北京大学物理学院 Bryan*

摘要

非相对论性量子力学的背后实际上存在着丰富的几何与对称性。本文尝试结合现代观点和量子力学发展史,对其中的重要图像作一综述;这其中包括 Hilbert 空间的结构、时空平移对称性、三维空间的旋转对称性等。这些图像有助于对量子力学基本力学的直观理解,同时便于推广至相对论情形,可以认为是后续理论的基础。

本文为笔者学习量子力学、参与讨论班过程中总结而成。主要参考如下文献:

- [1] J. Sakurai and J. Napolitano, Modern Quantum Mechanics.
- [2] D. Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics.
- [3] J. Townsend, A Modern Approach to Quantum Mechanics.
- [4] L. Ballentine, Quantum Mechanics: A Modern Development.

其余参考资料附于脚注或文末。

1 量子力学的基本思想

1.1 量子态及其所处空间

在量子力学中,粒子的运动信息"储存"在量子态 $|\Psi\rangle$ 中。几何上, $|\Psi\rangle$ 对应 N 维 Hilbert 空间 1 中的一点,其中 $N \leq \infty$. 这一假定即为量子态公设。

除此之外,约定 $\lambda |\Psi\rangle$ 与 $|\Psi\rangle$ (其中 $\lambda \in \mathbb{C}\setminus\{0\}$) 表示同一物理状态。因此,准确地说,量子态实际并不对应 Hilbert 空间中的点,而是其中经过原点的射影直线(projective rays)。在此等价关系下,物理的量子态实际是射影 Hilbert 空间中的元素。但是,为了计算方便,往往在 Hilbert 空间中考虑 $|\Psi\rangle$,最终再将其单位化。

事实上,态的时间演化正是以相因子表示的,故难以在射影 Hilbert 空间中方便地处理;因此,我们需要线性 Hilbert 空间上的量子力学。(同时,存在某些不依赖标架选取的几何相,它们具有可观测效应——例如著名的 AB 效应即是如此,这点亦不能忽略。)

在 Hilbert 空间中,可通过标准内积的定义引入其对偶空间。须注意,对偶空间中元素的矩阵表示对应原空间中矩阵的共轭转置,例如,

$$\lambda \ket{\Psi} \xleftarrow{\mathrm{dual}} \lambda^{\dagger} \bra{\Psi}$$

对数量 λ 而言, $\lambda^{\dagger} = \lambda^* = \bar{\lambda}$.

^{*}邮箱: bryanlai@pku.edu.cn 指导老师: 马伯强

¹完备的内积空间;可以形象地认为,该空间对极限运算封闭。

1.2 可观测量作为算符

从量子态中"提取"粒子的运动信息(即可观测量,observables),需要通过相应的算符来实现。一般来说,可观测量均可用算符表示,然算符并不全对应可观测量。下面约定用 X,Y,\cdots 表示一般的算符,而 A,B,\cdots 表示可观测量对应的算符;最常见的算符即所谓投影算符:

$$\pi_{a'} = |a'\rangle\langle a'| \tag{1.1}$$

叠加投影算符即可得到 $\mathbb{1} = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|$. 这实际上表征了基底组 $\{|a'\rangle\}$ 的完备性。注意,基底组的完备性与空间的完备性是不同的概念,应当区分²。

对于具有连续谱的算符 x 而言, 自然有:

完备性:
$$\int \mathrm{d}x\,|x\rangle\!\langle x|=1$$
 值加系数 \sim 分布函数:
$$\int \mathrm{d}x\,|x\rangle\,\langle x|\Psi\rangle=|\Psi\rangle$$

常说的波函数,实际正是 $|\Psi\rangle$ 在坐标基 $\{|x'\rangle\}$ 上的分布,或者说,有:

$$\Psi(x,t) = \langle x|\Psi\rangle \tag{1.3}$$

对有限维线性空间,基底的正交归一性可简洁地表示为: $\langle \xi_i | \xi_j \rangle = \delta_{ij}$. 对于无穷维空间,类似的关系通过考察展开式 (1.2) 得到; 以 $\langle x' |$ 作用,我们发现,对不可数无穷维空间,有:

正交归一性:
$$\langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'')$$
 (1.4)

可数无穷维空间的情形与有限维完全一致,即 $\langle a'|a''\rangle = \delta_{a'a''}$.

一般来说,算符的作用可以表示为积分变换:

$$\langle x|A|\Psi\rangle = \int dx' \langle x|A|x'\rangle \langle x'|\Psi\rangle = A\{\Psi\}_{(x,t)}$$
 (1.5)

等式最右边的 A 是等式左边算符在坐标表象波函数空间中的对应(表示),两者的意义不尽相同,但在不至混淆的情况下,我们往往使用同一符号 3 。不难发现,

$$\langle x|AB|\Psi\rangle = A\Big\{B\{\Psi\}\Big\}_{(x,t)}$$
 (1.6)

注意到,对连续谱而言,基底 $|x\rangle$ 实际已经超出了 Hilbert 空间的范畴——因为它的模长是不可归一化的,其所谓"正交归一"式的右边是一 δ 分布,而非单位元 1. 数学上,将其所在的空间严格化为扩充(rigged) Hilbert 空间 4 。

²参见 Griffiths ^[2] 形式理论(Formalism)部分的脚注。

³是为 abuse of notation, 即记号滥用。

 $^{^4}$ 参见 Ballentine $^{[4]}$. 并没有统一约定的翻译,译为作弊版 Hilbert 空间也未尝不可!

1 量子力学的基本思想

3

进一步,我们可以写出坐标表象 (representation) 下内积的表达式:

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \int dx \langle \Phi | x \rangle \langle x | \Psi \rangle = \int dx \, \Phi^{\dagger}(x) \, \Psi(x)$$
 (1.7)

由此可见,建立在抽象线性空间上的矩阵力学与建立在函数空间上的波动力学是实际等价的。利用泛函分析的理论,对抽象 Hilbert 空间的严格描述可通过研究平方可积函数空间 L^2 或 l^2 实现。

观测值对应可观测量的本征值;为符合物理实际,可观测量应当始终有实本征值。这对可观测量的算符形式造成了很强的限制。事实上,可以进一步引入一项基本假定:

可观测量是自伴算符 / 厄米算符

这便自然保证了其本征值满足实际要求5。

1.3 动量算符的形式定义

为了给出动量算符在矩阵力学框架下的形式定义,我们应用分析力学的思想,考察系统的空间 平移对称性。依然以一维的情形为例,对经典情形而言,空间平移 $x \to x + \delta x$ 导致:

$$L'(x, \dot{x}, t) \simeq \left(1 - \delta x \frac{\partial}{\partial x}\right) L(x, \dot{x}, t) = L(x, \dot{x}, t) - \delta x \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}$$
 (1.8)

记 $L' = L - \frac{dF}{dt}$, 则 $F = p \delta x$ 是空间平移这一正则变换的生成函数。

对量子情形,设空间平移算符 T 对态矢的作用为:

$$T(\delta x)|x\rangle = |x + \delta x\rangle \tag{1.9}$$

由此,将任意的态 $|\Psi\rangle$ 用 $|x\rangle$ 表示,不难导出:

$$T(\delta x) |\Psi\rangle = \int dx |x + \delta x\rangle \langle x|\Psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x - \delta x|\Psi\rangle,$$

$$\langle x|T(\delta x)|\Psi\rangle = \langle x - \delta x|\Psi\rangle,$$
(1.10)

要求 T 作用前后态矢应当保持归一化,这自然给出幺正性:

$$T^{\dagger}T = 1 \tag{1.11}$$

除此之外,还应有连续性: $T(\delta x) |\Psi\rangle \xrightarrow{\delta x \to 0} |\Psi\rangle$,即:

$$\lim_{\delta x \to 0} T(\delta x) = 1 \tag{1.12}$$

同时,不难理解,平移应当可以复合:

$$T(\delta x') T(\delta x) = T(\delta x + \delta x') \tag{1.13}$$

 $^{^5}$ 某些教材还对自伴性与厄米性进行了更细致的区分,两者的差异主要与算符的定义域有关,参见 Ballentine $^{[4]};$ 这主要是一个数学严格性的问题,本文不作额外的区分。

为写出 T 的具体形式,考虑其对 δx 的展开,类比 (1.8),有:

$$T(\delta x) = 1 - \delta x \frac{\{?\}}{\hbar} + \cdots$$
 (1.14)

其中,引入分母 \hbar 意在使分子具有动量量纲。这里我们力图以独立于旧量子论的办法导出运动方程,因此 \hbar 的物理意义也并没有被完全确定,只是知道它是一个具有作用量量纲的常数。

将上面这一含有未知算符 {?} 的表达式代入 (1.11), 得到:

$$T^{\dagger}T = 1 - \delta x \frac{\{?\}^{\dagger} + \{?\}}{\hbar} + \cdots$$
 (1.15)

显然,(1.11) 成立的必要条件是 $\{?\}$ 的反厄米性。再次类比 (1.8),自然可设 $\{?\} = ip$,p 为空间平移的生成元,其代表的对称性与经典力学中的动量完全一致;因此,我们不妨将其看作量子世界中的动量(算符)。当然,应当强调,这样定义的动量与经典动量的一致性是需要论证的,这将在后文通过经典极限实现。

将波函数按坐标表象展开, 我们发现:

$$T(\delta x) |\Psi\rangle = \int dx |x + \delta x\rangle \langle x|\Psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x - \delta x|\Psi\rangle$$
 (1.16)

综上所述, 我们得到两个关键的表达式:

$$\langle x|T(\delta x)|\Psi\rangle = \langle x - \delta x|\Psi\rangle, \quad T(\delta x) = \mathbb{1} - i\frac{p}{\hbar}\delta x + \cdots$$
 (1.17)

联系两式,我们可以解出与波动方程一致的动量算符表示:

$$\langle x|p|\Psi\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \langle x|\Psi\rangle$$
 (1.18)

再次比较 (1.8), 我们发现,经典动量其实也可与算符 $\frac{\partial}{\partial x}$ 联系在一起;几何上, $\frac{\partial}{\partial x}$ 正是一维空间中的 Killing 矢量场,即保长变换的生成元。

考察动量本征态 $|p\rangle$ 在坐标表象下的表示,只需取 $|\Psi\rangle = |p\rangle$,得一次微分方程组,解得:

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar} \tag{1.19}$$

系数是额外通过要求 $\{|p\rangle\}$ 正交归一得到的。利用 (1.6), 可得到量子力学中的正则对易关系:

$$[x,p] = i\hbar \tag{1.20}$$

2 态的时间演化

薛定谔方程描述的是量子态的时间演化——这一章中我们打算参考引入动量的方式,用较为 形式的办法导出薛定谔方程。

2.1 时间演化算符

考虑时间演化算符 $U(t;t_0)$, 它将 t_0 时刻的态矢与 t 时刻的态矢联系在了一起; 若以波动力学的观点考察之,可见其与方程对应的格林函数(传播子)有关。其定义式为:

$$U(t;t_0)|\Psi(t_0)\rangle = |\Psi(t)\rangle \tag{2.1}$$

类似于空间平移算符, U 也应当满足如下基本条件:

$$U^{\dagger}U = 1, \tag{2.2}$$

$$\lim_{t \to t_0} U(t; t_0) = 1, \tag{2.3}$$

$$U(t;t')U(t';t_0) = U(t;t_0), (2.4)$$

同样, 考虑 U 对时间 δt 的展开, 有:

$$U(t + \delta t; t) = 1 - i \frac{H}{\hbar} \delta t + \cdots$$
 (2.5)

这里借用了同样的常量 ħ 使得 H 具有能量量纲。

类似可知,H 是自伴算符,称为时间平移的生成元,考虑其在经典力学中的对应,也称之为哈密顿量。综合上述讨论,我们得到:

$$\delta U(t;t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}H\,\delta t\right)U(t;t_0) \tag{2.6}$$

其中, $\delta U(t;t_0) \sim (U(t+\delta t;t)-U(t;t))U(t;t_0) = (U(t+\delta t;t)-1)U(t;t_0)$.

由此,可以定义 U 的时间微商 $\frac{\delta U}{\delta t}$, 得到:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t; t_0) = H(t) U(t; t_0)$$
 (2.7)

这正是算符满足的薛定谔方程。

将算符方程作用到态 $|\Psi(t_0)\rangle$ 上, 便得到:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \tag{2.8}$$

这便是一般形式的薛定谔方程。

薛定谔方程是 $F=m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}$ 在量子力学中的对应。注意到,薛定谔方程是关于时间 t 的一阶方程,而牛顿第二定律却是二阶方程;这是因为,量子态 $|\Psi\rangle$ 既包含了粒子的位置信息,又包含了粒子的动量信息; $\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle$ 已经包含了经典的加速度,因此无需更高阶的导数。类似地,分析力学中的哈密顿一雅可比方程也仅包含对时间的一阶微分,两者的道理是一致的。

可以进一步追问: 为何经典运动方程 F = ma 仅仅是关于时间的二阶微分方程? 这里尝试由两个角度加以分析。

首先, F = ma 仅在经典范畴内适用; 现在看来, 有很多系统必须以高阶微分或者更高级的数学工具进行描述, 例如著名的辐射阻尼问题。

其次,考察经典的保守系统,时间反演不变性要求方程只能包含对时间的偶数次微分;进一步 考察 F=0 的平凡情形,我们发现,二阶方程足以给出正确的描述(匀速直线运动),而高阶方程 给出了不存在的发散解。事实上,力的定义源自弹簧 F=-kx 和重力 F=mg,对于这类经典问 题而言,二阶的运动方程是充分而必要的数学形式。

2.2 算符的函数

在讨论哈密顿算符的具体形式之前,由于 H = H(x, p, t),我们有必要补充说明何为算符的函数。只要函数关系充分地好,我们总可以将其泰勒展开;此外,若这一函数的宗量是自伴算符(对应某一可观测量 A),则可以将其表示为投影算符的叠加:

$$A = \sum_{a'} a' |a'\rangle\langle a'| \tag{2.9}$$

从而将 f(A) 定义为其关于本征值的函数:

$$f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n A^n = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \left(\sum_{a'} a' |a'\rangle\langle a'| \right)^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} c_n \sum_{a'} (a')^n |a'\rangle\langle a'|$$

$$= \sum_{a'} \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cdot (a')^n |a'\rangle\langle a'|$$

$$= \sum_{a'} f(a') |a'\rangle\langle a'|$$
(2.10)

对 H 而言,往往其对 x 的依赖可以分离出来,使得:

$$H(x, p, t) = T(p) + V(x, t)$$
 (2.11)

T(p), V(x,t) 分别为系统的动能、势能函数。

一般来说,H(x,p,t) 同时依赖于不对易的 (x,p); 为保证 H 是可观测量,其关于 (x,p) 的函数形式不可以是任意的,否则 H(x,p,t) 可能不是自伴算符。具体而言,若 $f=f(A,B,\ldots)$,且 A,B,\ldots,f 均是可观测量,则 f 的多项式展开之各阶项必须是对称化的;例如,一阶项:

$$\frac{\partial f}{\partial A} \cdot \delta A \longrightarrow \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial f}{\partial A}, \delta A \right\} \tag{2.12}$$

即可用反对易括号 $\{A,B\}=AB+BA$ 代替简单的相乘。在后续计算当中,可进一步将 $\{\cdot,\cdot\}$ 化为对易括号 $[\cdot,\cdot]$ 在加上一个"正常项" $\frac{\partial f}{\partial A}\cdot\delta A$,以便于分析讨论。

2.3 经典极限

前几节中,我们从系统的对称性出发,导出了一套平行于经典力学的微观动力学体系;然而,这一切推到都是抽象的——我们并不能确悉 H 的函数形式,甚至不能严密地说明微观动量 p,能量 H 与宏观物理量的一致性。

接下来,我们将尝试讨论所谓经典极限,从而给出 p,H 在经典物理中的对应量。这一过程通过考察可观测量期望值的时间演化来实现——考虑 $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$,对三部分分别微分,得到:

$$\frac{\mathrm{d}\langle A \rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \left\langle [A, H] \right\rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \left\langle [A, H] \right\rangle / \left\langle [x, p] \right\rangle$$
 (2.13)

对前后两个 |Ψ⟩ 的时间微分可以用薛定谔方程代入,最终给出上式。

不难看出,上式在经典力学中的对应是:

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial A}{\partial t} + [A, H]_{x,p} \tag{2.14}$$

其中 $[,]_{x,p}$ 指泊松括号。

对自由粒子而言,其时间平移特性与空间位置无关,自然有 $\frac{\partial H}{\partial x}=0$,亦即可取 $V(x)\equiv 0$;同时,还有 $\frac{\mathrm{d} H}{\mathrm{d} t}=\frac{\partial H}{\partial t}=0$.这都与经典情形完全一致。在动量表象下考察,有:

$$\begin{split} \Big\langle p \Big| [x, H(x, p, t)] \Big| \Psi \Big\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \bigg(H \Big(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, p, t \Big) \, \langle p | \Psi \rangle \bigg) - H \Big(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, p, t \Big) i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \, \langle p | \Psi \rangle \\ &= i\hbar \frac{\partial H}{\partial p} \Big(i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, p, t \Big) \, \langle p | \Psi \rangle \end{split}$$

也可将 H 按照 p 的级数展开,从而不依赖动量表象地得到这一结论:

$$[x, H(x, p, t)] = i\hbar \frac{\partial H}{\partial p} = i\hbar [x, H]_{x, p}$$
(2.15)

注意在上述推导中体现出的一般规律: 对于微分算符 D 而言, [D,X] = D(X); 这实际上是流形上的李导数。若 D 不是微分算符,则不然;容易举出反例: $[1,X] = 0 \neq 1(X) = X$.

将这一表达式子代回到 (2.13), 我们得到:

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p} \right\rangle \tag{2.16}$$

对动量而言, 类似有 $[p, H(x, p, t)] = -i\hbar \frac{\partial H}{\partial g} = i\hbar [p, H]_{x,p}$, 从而,

$$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle -\frac{\partial H}{\partial q} \right\rangle \tag{2.17}$$

上面两式合称为 Erhenfest 定理,它们是哈密顿正则方程在量子世界中的对应——两者的结构 完全一致。令 H 对 x,p 的依赖与经典情形相同: $H(x,p,t)=\frac{p^2}{2m}+V(x,t)$,则有:

$$\left\langle \frac{\partial H}{\partial p} \right\rangle = \frac{\partial H(\langle x \rangle, \langle p \rangle, t)}{\partial \langle p \rangle} \tag{2.18}$$

由此可见,粒子动量的经典极限就是经典动量,粒子哈密顿量的经典极限就是经典哈密顿量, 两者至多相差一个共同的比例系数——这一系数可以通过引入 ħ 来固定;也就是说,

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k \tag{2.19}$$

其中 E, p 是宏观可观测量,而 ω, k 是波函数的参量。可见,通过这一较为严格的方式,我们重新导出了德布罗意关系。

需要说明的是,(2.18) 并不总是成立,当 H 依赖于 p 的更高次幂时便会失效。当然,这种情形已偏离了经典范畴,出现问题也是不足为奇的。对 $H=\frac{p^2}{2m}+V$,取坐标表象,我们便得到了通常形式下的定态薛定谔方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (V(x) - E)\psi(x) = 0$$
 (2.20)

2.4 非相对论性量子力学中的对称性综述

由上述讨论可见,按照现代的观点,非相对论性量子力学可由基本的时空对称性——空间平 移、时间平移等——自然地导出(结合一些基本假定)。

一般来说,考虑对相空间坐标 $\xi = (x, p)$ 及时刻 t 的可逆变换:

$$(\xi, t) \xrightarrow{g} (\xi', t')$$

我们熟悉 g 有空间平移、时间平移、空间反演、时间反演等等。

其中,空间平移、时间平移这类连续对称性往往依赖于某个参数 $\delta\in\mathbb{R},\,\delta\simeq0$ 时的无限小变换可以展开为:

$$g \simeq 1 + \delta \cdot G \tag{2.21}$$

G 正是变换的生成元;如果将 g 构成的集合看成一个流形,则 G 实际上是其切空间中的元素。

注意,这里的 g, G 作用于相空间上;可以相应地考察这一变换对作用量或波函数(处于函数空间)的影响——进一步假定 g 仅关于 (x,t), 则有:

$$L'(x', \dot{x}', t') = L(x, \dot{x}, t), \quad \Psi'(x', t') = \Psi(x, t),$$

$$(x', t') = g(x, t)$$
(2.22)

化简上面诸式, 我们得到:

$$L'(x, \dot{x}, t) = L \circ g^{-1}(x, \dot{x}, t),$$

$$\Psi'(x, t) = \Psi \circ g^{-1}(x, t),$$
(2.23)

相应地,定义 Hilbert 空间 Π 上的算符 O_g ,使得 $|\Psi'\rangle=O_g$ $|\Psi\rangle$. 前面介绍的空间平移、时间演化算符都是 O_g 的实例; O_g 在坐标表象下的表示则与 $\Psi\circ g^{-1}(x,t)$ 的展开式直接相关。注意,这里出现了逆变换 g^{-1} ,这说明若将 O_g 按参数 δ 展开,则其符号将由正变负:

$$O_g = 1 - \frac{i}{\hbar} \, \delta \cdot \hat{G} \tag{2.24}$$

如前所述,引入i只是为了保证G的厄米性,从而 \hat{G} 自然是可观测量。

 g, O_g 分别作用在相空间和 \coprod 上,它们一一对应但实际不同;事实上, g, O_g 构成的变换群同构。而 G, \hat{G} 则对应变换群的切空间,除去一个比例系数外,两者自然等同;在不致混淆的情况下,往往去掉 \hat{G} 上的帽子(hat),也记为 G.

• •

一般来说,经典物理在伽利略变换下不变;所有伽利略变换(包括时空平移)构成伽利略群。取 g 为伽利略群中的元素,在此对称观点上构建的量子力学正是非相对论性量子力学。自然,若考虑洛伦兹变换,以及相应的洛伦兹群或包含时空平移的庞加莱群,我们可以构建相对论性的量子力学,乃至量子场论。

3 量子力学中的作用量

注意到,一般形式的薛定谔方程与哈密顿-雅可比方程具有极大的相似性。在经典力学中,

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(x, p, t) = 0, \quad p = \frac{\partial S}{\partial x},$$
 (3.1)

作用量函数 S = S(x,t) 通过求解方程给出。

薛定谔当年发现波动方程,正是受到了哈密顿力学中的雅克比原理/光学中的费马原理之启发。事实上,从惠更斯的波动光学到几何光学的过渡与从量子力学到经典力学的过渡是完全类似的。以[5]为主要参考文献,下面我们尝试给出这一自然过渡。

3.1 从保守系统到非保守系

回顾历史,当年薛定谔首先考虑的是保守系统(也就是 $E=H=rac{p^2}{2m}+V$)。此时,

$$\frac{\partial S(x,t)}{\partial t} = -E = \text{const.} \tag{3.2}$$

注意 E 的值一般来说是待定的; 而 $S(x,t) = S_0(x) - Et$, 方程简化为:

$$E = H\left(x, \frac{\partial S_0}{\partial x}\right) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S_0}{\partial x}\right)^2 + V(x)$$
(3.3)

注意,这里采用的是经典思路,即到目前为止,x,p,H,V等等都是实实在在的物理量,并不是算符。我们希望化简这一方程,遂考虑常用的对数代换:

$$S_0 = \hbar \ln \psi \tag{3.4}$$

这里的 \hbar 是具有作用量量纲的比例系数, 而 ψ 的物理意义尚不明朗; 这导致:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2 + \left(V(x) - E\right)\psi^2 = 0 \tag{3.5}$$

上式是关于 x, $\frac{\partial \psi}{\partial x}$ 的二次齐次方程。薛定谔的天才在于,他认为,由于能量 E 是一个待定参数,此时我们不应急于找出这一方程对任意 E 值的所有解,而应当关注其稳定解 6 。

⁶具体参见薛定谔当年的论述 [5].

因此,我们引入泛函:

$$I = \int_{\Omega} dx \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \left(V(x) - E \right) \psi^2 \right)$$
 (3.6)

并要求 $\delta I = 0$. 不难发现,变分结果给出:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (V(x) - E)\psi = 0, \qquad \frac{\partial \psi}{\partial x}\delta\psi \bigg|_{\partial\Omega} = 0$$
 (3.7)

正是定态方程;其中, ψ 与前文形式理论中引入的定态波函数一致,而此处却是源于平凡的变量代换,实际有 $S=\hbar\ln\psi-Et$.

在此基础上,薛定谔参考了德布罗意关于物质波的假定,认为此时系统可以由带时间相因子 $e^{-iEt/\hbar}$ 的另一函数 Ψ 来描述,即:

$$\Psi \propto \psi \, e^{-iEt/\hbar}, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\frac{E^2}{\hbar^2} \Psi$$
 (3.8)

注意,上述讨论中的复数仅表征相位,实际并不必要;解完全可以用实的三角函数进行表示。

联立 (3.7) 和 (3.8) 消去 E, 我们发现,此时方程将具有对时间变量的 2 阶微商,以及对空间变量的 4 阶微商。然而,前面已经说明,我们实际上并不需要 ψ 或 S 对时间的二阶微商,这将给出非物理的解。经过一番纠结以后⁷,薛定谔提出^[5],可以通过对高阶微分算子进行因式分解,或是直接考虑复方程:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \Psi \tag{3.9}$$

联立消去 E 得到对时间变量 1 阶微商、对空间变量 2 阶微商的方程:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)\Psi$$
 (3.10)

这正是通常形式下的含时波动方程。由此可见,复数在量子力学中是必要的存在⁸。此时,依然有 $\Psi \propto \psi \, e^{-iEt/\hbar}$,这里的比例系数可以是复数,带有初始相位的信息;它可以吸收到 ψ 的定义当中,使 ψ 成为一个复的、可能具有量纲的函数。进一步,为满足变分问题的边界条件,要求:

$$\|\Psi\|^2 = \|\psi\|^2 = \int_{\Omega} \Psi^{\dagger} \Psi \, \mathrm{d}x = \int_{\Omega} \psi^{\dagger} \psi \, \mathrm{d}x = 1$$
 (3.11)

在重走薛定谔之路后,我们发现,波动力学完全可以从经典力学的框架中十分自然地产生,但 须加上稳态解假定,并利用复数进行降阶。

[「]参见杨振宁先生对这一过程的精彩论述: Square root of minus one, complex phases and Erwin Schrödinger [6].

⁸具体同样参见 [6].

3.2 作用量与波函数

在使 $\Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}$ 复化后,我们某种程度上破坏了 $S = \psi$ 之间的函数关系;但是,对保守系统,我们依然有 $S = S_0 - Et$. 在此基础上,我们发现:

$$\Psi = \psi e^{-iEt/\hbar} = \psi e^{i(S-S_0)/\hbar}, \quad \frac{\Psi}{\psi} = \frac{e^{iS/\hbar}}{e^{iS_0/\hbar}}$$
(3.12)

即 $\Psi \propto e^{iS/\hbar}$. 当然,这是在保守系前提下给出的结果。对一般的系统,我们将上一节中的变量替换 $S_0 = \hbar \ln \psi$ 写成指数 $\psi = e^{S_0/\hbar}$,再更新为复的形式,即:

$$\psi(x) = e^{S_0(x)/\hbar} \longrightarrow \Psi(x,t) = \sqrt{\rho(x,t)} e^{iS(x,t)/\hbar}, \quad \int dx \, \rho(x,t) = 1 \tag{3.13}$$

在这一代换下,考虑哈密顿-雅可比方程,我们似乎再次发现了薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H(x, p, t) \Psi$$
 (3.14)

但这只是表象而已,因为上式中的 $p = \frac{\partial S}{\partial x}$,并非薛定谔方程中的微分算符 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. 好消息是,此时的 H 可取任意形式,不再受制于保守系统。

事实上,此时有:

$$p = \frac{\partial S}{\partial x} = -i\hbar \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\hbar \left(\frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial x} \right), \quad A = \sqrt{\rho(x, t)}$$
 (3.15)

注意到,第一项乘以 Ψ 后恰等于 $-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}$;关键在于第二项中的 $\left(\frac{1}{A}\frac{\partial A}{\partial x}\right)$.

事实上,第二项在**振幅** $A = \sqrt{\rho(x,t)}$ **对** x **缓变**时可以略去。直观上,这是一合理的假定;它类似于上一节中薛定谔给出的稳定解条件。考察经典的例子(粒子),如平面波解,我们可以印证这一假定的自治性;在此基础上,p 自然简化为:

$$p = \frac{\partial S}{\partial x} \simeq -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad \text{for } \Psi \simeq \sqrt{\rho(x_0, t)} e^{i(kx - \omega t + \phi)}$$
 (3.16)

由此,我们终于得到了含时波动方程:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, t\right) \Psi$$
 (3.17)

综上所述,一定条件下, Ψ 可以看作系统作用量的另一种表示;它满足的方程则是哈密顿-雅可比方程的另一种形式。这种等价当 Ψ 振幅缓变时成立(短波近似,波形接近于平面波,类似于几何光学近似),或者按薛定谔的观点——此时的解是系统的稳定解。

在这种情况下,经典和量子的描述得到了统一,这正是波动力学中的经典极限;它平行于前一章给出的形式理论中的经典极限(对应矩阵力学描述)。

事实上,哈密顿—雅可比方程实际上是薛定谔方程在 $\hbar \to 0$ 极限下的 $\mathcal{O}(\hbar)$ 阶近似。为了较为严格地说明这一事实,从薛定谔方程出发,记经典(<u>c</u>lassical)正则(<u>c</u>anonical)动量为 p_c ; 由前述计算 (3.15) 可知,单次作用动量算符 $p=-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 等价于:

$$p - p_c = -i\hbar \left(\frac{1}{A}\frac{\partial A}{\partial x}\right), \quad p_c = \frac{\partial S}{\partial x}, \quad A = \sqrt{\rho(x,t)},$$
 (3.18)

将 H 按 $\Delta p = p - p_c$ 展开; 由上可见, 展开式的阶数可由 \hbar 的次数表征。

表观上,似乎只须要求 \hbar 和 $\epsilon = \frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial x}$ 的乘积 $\hbar \epsilon$ 充分小,即可使展开式收敛。然而,由于算符非对易,展开结果中的 \hbar 和 ϵ 次数并不一致,因此必须要求 \hbar 充分小,展开式才能收敛。

具体而言,对一般的波函数 $\Psi = \sqrt{\rho} \, e^{iS/\hbar}$,将其代入薛定谔方程并化简,整理可得, $\mathcal{O}(1)$ 正是哈-雅方程, $\mathcal{O}(\hbar)$ 则是流守恒方程。由于 i,\hbar 结伴出现,还可以将结果分为实部和虚部加以考察,其中实部:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H_c - \frac{1}{2} \,\hbar^2 \left(\epsilon^2 + \epsilon \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial \epsilon}{\partial x} + \frac{1}{3} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \frac{\partial^2 H_c}{\partial p_c^2} + \mathcal{O}(\hbar^4), \quad \epsilon = \frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial x}$$
(3.19)

其中, $H_c = H(x, p_c, t)$, 这里 p_c 是数量, 而 x 是算符。

注意,上述计算过程中考虑了算符的不对易性和微分特性;例如,计算二阶项时,需要将三项乘积 $\frac{\partial H_c}{\partial p_c}\cdot\Delta p\cdot\Delta p$ 对称化,括号中的各项均源于此。类似地,约去了 $i\hbar$ 等共同系数后,虚部为:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \frac{\partial H_c}{\partial p_c} \right) + \mathcal{O}(\hbar^2) = 0 \tag{3.20}$$

作为例子,考虑 $H = \frac{p^2}{2m} + V(x,t)$,有精确方程:

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = H_c - \frac{\hbar^2}{2m} \left(\epsilon^2 + \frac{\partial \epsilon}{\partial x} \right) \tag{3.21}$$

这一方程与 $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right) \Psi$ 完全等价。

 $\hbar \to 0, \epsilon \to 0$ 极限下,按经典办法求解 $-\frac{\partial S}{\partial t} = H_c$,我们将得到薛定谔方程的行波解;因此,经典极限可以自然地用以计算散射问题。这一求解薛定谔方程的思路又称为 WKB 近似。对于定态问题,叠加行波解,考虑边界附近的渐进行为,即可得到满足边界条件的驻波解。

3.3 非经典世界的基本图像

求解薛定谔方程,我们可以很容易地得到一些不满足经典极限的解。然而,实验证实,薛定谔方程给出的是正确的描述。这表明,在非经典情形下,哈密顿-雅可比方程失效,此时我们就应当以薛定谔方程取而代之。这便是玻尔互补原理的核心思想。

由此可见,在量子力学的建立过程当中,光学给予了我们十分丰富的启示。光学和力学之间的 对应关系由下表给出:

光学	力学
光程	作用量泛函
费马原理	最小作用量原理
光线微分方程	拉氏方程、哈雅方程等
波动方程	薛定谔方程
衍射积分	路径积分

4 三维空间中的量子力学

量子力学在描述原子的过程中获得了巨大的成功。这里我们简要讨论,如何建立三维空间中的量子力学,并考察其中的几何与对称性。

4.1 动量与角动量

基于前述讨论,我们可以直接将经典的动能视为算符,从而得到:

$$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad \langle x|\mathbf{p}|\psi\rangle = -i\hbar\mathbf{\nabla}\langle\mathbf{r}|\psi\rangle$$
 (4.1)

对具有旋转对称性的问题,我们可以参考研究行星运动时采用的技巧,即引入角动量:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \tag{4.2}$$

升级为算符之后,所谓的矢量应当简单地理解为三个算符的平庸组合。对 \mathbf{x} , \mathbf{p} , 其三个分量互不干涉,分量与分量为相容可观测量;对于 \mathbf{L} , 由正则对易关系 $[r_j,p_k]=i\hbar\,\delta_{jk}$, 可得:

$$[L_k, L_l] = i\hbar \,\epsilon^{klm} L_m \tag{4.3}$$

角动量和旋转的关系完全类似于动量和平移的关系。

可以推测,角动量算符 \mathbf{L} 应当仅包含对方向角 \mathbf{n} 的依赖而与 r 无关;事实上, \mathbf{L} (在坐标表象、笛卡尔坐标下的任一分量) 是转动的生成元,这可由定义出发严格证明——不妨考虑 $R_z(\delta\phi)$,

$$R_{z}(\delta\phi) \equiv e^{-i\frac{L_{z}}{\hbar}\delta\phi}$$

$$= \mathbb{1} - i\frac{L_{z}}{\hbar}\delta\phi + \cdots$$

$$= \mathbb{1} - \delta\phi \frac{i}{\hbar}(xp_{y} - yp_{x}) + \cdots$$

$$= \mathbb{1} + T_{y}(x\,\delta\phi) - T_{x}(y\,\delta\phi) + \cdots$$

$$(4.4)$$

注意,这里的 $\delta\phi$ 看作系数 (参数) 而非算符,可以自由移动;将 $R_z(\delta\phi)$ 作用到 $|\mathbf{r}\rangle = |x,y,z\rangle$ 上,确实得到了绕 z 轴的无限小转动:

$$R_z(\delta\phi)|x,y,z\rangle \simeq |x-y\,\delta\phi\,,y+x\,\delta\phi\,,z\rangle$$
 (4.5)

 \mathbf{L} 依赖于 \mathbf{n} 而独立于 r 的事实也可通过在坐标表象下的直接计算加以验证:

$$\mathbf{L} = -i\hbar \,\mathbf{r} \times \mathbf{\nabla}$$

$$= -i\hbar \,\mathbf{r} \times \left(\hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\boldsymbol{\phi}} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}\right)$$

$$= -i\hbar \,\hat{\mathbf{r}} \times \left(\hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\boldsymbol{\phi}} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}\right)$$

$$= -i\hbar \left(\hat{\boldsymbol{\phi}} \frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}\right)$$

$$(4.6)$$

可见确实仅与 $\mathbf{n} \sim (\theta, \phi)$ 有关。

转换到笛卡尔坐标, 我们得到:

$$L_z \sim -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} \tag{4.7}$$

结合 L_x, L_y , 我们发现这正是球面上的 Killing 矢量场——球面上保长变换的生成元 (除去一个 $-i\hbar$ 系数)。事实上,球面上的保长变换正是 \mathbb{E}^3 中的旋转,构成 SO(3) 群;等价地, L_k 的形式可以由 $R_z^{-1}(\delta\phi)$ or 的形式得到,只需取球坐标系即可。

其实,此前我们已得到了平移变换的生成元 $\frac{\partial}{\partial x}$,而旋转正是另一种基本的保长变换; L_x, L_y 是沿赤道上x, y轴的旋转,对应极点附近的平移。

 \mathbf{L} 完全不依赖 r, 这表明,仅仅通过引入角动量算符,我们便成功地实现了对 T 的分离变量,其中 p_r^2 成分仅有对 r 的依赖,而 L^2 成分仅有对方向 \mathbf{n} 的依赖。

事实上, L^2 的本征函数——球谐函数 Y_l^m 构成了球面 S^2 上的函数基底,正如 $e^{im\phi}$ 构成了圆环 S^1 上的一组标准正交基;球面上的函数(或任意函数对方向的依赖成分)可用这组基底展开,正如圆环上的傅立叶级数(注意, $\mathbb R$ 上的周期函数可以看作圆环上的一般函数)。

然而,选取球面上的函数基底显然比较困难;往往需要指定一个特殊方向为z轴,球坐标正是这样建立得到的。 L^2 非零本征值对应的子空间存在简并现象(这是必须的,同一大小的角动量可以具有不同的"方向"),必须再确定一个规则,以理清简并子空间中的基矢。如果选定了z轴,考虑 L^2, L_z 的共同本征矢,便可实现上述目标。数学上,这依赖于两者的相容性:

$$[L^2, L_j] = 0 (4.8)$$

我们甚至可以构造沿任一方向 $\mathbf n$ 的角动量算符 $L_{\mathbf n} = \mathbf n \cdot \mathbf L = v^j L_j$, 这里的 $\mathbf n$ 不是算符,只是一个系数组合;同样有 $[L^2, L_{\mathbf n}] = 0$.

4.2 角动量的代数理论

我们知道, 角动量算符关于对易运算封闭, 即 L 的分量构成李代数。在此基础上,参考一维谐振子的求解, 我们可以用(几乎)完全代数的办法,得到其本征值。

事实上,这里我们不要求 $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$,而是直接通过对易关系定义角动量算符 \mathbf{J} :

$$[J_k, J_l] = i\hbar \,\epsilon^{klm} J_m \tag{4.9}$$

可以一般性地证明,代数上允许 J_z 可以具有 1,2,3... 个可能的取值 9 ,对应角动量量子数:

$$2j + 1 = 1, 2, 3, \dots$$
 or, $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ (4.10)

对轨道角动量,即 $J = L = r \times p$,实际只能取 $j \in \mathbb{Z}$.事实上,

$$L_z = xp_y - yp_x \tag{4.11}$$

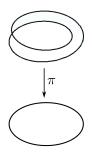
可以通过配方(实际上应当是正则变换,因为我们要保持对易括号不变),使得 L_z 具有两个谐振子的哈密顿量之差这种形式¹⁰。因此 L_z 必须具有整数本征值,从而 $j \in \mathbb{Z}_+$.

之所以得到了整数、半奇数两组结果,是因为计算的基础——角动量的对易关系——不仅仅对应 SO(3) 群的李代数,还同时对应 SU(2) 的李代数; SO(3) 群和 SU(2) 群本身的结构不尽相同,但其对应的李代数(切空间)却是一致的。

具体而言,注意到 SO(3) 连续地依赖于三个实参数(例如,三个欧拉角),它实际上是一个三维流形; R_k 或 J_k 可以看作其切空间的基底。SU(2) 也是如此;事实上,有:

$$SO(3) \subset SU(2)$$
, $\pi \colon SU(2) \to SO(3)$, 局部微分同胚 (4.12)

 π 是一个二对一的映射,即 SU(2) 是 SO(3) 的双重覆盖(二页复叠)¹¹。局部上的一致性意味着对易关系 $[J_i,J_k]=i\hbar\,\epsilon^{jk\ell}J_\ell$ 同样适用于 SU(2), 这便是自旋对应的对称性。



双重覆盖的直观理解

注意,半奇数的 j 值不再对应 \mathbb{E}^3 中的旋转,因此难以直观地想象;但是,我们其实可以强行将其表示为推广的球谐函数。

⁹证明略微繁琐,参见 Griffiths ^[2].

¹⁰具体见 Ballentine [4].

¹¹更为详细的介绍可以参见刘川老师的《理论力学》讲义;实际上,SU(2)还是万有复叠空间,这意味着它是可能复叠SO(3)的"最大"空间(同时还是单连通的)。也就是说,角动量对易关系至多给出SU(2)群。

5 总结

一般来说, Y_j^m 具有相因子 $e^{im\phi}$; 当 j,m 为半奇数时,关于 ϕ 的周期不再是 2π , 而是 4π . 也就是说,推广的球谐函数有如下性质:

$$Y_j^m|_{\phi=4\pi} = Y_j^m|_{\phi=0},$$
 $j: 半奇数$ $Y_j^m|_{\phi=2\pi} = -Y_j^m|_{\phi=0},$ $j: 半奇数$

这一图景与复变函数中的多值特性类似;单值化的 Y_j^m 定义在 $\theta \in [0,\pi]$, $\phi \in [0,4\pi]$ 的"双球面"上;若限制 $\phi \in [0,2\pi]$,则 Y_j^m 可以看作球面上的二值函数 12 。一个经典的说法是,角动量 $\frac{1}{2}$ 意味着要"转两圈"才能回复原位;这里给出了这一说法的严格表述—— ϕ 改变 2π ,波函数变号; ϕ 要改变 4π ,波函数才会回复原值。

综上所述,上述计算实际上得到了 SU(2) 群的表示;现在看来,似乎只有 $j \in \mathbb{Z}_+$ 代表的是物理的转动,半奇数的情形似乎没有物理意义。然而,令人惊喜的是,后来我们发现,费米子的内禀角动量——即自旋——恰可由这一办法描述。

5 总结

本文归纳了(初等)量子力学中的各类直观图像,主要观点有:

- 1. 量子态是射影 Hilbert 空间中的元素,而其动力学在 Hilbert 空间中给出;可观测量则是 Hilbert 空间上的自伴算符。
- 2. 运动方程——薛定谔方程可以通过考察时空平移对称性形式地写出,其确切的物理意义可以通过经典极限加以确认。
- 3. 通过与光学的类比,我们可以更深刻地理解薛定谔方程作为"波动方程"的物理图像;经典极限实际上正如几何光学极限,经典轨迹正如光线一般,只在特定条件下适用。
- 4. 轨道角动量与旋转群 SO(3) 密切相关,而数学上 SU(2) 对 SO(3) 的复叠自然给出了一般的半整数角动量量子数,其对应的波函数可视为球面上的二值函数。

从这些直观图像出发,可以自然引出一些初等量子力学中尚未涉足的话题——例如,相对论性量子力学、路径积分表述、SU(2)的表示乃至量子场论等¹³,期待在后续学习当中进一步加以探究。



本文采用 CC BY-NC-SA-4.0 许可协议。

欢迎转载,转载需注明出处,且禁止用于商业目的。



¹²课后补充: 参见 [7], 即 arXiv:math-ph/9810001, Fermion Quasi-Spherical Harmonics.

¹³参见刘川老师《量子场论》中关于洛伦兹对称性、SU(2)对称群的描述。

参考文献 17

参考文献

[1] J. Sakurai and J. Napolitano, Modern Quantum Mechanics (Addison-Wesley, 2011).

- [2] D. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*, Pearson international edition (Pearson Prentice Hall, 2005).
- [3] J. Townsend, A Modern Approach to Quantum Mechanics (University Science Books, 2012).
- [4] L. Ballentine, Quantum Mechanics: A Modern Development (World Scientific, 1998).
- [5] E. Schrödinger, Annalen der physik **385**, 437 (1926).
- [6] C. N. Yang, in Selected Papers of Chen Ning Yang II: With Commentaries (World Scientific, 2013) pp. 94–105.
- [7] G. Hunter, P. Ecimovic, I. Schlifer, I. M. Walker, D. Beamish, S. Donev, M. Kowalski, S. Arslan, and S. Heck, Journal of Physics A: Mathematical and General **32**, 795 (1999).