起任何作用．这时，纵向变量不再出現于理論中．

§ 81. 理論的困难

标准右矢 $|0_Q\rangle$ 代表沒有光子、沒有电子、沒有正电子的态．人們傾向于假定，这个态是完全眞空，但是这是不可能的，因为这个态不是定态．为了让它是定态，我們应当要求有

$$H^*|0_Q\rangle = C|0_Q\rangle,$$

其中 C 为数字，現在 H^* 包括下列各項：

$$-e\int\bar{\psi}^{*+}\alpha_r\mathscr{A}'\psi^* d^3x + \frac{1}{2}\iint\frac{j_{0\mathbf{x}}j_{0\mathbf{x}'}}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}d^3xd^3x', \tag{119}$$

当它們作用于 $|0_Q\rangle$ 时不給出数字因子，因而它們破坏了 $|0_Q\rangle$ 的定态性質．

我們可以把这些項当成微扰，按照 §44 的理論，这个微扰引起态 0_Q 跃迁到另一态的几率．这些項中的第一項分解为它的傅里叶分量时包括一部分为

$$-e(\alpha_r)_{ab}\iint\mathscr{A}^r_{\mathbf{k}}\bar{\xi}^*_{a\mathbf{p}}\zeta^*_{b\mathbf{p}+\mathbf{k}\hbar}d^3kd^3p, \tag{120}$$

这一部分引起的跃迁是发射出一个光子同时产生一个电子-正电子对．在一个短时間以后，此跃迁几率正比于由(120)式乘到开始

的右矢$|0_Q\rangle$而得的右矢的长度平方，就是

$$e^2(\bar{\alpha}_r)_{ab}(\alpha_s)_{cd}\times$$
$$\times\iiiint\langle 0_Q|\bar{\zeta}^*_{a\mathbf{p}+\mathbf{k}\hbar}\xi^*_{b\mathbf{p}}\bar{\mathscr{A}}^r_{\mathbf{k}}\mathscr{A}^s_{\mathbf{k}'}\bar{\xi}^*_{c\mathbf{p}'}\zeta^*_{d\mathbf{p}'+\mathbf{k}'\hbar}|0_Q\rangle d^3kd^3pd^3k'd^3p'$$
$$=e^2(\bar{\alpha}_r)_{ab}(\alpha_s)_{cd}\iiiint\langle 0_Q|i\hbar[\bar{\mathscr{A}}^r_{\mathbf{k}},\mathscr{A}^s_{\mathbf{k}'}]\times$$
$$\times[\xi^*_{b\mathbf{p}},\bar{\xi}^*_{c\mathbf{p}'}]_+[\bar{\zeta}^*_{a\mathbf{p}+\mathbf{k}\hbar},\zeta^*_{d\mathbf{p}'+\mathbf{k}'\hbar}]_+|0_Q\rangle d^3kd^3pd^3k'd^3p'.$$

用由(4)、(16)、(72)、(73)式所得出的泊松括号与反对易子之値，我們得到一个被积函数，它与变量$\mathbf{k}$, $\mathbf{k}'$的关系是，在$\mathbf{k}$与$\mathbf{k}'$之值大时按照$|\mathbf{k}|^{-1}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$的規律．这样得出的积分是发散的，所以跃迁几率是无穷大．

(119)式的第二项当分解为傅里叶分量时包括象$\bar{\xi}^*_{\mathbf{p}}\,\bar{\xi}^*_{\mathbf{p}'}\,\zeta^*_{\mathbf{p}''}\,\zeta^*_{\mathbf{p}+\mathbf{p}'-\mathbf{p}''}$的項，这些项引起的跃迁为同时产生两个电子-正电子对．我們也可与前面一样計算这个跃迁几率，我們发現它又是无穷大．

从这些計算我們可以得出結論，态0_Q甚至不是近似的定态．更严重的困难是，处理波动方程的微扰方法，当它所得出的跃迁几率为无穷大时，就不能再当成是有效的方法了，而在量子电动力学中，情况总是这样的，不管我們取什么起始态，这些跃迁几率总是无穷大．沒有任何已知的其他方法能用来代替微扰法．結果量子电动力学的波动方程就沒有已知的解了．

这一困难的来源在于負能电子海中的密度起伏，在沒有电磁場的电子与正电子的理論中，已經出現了这种密度起伏．所有的电子(处于正能态的以及处于負能态的)的密度是

$$\rho_{\mathbf{x}}=\bar{\psi}^\dagger_{\mathbf{x}}\psi_{\mathbf{x}}=(\bar{\xi}^\dagger_{\mathbf{x}}+\bar{\zeta}^\dagger_{\mathbf{x}})(\xi_{\mathbf{x}}+\zeta_{\mathbf{x}}).$$

因此，从(74)式得

$$\rho_{\mathbf{x}}|0_P\rangle=\bar{\xi}^\dagger_{\mathbf{x}}\zeta_{\mathbf{x}}|0_P\rangle+(\bar{\zeta}^\dagger_{\mathbf{x}}\zeta_{\mathbf{x}}+\zeta^\dagger_{\mathbf{x}}\bar{\zeta}_{\mathbf{x}})|0_P\rangle.\qquad(121)$$

由ζ与$\bar{\zeta}$的反对易关系(73)式，知

$$\bar{\zeta}^\dagger_{\mathbf{x}}\zeta_{\mathbf{x}}+\zeta^\dagger_{\mathbf{x}}\bar{\zeta}_{\mathbf{x}}\qquad(122)$$

是一个数，即令它是一个无穷大的数，所以(121)式右边的第二项是一个数乘以$|0_P\rangle$．但是，第一项肯定不是一个数乘以$|0_P\rangle$，所以

$|0_P\rangle$ 不是 $\rho_{\mathbf{x}}$ 的本征右矢. 这一点的意义是,在真空中負能电子海的密度不是恆量,而是連續起伏的.

按照 §73 的思想, 我們应当从所有电子密度中減去真空分布的密度, 才能得到一个物理上重要的量——正能电子的密度減去正电子的密度, 这个量决定了在 §73 的麦克斯韦方程(58)中用到的电荷密度. 在量子电动力学的精确理論中, 我們減掉的量必須是可以放进方程中的明确定义的算符. 我們能够做到的最好方法是,取真空分布的密度中的恆量部分(122)式作为这个算符, 而令起伏部分保留不減去. 这样就得到

$$j_{0\mathbf{x}} = -e\{\bar{\psi}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\psi_{\mathbf{x}} - (\bar{\zeta}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\zeta_{\mathbf{x}} + \zeta_{\mathbf{x}}^{\dagger}\bar{\zeta}_{\mathbf{x}})\}. \tag{123}$$

在反对易关系(72)式与(73)式中,令 $a=b$, 并求和,我們就得到

$$\bar{\xi}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\xi_{\mathbf{x}} + \xi_{\mathbf{x}}^{\dagger}\bar{\xi}_{\mathbf{x}} = \bar{\zeta}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\zeta_{\mathbf{x}} + \zeta_{\mathbf{x}}^{\dagger}\bar{\zeta}_{\mathbf{x}},$$

从这个关系我們容易发現, (123)式与我們以前得到 j_0 的表达式(77)式是一致的.

但是,由于真空分布的密度中的起伏部分沒有減去,它保留在作用于真空右矢的电荷密度中,即是

$$j_{0\mathbf{x}}|0_P\rangle = -e\bar{\xi}_{\mathbf{x}}^{\dagger}\zeta_{\mathbf{x}}|0_P\rangle.$$

因此,对真空而言,电荷密度不是零. 我們得到了有明显矛盾的結果,虽然真空态是定义为沒有电子、沒有正电子的态, 但它却仍然有不为零的电荷密度. 这个結果是我們无法減去負能电子海的起伏而引起的必然后果,即令沒有与电磁場相互作用时也是如此.

也有某些困难是与真空分布密度的恆量部分(122)式相联系的. 从对称性考慮,我們期望,真空分布的电子运动产生的电流沒有恆量部分, 这样我們就有一个不带电流的电荷密度. 这一点就使我們获得一个較为有利的洛伦兹参考系, 而在相对論性的理論中,这种比較有利的参考系却应当不出現.

避开这种不协調的方法在于, 真空分布的电子运动所产生的电流实际上是两个无穷大之差, 因而不是一个完全定义的量. 我們可以用与某特定洛伦兹参考系相关的求极限的过程来計算出它的恆量部分, 得到它的一个特定值,但是,这个值不应当比其他的

值更具有优先性. 电流的恆量部分中的含糊不清，并不在理論中产生严重困难,因为我們可以避开它，办法是重新定义 j_r，定义它为

$$j_{r\mathbf{x}} = -\frac{1}{2} e(\overline{\psi}_{\mathbf{x}}^{\dagger} \alpha_r \psi_{\mathbf{x}} - \psi_{\mathbf{x}}^{\dagger} \alpha_r^{\dagger} \overline{\psi}_{\mathbf{x}}),$$

而不用(78)式. 这就使 j_0 的表达式与(77)有相同的形式，并使我們能写出相对論性的方程

$$j_{\mu} = -\frac{1}{2} e(\overline{\psi}^{\dagger} \alpha_{\mu} \psi - \psi^{\dagger} \alpha_{\mu}^{\dagger} \overline{\psi}). \tag{124}$$

起伏的困难是一个更为严重的困难. 当我們引进与电磁場的相互作用时,眞空的电荷密度起伏,按照麦克斯韦方程(100),就要引起一个起伏的电場，而这个起伏的电場又反过来作用于負能电子海,引起电子-正电子对的产生. 当我們計算这个作用时它导致发散积分,而使我們无法得到有相互作用的波动方程的解.

在理論中早已有某些无穷大出現，但是这些无穷大并不曾引起严重的困难,因为它們在方程中不起重要作用,我們采取适当的修正就能避免它們. 用(47)式得出的 H_{FT}，會有横向电磁場的零点能为无穷大，我們用(65)式就避免了它. 用(80)式得出的 $H_{P'}$，會有电子和正电子的零点能为无穷大，这个无穷大的項在 H_P 的(82)式的形式中明显地看出来了. 我們可以避免这个无穷大，办法是用形如(81)式的 H_P 来进行計算. 还有眞空电子密度(122)式的恆量部分也是无穷大，我們可以用 j_{μ} 的公式(124)把它从理論中排除出去. 但是，沒有什么簡单的修改方法能使我們避免起伏的无穷大.

人們已經成功地建立了一些規則，由这些規則可以按一种自相协调的方式去掉起伏所产生的这种无穷大，并且已經得到了一个可以运用的理論，从这种理論可以計算出能与实驗相比較的一些結果. 已經发現这些結果与实驗相符很好，这就表明在这些規則中有某些可靠性. 但是这些規則只能应用于特殊問題，通常是碰撞問題,并且它不能与量子力学的邏輯基础相适合. 因此,它們

不应当被看成是解决这个困难的令人满意的方法.

事情似乎是我們已經尽可能地遵循了量子力学思想的邏輯发展道路（按現在所了解的意义）. 而这些困难却是具有深刻性質的，要能克服它們，唯一的办法是在理論的基础上作某种剧烈的改变，很可能这种改变的剧烈程度将不亚于从玻尔軌道理論轉变到現在的量子力学.

索　引

七 划

八 划

九 划