

3312

6076

量子场论引论

LIANG ZI CHANG LUN YIN LUN

罗长勋 编著

陕西师范大学出版社

量子场论引论

罗长勋 编著

陕西师范大学出版社

量子场论引论

罗长勋 编著

陕西师范大学出版社出版
(西安市陕西师大120信箱)

陕西省新华书店发行 各地新华书店经销
西安外国语学院印刷厂印刷

787×1092 1/16 印张24 字数540千字
1986年7月第1版 1986年7月第1次印刷
印数:1 1,500册

统一书号: 13403·02 定价: (平) 4.10元
(精) 6.10元

前 言

1983年到1985年，编者为了给陕西师范大学物理系高年级开设选修课，以及助教进修班和理论物理专业硕士研究生需要学习现代物理学，鉴于量子场论方法在近二十年已经广泛地应用到量子统计、激光物理和固体物理。编者连续四年讲授了量子场论这门课程，在教学中编写出《量子场论引论》一书作为教材。本书编写中采用了目前已出版的国内外同类著作中有关部分的有益观点和内容。在数学计算上，既尽量避免推导过于繁琐，又要避免过于简略；采用适中的导出步骤，相形比较，跳跃幅度小。在教材内容的安排上和基本理论的阐述方面，尽量要求具有循序渐进，深入浅出，通俗易懂，条理清晰，逻辑性强，处理问题思路明确的特点，以便于读者自学。根据教学实践，结合目前一般读者的实际，加强了学习量子场论所必须的预备知识，例如建立“量子场”的观念和量子场论中一般研究方法和步骤，以及狄拉克符号的引用。实践证明，这样安排教材内容，对初学量子场论的读者是有益的。本书内容只介绍到费曼图技术求取某一确定物理过程的跃迁振幅和跃迁几率，以及量子场论方法在粒子物理中的具体应用，从而可以了解到利用量子场论方法处理实际物理问题的一般法则。

在编写本书的过程中，编者感谢陕西师范大学赵小松副教授对原稿的精心校阅和改正，由于他提出很多有益的建议而使本书在正式出版前能得到多次修改。编者感谢陕西师范大学出版社给予的多方面热情支持和帮助。编者也感谢很多听过“量子场论”课的学生，感谢他们的评论，并对本书某些具体内容提出过建设性的批评。本书的插图，全部由潘原同志绘制，对她的辛勤劳动，特表谢意。

由于编者水平有限，书中不免有错误之处，希望读者批评指正，特此致谢。

编 者

1986年3月于西安

序

量子场论是现代物理学中的一个重要领域，是研究基本粒子及其相互作用的理论工具。量子场论的方法在固体物理学、统计物理学等领域也有重要的应用。因而它已成为不少领域的物理学工作者必备的基本理论知识。不少大学，量子场论已成为一些专业的研究生和高年级大学生的必读基础课或重要选修课。适应这种需要，罗长勋老师在数年来讲授量子场论的讲义的基础上，修改成《量子场论引论》一书出版是值得欢迎的。本书将其注意力集中于为初学者提供一本便于阅读的教材，内容上着重于量子场论的最基本的理论。同时，针对初学者的困难所在，特别注意预备知识的提供，对物理概念的讲述和物理意义的诠释。希望这本书能受到广大初学者的欢迎并对他们有所帮助。

赵 小 松

1986年4月于陕西师范大学

内 容 简 介

本书主要阐述量子场论的基本理论及其微观的运动规律，第一章是建立“量子场”观念，并介绍量子场论的一般研究方法，第二章讨论具有普遍性的自由场的经典理论与场的正则量子化法则，其中主要讨论了洛塞尔定理，求取场的运动常量。第三章到第五章，讨论了标量场、电磁场和旋量场三个自由场的经典理论和量子化程序，作为研究后续内容的理论基础。第六章到第八章，主要讨论了微观过程的电磁相互作用、唯象的强相互作用和弱相互作用的宇称不守恒，以及相互作用表象和散射矩阵的物理意义。第九章讨论了微观过程的微扰近似和维克定理，求取各级微扰的跃迁振幅。事实上，我们结合具体物理过程，仅用了一、二级微扰近似求取各物理过程的跃迁振幅。第十章讨论了微观过程的跃迁几率、散射截面和衰变现象发生的机制，作为量子场论方法在粒子物理中的具体应用，所得理论结果值能与实验相比较符合一致，说明量子场论能够正确地反映微观物理过程的客观规律。

本书可作为理论物理专业硕士研究生、粒子物理专业的教材，也可供物理工作者的参考用书。

目 录

第一章 量子场论的预备知识	1
§1 粒子和波, “量子场”的观念	1
§2 Schrödinger 波动方程	5
§3 Dirac 符号	12
§4 谐振子的量子力学解	26
§5 自然单位制	33
第二章 自由场的经典理论与场的量子化	35
§1 场方程的 Lagrange 程式	36
§2 场的 Hamilton 型运动方程	38
§3 空间的均匀性导致守恒定律	43
§4 场的量子化	54
第三章 标量场的量子化	58
§1 π 介子是自旋为零的粒子	58
§2 标量场的经典理论	59
§3 实 Klein—Gordon 场的量子化	66
§4 复 Klein—Gordon 场的量子化	76
§5 介子场的同位旋	82
第四章 电磁场的量子化	88
§1 电磁场的 Lagrange 程式	88
§2 A_μ 的平面波解	94
§3 电磁场的量子化	97
§4 场的零点涨落	104
第五章 旋量场的量子化	108
§1 预备知识	109
§2 Dirac 方程	114
§3 γ 矩阵定理	122
§4 电子的自旋	125
§5 Dirac 方程的协变性	127
§6 螺旋度 (helicity) 及其本征态	145
§7 平面波解	151
§8 旋量场的物理量与量子化	156
§9 反对易关系	164
§10 旋量场算符在连续动量空间的表示	172
§11 二分量子理论	175
第六章 Green 函数	180

§1	Green 函数的形式定义	180
§2	量子介子场的传播函数 $\Delta_F(x)$	184
§3	量子电磁场的传播函数 $D_F(x)$	195
§4	量子旋量场的传播函数 $S_F(x)$	199
第七章	场的相互作用	206
§1	四种相互作用概述	206
§2	旋量场与电磁场的相互作用	208
§3	荷电标量场与电磁相互作用的最少耦合	215
§4	对 πN 相互作用的一些考虑	219
§5	πN 相互作用	221
§6	同位旋旋量	225
§7	同位旋守恒的 πN 相互作用	229
§8	四Fermi 子耦合	233
第八章	相互作用表象、散射矩阵	237
§1	Schrödinger 表象、Heisenberg 表象、相互作用表象	237
§2	时间平移算符	241
§3	微扰论展开	243
§4	散射矩阵	246
第九章	微扰论	249
§1	散射矩阵的简化	249
§2	正规乘积	251
§3	编时乘积分解为正规乘积之和	255
§4	一级微扰跃迁振幅和 Feynman 图	264
§5	二级微扰跃迁振幅和 Feynman 图	271
§6	Feynman 图和对对应规则	297
第十章	跃迁几率、散射截面与衰变	306
§1	跃迁振幅与跃迁几率	306
§2	一般散射物理过程的跃迁几率	308
§3	衰变寿命、角分布、能量分布	314
§4	$N^* \rightarrow \pi N$ 衰变	320
§5	π 衰变现象	328
§6	$\pi^0, \eta \rightarrow \gamma + \gamma$ 电磁衰变	331
§7	π^- 介子衰变为 π^0 介子、电子和反中微子	335
§8	碰撞问题、微分截面	341
§9	compton 散射截面	349
§10	coulomb 散射	357
§11	正负电子在高能碰撞中转化为 $\mu^\pm$ 介子对	362
§12	高能中微子、电子弹性散射	370

第一章 量子场论的预备知识

自然界存在着普遍性的规律和特殊性的规律，在特殊的规律中寓含有普遍性的规律。例如物质运动的能量守恒和相互转化定律，在各种自然现象中都无一例外地普遍成立；因为该定律反映了自然界各种现象中所遵从的普遍性，所以在任何特殊的自然现象研究中必须包含能量守恒和相互转换定律这一重要因素，即在特殊的运动中寓含有普遍性的规律。所谓特殊性的规律，即它只能在一定条件下成立，才能是正确的反映客观自然现象。由于人们的认识总是相对真理，所以任何科学理论都近似真实地反映了客观自然界的规律性；这一点在整个物理学的发展史中表现得最为明显。

众所周知，经典物理学理论，在低速的宏观物理现象的范围内起着普遍的作用。在此条件下，人们运用经典物理学的许多概念和规律能很好地解释许多自然现象与观测的结果。但是在高速宏观物体运动的条件下，经典物理学理论是无能为力的，必须运用狭义相对论来研究高速运动物体的规律，在狭义相对论中所有物体的运动方程，在Lorentz坐标变换下是协变的。时空观念是相对的而非绝对的。狭义相对论理论在高速的宏观物理现象的范围内起着普遍的作用。如果把上述经典物理学和狭义相对论关于宏观自然现象的理论用于研究微观客体的运动规律，所得的一切预言同观测的实验事实相比较却是不一致的，甚至是矛盾的。因为微观客体本身具有波、粒二重性的普遍属性，对微观客体的运动测量要受Heisenberg测不准关系的限制。廿世纪三十年代发展起来的非相对论量子力学，在低速的微观物理现象范围内起着普遍的作用。但是，这一理论不能解释粒子之间的相互作用过程中发生的粒子产生、湮没和相互转变的自然新现象。这种自然现象在宇宙射线观测、原子蜕变以及在人工高能物理实验的研究中表现得最为突出。如果仅用狭义相对论或量子力学是不可能解释这些新的自然现象的。因此，有必要建立新的理论来研究粒子之间有相互作用的相对论理论，即量子场论。故量子场论是反映高速微观客体在相互作用过程中相互转化为主要特征的微观理论。到目前为止，量子场论在高速的微观自然范围内起着普遍的作用。但在理论研究中同样遇到有根本性的困难，例如微扰论中的发散困难。实际上，量子场论是量子力学的继续和发展，它对微观自然现象作了进一步的近似真实地描写。

现代物理学的理论发展，基本上有两种类型：一是严格服从因果律的决定论，这样的理论多用于具有连续性结构和运动的宏观现象的研究；二是服从统计规律的非决定论，这样的理论多用于具有非连续性的微观自然现象的研究。从量子场论所研究的物质对象来看，是属于非决定论的一种统计理论。

§ 1. 粒子和波，“量子场”的观念

1. 物质的粒子性 对物质的可分性，自古以来，有两种看法：一是无限可分；二是有限

可分。从目前有关精密的巨大高能加速器的实验来看，要作出粒子的无限可分的论断，为时尚早。对于粒子的有限可分，无论从物理实验或从理论探讨中，都是人们正在追求和探索的问题。此处所谓粒子，是指无内部结构的一种物质的几何点。我们知道，凡是不能用任何化学方法作出进一步的离解或分化的一种物质，称为一种元素，而“原子”一词用来表示属于一个化学元素物质的最小单位，而化合物的最小颗粒能用一团不可分的原子来描绘。例如铁元素的最小颗粒是铁原子，而水的最小颗粒是由一个氧原子和两个氢原子组合而成的水分子。显然，从化学元素的性质来看，各化学元素的原子是不可分的，故原子应被看成粒子。

从近代原子物理学知道，原子不仅有大小，而且有它的内部结构。按照 Bohr 的原子模型，原子是由电子绕原子核运动形成的，原子的质量主要集中在原子核内部。而电子距离原子核还有很大的空间范围，用尺度来说，原子的线度约为 10^{-12} 厘米，而原子核的线度约为 10^{-13} 厘米。原子核带有正电荷，正电荷的数值与核外电子电荷的单位总数值相等，而成为中性原子。每一种化学元素的核电荷单位的总数值正好与元素周期表中的原子序数相同。

从近代核物理学的研究知道，原子核本身不仅有大小，而且尚有内部结构；核的内部是由质子和中子组成，质子带有正电荷，正电荷的单位恰好等于电子电量单位的绝对值。而中子不带电荷，但有磁矩。通常把质子和中子二者统称为核子。从尺度来看，核子的尺度约为 10^{-15} 厘米。因此，在原子核中，核子之间尚有相当大的运动空间范围。

除了上述电子、质子和中子的发现外，在近代物理实验中发现的粒子已经有几十种之多，如果按粒子本身的质量来分类，大致可分为四种类型的粒子：

(1) 静止质量为零的粒子：光子、中微子和反中微子；

(2) 轻子和反轻子：正电子、负电子、正 μ 介子、负 μ 介子；（有的作者，把中微子和反中微子也归并为此类）

(3) 介子：正 π 介子 π^+ 、负 π 介子 π^- 和中性 π 介子 π^0 ，正 K 介子 K^+ 、负 K 介子 K^- 和第一、第二种中性 K^0 、 $\bar{K}^0$ 介子；

(4) 重子和反重子：质子和反质子，中子和反中子， Λ 超子，正 Σ^+ 超子、负 Σ^- 超子和中性 Σ^0 超子，负 Ξ^- 超子和中性 Ξ^0 超子等。

根据目前的物理实验证实，按照粒子的自旋又可分为下述三种类型：

(1) 自旋为零的粒子： π 介子和 K 介子；

(2) 自旋为 $1(\hbar)$ 的粒子：光子；

(3) 自旋为 $\frac{1}{2}(\hbar)$ 的粒子：轻子和反轻子，重子和反重子，中微子和反中微子。

从上述可见，自旋等于 $1(\hbar)$ 的粒子，只有光子一种。

近年来，由于高能加速器的改进，提高了碰撞粒子的能量，美籍华人丁肇中曾发现了胶子。在 1983 年 1 月，鲁比亚发现了中间 Bose 子 $W^\pm$ ，在同年 6 月又发现了中间 Bose 子 Z^0 。 $W^\pm$ 和 Z^0 的发现证实了 Weinberg—Salam 提出的弱电统一场论，从而使人们对自然界的四种基本作用力（强力、弱力、电磁力和引力）的认识又前进了一步，并把高能物理研究大大向前推进了一步。

近年来，根据高能粒子在碰撞过程中表现的迹象，反映出质子有它内部的构造。根据静止能 m_0c^2 可以粗略的判断质子内部具有强大的内能，这些内能必定由它内部的粒子之间的相互作用和运动所决定。人们把构成质子的下一层次的粒子，称为夸克。这些夸克有 $\frac{1}{3}$ 及 $\frac{2}{3}$ 电子电量单位的绝对值。但在高能物理实验中，至今尚未发现夸克粒子的存在。因此，有些物理学家企图用夸克囚禁的理论来解释。这种解释是否成功，有待今后的实验检验和理论的进一步探索。

高速粒子在相互作用过程中能够相互转化，是它的主要特征。例如光子可以转化为正负电子对，而正负电子对的湮没又可转化为一对光子。研究这些类似的高速粒子的相互转化的微观自然现象的规律，量子场论是起着普遍的作用。这一理论的建立，有两个特点：一方面反映微观现象的波、粒二重性；另一方面反映高速运动现象所满足的运动方程在 Lorentz 坐标变换下的不变性。

2. 物质的波性 (1) 光的波、粒二重性：波是物质的一种运动形式，表现得最明显的是电磁波，因为电磁波在时空中的传播，不需要任何介质。在经典电磁理论中充分证明了光是电磁波。在 1900 年，M. Planck 为了解释热辐射的宏观理论上的困难，提出微观粒子吸收或放射电磁辐射能量具有最小能量单位 ϵ_0 的假设，而

$$\epsilon_0 = \hbar \omega$$

所有其它能量应为该最小能量单位的整数倍，

$$\epsilon = n \hbar \omega,$$

式中 $n = 0, 1, 2, \dots$ 。在这样能量不连续的假定下，M. Planck 仍然提出辐射本身在时空中是连续的电磁波的传播。

1905 年，A. Einstein 发表了一篇论文，比 M. Planck 更进一步提出微观粒子吸收或放射电磁辐射能量的不连续性，是由于电磁辐射场的“粒子性结构”所导致的结果。正象质量的不连续性反映着实物粒子（原子或电子）结构一样。当时把电磁辐射场的粒子称为光量子，简称光子，在空间运动的速度等于光速（ c ）。这样的观点，不久在光电效应中被证实。后又在 Compton 的光子、电子散射实验中得到进一步证明。但光子的静止质量等于零。

在此理论中，光子的能量和动量与频率和波长的关系如下：

$$E = \hbar \omega, \quad P = \frac{\hbar \omega}{c} = \hbar k, \quad (1)$$

式中 $K = \frac{2\pi}{\lambda}$ = 波矢量的绝对值， $\omega = 2\pi\nu$ ， ν 为频率。把动量 P 写成矢量形式为

$$\vec{P} = \hbar \vec{K} \quad (2)$$

显而易见，光子的能量、动量与 Planck 常数直接关联着，应同时代表辐射场具有光量子的结构性质。根据这一特征，可以得到这样的结论，凡是与 Planck 常数直接关联的物理量反映物质的非连续性，称为该物质具有粒子性。

如果电磁场描述带电粒子之间的相互作用，则电磁辐射的光量子就是描述荷电粒子之间的相互作用粒子。因此，光不仅有波性，同时也有粒子性；是波、粒二重性的微观

客体。

(2) 电子的波性 根据上面所述, 光不仅有波性, 而且有粒子性。由 planck 的假设可知, 光子可以被微观客体吸收或放射: 按照 Einstein 的观点, 则在热辐射场中有光子的湮没或产生。对电子来说, 同样可以被微观客体吸收或放射, 而且正、负电子对可以湮没并产生光子, 光子也可以转化为正、负电子对。1924年, 法国青年科学家 De'Broglie 利用对比法则, 认为光子与电子有相同的类似性质; 因而提出电子不仅具有粒子性, 同时也具有波性的假设, 其波频与波长应满足下式:

$$\omega = \frac{E}{h}, \quad (3)$$

$$\lambda = \frac{h}{P}, \text{ 或 } \vec{K} = \frac{\vec{P}}{h}. \quad (4)$$

式中 E 和 $\vec{P}$ 分别代表电子的能量和动量 $\vec{P} = m\vec{v}$, m 为电子的质量, $\vec{v}$ 为电子的运动速度。

(3) 式与 (4) 式在形式上与 (1) 式和 (2) 式相同, 但在物理意义上是不同的。(3) 式与 (4) 式说明一个自由运动的电子, 能量为 E , 动量为 $\vec{P} = m\vec{v}$ 时, 唯一地对应一个波频为 ω , 波长为 λ 或波矢为 $\vec{K}$ 的一个平面波。这与经典物理中的电子, 只有粒子性的概念相违背, 是难以理解的。但是, 电子的波动性假设, 在以后的电子衍射实验中被证实, 从衍射实验充分证明了电子的动量为 P 时所决定的电子运动表现波性的波长, 与 (4) 式计算的结果完全一致。在以后的各种实验中, 例如中子以及其它微观粒子, 充分显示了运动过程中的波性。由此得出结论: 粒子与波动的二重性, 是一切微观粒子的普遍属性。

3. 量子场论的研究方法和“量子场”观念 根据以上所述可以看出, 在经典物理学中的纯波性, 例如热辐射的电磁波, 和经典物理学中的纯粒子性, 例如电子的运动; 在量子现象中用波、粒二重性统一起来了。所以在量子现象领域中物质的粒子性和物质的波性都是同时重要的领域。当物质的波性可被忽略时, 就过渡到粒子的经典力学领域。当粒子性在一定条件下显得不重要时, 就过渡到经典物理学的波动性。Bohr 认为波、粒二重性是相斥的, 但又是互相补充的, 此所谓量子现象中 Bohr 的互补原理。

现在根据量子现象的波、粒二重性来看, 热辐射的电磁波到由光子所构成的量子系统, 可以说是由经典波动场向量子力学领域过渡。而电子的波性是由经典粒子向量子力学领域的过渡。在这种过渡中都必须建立粒子性的物理量和波动性的物理量间的关系, 所以都必须引入代表它们之间单位换算的 planck 常数 h 。当由经典波动场过渡到量子领域时, 必须利用 (1) 式和 (2) 式; 当由经典粒子过渡到量子领域时, 必须利用 (3) 式和 (4) 式。

从经典波动场向量子学领域的过渡, 通常称为经典场的量子化方法, 把连续的经典场转变为粒子的观点, 这时的场与不连续的能量子相对应。我们知道, 经典的电磁波动场是由 Maxwell 方程组描述的, 而 Maxwell 方程组是满足相对论要求的电磁波动方程。按照 Einstein 的观点, 电磁辐射场是由光子所组成, 是一种光子系统; 换言之, 电磁辐射场是一种多粒子系统。因此, 满足相对论要求的经典场所对应的是一种多粒子的量子系统。这一结论是我们研究量子场论的重要观点和依据。

从经典粒子向量子领域的过渡，其中一个重要研究内容，是确定粒子在一定条件下所表现的波性。在量子场论中，如同粒子在量子力学领域中表现为波，则用波函数来描写。如果满足相对论要求的波动方程，尽管波动方程有各种形式的差异，则该波动方程仍然是描写多粒子系统的量子效应。此时我们就可以将波动场和静止质量不为零的粒子（例如电子、核子、介子等）相对应。上述的粒子就是相应场的量子，并作为此波动场之源的其它粒子之间的相互作用。例如，核子（质子与中子）之间相互作用的核力场，就是与 π 介子对应的介子场，而介子就是介子场的量子。显然，介子场属于多粒子的量子。因此，我们可以说，核力场是通过介子来传递。而相互作用的波动场量子理论，在此，我们可以对不同的粒子引入不同的“量子场”，例如上述的介子场。对于电子就可以引入电子场，其它以此类推。而不同的“量子场”又决定不同粒子的基本性质。“量子场”是量子场论所要研究的主要物质对象，因此“量子场”的观念在量子场论中占有极为重要的地位。

在量子场论的研究中，通常采取这样的步骤：从已知的理论中，例如电子与电磁场相互作用关系，或从唯象的讨论中把经典粒子向量子力学领域过渡，得到满足相对论要求的波动方程，作为对某种经典粒子的波动场的描述，亦即引入了该粒子的量子场，此称为第一次量子化方法。从该粒子的量子场获得有关场的某些经典物理量，例如场的动量、能量和角动量等等。正如我们对光子的量子电磁场研究一样，先从经典的Maxwell电磁场方程作为理论出发点，经过数学推论而获得有关电磁场的能量、动量以及角动量等。其次，我们再对场本身进行量子化，此称为二次量子化方法。用此方法可求得场与不连续的能量子，这些能量子相应于场振子的各种许可能量态，场振子处在某种状态，就称为场在某点处被激发，量子场的激发代表粒子的产生，量子场的激发消失代表粒子的消失。对于量子电子场来说，量子电子场的激发代表电子的产生，量子电子场的激发消失，代表电子的湮没。对于量子电磁场也同样，如果量子电磁场的一个振动自由度激发到 $n=1$ 的受激态，相对应就产生了一个频率为 ω 的光子。当 $n=5$ 时，量子电磁场就相应地产生了频率为 ω 的五个光子；量子电磁场的振动激发消失对应于光子的消失。量子场论的观点，正如演奏二胡的弦振动一样，此处弦的振动激发，对应于量子场的受激态，量子场的各种受激态代表处在各种情况下粒子的量子系统。因此，量子场论中引入“量子场”这一概念，反映了高速微观多粒子系统现象的描述。“量子场”是客观存在的形式之一。用不同的量子场可以描述不同种类的高速微观多粒子系统的运动规律。

概括来说，量子场论研究的步骤，首先讨论波动场的经典理论；其次讨论自由场的量子理论；最后讨论相互作用的量子理论。对自由场的经典理论和量子理论，我们着重讨论标量场、旋量场和电磁场的量子化，作为这些量子场对其它粒子（诸如质子、中子等）相互作用的理论基础。

§ 2 Schrödinger 波动方程

上节我们讨论了物质的波性和粒子性，实际上量子现象中波动性和粒子性都是同等

重要的研究领域。在量子场论研究中引入“量子场”概念后，并认为量子场是物质存在的形式之一。当经典粒子向量子力学领域过渡，实质上要研究物质的波动性；当经典波动场向量子力学领域过渡，实质上要研究物质的粒子性。此处所指的物质粒子性，是指场与不连续的能量子相对应，即对 $E = \hbar \omega$ 和 $\vec{P} = \hbar \vec{K}$ 而言。

现在我们要明确经典粒子向量子力学领域是如何过渡的。我们的着重点不是讨论 Schrödinger 波动方程是如何建立的，而是要知道经典粒子如何向量子力学领域过渡，对今后量子场论的研究是有益的。

据近代物理学史的记载，Schrödinger（当时任教瑞士 Zurich 大学）被 P. Debye（当时任教 Zurich 联邦工学院）邀请在两校之联合讨论会中，报告 1924 年 L. De Broglie 发表的论文，提出粒子的波性新理论，使 Schrödinger 研究此问题。在 1926 年一月至六月中，先后发表了四篇论文，完成了波动力学的基础工作，并指出波动力学与 Heisenberg 的矩阵力学即量子力学是等价的，可由波动力学导出量子力学的相同数学形式。

在科学领域研究中如果能正确提出问题，等于问题解决了一半。在 Schrödinger 波动方程建立的过程中，当时 Schrödinger 自己提出了两个问题：（1）求一个 De Broglie 波的理论，或此波所遵守的方程式；（2）进一步创造一种新力学，在极限情形下趋近经典的质点力学，有如经典波动光学在波长入极短的极限时趋近几何光学一样。

现在看来，De Broglie 提出粒子有波的特性，已经被广泛的实验证明，是无可非议的客观事实。波与粒子之间的 De Broglie 关系式为

$$E = \hbar \omega, \quad \vec{P} = \hbar \vec{K} \quad (1)$$

式中 E ， $\vec{P}$ 为自由粒子的能量和动量， ω 和 $\vec{K}$ 为粒子具有波性的波频和波矢。从（1）式可见，一个能量为 E 和动量为 $\vec{P} = m\vec{v}$ 的经典自由粒子，唯一地对应一个波，即平面波。假设该平面波在时刻 t 和空间某点 (x, y, z) 处，振动的位移为 $\Psi(t, \vec{r})$ ，即通常所说的粒子运动的波函数，其形式应取下式：

$$\Psi(t, \vec{r}) = A e^{i(\vec{K} \cdot \vec{r} - \omega t)}, \quad (2)$$

式中 A 是波的振幅，对平面来说， A 应是一个常数，上式表示一个前进波。把（1）式中的 ω 和 $\vec{K}$ 代入（2）式，即得

$$\Psi(t, \vec{r}) = A \exp \frac{i}{\hbar} (\vec{P} \cdot \vec{r} - Et). \quad (3)$$

如果在（3）式两边对坐标微分，则有下列式成立：

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(t, \vec{r}) = \vec{P} \Psi(t, \vec{r}). \quad (4)$$

从上式不难看出，式的左边是一微分算符 $\frac{\hbar}{i} \nabla$ ，而式的右边是粒子的经典力学中的动量 $\vec{P}$ ，这一动量 $\vec{P}$ 属于一般普通的物理量。Dirac 称类似 $\vec{P}$ 的物理量为 c 数，与其它任何数在乘积中可以交换。而 $\frac{\hbar}{i} \nabla$ 称为 q 数，意谓属于量子力学的算符，算符本身一般不能与其它各种量在乘积中进行交换。所以，在量子力学中，如果 B ， C 分别代表两个

不同算符，在乘积的运算中，在一般情况下，

$$BC \neq CB. \quad (5)$$

通常把(4)式左边的算符 $(\frac{\hbar}{i}\nabla)$ 称为动量算符。由(4)式不难看出，有下式成立：

$$\frac{\hbar}{i}\nabla \equiv \vec{P} \quad (6)$$

上式的恒等有两重意义：(1)粒子的动量算符 $(\frac{\hbar}{i}\nabla)$ 对波函数 $\Psi(t, \vec{r})$ 的作用等效于粒子的经典力学动量 $\vec{P}$ 与 $\Psi(t, \vec{r})$ 的乘积；(2)粒子的经典力学的动量本身也可看作量子力学中动量算符的代表。所以，在量子力学中常称动量 $\vec{P}$ 算符，即 $\vec{P}$ 代表动量算符 $(\frac{\hbar}{i}\nabla)$ 。在这样的意义下，经典粒子的动量 $\vec{P}$ 过渡到量子学领域的描述，应当用动量算符 $(\frac{\hbar}{i}\nabla)$ 代替通常的经典力学的粒子动量 $\vec{P}$ 对波函数 $\Psi(t, \vec{r})$ 的运算。

同样，在(3)式的两边对时间 t 取偏导数，则有下式成立：

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t, \vec{r}) = E\Psi(t, \vec{r}), \quad (7)$$

因此，
$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} \equiv E. \quad (8)$$

从(8)式可以看出， $(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t})$ 代表经典粒子的能量算符，上式的恒等意味着当能量算符作用于粒子的波函数 $\Psi(t, \vec{r})$ 等效于粒子的能量 E 乘波函数 $\Psi(t, \vec{r})$ 。

在经典力学中，一个自由粒子的动能与它的动量之间，要满足下式：

$$E = \frac{1}{2m}\vec{P}^2, \quad (9)$$

如果把经典粒子过渡到量子力学领域描述它的波性，(9)式中两边的经典力学物理量，应当用(6)式和(8)式中相应的动量算符和能量算符代替，而得下式，

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2. \quad (10)$$

(10)式是一种算符方程，当上述方程的两边分别左作用于粒子的波函数 $\Psi(t, \vec{r})$ 时，即构成对自由粒子所满足的Schrödinger波动方程。

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(t, \vec{r}) = 0. \quad (11)$$

如果经典粒子在保守力场中运动，粒子的势能为 $V(\vec{r})$ 。根据粒子在保守力场中运动的总能量守恒，而得下式：

$$E = \frac{1}{2m} \vec{P}^2 + V(\vec{r}) \quad (12)$$

同样, 把经典粒子在保守力场中的运动, 过渡到量子力学领域中描述它的波性, 则(12)式中的 E , $\vec{P}$ 和 $V(\vec{r})$ 均应看作相应的能量算符和动量算符, 并且把 $V(\vec{r})$ 也看作算符, 而得下述算符方程:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (13)$$

把(13)式的两边分别左作用于粒子在保守力场中运动的波函数 $\Psi(t, \vec{r})$ [注意, 此处的 $\Psi(t, \vec{r})$ 与自由粒子的波函数不同], 则有下列式成立:

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(t, \vec{r}) + V(\vec{r}) \Psi(t, \vec{r}) \quad (14)$$

(14)式即为通常用到的Schrödinger波动方程。为书写简便, (14)式又可表示为

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t, \vec{r})}{\partial t} = H \Psi(t, \vec{r}). \quad (15)$$

式中 $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$, 称为粒子在有势场中的总能量算符, 或称为粒子的Hamilton量算符。显见 H 算符是实的, 即 $H = H^*$ 。

以上所得的自由粒子和在保守力场中的粒子运动的Schrödinger波动方程(11)以及方程(14)或(15)式, 是量子理论中的基本假定, 找到了De'Broglie波所遵从的方程, 决不能视为该方程可由经典物理推导出来。

方程(11), (14)或(15)对 $\Psi(t, \vec{r})$ 是时间 t 的一次微分, 对坐标 x, y, z 是二次微分的线性偏微分方程式。故在 Lorentz 坐标变换下是非协变的, 换言之, 是不满足狭义相对论要求的方程式。故(11)式, (14)或(15)式称为非相对论的Schrödinger波动方程。

在此我们讨论以下三个问题:

1. $\Psi(t, \vec{r})$ 的意义。

现在我们把(14)式推广, 应用到多个粒子系统, 所满足的 Schrödinger 波动方程为:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)}{\partial t} = \left\{ \hbar^2 \sum_{j=1}^N \left(-\frac{\nabla_j^2}{2m_j} \right) + \sum_{j,k} V_{jk}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \right\} \Psi(t, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad (16)$$

如果上式中的 N 个粒子的位置矢量, 换成描写该粒子系统的 n 个自由度的广义坐标, 则

$$\Psi(t, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \Psi(t, q_1, \dots, q_n), \quad n = 1, 2, \dots, 3N$$

因此(16)式又可写为

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t, q_1, \dots, q_n)}{\partial t} = \left\{ \hbar^2 \sum_{j=1}^n \left(-\frac{1}{2m_j} \frac{\partial^2}{\partial q_j^2} \right) + \right.$$

$$+ \sum_{i,k} V_{i,k}(q_1, \dots, q_n) \} \Psi(t, q_1, \dots, q_n) \quad (17)$$

$$\text{或 } i\hbar \frac{\partial \Psi(t; q)}{\partial t} = H \Psi(t; q). \quad (17a)$$

此处 $q = (q_1, \dots, q_n)$, $H = \hbar^2 \sum_{i=1}^n \left(-\frac{1}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial q_i^2} \right) + \sum_{i,k} V_{i,k}(q_1, \dots, q_n)$, 由(17)可见, 一个 N 个粒子的系统, 自由度为 $n = 3N$ 时, 式中的 Ψ 是 n 维空间 (或位形空间, Configuration Space) 的波函数, 并不是经典物理学中的三维空间的波, 例如电磁波或弹性波等.

又从方程式(14)或(17)之解 Ψ , 可以看出 Ψ 是复函数, 故没有直接的物理意义, 惟有 $\Psi^* \Psi = |\Psi|^2$ 则是实函数, 而且是正定的, 即

$$\Psi^* \Psi \geq 0. \quad (18)$$

由(14)式或(17)式及其共轭方程, 可得

$$\int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi \right) d\tau = \frac{i}{\hbar} \int \left\{ -\Psi^* H \Psi + \Psi (H^* \Psi^*) \right\} d\tau = 0. \quad (19)$$

此处 $d\tau = dq_1 dq_2 \dots dq_n$, 故 $\Psi^* \Psi d\tau$ 对整个位形空间积分与时间无关. 换言之, $\int \Psi^* \Psi d\tau =$ 常数, 并且是有限的. 如果把 Ψ 归一化, 则有下式成立

$$\int \Psi^* \Psi d\tau = 1. \quad (20)$$

式中 $\Psi^* \Psi d\tau$ 表示粒子系统在 n 维空间的体积元素 $d\tau = dq_1 \dots dq_n$ 中粒子出现的几率. (20) 式表示粒子系统在整个位形空间出现的总几率等于“1”. M. Born 在 1926 年由于应用量子力学于粒子在力场中的散射问题, 创造出这一几率的解释, 而成为量子力学的基本假定之一. 所以, Schrödinger 提出的粒子波函数 $\Psi(t, \vec{r})$, 实质上是决定粒子在时间 t 和空间某点处粒子出现的几率振幅. 微观区域内粒子的波性只意味着几率分布的一种周期性, 所谓粒子性也只代表能量的不连续性. 这就从本质上说明了微观粒子带有波的特性, 得到波、粒二象性的统一解释.

由(14)式或(17)式及其共轭又可得到

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) + \nabla \cdot \left\{ \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi] \right\} = 0, \quad (21)$$

$$\text{在上式中令 } \vec{J} \equiv \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* \nabla \Psi - (\nabla \Psi^*) \Psi], \quad (22)$$

$$\rho \equiv \Psi^* \Psi. \quad (23)$$

则(21)式又可写成一连续性方程的形式,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0. \quad (24)$$