量子力学之波动力学(下)

曹则贤[†]
(中国科学院物理研究所　北京　100190)

2024－06－03收到
† email：zxcao@iphy.ac.cn
DOI：10.7693/wl20240905

(接53卷 第8期)

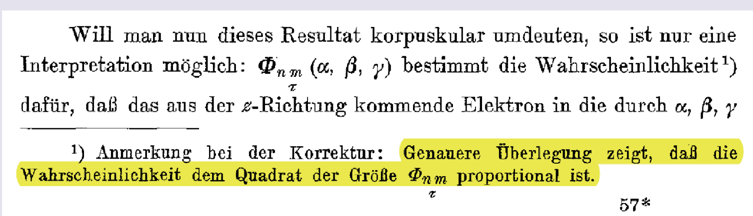
5　对薛定谔波动力学论文的即时响应

对薛定谔的波动力学持排斥态度的，海森堡是不多的例外，而玻恩、泡利(稍微表示过不爽)、约当、狄拉克、冯·诺伊曼、朗道、福克等人则是迅速跟上去并做出了非常重要的工作。笔者觉得最离谱的要数索末菲。索末菲1919年出版了*Atombau und Spektrallinien*(原子构造与谱线)这本经典著作，里面有他1915—1916年构造原子模型、引入新量子数的工作，这可以说是启发量子力学——确切地说是矩阵力学——诞生的关键思想源泉。然而，1929年索末菲出版了*Atombau und Spektrallinien*, *Wellenmechanischer Ergänzungsband*(原子构造与谱线：波动力学增补版)。这几乎就是另一本书了。

5.1　玻恩对薛定谔波动力学的响应

玻恩对薛定谔波函数的概率诠释{注意，得经过undeuten的过程，即从波的观念换个角度转到粒子的观念来理解}，出现在当年他拿薛定谔波函数处理碰撞问题的短文中[Max Born, Zur Quantenmechanik der Stoßvorgänge (碰撞过程的量子力学), *Zeitschrift für Physik* **37**, 863—867 (1926)]。这篇论文原是给*Naturwissenschaften*杂志写的，但因没有版面而被拒(wegen Raummangel nicht aufgenommen warden)。玻恩对薛定谔波函数的诠释出现在脚注里，只短短的一句话(图7)。而这个诠释，竟然被用别的地名给冠名了，还成了玻恩许久之后被认可的理由。玻恩一生成就无数，有底气自称my own school (见Max Born & Kun Huang, *Dynamical Theory of Crystal Lattices*一书序)，竟然以这种方式被人认可，想来令人唏嘘。这篇文章开篇的前几个字够他后悔一辈子：Die von Heisenberg begründete Quantenmechanik (由海森堡所建立的量子力学)。他自己这么说，别人，比如薛定谔，也就这么说了，见1926年文章中“die Heisenbergsche Mechanik (海森堡的力学)”。他自己谦虚就算了，还连累了约当。

玻恩的这篇论文大意如下。薛定谔形式的量子力学能描述量子跃迁。如玻尔所注意到的那样，量子表述在处理原子的光发射、光吸收所遭遇的原则性困难，在原子相互作用比如碰撞过程中也一样存在。我曾认真考虑过不在当前理论框架内是否有可能描述碰撞过程。在不同的理论形式中，薛定谔的看来最合适，有鉴于此我以为其是对量子规律最深刻的把握(sie als die tiefste Fassung der Quantengesetze ansehen)。{玻恩对薛定谔理论的正面态度于此可见一斑。}


Will man nun dieses Resultat korpuskular umdeuten, so ist nur eine Interpretation möglich: $\Phi_{n m}^{\;\tau}(\alpha, \beta, \gamma)$ bestimmt die Wahrscheinlichkeit¹) dafür, daß das aus der z-Richtung kommende Elektron in die durch α, β, γ

¹) Anmerkung bei der Korrektur: Genauere Überlegung zeigt, daß die Wahrscheinlichkeit dem Quadrat der Größe $\Phi_{n m}^{\;\tau}$ proportional ist.

57*

图7　玻恩1926年碰撞文章p.865页上的截图。对薛定谔波函数的诠释出现在脚注中

考察量子理论里的两个系统相互作用，两系统所有状态以纠缠的方式耦合在一起(alle Zustände beider Systeme koppeln sich in verwickelter Weise){别拿量子纠缠一惊一乍的了哈。量子力学自诞生伊始就面对纠缠问题，经典的学问也

早就处理纠缠。那只是一个二体体系就会遭遇的平凡问题}。不过，设想一个来自无穷远处的电子，又消失在了无穷远处，则在碰撞后当电子足够远而耦合足够小时，显然体系可看作是又处于特定状态的原子外加一个确定地在进行直线运动的电子。可以用薛定谔理论得到关于这个渐近行为的数学描述。我确信，光的发射、吸收问题也可以类似地当作波动方程的边界值任务 (Randwertaufgabe)来处理。

根据薛定谔理论，处于状态n的原子就是一个振动过程，其有频率为W_n^0/h的处于全空间的状态量。直线运动的电子是这种振动过程的特例，对应平面波。原子—电子薛定谔问题的解要渐近地过渡到传播方向上的平面波。设原子未扰动的本征函数为$\psi_1^0(q_k)$，$\psi_2^0(q_k)\cdots$，直线运动的电子的本征函数为$\sin\frac{2\pi}{\lambda}(\alpha x+\beta y+\gamma z+\delta)$，其中波长根据德布罗意理论同电子的**动能**相联系，$\tau=\frac{h^2}{2\mu\lambda^2}$。对于电子自$z$方向来的状态，波函数为$\psi_{n\tau}^0(q_k,z)=\psi_n^0(q_k)\sin\frac{2\pi}{\lambda}z$。经过相互作用后在$z\to\infty$下的渐近行为应是上述函数。散射的波在无穷远处的渐近形式可表示为

$$\psi_{n\tau}^{(1)}(x,y,z;q_k)=\sum_m\iint_{\alpha x+\beta y+\gamma z>0}\mathrm{d}\omega\,\Phi_{nm}(\alpha,\beta,\gamma)\times\sin k_{nm}(\alpha x+\beta y+\gamma z+\delta)\,\psi_m^0(q_k)\ ,$$

其中波长λ_{nm}联系着的能量为$W_{nm}=h\nu_{nm}^0+\tau$，ν_{nm}^0是未受扰动的原子的频率(差)。

现在转而用粒子的观点来考察结果的意义，则只有一种诠释是可能的：$\Phi_{nm}(\alpha,\beta,\gamma)$确定了自$z$方向而来的电子被抛到$\alpha,\beta,\gamma$所确立的方向上的概率(Will man nun dieses Resultat korpuskular umdeuten, so ist nur eine Interpretation möglich: $\Phi_{nm}(\alpha,\beta,\gamma)$ bestimmt die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das aus der z-Richtung kommende Elektron in die durch α,β,γ bestimmte Richtung gewoffen wird …)。在脚注中，玻恩把表述修改为概率正比于$\Phi_{nm}(\alpha,\beta,\gamma)$的平方。这就是一般量子力学中所说的玻恩关于薛定谔波函数的诠释。{然而，笔者以为这里重要的是dieses Resultat korpuskular umdeuten (对结果转而用粒子的观点考察其意义)这一句。这牵扯到所谓的波粒二象性。对于薛定谔的波(函数)，欲对其进行诠释，第一步我们(!)应该做的是转到粒子的观点看问题。波粒二象性不是微观粒子的精神分裂，它首先是物理学家的精神分裂。在索末非接受了薛定谔的波动力学后对原子物理的重新表述中，也有wellenmechanische **Umdeutung** klassischer Größen (经典物理量之波力学的转义)的说法。我们说电子、反电子是粒子，它们相遇以后丝滑地转换为了光，而我们习惯地把光看作波。可见这粒子—波未必有什么明显的区别。我们又为电子赋予了波的概念，为光赋予了光子的形象。这里的波—粒子其意义是前后一致的吗？我们知道我们用粒子、波在说什么吗？}

正是玻恩的这篇文章，使得爱因斯坦在1926年12月4日一封给玻恩的回信中写下了如下这段话："Quantum mechanics is very impressive. But an inner voice tells me that it is not yet the real thing. The theory produces a good deal but hardly brings us closer to the secret of the Old One. I am at all events convinced that He does not play dice"{见于Abraham Pais所著*Subtle is the Lord*一书第443页。德文原文笔者刚找到，拟另处讨论。这就是所谓的"上帝不掷骰子"的滥觞}。

关于碰撞问题，玻恩在这一年还有其他著述，包括：

(1) Max Born, Quantenmechanik der Stoßvorgänge (碰撞过程的量子力学), *Zeitschrift für Physik* **38**, 803—827 (1926). 此文似乎是对前文的精确且详细的阐述，这是玻恩的老习惯了。对理解量子力学非常重要的经典名句"Die Bewegung der Partikeln folgt Wahrscheinlichkeitsgesetzen, die Wahrscheinlichkeit selbst aber breitet sich im Einklang mit dem Kausalgesetz (粒子的运动遵从概率规律，但概率自己以同因果律相协调的方式传播)"的说法即来自此文。此句的流行英文译法为"The motion of a particle follows probability laws

but the probability propagates according to the laws of causality”。

(2) Max Born, Das Adiabatenprinzip in der Quantenmechanik (量子力学的不可逾越原理), *Zeitschrift für Physik* **40**, 167—912 (1926). Adiabatic，不可通过的、不可逾越的，不是流行汉译的绝热！此文是玻恩关于量子力学之统计诠释的进一步发展，指出量子力学不是要回答“粒子如何运动(wie bewegt sich ein Teilehen)”的问题，而是“粒子以特定方式运动的概率多大 (wie wahrscheinlich ist es, daß ein Teilchen sich in gegebener Weise bewegt)”的问题。德布罗意—薛定谔波…以其模平方决定粒子处于与波相对应的运动状态的概率 (diese de Broglie-Schrödingerschen Wellen …bestimmen durch das Quadrat ihrer Amplitude die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Teilehen in dem der Welle entsprechenden Bewegungszustand vorhanden ist)。

5.2 狄拉克对薛定谔波动力学的响应

狄拉克在1926年底递交了一篇论文，谈量子动力学的诠释问题 [P. A. M. Dirac, The Physical Interpretation of the Quantum Dynamics, *Proc. R. Soc. Lond. A* **113**, 621—641 (1927). 收稿日期为1926年12月2日]。该文中狄拉克的第一句话就道出了一个事实，(薛定谔的) 新量子力学由一个同经典力学方程极其相类似的方程体系构成 (The new quantum mechanics consists of a scheme of equations which are very closely analogous to the equations of classical mechanics)，根本的区别(不在方程)在于动力学变量如今要满足量子条件。因此，不能把薛定谔方程里的变量等同于普通数 (ordinary number, *c*-number)，而是要当作一类特别的数(*q*-number)处理{Born还有*q*-nummer, *p*-nummer的说法}。用这些*q*-number计算也得到了想要的矩阵后{矩阵是不可少的。不可以把矩阵力学同薛定谔波动力学的等价理解为二者可以取其一!}，问题是如何从理论中得到物理结果。薛定谔的波表示为此引入了一个假设，波函数模平方被诠释为概率。

基于经典理论能问的一些问题基于量子理论也可以给出确定不含糊的答案。狄拉克的这篇文章就是探讨这样问题的一般性理论以及获得答案的方法的。概述如下。

1 导言与总结

经典力学的一般性问题是：对于给定的坐标与动量的初始值，一个给定的动力学系统之任意积分常数g的值是什么？积分常数g可以表示为坐标与动量，q_{r0}，p_{r0}，的函数，用数值取代变量就得到积分常数值了。但是对于量子论的问题(any question on the quantum theory)，就不能把q_{r0}和p_{r0}值代入了事啦，因为“but the q_{r0} and p_{r0} do not now satisfy the commutative law of multiplication”{因为q_{r0}与p_{r0}不满足对易的乘法律，无法回答任何涉及q_{r0}与p_{r0}两者之数值的量子论问题。狄拉克的这个表述在海森堡所谓的Unschärferelation (uncertainty principle)的表述之前。这句表述同汉语书本里的“测不准原理”的说法放一起，境界之高下立判。关于不确定性原理，可参阅拙著“*Uncertainty of the Uncertainty Principle*”，后续还会专门探讨。总共没学过几天经典力学的狄拉克掌握了经典力学的精髓并有能力拓展它，实在令人赞叹}。不过，我们希望能回答只有q_{r0}或者p_{r0}被赋值的问题；或者更一般地，当一组对易的积分常数ξ_r被赋予数值时能回答问题。如果η_r是积分常数ξ_r的正则共轭量，我们想知道关于η_r的函数g我们能知道什么！结论是，我们可以确切地决定g处于两特定数值之间所对应的η-空间的占比。或者更一般地，对于一组对易的积分常数$g_1, g_2, \cdots$，可以决定各g_r处于两特定数值之间所对应的η-空间的占比。{这是量子力学的概率论}。这类问题似乎是唯一的一类量子力学能给出确切答案的问题，恐怕也是唯一的一类物理学家要知道答案的问题 (Questions of this type appear to be the only ones to which the quantum theory can give a definite answer, and they are probably the only ones to which the physicist requires an answer)。{狄

拉克很顽皮。}

为此，首先要给出表示积分常数 ξ_r 的矩阵体系。需要一个更一般的矩阵表示体系的理论，其中矩阵元是关于一组对易的积分常数的，而且还要包含从一个体系到另一个体系的变换规律(We therefore require a theory of the more general schemes of matrix representation, in which the rows and columns refer to any set of constants of integration that commute, and of the laws of transformation from one such scheme to another)。这有点类似Lanczos的场论，该理论中的场表示实际上等同于矩阵元有连续变化范围的矩阵[Cornelius Lanczos, Über eine feldmäßige Darstellung der neuen Quantenmechanik (新量子力学之场形式的表述), *Zeitschrift für Physik* **35**, 812—830 (1926)]。

2 记号

{特别地，在第二节中狄拉克引入了 δ-函数。这个函数，如果就定义而言，爱因斯坦在1907年就为统计物理引入了，庞加莱1912年也用过了。这里，狄拉克给出了这个函数的新定义 $x\delta(x)=0$，以及它应该满足的很多性质，比如其应满足的矩阵乘法 $\int_{-\infty}^{\infty}\delta(a-x)\delta(x-b)\mathrm{d}x=\delta(a-b)$ 等。又比如，当使用那些变量范围连续的矩阵时，用 $\delta(x)$ 表示单位矩阵的元素，有 $\mathbf{1}(\alpha\beta)=\delta(\alpha-\beta)$。将 δ-函数命名为狄拉克函数不过分。具体内容此处略。感兴趣的读者请阅读这一节的原文，内容比教科书中能见到的更多、更深刻}。

3 变换方程

表示动力学变量的矩阵体系(scheme of matrices)应满足如下条件：

(1) 量子化条件如 $\boldsymbol{q}_r\boldsymbol{p}_r-\boldsymbol{p}_r\boldsymbol{q}_r=\mathrm{i}h$ 等；{这里的表达是简记，应是 $\boldsymbol{q}_r\boldsymbol{p}_r-\boldsymbol{p}_r\boldsymbol{q}_r=\mathrm{i}h\mathbf{1}$。此外，还有联系着傅里叶展开的振荡项不显式给出。相信这时候你也注意到了，一般量子力学教科书给出这个不对易关系时，根本不知道它是什么意思}；

(2) 运动方程 $g\boldsymbol{H}-\boldsymbol{H}g=\mathrm{i}h\,\dot{\boldsymbol{g}}$。如果 g 是含时的，则是 $g\boldsymbol{H}-\boldsymbol{H}g+\mathrm{i}h\,\partial\boldsymbol{g}/\partial t=\mathrm{i}h\,\dot{\boldsymbol{g}}$。{这个方程后来被称为海森堡方程。狄拉克1925—1926年得到的几个结果都被用海森堡命名了}；

(3) 表示哈密顿量 $\boldsymbol{H}$ 的矩阵必须是对角的；

(4) 表示实变量的矩阵必须是厄米的。

满足这些条件的矩阵系统一般来说不是唯一的，由正则变换而来的 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{bgb}^{-1}$ 仍要满足 $\boldsymbol{g}$ 所满足的代数关系。如果矩阵不是时间的显函数，则还有 $\dot{\boldsymbol{G}}=\boldsymbol{b}\dot{\boldsymbol{g}}\boldsymbol{b}^{-1}$，皆满足运动方程这一点得到了保证。若 $\boldsymbol{b}$ 与 $\boldsymbol{H}$ 对易，则变化得到的哈密顿量仍是对角的；如果 $\boldsymbol{b}^*=\boldsymbol{b}^{-1}$，则变换保厄米性。当然了，$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{bgb}^{-1}$ 的行、列的排列变动一下不妨碍满足前述四个条件。{笔者是在撰写《得一见机》之唯一性一章时学到的这些}。$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{bgb}^{-1}$ 这样的写法暗含着 $\boldsymbol{G}$，$\boldsymbol{g}$ 的行列有一一对应，其实这是没必要的事儿。可以为 $\boldsymbol{G}$，$\boldsymbol{g}$ 选用两套不那么关联的(quite unconnected)标签，比如分别用记号 ξ_r，α_r。{符号混乱是狄拉克初期的量子力学论文特色之一。不奇怪，因为他是在创造一门新学问}。

这样，问题就变成了如何给新矩阵贴标签，使得其变量 $\boldsymbol{\xi}_r$ 之矩阵元为 $\boldsymbol{\xi}_r(\xi'\xi'')=\xi'\boldsymbol{\delta}(\xi'-\xi'')$。这样的 $\boldsymbol{\xi}_r$ 形成一套正则坐标，其有一套正则共轭动量 $\boldsymbol{\eta}_r$。因为 $\boldsymbol{\xi}_r$ 本就是运动常数，因此必是原初正则变量 $\boldsymbol{q}_r$, $\boldsymbol{p}_r$ 的不含时函数。

4 一些基本矩阵

$\boldsymbol{\xi}_r(\xi'\xi'')=\xi'\delta(\xi'-\xi'')$，有共轭动量为 $\boldsymbol{\eta}_r(\xi'\xi'')=-\mathrm{i}h\,\delta'(\xi'-\xi'')$，满足：

$$(\boldsymbol{\xi\eta}-\boldsymbol{\eta\xi})(\xi'\xi'')=\mathrm{i}h\delta(\xi'-\xi'')\ .$$

注意，$\boldsymbol{\eta}_r$ 并不能被唯一地确定，实际上 $\boldsymbol{\eta}_r^*=\boldsymbol{\eta}_r+\partial\boldsymbol{F}/\partial\boldsymbol{\xi}_r$ 都满足量子条件。这意味着：

$$\boldsymbol{\eta}_r^*(\xi'\xi'')==\boldsymbol{\eta}_r(\xi'\xi'')\frac{f(\xi')}{f(\xi'')}$$
$$==\boldsymbol{\eta}_r(\xi'\xi'')+\frac{\mathrm{i}h}{f(\xi)}\frac{\partial f(\xi)}{\partial\xi_r}(\xi'\xi'')\ .$$

取 $F=\mathrm{i}h\log f$，即得 $\boldsymbol{\eta}_r^*=\boldsymbol{\eta}_r+\dfrac{\partial\boldsymbol{F}}{\partial\boldsymbol{\xi}_r}$。{这个 $F=\mathrm{i}h\log f$，类似的函数在玻尔兹曼的熵公式、薛定谔构造波动力学过程中公式都可见到。}

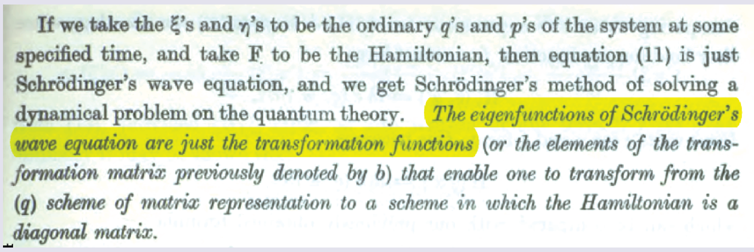

If we take the ξ's and η's to be the ordinary q's and p's of the system at some specified time, and take F to be the Hamiltonian, then equation (11) is just Schrödinger's wave equation, and we get Schrödinger's method of solving a dynamical problem on the quantum theory. *The eigenfunctions of Schrödinger's wave equation are just the transformation functions* (*or the elements of the transformation matrix previously denoted by b*) *that enable one to transform from the* (*q*) *scheme of matrix representation to a scheme in which the Hamiltonian is a diagonal matrix.*

图8 狄拉克1927年文章p.645上的截图

5 变换理论

考察从一套矩阵体系(α)到另一套矩阵体系(ξ)的变换，变换函数记为(ξ'/α') {狄拉克重复提醒，此处带撇的表示数值。读狄拉克的《量子力学原理》一书时请注意}，则对于方程$f(\xi_r,\eta_r)$，有一般变换关系：

$$f(\xi_r,\eta_r)(\xi'\alpha')=f(\xi_r',-\mathrm{i}h\partial/\partial\xi_r')(\xi'/\alpha')\ ,$$

其表示一个算符作用到变换函数(ξ'/α')上。逆变换为$f(\xi_r,\eta_r)(\alpha'\xi')=f(\xi_r',\mathrm{i}h\partial/\partial\xi_r')(\alpha'/\xi')$。此变换提供了一个得到让任何特定动力学变量之函数为一对角矩阵的表示矩阵体系的有效办法。对于一给定的函数$F(\xi_r,\eta_r)$，我们想让其在矩阵体系(α)中是对角的，$F(\alpha'\alpha'')=F(\alpha')\delta(\alpha'-\alpha'')$。这样，就要求：

$$F(\xi_r',-\mathrm{i}h\partial/\partial\xi_r')(\xi'/\alpha')=$$
$$\int(\xi'/\alpha'')\mathrm{d}\alpha''F(\alpha'\alpha'')=F(\alpha')(\xi'/\alpha')\ ,$$

这就是关于(ξ'/α')——将之看作ξ'的函数—的一个常微分方程。得到了(ξ'/α')，就容易得到矩阵：

$$F(\xi_r,\eta_r)(\alpha'\alpha'')=$$
$$\iint(\alpha'/\xi')\mathrm{d}\xi'F(\xi_r',-\mathrm{i}h\partial/\partial\xi_r')(\xi'/\alpha'')\ .$$

当$\boldsymbol{\xi}$，$\boldsymbol{\eta}$就是通常的$\boldsymbol{q},\boldsymbol{p}$，而$\boldsymbol{F}$是哈密顿量时，$F(\xi_r',-\mathrm{i}h\partial/\partial\xi_r')(\xi'/\alpha')=F(\alpha')(\xi'/\alpha')$就是薛定谔波方程！薛定谔波方程的本征函数就是变换函数，其让q-矩阵表示体系变换到哈密顿量是对角阵的矩阵表示体系 (The eigenfunctions of Schrödinger's wave equation are just the transformation functions that enable one to transform from the (q) scheme of matrix representation to a scheme in which the Hamiltonian is a diagonal matrix)，见图8。{愚以为，这句话应该写入任何一本量子力学教科书}。

在经典力学里，从一组正则变量ξ_r,η_r到α_r,β_r的接触变换(contact transformation) 可取简单形式如$\eta_r=\partial S/\partial\xi_r$，$\beta_r=\partial S/\partial\alpha_r$，其中$S$是$\xi_r$和$\alpha_r$的函数。约当指出，如果有$S=\sum f(\xi_r)g(\alpha_r)$，且严格要求$\xi$始终在$\alpha$的前面，上面的关系在量子力学中也成立 [Pascual Jordan, Über Kanonische Transformationen in der Quantenmechanik I. II (量子力学正则变换，I, II), *Zeitschrift für Physik* **37**，383—386；**38**, 513—517(1926)]。可令变换函数$(\xi'/\alpha')=\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/h}$。

6 矩阵的物理诠释

为了从矩阵理论得到物理结果，只需假设表示动力学系统的积分常数g的矩阵，其是关于一组ξ的，之对角元表示函数$g(\xi_r,\eta_r)$针对某特定的一组ξ值的、在整个η-空间中的平均值即可。δ-函数的矩阵为$\delta(g-g')(\xi'\xi'')=(\xi'/g')(g'/\xi'')$。{对于$(\xi'/\alpha')=\mathrm{e}^{\mathrm{i}S/h}$这样的变换函数，这其实是在述说傅里叶变换的性质。}

7 与其他方法的比较

从矩阵理论获得物理结果的方法与波函数模平方在一些情形下决定概率的假设相一致。考察某一系统，其初始哈密顿量不含时间。现在加一含时扰动。为了计算扰动带来的跃迁概率，首先要得到未扰动系统的本征函数$\psi_0(\alpha')$，其中的α是未扰动系统的积分常数。若$\psi_t(\alpha')$是初始值为$\psi_0(\alpha')$的扰动系统的本征函数，作展开$\psi_t(\alpha')=\int\psi_0(\alpha')\mathrm{d}\alpha''c(\alpha''\alpha')$，其中系数$c(\alpha''\alpha')$仅是时间的函数，则$\left|c(\alpha''\alpha')\right|^2\mathrm{d}\alpha''$是初始时处于状态$(\alpha')$的原子在时刻$t$时各量$\boldsymbol{\alpha}_r$处于$\alpha_r''\rightarrow\alpha_r''+d\alpha_r''$之间的状态的概率{这是量子力学概率诠释之一}。

{结论是}可以假设一个系统的初始状态确切地决定系统接下来的状态。如果通过为坐标—动量赋值的方式来描述任意时刻的系统状态，那就实际上无法建立起初始坐标、动量值同接下来的

坐标、动量值之间的一一对应。概率的观念并不进入力学过程的最终描述；只当一些带概率的信息塞到你手里，才会得到带概率的结果(The notion of probabilities does not enter into the ultimate description of mechanical processes; only when one is given some information that involves a probability can one deduce results that involve probabilities)。

薛定谔的波动力学与玻恩的矩阵力学的等价性之狄拉克表述：The eigenfunctions of Schrödinger's wave equation are just the transformation functions (or the elements of the transformation matrix previously denoted by b) that enable one to transform from the (q) scheme of matrix representation to a scheme in which the Hamiltonian is a diagonal matrix. 从狄拉克这篇文章，你还相信有什么矩阵力学和波动力学的等价的说法吗？笔者的观点是，矩阵在量子力学的表述中是不可或缺的。

5.3 约当对薛定谔波动力学的响应

约当是当之无愧的量子力学关键奠基者。笔者以为他和泡利、狄拉克算是不多的能弄懂别人对量子力学贡献的人，就这一点而言，玻恩和薛定谔都嫌逊色。因为某种原因，约当其人与其对量子力学的贡献都被故意埋没了，基于英文文献的中文量子力学文献几乎不见这个名字。新世纪开始，逐渐有学者面对这个反常，撰文指出“Aber Jordan war der Erste (但约当才是第一人)”一类的文章。关于这个问题，后面本系列会有专文讨论。此处介绍约当对薛定谔波动力学的响应之一[Pascual Jordan, Über eine neue Begründung der Quantenmechanik (量子力学之重新筑基), *Zeitschrift für Physik* **40**, 809—838 (1927). 收稿日期是1926年12月8日]。约当发展了一套一般性的形式理论，指出当时已有的四种量子力学理论，即矩阵理论，Born—Wiener 理论，波动力学，以及 q-数理论，都是这个形式理论的特例。

对于 Über eine neue Begründung der Quantenmechanik 这样的一篇论文，笔者以为若把题目译成“量子力学新基础”虽然读着顺，但那没说到点子上。约当跟着玻恩为量子力学构造了矩阵表示，受薛定谔论文的启发他为量子力学重新筑基，或者说筑一个新基。“新基础”强调的是知识，“重新筑基”强调的是创造学问以及创造学问的方法。

约当此文分为两部分7节。第一部分包含§1导言；§2量子力学的统计基础。第二部分包含§3形式准备，共轭量；§4 (概率)幅的微分方程(对§2内容的重新论证)；§5 (概率)幅方程的数学理论；§6二层矩阵构造；§7量子跃迁。{Amplitude，大小，幅度。在矩阵力学中它指的是展开的傅里叶分量前面的系数，在波动力学中指波函数的模。Matrizen zweiter Stufe，不知道如何翻译，暂用二层矩阵凑合}。简述如下。

薛定谔为哈密顿量 $H(q,p)$ 引入了波方程 $\left\{H\left(\varepsilon\frac{\partial}{\partial y},\ y\right)-W\right\}\varphi(y)=0$，其中 $\varepsilon=\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}$，这对应经典力学的 Hamilton—Jacobi 方程。引入替代 $S=\varepsilon\ln\varphi$，方程可改写为

$$\left\{H\left(\frac{\partial S}{\partial y}+\varepsilon\frac{\partial}{\partial y},\ y\right)-W\right\}\cdot 1=0$$

的形式，容易看到当 $h\to 0$，就过渡到 Hamilton—Jacobi 方程。{这也许是“当 $h\to 0$ 时量子力学回到经典力学”此一错误说法的滥觞。不存在 $h\to 0$。h 是作用量量子，是普适常数，$h=1$！当然，你可以去掉带 h 因子的项看看结果是什么，那是令 $h=0$。}

若有自 p,q 正则变换而来的新变量 P,Q，从而有 $H(p,q)=\bar{H}(P,Q)$，相应地有方程 $\left\{\bar{H}\left(\varepsilon\frac{\partial}{\partial x},\ x\right)-W\right\}\psi(x)=0$。那么，$\psi(x)$ 与 $\varphi(y)$ 之间是什么关系？对这个问题的研究包含量子规律之间的一般形式关系，当前由其他理论所确立的形式事实都是特例。其他三种理论都会得到与矩阵理论相同的公式，但他们三者之间的内在本质的联系(eigentliche innere Verbindung)却没有厘清。研究理论间的形式关系可以发展泡利的一个思想，即将量子力学规律作为某些简单的统计假

设的结果这样来建立量子力学(die quantenmechanischen Gesetze als Folgerungen einiger einfacher statistischer Annahmen zu begründen)。泡利沿着玻恩的思想，建议这样为薛定谔的本征函数赋予物理意义。$\varphi_n(q)$是归一化的，则$\left|\varphi_n(q)\right|^2\mathrm{d}q$是当系统处于状态$n$时坐标$q$在间隔$q \to q+\mathrm{d}q$中的概率{这得算是波函数的泡利诠释。当时泡利在汉堡大学或苏黎世}。与此对应的是玻恩将不含W{能量}的解$\sum_n c_n(t)\varphi_n(q)$理解为$\left|c_n(t)\right|^2$是在给定时刻$t$系统处于状态$n$的概率(图9)。

泡利把$\varphi(q)$扩展到含参数的情形，$\varphi(q,\beta)$的情形。$\left|\varphi(q_0,\beta_0)\right|^2\mathrm{d}q$是系统当$\beta$的值为$\beta_0$时$q$在间隔$q_0 \to q_0+\mathrm{d}q$中的概率。泡利称$\varphi(q,\beta)$为概率幅(Wahrscheinlichkeitsamplitude)。预期有公设：(I) 函数$\varphi(q,\beta)$与系统的哈密顿量无关，只由q,β之间的运动学关系决定；(II)若$\psi(Q_0,q_0)$是当$q=q_0$时$Q=Q_0$的概率幅，则概率幅$\Phi(Q_0,\beta_0)$有$\Phi(Q_0,\beta_0)=\int\psi(Q_0,q)\varphi(q,\beta_0)\mathrm{d}q$。这是关于概率幅的矩阵乘法。概率幅的这种组合规则可暂时理解为概率的干涉 (Interferenz der Wahrscheinlichkeiten)。直接拿概率按矩阵乘法组合的算法出现在两类特例中，一类出现在非相干的情形[Max Born, Das Adiabatenprinzip in der Quantenmechanik，*Zeitschrift für Physik* **40**, 167—912 (1926); P. A. M. Dirac, On the theory of quantum mechanics, *Proc. Roy. Soc.* (*A*) **112**, 661—677 (1926)。收稿日期为1926年8月26日]，一类是共振的情形。

量子力学量q被看作是一个数，其在复平面内的某个点集内变化。这个点集形式上可当作连续的曲线处理，它也可以是分立的。量子力学量要满足量子力学的对易关系，即它们是q-数。因为经常用同一个字母表示q-数及其具体数值，所以对于不同公式的意义要格外小心 (so muß sehr sorgfältig auf die Bedeutung der verschiedenen Formeln geachtet werden) 。{尤其是读狄拉克的《量子力学原理》时要格外小心。}

公设A：对两个存在确定的运动学关系的力学量q,β，有两个函数$\varphi(x,y)$和$\psi(x,y)$，使得$\varphi(x,y)\psi^*(x,y)\,\mathrm{d}x$是当$\beta=y$时，$q$处于间隔$x \to x+\mathrm{d}x$内的概率。这个$\varphi(x,y)$是概率的幅，而$\psi(x,y)$是概率的补充幅 (Ergänzungsamplitude)。

公设B：函数$\bar{\varphi}(x,y)$和$\bar{\psi}(x,y)$对应交换的力学量对β,q，则$\bar{\varphi}(x,y)=\psi^*(y,x)$，$\bar{\psi}(x,y)=\varphi^*(y,x)$。

公设C：概率以干涉方式组合 (Die Wahrscheinlichkeiten kombinieren interferierend)。记F_1,F_2为两个物理事件，其概率幅分别为φ_1,φ_2。若F_1,F_2是互相排斥的，则$\varphi_1+\varphi_2$是“F_1或F_2”的概率幅；而若F_1,F_2是互相独立的，则$\varphi_1\varphi_2$是“F_1与F_2”的概率幅。再加上用概率幅的矩阵乘法推导出正交关系，最后可得若$\varrho(x,y)=\mathrm{e}^{-xy/\varepsilon}$，$\varepsilon=\dfrac{h}{2\pi\mathrm{i}}$，其是当$q$取$y$时$p$取值为$x$的概率幅。概率的补充幅也是$\mathrm{e}^{-xy/\varepsilon}$。因此，有定理：对于任意给定的$q$值，$p$所有可能的值都是等概率的 (Bei einem gegebenen Wert von q sind alle möglichen Werte von p gleich wahrscheinlich)。{这是所谓的不确定性原理的滥觞，比海森堡那篇文章的

einiger einfacher statistischer Annahmen zu begründen. Pauli hat im Anschluß an Überlegungen von Born[1]) folgende physikalische Deutung der Schrödingerschen Eigenfunktionen vorgeschlagen[2]): Ist $\varphi_n(q)$ normiert, so gibt

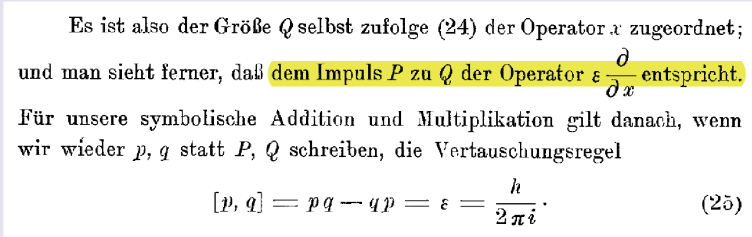
$$|\varphi_n(q)|^2\,dq \qquad (5)$$

die Wahrscheinlichkeit an, daß, wenn das System sich im Zustand n befindet, die Koordinate q einen Wert im Intervall q, $q+dq$ besitzt. Diese Deutung ist eng verwandt mit Borns Deutung der Lösung $\sum_n c_n(t)\,\varphi_n(q)$ der vom Parameter W befreiten Schrödingergleichung; Born nimmt an, daß

$$|c_n(t)|^2 \qquad (6)$$

die Wahrscheinlichkeit sei, daß zur gegebenen Zeit t das System im n-ten Zustand ist. Beide Deutungen sind physikalisch so unmittelbar einleuchtend und naturgemäß, daß eine ausführlichere Erläuterung überflüssig scheint. Sie sind auch beide enthalten in der allgemeinen statistischen Deutung der Quantenmechanik, die wir im folgenden entwickeln.

图9 约当1927年论文P.811上的截图


Es ist also der Größe Q selbst zufolge (24) der Operator x zugeordnet; und man sieht ferner, daß dem Impuls P zu Q der Operator $\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}$ entspricht. Für unsere symbolische Addition und Multiplikation gilt danach, wenn wir wieder p, q statt P, Q schreiben, die Vertauschungsregel

$$[p,q]=pq-qp=\varepsilon=\frac{h}{2\pi i}. \qquad (25)$$

图10 约当1927年文章p.815上的截图

投稿日期1927年3月23日要早得多。关键是约当的文章要更深刻、严谨，所以普罗科学大众不感兴趣。参阅《物理学咬文嚼字》044：Uncertainty of the Uncertainty principle。}

公设D：对于每一个q，存在一个共轭动量p。明显地，函数$\varrho(x,y)=\mathrm{e}^{-xy/\varepsilon}$满足方程：

$$\left\{x+\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}\right\}\varrho(x,y)=0\ ,$$

$$\left\{-\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}-y\right\}\varrho(x,y)=0\ .$$

若当$q=y$时$Q=x$的概率幅是$\varphi(x, y)$；当$p=y$时$Q=x$的概率幅是$\Phi(x,y)$，有$\varphi(x,y)=\int\Phi(x,z)\varrho(z,y)\,\mathrm{d}z$。{此为变换理论的精髓。形式上是矩阵乘法。}

记线性算符$T=\int\mathrm{d}x\,\Phi(y,x)\cdots$，前式可写成$\varphi(x,y)=T\cdot\varrho(x,y)\cdot\varphi(x,y)$，应满足方程{此处负号没验证}：

$$\left\{-TxT^{-1}+\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}\right\}\varphi(x,y)=0\ ,$$

$$\left\{T\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}T^{-1}-y\right\}\varphi(x,y)=0\ .$$

对于奇性情形$Q=q$，函数在除了$x=y$以外的地方有$\varphi(x,y)=0$；函数$\varphi(x,y)$可以说是$x-y$的函数。作为极限情形上式对应的方程为

$$\left\{\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}+\varepsilon\frac{\partial}{\partial y}\right\}\varphi(x,y)=0\ ,$$

$$\{x-y\}\varphi(x,y)=0\ .$$

据此赋予量Q以算符x，则与Q对应的动量P所对应的算符为$\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}$。还是用$p,q$标记$P$，$Q$，有对易规则$[p,q]=pq-qp=\varepsilon=\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}$(图10)。一般的线性算符都可以写成算符$x$和算符$\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}$的和与积的形式。{此处就是约当得到对应算符$x$的动量算符为$\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}$的推导过程。笔者不是很明白。此外，一般量子力学教科书谈及算符x和算符$\varepsilon\frac{\partial}{\partial x}$的关系时，从不谈论它们作为算符的作用对象的性质，不知为什么。数值，q-数和算符，文献中的表示都挺乱的。顺带说一句，数学大神希尔伯特和库朗的经典著作《数学物理方法》当然是由库朗捉刀的，而约当当时是库朗的助手，对这本书贡献颇多。若不是约当恰巧会那些数学，玻恩是否有能力构造矩阵力学都存疑！冥冥之中自有天意，玻恩在1924年造了量子力学一词，《数学物理方法》在1924年出版，而约当也成了玻恩的助手。量子力学是哥廷恩出品。}

对于一般的物理量$F(P,Q)$，有伴随物理量$F^{\dagger}(P,Q)$，其由将$F(P,Q)$表达式中的相乘的算符顺序反转然而去复共轭而来。若$F=F^{\dagger}$，$F(P,Q)$是厄米的；若$FF^{\dagger}=1$，$F(P,Q)$是正交的。若是对于$\check{F}=F^{\dagger-1}$,有$F\check{F}^{\dagger}=F^{\dagger}\check{F}=1$，我们称$\check{F}$是函数$F$的kontragrediente Größe {转置共轭逆，当前汉译逆步}。伴随算符可以这样得到：把所有的积表示倒过来，取复共轭，用$-\frac{\partial}{\partial x}$代替$\frac{\partial}{\partial x}$。

对于自伴随算符，$F=F^{\dagger}$，自伴随特性是本征值问题$F\varphi=W\varphi$具有正交的解φ_n且可以看作是某个变分问题的拉格朗日方程(als Lagrangesche Gleiehung eines Variationsproblems angesehen werden kann)的充分必要条件{后一条量子力学和数学物理方法方面的书籍鲜有提及}。

任意的一组正则变量α，β，满足$[\alpha,\beta]=\varepsilon=\frac{h}{2\pi\mathrm{i}}$。记$T=T(p,q)$，$\alpha=f(p,q)=TpT^{-1}$，$\beta=g(p,q)=TqT^{-1}$，则有方程：

$$\left\{f\left(\varepsilon\frac{\partial}{\partial q},q\right)+\varepsilon\frac{\partial}{\partial\beta}\right\}\varphi(q,\beta)=0\ ,$$

$$\left\{g\left(\varepsilon\frac{\partial}{\partial q},q\right)-\beta\right\}\varphi(q,\beta)=0\ ,$$

$$\left\{f^{\dagger}\left(\varepsilon\frac{\partial}{\partial q},q\right)+\varepsilon\frac{\partial}{\partial\beta}\right\}\psi(q,\beta)=0\ ,$$

$$\left\{g^{\dagger}\left(\varepsilon\frac{\partial}{\partial q},q\right)-\beta\right\}\psi(q,\beta)=0\ .$$

其有解且解的正交性$\int\varphi(q,\beta')\psi^{*}(q,\beta'')\mathrm{d}q=\delta_{\beta'\beta''}$都能因正则变换而得到保障。若这里的$\beta$是时间$t$，则$f$是哈密顿量$H(p,q)$。根据Born—Wiener的理论，$\varphi$和$\psi^{*}$分别是算符$T,T^{-1}$的生成函数{见于Max Born, Nobert Wiener, Eine neue Formulierung der Quantengesetze für periodische und nichtperiodische Vorgänge (周期与非周期过程之量子规律再表述), *Zeitschrift für Physik* **86**, 174—187 (1926)。后续有机会再介绍}。函数$\varphi(x,y)$是基于α，β表达的关于T的一层矩阵 (Matrix erster Stufe)。

概率表达$\varphi(x,y)\psi^{*}(x,y)$的对称性为薛定谔通过边界值确立本征值提供了物理基础。考察一属于“非量子化的”能量值的薛定谔函数，其在无穷的q-空间是无穷的，某有限q-值在未量子化能量下的概率是无限小的。反过来说，若q-值是无穷的，未量子化能量的概率为零{此处内容笔者未能消化。有机会应参照庞加莱的量子化是得到普朗克黑体辐射公式的充分必要条件一文(1912)仔细审视一下}。设$S\left(\varepsilon\frac{\partial}{\partial x},x\right)$是物理量$S$基于$\alpha',\beta'$的算符，而$\varphi(x,y)$，$\psi(x,y)$分别是算符$T$，$\check{T}$，基于$\alpha,\beta$的概率幅，则有$S(y,z)=\int\varphi(x,y)S\left(\varepsilon\frac{\partial}{\partial x},x\right)\psi^{*}(x,z)\mathrm{d}x$。若引入函数$s(x,y)$作为物理量$S$基于$\alpha',\beta'$的概率幅，则有$S(y,z)=\iint\mathrm{d}x\mathrm{d}\xi\,\varphi(x,y)s(x,\xi)\psi^{*}(\xi,z)$，这就是如何为两变量函数$s(x,y)$赋予一个二层矩阵的程序。接下来可以表明，状态的概率幅是一层矩阵，而跃迁概率幅是二层矩阵(更多内容，暂略)。

此文的第二部分为Pascual Jordan, Über eine neue Begründung der Quantenmechanik II (量子力学之重新筑基 II), *Zeitschrift für Physik* **44**, 1—25 (1927). 收稿日期是1927年6月3日。

5.4 更多对薛定谔波动力学的响应

对薛定谔波动力学的即时响应的还有泡利、冯·诺伊曼、福克等人，相关工作以后会相继在恰当的语境下介绍。福克(Влади́мир Алекса́ндрович Фок，1898—1974) 1926年把波函数的变换同电磁势的规范变换给结合到一起[Vladimir Fock，Über die invariant Form der Wellen und der Bewegungsgleichungen für einen geladenen Massenpunkt (带电质点的不变波形式与运动方程)，*Zeitschrift für Physik* **39**, 226—232 (1926). 收稿日期1926年7月30日，也是在薛定谔论文发表的半中间]，那是规范场论诞生的关键一步，请参阅拙著《云端脚下》。

6 矩阵力学与波动力学之间的一个插曲

如约当指出的那样，量子力学除了矩阵力学和波动方程的形式，还有Born—Wiener理论和q-数理论。Born—Wiener 理论出现在波动力学之前[Max Born, Nobert Wiener, Eine neue Formulierung der Quantengesetze für periodische und nichtperiodische Vorgänge (周期与非周过程之量子规律的新表述)，*Zeitschrift für Physik* **86**, 174—187 (1926). 收稿日期为1926年1月5日]。

矩阵力学对非周期运动情形失效。比如对于直线运动，坐标q的矩阵只有对角元，但是对于连续情形是不可能写出这样的矩阵的。把矩阵看作是对变量组的线性变换，$y_m=\sum_n q_{mn}x_n$，则矩阵乘法就直接看作是两个此等操作的接连实施(Dann erscheint die Matrizen-Multiplikation unmittelbar verstandlich als Aufeinanderfolge zweier solcher Operationen)。可以基于线性算符的一般概念建立起对量子规律的表示。

玻恩和维纳的量子论是发展了一种实操计算

(operational calculus)，把海森堡的{q,p那样的}无限矩阵限制在分析数学的一个小区域里 (to confine the infinite matrices of Heisenberg to a region of mathematics more highly developed analytically)。另一个优点是其结构可用于周期和非周期体系。可惜的是，薛定谔的波动力学一出，不久玻恩和维纳的量子论就屈服于薛定谔的简单方法了(it soon succumbed to the simpler method of Schrödinger)。笔者不同意这种表述，实际上，Born—Wiener的线性算符理论一直存活着，只是人们在使用时很少会意识到它也是需要由具体的学者发展起来的而已。

R. J. Seeger在1931年曾言道："薛定谔方程如今成了量子力学的化身。但是，其应用之成功越是无可置疑，其可用性的诠释就越显得可疑。这已经变成了新理论的症结，因此对基本概念的激烈讨论把物理给扩展到了后物理的领域 [Indeed, Schrödinger's equation is now the epitome of quantum mechanics... But the more the success of the latter's application is unquestionable, the more problematic is the interpretation of its usefulness. This has become the crux of the new theory so that much discussion of fundamental concepts has enlarged physics into metaphysics—R. J. Seeger, The quantum theory of Born and Wiener, *Journal of the Washington Academy of Sciences* **21**(14), 315—319 (1931)]"。这里薛定谔波动理论是相对于Born—Wiener 理论而言的后者(the latter)，那个后物理学，metaphysics，标准汉译是形而上学。如果整理量子力学发展史以及量子力学应该有的内容，会发现薛定谔的方程确实一下子把此前二十多年里很多人的风头全抢走了，也难怪海森堡气愤，泡利也表示过不爽。薛定谔的波动方程大受当时对量子理论不熟悉的人们的欢迎，因为它把(它适用的)问题迅速约化为经典力学和经典电动力学里的边界值问题而无需懂什么量子力学。这正应了"越恶俗，越流行"的自然逻辑，也是没法子的事儿。后来，薛定谔1935年论文[Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik (量子力学的现状)，*Naturwissenschaften* **48**, 807—812; 823—828; 844—849(1935)]里的猫以违背薛定谔原意的方式被玩坏了，也算是报应不爽。毕竟，愿意把物理学当作一门严肃学问的物理学家并不多。

7 读懂薛定谔1926年论文的题目

将波动力学的薛定谔方程用于晶体，即针对满足平移对称性的势能$V(x,y,z)$，$V(\boldsymbol{r})=V(\boldsymbol{r}+n_1\boldsymbol{a}_1+n_2\boldsymbol{a}_2+n_3\boldsymbol{a}_3)$，其中$n_1$，$n_2$，$n_3$是整数，$\boldsymbol{a}_1$，$\boldsymbol{a}_2$，$\boldsymbol{a}_3$是线性不相关的三个矢量，解薛定谔方程，所得的色散关系$E=E(p)$，或者说$E=E(k)$，发现有带状结构。这就有了固体的能带理论。

时光约莫到了1986年，Sajeev John发表了Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices [*Physical Review Letters* **58** (23), 2486—2489(1986). 收稿日期为1987年3月5日]一文，此文开创了光子晶体研究。我猜作者是读懂了薛定谔论文的题目"量子化作为本征值问题"的，因此他把我们熟悉的麦克斯韦方程组给改造成了本征值问题的形式。这样，一块介电常数$\varepsilon(\boldsymbol{r})$具有平移对称性的固体，类比于电子晶体，就成了光子晶体了。此处不赘述。

8 几句感慨

先说说笔者学量子力学的真实感受之一。薛定谔波动方程的说服力来源之一是处理氢原子问题(能合理地得到nlm三个量子数及其关系)，方程的解是用球谐函数(这个汉语叫法误导性极强)和络合拉盖尔函数表示的，当时我是一头雾水——自己不会推导哇。看看教科书的写法、讲课老师的表情，他们仿佛都会的样子，这让我很焦虑。后来看了不少别的量子力学书籍，作者们也都仿佛很会推导的样子，这让我更加焦虑。及至2003年左右我不知道怎么就觉得应该看看薛定谔的原文，才发现给出波动方程时39岁的维也纳大学数学物理教授、苏黎世大学访问教授薛定谔老师在摆弄这个方程时也是需要帮助的，而提供帮助者是历史上不多的数学物理巨擘外尔。在论文

第一部分363页的脚注中，薛定谔写道：“对于外尔就如何处理方程(7)所给予的指导，我非常感激 (Für die Anleitung zur Behandlung der Gleichung (7) bin ich Hermann Weyl zu größtem Dank verpflichtet)”。

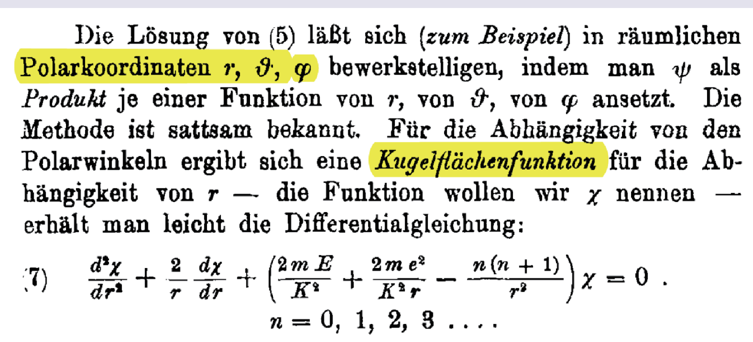
方程(7)就是关于径向函数的方程(图11)。氢原子具有球对称性，用空间极坐标r, ϑ, φ表示，而波函数硬当作(ansetzt)坐标r, ϑ, φ各自函数之积，即假设变量可分离，其中依赖极角ϑ, φ的函数部分构成球面函数 (Kugelflächenfunktion)，而只依赖于坐标r的函数就满足方程(7)。

强调一句，在汉语数学、物理文献中， 球的、球面的概念常常是混淆的。比如，把同平面波对应的球波(spherical wave)随口就说成是球面波。球波是充满以源为中心的、不断扩展的一个球形空间的波，$\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kr-\omega t)}}{r}$。地震会造成在地表传播的波，那才是球面波。在氢原子问题中，函数$P_l^m(\cos\vartheta)\sin(m\varphi)$的适当安装(harmony)能得到完美的球面，故而称为spherical harmonics (安装出球面的部件)。Harmony，汉语的“和谐”得算是很传神的翻译了，但翻译终究不反映原义。

极端一点说，薛定谔的波动力学是滤掉了量子思想的量子力学 (请不要误解为薛定谔本人不精通量子力学)。藉由薛定谔方程开始的量子力学学习，很难明白量子力学从哪儿来，以及它为什么(不)正确了。希望本系列对1926年以前和以后的量子论、量子力学的回顾能为这个观点提供说服力。基于薛定谔的波动方程可以解决很多物理问题，比如洪特很快就提出的量子隧穿效应，但波动方程形式的量子理论在诞生的当年就遭遇了一些固有局限。

若论精通量子力学，即理解他人的思想还自己有思想还能数学地实现，愚以为约当、狄拉克和泡利算是佼佼者，这一点连玻恩和薛定谔都稍显逊色。至于抢先一步给出引力场方程的希尔伯特，对狭义相对论和量子论的建立都给出了一锤定音式论述的庞加莱，对量子力学、相对论的表述都有贡献且创立了规范场论的外尔，那是另一类存在，所幸他们当初做物理时还没有“降维打击”一词。

论及一些物理学家的时候，时常会有某某的物理直觉特别好的说法。海森堡就常常被称赞有过人的物理直觉，仿佛海森堡光靠直觉就能在物理大家圈子里立足似的。笔者觉得，说一个人强在物理直觉好，那可能是一种委婉的表达，意思是这个人没有能力阐述他想到的某个念头，甚至别人阐述了他也未必看得懂。要论物理直觉好，爱因斯坦得算头一个，但他因数学不足应该说吃亏不少。就狭义相对论而言，关于洛伦兹变换要满足群的性质，这思想来自庞加莱；而时间、空间要结合在一起构成时空，这思想来自闵可夫斯基。爱因斯坦虽然是波动力学的启发者，但他没有能力把狭义相对论用于量子力学。爱因斯坦为了构造引力场方程，还不是静下心来跟意大利人Levi-Civita学了几年绝对微分(张量分析)。现学现卖多少有点儿不给力，所以当爱因斯坦获知希尔伯特率先给出了引力场方程时大爆粗口，也就可以理解了——挫折感会让人迅速忘了优雅。如狄拉克者，自己提出问题还自己创造数学来回答，当属异类。


Die Lösung von (5) läßt sich (*zum Beispiel*) in räumlichen Polarkoordinaten r, ϑ, φ bewerkstelligen, indem man ψ als *Produkt* je einer Funktion von r, von ϑ, von φ ansetzt. Die Methode ist sattsam bekannt. Für die Abhängigkeit von den Polarwinkeln ergibt sich eine *Kugelflächenfunktion* für die Abhängigkeit von r — die Funktion wollen wir χ nennen — erhält man leicht die Differentialgleichung:

$$(7)\quad \frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\chi}{dr} + \left(\frac{2mE}{K^2} + \frac{2me^2}{K^2 r} - \frac{n(n+1)}{r^2}\right)\chi = 0 .$$
$$n = 0, 1, 2, 3 \ldots .$$

图11　薛定谔1926年文章第一部分p.363上的截图

在量子力学发展过程中，退化问题(Entartung，英文为Degeneration，汉译简并)就一直受到关注，但在有些文献中会因为复杂以及被认为不影响讨论而一笔带过，请读者朋友们多留心。实际上，从玻尔

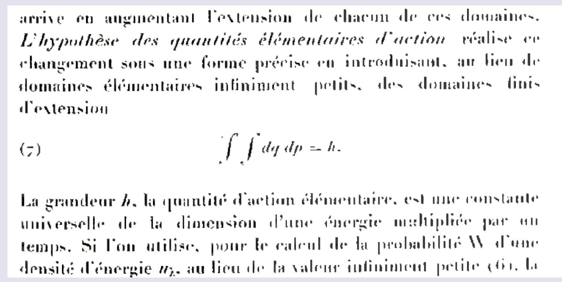
的原子轨道模型到索末菲的原子轨道模型，以及泡利不相容原理，实验上则是从自然光谱到塞曼效应/斯塔克效应，可看作是发现和处理退化(简并)问题的过程。退化(简并)问题是量子理论的核心问题之一。2024年6月2日我看到一个德语搞笑视频，一位妇女把她的一儿三女都命名为Hanna，我突然就明白了他们(德国、瑞士、奥地利、荷兰粗略地都可当作德语区)为什么会留意Entartung现象了。

解矩阵力学的问题，一个矩阵体系(a scheme of matrices)应该满足四个条件：(1)量子条件；(2)运动方程；(3)哈密顿算符是对角的；(4)表示(真)实变量的矩阵是厄米的。这样的矩阵体系不是唯一的。不唯一也不是无规可循啊。不唯一，也分针对什么样的事儿的不唯一，因此这不唯一之间的关系也是有讲究的，这个讲究就有物理。比如上面的 a scheme of matrices，那不同的schemes中间有相似变换 (必须相似啊，要不相互之间有啥关系)，那也是正则变换，$G = bgb^{-1}$。这就是量子力学变换理论的思想基础。又，一个矩阵，对角化后得到的矩阵，其对角元就是矩阵的本征值。找到一个表示，让哈密顿量是对角化的，那矩阵对角元 (天然地是量子化的) 就是本征值。按照矩阵力学，哈密顿量对应的矩阵 H_{nm} 应是对角的，其对角元正是系统不同状态的能量。薛定谔是读懂了这些矩阵力学内容的。反过来说，缺乏这些矩阵力学知识准备，是不好理解薛定谔的波动力学的，首先就不明白他论文题目的意思，而多年后那个读懂这篇论文的题目的人开创了光子晶体研究。

9 附录：相空间的量子化

为了真正理解量子以及物质波的概念，一个关键的概念是相空间的量子化。一般原子物理、量子力学的教科书对此问题多是一笔带过，给我们学习时带来了极大的困惑。

在第一次索尔维会议 (1911.10.30—1911.11.03)的文集 [Paul Langevin, Maurice de Broglie (eds.), *La theorie du rayonnnement et les quanta* (关于辐射与量子的理论), Gauthier-Villars (1912)]中，普朗克有一篇文章 [Max Planck, La loi du rayonnement noir et l’hypothése des quantités élémentares d’action (黑体辐射规律与基本作用量假设)，93—114]，在第99页上，普朗克明确提出了作用的量(quantité d’action)的量子化问题，即普朗克常数 h 是一维相空间体积的最小单元，$\iint \mathrm{d}q\mathrm{d}p = h$ (附图1)。普朗克写道，“在所有减少等概率独立区域数目的方式中，我们如此增加各个区域的范围，即实现此一变化的关于基本作用量的假设严格地有如下引入的形式，用有限范围的区域 $\iint \mathrm{d}q\mathrm{d}p = h$ 代替范围无穷小的基本区域(De toutes mannières on est conduit à diminuer le nombre des domaines indépendants d’égale probabilité: on y arrive en augmentant l’extension de chacun de ces domaines L’hypothèse des quantités élémentaires d’action réalise ce changement sous une forme précise en introduisant, au lieu de domaines élémentares infiniment petits des domaines finis d’extension, $\iint \mathrm{d}q\mathrm{d}p = h$)”。


arrive en augmentant l'extension de chacun de ces domaines. *L'hypothèse des quantités élémentaires d'action* réalise ce changement sous une forme précise en introduisant, au lieu de domaines élémentaires infiniment petits, des domaines finis d'extension

$$\int\int dq\,dp = h. \tag{7}$$

La grandeur h, la quantité d'action élémentaire, est une constante universelle de la dimension d'une énergie multipliée par un temps. Si l'on utilise, pour le calcul de la probabilité W d'une densité d'énergie u_ν, au lieu de la valeur infiniment petite (6), la

附图1 普朗克收录入第一届索尔维会议文集中的文章p.99上的截图

玻尔1913年的氢原子轨道量子化是否受此启发，未见说明。可以肯定的是，1924年玻色假设三维相空间的体积单元为 h^3 从而得到普朗克谱分布公式，肯定是与普朗克的这个假设一脉相承的。玻色1924年的文章没说是受了普朗克的启发，而爱因斯坦为之翻译并接着做下去的工作也都没有提及这事儿。然而，爱因斯坦应该是熟知普朗克

Hieraus folgern wir, daß, abgesehen von einem jeweils zu bestimmenden Zahlenfaktor, $\sqrt[n]{\sigma}$ eine universelle Konstante sein muß und daß

$$\sqrt[n]{\sigma} = z \cdot h, \tag{3}$$

wo z eine reine Zahl und h das elementare Wirkungsquantum $= 6{,}548 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{g}^{+1}\,\mathrm{cm}^{+2}\,\mathrm{sec}^{-1}$ ist.

附图2　Tetrode 文章 p.436的截图

Zur Auswertung der Funktion $f(\varepsilon)$ dienen nun die folgenden Überlegungen: Summiert man die Gleichungen $n = Nhf(\varepsilon)$ über alle möglichen Werte von $\varepsilon = 0$ bis ∞, so erhält man rechts und links unendlich, nämlich eine unendliche Summe von lauter ganzen Zahlen. Dies kommt daher, daß während nun, daß in einem festen Körper jedes Atom Schwingungen in den drei aufeinander senkrechten Richtungen ausführen kann, deren Energien ε_1, ε_2, ε_3 unabhängig variabel sind, so erhalten wir nach den Gesetzen der Wahrscheinlichkeitsrechnung

$$n = Nh^3 f(\varepsilon_1) \cdot f(\varepsilon_2) \cdot f(\varepsilon_3) \tag{1}$$

und durch Summierung

$$1 = h^3 \sum f(\varepsilon_1)\, f(\varepsilon_2)\, f(\varepsilon_3).$$

Für die Gesamtenergie der N Atome erhalten wir entsprechend

$$\begin{cases} E = \sum(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3) Nh^3 f(\varepsilon_1)\, f(\varepsilon_2)\, f(\varepsilon_3) \\ \quad = Nh^3 \sum(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3)\, f(\varepsilon_1)\, f(\varepsilon_2)\, f(\varepsilon_3), \end{cases} \tag{2}$$

wenn wieder die Summierung nicht über alle beliebigen Werte von ε, sondern nur über die Werte $h\nu$, $2h\nu$, $3h\nu$ ... usw. zu erstrecken ist.

附图3　Sackur 1913 年文章 p.70—71 上的截图

的这个公式 $\iint \mathrm{d}q\mathrm{d}p = h$ 的，因为普朗克报告后的讨论环节第一个发言的就是爱因斯坦，或许他不肯八卦吧。笔者愚见，基于 $\iint \mathrm{d}q\mathrm{d}p = h$ 这个公式，普朗克在我心目中的形象又高大了一截，而玻尔1913年的工作和玻色1924年的工作则同时变得逊色了一点儿。普朗克这个公式的意义是，指明量子化是作用量的量子化而非能量的量子化才是量子力学的真谛。与此可媲美的，是此前玻尔兹曼认识到统计是关于能量的统计而非关于气体分子速率的统计。

其实，关于物理相空间的量子化，还有其他人注意到或使用过，都比玻尔和玻色要早。1911—1913年之间，Hugo Martin Tetrode (1895—1931)与 Otto Sackur (1880—1914)独立发展了 Sackur—Tetrode equation (Sackur—Tetrode 等式)，此乃玻尔兹曼气体统计与熵的方程的解，见于：

(a) Hugo Tetrode, Die chemische Konstante der Gase und das elementare Wirkungsquantum (气体的化学常数与基本作用量), *Annalen der Physik* **38**, 434—442 (1912)，以及更正 Berichtigung zu meiner Arbeit：Die chemische Konstante der Gase und das elementare Wirkungsquantum, *Annalen der Physik* **39**, 255—256(1912).

(b) Otto Sackur, Die Anwendung der kinetischen Theorie der Gase auf chemische Probleme (气体运动学理论在化学问题上的应用), *Annalen der Physik* **36**, 958—980(1911).

(c) Otto Sackur, Die Bedeutung des elementaren Wirkungsquantums für die Gastheorie und die Berechnung der chemischen Konstanten (基本作用量子对气体理论以及化学常数计算的意义)，Festschrift W. Nernst zu seinem 25jährigen Doktorjubiläum gewidmet von seinen Schülern, Wilhelm Knapp (1912)，pp. 405—423.

(d) Otto Sackur， Die universelle Bedeutung des sog. elementaren Wirkungsquantums (所谓基本作用量子的普适意义), *Annalen der Physik* **40**, 67—86 (1913).

具体地，Tetrode 用的是 n-空间相体积开 n-次方的形式，$\sqrt[n]{\sigma} = z.h$ (附图2)；而Sackur直接使用物理相空间的体积单元为 h^3 (附图3)，这正是玻色后来采用的假设。

参考文献

[1] von Meyenn K. Eine Entdeckung von ganz außerordentlicher Tragweite：Schrödingers Briefwechsel zur Wellenmechanik und zum Katzenparadoxon (一个影响深远的发现：薛定谔关于波动力学与猫悖论的信件往来). Springer，2011

[2] Schönhammer K，Max Born. Göttingen and Quantum Mechanics (网文)

[3] Przibram K. Schrödinger，Planck，Einstein，Lorentz：Briefe zur Wellenmechanik (薛定谔、普朗克、爱因斯坦和洛伦兹关于波动力学的信件往来). Springer，1963