

费  
曼

1965年诺贝尔物理学奖获得者

RICHARD P. FEYNMAN 著作选译 第二辑

QUANTUM MECHANICS  
AND PATH INTEGRALS

量子力学与路径积分

R. P. 费曼 A. R. 希布斯 著 张邦固 译

高等教育出版社



理查德·菲利浦斯·费曼 (Richard Phillips Feynman, 1918—1988)，著名美国物理学家，加州理工学院物理系教授。因在量子电动力学方面的贡献与施温格、朝永振一郎共同获得 1965 年诺贝尔物理学奖。

本书在费曼编的讲义基础上由希布斯加以整理而成。从天体物理到凝聚态理论，几乎所有现代物理学领域都要用到路径积分技术。费曼——路径积分的创立者，史上最著名的物理学家之一，诺贝尔物理学奖获得者——在本书中提供了独特的视角，令读者洞悉路径积分方法及其应用。费曼回避了密集复杂的描述，而是以一种简明清晰的方式将他的著名理论娓娓道来，既有数学运算亦有物理图像，实现了两者之间的完美平衡。

本书系从斯蒂尔的校订版翻译，修正了 1965 年版的数百处印刷错误，并且重排了大量公式以便利读者阅读。它保留了原版的激情与精神，这一点得到了费曼家人的认可。本书开头的几章考察了量子力学的基本概念，并引入了路径积分。接下来的数章则涵盖了更深入的课题，包括微扰方法、量子电动力学，以及路径积分与统计力学的关系。本书是学习路径积分的一本经典著作，不仅可供物理系师生使用，也是专业人员极好的参考资料。

学科类别：物理

ISBN 978-7-04-042411-9

9 787040 424119 >

定价 79.00元



本书微信、微博



微信号：ldjjhwx



@朗道集结号



1965年诺贝尔物理学奖获得者  
RICHARD P. FEYNMAN 著作选译 第二辑

## QUANTUM MECHANICS AND PATH INTEGRALS

LIANGZI LIXUE YU LUJING JIFEN

# 量子力学与路径积分

R. P. 费曼 A. R. 希布斯 著 张邦固 译

高等教育出版社·北京

## 图书在版编目（CIP）数据

量子力学与路径积分 / (美) 费曼 (Feynman, R.P.),  
(美) 希布斯 (Hibbs, A.R.) 著; 张邦固译. -- 北京:  
高等教育出版社, 2015.5

书名原文 : Quantum mechanics and path integrals

ISBN 978-7-04-042411-9

I. ①量… II. ①费… ②希… ③张… III. ①量子力学②路径积分 IV. ①O413.1 ②O172.2

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 075417 号

策划编辑 王超  
插图绘制 杜晓丹

责任编辑 王超  
责任校对 王雨

封面设计 王洋  
责任印制 韩刚

版式设计 余杨

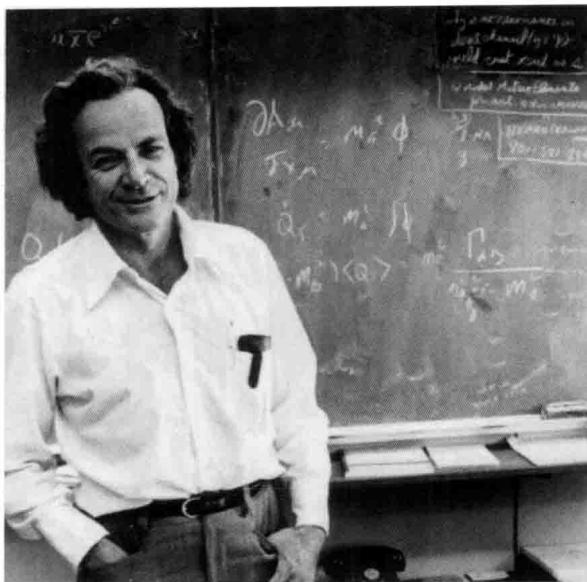
---

出版发行 高等教育出版社  
社址 北京市西城区德外大街 4 号  
邮政编码 100120  
印刷 涿州市星河印刷有限公司  
开本 787mm×1092mm 1/16  
印张 20.5  
字数 380 千字  
插页 1  
购书热线 010-58581118

咨询电话 400-810-0598  
网 址 <http://www.hep.edu.cn>  
<http://www.hep.com.cn>  
网上订购 <http://www.landraco.com>  
<http://www.landraco.com.cn>  
版 次 2015 年 5 月第 1 版  
印 次 2015 年 5 月第 1 次印刷  
定 价 79.00 元

---

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题, 请到所购图书销售部门联系调换  
版权所有 侵权必究  
物料号 42411-00

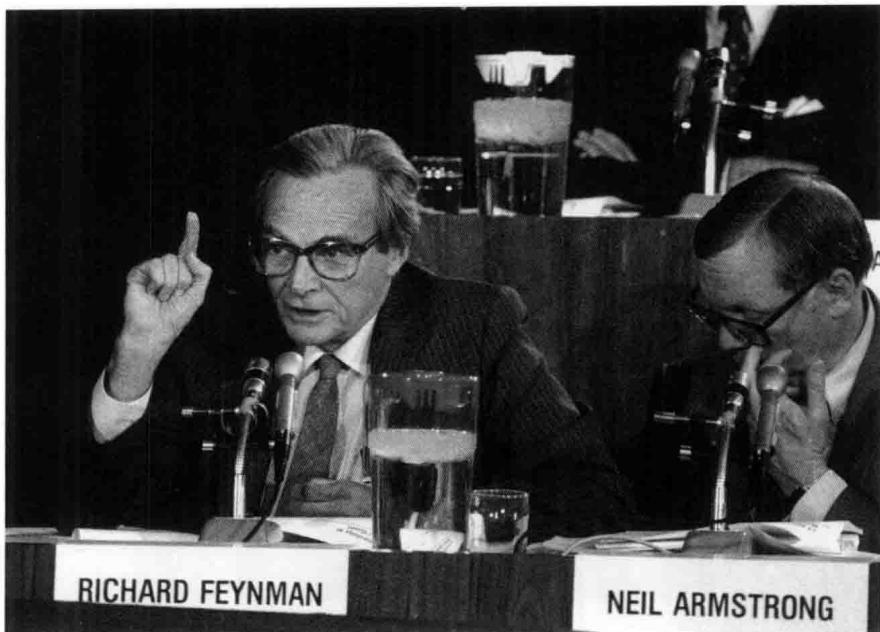


理查德·菲利浦斯·费曼 (Richard Phillips Feynman, 1918—1988)，著名美国物理学家，加州理工学院物理系教授，诺贝尔物理学奖得主。

1918年5月11日，费曼出生于纽约市皇后区。童年时，费曼接受了来自父亲的科学启蒙教育，父亲所启发的思考方式影响了费曼的一生。高中毕业后进入麻省理工学院学习，并于1939年获得学士学位。随后进入普林斯顿大学念研究生，师从约翰·惠勒 (J. A. Wheeler)，1942年获得理论物理学博士学位。1943年进入洛斯阿拉莫斯国家实验室，参与了曼哈顿计划。1945年费曼开始在康奈尔大学任教，1951年转入加州理工学院。在加州理工学院期间，因其幽默生动、不拘一格的讲课风格深受学生欢迎。1963年出版《费曼物理学讲义》。1965年，费曼因在量子电动力学方面的贡献与施温格 (Julian Schwinger)、朝永振一郎 (Sin-Itiro Tomonaga) 共同获得诺贝尔物理学奖。1972年获得奥斯特教学奖章。1986年，费曼受邀调查挑战者号航天飞机失事事件。1988年2月15日，费曼因癌症于加州洛杉矶与世长辞。

在学生时期，费曼就表现出了不凡的研究能力。他的大学毕业论文题目是《分子中的力》，在这篇论文中，他提出了后来所称的费曼－海尔曼定理。在整个科研生涯中，费曼在物理学的多个领域均有建树。除了因之荣获诺贝尔物理学奖的量子电动力学方面的工作之外，广为人知的另外两项重大贡献：一是量子力学的路径积分形式，这种形式从经典力学中的最小作用量原理延伸出来，通过“对历史求和”来处理量子力学问题，这是有别于薛定谔的波动力学及海森伯的矩阵力学的第三种量子力学形式；二是费曼图，这一工具大大简化了量子场论的计算。费曼的研究工作还包括：低温下液氦的超流动性理论；弱相互作用的V-A理论；强相互作用的部分子理论等。

费曼不仅是一位顶尖的科学家，同时也是一名优秀的教师。费曼非常热爱教学工作，他曾写道：“我不相信，如果不教书我还能过得下去……教学和学生使我的生命得以延续。如果有人给我创造一个很好的环境，但是我不能教学的话，那我永



1986年，费曼受邀调查挑战者号航天飞机失事原因。与其他调查人员的工作方式不同，费曼并没有陈列繁杂的数据、资料，他只用一个橡皮环和一杯冰水，就向公众揭示了挑战者号失事的根本原因——低温下橡胶失去弹性。第二天的《华盛顿邮报》报道：“费曼用一个简单而优雅的实验，让所有人明白了失事的原因。”图为费曼在调查会议上，坐在他身边的是登月第一人阿姆斯特朗。

远不会接受它，永远不会。”20世纪60年代初，美国一些理工科大学鉴于当时的大一基础物理教学与现代科学技术的发展不相适应，纷纷试行教学改革。在这个背景下，费曼参与了加州理工学院基础物理教学的改革尝试。他从1961年9月到1963年5月，进行了为期两个学年的有关基础物理学的系列讲演。他的讲演经过莱顿(Robert B. Leighton)和桑兹(Matthew Sands)的整理，以《费曼物理学讲义》之名于1963年出版。《科学美国人》这样赞誉这套书：“尽管这套教材深奥难懂，但是它的内容丰富而且富有启发性……它已经成为讲师、教授和低年级优秀学生的学习指南。”这套书本来是面向大学一二年级学生的，可是最能认识到这套书价值的却是物理教师，他们从中找到了自己授课的灵感。故而有人称费曼为“老师的老师”。

除了《费曼物理学讲义》之外，费曼还有许多优秀的著述：《量子力学与路径积分》《量子电动力学讲义》《费曼统计力学讲义》《基本过程理论》《光子—强子相互作用》《费曼引力学讲义》《费曼计算学讲义》等。这些书无不有鲜明的“费曼风格”，即对基本概念、定理和定律的讲解生动清晰、通俗易懂，而且特别注重物理分析和描述，反映了费曼自己以及其他在前沿研究领域工作的物理学家所通常采用的分析和处理方法。无论对于学生还是教师，这些书都有着极大的参考价值。

费曼的一生多彩多姿。除了对理论物理学做出了巨大贡献之外，他还是一名探险者、鼓手、艺术家和玛雅文化专家。可以用这样一句话来总结描述费曼：一位独辟蹊径的思考者，超乎寻常的教师，尽善尽美的演员，一位热爱生活和自然的人。

# 前言

---

R. P. 费曼在普林斯顿讲授的研究生课程中, 第一次阐述了路径积分方法用于量子力学所依据的基本物理和数学概念, 然而更全面发展的概念(例如, 在本书中所描述过的那些概念)是以后几年才形成的。这些早期工作涉及电子的自能无限大的问题。在研究这个问题时, 费曼发现了一种最小作用量原理, 其中使用了半超前势和半滞后势。此原理能成功地解决经典电动力学中所出现的无限大问题。

于是, 这个问题变成了把这个作用量原理以如下方式应用于量子力学, 使得当  $\hbar$  趋近于零时, 经典力学可以自然地成为量子力学的特殊情况。

费曼曾想寻找某种方案, 以便预先建立量子力学性质与拉格朗日量(或特别是, 由拉格朗日量的不定积分定义的哈密顿作用量函数  $S$ )等经典概念之间的联系。在与某一欧洲访问学者会谈中, 费曼获悉, 狄拉克在一篇文章中曾提出,  $i\epsilon$  乘以拉格朗日量之积的指数函数与量子力学波函数的变换函数相似, 其相似之点是: 某一时刻的波函数乘以这个指数函数可以与下一时刻(相隔时间  $\epsilon$  以后)的波函数联系起来。

以后出现的问题是, 狄拉克使用“相似”一词的含意究竟是什么? 于是费曼决定要查明, 它是否能用“相等”一词来代替。简短的分析表明, 这个指数函数确实可以直接按上述方法应用。

然后, 进一步分析导致把拉格朗日量的时间积分  $S$ (本书中称为作用量)的指数用作有限时间间隔的变换函数。但应用这个函数时, 必须在每一时刻完成对全部空间变量的积分。

费曼在准备描述这一概念的一篇论文<sup>①</sup>中, 把“对全部路径积分”这一概念发展成既能描述、又能计算所需要的对空间坐标积分的方法。这时, 已经发展了应用路径积分技术的一些数学方法, 并且完成了一些特殊的应用, 虽然这

<sup>①</sup> R. P. Feynman Space-Time Approach to Non-relativistic Quantum Mechanics, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 20, p. 367-387, 1948.

一时期工作的主要方向是量子电动力学。实际上, 路径积分当时没有提供以后也未提供一个可以避免量子电动力学中的发散困难的令人满意的方法; 但已经发现, 对于解决这一领域中的其他问题, 它是很有用的。具体说, 它提供了量子电动力学中各个定律的表达形式, 其中相对论不变性质是明显的。另外, 还找到了它对量子力学其他问题的一些有价值的应用。

在发现兰姆位移及其理论解释的困难(即不用人为的方法显然无法摆脱的积分发散)之后不久, 把路径积分应用于这种难以处理的量子力学问题, 就成为早期最突出的应用。路径积分以合乎逻辑的前后一致的方式提供了一个处理这种棘手的无穷大问题的方法。

在加利福尼亚工学院, 有几年把路径积分用作教授量子力学的技术。在此期间, 费曼的学生希布斯 (A. R. Hibbs) 整理了一些笔记, 以便把用路径积分探讨量子力学的讲义编成一本书。

在以后几年中, 当精心整理本书时, 费曼博士的讲义和本书又吸收了其他一些内容, 如统计力学和变分原理。与此同时, 费曼博士教授量子力学的内容比初始的路径积分方法又有所发展。现在, 对于解决更一般的量子力学问题, 算符技术显然既深刻又更有力。然而, 路径积分方法为量子力学特性提供了直观的理解, 这对于直观理解量子力学定律极有价值。因此, 在那些路径积分方法特别有效的量子力学领域中, 本书叙述了其中大部分内容。本书为物理专业的学生提供了掌握量子力学基本原理的方法, 以便他们在理论物理广阔的领域内更有效地解决各种难题。

R. P. 费曼  
A. R. 希布斯

# 校订版前言

---

自《量子力学与路径积分》第一次出版之四十年间，书中所涉及的数学和物理学知识无论是在广度还是深度上都有了发展。然而，这部充满了费曼的激情和洞察力的发轫之作仍然是学习该领域的最佳材料。令人遗憾的是，1965 年版中充斥了大量印刷错误，也有许多不恰当和不一致的地方。这一版所做的更正不少于 879 处，并且重排了大量公式，使它们更易于理解和解读。全书统一了符号，还改正了语法错误。另一方面，本书不乏粗糙跳跃之处，这是富有创造力的头脑在面对巨大挑战时所会表现出来的。我们只做修正而不做修饰，从而保留了这种精神。这个版本并不试图增加新的课题，也不补充时兴的处理方式。不过，我们以附录的形式增补了一些注释。（凡有相关注释的地方，都在文中用<sup>o</sup> 符号标记。）至于公式号，除了 (10.63) 和 (10.64) 互换之外，都和 1965 年版一致。

我感谢 Edwin Taylor 的鼓励，感谢 Daniel Keren 和 Jozef Hanc，特别是 Tim Hatamian 让我注意到一些错误。Oberlin 学院给我放的学术假使这项修订工作成为可能。

我清楚地记得三十年前，当我翻开费曼和希布斯的这些书页时，第一次感觉到量子力学是大自然活生生的一部分，而不再是晦涩神秘的算法——算法虽然可爱、神秘、令人满足，却难以理解、超越直觉。这种感受，至今记忆犹新。这个校订版也将为新一代打开类似的大门——我希望能够如此，我也坚信必会如此。

*Daniel F. Styer (斯蒂尔)*

# 目录

---

<b>第一章 量子力学的基本概念</b>	1
1-1 量子力学中的概率	1
1-2 测不准原理	6
1-3 干涉选择	10
1-4 概率概念的小结	14
1-5 一些遗留问题	16
1-6 本书的目的	17
 <b>第二章 量子力学的运动规律</b>	 19
2-1 经典作用量	19
2-2 量子力学的概率幅	22
2-3 经典极限	22
2-4 对路径求和	24
2-5 相继发生的事件	28
2-6 一些说明	30
 <b>第三章 用一些特例阐述概念</b>	 31
3-1 自由粒子	31
3-2 通过狭缝的衍射 <sup>。</sup>	35
3-3 锐边狭缝的结果	41
3-4 波函数	43
3-5 高斯积分	44
3-6 势场中的运动	47
3-7 多变量系统	50
3-8 可分离系统	51
3-9 作为泛函的路径积分	52

---

3-10 粒子与谐振子的相互作用 . . . . .	53
3-11 用傅里叶级数对路径积分求值 . . . . .	55
<b>第四章 量子力学的薛定谔描述 . . . . .</b>	<b>57</b>
4-1 薛定谔方程 . . . . .	58
4-2 与时间无关的哈密顿量 . . . . .	64
4-3 自由粒子波函数的归一化 . . . . .	68
<b>第五章 测量与算符 . . . . .</b>	<b>74</b>
5-1 动量表象 . . . . .	74
5-2 量子力学变量的测量 . . . . .	82
5-3 算符 . . . . .	87
<b>第六章 量子力学中的微扰方法 . . . . .</b>	<b>92</b>
6-1 微扰展开 . . . . .	92
6-2 $K_V$ 的积分方程 . . . . .	97
6-3 波函数展开 . . . . .	98
6-4 电子散射 . . . . .	99
6-5 与时间有关的微扰及跃迁概率幅 . . . . .	110
<b>第七章 跃迁元 . . . . .</b>	<b>126</b>
7-1 跃迁元的定义 . . . . .	126
7-2 泛函导数 . . . . .	131
7-3 某些特殊泛函的跃迁元 . . . . .	134
7-4 二次型作用量的一般结果 . . . . .	141
7-5 跃迁元与算符记号 . . . . .	143
7-6 矢量势的微扰级数 . . . . .	148
7-7 哈密顿量 . . . . .	150
<b>第八章 谐振子 . . . . .</b>	<b>153</b>
8-1 简单谐振子 . . . . .	154
8-2 多原子分子 . . . . .	158
8-3 简正坐标 . . . . .	162
8-4 一维晶体 . . . . .	165
8-5 连续近似 . . . . .	170
8-6 原子线的量子力学 . . . . .	174

---

8-7 三维晶体 . . . . .	175
8-8 量子场论 . . . . .	179
8-9 受迫谐振子 . . . . .	181
<b>第九章 量子电动力学<sup>o</sup> . . . . .</b>	<b>184</b>
9-1 经典电动力学 . . . . .	185
9-2 辐射场的量子力学 . . . . .	190
9-3 基态 . . . . .	192
9-4 场与物质的相互作用 . . . . .	194
9-5 辐射场中的单电子 . . . . .	199
9-6 兰姆位移 . . . . .	201
9-7 光的发射 . . . . .	205
9-8 小结 . . . . .	206
<b>第十章 统计力学 . . . . .</b>	<b>209</b>
10-1 配分函数 . . . . .	210
10-2 计算路径积分 . . . . .	214
10-3 量子力学效应 . . . . .	218
10-4 多变量系统 . . . . .	225
10-5 关于推导方法的若干说明 . . . . .	232
<b>第十一章 变分法 . . . . .</b>	<b>235</b>
11-1 极小值原理 . . . . .	235
11-2 变分法的应用 . . . . .	238
11-3 标准变分原理 . . . . .	241
11-4 极性晶体中的慢电子 . . . . .	244
<b>第十二章 有关概率的其他问题 . . . . .</b>	<b>253</b>
12-1 随机脉冲 . . . . .	253
12-2 特征函数 . . . . .	255
12-3 噪声 . . . . .	257
12-4 高斯噪声 . . . . .	262
12-5 噪声谱 . . . . .	264
12-6 布朗运动 . . . . .	266
12-7 量子力学 . . . . .	269
12-8 影响泛函 . . . . .	272

12-9 谐振子的影响泛函 . . . . .	279
12-10 结论 . . . . .	283
<b>附录 . . . . .</b>	<b>285</b>
一些有用的定积分 . . . . .	285
注释 . . . . .	286
<b>中英对照主题索引 . . . . .</b>	<b>291</b>
<b>英中对照主题索引 . . . . .</b>	<b>304</b>
<b>译后记 . . . . .</b>	<b>316</b>

# 第一章

## 量子力学的基本概念

---

### 1-1 量子力学中的概率<sup>①</sup>

大约从 20 世纪初开始, 实验物理学积累了大量引人注目的种种奇怪现象, 这些现象表明, 经典物理学已不够用了. 为新现象寻找理论结构的工作一开始就引起了混乱, 即光和电子表现得有时像波, 有时又像粒子. 在 1926 年至 1927 年间, 这种表观矛盾由称为量子力学的理论圆满地解决了. 该新理论表明, 有些实验的精确结果根本不可预言, 在这些情况下, 我们只好满足于计算出各种结果的概率; 但更为重要的发现是, 量子力学的概率叠加定律在本性上不同于拉普拉斯经典概率理论的叠加定律. 当实验所涉及的对象的尺寸增大时, 物理世界的量子力学定律与拉普拉斯定律十分相近. 因此, 惯用的概率定律用来分析轮盘赌令人十分满意, 但它却不能分析单个电子或光子的行为.

一个假想的实验 概率的概念在量子力学中并无改变. 当我们说一个实验的某一结果的概率为  $p$  时, 我们是就传统意义讲的, 即如果这个实验重复多次, 那么我们可以期望得到这一结果的次数占实验总次数的比例大致为  $p$ . 我们不再更详细地分析和定义概率概念了, 因为它与经典统计力学中所用的概念是一致的.

所要改变的, 并且从根本上要改变的是量子力学计算概率的方法. 在处理原子尺度的对象时, 这种改变的效果最大. 为此, 我们将描述单个电子在某些假想的实验中可以预期的结果来说明量子力学定律.

<sup>①</sup> 本章给出的大部分内容首次出现在 R. P. 费曼的讲演中, 并以“量子力学中的概率概念”为题, 发表在 Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability, University of California Press, Calif., pp. 533–541, 1951.

[1]

[2]

[3]

一个假想的实验如图 1-1 所示.  $A$  处有个电子源  $S$ .  $S$  处的所有电子以相同的能力向各个方向射出, 撞击在屏  $B$  上, 屏  $B$  上有 1 和 2 两个孔, 电子可以通过它们. 最后, 在  $B$  之后的屏  $C$  处放置一台电子探测器, 该探测器可放在距屏中心为任意距离的  $x$  处。

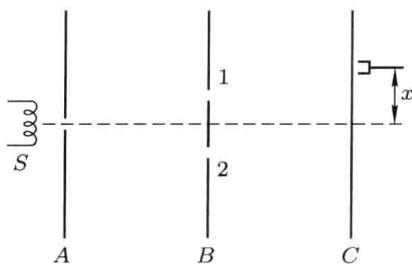


图 1-1 实验装置.  $A$  处射出的电子前进到屏  $C$  处的探测器, 其间插入一个带有两个孔的屏  $B$ . 对于到达的每一个电子, 探测器记录下一个计数; 当探测器距屏的中心为  $x$  时, 测量电子到达的比例, 并以  $x$  进行标定, 如图 1-2 所示

如果探测器极其灵敏 (如盖革计数器), 则将会发现, 到达  $x$  的电流不是连续的, 而是相当于一阵粒子雨. 若源  $S$  的强度很弱, 探测器会记录下代表个别粒子到达的一些脉冲, 脉冲间的时间间隔中没有粒子到达. 正因为这个原因, 我们说电子是粒子. 如果将几个探测器同时分布在屏  $C$  上, 并且源  $S$  很弱, 那么只有一个探测器响应, 片刻后, 另一探测器才会记下另一个电子的到达, 如此不断继续下去. 探测器决不会出现半个响应, 也就是说, 或者只能是一个完整的电子到达, 或者只能是什么也没有. 并且两个探测器也决不会同时响应 (除非电子源在探测器的分辨时间内恰好射出两个电子, 而进一步削弱源强, 可降低这种巧合的概率). 换句话说, 图 1-1 中的探测器记下了单个微粒从源  $S$  经屏  $B$  上的孔再到达  $x$  点的经历.

[4]

这个特殊的实验从未有人这样做过<sup>o</sup>. 在下面的论述中, 我们根据一些定律来阐述所得的结论, 这些定律适用于人们已经做过的每个这种类型的实验. 人们曾用一些实验直接来说明这里将要作出的结论, 但这些实验一般较为复杂. 出于教学的原因, 我们最好选择原理最简单的实验, 而不考虑实际做这些实验的种种困难.

顺便说一句, 如果愿意, 在这实验中用光代替电子亦可说明同样的论点. 源  $S$  可以是一束单色光, 灵敏探测器则为一个光电盒或最好是一个光电倍增管, 它们记录下的每一个脉冲都代表单个光子的到达.

我们所要做的是, 对不同位置  $x$  处的探测器, 测量每秒钟脉冲的平均数, 换句话说, 要把实验上确定电子从  $S$  到达  $x$  的相对概率  $P$  作为  $x$  的函数.

概率  $P$  作为  $x$  函数的图像是一复杂的曲线, 定性地画在图 1-2(a) 中. 它有几个极大值和极小值, 屏中心附近的一些地方几乎没有电子到达. 发现控制这条曲线结构的定律是个物理问题.

首先我们可假定(因为电子表现为粒子):

I. 从  $S$  到  $x$  的每个电子必须或者经过孔 1 或者经过孔 2. 作为 I 的推论, 我们期望有

II. 到达  $x$  的概率应是两部分之和, 即通过孔 1 到达  $x$  的概率  $P_1$  加上通过孔 2 到达  $x$  的概率  $P_2$ . [5]

我们可以用直接的实验来判断这一点是否对. 每个组分的概率是易于测定的. 只要遮住孔 2, 让电子只从孔 1 通过, 就得到电子通过孔 1 到达  $x$  的概率  $P_1$ , 这个结果由图 1-2(b) 给出. 同样, 遮住孔 1, 我们得到通过孔 2 到达  $x$  的概率  $P_2$  [图 1-2(c)].

它们的和 [图 1-2(d)] 与曲线 (a) 显然不一致. 因此, 实验明确表明,  $P \neq P_1 + P_2$ , 或者说, II 是错误的.

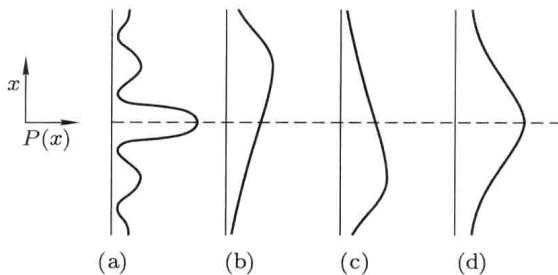


图 1-2 实验结果. 电子到达  $x$  的概率是相对探测器位置  $x$  画出的. 图 1-1 的实验结果画在 (a); 若仅 1 孔开启, 则电子仅能通过孔 1, 其结果为 (b); 若仅孔 2 开启, 则为 (c). 如果我们设想每个电子恰好通过这个孔或那个孔, 则当两孔都开启时, 预期应得到曲线 (d)=(b)+(c). 这与实际所得的曲线 (a) 完全不同

**概率幅** 两孔都开启时, 电子到达  $x$  的概率并不是单独开启孔 1 的概率与单独开启孔 2 的概率之和.

实际上, 复杂曲线  $P(x)$  是我们熟悉的, 因为它恰好是发自  $S$  的波穿过两个孔撞击在屏  $C$  上(图 1-3)所得到的干涉图形的强度分布. 表达波幅的最简单的办法是用复数. 定义  $P(x)$  是某一复量  $\phi(x)$  的绝对值平方(如果考虑电子自旋, 该复量为超复量), 而  $\phi(x)$  为到达  $x$  的概率幅, 我们就能够从数学上阐述  $P(x)$  的正确规律. 并且  $\phi(x)$  是两个贡献之和:  $\phi_1$ (通过孔 1 到达的概率幅)加  $\phi_2$ (通过孔 2 到达的概率幅). 也就是说,

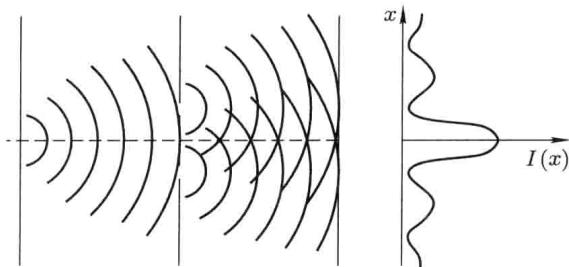


图 1-3 波动干涉中的一个模拟实验. 图 1-2(a) 中的复杂曲线  $P(x)$  与从  $S$  出发穿过孔而可能到达  $x$  的波的强度  $I(x)$  相同. 在某些  $x$  点, 发自孔 1 和孔 2 的波干涉相消 (即发自孔 1 的波峰与发自孔 2 的波谷同时到达); 在另一些点, 干涉相长. 由此产生出曲线  $I(x)$  的复杂的极大值和极小值

III. 存在复数  $\phi_1$ 、 $\phi_2$ , 使得

$$P = |\phi|^2, \quad (1-1)$$

$$\phi = \phi_1 + \phi_2, \quad (1-2)$$

$$P_1 = |\phi_1|^2, \quad P_2 = |\phi_2|^2. \quad (1-3)$$

在以后的章节里, 我们将详细讨论  $\phi_1$  和  $\phi_2$  的实际计算. 这里我们仅设  $\phi_1$  是可以计算的, 它表示波从源通过孔 1 再传播到  $x$  的波动方程的一个解. 这反映了电子 (或者在光的情况下为光子) 的波动性质.

总之, 我们计算出能到达  $x$  处探测器的波强度 (即概率幅的绝对值平方), 然后将此强度解释为粒子到达  $x$  的概率.

**逻辑上的一些困难** 值得注意的是, 同时使用波的概念和粒子的概念并不产生矛盾. 只有对这实验情况允许我们作出什么样的说明进行十分仔细的考虑, 才能做到这一点.

为了更详细地讨论这一点, 首先考虑观测结果中出现的一种情况, 新的概率合成规律 III 一般地意味着  $P = P_1 + P_2$  是不对的. 我们必定得出结论: 当两个孔同时开启时, 粒子通过这个孔或那个孔的说法是不对的. 因为如果粒子必须通过这个孔或那个孔, 我们就能将到达  $x$  的粒子分成不相干的两类, 即经孔 1 和经孔 2 到达  $x$  的粒子; 并且到达  $x$  的次数  $P$  一定是粒子经过孔 1 的次数  $P_1$  与经过孔 2 的次数  $P_2$  之和.

为了摆脱这惊人的结论所导致的逻辑上的困难, 我们可以试一试各种办法. 例如, 设想电子也许在一条复杂的轨道上运动, 先通过孔 1, 然后回头穿过孔 2, 最后以某种复杂的方式穿过孔 1; 或许电子以某种方式散开, 部分地通过两个孔, 以致最终产生干涉结果 III; 或许由于遮住孔 2 有可能影响孔 1 附近的电子运动, 从而电子穿过孔 1 的概率没有被正确地确定, 人们也曾用了许多这

类经典力学模型试图解释这个结果, 当我们使用光子时 (在这种情况下, 规律Ⅲ同样适用), 可以使两个干涉路径 1 和 2 在空间上相距几个厘米, 因此, 这两个交叉的轨道几乎肯定是独立的. 下面的实验证明, 实际情况将比开始所设想的具有更深远的意义.

**观察的影响** 我们已经从逻辑基础上得出结论: 既然  $P \neq P_1 + P_2$ , 那么根据电子或者通过孔 1 或者通过孔 2 这一简单假设来分析电子的运动是不正确的. 可是, 极容易设计一个实验, 直接来验证我们的结论, 只要在孔的后面放一个光源, 就可观看电子通过哪一个孔 (见图 1-4). 由于电子散射光, 因此, 如果光在孔 1 后面被散射, 我们就可以断定某个电子通过了孔 1; 若光在孔 2 附近被散射, 则可断定电子通过了孔 2.

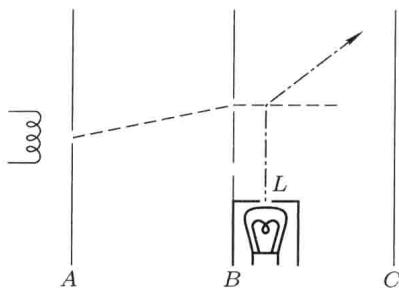


图 1-4 图 1-1 实验的一个修正. 我们在屏  $B$  后放置一个光源  $L$ , 并寻找通过孔 1 或者孔 2 的电子所散射的光. 用一个很强的光源, 确实可以发现每个电子通过这个或者那个孔. 但现在到达  $x$  的概率不再是由图 1-2(a) 中的曲线给出, 而是由图 1-2(d) 给出

这个实验结果明确表示, 电子确实或者通过孔 1 或者通过孔 2! 即对于每个到达屏  $C$  的电子 (假定光足够强, 我们不会察觉不到), 光或者在孔 1 后面或者在孔 2 后面被散射, 并且决不会 (若光源  $S$  很弱) 在两处同时被散射. (一个更精细的实验甚至能表明, 通过两孔的电荷或者是通过这个孔的或者是通过那个孔的. 并且在所有情况下, 都是以一个电子的完整电荷出现的, 决不会是它的部分电荷.)

现在看来, 我们得出了一个佯谬. 假设将两个实验联合起来察看电子通过了哪个孔, 并同时测量电子到达  $x$  的概率, 然后对于每个到达  $x$  的电子, 我们可以从实验上来说明电子是否通过了孔 1 或孔 2. 首先, 我们要证实  $P_1$  由曲线 (b) 给出, 因为我们选择到达  $x$  的电子只是通过孔 1 (根据那里的光被散射) 的电子, 则我们发现, 它们的分布确似曲线 (b). (孔 2 不论是遮住还是开启, 均可得到这个结果, 因此可证实, 关闭孔 2 对孔 1 附近的运动毫无影响.) 如果选取孔 2 处散射光的电子, 我们得到很近于图 1-2(c) 中的  $P_2$ . 现在每个电子或者出现在孔 1, 或者出现在孔 2, 并且可将其分成不相干的两类. 因此,

如果我们将两者放在一起,一定得到图 1-2(d) 中的分布  $P = P_1 + P_2$ , 实验确实如此. 然而, 该分布莫名其妙地没有出现如曲线 (a) 的干涉结果 III!

这里发生了什么变化呢? 当我们察看电子通过哪个孔时, 就能得到结果  $P = P_1 + P_2$ , 当我们不观察时, 就得到不同的结果  $P = |\phi_1 + \phi_2|^2 \neq P_1 + P_2$ .

实际上, 正是由于察看了电子才改变了它到达  $x$  的概率. 这怎么可能呢? 答案是: 为了察看电子, 我们使用了光, 可以预期光与电子的碰撞会改变电子的运动, 或者更确切地说, 改变了电子到达  $x$  的概率.

另一方面, 我们是否能使用较弱的光源而期望这种影响弱一点呢? 我们认为, 一个很弱以至可以忽视的干扰对分布肯定不会产生从 (a) 到 (d) 的有限小的改变. 但弱的光并不意味着弱的干扰. 光以能量为  $h\nu$  或动量为  $h/\lambda$  的量子形式出现, 这里  $\nu$  是频率,  $\lambda$  是波长. 减弱光源意味着使用较少的光子. 因此, 我们也许会漏看了电子. 但是当我们确实看见一个电子时, 就意味着一个完整的光子被散射, 并且这个电子获得大约为  $h/\lambda$  的有限动量.

漏看的那些电子是根据干涉定律 (a) 分布的, 而我们真正看到的、因而是散射了一个光子的并到达  $x$  的那些电子具有 (d) 中的概率  $P = P_1 + P_2$ . 因此, 在这种情况下, 净分布是 (a) 和 (d) 的加权平均. 在强的光线下, 几乎所有的电子都散射光时, 分布近似于 (d); 而在很弱的光线下, 散射极少时, 它更相似于 (a).

[9]

我们仍可认为, 既然光所携带的动量为  $h/\lambda$ , 则用波长  $\lambda$  较长的光会产生较弱的效果. 但这有个限度, 若使用波长太长的光, 我们将不能区别光子是从孔 1 后面还是从孔 2 后面被散射; 因为波长为  $\lambda$  的光源用于空间定位时, 其精度不超过  $\lambda$  的数量级.

因此我们看到, 为测定电子通过哪个孔所设计的任何物理实验, 一定会产生 (否则就有佯谬) 强的干扰, 足以使分布从 (a) 变化到 (d).

海森伯第一个注意到这些, 并在他的测不准原理中作了陈述: 当时崭新的力学的一致性对所能进行的实验的精度要求有一个限制. 在我们的情形中, 该原理指出: 设计一种装置来测定电子通过什么样的孔, 并且足够精细, 使得电子的偏转不足以破坏干涉图形的企图一定不会成功. 显然量子力学的一致性要求它必须是一个普遍性的陈述, 包括物理世界中各种可用以测定电子通过哪个孔的手段. 物理世界不可能是半量子力学、半经典的. 对于测不准原理从未发现任何例外情况.

## 1-2 测不准原理

测不准原理可以陈述为: 一个过程如有两个以上的效果可供选择, 那么,

一旦决定了采用其中某个选择, 就破坏了各个可能选择之间的干涉。海森伯测不准原理的论述最初并不是以这里所采用的形式给出的。我们将中断这里的讨论, 专门用几段来讨论海森伯的原始论述。

在经典物理学中, 一个粒子可被描述为沿着一定的轨道运动, 并在任何特定的时刻具有精确的位置和速度。这样一幅图像不会导出我们已知的作为量子力学特征的那些奇怪结果。海森伯的测不准原理指出了上述经典概念的精确性受限制。例如, 一个粒子既有确定位置又有确定动量的概念就有其局限性。从经典角度来看, 一个真实体系(即遵从量子力学的体系)的位置和动量虽然不是确切的, 但只是未确定而已。仔细测量能减小位置的不确定性, 而其他一些测量可以确定动量。但是, 正如海森伯在测不准原理中所述的, 两者不能同时精确地确定; 任何一个实验所涉及的动量不确定值和位置不确定值的乘积不小于数量级为  $\hbar$  的一个数<sup>①</sup>。在我们已经讨论的情况下, 物理学的内在一致性要求这样的结论也适合于其他用来决定电子究竟通过哪个孔的办法。

**例** 如果一个电子在通过一个孔后被偏转, 则其动量的竖直分量改变。而且通过孔 1 后到达探测器  $x$  的一个电子与经孔 2 到达探测器  $x$  的一个电子相比, 其偏转大小是不同的, 因而有不同的动量变化。设  $B$  处的屏不是刚性支撑, 而是可以自由上下移动的(图 1-5)。通过某个孔的电子的动量的竖直分量的任一改变, 将伴随有屏动量的等量而反向的改变。测量电子经过孔前、孔后屏的速度, 就能测出这个动量的改变。令  $\delta p$  为通过孔 1 或孔 2 的电子之间动量

[10]

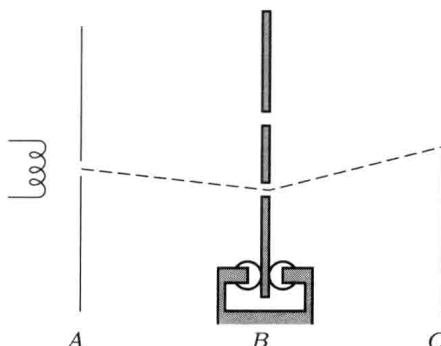


图 1-5 图 1-1 实验的另一种修正。使屏  $B$  自由地作垂直运动。如果电子通过孔 2 而到达探测器(例如:  $x = 0$ ), 则电子向上偏转, 而屏  $B$  将向下反冲。对电子的每次穿行, 从静止的屏开始, 然后测量它是向上还是向下反冲来确定电子通过的那个孔。然而根据海森伯测不准原理, 对屏  $B$  的这种精确的动量测量将与孔的垂直位置的准确了解相矛盾, 因此, 我们没有把握正确地建立两个孔的中线。图 1-2(a) 中的  $P(x)$ , 由于它在竖直方向上被模糊了一点, 因此它看起来像图 1-2(d)

①  $\hbar = h/2\pi = 1.055 \times 10^{-27}$  erg·s, 其中  $h$  为普朗克常量。

改变的差值。那么，要准确地测量一个特定的电子所经过的孔就需要用比  $\delta p$  更为精确的方法来测量屏的动量。

[11] 如果我们建立起这样的实验，使得屏  $B$  动量的测量能达到所要求的精度，那么，由于我们能测定电子所通过的孔，就一定能发现电子的最终分布是图 1-2(d) 的曲线。干涉图形曲线 (a) 一定消失。这是怎样发生的呢？为便于理解，我们指出，欲知屏  $C$  上的分布曲线的结构就需要准确了解屏  $B$  上两孔的竖直位置。因此，我们不但要测量屏  $B$  的动量，而且还要测量它的位置。如果要建立干涉图形曲线 (a)，我们一定要知道  $B$  的竖直位置，其精度大于  $d/2$ ，这里  $d$  是曲线 (a) 的极大值之间的跨距。设  $B$  的竖直位置的确定达不到这个精度，则确定图 1-2(a) 中各点的竖直位置的精度不大于  $d/2$ ，因为竖直标度的零点必须用屏  $B$  上的某些标称零点来调整。任一高度  $x$  处的  $P$  值必须由  $x$  上下  $d/2$  间隔内的所有  $P$  值的平均来得到。显然，干涉图形将被这个平均过程毁坏，最终曲线相似于图 1-2(d)。

在最初的实验中，这种干涉图形是电子波动性的象征。这个图像对任一种波动都是相同的，因此我们可以借用光衍射理论中已经熟知的结果来得到孔的间隔  $a$ ，屏  $B$  和屏  $C$  间的距离  $l$  以及光的波长  $\lambda$  和  $d$  之间的关系为

$$\frac{a}{l} = \frac{\lambda}{d}, \quad (1-4)$$

如图 1-6 所示。在第三章中，我们将会看到电子波的波长与电子的动量密切相关：

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad (1-5)$$

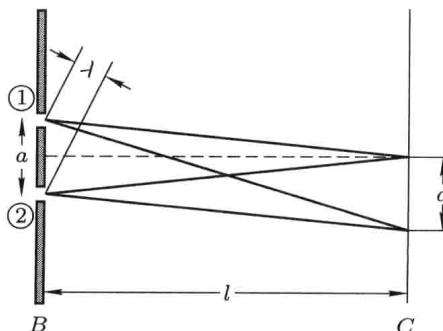


图 1-6 孔 1 和孔 2 处发出的相位相同的两束光，如果它们从  $B$  至  $C$  所用的时间相同，则它们到达屏  $C$  时，将干涉相长。这意味着，通过两个孔的光束在屏的中心将发生衍射极大。当屏  $C$  向下移动时，在离中心足够远的距离  $d$  处将产生次极大；对于到达这一点的光束来说，来自孔 1 的光比来自孔 2 的光正好多走一个波长  $\lambda$

若  $p$  是单个电子的总动量 (假定所有电子具有相同的总动量), 那么对于  $l \gg a$ , 有

$$\frac{\delta p}{p} \approx \frac{a}{l} \quad (1-6)$$

如图 1-7 所示. 由此得

$$d = \frac{h}{\delta p}. \quad (1-7)$$

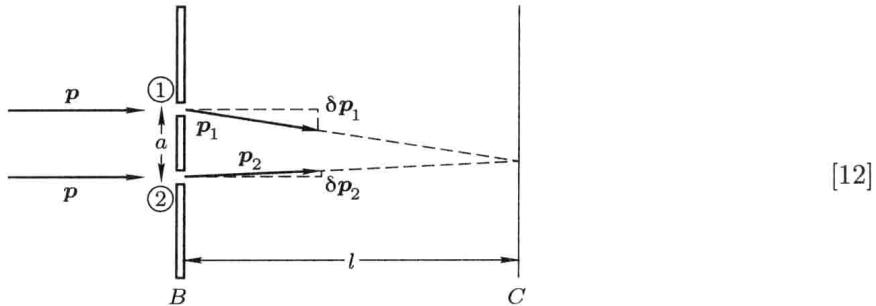


图 1-7 一个电子通过屏  $B$  上一个孔, 其偏转实际上是由动量改变  $\delta p$ . 这个改变相当于在近似垂直于初始动量矢量的方向上附加一个小的动量分量. 能量的改变可忽略不计. 对于小的偏转角, 总动量矢量近似地保持同样的数值, 那么, 偏转角可表示为一个良好的近似值  $|\delta p|/|p|$ . 如果两个电子, 一个从孔 1 出发, 具有动量  $p_1$ , 另一个自孔 2 出发, 具有动量  $p_2$ , 两者到达屏  $C$  上的同一点, 则它们的偏转角一定近似相差值  $a/l$ . 由于我们不能说明电子穿过哪一个孔, 因此穿过屏  $B$  时电子获得的动量垂直分量的不确定性一定等价于偏转角的不确定性, 由此给出关系  $|p_1 - p_2|/|p| = |\delta p|/|p| = a/l$

因为在实验上我们发现, 干涉图已经消失, 这一定是在测定  $B$  位置时, 其不确定值  $\delta x$  大于  $d/2$ . 因此,

$$\delta p \delta x \geq \frac{h}{2}, \quad (1-8)$$

它与测不准原理的一般论述 (在数量级上) 相一致.

对于前面用光散射来决定电子通过哪个孔的测量装置亦可做类似的分析. 这种分析能得到相同的测不准下限.

只考虑少数几个这样的实验并不能“证明”测不准原理, 而只不过是举例说明它. 它的证据有两类. 第一类, 至今尚无人发现任何一个实验方法能突破该测量限度; 第二类, 如果我们要保持物理学的一致性, 量子力学看来是需要它的, 并且量子力学定律的预言已经一次又一次地非常精确地被证实了.

## 1-3 干涉选择

**两类选择** 从物理观点来看, 两条路就是两个互相独立的选择, 但是, 概率为  $P_1 + P_2$  的含义是错误的. 也就是说, 前提和导致这样一个结论的推理两者之一必定是错误的. 由于我们思想上的习惯势力很强, 许多物理学家发现, 否定这前提比否定这推理要方便得多. 为了避免易于使人陷入混乱的逻辑上的不一致, 物理学家采取下述观点: 在不打算测定电子通过哪个孔的时候, 人们就不能说电子必须通过这个孔或那个孔. 只有仪器在工作着以测定电子通过哪个孔的时候, 才允许说电子穿过这个或那个孔. 当察看电子时才会发现电子穿过这个孔或那个孔; 而在不观察时, 就不能说电子走哪一条路. 如果我们要描述自然, 它就要求我们走一条严格合乎逻辑的道路.

与这个思想方法相反, 本书将遵循本章第一部分的建议而否定其推理, 即对于各种可能的选择, 我们不用概率叠加来计算概率. 为了定义出新的规则, 以便概率能合成, 先给定“选择”这词的两种意义是较为方便的. 该词的第一个意义是排斥的概念. 因此, 如果其中一个孔关闭或者能够清楚地决定所用的孔是哪一个的仪器处于工作状态时, 则孔 1 和孔 2 是排斥选择.“选择”的另一意义是合成或干涉的概念(这里, 术语“干涉”与光学中的意义相同, 即相长干涉或相消干涉). 因此, 当(1)两孔开启和(2)不打算测定电子通过哪个孔时, 我们就说孔 1 和孔 2 表示电子的干涉选择. 当选择是这种干涉类型时, 概率定律一定成为方程(1-1)和(1-2)所给出的形式.

干涉选择的概念是量子力学全部内容的基础. 在某些情况下, 我们允许两种选择都存在. 在两孔实验中, 假设我们问, 电子到达某点(例如在屏中心附近的 1 cm 范围内)的概率, 我们的意思就是说, 如果幕上布着计数器(当电子到达时, 这个或那个计数器会响应), 那么在  $x = 0$  邻近 1 cm 内计数器响应的概率是多少. 在这里, 各种可能性就是电子通过某个孔而到达某个计数器的可能性. 两个孔表现为干涉选择, 而计数器是排斥选择. 因此, 我们首先对一个固定的  $x$  叠加  $\phi_1 + \phi_2$ , 将其平方, 然后对  $x$  从 -1 cm 到 +1 cm 求出这些合成概率之和.

只要有一点经验, 就不难区别所采用的是哪一类选择. 例如, 假定有关选择的资料可资利用(或不变其结果就可利用), 但这资料并没有被利用, 然而在这种情况下, 概率求和(按普通含义)一定在排斥选择上进行. 这些排斥选择是能够被那些资料分别加以区分的.

**举例** 当选择不可能被任一实验分辨时, 那一定是干涉的. 一个显著的例子是两个核作  $90^\circ$  的散射(例如在质心系统中), 如图 1-8 所示. 设  $A$  代表  $\alpha$

粒子,  $B$  代表其他的核. 问题是要求出  $A$  被散射至位置 1 而  $B$  被散射至位置 2 的概率. 该振幅表示为  $\phi_{AB}(1, 2)$ , 其概率为  $p = |\phi_{AB}(1, 2)|^2$ . 假定我们不管到达 1 处的是哪种核, 即无论是  $B$  或  $A$ . 若是  $B$ , 则振幅为  $\phi_{AB}(2, 1)$  (它等于  $\phi_{AB}(1, 2)$ , 因为我们取  $90^\circ$  的角). 某个核到达 1 处和另一个核到达 2 处的概率为

$$|\phi_{AB}(1, 2)|^2 + |\phi_{AB}(2, 1)|^2 = 2p. \quad (1-9) \quad [15]$$

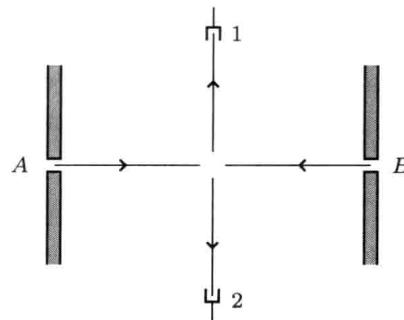


图 1-8 质心系中一个核对另一个核的散射. 两个全同核的散射显示出显著的干涉效应. 这里有两种干涉选择. 到达 1 处的粒子可以说是从  $A$  或  $B$  出发的那个粒子, 若初始核不是全同的, 则在 1 处的全同性试验能够决定实际所取的是哪一种选择, 因此他们是排斥选择, 但在这个情况中特别的干涉效应并不出现

这里, 我们已经叠加了这些概率.  $A$  到达 1 而  $B$  到达 1 的情况是排斥选择, 因为我们能够在不妨碍以前散射过程的条件下, 决定 1 处核的特性.

但是, 如果  $A$  是  $\alpha$  粒子,  $B$  也是  $\alpha$  粒子, 情况又将怎样呢? 没有一个实验能够区别它们, 我们也不知道到达 1 处的粒子是来自  $A$  还是  $B$ . 因此, 我们得到的是干涉选择, 其概率为

$$|\phi_{AB}(1, 2) + \phi_{AB}(2, 1)|^2 = 4p. \quad (1-10)$$

这一有趣的结果已为实验所证实.

如果电子散射电子, 其结果在两个方面有所不同. 首先, 电子具有一个我们称之为自旋的量, 并且一个给定的电子可以处在所谓自旋向上和自旋向下的两态之一. 对低能散射取一级近似, 其自旋不变. 自旋带有磁矩, 在低速情况下, 主要作用力来自电荷的电力, 而磁力的影响仅作为一个小的修正, 可以忽略不计. 因此, 如果电子  $A$  自旋向上而  $B$  自旋向下, 那么以后我们就能用测量其自旋的办法来区别到达 1 处的电子. 若自旋向上, 则是  $A$ ; 若自旋向下, 则是  $B$ . 故在这种情况下, 散射概率为

$$|\phi(2, 1)|^2 + |\phi(1, 2)|^2 = 2p \quad (1-11)$$

[16] 然而, 若开始时  $A$  和  $B$  两者都是自旋向上, 以后我们就不能区别它们了, 而会得到

$$|\phi_{AB}(1, 2) + \phi_{AB}(2, 1)|^2 = 4p. \quad (1-12)$$

实际上这是错误的. 值得注意的是, 电子服从一个不同的规则. 电子对的全同性与上面的 ( $\alpha$  粒子) 正相反, 其概率幅相差  $180^\circ$  的相角, 即在两个自旋向上的情况下, 有

$$|\phi_{AB}(1, 2) - \phi_{AB}(2, 1)|^2. \quad (1-13)$$

在  $90^\circ$  散射的情况下,  $\phi_{AB}(1, 2) = \phi_{AB}(2, 1)$ , 因此上式为零.

**费米子和玻色子** 全同电子交换所涉及的两种可能选择之间有  $180^\circ$  的相移, 这一规则是很奇怪的. 其根本原因我们还不完全理解. 除电子以外, 还有一些别的粒子也服从这个规则, 这样的粒子称为费米子, 我们说它们服从费米统计, 也称为反对称统计. 电子、质子、中子、中微子和  $\mu$  子都是费米子. 它们的奇数组合也是费米子, 例如氮原子, 它含有七个电子, 七个质子, 七个中子. 泡利首先阐述了这个  $180^\circ$  规则, 它是泡利不相容原理的完备的量子力学根据, 而且决定了化学元素周期表的特性.

有些粒子, 在互换中不变相角, 就称为玻色子, 它服从玻色统计, 也称为对称统计. 例如光子,  $\pi$  介子、含有偶数个费米子 (如  $\alpha$  粒子, 它有两个质子和两个中子) 的系统都是玻色子. 所有的粒子必定是玻色子或者费米子两类中的一类. 这些干涉性质具有深远而神秘的影响. 例如在 1 或 2 开氏温度时, 原子质量为 4 的氦 (玻色子) 的液体流过小管时不受任何阻力, 而原子质量为 3 的氦 (费米子) 的液体就没有这个性质.

粒子的全同概念在量子力学中远比经典力学中的明确和完整. 在经典力学中, 看来好像全同的两个粒子可能是近似全同的, 或对所有实际目的来说是全同的, 其含义为: 它们是这样近乎全等, 以至于现存的实验技术不能测出任何差别. 然而, 将来是否会有某种技术能确定出这种差别, 还很难说. 但是, 在量子力学中, 情况就大不相同了. 我们可以给出一个直接的实验, 用来确定粒子是否完全不可区别.

[17] 如图 1-8 所示的实验中, 如果来自  $A$  和  $B$  的粒子仅是近似全同的, 那么, 实验技术的改进就会使我们能仔细观察到达例如 1 处的粒子, 从而决定它是来自  $A$  还是  $B$ . 在这种情况下, 两个初始位置的选择一定是互相排斥的, 描述这些选择的振幅之间一定不存在任何干涉. 重要的一点是观察动作将出现在散射发生之后, 就是说观察不可能影响散射过程. 由此可以推出: 描述两种选择 (即到达 1 处的粒子或者来自  $A$  或者  $B$ ) 的振幅之间不会有干涉. 在这种情况下, 根据测不准原理, 必能断定, 没有办法 (甚至在原理上) 区别这两个概率.

即当一个粒子到达 1 处时, 不论现在或将来, 完全不可能有任何实验能决定粒子究竟是来自 A 还是 B. 在全同的这种更严格的意义上讲, 所有的电子都是全同的, 所有的质子也是全同的.

第二个例子. 我们考虑中子在晶体上散射. 当波长比原子间隔稍短一点的中子被晶体中的原子散射时, 我们会得到极强的干涉效应. 中子仅在布拉格反射定律所规定的某些离散方向发出, 正像 X 射线一样. 本例所涉及的干涉选择是这个或那个原子散射某一特定中子的各种选择的可能性. (任一原子散射中子的概率幅非常之小, 以至于我们不必考虑中子被两个以上的原子所散射这种选择.) 描述出自这些原子的某个中子运动的振幅波仅在某些确定的方向上产生相长干涉.

现在, 在这个看来简单的图像中出现了一个有意义的复杂现象. 像电子一样, 中子具有自旋, 可分为自旋向上和自旋向下两种状态. 设散射材料由某类原子组成, 它具有类似的自旋特性, 例如碳 -13. 在这种情况, 实验将出现两种显然不同的散射类型. 我们发现, 散射除了在一些离散的方向上发生以外, 正如前几段中所述的, 还有一种漫反射, 它在所有方向上都存在. 为什么是这样呢?

下面的观察结果给这两类散射的来源提供一个线索. 设参加实验的所有中子经过适当的制备过程都处于自旋向上的状态. 若我们分析出射中子的自旋方向就会发现, 有些向上, 而有些向下; 自旋仍然向上的中子仅散射在离散的布拉格角的方向上, 而自旋变为向下的中子则漫散射到所有的方向上.

为使一个中子从自旋向上翻转至自旋向下, 角动量守恒定律要求散射核的自旋从向下转变至向上. 因此, 原则上我们能够测定散射了某特定中子的那个特定原子的核. 原则上讲, 我们能在实验以前记录下晶体中所有散射核的自旋状态. 于是, 中子被散射以后, 我们再重新研究晶体, 观察哪个核的自旋从向下改变至向上. 如果晶体中没有任何核的自旋经历这样一种改变, 那么中子的自旋也不会改变, 并且我们也不能区别中子实际被哪个核所散射. 在这种情况下, 各种选择相互干涉, 结果就是布拉格散射定律.

另一方面, 如果发现晶体中的某个核改变了自旋方向, 那么我们就知道这个核一定散射了中子, 不存在干涉选择. 发自这个特定核的球形波幅描述了散射中子的运动, 而且只有发自这个核的波才能作这种描述. 因此发现散射到任何方向上的中子的机会是相等的.

在晶体中搜遍所有的核, 以便找到哪个核的自旋态发生了改变的想法确实好像是大海捞针, 但大自然并不管实验的实际困难. 重要的事实是, 在不对被散射中子产生干扰的情况下测定了晶体中哪个核实际发生了散射(这种情况下, 自旋状态变了), 这在原则上是可能的. 这种可能性存在的意义是, 即使

我们并未实际进行这种测量, 但我们却能安排排斥选择 (因而是非相干的选择).

另一方面, 在中子的自旋态不改变的情况下, 则得到各选择之间的干涉. 这一事实的意义是, 要发现晶体中究竟哪个核发生了散射是不可能的, 甚至在原则上都是不可能的, 至少可以说, 在散射前或散射中不干扰实验条件是不可能实现的.

## [19] 1-4 概率概念的小结

**选择和测不准原理** 作为引言, 这一章的目的是阐述概率幅的意义及其在量子力学中的重要性, 并且讨论概率幅的运算规则. 至此我们已经阐明: 存在一个称为概率幅的 (物理) 量, 它与处理自然界中发生的事件的各种方法相联系. 例如, 从  $S$  源 (图 1-1) 出发到探测器  $x$  的一个电子, 就有通过屏  $B$  的孔 1 而完成这一过程的一个概率幅和通过孔 2 而完成这一过程的另一个概率幅. 并且, 我们能够通过每种选择的概率幅的相加将某个概率幅与整个事件联系起来. 因此, 到达  $x$  处的总的概率幅由方程 (1-2) 给出, 即

$$\phi = \phi_1 + \phi_2. \quad (1-14)$$

接着, 我们把总概率幅的绝对值平方解释为代表事件将要发生的概率. 例如, 电子到达探测器的概率为

$$P = |\phi_1 + \phi_2|^2. \quad (1-15)$$

如果对事件中涉及的粒子状态进行观察在得出结论以前, 我们中断了该事件的进程, 我们就干扰了整个概率幅的结构. 因此, 观察处于某种特定状态的粒子体系, 就得排除处在其他任一状态的可能性, 并且和已摒弃的状态相联系的概率幅, 在计算总概率幅时不能再被作为一种选择而相加. 例如, 如果用某种测量设备测定电子通过孔 1 的概率, 则到达探测器的概率正好是  $\phi_1$ . 而且我们有没有实际观察到和记录下测量结果是无关紧要的, 只要测量设备处于工作状态就行了. 显然, 在任一希望的时刻, 我们都能观察这个结果. 测量设备的运行足以干扰这个体系及其概率幅.

后面这个事实是海森伯测不准原理的基础. 该原理说明, 任何实验的精巧程度和任何测量的改进程度都有一个自然极限.

[20]

**概率幅的结构** 一事件的概率幅是该事件可能发生的各种选择的概率幅之和. 这就允许我们用许多不同的方法来分析该概率幅, 这些方法取决于选择所属的不同种类. 最详尽的分析可以从下面的研究中得到: 在给定的时间间隔

内,一个从  $A$  到  $B$  的粒子可以看作是空间和时间上的某一运动或路径,因此,概率幅将与每个可能的运动联系起来,总概率幅就是每个路径的贡献之和.

进一步研究两孔实验可使这个思想更为清晰.设在源和孔之间放一对附加屏;称为  $D$  和  $E$ ,每一个屏上都钻了一些标号为  $D_1, D_2, \dots$  和  $E_1, E_2, \dots$  的孔(图 1-9).为简单起见,设电子限制在  $xy$  平面上运动,那么一个电子可采取几种不同的路径从源运动到屏  $B$  上的孔.它可以从源到  $D_2$ ,至  $E_3$ ,然后再到达孔 1;或者从源到  $D_3$ ,至  $E_1$ ,最后到达孔 1 等等.每条路径都有自身的概率幅,总的概率幅为各个路径的概率幅之和.

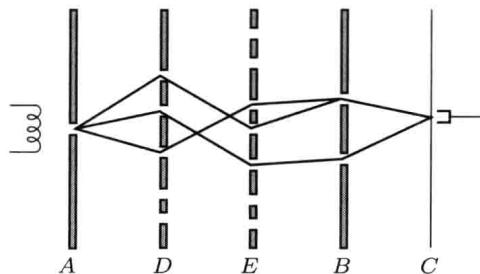


图 1-9 当在屏  $A$  处的源和最末位置的屏  $C$  之间放置屏  $D$  和屏  $E$ ,并在其上钻了一些孔的时候,每个电子能得到几条可选择的路径.每条路径有一个概率幅,所有小孔都开启时的任一实验结果就是每条可能路径的概率幅之和

再设我们继续在屏  $D$  和屏  $E$  上钻孔,直到屏上不留一点余地,于是一个电子的路径一定由高度  $x_D$  和  $x_E$  来表征,如图 1-10 所示,  $x_D$  相应电子在  $y_D$  处通过实际已不存在的屏  $D$ ,类似地  $x_E$  相应  $y_E$ .每对高度相应有一个概率幅.叠加原理仍可应用,并且我们必须对所有可能的  $x_D$  和  $x_E$  值所相应的概率幅求和(现在为积分).

[21]

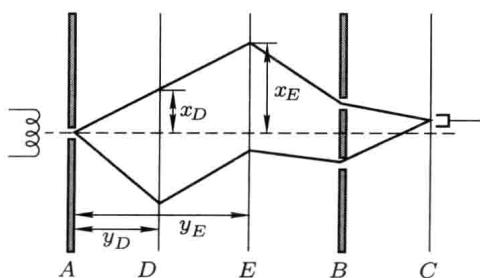


图 1-10 在  $y_D$  和  $y_E$  处的屏上钻更多的孔.最终使屏上布满了这样的孔,因此电子在每个屏上就得到一个上下位置的连续区间,其中电子能够通过屏上的每一点.在此情况下,选择求和就变成对连续参量  $x_E$  和  $x_D$  的二重积分,这些参量描述了电子通过  $y_E$  和  $y_D$  处的屏上各处的选择高度

显然,下一步要做的是在源和孔 1 之间放置越来越多的屏,并且在每个屏上钻很多很多的孔,使之不留余地。重复上述过程,使电子路径的确定不断地精确,直至最后得到一个很清楚的概念,即所谓路径不过就是高度作为距离的特定函数,也就是  $x(y)$ 。我们仍可继续应用叠加原理,直至对每条路径求得在所有概率幅路径上的积分。

现在可以更仔细地描绘电子的运动图像了,我们不仅可以想象特别的空间路径  $x(y)$ ,而且还能定出电子通过空间各点的具体时间<sup>o</sup>。就是说,若给定了两个函数  $x(t)$  和  $y(t)$ ,则一个路径(在两维情况下)就定了。于是我们有这样一种思想,在某一路径  $x(t)$  和  $y(t)$  上定义一个概率幅,所求的总概率幅就是所有可能路径上的概率幅的和或积分。这种在所有的路径上积分或求和的概念,可用数学上更为精确的方法定义,我们将在第二章中给出。

[22]

第二章也论述了任一给定路径的概率幅公式。一旦给出了这个公式,就可以完备地论述非相对论性量子力学定律,于是剩下的各种问题就是说明这些定律在许多有意义的特殊情况下的应用了。

## 1-5 一些遗留问题

我们将会发现,在量子力学中,概率幅  $\phi$  是一个完全确定的方程(薛定谔方程)的解。 $\phi$  在  $t = 0$  时的状态决定了它在后续时间中的状态。 $|\phi|^2$  作为一事件概率的解释是一个非决定性的解释,它意味着实验结果不可能精确地预料。值得注意的是,这样的解释不会导致任何不一致。海森伯、玻尔、玻恩、冯·纽曼和许多其他物理学家在许多特殊情况的分析都充分证实了它的正确性。尽管这些分析很多,但不出现不一致性这个事实却不完全是浅显的。正是由于这个原因,对于初学者来说,量子力学显得有些神秘而困难。引用更多的例证,神秘性会逐步减小。但是,人们总会感到量子力学有点特殊,这种感觉永远不会消失。

现在仍有几个尚待解决的解释性问题。在它们完全被解决以前,要陈述它们是非常困难的。问题之一是要证明  $\phi$  的概率解释是这个量的唯一的自洽解释。我们和我们的测量仪器都是自然界的组成部分,因此原则上讲,可以用满足决定论方程的概率幅函数来描述。为什么我们对于一个给定的实验得到某一肯定结果这事只能预言其概率呢?不确定性由什么产生的呢?几乎毫无疑问,这是因为必须把单个原子的效应放大到这样一种程度,使它们容易被宏观系统所观察。这一点的细节已经只根据  $|\phi|^2$  是概率的假定就作过分析了,并且对该假定的自洽性也已作了说明。如果我们能证明不可能作出任何别的自洽解释,那将会是一件有意义的事<sup>o</sup>。

其他一些有待进一步分析的是那些与认识有关的理论问题. 例如, 我们的认识缺乏时间上的对称性. 对于过去的了解在性质上不同于对于未来的了解. 既然对过去事件的确定性显然能够经常断定, 为什么对将来的事件我们只能了解其概率呢? 这些问题已被一再详细分析过了. 但在这里, 我们还要多说几句, 加以澄清. 显然, 这又涉及我们本身和测量设备宏观尺寸的影响. 观察者和被观察对象 (在量子力学中需要加以分析测量) 之间的通常隔离实际上不应该是必要的, 至少应进行更透彻的分析. 但这又似乎需要有关放大仪器的统计力学的信息<sup>①</sup>.

[23] 当然, 这些问题的分析在性质上属于哲学范畴, 对于物理学的进一步发展不是必需的. 我们已知道  $\phi$  的自治解释, 而且几乎毫无疑问, 这是唯一的自治解释. 现在的问题看来是要对核和费米子有关的现象找到支配  $\phi$  的那些定律.  $\phi$  的解释是有意义的. 但更重要的问题是: 为了分析原子核尺度内发生的现象, 我们的思想必须做哪些新的修正?

## 1-6 本书的目的

到目前为止, 我们已经给出了量子力学定律必须采取的形式, 即概率幅是存在的, 而且勾划出一幅计算该概率幅的可能图像. 还有一些其他的方式来陈述这一点. 有一个更常用的通往量子力学的途径, 即通过解一种波动方程来计算概率幅. 对于低速度的粒子, 这一方程叫做薛定谔方程, 一个更为精确的方程称为狄拉克方程. 它适用于速度任意接近光速的电子. 在此情况下, 概率幅是一种超复数, 在本书中, 我们将不讨论狄拉克方程, 也不研究自旋效应, 而仅限于讨论低速电子, 还要研究光子, 即由麦克斯韦方程决定其行为的粒子, 以求在量子电动力学方面扩展我们的眼界.

在本书中, 我们将以多少不同于传统的方法给出计算非相对论问题的概率幅的定律. 在某些方面, 特别对深入理解量子力学的概念, 这是很可取的, 但在其他方面, 如计算较为简单的问题和了解文献来说, 就不利了.

更传统的观点 (通过薛定谔方程) 在许多书中已经给出了, 但这里所陈述的观点仅仅以缩简形式发表在一些文献和杂志上<sup>①</sup>. 本书的主旨在于将这类工作集中于一册, 更清晰而又详细地阐述其内容, 以期有益于那些有兴趣的学生.

为了将主题限定在某些范围内, 对量子力学我们不作全面的论述. 而且当一个问题已经在其他书籍中得到普遍地、深入地论述时, 我们就介绍大家

[24] <sup>①</sup> R. P. Feynman, Space-Time Approach to Non-relativistic Quantum Mechanics, *Rev. Mcd. Phys.*, vol. 20, p. 367-387, 1948.

去参考那些书. 由于内容并不完整, 本书不能作为一本完善的量子力学教科书, 而只能作为一本入门书, 用来论述薛定谔方程、矩阵力学、量子力学应用的主题思想.

另一方面, 我们将不用过多的篇幅详细地讨论量子力学的各个方面, 也不讨论量子力学表述中所用的数学方法对其他物理分支的应用.

当过程明显地涉及更为复杂的粒子时, 如中子、质子、介子, 找到计算概率幅的精确方法是将来的问题. 也许当这未知的定律被发现时, 我们可能会怀疑自己是否真找到了计算概率幅的方法. 但是, 现在的情况看来与早期发现量子力学时的情况并不相似.

在 20 世纪 20 年代, 许多迹象表明, 经典力学的基本定理和概念是错误的, 即有许多佯谬. 可以证明, 普遍定律与所涉及的力的细节无关. 其中有些定律不成立. 例如, 在温度  $T$  时, 每个自由度有一份  $kT$  的能量, 一条谱线表示一个原子的一个自由度, 因此对比热的贡献是  $R$ . 但是, 由于有大量光谱线而预期会得到很高比热的情况并没有出现.

今天, 我们已经能从概率幅叠加原理推导出来的任何普遍定律 (例如关于角动量的特征) 似乎是适用的. 但对细微的相互作用过程, 我们仍感到困惑. 我们认为, 在未来的理论中, 概率幅还会存在, 但其计算方法对于我们也许是陌生的.

## 第二章

[25]

# 量子力学的运动规律

---

本章打算完成在第一章就开始了的非相对论量子力学的论述. 前章已经提及, 每一轨道都有一个概率幅, 本章我们将要给出每一轨道的概率幅的形式. 为简单起见, 暂时我们仅限于讨论粒子作一维运动的情况. 因此, 粒子在任一时刻的位置由坐标  $x$  (作为  $t$  的函数) 来给定. 这样, 路径的意义就是函数  $x(t)$ .

[26]

如果一个粒子在初始时间  $t_a$  从点  $x_a$  出发, 在时刻  $t_b$  到达终点  $x_b$ , 我们就说粒子从  $a$  到达  $b$ , 并且函数  $x(t)$  具有这样的性质:  $x(t_a) = x_a$  和  $x(t_b) = x_b$ . 因此, 在量子力学中, 我们得到一个从点  $a$  到点  $b$  的概率幅, 通常称为<sup>o</sup> 传播子(kernel), 也可以写成  $K(b, a)$ . 它是端点  $a, b$  间所有轨道的贡献之和. 这正与经典力学的情况相反, 在经典力学中,  $a$  和  $b$  之间只存在一个特定的轨道, 称为经典轨道, 记作  $\bar{x}(t)$ . 在给出量子力学的规则以前, 我们先回顾一下经典力学中的情况.

### 2-1 经典作用量

在所有可能的路径中, 一条特定的路径  $\bar{x}(t)$  由适当的条件决定, 最小作用量原理是表示这条件的最精彩的方法之一. 也就是说, 存在某一个量  $S$ , 对每条路径它都能被计算, 经典路径  $\bar{x}(t)$  就是使  $S$  为最小值的那条. 实际上, 真正的条件为,  $S$  仅是一个极值. 就是说, 如果这路径  $\bar{x}(t)$  稍作改变,  $S$  的值是一阶不变的.

量  $S$  由表达式

$$S = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt \quad (2-1)$$

给出, 这里  $L$  是体系的拉格朗日量. 对于质量为  $m$ 、在势能  $V(x, t)$  (它是坐标和时间的函数) 中运动的粒子, 拉格朗日量为

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t). \quad (2-2)$$

极值路径  $\bar{x}(t)$  的形式可用通常的变分法决定. 因此, 设路径偏离  $\bar{x}(t)$  一个量  $\delta x(t)$ ;  $\bar{x}(t)$  的两个端点是固定的这个条件要求

$$[27] \quad \delta x(t_a) = \delta x(t_b) = 0. \quad (2-3)$$

$\bar{x}(t)$  使  $S$  是一个极值的条件为, 对于一级的  $\delta x(t)$ , 有

$$\delta S = S[\bar{x} + \delta x] - S[\bar{x}] = 0. \quad (2-4)$$

利用定义式 (2-1), 我们写出

$$\begin{aligned} S[x + \delta x] &= \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x} + \delta \dot{x}, x + \delta x, t) dt \\ &= \int_{t_a}^{t_b} \left[ L(\dot{x}, x, t) + \delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right] dt \\ &= S[x] + \int_{t_a}^{t_b} \left( \delta \dot{x} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + \delta x \frac{\partial L}{\partial x} \right) dt. \end{aligned} \quad (2-5)$$

分部积分,  $S$  的变分成为

$$\delta S = \delta x \left. \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right|_{t_a}^{t_b} - \int_{t_a}^{t_b} \delta x \left[ \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} \right] dt. \quad (2-6)$$

由于  $\delta x(t)$  在端点为 0, 方程右边第一项为 0. 在两个端点之间,  $\delta x(t)$  可取任意值. 因此, 在极值曲线上, 总是满足下面的条件:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0. \quad (2-7)$$

当然, 这就是经典拉格朗日运动方程.

在经典力学中, 有意义的是作用量积分  $S = \int L dt$  的形式, 而不只是极值  $S_{cl}$ . 这是因为必须知道沿一组相邻近的路径的作用量, 才能决定最小作用量的路径.

在量子力学中, 积分的形式与极值两者都是重要的. 在下面的问题中, 我们将计算各种不同情况下的极值.

**问题 2-1** 一个自由粒子, 其  $L = m\dot{x}^2/2$ . 证明自由粒子的经典运动所对应的作用量  $S_{\text{cl}}$  为

$$S_{\text{cl}} = \frac{m}{2} \frac{(x_b - x_a)^2}{t_b - t_a}. \quad (2-8)$$

**问题 2-2°** 一个谐振子, 其  $L = (m/2)(\dot{x}^2 - \omega^2 x^2)$ . 令  $T = t_b - t_a$ , 证明其经典作用量为 [28]

$$S_{\text{cl}} = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} (x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2x_b x_a. \quad (2-9)$$

**问题 2-3°** 求出常力  $f$  作用下的一个粒子的  $S_{\text{cl}}$ , 其拉格朗日量为  $L = (m\dot{x}^2/2) + fx$ .

**问题 2-4** 按经典力学, 动量定义为

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}, \quad (2-10)$$

证明在终点  $x_b$  处的动量为

$$\left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right)_{x=x_b} = + \frac{\partial S_{\text{cl}}}{\partial x_b}. \quad (2-11)$$

而在起点  $x_a$  处的动量为

$$\left( \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right)_{x=x_a} = - \frac{\partial S_{\text{cl}}}{\partial x_a}.$$

**提示** 固定一个端点, 考虑另外一个端点的改变对方程 (2-6) 的影响.

**问题 2-5** 按经典力学, 能量定义为

$$E = \dot{x}p - L. \quad (2-12)$$

证明在终点  $x_b$  处的能量的表达式为

$$\dot{x}_b \left( \frac{\partial L}{\partial x} \right)_{x=x_b} - L(x_b) = - \frac{\partial S_{\text{cl}}}{\partial t_b}. \quad (2-13)$$

而在起点  $x_a$  处的能量为

$$+ \frac{\partial S_{\text{cl}}}{\partial t_a}.$$

**提示** 由于所有的路径都是经典的, 故当一个端点随时间改变时, 路径也会改变.

## 2-2 量子力学的概率幅

[29] 现在可以给出量子力学的规则了。我们必须说明，从  $a$  到  $b$  的过程中，每个轨道对总概率幅的贡献为多少；不仅是那条特定的极值路径有贡献，而是所有路径都有贡献。它们对总概率幅贡献的大小是相等的，但贡献的相位却不同。给定路径对相位的贡献就是该路径的作用量以用量子作用量  $\hbar$  为单位而表示的值。总括起来是，从时刻  $t_a$  的点  $x_a$  到时刻  $t_b$  的点  $x_b$  的概率  $P(b, a)$  是  $a$  到  $b$  的概率幅的绝对值平方： $P(b, a) = |K(b, a)|^2$ 。这个概率幅是每条路径的贡献  $\phi[x(t)]$  之和：

$$K(b, a) = \sum_{\text{从 } a \text{ 到 } b \text{ 的所有路径}} \phi[x(t)]. \quad (2-14)$$

一条路径的贡献具有一个与作用量  $S$  成正比的相位：

$$\phi[x(t)] = \text{const } e^{(i/\hbar)S[x(t)]}. \quad (2-15)$$

这个作用量就是相应的经典系统的作用量 [见方程 (2-1)]。为了方便，我们选择该式中的常数来使  $K$  归一化，以后 (2-4 节) 更为数学地讨论方程 (2-14) 中对路径求和的含义时，我们还要提到它。

## 2-3 经典极限

在更加全面地进行数学探讨以前，我们对量子力学的规则与经典规则作个比较。乍一看来，根据方程 (2-15)，所有的路径都有同样的贡献，虽然它们的相位有改变。因此，现在不大清楚的问题是，在经典极限下，某个特定的路径是怎样变成最重要的路径的。但是经典近似相当于尺寸、质量、时间等都很大，以致  $S$  与  $\hbar (= 1.055 \times 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{s})$  相比是巨大的，因此，所贡献的相位  $S/\hbar$  是某个很大的角。 $\phi$  的实部 (或虚部) 是这个角的余弦 (或正弦)，它为正数或为负数的可能性是相同的。如果我们按照图 2-1 所示的那样，将一个路径移动一个小量  $\delta x$  (在经典范围内很小)，则  $S$  的改变在经典范围内也很小，但若采用微小的单位  $\hbar$  来量度，则  $S$  的改变就不小了。一般来说，路径的微小改变会造成相位的巨大改变，并且正弦或余弦将在正值和负值之间急速振荡。因此，这样一加起来，总的贡献为零；若一条路径给出一个正的贡献，那么另一无限接近的相邻路径 (在经典的范围内) 就给出一个等量的负贡献，所以不出现净贡献。

所以如果邻近的路径具有不同的作用量，它们所做的贡献就相互抵消，实

际上不必考虑这些路径. 但是对于  $S$  为极值的特殊路径  $\bar{x}(t)$ , 路径的微小改变(至少在一级近似下)不会使  $S$  发生变化. 所以这个区域内各路径的所有贡献几乎都是同相的(即相角均为  $S_{\text{cl}}/\hbar$ ), 不能抵消. 因此, 只有  $\bar{x}(t)$  附近的路径才有重要贡献. 在经典极限下, 我们只需认为这个特定轨道是有重要意义的. 按这样的方式, 经典的运动定律是从量子力学定律导出的.

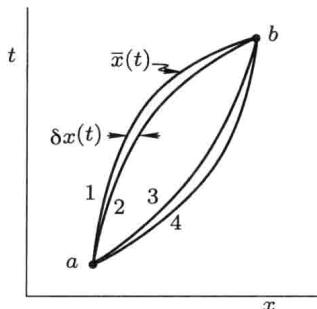


图 2-1 经典路径 1 [即  $\bar{x}(t)$ ] 是使某个积分(即作用量  $S$ )为最小值的那条轨道. 若该路径变化了  $\delta x(t)$  而成为路径 2, 则这积分没有一级变化, 由此决定了运动方程.

在量子力学中, 从  $a$  到  $b$  的概率幅是每条干涉选择路径的概率幅之和. 一条给定路径的概率幅  $e^{iS/\hbar}$  具有一个与作用量成正比的相位.

若作用量与  $\hbar$  相比显得很大, 那么宏观地看, 邻近路径如 3 和 4 具有稍微不同的作用量. 这样的路径将(由于  $\hbar$  是微小的)有很不同的相位, 以至于它们的贡献会相互抵消. 只有在经典轨道  $\bar{x}(t)$  附近, 当路径变化时, 作用量改变很小, 邻近的路径如 1 和 2 才会有相同相位的贡献, 因而干涉相长. 这就是为什么经典物理学近似[即只需考虑  $\bar{x}(t)$ ]在作用量远大于  $\hbar$  时是适用的理由.

我们可能注意到, 只要作用量仍在  $S_{\text{cl}}$  的邻近范围( $\hbar$ )内, 不同于  $\bar{x}(t)$  的那些轨道就有贡献. 经典轨道就不确定到这么小的范围内. 这个规则可以用来量度经典地确定轨道的精度限制.

其次, 考虑相位与端点位置  $(x_b, t_b)$  的关系. 若端点稍微变动一点, 相位变化就很大, 而  $K(b, a)$  则迅速地变化. 如果一个函数, 像  $S_{\text{cl}}$  那样, 仅当其辐角在经典尺度上作明显的变化时, 它才有所改变, 我们就称之为“光滑函数”. 我们看到,  $K(b, a)$  远不是光滑函数, 但是在上述经典近似情况下, 我们的讨论说明它具有形式

$$K(b, a) = \text{“光滑函数”} \cdot e^{iS_{\text{cl}}/\hbar}. \quad (2-16)$$

[31]

所有这些近似考虑都可应用于经典物理能适用的尺度(即  $S \gg \hbar$ ). 但是在一个原子尺度上,  $S$  与  $\hbar$  可以相比拟, 因此, 在方程(2-14)中, 必须仔细地改进所有的轨道. 没有任何特定的轨道能使其重要性压倒其他轨道, 当然, 方程(2-16)也就不一定是个好的近似了. 为了研究这些情况, 我们必须找出一种方法来实现方程(2-14)包含的那种求和.

## 2-4 对路径求和

与黎曼积分相似 虽然每条路径贡献之和的定性概念是清楚的,但是对这样的求和应给出更精确的数学上的定义. 路径的数目是个高阶无穷大,并且对路径的间隔应给予什么样的量度也是不明显的. 在这一节中,我们的目的就是给出这样一个数学定义. 对实际计算来说,这个定义是相当麻烦的. 在以后几章中,我们将叙述其他更有效的方法来对所有路径求和. 至于本节,我们希望数学上的困难(或者相当不简洁)不致影响读者对物理思想的理解.

可以先考虑普通的黎曼积分来开始我们的认识. 大体上,我们可以说,一个曲线下的面积  $A$  是曲线所有纵坐标的和. 更好一些,应当说,它正比于那个和. 但是为了使这观念确切,我们这样做: 取全部纵坐标的一个子集(例如相距为等间隔  $h$  的那些坐标),将这些纵坐标相加,得

$$A \sim \sum_i f(x_i), \quad (2-17)$$

这里求和在有限点集  $x_i$  上进行,如图 2-2 所示.

[32]

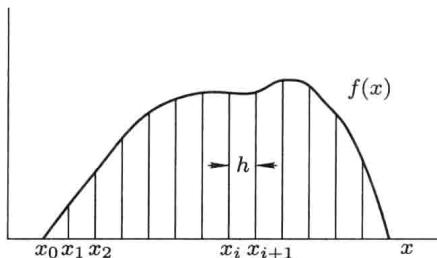


图 2-2 在普通黎曼积分的定义下,在横坐标与曲线之间画一系列纵线,纵线间隔的跨距为  $h$ ,积分(曲线与横坐标之间的面积)近似为  $h$  乘以纵坐标之和,当  $h$  趋于 0 时,该近似值趋于准确值.

对于路径积分,亦能用类似的定义. 在求极限的过程中,路径上的离散点之间的时间间隔  $\epsilon$  趋于零

下一步定义  $A$  为这个和的极限,这时,这些点集(也就是坐标子集)变得越来越完全,或者因为一个有限集决不是无限连续系统的任一可测部分,我们可以更恰当地说,这子集成了完备集的更好的代表. 我们可以逐步地取  $h$  越来越小的值,从而有秩序地达到这个极限. 这样,对每个  $h$  值我们将得到一个不同的和. 不存在任何极限. 为了求出这个过程的极限,我们必须指定某个取决于  $h$  的归一化因子. 当然,对于黎曼积分,这个因子就是  $h$  本身. 现在有极限,我们可以写出表达式

$$A = \lim \left[ h \sum_i f(x_i) \right]. \quad (2-18)$$

**构造和式** 我们可以按照类似的方法来定义对全部路径求和的概念. 首先, 选择全部路径的一个子集. 为做到这一点, 我们将时间这自变量分成宽为  $\epsilon$  的各个区间, 于是在值  $t_a$  和  $t_b$  之间得到一系列间距为  $\epsilon$  的  $t_i$  值, 在每一时刻  $t_i$ , 选定某个特殊点  $x_i$ . 将所有的点用折线连接起来, 就构造了一条路径. 对这种方式构造的全部路径定义一个求和是可能的, 办法是对 1 到  $N - 1$  之间  $i$  的所有  $x_i$  值取多重积分, 这里,

$$\begin{aligned} N_\epsilon &= t_b - t_a, \quad \epsilon = t_{i+1} - t_i, \\ t_0 &= t_a, \quad t_N = t_b, \quad x_0 = x_a, \quad x_N = x_b. \end{aligned} \quad (2-19) \quad [33]$$

得出的方程为

$$K(b, a) \sim \int \cdots \iint \phi[x(t)] dx_1 dx_2 \cdots dx_{N-1}. \quad (2-20)$$

我们并不对  $x_0$  或  $x_N$  积分, 因为它们是固定的端点  $x_a$  和  $x_b$ . 此式在形式上与方程 (2-17) 相当. 在目前情况下, 使  $\epsilon$  更小就可得到更能代表  $a$  和  $b$  之间所有可能路径的完备集的表达式. 但是, 正如黎曼积分中的情况一样, 我们不能求这个过程的极限, 因为这个极限并不存在. 同前面一样, 必须提供一个依赖于  $\epsilon$  的归一化因子.

遗憾的是, 定义这样一个归一化因子看来是个很困难的问题, 而且我们不知道在普遍情况下该如何去处理. 但是对那些已显出实际价值的情况, 我们能够给出其定义. 例如, 考虑式 (2-2) 给定的拉格朗日量的情况, 我们得出归一化因子为  $A^{-N}$ , 这里

$$A = \left( \frac{2\pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{1/2}. \quad (2-21)$$

以后我们将会看到 (例如节 4-1), 这个结果是怎样得到的. 有了这个因子, 极限就存在°, 可以写出

$$K(b, a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \cdots \iint e^{(i/\hbar)S[b,a]} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \cdots \frac{dx_{N-1}}{A}, \quad (2-22)$$

其中

$$S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) dt \quad (2-23)$$

是通过点  $x_i$  的轨道上的线积分, 在各点间取直线段, 如图 2-3 所示.

[34]

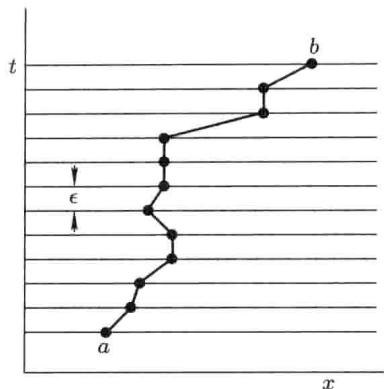


图 2-3 路径的求和定义为一个极限,首先路径仅由给定它的坐标  $x$  来刻划,其中  $x$  是在大量的由微小间隔  $\epsilon$  所分离的特定的时间处的坐标,因此,路径求和就是所有这些特别坐标上的一个积分.当  $\epsilon$  趋于 0 时,求得极限,由此得到准确值

用更精致一点的方法来定义这个路径是可能的.在  $i$  与  $i+1$  之间可以不用直线段,而用经典轨道的相应节段.因此可以说,  $S$  是通过特定点  $(x_i, t_i)$  的全部路径上的拉格朗日积分的最小值.有了这个定义,就不必借用任意直线段了.

**路径积分** 定义  $a$  和  $b$  之间的全部路径的一个子集有许多方法.这里所采用的定义从数学上看,也许不是最好的.例如,设拉格朗日量与  $x$  的加速度有关,这样构造的路径,其速度在许多点  $(x_i, t_i)$  是不连续的,即加速度在这些点为无限大,有可能这种情况要引起麻烦.但是在少数这样的例子中,我们已经有了经验,只要作替换

$$\ddot{x} = \frac{1}{\epsilon^2}(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) \quad (2-24)$$

就已经够了.在其他情况中,没有这种替换可以利用,或虽有但不够用,而且现有的对所有路径求和的定义使用起来确实太繁琐.

这种情况也出现在某些普通积分中,此时黎曼定义 [如方程 (2-18)] 就不够用了,必须求助于其他一些定义,如勒贝格 (Lebesgue) 定义.积分方法必须重新定义并不会破坏积分的概念.因此我们认为,路径求和的特殊定义 [如方程 (2-22) 给出的] 中可能的困难最终会要求提出一些新的定义.虽然如此,所有路径上求和的概念像普通积分的概念一样,与特殊定义是无关的.即使这种定义失败了,这概念也是有效的.因此,我们用一个不太严格的记号将所有路径上的求和写成

$$[35] \quad K(b, a) = \int_a^b e^{(i/\hbar)S[b, a]} \mathcal{D}x(t), \quad (2-25)$$

我们称它为路径积分.这个表达式的特定识别标记是符号  $\mathcal{D}$ .以后我们很少

使用式 (2-22) 给出的形式.

**问题 2-6** 规定路径积分的泛函种类可惊人地变化. 到目前为止, 我们已经考虑了一些泛函, 如式 (2-15). 这里我们要考虑另一个完全不同的类型. 后一种类型的泛函出现在一维相对论性的问题中. 设作一维运动的粒子只能以光速前后运动. 为了方便, 我们要定义一套单位, 使光速、粒子质量、普朗克常量都等于 1. 于是在  $xt$  平面上, 粒子沿斜率  $\pm 45^\circ$  的各个轨道来回穿梭运动, 如图 2-4 所示. 这种路径的概率幅可以定义为: 设将时间分成相等的微小间隔, 长度为  $\epsilon$ , 假定路径方向的倒向只能发生在这些间隔的边界, 即在  $t = t_a + n\epsilon$  处, 这里  $n$  是整数. 对于这个相对论性的问题, 沿这路径运动的概率幅不同于式 (2-15) 所定义的概率幅. 对于目前的情况, 正确的定义为

$$\phi = (i\epsilon)^R, \quad (2-26)$$

$R$  是沿路径的倒向或转弯数.

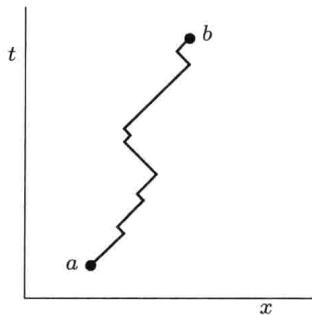


图 2-4 在二维平面上运动的相对论性粒子的路径是一条“Z”形直线段. 线段的斜率大小不变, 仅在转弯时斜率符号要改变. 对一条特别路径, 正如从  $a$  到  $b$  的传播子一样, 概率幅取决于沿一条路径的转弯数  $R$ , 如式 (2-26) 和式 (2-27) 所示

作为一个问题, 读者可以使用这个定义, 将一次转向、二次转向等路径的贡献叠加一起, 从而计算出传播子  $K(b, a)$ . 因此, 定出 [36]

$$K(b, a) = \sum_R N(R)(i\epsilon)^R, \quad (2-27)$$

$N(R)$  是转向  $R$  次的可能路径数. 最好是计算四个不同的  $K$ , 即概率幅  $K_{++}(b, a)$ ——从  $a$  点出发, 具有正的速度, 而且以正速度到达  $b$  点; 概率幅  $K_{+-}(b, a)$ ——以负速度从  $a$  点出发, 而以正速度到达  $b$  点; 以及用类似方式定义的概率幅  $K_{-+}(b, a)$  与  $K_{--}(b, a)$ .

其次, 设时间的单位定义为  $\hbar/mc^2$ . 如果时间间隔很长 ( $t_b - t_a \gg \hbar/mc^2$ ), 并且平均速度较小 [ $x_b - x_a \ll c(t_b - t_a)$ ], 证明: 除因子  $\exp[-(i/\hbar)mc^2(t_b - t_a)]$  外, 合成的传播子近似相同于一个自由粒子的传播子 [方程 (3-3) 给出]. 这里给出的概率幅和合成传播子的定义对于作一维运动的自由粒子的相对论理论是正确的. 该结果等价于这种情况下的狄拉克方程.

## 2-5 相继发生的事件

**两个事件的规则** 在这一节中, 我们要推出一个重要定律, 以便构成在时间上相继发生事件的概率幅. 设  $t_c$  为  $t_a$  与  $t_b$  之间的某时刻, 则沿  $a$  和  $b$  间任一路径的作用量可以写成

$$S[b, a] = S[b, c] + S[c, a]. \quad (2-28)$$

这可以从作用量按其定义是一个时间上的积分得出, 也可以由  $L$  不含比速度更高阶的对时间的导数这一事实得出. (如果不是这样, 我们就必须指明在  $c$  点的速度值, 甚至更高阶的导数值.) 利用定义传播子的式 (2-25), 可以写出

$$K(b, a) = \int_a^b e^{(i/\hbar)S[b, c] + (i/\hbar)S[c, a]} \mathcal{D}x(t). \quad (2-29)$$

[37] 将任一路径分成两部分是可能的. 第一部分的端点为  $x_a$  和  $x_c = x(t_c)$ , 第二部分的端点为  $x_c$  和  $x_b$ , 如图 2-5 所示. 可以先对从  $a$  到  $c$  的所有路径积分, 再对从  $c$  到  $b$  的所有路径积分, 最后, 对所有可能的  $x_c$  值积分. 在计算积分的第一步时,  $S[b, c]$  是常数, 因此, 结果可以写为

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_c^b e^{(i/\hbar)S[b, c]} K(c, a) \mathcal{D}x(t) dx_c, \quad (2-30)$$

式中的积分不仅必须在  $c$  和  $b$  之间的路径上进行, 而且包括对可变端点  $x_c$  的积分. 第二步, 对具有任意值的某点  $x_c$  与点  $b$  之间的所有路径进行积分, 最后剩下的工作就是对所有可能的  $x_c$  值作积分. 因此,

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} K(b, c) K(c, a) dx_c, \quad (2-31)$$

从方程 (2-22) 开始讨论也许更清楚些. 选择一个离散的时刻作为  $t_c$ , 令  $t_c = t_k$  和  $x_c = x_k$ . 首先对  $i < k$  的  $x_i$  进行所有的积分, 这将在积分中引进一个因子  $K(c, a)$ . 其次, 再对  $i > k$  的所有  $x_i$  积分, 这将引进因子  $K(b, c)$ . 最后要做的工作是对  $x_c$  进行积分. 这个结果可写成式 (2-31).

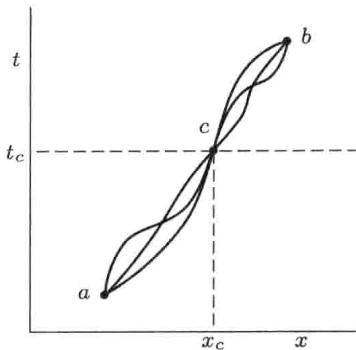


图 2-5 对所有路径求和的一个办法是, 先对时刻  $t_c$  通过点  $x_c$  的路径求和, 然后再对  $x_c$  求和. 从  $a$  经  $c$  到  $b$  的每条路径的概率幅是两个因子的乘积: (1) 从  $a$  到  $c$  的概率幅; (2) 从  $c$  到  $b$  的概率幅. 因此, 这对所有通过  $c$  的路径求和也是有效的: 从  $a$  经  $c$  到  $b$  的总概率幅是  $K(b, c)K(c, a)$ . 所以, 对可选择的量 ( $x_c$  的值) 求和, 我们就得到从  $a$  到  $b$  的总概率幅, 即方程 (2-31)

这一结果可以小结如下: 从  $a$  到  $b$  的所有可选择的路径能用粒子在时刻  $t_c$  所通过的位置  $x_c$  来标记. 于是, 从  $a$  运动到  $b$  的粒子的传播子可以根据下列规则计算:

1. 从  $a$  到  $b$  的传播子是从  $a$  到  $c$ 、然后再到达  $b$  的所有可能  $x_c$  的值概率幅和.

2. 从  $a$  到  $c$  再到  $b$  的概率幅就是从  $a$  到  $c$  的传播子乘以从  $c$  到  $b$  的传播子. [38]

因此, 我们得到规则如下: 对于时间上相继发生的事件, 其概率幅相乘.

**推广到几个事件** 这个重要规则有许多应用, 有一些我们将在后面的章节中深入讨论. 这里我们要说明一个应用, 使我们能用另外一条途径来推导传播子的方程 (2-22).

将所有的路径进行两次分割是完全可能的: 一次在  $t_c$ , 另一次在  $t_d$ . 一个粒子从  $a$  运动到  $b$  的传播子可以写为

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K(b, c)K(c, d)K(d, a) dx_d dx_c. \quad (2-32)$$

这就是说, 一个从  $a$  到  $b$  的粒子可看成它先从  $a$  运动到  $d$ , 再从  $d$  到  $c$ , 最后从  $c$  到达  $b$ . 通过这样一条路径的概率幅是该路径上各部分传播子的乘积. 在所有可能的值  $x_c$  和  $x_d$  上, 对这个乘积积分就得到从  $a$  到  $b$  的所有这种路径的传播子.

继续进行这个过程, 直到将时间分成  $N$  个间隔, 其结果为

$$K(b, a) = \int_{x_{N-1}} \cdots \int_{x_2} \int_{x_1} K(b, N-1) K(N-1, N-2) \cdots \\ K(i+1, i) \cdots K(1, a) dx_1 dx_2 \cdots dx_{N-1}. \quad (2-33)$$

这就是说, 我们可以用不同于式 (2-22) 给出的方法来定义传播子. 在这个新的定义中, 一个粒子在无限小的时间间隔  $\epsilon$  的两点间运动的传播子为

$$K(i+1, i) = \frac{1}{A} \exp \left[ \frac{i\epsilon}{\hbar} L \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon}, \frac{x_{i+1} + x_i}{2}, \frac{t_{i+1} + t_i}{2} \right) \right], \quad (2-34)$$

它正确到  $\epsilon$  的一阶近似. 因此, 根据时间上相继发生事件的概率幅乘法规则, 对一个完整路径的概率幅, 我们有

$$\phi[x(t)] = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{i=0}^{N-1} K(i+1, i). \quad (2-35)$$

然后利用可选择的路径的概率幅的相加规则, 我们可得到  $K(b, a)$  的一个定义, [39]

## 2-6 一些说明

在电子的相对论性理论中, 我们发现不可能将一条路径的概率幅表示为  $e^{iS/\hbar}$ , 也不存在任何别的简单方法. 但是, 概率幅合成定律仍然成立 (要作一些小的修正). 轨道的概率幅概念仍然存在. 事实上, 它仍由式 (2-35) 给出. 唯一的区别是, 相对论性理论中的  $K(i+1, i)$  不像式 (2-34) 那么容易表示, 其所以复杂是因为必须考虑自旋和正负电子对产生的可能性.

在变量数目较多的非相对论系统中, 甚至在电磁场的量子理论里, 概率幅合成定律不但仍然成立, 而且概率幅本身还遵循本章所讨论的那些规则. 也就是说, 一个变量的每种运动都有一个概率幅, 其相位是与之相联系的作用量的  $1/\hbar$  倍.

这些更为复杂的问题将在以后几章中处理.

# 第三章

[41]

## 用一些特例阐述概念

---

在这一章中, 我们将阐述支配某些特殊运动类型的传播子. 为了阐述关于量子力学定律支配下运动的某些物理直觉, 我们将探索数学结果的物理意义. 将引入波函数, 并描述它与传播子的关系. 这是将我们研究量子力学的方法与传统方法连系起来的第一步.

[42]

为了计算全部路径的和, 我们还将引入某些特殊的数学方法. 全部路径求和的概念在第二章中已用一个特定的计算方法描述过. 虽然那种方法可以阐明这个概念, 但它却是一个使用不便的研究工具. 本章将引入一个较简单的方法, 它在以后的工作中将会很有用.

这样, 本章有三个目的: 加深我们对量子力学原理的理解, 建立我们的方法与另一些方法之间的联系, 引入某些有用的数学方法.

### 3-1 自由粒子

**路径积分** 现在用第二章中描述的对全部路径求和的方法来计算自由粒子的传播子. 自由粒子的拉格朗日量是

$$L = m \frac{\dot{x}^2}{2}. \quad (3-1)$$

于是, 借助于式 (2-21)–(2-23), 自由粒子的传播子 (以下标 0 区分) 为

$$\begin{aligned} K_0(b, a) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{N/2} \\ &\times \int \cdots \int \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} \sum_{i=1}^N (x_i - x_{i-1})^2 \right\} dx_1 \cdots dx_{N-1} \end{aligned} \quad (3-2)$$

这是一组高斯积分, 即形如

$$\int [\exp(-ax^2)]dx \quad \text{或} \quad \int [\exp(-ax^2 + bx)]dx$$

的积分. 因高斯函数积分后仍旧是高斯函数, 所以可对一个个变量逐步进行积分. 积分完成后, 可取极限. 结果是

$$K_0(b, a) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar(t_b - t_a)} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)} \right\}. \quad (3-3)$$

[43] 其计算过程如下. 首先注意到

$$\begin{aligned} & \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{2/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} [(x_2 - x_1)^2 + (x_1 - x_0)^2] \right\} dx_1 \\ &= \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \cdot 2\epsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \cdot 2\epsilon} (x_2 - x_0)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (3-4)$$

然后我们将这个结果乘以

$$\left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \epsilon} (x_3 - x_2)^2 \right\}, \quad (3-5)$$

再对  $x_2$  积分. 结果与式 (3-4) 相似, 只不过  $(x_2 - x_0)^2$  变成了  $(x_3 - x_0)^2$ , 并且两处的  $2\epsilon$  都换成  $3\epsilon$ . 这样, 我们得到

$$\left( \frac{m}{2\pi i \hbar \cdot 3\epsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \cdot 3\epsilon} (x_3 - x_0)^2 \right\}.$$

用这种方式可以建立一个递推过程,  $n - 1$  步之后, 得

$$\left( \frac{m}{2\pi i \hbar \cdot n\epsilon} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar \cdot n\epsilon} (x_n - x_0)^2 \right\}.$$

因为  $n\epsilon = t_n - t_0$ , 容易看出,  $N - 1$  步之后, 结果与式 (3-3) 完全相同.

还有另一个办法. 式 (3-4) 可以用来对那些  $i$  是奇数的变量  $x_i$  积分 (假定  $N$  是偶数). 结果仍是像式 (3-2) 那样的表达式. 只不过积分变量只有一半了. 剩下的变量定义在时间间隔为  $2\epsilon$  的点上. 因此, 至少在  $N$  是  $2^k$  的情况下, 这样作  $k$  步之后, 便得到了式 (3-3) 的结果.

**问题 3-1** 一粒子由  $a$  点到达  $b$  点的概率按定义应正比于传播子  $K(b, a)$  的绝对值的平方. 对于自由粒子传播子式 (3-3), 这就是

$$P(b)dx = \frac{m}{2\pi \hbar(t_b - t_a)} dx. \quad (3-6)$$

显然, 这是相对概率, 因为对  $x$  全部区域的积分发散. 这种特别的归一化意味着什么? 证明, 这相当于粒子在  $a$  点开始运动时的动量为任何值的可能性一样大的经典图像. 证明粒子动量在  $dp$  区间相应的相对概率是  $dp/2\pi\hbar$ .

**动量和能量** 现在研究自由粒子传播子的某些含义. 为了方便, 令  $a$  表示时间和空间的原点. 到达另一点  $b = (x, t)$  的概率幅是

$$K_0(x, t; 0, 0) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{1/2} \exp \frac{imx^2}{2\hbar t}. \quad (3-7)$$

如果时间固定, 概率幅随距离而变化, 如图 3-1 所示, 其中只画出了  $\sqrt{i}K_0(x, t; 0, 0)$  的实部.

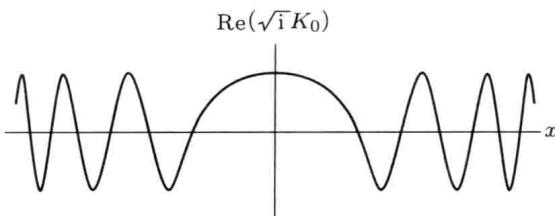


图 3-1 粒子从原点出发, 经过  $t$  时间后到达不同距离  $x$  的波幅的实部. 虚部 (未画出来) 是相位差  $90^\circ$  的类似波, 因此, 波幅的绝对值的平方是常数. 即在  $x$  大处, 波长短, 就是说, 仅当经典粒子以高速运动, 它才能到达  $x$  大的地方. 一般地, 波长与经典动量成反比 [式 (3-10)]

我们看到, 离原点越远, 振荡变得越快. 如果  $x$  很大, 以致发生了许多次振荡, 则相继节点之间的距离几乎是常数, 至少接下去的几个振荡是这样. 也就是说, 概率幅的性质很像一个波长缓慢变化的正弦波. 求出这个波的波长  $\lambda$  是有意义的.  $x$  改变一个波长  $\lambda$ , 必然使概率幅相位增加  $2\pi$ . 即

$$2\pi = \frac{m(x + \lambda)^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar t} = \frac{mx\lambda}{\hbar t} + \frac{m\lambda^2}{2\hbar t}. \quad (3-8)$$

相对于  $x\lambda$ , 可以忽略量  $\lambda^2$  (即假设  $x \gg \lambda$ ), 我们发现,

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m(x/t)}. \quad (3-9)$$

根据经典观点, 一个粒子在时间间隔  $t$  内由原点运动到  $x$ , 其速度为  $x/t$ , 而动量为  $mx/t$ . 根据量子力学的观点, 指定粒子的经典动量为  $p = mx/t$  就能充分描述运动, 这时, 概率幅以波长

$$\lambda = \hbar/p \quad (3-10)$$

在空间中变化.

我们可以更一般地证明这个关系. 假定有某种大型仪器, 诸如磁分析仪, 它能把给定动量  $p$  的粒子引到给定点. 我们将证明, 每当仪器大到足以使经典

物理提供一个好的近似时, 到达规定点的粒子概率幅便在空间迅速变化, 其波长为  $h/p$ . 因为我们已经看到, 在这种情况下, 传播子近似为

$$K \sim \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S_{\text{cl}}(b, a) \right]. \quad (3-11)$$

终点位置  $x_b$  的改变引起经典作用量的变化. 如果此作用量比  $\hbar$  大得多 (半经典近似), 则传播子将随着  $x_b$  的改变而非常迅速地振荡. 端点每单位位移的相位改变量是

$$k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial S_{\text{cl}}}{\partial x_b}, \quad (3-12)$$

但是,  $\partial S_{\text{cl}}/\partial x_b$  是粒子到达点  $x_b$  时的经典动量 (参看问题 2-4). 这样,  $p = \hbar k$ . 量  $k$  (波的单位距离相位的改变) 称为波数, 并且它是非常便于使用的. 因为波长是相位改变了  $2\pi$  的距离, 所以  $k = 2\pi/\lambda$ . 式 (3-12) 是德布罗意 (de Broglie) 公式, 它把动量与波数联系起来了,  $p = \hbar k$ .

下面, 我们研究式 (3-7) 给出的自由粒子传播子随时间的变化关系. 假定我们固定距离而变化时间. 传播子的实部变化如图 3-2 所示. 频率和概率幅都随  $t$  改变.

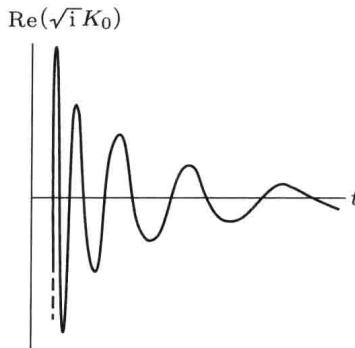


图 3-2 在给定点发现粒子的概率幅随时间的变化. 这里只画出了实部. 振荡频率正比于经典粒子在时间间隔  $t$  到达给定点所必须具有的能量

[46]

假设  $t$  很大, 并且先不考虑概率幅随着  $t$  的变化. 振荡周期  $T$  定义为相位增加  $2\pi$  所需要的时间. 这样,

$$2\pi = \frac{mx^2}{2\hbar t} - \frac{mx^2}{2\hbar(t+T)} = \frac{mx^2}{2\hbar t^2} \left( \frac{T}{1+T/t} \right). \quad (3-13)$$

引入角频率  $\omega = 2\pi/T$ , 并假设  $t \gg T$ , 则此式可写为

$$\omega \approx \frac{m}{2\hbar} \left( \frac{x}{t} \right)^2. \quad (3-14)$$

因为  $m(x/t)^2/2$  是自由粒子的经典能量, 此式意味着:

$$\text{能量} = \hbar\omega. \quad (3-15)$$

像动量与波长之间的关系一样, 对于任何可由经典物理充分描述的仪器, 式 (3-15) 成立; 并且像前一关系一样, 它也可以由更一般的论述得到.

参看式 (3-11), 端点时间  $t_b$  的任何变化都会引起传播子的迅速振荡. 得到的频率是

$$\omega = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial S_{cl}}{\partial t}. \quad (3-16)$$

量  $-\partial S_{cl}/\partial t$  的经典解释是能量  $E$  (参看问题 2-5). 于是

$$\omega = \frac{E}{\hbar}. \quad (3-17)$$

这样, 用下述规则便把动量和能量的概念推广到量子力学中了:

[47]

1. 如果概率幅正比于  $\exp(i k x)$ , 则说粒子的动量为  $\hbar k$ .
2. 如果概率幅有确定的频率, 随时间变化正比于  $\exp(-i\omega t)$ , 则说其能量是  $\hbar\omega$ .

刚才我们已经证明, 在经典极限, 这个规则与能量和动量的定义一致.

**问题 3-2** 用代入法证明, 只要  $t_b$  大于  $t_a$ , 自由粒子传播子  $K_0(b, a)$  满足微分方程

$$\frac{\partial K_0(b, a)}{\partial t_b} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 K_0(b, a)}{\partial x_b^2}. \quad (3-18)$$

## 3-2 通过狭缝的衍射<sup>◦</sup>

**假想的实验** 我们可以用另一个更为复杂的例子进一步来研究量子力学的物理解释以及它与经典力学的关系. 假设一个粒子在  $t = 0$  时离开原点, 间隔时间  $T$  之后, 我们在一定点  $X$  处发现了它. 按经典观点, 我们应该说, 此粒子具有速度  $V = X/T$ . 这意味着, 如果粒子自由地继续前进一段时间  $t'$ , 则它应该又移动一段距离  $x' = Vt'$ . 为了用量子力学观点分析这点, 我们试图解决下面的问题:

在  $t = 0$ , 粒子从原点  $x = 0$  出发. 在一段时间  $T$  以后, 假定知道粒子在  $X - b$  至  $X + b$  之间. 我们问: 又一段时间  $t'$  之后, 发现粒子从  $x'$  移到  $X$  处的概率是多少? 可以认为, 在  $T + t'$  时, 粒子到达位置  $x'$  的净概率幅是由原点到终点的各轨道贡献之和, 只要那些轨道在  $T$  时刻位于  $X - b$  至  $X + b$  之间.

[48] 我们过一会儿再来计算这个问题, 现在需要先议论一下这儿考虑的实验是哪种类型的实验。我们如何能够知道粒子在  $X - b$  和  $X + b$  之间通过? 一个办法是在时刻  $T$  对粒子作一次观察, 看它是否在  $X \pm b$  之间通过。这或许是一种最自然的方式, 但是, 由于粒子与观察仪器之间的复杂相互作用, 这种方法往往难于详细分析, 而有一个另外的实验方法则较为容易分析。

我们假设, 比如说用非常强的光, 在时刻  $T$  观察  $x$  轴上除了  $X \pm b$  区间之外的每一处。如果我们发现了粒子, 我们便停止实验。我们只考虑那些情况, 其中除  $\pm b$  区域之外的其余区域经过彻底考察, 证明没有粒子。即排斥了所有那些通过距  $X$  为  $\pm b$  的界限之外的轨道。实验情况如图 3-3 所示。于是概率幅可以写为

$$\psi(x') = \int_{-b}^b K(x + x', T + t'; X + y, T) K(X + y, T; 0, 0) dy. \quad (3-19)$$

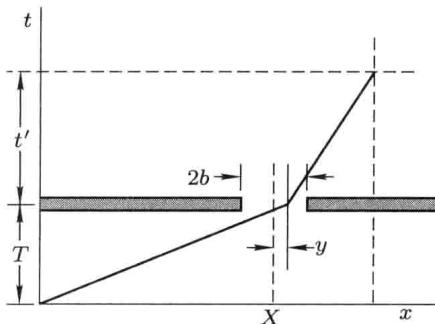


图 3-3 一个在  $t = 0$  时刻从  $x = 0$  出发的粒子, 限于  $t = T$  时刻通过  $X - b$  到  $X + b$  之间。我们希望计算出  $t'$  秒之后(即在  $t = T + t'$  时)在某点  $x$  发现这个粒子的概率。按照经典定律, 粒子必将在  $(X - b)(1 + t'/T)$  和  $(X + b)(1 + t'/T)$  之间, 即在原来狭缝的直线的延长线之间。然而, 量子力学定律表明, 这样的粒子出现在这种经典界限之外的概率不为零。

我们不可能仅仅应用自由粒子运动定律来研究这个问题, 因为实际上粒子受狭缝约束。因此, 我们把这个问题分成两个相继的自由粒子运动。第一个是粒子在  $t = 0$  时从  $x = 0$  出发而在  $t = T$  时到达  $x = X + y$  点, 其中  $|y| \leq b$ 。第二个是粒子由  $t = T$  时的  $X + y$  点到  $t = T + t'$  时的  $x$  点。总概率幅是这样两种自由粒子传播子乘积的积分, 如式 (3-19) 所示

[49] 此式是按照相继事件概率幅的组合规则写出的。第一个事件是粒子从原点跑到狭缝。第二个事件是粒子由狭缝前进到  $x'$  点。狭缝有一定的宽度, 而经过狭缝的每个元间隔的通道都是沿完整路径行进的一种可能方式。这样, 我们必须对狭缝的宽度积分。所有不通过狭缝的粒子都被俘获而从实验中清除; 这种粒子的概率幅是不予考虑的。所有通过狭缝的粒子像自由粒子一样运动,

其传播子由式 (3-3) 给出. 于是, 概率幅是

$$\begin{aligned}\psi(x') = & \int_{-b}^b \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t'} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i m (x' - y)^2}{2\hbar t'} \right\} \\ & \times \left( \frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i m (X + y)^2}{2\hbar T} \right\} dy.\end{aligned}\quad (3-20)$$

这个积分可以用菲涅耳积分表示. 这样的表述包含了我们所探求的物理结果, 但是由于菲涅耳积分形式的数学复杂性, 物理结果很难看出. 为了不让数学复杂性扰乱物理结果, 我们将建立另一个不同的、但类似的表达式, 它会导致较简单的数学形式.

**高斯狭缝** 我们引入函数  $G(y)$  作为被积函数的一个因子. 如果这个函数定义为: 在  $y = -b$  和  $y = b$  之间等于 1, 而在其他地方等于零, 则积分限可以扩展到无限而对结果不会有任何影响. 于是,

$$\psi(x') = \frac{m}{2\pi i \hbar \sqrt{t' T}} \int_{-\infty}^{\infty} G(y) \exp \left\{ \frac{i m}{2\hbar} \left[ \frac{(x' - y)^2}{t'} + \frac{(X + y)^2}{T} \right] \right\} dy,\quad (3-21)$$

式中

$$G(y) = \begin{cases} 1 & \text{当 } -b \leq y \leq b, \\ 0 & \text{当 } |y| > b. \end{cases}$$

如果不是这样, 而定义  $G(y)$  为一个高斯函数, 则

$$G(y) = \exp(-y^2/2b^2).\quad (3-22)$$

这个函数的形状如图 3-4 所示. 这个曲线的有效宽度与参数  $b$  有关. 对于这个特定函数, 曲线之下的面积大约有三分之二位于  $-b$  和  $+b$  之间.

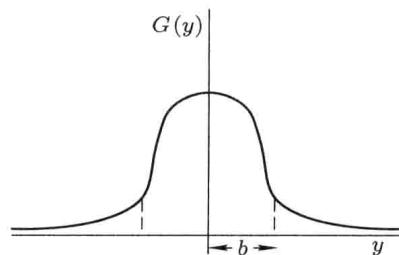


图 3-4 高斯函数  $G(y) = e^{-y^2/2b^2}$  的形状. 这个曲线的形状与具有标准偏差  $b$  的正态分布的形状相同

我们不知道如何为我们的假想实验设计金属零件, 使之产生这种高斯狭缝. 然而, 概念上没有困难. 现在的情况是, 粒子在时刻  $T$  以正比于函数  $G(y)$

的相对概率幅沿  $x$  轴分布 (相对概率正比于  $[G(y)]^2$ ). 若粒子按经典规律运动, 则我们可以期望, 在间隔时间  $t'$  之后会发现, 它们类似地以  $X$  之后距离  $x'_1$  为新中心沿  $x$  轴分布,  $x'_1$  和变宽了的宽度参数  $b_1$  由下式给出:

$$x'_1 = \left(\frac{X}{T}\right) t', \quad b_1 = b \left(1 + \frac{t'}{T}\right), \quad (3-23)$$

如图 3-5 所示.

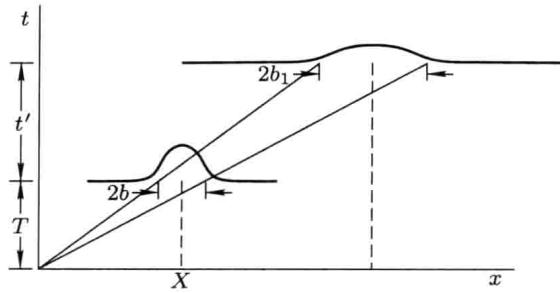


图 3-5 粒子通过高斯狭缝运动的路径. 如果粒子服从经典运动定律, 则粒子在  $T + t'$  时刻的分布会与其在  $T$  时刻的分布具有同样形状. 其差别只是前者的展宽与飞行时间成正比. 分布的特征宽度会从  $2b$  增加到  $2b_1 = 2b(1 + t'/T)$ . 而根据量子力学运动规律, 实际的展宽比它要大

用这种高斯狭缝, 概率幅的表达式是

$$\begin{aligned} \psi(x') = & \frac{m}{2\pi i \hbar \sqrt{t' T}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \left[ \frac{x'^2}{t'} + \frac{X^2}{T} \right] \right. \\ & \left. + \frac{im}{\hbar} \left[ -\frac{x'}{t'} + \frac{X}{T} \right] y + \left[ \frac{im}{2\hbar} \left( \frac{1}{t'} + \frac{1}{T} \right) - \frac{1}{2b^2} \right] y^2 \right\} dy. \end{aligned} \quad (3-24)$$

这个积分的形式为

$$\int_{-\infty}^{\infty} [\exp(\alpha x^2 + \beta x)] dx = \sqrt{\frac{\pi}{-\alpha}} \exp\left(-\frac{\beta^2}{4\alpha}\right)$$

当  $\operatorname{Re}(\alpha) \leq 0$ , (3-25)

配好指数的平方便可完成这个积分. 于是, 概率幅变为

$$\begin{aligned} \psi(x') = & \frac{m}{2\pi i \hbar \sqrt{t' T}} \left( \frac{-\pi}{(im/2\hbar)(1/t' + 1/T) - 1/2b^2} \right)^{1/2} \\ & \times \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \left( \frac{x'^2}{t'} + \frac{X^2}{T} \right) + \frac{(m^2/4\hbar^2)(-x'/t' + X/T)^2}{(im/2\hbar)(1/t' + 1/T) - 1/2b^2} \right\}. \end{aligned} \quad (3-26)$$

些项, 概率幅的表达式就变成

$$\begin{aligned}\psi(x') = & \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar}} \left( T + t' + it'T \frac{\hbar}{mb^2} \right)^{-1/2} \\ & \times \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \left( \frac{x'^2}{t'} + V^2 T \right) + \frac{(m^2/2\hbar^2 t'^2)(x' - Vt')^2}{(im/\hbar)(1/t' + 1/T) - 1/b^2} \right\}. \quad (3-27)\end{aligned}$$

我们首先考虑粒子到达  $x$  轴各个点的相对概率. 这个概率正比于概率幅绝对值的平方. 幅角为虚数的指数函数的绝对值等于 1. 于是, 通过有理化式 (3-27) 中的第二个因子和后一指数的分母, 我们得到

$$P(x')dx = \frac{m}{2\pi\hbar T} \frac{b}{\Delta x} \exp \left[ \frac{-(x' - Vt')^2}{(\Delta x)^2} \right] dx, \quad (3-28)$$

其中我们已经用了替换

$$(\Delta x)^2 = b^2 \left( 1 + \frac{t'}{T} \right) + \frac{t'^2 \hbar^2}{m^2 b^2} = b_1^2 + \frac{t'^2 \hbar^2}{m^2 b^2}. \quad (3-29)$$

正如我们所期望的, 概率分布呈现出以式 (3-23) 的点  $x'_1 = V/t'$  为中心的高斯曲线. 然而, 分布的延展  $\Delta x$  大于所预期的式 (3-23) 的  $b_1$ . 这点可用下述方式解释. 假设  $a_1$  和  $a_2$  是两个独立的无规变量, 它们与其平均值的方均根偏差分别是  $\alpha_1$  和  $\alpha_2$ . 那么, 若  $a_3 = a_1 + a_2$ , 则  $a_3$  与其平均值的方均根偏差是  $\alpha_3 = (\alpha_1^2 + \alpha_2^2)^{1/2}$ . 现在, 特定分布的方均根偏差是分布延展或分布宽度的量度. 事实上, 对于高斯分布  $\exp(-x^2/2b^2)$ , 方均根是  $b$ .

于是, 在目前情况下我们发现, 量子力学系统表现为似乎它还有一个额外的无规变量  $x_2$ , 这个  $x_2$  的方均根偏差是

$$\Delta x_2 = \frac{\hbar t'}{mb}. \quad (3-30)$$

有物理意义的正是这个额外偏差  $\Delta x_2$  (或展宽), 而不是那个表面上看来是额外的变量  $x_2$ . 由于其中包含了常数  $\hbar$ , 很清楚, 从性质上讲, 这一项是量子力学的, 这项对于质量小的粒子和狭缝很窄的情况都是重要的.

这样, 量子力学告诉我们, 小粒子通过狭缝后, 其位置不确定. 这个不确定量  $\Delta x_2$  正比于从所通过的狭缝到下一个观察点的时间间隔  $t'$ . 如果我们引入经典速度概念, 则可以说, 通过狭缝会引起速度不确定, 其大小为

$$\delta v = \frac{\hbar}{mb}. \quad (3-31)$$

我们可以取狭缝宽度参数  $2b$  为粒子通过这个狭缝时位置不确定性的度量. 若把这个不确定记为  $\delta x$ , 并把乘积  $mv$  记作  $p$ , 则式 (3-31) 变为

$$\delta p \delta x = 2\hbar. \quad (3-32)$$

我们又一次得到了测不准原理的一种陈述. 它说明, 尽管经典上讲, 可以知道速度, 然而它却对将来的位置带来新增加的不确定性, 似乎通过宽度为  $\delta x$  的狭缝时会引起一个无规动量. 若用经典概念定性地描述量子力学的结果, 则可以说, 知道了位置, 就会引起动量不确定.

[53] 式 (3-28) 中出现在指数前面的因子的情况又如何呢? 如果我们将这个表达式对从  $-\infty$  到  $+\infty$  的  $x$  的整个区域积分, 结果为

$$P(\text{任何 } x) = \frac{m}{2\pi\hbar T} b\sqrt{\pi}. \quad (3-33)$$

这必然是粒子通过狭缝的概率, 因为这正是并且只是对那些通过狭缝的粒子积分. 不过我们还有另一种方法可以得到这个结果. 假设我们取传播子  $K(X+y, T; 0, 0)$  的模方, 这个传播子包括了式 (3-20) 中积分的后一半. 这恰是粒子到达这个狭缝的点  $X+y$  的单位距离上的概率. 它是

$$P(X+y)dy = \frac{m}{2\pi\hbar T} dy. \quad (3-34)$$

这个概率与狭缝上的位置无关. 于是, 若我们将其乘以狭缝的宽度, 便得到粒子到达狭缝的总概率. 这意味着, 高斯狭缝的有效宽度是  $\sqrt{\pi}b$ . 若我们使用原来的锐边狭缝, 则会发现, 有效宽度是  $2b$ .

**问题 3-3** 将式 (3-20) 中的概率幅平方, 再对  $x$  积分, 证明: 通过原狭缝的概率是

$$P(\text{通过}) = \frac{m}{2\pi\hbar T} 2b. \quad (3-35)$$

此问题中会出现积分

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(iax) dx. \quad (3-36)$$

这是  $a$  的狄拉克  $\delta$  函数的积分表示<sup>①</sup>.

这样, 量子力学结果与下述概念一致, 即粒子通过一个狭缝的概率等于粒子到达这个狭缝的概率.

**动量和能量** 下面我们将再一次证实, 当动量确定时, 概率幅变化正比于  $\exp(ikx)$ . 我们回过头来详细研究式 (3-27) 中给出的概率幅. 这次我们尽量安排实验条件, 以便尽可能精确地知道粒子通过狭缝之后的速度.

[54] 完全与任何量子力学的考虑无关, 速度本来就有一经典不确定性  $b/T$ . 对于任何给定的狭缝宽度, 我们只要选择  $T$  非常大, 总可以使这个不确定性小

<sup>①</sup> 参看附录中的积分表中式 (A.9) 或 L. I. Schiff, Quantum Mechanics, 2nd ed., p. 50—52, McGraw-Hill, New York, 1955.

得可忽略不计. 我们还可以取  $X$  特别大, 以致平均速度  $X/T = V$  不会趋于零. 将  $V$  和  $t'$  看作常数, 在大  $T$  极限下, 概率幅的表达式为

$$\begin{aligned}\psi(x') &\approx \text{const} \left(1 + it' \frac{\hbar}{mb^2}\right)^{-1/2} \\ &\times \exp \left\{ \frac{imx'^2}{2\hbar t'} + \frac{(m^2/2\hbar^2 t'^2)(x' - Vt')^2}{im/\hbar t' - 1/b^2} \right\}.\end{aligned}\quad (3-37)$$

下面我们必须安排得使动量的量子力学不确定性  $\hbar/b$  很小. 即我们取  $b$  很大, 可以忽略  $1/b^2$ . 于是可将概率幅写为

$$\psi(x') \approx \text{const} \exp \left\{ \frac{imV}{\hbar} x' - \frac{imV^2}{2\hbar} t' \right\}. \quad (3-38)$$

这是一个重要的结果. 它表明, 若安排好实验, 使我们知道粒子的动量就是  $p$ , 则在  $t$  时刻, 粒子到达  $x$  点的概率幅是

$$\psi(x) \approx \text{const} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} px - \frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} t \right\}. \quad (3-39)$$

注意, 这是有确定波数  $k = p/\hbar$  的波. 并且它有确定的频率  $\omega = p^2/2m\hbar$ . 这意味着, 可以说, 动量为  $p$  的自由粒子有确定的量子力学能量 (定义为  $\hbar$  乘以频率)  $p^2/2m$ , 它恰好等于经典力学中相应的量.

到达任何特定点  $x$  的概率 (正比于概率幅的模方) 在此情况下与  $x$  无关. 这样, 确切地了解速度便意味着完全不知道位置. 在一个能精确得知速度的实验中, 我们会完全失去精确预言位置的可能性. 我们已经看到, 反过来也是正确的. 由于存在量子力学展宽 (它反比于狭缝宽度  $2b$ ), 精确知道位置, 就会预先排除任何关于速度的知识. 于是, 若已知它在哪儿, 就不能说清它跑得多快; 若已知它跑得多快, 则就不能说出它在哪儿. 这又是一个说明测不准原理的例子.

### 3-3 锐边狭缝的结果

[55]

抛开极限情形, 我们转向下述情况, 其狭缝宽度与量子力学展宽在大小上可以相比, 而且运动时间和距离都不是极端大. 已经看到, 高斯狭缝导致高斯分布. 若我们使用更现实的锐边狭缝, 并得到菲涅耳积分结果, 则在通过狭缝后时刻  $t'$  的分布概率如图 3-6 所示.

分布用下式表示<sup>o</sup>

[56]

$$P(x') = \frac{m}{2\pi\hbar(T+t')} \left( \frac{1}{2}[C(u_+) - C(u_-)]^2 + \frac{1}{2}[S(u_+) - S(u_-)]^2 \right), \quad (3-40)$$

其中

$$u_{\pm} = \frac{(x' - Vt') \pm b(1 + t'/T)}{\sqrt{(\pi\hbar t'/m)(1 + t'/T)}}, \quad (3-41)$$

而  $C(u)$  和  $S(u)$  是菲涅耳积分的实部和虚部. 这个概率分布中的头一个因子就是式 (3-6) 给出的自由粒子概率分布. 剩下的因子包括了菲涅耳积分<sup>①</sup>的实部虚部的一种组合. 这个因子正是图 3-6 所示的曲线变化的原因.

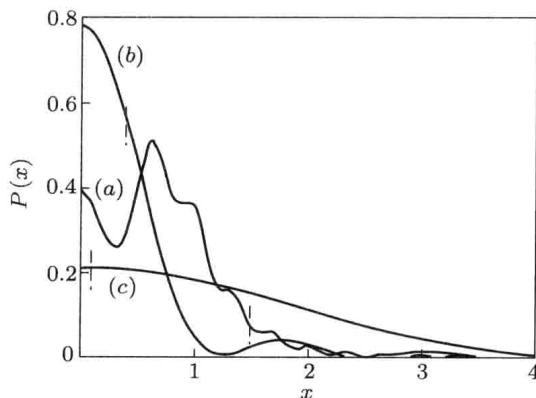


图 3-6 这三个曲线表明了通过不同宽度的锐边狭缝的粒子分布. 这些分布是对称于平均位置  $V(T+t')$ , 这里仅画出右半. 经典预言宽度  $b_1 = b(1+t'/T)$  的位置用虚垂线标出. 选了三个不同的经典宽度  $b_1$  与量子力学展宽  $\Delta x_2$  的比值: 曲线 (a),  $b_1/\Delta x_2 = 15$ ; 曲线 (b),  $b_1/\Delta x_2 = 1$ ; 曲线 (c),  $b_1/\Delta x_2 = 1/15$ . 在每种情况下, 分布的展宽都超过了经典宽度. 分布的方均根宽度近似正比于  $[(\Delta x_2)^2 + (b_2)^2]^{1/2}$

这样, 对于两种狭缝, 一般的结果是相同的. 发现粒子的最可几位置都在狭缝的经典投影之间. 在此区域之外, 还有量子力学展宽.

我们已经把这个问题当作是两个分开运动的组合来处理. 首先, 粒子跑到狭缝, 然后再从狭缝跑到观察点. 看起来运动在狭缝处不相连结了, 因而有人会问, 如此分段运动的粒子怎样“记住”了自己的速度并大体向着经典物理所预言的方向运动呢? 或者换一个方式讲, 如何使狭缝更窄, 以致引起“丧失记忆”, 直到在极限情况下粒子的各种速度都是同样可能的呢?

为理解这点, 我们来研究到达狭缝的概率幅. 这恰是式 (3-3) 给出的自由粒子的概率幅, 其中  $x_a = t_a = 0, x_b = X + y, t_b = T$ . 当横移狭缝 (改变  $y$ ) 时, 概率幅的实部和虚部都正弦式地变动. 正如我们已经看到的, 这一变动的波长与动量有关 [参看式 (3-10)]. 后继运动是这些波之间像光一样干涉的结果. 这种干涉在经典物理预言的方向上一般是相长干涉, 而在其他方向上一般是相消干涉.

<sup>①</sup> 参看 E. Jahnke 和 F. Emde, Tables of Functions, Dover Publication, Inc., New York, 1943.

如果跨过狭缝有许多个波长 (即狭缝很宽), 则形成的干涉图样十分尖锐, 运动近似是经典的. 但若狭缝非常窄, 甚至不能包含一个完整的波长. 那么, 就不再有任何能产生干涉的振荡, 速度的信息也失去了. 这样, 在狭缝宽度趋于零的极限情况下, 粒子的各种速度都是同样可能的.

## 3-4 波函数

[57]

通过紧随着粒子运动的方式, 我们已经得到了它到达某一特定时空点的概率幅. 然而, 对以前的运动不进行任何特殊的讨论, 而只考虑到达一个特定地点的概率幅常常是很有用的. 这样, 我们可以说,  $\psi(x, t)$  是由过去某种状态 (也许未明确指出) 到达  $(x, t)$  的总概率幅. 这样的概率幅与我们已经研究过的有同样的概率特性; 即于时刻  $t$  在  $x$  点发现粒子的概率是  $|\psi(x, t)|^2$ . 我们将这类概率幅称为波函数. 它与我们以前研究过的概率幅之间的差别只是符号不同而已. 人们常听到一种说法: 系统处于  $\psi$  态. 这就是“系统可用波函数  $\psi$  描述”的另一种说法.

因此, 传播子  $K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \psi(x_b, t_b)$  实际上是一种波函数, 是达到  $(x_b, t_b)$  的概率幅. 特别是, 记号  $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$  给了我们更多的信息: 这个概率幅是粒子来源于  $(x_a, t_a)$  那种特殊情况下的概率幅. 也许  $(x_a, t_a)$  这个信息与问题无关, 保留其标记没有意义. 于是, 我们只使用波函数记号  $\psi(x_b, t_b)$ .

因为波函数是一个概率幅, 它服从时间上相继事件概率幅的组合规律. 于是, 由式 (2-31) 对所有点  $(x_a, t_a)$  成立可见, 波函数满足积分方程

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_b, t_b; x_c, t_c) \psi(x_c, t_c) dx_c. \quad (3-42)$$

这个结果可以用物理语言叙述如下. 到达  $(x_b, t_b)$  点的总概率幅 [即  $\psi(x_b, t_b)$ ] 是到达  $(x_c, t_c)$  点的总概率幅 [即  $\psi(x_c, t_c)$ ] 乘以由点 3 跑到点 2 的概率幅 [即  $K(x_b, t_b; x_c, t_c)$ ], 再对  $x_c$  的所有可能值求和或积分. 这意味着, 粒子全部过去历史的影响可以用一个函数来表示. 若我们忘了我们所知的粒子的一切, 但只要知道它在某个别时刻的波函数, 我们就能计算那一时刻以后粒子可能发生的一切. 历史对世界将来所有影响可以由单个巨大的波函数得到.

**问题 3-4** 假若一个自由粒子在  $t = 0$  时刻具有确定的动量 (即波函数为  $C e^{ipx/\hbar}$ ). 借助于式 (3-3) 和式 (3-42) 证明: 在以后某时刻, 这个粒子仍有同一固定的动量 (即波函数通过函数  $e^{ipx/\hbar}$  与  $x$  相关), 并且随时间的变化正比于  $e^{(-ip^2/2m\hbar)t}$ . 这意味着粒子有确定的能量  $p^2/(2m)$ .

[58]

**问题 3-5** 应用问题 3-2 的结果和式 (3-42) 证明: 波函数满足方程

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right], \quad (3-43)$$

这是自由粒子的薛定谔方程.

## 3-5 高斯积分

我们完成了这章的物理部分, 现在进行数学处理. 我们将引入一些新的数学技术来协助我们计算在某些情况下的路径的和.

最简单的路径积分是其中所有变量在指数上至多出现二阶的那些积分. 我们将称其为高斯积分. 在量子力学中, 这相当于下述情形: 其中作用量  $S$  涉及路径  $x(t)$  只到其二次幂.

为了演示此方法如何在这种情形下起作用, 考虑其拉格朗日量为下述形式的粒子:

$$L = a(t)\dot{x}^2 + b(t)\dot{x}\dot{x} + c(t)x^2 + d(t)\dot{x} + e(t)x + f(t). \quad (3-44)$$

作用量是这个函数在两个固定端点之间对时间积分. 实际上, 这种形式的拉格朗日量比所需要的稍微更普遍一些. 通过分部积分, 因子  $\dot{x}$  可以从含它一次的项中去掉, 不过这事对我们当前的目的是不重要的. 我们希望决定

$$K(b, a) = \int_a^b \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} L(\dot{x}, x, t) \right] \mathcal{D}x(t), \quad (3-45)$$

其中积分遍及所有从  $(x_a, t_a)$  到  $(x_b, t_b)$  的路径.

[59] 当然, 可以用前面已经描述过的方法来完成这个遍及所有路径的积分, 这个方法是把区间分成短的时间元等等. 此方法之所以行得通是由于, 这个被积函数是变量  $\dot{x}$  和  $x$  的二次型的指数函数. 这样的积分总是可以做出来的. 但是我们不去做这个冗长的计算, 因为我们可以通过下述方式决定传播子的最重要的特性.

令  $\bar{x}(t)$  表示所指定的端点之间的经典路径. 这个路径是作用量  $S$  为极值的路径. 在此记号中, 我们已用到

$$S_{\text{cl}}[b, a] = S[\bar{x}(t)]. \quad (3-46)$$

我们可以用  $\bar{x}(t)$  和一个新变量  $y(t)$  来表示  $x(t)$ :

$$x(t) = \bar{x}(t) + y(t). \quad (3-47)$$

这就是说, 我们现在不用到任意坐标轴的距离  $x(t)$  来定义路径上的点, 而用与经典路径的偏差  $y(t)$  来度量这个点, 如图 3-7 所示.

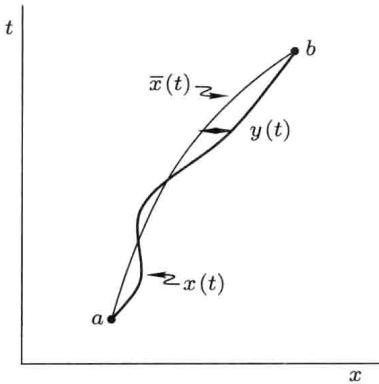


图 3-7 经典路径  $\bar{x}(t)$  和某些可能的路径  $x(t)$  之间的差是函数  $y(t)$ . 因为这些路径必须到达同样的端点, 所以  $y(t_a) = y(t_b) = 0$ . 在这两个端点之间,  $y(t)$  可以取任何形式. 由于经典路径是完全固定的, 于是, 其他路径  $x(t)$  的任何变化等价于差  $y(t)$  的相应变化. 这样, 在路径积分中, 路径微分  $Dx(t)$  可以用  $Dy(t)$  代替, 路径  $x(t)$  可以代之以  $\bar{x}(t) + y(t)$ . 在这种形式中,  $\bar{x}(t)$  在整个积分路径是常数. 而且新的路径变量  $y(t)$  在两端点只限取零值. 这个代替使得路径积分与端点位置无关

在每一时刻  $t$ , 变量  $x$  和  $y$  差一常数  $\bar{x}$  (当然, 对于不同的  $t$  值, 它有不同的值). 因此, 很清楚, 在小时间间隔情况下, 对于每个特定点  $t_i$  有  $dx_i = dy_i$ . 一般我们可以说,  $Dx(t) = Dy(t)$ . [60]

作用量的积分可以写为

$$\begin{aligned} S[x(t)] &= S[\bar{x}(t) + y(t)] \\ &= \int_{t_a}^{t_b} [a(t)(\dot{\bar{x}}^2 + 2\dot{\bar{x}}\dot{y} + \dot{y}^2) + \dots] dt. \end{aligned} \quad (3-48)$$

若把所有不含  $y$  的项集中起来, 得到的积分恰是  $S[\bar{x}(t)] = S_{\text{cl}}$ . 把所有含  $y$  一次方的项集中起来, 得到的积分等于零. 可以通过实际完成积分 (要包括一些分部积分) 来证明这一点; 然而, 因为我们已经知道结果是正确的, 因此这种计算是不必要的. 函数  $\bar{x}(t)$  正是由这个要求确定的, 也就是说,  $\bar{x}(t)$  是如此选择的, 要使在路径围绕  $\bar{x}(t)$  变化时, 近似到第一阶,  $S$  没有变化. 剩下的项全是  $y$  的二阶项. 容易把它们挑出来, 于是我们可以写出

$$S[x(t)] = S_{\text{cl}}[b, a] + \int_{t_a}^{t_b} [a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}\ddot{y} + c(t)y^2] dt. \quad (3-49)$$

这个路径积分与经典路径无关, 所以传播子可写为

$$K(b, a) = e^{(i/\hbar)S_{cl}[b, a]} \int_0^0 \left( \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} [a(t)\dot{y}^2 + b(t)\dot{y}y + c(t)y^2] dt \right\} \right) \mathcal{D}y(t). \quad (3-50)$$

因为所有路径  $y(t)$  都始于并终于  $y = 0$  的点, 所以在端点, 路径积分只能是时间的函数. 这意味着, 传播子可写为

$$K(b, a) = \exp \left( \frac{i}{\hbar} S_{cl}[b, a] \right) F(t_b, t_a), \quad (3-51)$$

于是  $K$  被确定到只差一个  $t_b$  和  $t_a$  的函数. 特别是, 它与空间变量  $x_b$  和  $x_a$  的依赖关系完全计算出来了. 应该看到, 传播子与线性项系数  $d(t)$  和  $e(t)$  以及剩下的系数  $f(t)$  之间的依赖关系也完全算出来了.

看来这是路径积分的各种方法的特征; 大量的处理工作可用某些一般方法完成, 但是常有一些相乘的因子不能完全确定. 必须用解的某些其他已知性质来确定它, 比如用式 (2-31) 来确定.

[61] 值得注意, 对于  $S$  是二次型的情形, 近似表达式  $K \sim \exp(iS_{cl}/\hbar)$  是精确成立的.

**问题 3-6** 由于自由粒子拉格朗日量是二次型的, 证明 (问题 2-1)

$$K(b, a) = F(t_b, t_a) \exp \frac{im(x_b - x_a)^2}{2\hbar(t_b - t_a)}, \quad (3-52)$$

并用论述来证明  $F$  只可能与时间的差值有关  $F(t_b - t_a)$ .

**问题 3-7** 关于  $F$  的进一步的信息可以由式 (2-31) 表示的性质获得. 首先注意, 问题 3-6 的结果意味着  $F(t_b - t_a)$  可以写成  $F(t)$ , 其中  $t$  是时间间隔  $t_b - t_a$ . 通过在式 (3-52) 中应用这种形式的  $F$ , 再代入式 (2-31), 用  $F(t)$  和  $F(s)$  表示  $F(t+s)$ , 其中  $t = t_b - t_c, s = t_c - t_a$ . 证明, 若将  $F$  写为

$$F(t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}} f(t), \quad (3-53)$$

则新函数  $f(t)$  必然满足

$$f(t+s) = f(t)f(s). \quad (3-54)$$

这意味着,  $f(t)$  必定具有下述形式:

$$f(t) = \exp(at), \quad (3-55)$$

其中  $a$  可以是复数, 即  $a = \alpha + i\beta$ . 由我们至此所建立的原则出发, 很难得到关于函数  $f(t)$  的进一步的信息. 然而, 按式 (2-21) 中的定义而特殊选定的归一化常数  $A$  意味着, 近似到  $\epsilon$  的第一阶有  $f(\epsilon) = 1$ . 这相当于在式 (3-55) 中令  $a$  等于零.  $F(t)$  的结果与式 (3-3) 一致.

由这个例子清楚地看出, 路径积分的一些重要性质可以容易地得出, 即使被积函数可能是个复杂函数. 只要被积函数是一个仅包含二阶以下路径变量的指数函数, 完全的解便可以求得, 可能只差某个相乘因子. 这点不论变量数目多少都是成立的. 例如, 形如下式的路径积分

$$\int_a^b \int_c^d \cdots \int_k^l \exp\{E[x(t), y(t), \dots, z(t)]\} \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}y(t) \cdots \mathcal{D}z(t) \quad (3-56)$$

就包含  $\exp(E_{\text{cl}})$  作为它的重要因子, 其中  $E_{\text{cl}}$  是受边界条件约束的  $E$  的极值. 唯一的限制是,  $E$  是  $x, y$  等变量的二次函数. 剩下的因子是路径端点时间的函数. 对于我们将要研究的大多数路径积分, 重要的信息包含在指数项中而不是在后面的因子中. 事实上, 在大多数情形中, 我们甚至发现, 没有必要去求出后面的这个因子. 在后面各章中, 会经常应用这种解路径积分的方法.

[62]

## 3-6 势场中的运动

一个简单应用是经典极限情形, 其中作用量  $S$  比普朗克常量  $\hbar$  大得多. 正如我们已经指出过的那样, 对这种情形, 传播子  $K$  近似地正比于  $\exp(-iS_{\text{cl}}/\hbar)$ . 现在我们可以偏重于数学观点来看这个近似的根据. 只有那些十分接近经典路径  $\bar{x}(t)$  的路径才是重要的, 于是我们做替换  $x(t) = \bar{x}(t) + y(t)$ . 现在若粒子通过势  $V(x)$ , 我们可以写

$$V(x) = V(\bar{x} + y) = V(\bar{x}) + yV'(\bar{x}) + \frac{y^2}{2}V''(\bar{x}) + \frac{y^3}{6}V'''(\bar{x}) + \cdots, \quad (3-57)$$

其中撇表示对  $x$  微商, 而所有微商都是沿经典路径  $\bar{x}$  求值. 只有  $y$  值小的路径才是重要的, 假设  $V$  是足够光滑的函数, 以致我们可以略去  $y^3$  和更高阶的项. 这就是说, 我们假设与保留的项相比,  $y^3V'''$  和所有高阶项可以忽略.

在此假设下, 被积函数可以表示为  $y$  的二次型. 事实上, 因为  $\bar{x}$  使  $S$  取极值, 所以可写成  $S = S_{\text{cl}} + y$  的二阶项. 在此结果中, 重要的项是  $\exp(iS_{\text{cl}}/\hbar)$ , 当然, 其中  $S_{\text{cl}}$  只包含沿经典路径的势  $V(\bar{x})$ . 剩下对  $y$  的积分从零到零, 并且是式 (3-50) 中最后一个因子的形式. 它提供一个光滑函数作为  $\exp(iS_{\text{cl}}/\hbar)$  的因子.

[63] 除了经典极限情况外, 在另外一些情况中, 这个结果也是对的. 例如, 假设  $V(x)$  是  $x$  的二次函数, 则由于在式 (3-57) 的  $V(x)$  展开式中不再有高于二阶的幂, 因此, 上述解是精确的. 下面问题中给出了一些这类例子. 作为另一个例子, 假设  $V(x)$  是一个缓慢变化的函数. 具体讲, 若第三阶和更高阶导数非常小, 则上面给出的结果是非常精确的近似. 在量子力学中, 这种特定情况称为 WKB 近似.

还有另一些情况, 其中这个近似也是好的. 假设运动的总时间间隔非常短. 若一个粒子沿着一个十分不同于经典路径的路径运动, 则它必然有一个非常大的额外速度 (为了能在极短时间间隔内由初始点跑出又再回到终点). 额外的动能正比于这个大速度的平方, 作用量包含近似正比于这个动能乘以时间间隔 (即速度的平方乘以时间间隔) 的一项. 这种路径的作用量会很大, 并且非常靠近的相邻路径概率幅的相位会有很大的改变. 在这种情形中, 略去  $V(x)$  展开式中的高阶项也是合理的.

**问题 3-8** 谐振子的拉格朗日量是

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (3-58)$$

证明所得的传播子是 (参看问题 2-2)

$$K = F(T) \exp \left\{ \frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega T} [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2 x_b x_a] \right\}, \quad (3-59)$$

式中  $T = t_b - t_a$ . 注意, 相乘函数  $F(T)$  的显式并没有得出来. 用其他方法可以获得它, 并且对于谐振子°, 它是 (参看节 3-11)

$$F(T) = \left( \frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2}. \quad (3-60)$$

[64]

**问题 3-9** 找出在恒定外场  $f$  中运动的粒子的传播子, 其拉格朗日量为

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 + f x. \quad (3-61)$$

结果是

$$K = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{m(x_b - x_a)^2}{2T} + \frac{fT(x_b + x_a)}{2} - \frac{f^2 T^3}{24m} \right] \right\}. \quad (3-62)$$

其中  $T = t_b - t_a$ .

**问题 3-10°** 在  $z$  方向上恒定的外磁场中运动的粒子带电荷  $e$ , 质量是  $m$ , 其拉格朗日量为

$$L = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + \frac{eB}{2c} (x \dot{y} - \dot{x} y). \quad (3-63)$$

证明: 所得的传播子是

$$K = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{3/2} \left( \frac{\omega T/2}{\sin(\omega T/2)} \right) \exp \left\{ \frac{i m}{2\hbar} \left[ \frac{(z_b - z_a)^2}{T} + \left( \frac{\omega/2}{\tan(\omega T/2)} \right) [(x_b - x_a)^2 + (y_b - y_a)^2] + \omega(y_b x_a - x_b y_a) \right] \right\}, \quad (3-64)$$

其中  $T = t_b - t_a$ ,  $\omega = eB/mc$ .

**问题 3-11** 假定问题 3-8 中的谐振子被外力  $f(t)$  驱动, 其拉格朗日量为

$$L = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - \frac{m\omega^2}{2} x^2 + f(t)x. \quad (3-65)$$

证明: 所得的传播子是 ( $T = t_b - t_a$ )

$$K = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} \exp \left( \frac{i}{\hbar} S_{\text{cl}} \right),$$

其中

$$S_{\text{cl}} = \frac{m\omega}{2 \sin \omega T} \left[ (x_b^2 + x_a^2) \cos \omega T - 2x_b x_a + \frac{2x_b}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} f(t) \sin \omega(t - t_a) dt + \frac{2x_a}{m\omega} \int_{t_a}^{t_b} f(t) \sin \omega(t_b - t) dt - \frac{2}{m^2 \omega^2} \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^t f(t) f(s) \sin \omega(t_b - t) \sin \omega(s - t_a) ds dt \right]. \quad (3-66)$$

最后这一结果在许多高深问题中非常重要. 它在量子电动力学中有许多特殊的应用, 因为电磁场可以表示为一组受迫谐振子. [65]

**问题 3-12** 若一个谐振子的波函数 (在  $t = 0$  时) 是

$$\psi(x, 0) = \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} (x - a)^2 \right\}, \quad (3-67)$$

则应用式 (3-42) 和问题 3-8 的结果证明:

$$\psi(x, T) = \exp \left\{ -\frac{i\omega T}{2} - \frac{m\omega}{2\hbar} [x^2 - 2axe^{-i\omega T} + a^2 \cos(\omega T)e^{-i\omega T}] \right\}, \quad (3-68)$$

再找出概率分布  $|\psi|^2$ .

### 3-7 多变量系统<sup>①</sup>

假设一系统有几个自由度. 这种系统的传播子可由式 (3-25) 的形式表示, 这时, 其中的符号  $x(t)$  表示几个坐标而不只是一个.

我们取一个在三维空间中运动的粒子作为第一个例子. 路径由给定的三个函数  $x(t)$ 、 $y(t)$  和  $z(t)$  确定. 举例来说, 自由粒子的作用量是

$$\frac{m}{2} \int_{t_a}^{t_b} [\dot{x}(t)^2 + \dot{y}(t)^2 + \dot{z}(t)^2] dt.$$

在时刻  $t_a$  由某点  $(x_a, y_a, z_a)$  出发, 在  $t_b$  时刻到达终点  $(x_b, y_b, z_b)$  的传播子是

$$\begin{aligned} & K(x_b, y_b, z_b, t_b; x_a, y_a, z_a, t_a) \\ &= \int_a^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} [\dot{x}^2(t) + \dot{y}^2(t) + \dot{z}^2(t)] dt \right\} \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}y(t) \mathcal{D}z(t). \end{aligned} \quad (3-69)$$

微分写作  $\mathcal{D}x(t) \mathcal{D}y(t) \mathcal{D}z(t)$ . 若把时间分成许多小间隔  $\epsilon$ , 在时刻  $t_i$  的位置由三个变量  $x_i, y_i, z_i$  给定, 而遍及所有变量  $dx_i, dy_i, dz_i$  (对于每个  $i$ ) 的积分像式 [66] (2-22) 一样表示. (更一般地, 若我们在  $S$  维空间中用矢量  $\mathbf{x}$  表示位置, 则每一点的微分是体积元  $d^s \mathbf{x}_i$ , 并且对每一个  $i$ , 我们可以把它们的乘积写作  $\mathcal{D}^s \mathbf{x}_i$ .)

若应用定义方程 (2-22), 则在每个时间间隔中, 对每个变量必然包括归一化常数  $A$  [式 (2-21)]. 这样, 如果整个时间间隔分成每步长为  $\epsilon$  的  $N$  步, 那么积分中必然包含因子  $A^{-3N}$ .

包括几个变量的另一种情形是两个相互作用的系统. 假设一个系统由质量为  $m$  的粒子组成, 其坐标为  $x$ , 而另一个系统由质量为  $M$  的粒子组成, 其坐标为  $X$ . 假设这两个系统通过势  $V(x, X)$  相互作用. 于是, 所得到的作用量是

$$S[x(t), X(t)] = \int_{t_a}^{t_b} \left[ \frac{m}{2} \dot{x}^2 + \frac{M}{2} \dot{X}^2 - V(x, X) \right] dt, \quad (3-70)$$

因此, 传播子是

$$K(x_b, X_b, t_b; x_a, X_a, t_a) = \int_a^b \int_a^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t), X(t)] \right\} \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}X(t) \quad (3-71)$$

人们可以理解这是式 (2-25) 在数学上的推广. 这样, 人们可以考虑在某个抽象的二维坐标  $(x, X)$  空间中一点的运动. 然而, 更容易理解的是在物理上把它想象为表示两个分离的粒子的运动, 它们的坐标分别是  $x$  和  $X$ . 于是,  $K$  是

<sup>①</sup> R. P. Feynman, Space-time Approach to Non-relativistic Quantum Mechanics, *Rev. Mod. Phys.*, vol. 20, no. 2, p. 371, 1948.

质量为  $m$  的粒子从时空点  $(x_a, t_a)$  到达  $(x_b, t_b)$  而质量为  $M$  的粒子从  $(X_a, t_a)$  到达  $(X_b, t_b)$  的概率幅. 因此, 传播子是两个粒子在它们各自端点之间的所有可能路径上的概率幅之和. 对于任何一个特定的路径组合 [即  $x(t)$  和  $X(t)$  都被指定了], 概率幅是  $\exp(iS/\hbar)$ , 其中  $S$  是式 (3-70) 定义的作用量. 数学上, 概率幅是两个独立函数  $x(t)$  和  $X(t)$  的泛函, 而积分遍及两个可变函数.

## 3-8 可分离系统

假设我们有一种情形, 其中有两个粒子都在一维或多维空间中运动. 令矢量  $\mathbf{x}$  和矢量  $\mathbf{X}$  分别表示两个粒子的坐标, 正像上一节那样, 只不过现在我们将图像扩充到三维空间. 可能有这样的情况, 所得到的作用量可以分成两部分:

$$S[\mathbf{x}, \mathbf{X}] = S_x[\mathbf{x}] + S_X[\mathbf{X}], \quad (3-72) \quad [67]$$

其中  $S_x$  只包含路径  $\mathbf{x}(t)$ , 而  $S_X$  只包含路径  $\mathbf{X}(t)$ . 这就是两个粒子没有相互作用的情形.

在这种情况下, 传播子变成了两因子的乘积:

$$\begin{aligned} & K(\mathbf{x}_b, \mathbf{X}_b, t_b; \mathbf{x}_a, \mathbf{X}_a, t_a) \\ &= \int_a^b \int_a^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [S_x[\mathbf{x}] + S_X[\mathbf{X}]] \right\} \mathcal{D}^3 \mathbf{x}(t) \mathcal{D}^3 \mathbf{X}(t) \\ &= \int_a^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_x[\mathbf{x}] \right\} \mathcal{D}^3 \mathbf{x}(t) \int_a^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S_X[\mathbf{X}] \right\} \mathcal{D}^3 \mathbf{X}(t) \\ &= K_x(x_b, t_b; x_a, t_a) K_X(X_b, t_b; X_a, t_a), \end{aligned} \quad (3-73)$$

其中  $K_x$  是只有坐标为  $\mathbf{x}$  的粒子存在时算得的概率幅,  $K_X$  的定义类似. 因此, 在包含两个独立的不相互作用系统的情形中, 包括两个系统的一个事件的传播子是两个独立传播子的乘积. 这些传播子是每个粒子在全部事件中进行其本身那部分事件所得到的.

在包含几个粒子的情形, 通过与相应传播子类似的直接方式来定义波函数  $\psi(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \dots, t)$ . 把它解释为: 在时刻  $t$ , 一个粒子在点  $\mathbf{x}$  处, 另一个在点  $\mathbf{X}$  处等等的概率幅. 波函数的模方是下述情形的概率, 即在点  $\mathbf{x}$  处单位体积有一个粒子, 而在点  $\mathbf{X}$  处单位体积有另一粒子等等. 在一维情况下成立的式 (3-42) 可以直接推广:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \dots, t) &= \\ & \int \int \dots K(\mathbf{x}, \mathbf{X}, \dots, t; \mathbf{x}', \mathbf{X}', \dots, t') \psi(\mathbf{x}', \mathbf{X}', \dots, t') d^3 \mathbf{x}' d^3 \mathbf{X}' \dots \end{aligned} \quad (3-74)$$

其中  $dx'$  是许多微分的乘积, 其微分数目与  $x'$  空间的坐标一样多.

[68] 在两个独立粒子的情况下, 其坐标分别为  $x$  和  $X$ , 正如上面所述的, 其传播子  $K$  是  $x$  和  $t$  的一个函数与  $X$  和  $t$  的另一个函数的乘积. 然而, 一般这并不意味着  $\psi$  是这样的乘积. 在特殊情况下, 若在某特定时间,  $\psi$  是  $x$  的一个函数与  $X$  的另一个函数的乘积 [ $\psi = f(x)g(X)$ ], 则它以后也将保持如此. 因为传播子  $K$  表示两个粒子的独立运动, 因此, 每个因子都像这部分系统单独存在时一样变化. 不过这只是一种特殊情况. 这是由于粒子现在是独立的, 并不意味着它们总是独立的. 也许在过去有某种相互作用, 这就意味着  $\psi$  不是简单的乘积.

即使在原坐标系统中, 作用量  $S$  没有表示为简单的乘积, 但常有一种变换(诸如质心和内部坐标的变换)使  $S$  可分离. 因为在量子力学和经典力学中, 使用的作用量形式相同, 所以任何能将经典系统分离的变换也会分离相应的量子力学系统. 这样, 经典物理繁重工作中的一部分就可以直接在量子力学中应用了. 这种变换是非常重要的. 多变量系统是很难处理的. 变量分离可把一个复杂问题简化为几个较简单的问题.

### 3-9 作为泛函的路径积分

当问题包括一个以上的变量而又不可能分离变量时, 分析处理一般是非常困难的. 下面我们将讨论可以用于这种情况的一些近似. 现在我们描述一种时常可用的作用很大的工具. 考虑式 (3-71) 给出的传播子, 可以更详细地把它写成

$$K(b, a) = \int_a^b \int_a^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt + \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{M}{2} \dot{X}^2 dt - \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} V(x, X, t) dt \right\} \mathcal{D}x(t) \mathcal{D}X(t) \quad (3-75)$$

首先, 假定我们完成对路径  $X(t)$  的积分. 结果可以形式地写为

$$K(b, a) = \int_a^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} \dot{x}^2 dt \right\} T[x(t)] \mathcal{D}x(t) \quad (3-76)$$

其中

$$T[x(t)] = \int_a^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left[ \frac{M}{2} \dot{X}^2 - V(x, X, t) \right] dt \right\} \mathcal{D}X(t) \quad (3-77)$$

[69] 这些结果用下述方式解释. 遍及  $X$  粒子可采用的全部路径的积分产生了一个泛函  $T$ . 泛函是一个数, 其值与指定的一个完整函数有关. 例如, 曲线下的

面积是曲线的一个泛函  $A = \int f(y)dy$ . 为了得到它, 函数(曲线)必须完全指明. 我们把泛函写成  $A[f(y)]$ , 表明  $A$  与函数  $f(y)$  有关. 我们不写成  $A(f(y))$ , 因为, 可以把后者解释为函数的函数, 即  $A$  只是取决于  $f$  在某个特定点  $y$  所取的值. 但这里不是这种情况.  $A[f(y)]$  取决于函数  $f(y)$  的整个形状, 它与  $y$  完全无关.

式(3-77)定义的泛函是  $X$  粒子在势  $V$  影响下, 在其端点  $X_a$  和  $X_b$  之间跑动的概率幅. 这个势依赖于  $x$  和  $X$ , 它是靠假设当  $X$  变化时,  $x$  取固定路径而计算出来的. 所以, 它是当  $x$  粒子沿特殊轨迹运动时  $X$  粒子的势. 显然, 这个概率幅  $T$  与所选择的轨迹  $x(t)$  有关, 因此, 我们把它写成  $x(t)$  的泛函. 于是, 将  $T$  与  $x(t)$  的自由粒子传播子的乘积组成的泛函对所有路径求和, 便得到了总概率幅.

这样, 像所有其他情况一样, 概率幅  $K$  是全部可能概率幅的和. 这些概率幅中的每一个又是更小的两个概率幅的乘积. 其中前一个是概率幅  $T$ , 它是当  $x$  有特定轨迹时,  $X$  粒子在给定的端点之间跑动的概率幅. 后一个是有特定轨迹的  $x$  粒子的概率幅. 最终的求和变成遍及  $x$  的所有可能轨迹的求和. 清楚地理解这个概念是很重要的, 因为它包含了一个量子电动力学的基本原则, 这个课题我们在后面一章还要讨论.

当然, 除非对于轨迹  $x(t)$  的可能值可能实际地完成  $T$  积分(无论是精确的或是近似的), 否则采用上述方法是不实际的. 正如我们已经看到的(参看问题 3-11), 一个精确的情况是其中  $X$  为谐振子. 这是一个非常重要的实际情况. 比如说, 当粒子与量子场相互作用时, 场就是一个振子.

## 3-10 粒子与谐振子的相互作用

我们将更详细地考虑粒子与谐振子的相互作用. 令  $x$  表示粒子的坐标,  $X$  表示振子的坐标. 作用量可以写为

$$S[x, X] = S_0[x] + \int_{t_a}^{t_b} g(x(t), t)X(t)dt + \int_{t_a}^{t_b} \frac{M}{2}(\dot{X}^2 - \omega^2 X^2)dt, \quad (3-78) \quad [70]$$

其中  $S_0$  是没有振子时粒子的作用量. 在上面的讨论中, 我们曾假定这个作用量对应于自由粒子的作用量. 这个假定是不必要的.  $x$  的运动可能由于存在一个仅与  $x$  和  $t$  有关的势而变复杂. 例如, 作用量  $S_0$  可以是

$$S_0[x] = \int_{t_a}^{t_b} \left[ \frac{m}{2}\dot{x}^2 - V(x, t) \right] dt. \quad (3-79)$$

式(3-78)中的第二项表示粒子与振子的相互作用。注意，这项仅含  $X$  一次方。忽视对  $\dot{X}$  的依赖关系并不会失去普遍性，因为若有这样的项出现，总可以通过分部积分将其去掉。我们可以称系数  $g$  为耦合系数。它与  $x(t)$  的关系已明显地表示出来了，但它也可能与其他变量如  $\dot{x}(t)$  有关。因为我们目前所做的分析是一般的，把  $g$  的精确形式写出来并不重要。式(3-78)中的最后一项当然是振子单独存在时的作用量。将其与第二项组合，式(3-77)中的函数  $T$  可写为

$$T[x(t)] = \int_a^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left[ g(x(t), t) X(t) + \frac{M}{2} (\dot{X}^2 - \omega^2 X^2) \right] dt \right\} \mathcal{D}X(t). \quad (3-80)$$

现在就  $X$  而论，这个情况正是受迫谐振子的情况。力函数  $g(x(t), t)$  是  $t$  的某个特殊函数，比如说  $f(t)$ 。这样，此路径积分与问题 3-11 中考虑的一样，只不过用  $g(x(t), t)$  代替了  $f(t)$ ，并用  $(X_b, X_a)$  代替了初始和终了坐标值  $(x_b, x_a)$ 。

为了举例说明，并对表达式进行某种简化，我们取一个特殊情况，其中谐振子在初始和终了时都在原点，即  $X_b = X_a = 0$ （一般情形同样容易处理）。于是按照问题 3-11，在这种情况下，

$$T = \left( \frac{M\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \exp \left\{ \frac{-i}{\hbar M \omega \sin \omega T} \times \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^t g(x(t), t) g(x(s), s) \sin \omega(t_b - t) \sin \omega(s - t_a) ds dt \right\}. \quad (3-81)$$

[71] 因此，当前情形下的传播子可以写成

$$K(b, a) = \left( \frac{M\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2} \times \int_a^b \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ S_0[x] - \frac{1}{M\omega \sin \omega T} \times \int_{t_a}^{t_b} \int_{t_a}^t g(x(t), t) g(x(s), s) \sin \omega(t_b - t) \sin \omega(s - t_a) ds dt \right] \right\} \mathcal{D}x(t), \quad (3-82)$$

以及对任意  $X_a$  和  $X_b$  的类似（但更复杂）的表达式。

它比我们至今所解过的路径积分都更为复杂。只有利用以后几章阐述的各种近似方法，才能进一步把它解下去。注意，这个路径积分的被积函数仍可想象成有  $\exp(iS/\hbar)$  的形式，但现在的  $S$  不再只是  $\dot{x}, x$  和  $t$  的函数，而是包含了在两个不同时刻  $s$  和  $t$  定义的变量的乘积，不再把过去和将来分开了。所以这样做是由于前一时刻的变量  $x$  对振子有影响，而振子在后一时刻又反过来影响  $x$ 。不可能定义任何波函数  $\psi(x, t)$  来表示粒子在某一特定时刻  $t$ 、位于某一特定位置  $x$  的概率幅。这种概率幅已不足以继续计算到将来，因为在任何时刻，人们都必须知道振子当前的情况。

### 3-11 用傅里叶级数对路径积分求值

考虑谐振子问题中的路径积分 (问题 3-8); 它就是

$$K(b, a) = \int_a^b \left( \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} \left[ \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt \right] \right\} \right) \mathcal{D}x(t). \quad (3-83)$$

利用节 3-5 中的方法, 这个路径积分可以约化成两个函数的乘积, 就像在问题 3-8 中一样. 这两个函数中比较重要的一个与谐振子的经典轨道有关, 由式 (3-59) 给出. 剩下的那个函数只与时间间隔有关, 已在式 (3-60) 中写出来了. 后一函数还可写为

$$F(T) = \int_0^0 \left\{ \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_0^T \frac{m}{2} (y^2 - \omega^2 y^2) dt \right] \right\} \mathcal{D}y(t). \quad (3-84)$$

我们将用一种新方法来解它, 至少到只差一个与  $\omega$  无关的因子, 并以此作为处理路径积分的另一种方式的例证. 因为所有路径  $y(t)$  都从  $t = 0$  时刻的 0 点跑到  $t = T$  时刻的 0 点, 于是, 这种路径可以写为有基本周期  $T$  的傅里叶正弦级数. 这样,

$$y(t) = \sum_n a_n \sin \frac{n\pi t}{T}. \quad (3-85)$$

因此, 在任何特定时刻  $t$ , 都可以把路径当成系数  $a_n$  的函数而不作为  $y$  的函数. 这是一个线性变换, 其变换行列式  $J$  是个常数, 显然与  $\omega, m, \hbar$  无关.

当然, 可以直接求  $J$  的值. 然而, 这里我们避开对  $J$  求值的问题, 办法是把所有与  $\omega$  无关的因子 (包括  $J$ ) 都归并成一个常数因子. 我们总可以在结束时恢复这个正确的因子, 因为我们知道,  $\omega = 0$  时, 它的值是  $F(T) = \sqrt{m/2\pi\hbar T}$  (一个自由粒子).

作用量的积分可以用傅里叶级数 (3-85) 写出来. 这样, 动能项变成

$$\begin{aligned} \frac{m}{2} \int_0^T \dot{y}^2 dt &= \frac{m}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{n\pi}{T} \frac{m\pi}{T} a_n a_m \int_0^T \cos \frac{n\pi t}{T} \cos \frac{m\pi t}{T} dt \\ &= \frac{m}{2} \frac{T}{2} \sum_n \left( \frac{n\pi}{T} \right)^2 a_n^2; \end{aligned} \quad (3-86)$$

类似地, 势能项是

$$\frac{m\omega^2}{2} \int_0^T y^2 dt = \frac{m\omega^2}{2} \frac{T}{2} \sum_n a_n^2. \quad (3-87)$$

假定时间  $T$  分成许多长为  $\epsilon$  的离散间隔, 就像对式 (2-19) 所做的那样, 因而系数  $a_n$  的个数  $N$  是有限的, 在这种假定下, 路径积分变成

$$F(T) = J \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \left( \exp \left\{ \frac{i m}{2 \hbar} \frac{T}{2} \sum_{n=1}^N \left[ \left( \frac{n \pi}{T} \right)^2 - \omega^2 \right] a_n^2 \right\} \right) \times \frac{da_1}{A} \frac{da_2}{A} \cdots \frac{da_N}{A}. \quad (3-88)$$

因为这指数可以分成许多因子, 所以对每个系数  $a_n$  的积分可以分开来做. 其中之一的结果是

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \exp \left[ \frac{i m}{2 \hbar} \frac{T}{2} \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right) a_n^2 \right] \right\} \frac{da_n}{A} = \left( \frac{2}{\epsilon T} \right)^{1/2} \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-1/2}. \quad (3-89)$$

[73] 因而, 路径积分正比于

$$\prod_{n=1}^N \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} - \omega^2 \right)^{-1/2} = \prod_{n=1}^N \left( \frac{n^2 \pi^2}{T^2} \right)^{-1/2} \prod_{n=1}^N \left( 1 - \frac{\omega^2 T^2}{n^2 \pi^2} \right)^{-1/2}. \quad (3-90)$$

第一个乘积与  $\omega$  无关, 我们把它与变换系数行列式以及其他因子归并成一个常数. 第二个因子当  $N \rightarrow \infty$  时 (即当  $\epsilon \rightarrow 0$  时) 的极限为  $[(\sin \omega T)/\omega T]^{-1/2}$ . 于是,

$$F(T) = C \left( \frac{\sin \omega T}{\omega T} \right)^{-1/2}, \quad (3-91)$$

其中  $C$  与  $\omega$  无关. 但是当  $\omega = 0$  时, 我们的积分是一个自由粒子的积分, 对于它, 我们已经找到

$$F(T) = \left( \frac{m}{2 \pi i \hbar T} \right)^{1/2}. \quad (3-92)$$

所以, 对于谐振子, 我们有

$$F(T) = \left( \frac{m \omega}{2 \pi i \hbar \sin \omega T} \right)^{1/2}, \quad (3-93)$$

只要将它代入式 (3-59), 便可得到完整解.

**问题 3-13** 保留所有常数, 证明, 这意味着, 当  $N$  趋于无限大时, 变换系数行列式  $J$  满足

$$J \left( \frac{\pi}{\sqrt{2}} \right) \left( \frac{2T}{\pi^2 \epsilon} \right)^{(N+1)/2} \left( \prod_{n=1}^N \frac{1}{n} \right) \rightarrow 1 \quad \text{当 } N \rightarrow \infty. \quad (3-94)$$

# 第四章

[75]

## 量子力学的薛定谔描述

---

至此, 我们所讨论过的路径积分 [除了式 (3-82)] 的被积函数是作用量的指 [76]  
数, 而作用量有下述性质:

$$S[b, a] = S[b, c] + S[c, a]. \quad (4-1)$$

这种路径积分可以借助于由它们推导出来一些积分方程的性质来分析. 我们在第二章 [例如式 (2-31)] 和第三章 [例如式 (3-42)] 中已经看到这一点.

更方便的办法是把路径积分尽可能地转换成为微分方程. 在量子力学中, 存在这种可能性, 并且事实上, 这是表现此理论的最方便的方式. 几乎在每一个情况, 求解微分方程总比直接计算路径积分容易. 量子力学的传统表现形式依据的就是这样的微分方程, 它称为薛定谔方程. 这里, 我们将从我们的公式体系出发, 推导这个方程. 我们不想用大量例子来解这个方程, 因为其他量子力学书籍<sup>①</sup>已经以详尽的和完备的方式列出了这些解.

在这一章里, 我们有两个目的: (1) 对于主要关心量子力学的读者, 我们的目标是把路径积分的表示方式与标准文献和教科书中能找到的别的表示方式联系起来, 使得读者可以继续研究那些书, 并且学会在两种不同语言之间来回翻译. (2) 对于主要关心路径积分的读者, 这一章将演示一种技巧, 这种技巧可以把一定类型的路径积分转换成微分方程. 量子力学的特例最适于显示这种技巧, 我们在此正要阐述这一点.

---

<sup>①</sup> 例如, 参看 L. I. Schiff, Quantum Mechanics, 2d ed., McGraw-Hill, New York, 1955.

## 4-1 薛定谔方程

**微分方程形式** 我们可以建立微分方程的原因是关系式 (4-1) 对于点  $a, b, c$  的任何值都是正确的. 例如: 时刻  $t_b$  可以只比  $t_c$  大一段无限小的时间  $\epsilon$ . 这就使我们可以把一个时刻路径积分的值与其稍后时刻的值联系起来. 用这种方式, 我们就能获得路径积分的微分方程.

[77] 我们已经发现, 作为式 (4-1) 的一个推论, 我们可以定义一个波函数. 而且我们知道, 等式

$$\psi(x_b, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_b, t_b; x_a, t_a) \psi(x_a, t_a) dx_a, \quad (4-2)$$

借助于  $t_a$  时刻的波函数给出  $t_b$  时刻的波函数. 为了获得所寻找的微分方程, 我们将这个关系应用于一种特殊情况, 其中时刻  $t_b$  仅与时刻  $t_a$  差一无限小间隔  $\epsilon$ . 传播子  $K(2, 1)$  正比于  $t_a$  到  $t_b$  间隔的作用量与  $i/\hbar$  的乘积的指数. 对于短间隔  $\epsilon$ , 作用量近似等于  $\epsilon$  乘以这段间隔的拉格朗日量. 于是, 使用与式 (2-34) 相同的近似, 我们有

$$\psi(x, t + \epsilon) = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \epsilon L \left( \frac{x-y}{\epsilon}, \frac{x+y}{2} \right) \right\} \psi(y, t) dy. \quad (4-3)$$

我们将把它用于粒子在一维势  $V(x, t)$  中运动的特殊情况, 这时,  $L = m\dot{x}^2/2 - V(x, t)$ . 在这种情况下, 式 (4-3) 变成

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \epsilon) &= \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m(x-y)^2}{2\epsilon} \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon V \left( \frac{x+y}{2}, t \right) \right\} \psi(y, t) dy. \end{aligned} \quad (4-4)$$

量  $(x-y)^2/\epsilon$  出现在第一个因子的指数中, 显然, 如果  $y$  与  $x$  之差不可忽略, 则这个量很大, 当  $y$  变化时, 指数函数非常迅速地振荡. 当这个因子迅速振荡时, 对  $y$  的积分给出一个非常小的值 (由于其他因子的光滑性质). 仅当  $y$  接近  $x$  时 (这时指数变化较缓慢), 我们才得到重要的贡献. 由于这个原因, 我们做代换  $y = x + \eta$ , 预期只有  $\eta$  很小时才出现对积分的显著贡献. 我们得到

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \epsilon) &= \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{im\eta^2}{2\hbar\epsilon} \right\} \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon V \left( x + \frac{\eta}{2}, t \right) \right\} \psi(x + \eta, t) d\eta. \end{aligned} \quad (4-5)$$

当  $\eta$  是  $\sqrt{\epsilon\hbar/m}$  量级时, 第一个指数的相位改变为一弧度的量级, 因此, 积分的大部分贡献来源于这个量级的  $\eta$  值.

[78]

我们可以将  $\psi$  展开成幂级数. 仅需保留  $\epsilon$  量级的项. 这意味着保留  $\eta$  的二阶项. 项  $\epsilon V[(x + \eta)/2, t]$  可以用  $\epsilon V(x, t)$  代替, 因为其误差的阶比  $\epsilon$  的阶高. 展开左边到  $\epsilon$  的第一阶, 展开右边到  $\epsilon$  的第一阶及  $\eta$  的第二阶, 我们得到

$$\begin{aligned}\psi(x, t) + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i m \eta^2}{2 \hbar \epsilon} \right\} \\ &\quad \times \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(x, t) \right] \left[ \psi(x, t) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\eta^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right] d\eta.\end{aligned}\quad (4-6)$$

若我们取右边的主项, 我们得到量  $\psi(x, t)$  乘以积分

$$\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{i m \eta^2}{2 \hbar \epsilon} \right\} d\eta = \frac{1}{A} \left( \frac{2 \pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{1/2}. \quad (4-7)$$

在左边我们恰有  $\psi(x, t)$ . 为了保证  $\epsilon$  趋于零极限时两边一致, 必须选择  $A$ , 使式 (4-7) 中表达式等于 1. 就是说,

$$A = \left( \frac{2 \pi i \hbar \epsilon}{m} \right)^{1/2}, \quad (4-8)$$

正如我们早已看到的那样 [参看式 (2-21)]. 这也是在更复杂问题中, 获得量  $A$  的一个方法. 必须选择  $A$  使方程对零阶  $\epsilon$  是正确. 否则, 在原来的路径积分中, 当  $\epsilon$  趋近于零时极限不存在.

为了计算式 (4-6) 右边, 我们必须使用两个积分:

$$\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \eta \exp \left\{ \frac{i m \eta^2}{2 \hbar \epsilon} \right\} d\eta = 0 \quad (4-9)$$

和

$$\frac{1}{A} \int_{-\infty}^{\infty} \eta^2 \exp \left\{ \frac{i m \eta^2}{2 \hbar \epsilon} \right\} d\eta = \frac{i \hbar \epsilon}{m}. \quad (4-10)$$

写出式 (4-6) 的右边, 得

$$\psi + \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t} = \psi - \frac{i}{\hbar} \epsilon V \psi + \frac{i \hbar \epsilon}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}. \quad (4-11)$$

若  $\psi$  满足微分方程

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x, t) \psi \right], \quad (4-12)$$

则式 (4-11) 到  $\epsilon$  的一阶是对的. 对于粒子一维运动问题, 式 (4-12) 正是薛定谔方程. 用同样的方式可以得到对应于更复杂情形下的方程, 如下面问题所证明的那样.

[79]

**问题 4-1** 证明: 对于一个在三维势  $V(\mathbf{x}, t)$  中运动的粒子, 薛定谔方程是

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}, t) \psi(\mathbf{x}, t) \right]. \quad (4-13)$$

这个方程是薛定谔在 1925 年发现的, 并且自那以后形成了量子力学发展的中心.

**算符形式** 各种不同问题对应不同形式的拉格朗日量, 由此得到的方程可以用下述方便形式写出:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H \psi, \quad (4-14)$$

其中  $H$  并不代表一个数, 而是表示一个作用在  $\psi$  上的算符, 称为哈密顿算符. 例如, 在式 (4-12) 中, 这个算符是

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t). \quad (4-15)$$

这种方程两边都是算符, 其含义是: 若任何一个函数写在两边每一个算符之后, 则方程成立. 即式 (4-15) 的符号表明: 关系式

$$H f(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} + V(x, t) f(x) \quad (4-16)$$

对任意函数  $f$  都成立.

**问题 4-2** 一个带电粒子在磁场中, 其拉格朗日量是

$$L = \frac{m}{2} \dot{\mathbf{x}}^2 + \frac{e}{c} \dot{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) - e\phi(\mathbf{x}, t), \quad (4-17)$$

其中  $\dot{\mathbf{x}}$  是速度矢量;  $e$  是电荷;  $c$  是光速,  $\mathbf{A}$  和  $\phi$  是矢势和标势, 证明: 相应的薛定谔方程是

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \left[ \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \psi + e\phi\psi \right]. \quad (4-18)$$

[80] 于是, 哈密顿量是

$$H = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) + e\phi. \quad (4-19)$$

**问题 4-3** 将  $\psi$  中每个  $i$  都换成  $-i$ , 就得到其复共轭函数  $\psi^*$ , 证明:  $\psi^*$  满足

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t} = +\frac{i}{\hbar} (H\psi)^*. \quad (4-20)$$

给出了几个例子便可以描述算符的含义. 例如, 算符  $x$  的意思是用  $x$  乘, 算符  $x^2$  的意思是用  $x^2$  乘, 算符  $V(x)$  ( $x$  的某个函数) 的意思是用  $V(x)$  乘, 算符  $\partial/\partial x$  的意思是用  $x$  做偏微商  $\partial\psi/\partial x$  等等.

若  $A$  和  $B$  都是算符, 则算符  $AB$  的意思是, 我们先用  $B$  作用, 再用  $A$  作用, 即  $AB\psi$  的意思是  $A(B\psi)$ . 于是, 例如算符  $x(\partial/\partial x)$  的意思是  $x$  乘以  $\partial\psi/\partial x$ . 另一方面, 算符  $(\partial/\partial x)x$  的意思是用  $x\psi$  取  $x$  的偏微商, 即

$$\frac{\partial}{\partial x}(x\psi) = x \frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi.$$

我们看到, 在一般情况下, 算符  $AB$  与算符  $BA$  并不相等.

我们进一步提出一个规则, 即  $A+B$  作用在  $\psi$  上得出  $A\psi+B\psi$ , 并用这规则定义算符  $A+B$ . 例如, 上面的方程可以写为算符方程:

$$\frac{\partial}{\partial x}x = x \frac{\partial}{\partial x} + 1, \quad (4-21)$$

其含义是: 对任意函数  $f$  有  $(\partial/\partial x)xf = x(\partial/\partial x)f + f$ .

#### 问题 4-4 证明

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}x = x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2 \frac{\partial}{\partial x}, \quad (4-22)$$

因此, 对于式 (4-15) 中的  $H$  有

$$Hx - xH = -\frac{\hbar^2}{m} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (4-23)$$

在传统的量子力学公式中大量使用这些算子符号.

**传播子的薛定谔方程** 把  $K(b, a)$  想象成变量  $b$  的函数, 因为它是一个特殊的波函数 (即对应于从  $a$  开始的粒子的波函数), 我们看到,  $K$  必须也满足薛定谔方程. 这样, 对于式 (4-15) 描述的情况 ( $t_b > t_a$ ),

$$\frac{\partial}{\partial t_b}K(b, a) = -\frac{i}{\hbar} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_b^2}K(b, a) + V(b)K(b, a) \right]. \quad (4-24)$$

一般, 我们有

$$\frac{\partial}{\partial t_b}K(b, a) = -\frac{i}{\hbar}H_bK(b, a), \quad \text{当 } t_b > t_a, \quad (4-25)$$

其中算符  $H_b$  只作用在变量  $b$  上.

#### 问题 4-5 使用关系

$$K(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} K(b, c)K(c, a)dx_c \quad (4-26)$$

以及  $t_c - t_a = \epsilon$  是一无限小量, 证明: 若  $t_b$  大于  $t_a$ , 则传播子  $K$  满足

$$\frac{\partial}{\partial t_a} K(b, a) = +\frac{i}{\hbar} H_a^* K(b, a), \quad (4-27)$$

其中  $H_a$  只作用于变量  $a$ .

用式 (4-25) 中路径积分定义的函数  $K(b, a)$  仅当  $t_b > t_a$  才有定义. 当  $t_b < t_a$  时, 这函数没有定义. 当  $t_b < t_a$  时, 定义  $K(b, a)$  等于零会在以后的工作 (如第六章) 中带来很大方便. [由这个约定, 例如, 式 (4-2) 仅当  $t_b > t_a$  时才成立.] 按此条件,

$$K(b, a) = 0 \quad \text{当 } t_b < t_a \quad (4-28)$$

显然, 当  $t_b < t_a$  时, 式 (4-25) 也成立 (当然, 这意义不大, 因为这时  $K = 0$ ). 但是, 这个方程在  $t_b = t_a$  点不成立, 因为  $t_b = t_a$  时,  $K(b, a)$  不连续.

**问题 4-6** 证明: 当  $t_b \rightarrow t_a + 0$  时,

$$K(b, a) \rightarrow \delta(x_b - x_a).$$

由问题 4-6 的结果可以看到,  $K$  对  $t_b$  的导数给出时间的  $\delta$  函数乘以由  $\delta(x_b - x_a)$  得到的跳跃高度. 因此,  $K(b, a)$  满足

$$\frac{\partial}{\partial t_b} K(b, a) = -\frac{i}{\hbar} H_b K(b, a) + \delta(x_b - x_a) \delta(t_b - t_a). \quad (4-29)$$

[82] 如果在量子力学中, 人们的出发点是把薛定谔方程当作基本定义, 那么方程 (4-29) 加边界条件 (4-28) 可以用来定义  $K(b, a)$ . 显然, 量  $K(b, a)$  是薛定谔方程的一类格林函数.

**概率守恒** 式 (4-15) 给出的哈密顿算符具有一个有意思性质, 若  $f$  和  $g$  是任意在无穷远处下降到零的函数, 则

$$\int_{-\infty}^{\infty} (Hg)^* f dx = \int_{-\infty}^{\infty} g^* (Hf) dx. \quad (4-30)$$

符号的含义如下. 在左边我们令  $H$  作用于  $g$  (形成  $Hg$ ), 再取复数共轭, 其结果乘以  $f$ , 再对整个空间积分. 最后结果与取  $Hf$  乘以  $g$  的复数共轭再积分的结果相同. 通过积分  $\int (Hg)^* f dx$  (必要时分部积分), 容易证明这是对的.

应用式 (4-15) 中的例子, 式 (4-30) 左边是

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 g^*}{dx^2} f dx + \int_{-\infty}^{\infty} V g^* f dx \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{dg^*}{dx} f - g^* \frac{df}{dx} \right]_{-\infty}^{+\infty} - \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} g^* \frac{d^2 f}{dx^2} dx + \int_{-\infty}^{\infty} V g^* f dx \end{aligned} \quad (4-31)$$

(两次分部积分). 若  $f$  和  $g$  在无穷远处降到零, 则积出部分等于零, 所以式 (4-30) 成立. 具有式 (4-30) 给出的性质的算符称为厄米算符. 在量子力学的所有情形中, 哈密顿量都是厄米算符. 对于比上面所考虑的更复杂的情况, 遍及一维变量  $x$  的积分变成遍及所有系统变量的积分 (或求和).

若令  $f$  和  $g$  都等于  $\psi(x, t)$  则得

$$\int (H\psi)^* \psi dx = \int \psi^* (H\psi) dx, \quad (4-32)$$

若  $\psi$  满足波动方程 (4-14), 则上式变为

$$\int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi dx + \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx = \frac{d}{dt} \left( \int \psi^* \psi dx \right) = 0. \quad (4-33)$$

这就是说,  $\int \psi^* \psi dx$  是一个与时间无关的常数. 这点容易解释. 若  $\psi$  是适当归一化的, 则  $\psi^* \psi$  是在  $x$  处找到粒子的概率; 于是, 这个积分是在任何地方找到粒子的概率, 它是一定的 (即是 1), 并且是常数. 当然, 就其相关的波动方程而言,  $\psi$  可以乘以任意常数, 并且仍然是一个解. 则  $\psi^* \psi$  乘以这个常数的模方, 积分是这个常数模方.

[83]

$\psi \psi^*$  的积分是常数, 对于我们定义  $\psi \psi^*$  为概率幅具有根本性的意义. 用传播子的概念讲, 这意思是, 若在  $t_a$  时刻  $f$  是波函数, 则在  $t_b$  时刻它有同样的模方积分. 即若

$$\psi(b) = \int_{-\infty}^{\infty} K(b, a) f(a) dx_a, \quad (4-34)$$

则

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(b) \psi(b) dx_b = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(a) f(a) dx_a \quad (4-35)$$

或者

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} K^*(b; x'_a, t_a) K(b; x_a, t_a) f^*(x'_a) f(x_a) dx_a dx'_a dx_b \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x_a) f(x_a) dx_a. \end{aligned} \quad (4-36)$$

由于对任何  $f$ , 上式都成立, 我们必须有

$$\int_{-\infty}^{\infty} K^*(b; x'_a, t_a) K(b; x_a, t_a) dx_b = \delta(x'_a - x_a). \quad (4-37)$$

这就是说, 为了把  $\psi$  解释为概率幅. 传播子必须满足式 (4-37). 我们已经用薛定谔方程推出了这点. 直接用定义  $K$  的路径积分来证明这点及其他性质 [例如式 (4-38) 和问题 4-7] 比通过微分方程来证明可能更好些. 当然, 这样做

是可能的,但证明过程不会像推导这样基本的关系那样简单和灵巧。人们可以用如下步骤证明式(4-37):可以直接从表示  $\exp(i\varepsilon L/\hbar)$  得到小间隔  $t_b = t_a + \epsilon$  的式(4-37)。再由归纳法,就得到完全的式(4-37)。利用路径积分处理量子力学问题的不利之处是,事实上,涉及  $\psi^*$  或  $K^*$  的关系本身不是浅显的。

用  $K(c, a)$  乘以式(4-37)再对  $x_c$  积分,可以证明:

$$\int_{-\infty}^{\infty} K^*(b, c)K(b, a)dx_b = K(c, a), \quad (4-38)$$

[84] 其中  $t_b > t_c > t_a$  将其与  $\int K(b, c)K(c, a)dx_c = K(b, a)$  比较。我们可用下述方式描述第二个关系:由  $t_a$  时刻出发,  $K(c, a)$  给出了其后时刻  $t_c$  的概率幅。若我们希望得到更后时刻  $t_b$  的概率幅,则可以用传播子  $K(b, c)$  来做到这点。另一方面,若已知  $t_b$  时的概率幅,我们希望回头去找较早时刻  $t_c (< t_b)$  的概率幅,则可以按照式(4-38)用函数  $K^*(b, c)$  来找到它。因此,我们可以说,  $K^*(b, c)$  消除了  $K(c, b)$  的作用。

**问题 4-7** 证明:  $\int K^*(b, a)K(b, c)dx_b = K^*(c, a)$ , 其中  $t_b > t_c > t_a$ .

## 4-2 与时间无关的哈密顿量

**有确定能量的定态** 哈密顿量  $H$  与时间无关的特殊情况在实际中是很重要的。这相当于作用量  $S$  不显含与时间有关项的情形;即例如势  $A$  和  $V$  中不含  $t$ 。在这种情况下,传播子不可能与绝对时间有关,而只是时间间隔  $t_b - t_a$  的函数。由于这个事实,波函数是时间的周期函数。

研究微分方程最容易看出有些什么结果。由薛定谔方程(4-14)出发,我们试探  $\psi = \phi(x)f(t)$  形式的特解,这是一个只含时间的函数乘以一个只含位置的函数。将其代入薛定谔方程,得

$$\phi(x)f'(t) = -\frac{i}{\hbar}[H\phi(x)]f(t) \quad (4-39)$$

或

$$\frac{f'(t)}{f(t)} = -\frac{i}{\hbar} \frac{H\phi(x)}{\phi(x)}. \quad (4-40)$$

此式左边与  $x$  无关,而右边与  $t$  无关。若它们始终相等,则两边无论与变量  $t$  或变量  $x$  都无关。亦即每边都必须是常数。我们称这个常数为  $-(i/\hbar)E$ 。于是  $f' = -(i/\hbar)Ef$  或  $f = f_0 \exp(-iEt/\hbar)$ ,并乘上一个任意常数因子。这样,此特解有下述形式:

$$\psi(x, t) = \phi(x)e^{-(i/\hbar)Et}, \quad (4-41)$$

其中  $\phi(x)$  满足

$$H\phi = E\phi. \quad (4-42)$$

也就是说, 对这个特解, 波函数以确定频率振荡. 可见, 波函数振荡的频率在经典物理中相应于能量. 所以我们可以说, 当波函数是这种特别形式时, 状态有确定能量  $E$ . 对于  $E$  的每一个值, 都必须找出不同的特定函数  $\phi(x)$  [方程 (4-42) 的一个解].

一个粒子在  $x$  处的概率是该处波函数  $\psi(x)$  的模方, 即  $|\psi(x)|^2$ . 由于式 (4-41), 这等于  $|\phi(x)|^2$ , 并且与时间无关. 即在任何地方找到粒子的概率与时间无关. 在这种情况下, 我们说系统处于稳定态, 所谓稳定是指概率作为时间的函数不发生变化.

这个情况与测不准原理多少有点联系; 对于我们精确知道能量  $E$  的情况, 必然完全不能确定时间. 这与下述思想一致, 处于特定状态中的原子的性质绝对与时间无关, 所以在任何时刻我们都可以得到同样结果.

假设  $E_1$  是一个可能的能量, 对于它, 方程 (4-42) 有解  $\phi_1(x)$ ;  $E_2$  是另一个能量值, 对于它, 方程 (4-42) 有另一个解  $\phi_2(x)$ . 这样, 我们知道了薛定谔方程的两个特解, 即

$$\psi_1(x, t) = \phi_1(x)e^{-(i/\hbar)E_1 t}$$

和

$$\psi_2(x, t) = \phi_2(x)e^{-(i/\hbar)E_2 t}. \quad (4-43)$$

因为薛定谔方程是线性的, 显然, 若  $\psi$  是它的解, 则  $c\psi$  也是它的解. 并且, 若  $\psi_1$  是它的解,  $\psi_2$  又是它的解, 则  $\psi_1$  与  $\psi_2$  的和也是它的一个解. 显然, 函数

$$\psi(x, t) = c_1\phi_1(x)e^{-(i/\hbar)E_1 t} + c_2\phi_2(x)e^{-(i/\hbar)E_2 t} \quad (4-44)$$

也是薛定谔方程的解.

事实上, 可以证明: 若知道了  $E$  的所有可能值及其相应的函数  $\phi(x)$ , 则方程 (4-44) 的任何解  $\psi(x, t)$  都可以写成这些有确定能量特解的线性组合.

正如我们在节 4-1 中证明过的, 在任何地方, 粒子的总概率是常数. 无论  $c_1$  和  $c_2$  是什么值, 这一点总是正确的, 因此, 应用  $\psi(x, t)$  的式 (4-44), 我们有

$$\begin{aligned} \int \psi^* \psi dx &= c_1^* c_1 \int \phi_1^* \phi_1 dx + c_1^* c_2 e^{+(i/\hbar)(E_1 - E_2)t} \int \phi_1^* \phi_2 dx \\ &\quad + c_1 c_2^* e^{-(i/\hbar)(E_1 - E_2)t} \int \phi_1 \phi_2^* dx + c_2^* c_2 \int \phi_2^* \phi_2 dx. \end{aligned} \quad (4-45)$$

因为它们给出的结果必定为常数, 因此, 对于  $c_1$  和  $c_2$  的所有可能的选择, 时间

变量项 (即包括  $\exp[\pm(i/\hbar)(E_1 - E_2)t]$  的项) 必须为零. 这意味着,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_1^*(x)\phi_2(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2(x)\phi_1^*(x)dx = 0. \quad (4-46)$$

任何两个函数  $f(x)$  和  $g(x)$  只要满足  $\int f^*(x)g(x)dx = 0$ , 我们说它们是正交的. 这样, 式 (4-46) 说明: 能量不同的两个状态是正交的.

后面我们将研究诸如  $\int f^*(x)g(x)dx$  等表达式的含义, 并将看到, 式 (4-46) 记述了下述事实: 若已知一个粒子有能量  $E_1$  [因此波函数为  $\psi_1 = \exp(-iE_1 t/\hbar)\phi_1$ ], 则发现它有另一不同能量  $E_2$  [即波函数为  $\psi_2 = \exp(-iE_2 t/\hbar)\phi_2$ ] 的概率幅必然是零.

**问题 4-8** 由  $H$  是厄米的这一事实证明,  $E$  是实数.[在式 (4-30) 中选  $f = g = \phi$ .]

**问题 4-9** 由  $H$  是厄米的这一事实证明, 式 (4-46) 成立.[在式 (4-30) 中选  $f = \phi_2, g = \phi_1$ .]

**定态函数的线性组合** 假设相应于一组能级  $E_n$  的函数不仅是正交的, 而且也是归一化的, 即其模方遍及所有  $x$  的积分等于 1. 于是我们将有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x)\phi_m(x)dx = \delta_{nm}, \quad (4-47)$$

其中  $\delta_{nm}$  是克罗内克  $\delta$  符号, 它的定义为: 当  $n \neq m$  时,  $\delta_{nm} = 0$ ; 而当  $n = m$  时,  $\delta_{nm} = 1$ . 许多函数可以表示为这种  $\phi_n(x)$  的线性组合. 特别是, 可以作为波函数的任何函数都能够如此表示. 即

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x). \quad (4-48)$$

系数  $a_n$  容易得到, 用  $\phi_m^*(x)$  乘方程 (4-48) 两边再遍及全部  $x$  积分, 即得

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x)f(x)dx = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x)\phi_n(x)dx = a_m \quad (4-49)$$

这样,

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(x)f(x)dx. \quad (4-50)$$

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(y) f(y) dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \phi_n^*(y) \right] f(y) dy. \end{aligned} \quad (4-51)$$

利用狄拉克  $\delta$  函数, 这表明

$$\delta(x - y) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \phi_n^*(y). \quad (4-52)$$

可以用这些函数  $\phi_n(x)$  和能量值  $E_n$  表示传播子  $K(b, a)$ . 我们通过下述考虑来做这件事. 让我们提出问题: 若已知  $f(x)$  是时刻  $t_a$  的波函数, 那么时刻  $t_b$  的波函数是什么呢? 在任何时刻  $t$  都可以把它写为

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-(i/\hbar)E_n t} \phi_n(x), \quad (4-53)$$

因为它是薛定谔方程的解, 并且任意解都可以写成这种形式. 但是在时刻  $t_a$ , 我们有

$$f(x) = \psi(x, t_a) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-(i/\hbar)E_n t_a} \phi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \phi_n(x), \quad (4-54)$$

因为我们总可以用式 (4-48) 的形式表示  $f(x)$ , 所以我们得到

$$c_n = a_n e^{+(i/\hbar)E_n t_a}. \quad (4-55)$$

代入式 (4-53), 有

$$\psi(x, t_b) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n e^{-(i/\hbar)E_n t_b} \phi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-(i/\hbar)E_n(t_b - t_a)} \phi_n(x). \quad (4-56)$$

对于系数  $a_n$ , 应用式 (4-50), 得

$$\begin{aligned} \psi(x, t_b) &= \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) e^{-(i/\hbar)E_n(t_b - t_a)} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(y) f(y) dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x) \phi_n^*(y) e^{-(i/\hbar)E_n(t_b - t_a)} f(y) dy. \end{aligned} \quad (4-57)$$

最后这个式子用时刻  $t_1$  的波函数  $f(x)$  完全决定了时刻  $t_2$  的波函数. 以前我们曾用下式表示过这一关系:

$$\psi(x, t_b) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x, t_b; y, t_a) f(y) dy. \quad (4-58)$$

[88] 将上式与式 (4-57) 比较, 我们最终得到了定义传播子  $K(b, a)$  的表达式:

$$K(x_b; t_b; x_a, t_a) = \begin{cases} \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x_b) \phi_n^*(x_a) e^{-(i/\hbar) E_n(t_b - t_a)} & \text{当 } t_b > t_a \\ 0 & \text{当 } t_b < t_a \end{cases} \quad (4-59)$$

使  $K(b, a)$  的这个表达式变换为更方便的表示式是非常有用的。所谓更方便的表示式是指完全用微分方程 (4-42) 的解来表示传播子, 而后者本来是一个路径积分。

**问题 4-10** 证明式 (4-59) 中定义的  $K(b, a)$  满足薛定谔方程。

**问题 4-11** 对于三维自由粒子, 证明: 解

$$\phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{x}) = e^{i(\mathbf{p}/\hbar) \cdot \mathbf{x}} \quad (4-60)$$

具有能量  $E_{\mathbf{p}} = p^2/2m$ . 把矢量  $\mathbf{p}$  看作下标  $n$  并注意到正交性. 即, 只要  $\mathbf{p} \neq \mathbf{p}'$ , 便有

$$\int \phi_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{x}) \phi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{x}) d^3x = 0, \quad \text{即使 } E_{\mathbf{p}} = E_{\mathbf{p}'}.$$
(4-61)

因此, 自由粒子传播子必然是

$$K_0(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a) = \sum_{\mathbf{p}} e^{i(\mathbf{p}/\hbar) \cdot (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)} e^{-(i/\hbar)(p^2/2m)(t_b - t_a)}. \quad (4-62)$$

因为  $\mathbf{p}$  是分布在一个连续区域中的, 所以遍及“记号” $\mathbf{p}$  的求和实际上等价于遍及  $\mathbf{p}$  的所有值的积分, 即

$$\sum_{\mathbf{p}} (\quad) = \int (\quad) \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (4-63)$$

这样, 我们找到了由下式给出的自由粒子传播子:

$$K_0(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a) = \int e^{i(\mathbf{p}/\hbar) \cdot (\mathbf{x}_b - \mathbf{x}_a)} e^{-(i/\hbar)(p^2/2m)(t_b - t_a)} \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (4-64)$$

[89] **问题 4-12** 通过配平方来完成积分 (4-64). 证明会得到自由粒子传播子的形式 [即式 (3-3) 的三维形式].

### 4-3 自由粒子波函数的归一化

像问题 4-11 中那样给出的自由粒子传播子的推导方法是不能令人满意的, 有两个互相有关的理由. 第一, 如果状态处于一个连续区域中 (如对于自

由粒子, 任何  $p$  都是允许的), 则式 (4-62) 中使用的对离散态  $n$  求和的思想不能令人满意. 第二, 自由粒子的平面波函数虽然是正交的, 却不能归一化, 就是说,  $\int_{-\infty}^{\infty} \phi^* \phi dx = \int_{-\infty}^{\infty} 1 dx = \infty$ , 因此, 推导式 (4-62) 所用过的条件 (4-47) 不能满足. 可以用一个完全直截了当的数学方法把它们都克服掉. 让我们回到把任意函数表示成本征函数之和, 然后开始推导,

$$f(x) = \sum_n a_n \phi_n(x), \quad (4-65)$$

现在我们允许状态一部分 (甚至全部) 处于一个连续区域. 因此, 对  $n$  的求和至少必须部分地由积分代替. 用数学上的谨慎方法, 人们可以找到  $K$  的正确表达式, 它与式 (4-59) 类似, 而且当状态是在连续区内时也可以使用.

**箱归一化** 许多物理学家喜欢另一个不那么严格的方法. 他们用下述方式修改原来的问题; 这个方法出于物理原因, 不是根本上修改结果, 而仍让状态有离散能量, 所有简单求和现在仍是简单求和. 在我们的例子中, 可以用下面方法完成这点. 我们所研究的是在有限时间内, 粒子于时刻  $t_a$  从  $x_a$  点开始; 于时刻  $t_b$  跑到  $x_b$  点的概率幅. 若这两点只是分开一个有限距离, 并且时间不是特别长, 则确实, 无论粒子是真正自由的还是关在体积为  $V$  的某个巨大箱子 (其壁远离  $x_a$  和  $x_b$ ) 中, 所得到的概率幅没有什么明显不同. 仅当在时间  $t_b - t_a$  内粒子可能跑出箱壁又再回去, 概率幅才会受到影响, 但若箱壁相距足够远, 那么出现上述情况的概率幅就可以忽略不计.

这个假设对某种特殊形状的箱壁会失效总是可能的, 例如, 当  $x_b$  处于从  $x_a$  出发、又由壁反射回来的波的聚焦点上时, 就是这样. 有时有些人用处于大球形箱子中心的系统来代替真空中的系统, 这样就会带来一定误差. 事实上, 精确地位于一个完整的球中心的系统可能有一种效应 (像一个非常圆的物体阴影中心有一个亮点), 当球半径趋向无限大时, 它也不会消失. 对于另一种形状, 或系统偏离球心, 这种表面效应就会消失.

首先考虑一维情形. 于是, 真空中与空间有关的波函数是  $e^{ip/\hbar}x$  (任何  $p$ , 正的或负的). 比如说, 如果  $x$  的区域只限制在  $-L/2$  和  $L/2$  之间, 那么  $\phi(x)$  会是什么样的函数呢? 答案与边界条件规定  $\phi(x)$  在  $x = -L/2$  和  $x = L/2$  上的值有关. 物理上最容易理解的条件是: 对粒子来说, 壁是一个非常高的排斥势, 因此把粒子囚禁起来了 (即完全反射). 这相当于当  $x = -L/2$  和  $x = L/2$  时,  $\phi(x) = 0$ . 波动方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = E\phi \quad (4-66)$$

在  $|x| < L/2$  区域中, 相应于  $E = p^2/2m = \hbar^2 k^2/2m$  的解是

$$\exp(ikx) \quad \text{和} \quad \exp(-ikx)$$

以及它们的任何线性组合. 除非  $k = n\pi/L$  ( $n$  是整数), 否则无论  $\exp(ikx)$  还是  $\exp(-ikx)$  都不能满足边界条件.  $n$  是奇数时取它们两者之和的一半 (这是  $\cos(kx)$ ), 而当  $n$  是偶数时取它们两者的差再乘以  $i/2$  (是  $\sin(kx)$ ), 便给出令人满意的解, 正如图 4-1 所示. 这样, 状态函数是正弦和余弦, 而能级是离散的 (即不连续).

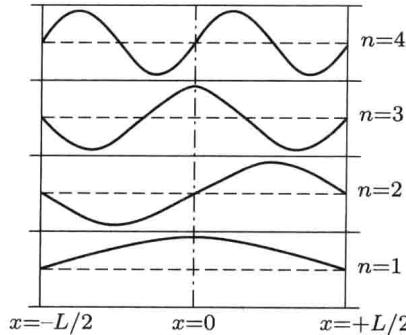


图 4-1 一维箱归一化波函数的形状. 画出了头四个. 它们相应的能级是  $E_1 = \hbar^2 \pi^2 / 2mL^2$ ,  $E_2 = 4E_1$ ,  $E_3 = 9E_1$ ,  $E_4 = 16E_1$ . 对于实际问题, 这的能量的绝对大小并不重要, 因为它与我们虚构的箱子尺度有关. 而各个状态能级之间的关系是有意义的

若把解写为

$$\sqrt{\frac{2}{L}} \cos(kx) \quad \text{和} \quad \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(kx),$$

则它们是归一化的, 因为

$$\int_{-L/2}^{+L/2} \left( \sqrt{\frac{2}{L}} \cos(kx) \right)^2 dx = 1. \quad (4-67)$$

遍及状态求和就是遍及  $n$  的求和. 比如说, 若我们考虑  $L$  非常大而  $x$  不大 (箱壁远离所讨论的点) 时的正弦波函数 (这样,  $n$  取偶数), 则相继函数之差只是一个量小:

$$\begin{aligned} [91] \quad & \sqrt{\frac{2}{L}} \left[ \sin\left(2\pi(n+1)\frac{x}{L}\right) - \sin\left(2\pi n \frac{x}{L}\right) \right] \\ &= \sqrt{\frac{2}{L}} \left[ 2 \cos\left(2\pi \frac{2n+1}{2} \frac{x}{L}\right) \sin\left(2\pi \frac{1}{2} \frac{x}{L}\right) \right] \\ &\approx \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{2\pi x}{L} \cos\left(2\pi \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{x}{L}\right), \end{aligned} \quad (4-68)$$

这个差近似地正比于一个小量  $x/L$ . 因此, 对  $n$  求和可以用遍及  $k = 2\pi n/L$  的积分来代替. 因为  $k$  的各个相继的允许值 (对于正弦函数) 之间的差值为  $2\pi/L$ , 所以  $\Delta k$  区间中有  $\frac{L}{2\pi}\Delta k$  个态. 所有这些, 对波函数是余弦的态也适用. 因此, 在我们的公式中, 可以用积分代替求和:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (\quad) \rightarrow \int_{-\infty}^{0} (\quad) \frac{dk}{2\pi} L; \quad (4-69)$$

记住, 要对两类波函数 (即  $\sqrt{2/L} \cos(kx)$  和  $\sqrt{2/L} \sin(kx)$ ) 都运用这个结果并且相加起来.

用  $\sin(kx)$  和  $\cos(kx)$  作波函数常常不方便. 我们更愿意用其线性组合  $\exp(ikx) = \cos(kx) + i \sin(kx)$  和  $\exp(-ikx) = \cos(kx) - i \sin(kx)$ . 由于我们的箱子限制, 我们不得不用正弦和余弦, 而不用其线性组合, 因为对于给定的  $k$ , 只有其中一个 (正弦或余弦, 而不是两者同时都是) 是问题的解. 但是若可以忽略由  $k$  的这些小差别引起的小误差, 则我们仍可期望从这些新的线性组合得到正确结果. 将其归一化后是

$$\sqrt{1/L} \exp(ikx) \quad \text{和} \quad \sqrt{1/L} \exp(-ikx). \quad [92]$$

因为波  $\exp(-ikx)$  可看成是  $k$  取负值的波  $\exp(ikx)$ , 于是我们的新程序 (包括两类波函数的相加) 变成了下述实际规则:

为了处理自由粒子波函数  $\exp(ikx)$ , 将它们在长度为  $L$  的  $x$  区域中归一化 [即令  $\phi(x) = \sqrt{1/L} \exp(ikx)$ ], 并且用  $k$  的积分代替对状态的求和, 其规则为: 在  $k$  到  $k + dk$  的区域内, 状态的数目是  $Ldk/2\pi$ ,  $k$  的区间是  $-\infty$  到  $\infty$ .

**周期边界条件** 有时, 用下面的论述来避免在正弦、余弦及指数之间兜圈子. 因为箱壁无论如何是人为的, 所以只要它足够远, 它的特定位置和特定边界条件就不应该产生任何物理差别. 因此, 可以不用物理上的简单条件, 即在  $x = L/2$  和  $x = -L/2$  处  $\phi(x) = 0$ , 而代之以另外两个条件, 由它们确实会直接得到解  $\exp(ikx)$ . 它们是

$$\phi(x) \left( \text{在 } x = \frac{L}{2} \text{ 处} \right) = \phi(x) \left( \text{在 } x = -\frac{L}{2} \text{ 处} \right) \quad (4-70)$$

和

$$\phi'(x) \left( \text{在 } x = \frac{L}{2} \text{ 处} \right) = \phi'(x) \left( \text{在 } x = -\frac{L}{2} \text{ 处} \right). \quad (4-71)$$

因为在整个空间内, 要求  $\phi(x)$  以  $x = L$  为周期而周期性变化会导致同样结果, 所以这又称为**周期边界条件**. 容易证实, 函数  $\sqrt{1/L} e^{ikx}$  是解, 在区域  $L$

中归一化, 只要  $k = 2\pi n/L$ , 其中  $n$  是整数 (正数、负数或零). 由此直接得出我们的规则.

在三维空间, 我们可以看到, 使用在三个方向上边长各为  $L_x$ 、 $L_y$ 、 $L_z$  的矩形箱子会有什么结果. 让我们使用周期性边界条件, 即在一个面上各点的波函数的大小和一阶导数分别等于对面相应点上波函数的大小和一阶导数. 归一化的自由粒子波函数是

$$\sqrt{\frac{1}{L_x}} \exp(i k_x x) \sqrt{\frac{1}{L_y}} \exp(i k_y y) \sqrt{\frac{1}{L_z}} \exp(i k_z z) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x}), \quad (4-72)$$

[93] 其中  $V = L_x L_y L_z$  是箱子的体积;  $k_x$ 、 $k_y$ 、 $k_z$  的允许值分别是  $2\pi n_x/L_x$ 、 $2\pi n_y/L_y$ 、 $2\pi n_z/L_z$ , 式中  $n_x$ 、 $n_y$ 、 $n_z$  都是整数. 进而,  $k_x$  在  $dk_x$  范围内、 $k_y$  在  $dk_y$  范围内、 $k_z$  在  $dk_z$  范围内解的数目是

$$\frac{dk_x}{2\pi} L_x \frac{dk_y}{2\pi} L_y \frac{dk_z}{2\pi} L_z = \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} V. \quad (4-73)$$

即在体积  $V$  中, 归一化的平面波为  $\sqrt{1/V} \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ . 在区域  $d^3 \mathbf{k}$  ( $\mathbf{k}$  空间中的微分体积) 中的状态数是  $V d^3 \mathbf{k} / (2\pi)^3$ .

让我们把这些用于问题 4-11, 再回顾节 3-1 阐述过的动量与波数的关系  $p = \hbar k$ . 在式 (4-64) 中必须做两点变化. 第一, 因为过去用的波函数是  $\exp(ip \cdot x / \hbar)$ , 而这里用的是  $\sqrt{1/V} \exp(ip \cdot x / \hbar)$ , 所以当两个波函数相乘时, 会包含另外一个因子  $1/V$ . 第二, 必须用  $V \int(\ ) d^3 p / (2\pi\hbar)^3$  代替符号  $\sum_p(\ )$ ,

这就证明了节 4-2 的做法是合理的, 也证明了问题 4-11 中给出的结果.

注意, 因子  $V$  最后抵消了, 实际上它们也必须是这样, 因为当  $V \rightarrow \infty$  时, 传播子  $K(b, a)$  必定与箱子的大小无关.

**关于数学严格性的一些评注** 看到计算的最后结果, 体积  $V$  被抵消了, 读者可能有一个或两个反应. 一个可能是: 怎么那么巧! 它如应该那样地被抵消了, 以使箱壁没有影响? 另一个也许是: 为什么要用这种复杂的“不干净”又不严格的方式来做这件事? 加了箱壁, 它又没有带来什么差别, 等等; 所有这些本来可以做得远为细致一些; 严格的数学论证并不需要箱壁; 等等. 有什么反应取决于你注意的是物理还是数学. 关于物理学中数学严格性的地位问题, 数学家和物理学家之间有许多误解. 因此, 这里议论一下每种方法 (箱归一化或数学严格方法) 的价值或许是适宜的.

当然, 有一个比较不值一提的论点: 哪个方法最容易为人熟悉, 也就是哪一个需要的新知识最小. 以前, 大多数物理学家已经看到过关于如何在箱子中计算状态的论述.

另一个论点是, 数学严格解在物理上可能并不是严格的. 即箱子在事实上可能存在. 它可能不是矩形箱子, 但是试验经常不是在露天, 而是在房间里进行的. 尽管“箱壁没有影响”这点在物理上是有道理的, 原来的问题也确实是理想化的体系. 把箱壁移至无穷远与代之以远远相对的精致镜子相比, 并不是更令人满意的理想化方案. 在第一种理想化情况中, 数学严格是被浪费了, 因为箱壁并不是在无穷远.

箱壁方法是恰如其分地严格, 或者说是恰如其分地不严格. 它有几个优点. 例如, 在发现体积抵消的过程中我们了解到, 理想化箱壁至少有一个方面(即它们离多么远)是不重要的. 这个发现使我们具有更直接的信念; 环境的实际安排并不重要. 最后, 实际上, 当我们遇到有限样品时, 已推出的公式非常有用. 例如在第八章, 我们将用它去计算大方形的物质块中的声波模式.

另一方面, 数学清晰论述的优点在于, 它避免了许多不必要的相互抵消的细节. 尽管使用箱壁方法人们可以了解箱壁怎样不会产生影响的有关情况, 人们还是可以确信, 无论如何这个方法是正确的, 并且不希望转向细节来重新研究它.

归一化问题是一个特例, 但是它说明了这一点. 物理学家不能理解, 在处理理想化了的物理问题时, 数学家那么小心谨慎. 物理学家知道, 实际问题远为复杂. 问题已经被直觉简化, 直觉去掉了不重要的成分, 而对剩下的部分还常常采用近似.

# 第五章

## 测量与算符

---

[96]

至此, 我们已经描述了一些量子力学系统, 似乎我们只打算测量位置坐标和时间. 确实, 所有对量子力学系统的测量最终都可以归结为测量位置和时间 (例如, 仪表上指针的位置或粒子飞行时间). 由于有这个可能性, 因而借助于位置测量而系统化了的理论原则上完全足以描述所有现象. 然而, 方便的做法是, 力争直接回答涉及诸如测量动量等问题, 而不坚持设备的最原始记录必须是位置测量值, 也不详细分析把动量信息转化成记录位置的那部分仪器. 因此, 这一章不再集中于粒子有确定位置的概率幅, 我们将阐述发现动量、能量或其他物理量为某一确定值的概率幅的概念.

本章第一节将说明如何用动量和能量来描述一个系统. 这里学到的概念将在第二节推广, 以便普遍描述表示量子力学系统的各种方法. 有一些我们能进行各种表象的相互转换的变换函数, 它们有许多有意义的性质. 其中有前一章引入的算符概念, 我们将在本章第三节作进一步讨论.

### 5–1 动量表象

**动量概率幅** 迄今为止, 我们已经用了以粒子位置来表述的概率概念. 但是, 如果我们希望测量动量, 那么, 是否有一个概率幅  $\phi(p)$ ? 其模方会给出测量动量时粒子动量为  $p$  的概率  $P(p)$ . 事实上, 确有这样的概率幅, 而且我们很容易找到它.

某些测量动量 (或其他物理量) 的方法相当于测量位置, 因此, 只要我们知道如何分析坐标测量, 就可以分析它们. 例如, 一维情形, 假设一个粒子在  $t = 0$  时的位置在  $x$  轴原点附近的  $\pm b$  之间. 这个不确定量  $b$  可以随意的大, 只

要它有限. 我们可以用飞行时间技术测量这个粒子的动量; 即我们可以观察粒子在时间  $t = T$  内移动 (假设没有任何力) 的距离. 若位置是  $y$ , 则速度是  $y/T$ , 动量是  $p = my/T$ . 动量测量的误差为  $\pm mb/T$ , 只要  $T$  足够大, 就能使这误差小到符合要求.

我们来分析按这个实验决定的动量概率  $P(p)$ . 动量在  $p$  和  $p + dp$  之间的概率  $P(p)dp$  是下面这一情况发生的概率  $P(y)d\bar{y}$ , 即若所有影响粒子的势突然消失则在时间  $T$  之后会在点  $y$  和  $y + dy$  之间发现粒子的概率. 当然, 这就要求我们用  $p = my/T$  把  $p$  与  $y$  联系起来. 设粒子在  $t = 0$  时的波函数由  $f(x)$  给出, 我们的问题是要找出直接用  $f(x)$  表示的  $P(p)$ .

粒子在时间  $t = T$  内到达  $y$  点的概率幅是

$$\psi(y, T) = \int_{-\infty}^{\infty} K_0(y, T; x, 0) f(x) dx. \quad (5-1)$$

用自由粒子传播子  $K_0$  (3.3 式) 代入后, 这个表达式变成

$$\begin{aligned} \psi(y, T) &= \left( \frac{m}{2\pi i \hbar T} \right)^{1/2} \\ &\times \exp \left\{ \frac{imy^2}{2\hbar T} \right\} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{im(-2yx + x^2)}{2\hbar T} \right\} f(x) dx. \end{aligned} \quad (5-2)$$

这个概率幅的模方给出粒子在  $y$  和  $y + dy$  之间的概率. 按照我们的定义, 在  $T \rightarrow \infty$  极限, 这与粒子的动量在  $p$  与  $p + dp$  之间的概率恒等.

$$\begin{aligned} P(y)dy &= \frac{mdy}{2\pi\hbar T} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{im(-2yx + x^2)}{2\hbar T} \right\} f(x) dx \right|^2 \\ &= P(p)dp \quad \text{当 } T \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (5-3)$$

再代入  $p = my/T$ , 并取  $T \rightarrow \infty$  的极限, 结果是

$$P(p)dp = \frac{dp}{2\pi\hbar} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{-ipx}{\hbar} + \frac{imx^2}{2\hbar T} \right\} f(x) dx \right|^2. \quad (5-4)$$

我们早已假定, 开始时粒子应限制在原点附近  $\pm b$  的区域内. 这意味着, 对于绝对值大于  $b$  的  $x$ , 初始波函数  $f(x)$  降到零. 现在随着  $T$  变大, 量  $imb^2/2\hbar T$  变到小得可以忽略的程度. 因为绝对值大于  $b$  的  $x$  对积分 (5-4) 没有贡献, 概率  $P(p)dp$  近似为  $dp/2\pi\hbar$  乘以下面概率幅的模方<sup>①</sup>

$$\phi(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ \frac{-ipx}{\hbar} \right\} f(x) dy. \quad (5-5)$$

<sup>①</sup> 许多作者愿意把因子  $1/2\pi\hbar$  说成是在  $\phi(p)$  的定义中的一部分, 在那儿, 它表示为  $1/\sqrt{2\pi\hbar}$ . 然而, 按照节 4-3 中的叙述, 我们乐于把它写成我们已经用过的形式, 并记住, 对于每一维空间, 动量的微分元总包括因子  $1/2\pi\hbar$ . 例如, 三维动量空间中动量的微分元是  $d^3p/(2\pi\hbar)^3$ .

这个结果。的另一种解释由图 5-1 给出，并由图 5-2 进一步展开。

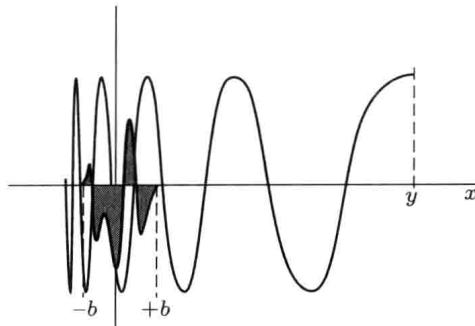


图 5-1 自由飞行粒子在时间间隔  $T$  内到达位置  $y$  的概率幅由两个函数的乘积决定。第一个是粒子从某个位置  $x$  开始的概率幅  $f(x)$ , 如图中阴影曲线所示。第二个从  $x$  跑到  $y$  的概率幅是自由粒子传播子  $K(y, T; x, 0)$ , 如图中波长缓慢变化的正弦波所示。(其中我们把最终位置  $y$  当作这个函数的原点, 因为  $x$  是我们的变量。) 若与  $f(x)$  是非零的距离  $-b$  到  $+b$  相比较, 点  $y$  距原点很远, 则这个波的波长近似为常数。波的近似形式为  $\exp[-(i/\hbar)(my/T)x]$ 。这两个函数乘在一起并对  $x$  积分, 便获得最后到达的概率幅。因为在相同时间  $T$  内, 所有粒子都飞行近似相等的距离  $y$ (还假设  $y \gg b$ ), 所以, 这个最终的概率幅等价于粒子有动量  $p = my/T$  的概率幅

式 (5-5) 给出的动量概率幅的表达式适用于一维情况。容易将这个定义推广到三维情形, 这时动量概率幅是

$$[100] \quad \phi(\mathbf{p}) = \int \exp\left\{\frac{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right\} f(\mathbf{x}) d^3x, \quad (5-6)$$

其中, 假定波函数  $f(\mathbf{x})$  在三维坐标空间的所有点上有定义。这是  $t = 0$  时粒子具有动量  $\mathbf{p}$  的概率幅。(注意, 在  $t = T$  时它没有定义。时间间隔  $T$  是测量装置的一部分, 它可以改变而不影响动量概率幅。) 这个概率幅的模方乘以动量微分元, 就给出了动量  $\mathbf{p}$  在三维动量空间间隔  $d^3p/(2\pi\hbar)^3$  内的概率。

我们已经分析了以飞行时间技术为基础的动量测量。然而, 这种分析也适用于其他技术。分析测量动量的任何技术都会给出同样的动量概率幅。假定测量同一个量(动量)有两种方法(或技术), 若其中之一给出的结果与另一个不同, 则我们必须解释为什么这个或另一个仪器出错了。因此, 如果同意飞行时间技术是测量动量的适当方法, 那么, 只要系统处于  $f(x)$  态, 任何其他测量动量的仪器必须给出同样的动量分布结果  $P(p)dp$ 。任何测量动量仪器的结果分析都会给出动量  $p$  的概率幅的相同表示  $\phi(p)$ , 顶多可能差一个无关紧要的常数相位 [即  $\delta$  为常数的因子  $\exp(i\delta)$ ]。作为一例, 考虑下面的问题。

**问题 5-1** 考虑任何一个设计得用经典近似方法来测量动量的实验装置,

例如磁场分析仪. 用前几节概括的方法分析仪器. 证明会得到动量概率幅的同样结果.

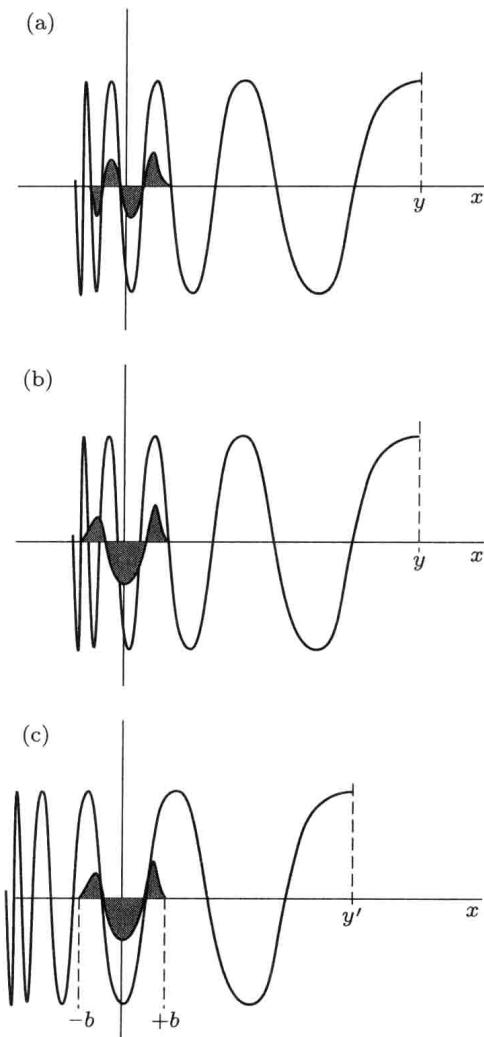


图 5-2 若概率幅  $f(x)$  近似为周期函数, 其波长与覆盖其上的传播子波长相等 [如 (a) 所示], 则两个函数乘积的积分很大, 即动量为  $p = my/T$  的概率很大.

另一方面, 若某新函数  $f'(x)$  的波长与传播子波长不同, 如 (b) 所示, 则取乘积后不同  $x$  值对积分的贡献会互相抵消. 于是, 动量为  $my/T$  的概率很小.

如果选择一个新的位置  $y'$  作为终点, 如 (c) 所示, 则传播子曲线的新区域覆盖了  $-b$  到  $+b$  空间. 对于正确选择的  $y'$ , 这个新区域中的传播子波长与  $f'(x)$  的相等, 结果概率很大; 即这个粒子取新的动量值  $p' = my'/T$  的概率很大.

**变换到动量表象** 我们已经把  $\psi(x, t)$  叫做  $t$  时刻粒子处于  $x$  点的概率幅. 也已经找到动量概率幅是

$$\phi(\mathbf{p}, t) = \int \exp\left\{\frac{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right\} \psi(\mathbf{x}, t) d^3x. \quad (5-7)$$

我们将称它为在  $t$  时刻粒子动量为  $\mathbf{p}$  的概率幅.

[101] 与坐标表象相比, 更常用动量表象来分析问题, 或者像人们常说的那样, 与坐标空间相比, 更经常在动量空间中分析问题. 实际上, 这两种表象中的互相转换正是一个傅里叶变换. 这样, 若已有动量表象而希望找到坐标表象, 我们用下式给出的逆变换:

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \int \exp\left\{\frac{+i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}\right\} \phi(\mathbf{p}, t) \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (5-8)$$

可以用描述其他概率幅结构时使用过的同样物理词汇来描述这一公式. 粒子处于位置  $\mathbf{x}$  的概率幅由对所有可能情况的和给出. 在这种情况下, 各种可能情况相应于两项的乘积. 其中之一是粒子动量为  $\mathbf{p}$  的概率幅, 由  $\phi(\mathbf{p})$  给出. 另一项  $\exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}/\hbar)$ , 是: 若粒子动量为  $\mathbf{p}$ , 它便是处于位置  $\mathbf{x}$  的概率幅. 我们对第二项并不陌生, 在问题 3-4 中已讨论过这个表达式.

注意, 在变换式 (5-7) 中, 指数函数中有负号. 这样的项可用与上一段相似的方式来描述; 即我们可以说,  $\exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}/\hbar)$  是: 若粒子处于位置  $\mathbf{x}$ , 它就是具有动量  $\mathbf{p}$  的概率幅.

**动量表象中的传播子** 在节 3-4 中我们已经说明, 如何从前一时刻  $t_a$  的波函数导出特定时刻  $t_b$  的波函数, 这要借助于在  $t_a$  和  $t_b$  之间描述粒子运动的传播子. 即

$$\psi(\mathbf{x}_b, t_b) = \int K(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a) \psi(\mathbf{x}_a, t_a) d^3x_a. \quad (5-9)$$

也可以定义动量空间中的传播子, 它在对应的表达式中使用. 这样,  $t_b$  时刻的动量概率幅可以由早一时刻  $t_a$  的动量概率幅推出:

$$\phi(\mathbf{p}_b, t_b) = \int K(\mathbf{p}_b, t_b; \mathbf{p}_a, t_a) \phi(\mathbf{p}_a, t_a) \frac{d^3p_a}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (5-10)$$

在式 (5-9) 中, 用式 (5-8) 代替  $\psi(\mathbf{x}_a, t_a)$ , 再取  $\psi(\mathbf{x}_b, t_b)$  的傅里叶变换, 以便求得  $\phi(\mathbf{p}_b, t_b)$ , 就像在式 (5-7) 中那样, 我们看到, 动量表象中的传播子由坐标表象中的传播子表示的表达式是

$$K(\mathbf{p}_b, t_b; \mathbf{p}_a, t_a) = \iint e^{-(i/\hbar)\mathbf{p}_b \cdot \mathbf{x}_b} K(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a) e^{+(i/\hbar)\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{x}_a} d^3x_b d^3x_a. \quad (5-11)$$

[102] 例如, 在动量空间中描述自由粒子运动的传播子是

$$\begin{aligned} & \mathcal{K}_0(\mathbf{p}_b, t_b; \mathbf{p}_a, t_a) \\ &= \begin{cases} (2\pi\hbar)^3 \delta^3(\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \frac{|\mathbf{p}_a|^2}{2m}(t_b - t_a)\right\} & \text{当 } t_b > t_a \\ 0 & \text{当 } t_b < t_a. \end{cases} \quad (5-12) \end{aligned}$$

[最后一行来源于约定 (4-28).] 这个表达式中出现  $\delta$  函数表明, 自由粒子的动量不变, 如图 5-3 所示. 然而, 动量波函数的相位按照因子  $\exp(-iEt/\hbar)$  连续变化, 其中  $E = p^2/2m$ . 由式 (5-12) 给出的这个结果也可以从式 (4-64) 直接看出来.

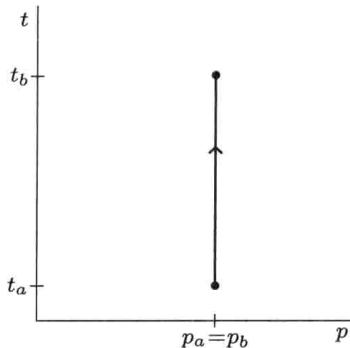


图 5-3 自由粒子在动量空间的传播子不像在坐标空间的传播子. 在动量空间, 只有一条路径可以使粒子在  $t_b$  时刻达到动量值  $p_b$ . 这一单一的路径必须开始于动量  $p_a = p_b$ . 没有其他路径对这个传播子有贡献

后一传播子为自由粒子提供了比坐标空间中所提供的远为简单的表达式. 一般, 当粒子不是自由的, 而是在某个势影响下运动时, 动量表象中的传播子不再那么简单. 但当势的效应可以表示为微扰展开时, 它又变得很简单了(参看第六章).

**能量 – 时间变换** 在许多应用中, 尤其是在相对论量子力学中, 最好用对称形式处理空间和时间变量. 这样, 在从坐标表象转换为动量表象的变换过程中, 我们就包含了由时间转换为能量的变换. 传播子的完整变换就是

$$k(\mathbf{p}_b, E_b; \mathbf{p}_a, E_a) = \iiint_{-\infty}^{\infty} \int_{t_a}^{\infty} e^{-(i/\hbar)\mathbf{p}_b \cdot \mathbf{x}_b} e^{+(i/\hbar)E_b t_b} K(\mathbf{x}_b, t_b; \mathbf{x}_a, t_a) \times e^{+(i/\hbar)\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{x}_a} e^{-(i/\hbar)E_a t_a} dt_b dt_a d^3 \mathbf{x}_b d^3 \mathbf{x}_a. \quad [103]$$

这里能量  $E$  不等于  $p^2/2m$ , 而是确定传播子所需要的另一个独立变量(时间的系数). 仅当系统永远(无限的时间)处于同样的能量状态, 才可能用精确的能量建立能量和动量之间的关系.

作为一个例子. 我们将计算自由粒子的传播子. 在这种情况下, 利用式 (5-12) 给出的结果, 其中遍及  $x_b$  和  $x_a$  的积分已经求出来了. 这样, 剩下遍及  $t_b$  和  $t_a$  的积分. 作代换  $t_b = t_a + \tau$ . 于是双重积分可以写成

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{(i/\hbar)(E_b - E_a)t_a} dt_a \int_0^{\infty} e^{(i/\hbar)(E_b - p_a^2/2m)\tau} d\tau. \quad (5-14)$$

这两个积分中的第一个是狄拉克  $\delta$  函数的积分表示, 具体地讲, 它是  $2\pi\hbar\delta(E_b - E_a)$ . 第二个积分的形式为

$$\int_0^\infty e^{i\omega\tau} d\tau. \quad (5-15)$$

这后一积分在量子力学问题中经常出现. 若  $\omega$  是实数, 则积分不收敛. 为了完成现在的计算, 我们把  $\omega$  换成复数  $\omega + i\epsilon$ . 当  $\omega$  和  $\epsilon$  都是实数时, 积分的值为  $i/(\omega + i\epsilon)$ .

现在一个可能的办法是, 取这个因子当  $\epsilon$  趋近于零时的极限, 并把结果直接解释成  $i/\omega$ . 然而, 在将来的工作中, 这种解释会导致不正确(或说不完全)的结果. 我们正在计算的这个函数是传播子, 在将来的工作中, 常常要遍及  $\omega$  的值或与之相当的变量对它(乘以某其他函数)积分. 如果从表达式中去掉  $\epsilon$ , 那么这种积分在  $\omega = 0$  处会有极点, 我们将完全不知如何办.

[104] 在这种极点处只取积分的主要部分是不正确的, 它将导致错误的结果. 具体地讲, 这种结果意味着: 对这个传播子作逆变换, 不会返回去给出从之开始的原来坐标表象的传播子. 此变换结果与正确的传播子的差别在于, 对小于零的时间值, 此变换结果不会等于零. 由这个积分获得正确结果的一个方法是, 把这个极点放到实轴上方一无限小距离处. 只要把  $\epsilon$  留在表达式中就可以做到这点.

若我们使这个表示有理化

$$\frac{i}{\omega + i\epsilon} = \frac{i(\omega - i\epsilon)}{\omega^2 + \epsilon^2} = \frac{i\omega}{\omega^2 + \epsilon^2} + \frac{\epsilon}{\omega^2 + \epsilon^2}, \quad (5-16)$$

则我们可以把右边的第一项解释为  $i/\omega$ , 并且在以后涉及这一项的积分中使用其主要部分. 第二项在  $\epsilon$  趋近零时变成  $\pi\delta(\omega)$ , 并且在以后的积分中必须把它解释成这样. 这就是说, 如果希望用更精确的数学定义, 那么应该用 P. P.  $(i/\omega) + \pi\delta(\omega)$  代替  $i/(\omega + i\epsilon)$ . 这意味着

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{i\omega\tau} d\tau &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \frac{i}{\omega + i\epsilon} \\ &= \text{P.P.} \left( \frac{i}{\omega} \right) + \pi\delta(\omega). \end{aligned} \quad (5-17)$$

(结果见附录 (A.7) 式) 在所有包含  $\epsilon$  的表示式中都隐含着应取  $\epsilon \rightarrow 0$  时的极限.

回过头来计算传播子, 我们用  $(E_b - p_a^2/2m)/\hbar$  代替  $\omega$  发现,

$$k_0(\mathbf{p}_b, E_b; \mathbf{p}_a, E_a) = \frac{(2\pi\hbar)^4 \delta^3(\mathbf{p}_b - \mathbf{p}_a) \delta(E_b - E_a) i\hbar}{E_a - p_a^2/2m + i\epsilon}. \quad (5-18)$$

在这个表达式中存在  $\delta$  函数意味着, 在自由粒子的运动过程中, 无论是能量  $E$  还是动量  $p$  都不变. 这个式子的最后一个因子表明了能量和动量对粒子运动的影响. 即一个具有能量  $E$  动量  $p$  的自由粒子由一点运动到另一点的概率幅正比于  $i/(E - p^2/2m + i\epsilon)$ .

本节前面曾叙述过, 能量  $E$  一般不恒等于  $p^2/2m$ , 而是另一个独立变量. 为了理解这一区别, 我们来看看自由粒子传播子, 它是时空中的类波函数, 其中  $E$  是时间的系数, 因此具有频率的性质. 式 (5-12) 中给出的这个传播子有图 5-4 中所示的形状 (图是相对于时间差  $T = t_b - t_a$  画的).

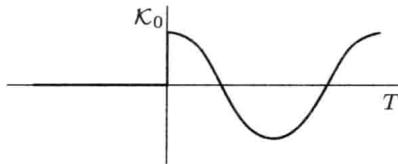


图 5-4 相对于时间画出的自由粒子传播子  $K_0$  的实部. 对于负的时间值, 函数是零, 因此, 在  $T = 0$  时开始有一个急剧的跳跃, 接着连续下去犹如一个有恒定振幅和恒定频率的余弦波

对于  $T$  小于零的值,  $K_0$  等于零, 在  $T = 0$  时它突然开始振荡. 由时间表象到能量表象的变换等价于傅里叶变换. 因为开始时波形急剧跳跃 (在  $T = 0$  处), 所以傅里叶变换包含全部频率分量, 因而也包括全部能量分量. 若函数延展一个长的时间间隔 (许多周期), 那么在傅里叶变换中一个频率逐渐占压倒优势. 对于自由粒子, 这个占压倒优势的频率相应于能量  $E_0 = p^2/2m$ . [105]

为此, 自由粒子传播子包含因子

$$\frac{i}{E_a - p_a^2/2m + i\epsilon} = \text{P.P.} \left( \frac{i}{E_a - p_a^2/2m} \right) + \pi\delta(E_a - p_a^2/2m), \quad (5-19)$$

其中右边第一项说明起源于  $t = 0$  时突然开始的短暂效应. 第二项给出定态性质, 并表明: 若我们等的时间足够长, 则所发现的唯一能量是通常的  $p^2/2m$ ; 但是, 靠近  $T = 0$  时, 能量不是由这个经典公式给定.

### 问题 5-2 如果我们定义

$$k(x_b, E_b; x_a, E_a) = \iint e^{+(i/\hbar)E_b t_b} K(x_b, t_b; x_a, t_a) e^{-(i/\hbar)E_a t_a} dt_b dt_a \quad (5-20)$$

用来仅变换时间变量而不变换空间变量, 则请证明: 对于哈密顿量  $H$  与时间无关的系统, 有

$$k(x_b, E_b; x_a, E_a) = 2\pi\hbar^2 i\delta(E_b - E_a) \sum_n \frac{\phi_n(x_b)\phi_n^*(x_a)}{E_a - E_n + i\epsilon}, \quad (5-21)$$

其中  $\phi_n(x)$  和  $E_n$  是  $H$  的本征函数和本征值.

## [106] 5-2 量子力学变量的测量

**特征函数** 在前一节我们已经证明, 为测量动量设计的实验如何导致了动量分布概率的定义. 即由正确设计的实验结果, 我们可以回答下述问题: 粒子动量为  $p$  的概率是多少? 从动量概率函数的存在问题开始, 我们还进一步发现了用动量变量写出的波函数或概率幅. 事实上, 我们发现, 正像我们以前所使用的时空表象一样, 动量能量表象也可以全面描述各种系统, 全面地分析各类问题.

这些结果还可适用于动量以外的物理变量. 任何一个物理量只要可以用实验测量, 就可以有一个概率函数与之相联系, 如果实验可以测量与系统相关的某特征量  $A$ (例如动量的  $x$  分量), 那么, 在重复实验几次以后, 将可能构造出概率函数  $P(a)$ , 它给出在任何特定实验中发现  $A$  的数值等于  $a$  的概率.

把概率幅与这种概率函数联系起来一般是可能的. 应该用测量的变量和为了完全描述系统所必要的其他变量一起确定此概率幅. 让我们看看, 推广动量测量的例子会引起一些什么问题. 首先, 我们只取一维, 不过推广到  $n$  维情况的过程是明显的. 我们问: 系统是否有性质  $G$ ? 例如,  $G$  可以代表这一叙述: “量  $A$  的值等于  $a$ .” 为回答这个问题, 我们必须有某种实验方法. 因此, 我们想象某种仪器可以如此设计: 如果它有性质  $G$ , 则粒子会通过这仪器并达到某个屏(或仪表)的某个确定点(或刻度).

这个概率可以写为

$$P(G) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} K_{\text{exp}}(y, x) f(x) dx \right|^2, \quad (5-22)$$

如果  $f(x)$  是所测量系统的波函数,  $K_{\text{exp}}(y, x)$  是通过特定实验仪器的传播子,  $y$  就是具有性质  $G$  的粒子到达的位置. 这个概率有另一种数学形式

$$P(G) = \left| \int g^*(x) f(x) dx \right|^2, \quad (5-23)$$

其中我们已经令

$$g^*(x) = K_{\text{exp}}(y, x). \quad (5-24)$$

(以后会看到, 把它定义成一个函数的复数共轭只是为了方便.) 于是我们可以说,

$$\psi(G) = \int g^*(x) f(x) dx \quad (5-25)$$

是系统具有性质  $G$  的概率幅。这个概念在图 5-5 中得到进一步描述。

出于下述原因，我们用函数  $g^*(x)$  来确定这个性质。假设另外某个实验有不同的装置，因此有不同的传播子  $K_{\text{exp}'}(y', x)$ ，可用它来测量同样的性质。在第二个实验中，粒子到达  $y'$  点。于是发现，系统有性质  $G$  的概率是

$$\left| \int K_{\text{exp}'}(y', x) f(x) dx \right|^2 \quad \text{或} \quad \left| \int g'^*(x) f(x) dx \right|^2. \quad (5-26)$$

因为我们所测量的性质是同一个，所以在每种情况下必须得到  $P(G)$  的同一个结果，与在前一个实验中所得的一样。就是说，在  $f(x)$  为任意函数时，都必须有

$$\left| \int g'^*(x) f(x) dx \right|^2 = \left| \int g^*(x) f(x) dx \right|^2. \quad (5-27)$$

[108] 这意味着， $g^*(x) = g'^*(x)$  顶多差一个不重要的常数相因子  $\exp(i\delta)$ 。即决定同一性质的所有方法相应于（差一个相位因子）同一个  $g^*(x)$ 。正因为如此，我们称  $g^*(x)$  为性质  $G$  的特征函数。

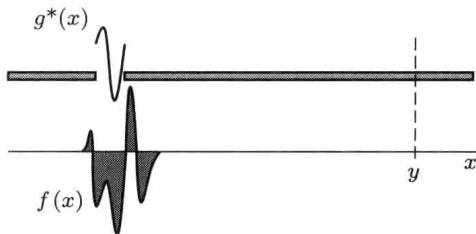


图 5-5 用来测量性质  $G$  的仪器放在入射粒子 [波函数为  $f(x)$ ] 的初始点和终点  $x = y$  之间。仪器修改了运动的传播子（比较图 5-1 和图 5-2），使它等于  $g^*(x)$ 。乘积  $f(x)g^*(x)$  对  $x$  积分就是通过仪器以后到达  $y$  点的概率幅

我们可以问另一个问题。对于确实有性质  $G$  的状态， $f(x)$  必须有什么样的表达式？（例如，具有确定动量的波函数是什么？）也就是说，我们希望找一个状态函数，比如说  $F(x)$ ，以使粒子通过仪器后一定会到达点  $y$  而不到达另外的点  $\check{y}$ 。到达点  $y$  的概率幅应该正比于  $\delta(y - \check{y})$ （亦即除非  $\check{y} = y$ ，否则它等于零）。因此，

$$\int_{-\infty}^{\infty} K_{\text{exp}}(\check{y}, x) F(x) dx = \delta(y - \check{y}). \quad (5-28)$$

我们可以通过节 4-1 讨论过的传播子的复共轭与其逆的关系来解这个问题。由式 (4-37)，有

$$\int_{-\infty}^{\infty} K_{\text{exp}}(\check{y}, x) K_{\text{exp}}^*(y, x) dx = \delta(y - \check{y}), \quad (5-29)$$

所以

$$F(x) = K_{\text{exp}}^*(y, x) = g(x). \quad (5-30)$$

即  $g(x)$  是粒子肯定具有性质  $G$  的波函数. 我们既可以说 (1) 粒子具有性质  $G$ , 也可以说 (2) 粒子处于  $g(x)$  态. 于是我们找到: 若粒子处于  $f(x)$  态, 则在  $g(x)$  态找到它的概率幅是

$$\psi(G) = \int_{-\infty}^{\infty} g^*(x)f(x)dx. \quad (5-31)$$

对于多维情况,  $x$  就换为多个变量.

我们可以不太严格地说, 粒子处于  $g(x)$  态的概率是

$$\left| \int g^*(x)f(x)dx \right|^2.$$

只要我们明白其含义, 这种说法是可行的. 系统处于  $f(x)$  态, 它就不会又处在  $g(x)$  态; 但如果作一个测量, 目的是想知道它是否也在  $g(x)$  态, 则回答是, 处于  $g(x)$  态的概率为

$$P(G) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} g^*(x)f(x)dx \right|^2. \quad (5-32)$$

[109]

若波函数实际就是  $g(x)$ , 测定系统是否处于  $g(x)$  态的测量总能得到肯定的答案. 若是任何别的波函数, 多次重复这种实验, 也可能得到肯定结果, 其次数与总次数的比为  $P(0$  与  $1$  之间的数). 这就是量子力学理论的概率解释的核心内容.

为了这些, 我们推导波函数与其复共轭之间的一个有意义的逆关系. 按照式 (5-25) 的解释,  $g^*(x)$  是只要系统处在位置  $x$ , 它就具有性质  $G$  的概率幅. [这样的叙述可以在式 (5-31) 中把  $f(x)$  换成  $\delta$  函数而数学化.] 另一方面,  $g(x)$  是只要系统具有性质  $G$ , 它就处于位置  $x$  的概率幅. (这恰是定义波函数的一种方式.) 一个函数给出若有  $A$  则有  $B$  的概率幅. 另一个函数给出若有  $B$  则有  $A$  的概率幅. 直接取复数共轭就完成了这个求逆的过程.

等式 (5-31) 可以解释如下: 系统具有性质  $G$  的概率幅是: (1) 系统在  $x$  点的概率幅  $f(x)$  乘以 (2) 若系统处在  $x$  点, 则它就具有性质  $G$  的概率幅  $g^*(x)$ , 再将这个乘积遍及可能的  $x$  求和.

**问题 5-3** 假设波函数为  $f(x)$  的粒子处于任何处的概率

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)f(x)dx$$

已经归一化为 1. 在这个约束下证明,  $f(x) = g(x)$  的状态具有性质  $G$  的概率最高.

**问题 5-4** 假设在  $t_a$  时刻系统的波函数是  $\psi(x)$ . 再假设在  $t_b \geq t \geq t_a$  间隔内, 系统运动的性质由传播子  $K(x_b, t_b; x_a, t_a)$  描述. 证明: 在  $t_b$  时刻发现, 系统处于  $\chi(x)$  态的概率由下面积分的平方给出:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \chi^*(x_b) K(x_b, t_b; x_a, t_a) \psi(x_a) dx_a dx_b.$$

我们称这个积分为由  $\psi(x)$  态到  $\chi(x)$  态的跃迁概率幅.

**多变量的测量** 上节我们假设了一个理想实验, 它的意思是测量到  $A$  的同时不可能再测量到其他量. 即我们不允许许多(大于 1)个  $g(x)$  会给出同一个结果, 并且断言, 测量  $A$  就已经是从系统中可能获得的最大信息量.

现实中确定一个系统的状态需要几个变量的情况是经常有的. 例如, 如果在三维系统中只测量动量的  $x$  分量, 那么不可能确定  $g(x)$ . 波函数  $\exp(ip_x x/\hbar)$  和  $\exp(ip_x x/\hbar - ip_y y/\hbar)$  两者都给出动量的  $x$  分量的相同值  $p_x$ . 所以若在一个三维系统中只测量  $p_x$ , 粒子就能以动量在  $y$  方向上的任何分量运动, 而不改变测量结果. 粒子也不一定触到测量仪器的某个唯一的点. 所有到达某条线(或者说点的某一集合)的粒子都会给出同样的值  $p_x$ .

因此, 一般地我们看到, 波函数  $g(x)$  以下述方式决定性质  $G$ : 一个由波函数  $g(x)$  描述的状态肯定具有性质  $G$ . 然而, 反之并不一定是对的, 即具有性质  $G$  的所有状态不一定都由波函数  $g(x)$  描述. 仅当  $G$  对所有可以同时测量的量都明确指定时, 它才能完全决定波函数. 甚至就是这种情况, 也还剩下下一个未定的(但不重要的)常数相位因子  $\exp(i\delta)$ .

当理想实验要求测量更多变量时, 将特征函数做必要的推广是不难的. 假设有一组称为  $A, B, C \dots$  的量可以在一个实验中同时测量, 例如, 动量的  $x$  分量、 $y$  分量等. 假设用赋予这些量以一系列数值  $a, b, c, \dots$ , 就可以完全地描述一个系统的状态; 即说明某系统是否有某一确定性质就能完全描述它的状态. 在这个情况, 要研究的性质是  $A$  的值是  $a$ ,  $B$  的值是  $b$  等等. 进而假定, 无论用什么手段都不能获得更多的新信息(不包括从  $A, B$  等的数值可以推出的信息).

想象我们有一个实验装置, 它能够测量所有这些量, 即能告诉我们状态是否具有  $A$  的值是  $a$  等等性质. 我们称这种性质的特征函数为

$$g^*(x) = \chi_{a,b,c,\dots}^*(x). \quad (5-33)$$

当然, 这个函数是数值  $a, b, c, \dots$  的函数, 我们建立实验正是要去测定这些数值以及坐标变量  $x$ .

[110]

假设系统处于  $f(x)$  态。于是，实验将表明， $A$  的值是  $a$ ,  $B$  的值是  $b$  等等的概率（即状态具有所研究的性质的概率）为

$$[111] \quad P(a, b, c, \dots) = \left| \int \chi_{a,b,c,\dots}^*(x) f(x) dx \right|^2. \quad (5-34)$$

**变换函数** 设系统确实处于  $\chi_{a',b',c',\dots}(x)$  态，即  $A$  的值是  $a'$  等等，则根据我们的实验发现，系统处于由  $a, b, c, \dots$  描述的状态的概率是零，除非  $a = a', b = b', c = c', \dots$  这意味着，加上适当的归一化因子，我们有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_{a,b,c,\dots}^*(x) \chi_{a',b',c',\dots}(x) dx = \delta(a - a') \delta(b - b') \delta(c - c') \dots. \quad (5-35)$$

函数  $\chi_{a,b,c,\dots}(x)$  是只要系统处于由  $a, b, c, \dots$  描述的状态就会发现它在  $x$  点的概率幅。称为特征函数的  $\chi_{a,b,c,\dots}^*(x)$  是只要系统在  $x$  点就会发现它处于由  $a, b, c, \dots$  描述的状态的概率幅。

如果已知系统处于  $f(x)$  态，那么，

$$F_{a,b,c,\dots} = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{a,b,c,\dots}^*(x) f(x) dx \quad (5-36)$$

是发现系统处于  $A$  有  $a$  值、 $B$  有  $b$  值等性质的状态中的概率幅。

量  $F_{a,b,c,\dots}$  和函数  $f(x, y, z, \dots)$  一样也是状态的良好表示式。事实上，只要知道了函数  $F_{a,b,c,\dots}$ ，我们就可以用逆变换把函数  $f(x, y, z, \dots)$  再构造出来。

函数  $F_{a,b,c,\dots}$  称为状态的  $A, B, C, \dots$  表象。（前一节中的动量表象是这种表象的一个特例。）函数  $f(x, y, z, \dots)$  是状态的通常的坐标表象或说  $x, y, z, \dots$  表象。两个表象之间的变换是用函数  $\chi$  和  $\chi^*$  完成的。具体地说，函数  $\chi_{a,b,c,\dots}^*(x, y, z, \dots)$  是由  $x, y, z, \dots$  表象过渡到  $A, B, C, \dots$  表象所必需的变换函数，而函数  $\chi_{a,b,c,\dots}(x, y, z, \dots)$  是反向变换所必需的变换函数。即式 (5-36) 的逆变换是

$$f(x, y, z, \dots) = \sum_a \sum_b \sum_c \dots F_{a,b,c,\dots} \chi_{a,b,c,\dots}(x, y, z, \dots). \quad (5-37)$$

[112] 这就是说，发现系统在  $x$  点的概率幅是：具有性质  $A = a, B = b, \dots$  的概率幅  $F_{a,b,c,\dots}$  乘以只要  $A = a, B = b, \dots$  它就在  $x$  点的概率幅  $\chi_{a,b,c,\dots}(x)$ ，最后再对所有可能的  $a, b, c, \dots$  求和。

**问题 5-5** 假设函数  $f(x, y, z, \dots)$  可以表示为

$$f(x, y, z, \dots) = \sum_a \sum_b \sum_c \dots F'_{a,b,c,\dots} \chi_{a,b,c,\dots}(x, y, z, \dots). \quad (5-38)$$

把此式代入式 (5-36), 再用由式 (5-35) 定义的  $\chi$  的正交性证明,  $F'_{a,b,c,\dots} = F_{a,b,c,\dots}$ .

**问题 5-6** 假设  $A, B, C$  是动量的三个笛卡尔分量  $p_x, p_y, p_z$ . 函数  $\chi_{a,b,c}(x, y, z)$  该有什么形式? 使用节 5-2 的结果证明节 5-1 得到的关系式.

**问题 5-7** 假设  $A, B, C, \dots$  表象既不是坐标表象, 也不是动量表象, 而是表示系统状态的第三种方式. 设已知函数  $\chi_{a,b,c,\dots}(x, y, z, \dots)$ , 它允许我们在坐标表象和  $A, B, C, \dots$  表象之间来回变换. 再设我们已知在坐标表象和动量表象之间来回变换所必需的变换函数, 求在动量表象与  $A, B, C, \dots$  表象之间变换所必要的函数.

## 5-3 算符

**期望值** 我们还可以介绍这些变换函数的几个新的性质. 让我们设法回答下面的问题. 一个系统处于由波函数  $f(x)$  所描述的状态, 我们来测量  $A$  这个量. 如果测量重复多次, 那么所得  $A$  的平均值是什么? 我们将用记号  $\langle A \rangle$  来标记这个平均值 (有时叫**期望值**).

假设原则上可以同时测量几个物理量  $A, B, C, \dots$ , 其中  $A$  的测量结果可能是连续的或一组离散的  $a$  值中的任何一个,  $B$  的测量结果也类似等等. 得到  $a, b, c, \dots$  值的某特定集合的概率是  $|F_{a,b,c,\dots}|^2$ . 于是, 测量  $A$  得到某特定  $a$  值而不管  $B, C, \dots$  的取值 (例如,  $B, C, \dots$  根本不测量) 的概率是

$$P(a) = \sum_b \sum_c \cdots |F_{a,b,c,\dots}|^2. \quad (5-39)$$

在此式中, 求和是对连续的或离散的  $b, c, \dots$  的所有可能值进行的.

测量  $A$  的平均值 (期望值) 可以由式 (5-39) 中的概率乘以  $a$  再对所有可能的  $a$  求和而得到, 即

$$\langle A \rangle = \sum_a \sum_b \sum_c \cdots a |F_{a,b,c,\dots}|^2. \quad (5-40)$$

量子力学问题中, 经常需要计算这种期望值. 如果有现成的公式可简化这种计算将是很有用的. 这个课题是一个算符的课题, 已在节 4-1 中简短地讨论过. 现在我们将叙述另外几个结果. 然而, 本书中没有什么地方会力图真正彻底地研究算符计算, 因为这方面已经有一些杰出的著作<sup>①</sup>.

<sup>①</sup> 例如, 参看 P. A. M. Dirac, "The Principles of Quantum Mechanics", Clarendon Press, Oxford, 1947. 中译本: 狄拉克. 量子力学原理. 陈咸亨译. 北京: 科学出版社出版, 1958.