



北京大学

本科生学位论文

题目：量子力学之经典对应

[private release]

姓名：W. X. Lai

学号：1500066666

院系：物理学院

专业：物理学专业

研究方向：理论物理方向

导师：吴飙教授

二〇一九年五月

版权声明

任何收存和保管本论文各种版本的单位和个人，未经本论文作者同意，不得将本论文转借他人，亦不得随意复制、抄录、拍照或以其他方式传播。否则一旦引起有碍作者著作权之问题，将可能承担法律责任。

摘要

所谓经典极限或经典对应，即要求量子理论在特征参数的相应极限下（如普朗克常量 $h \rightarrow 0$ 时）应当回归、还原到经典情形。这一朴素的想法早在 1920 年即由 Niels Bohr 以所谓“对应原理”的形式^[1]提出，作为检验量子理论合理性的关键判据；近百年来，随着现代量子力学及量子场论的建立，经典对应的形式与内涵不断得到扩充。事实上，由于量子物理中以测量问题为代表的若干基础问题至今尚待解决，经典对应——尤其是量子系统向经典过渡阶段的现象及其原理——依旧是讨论量子物理时的核心话题。

本文基于现代量子力学的形式理论及其发展过程，试图对经典对应的现有理论及发展前沿作一简要综述。第一部分含第一、二章，主要由形式理论出发，立足于 Eugene Wigner 主张的对称性视角^[2]，介绍了由经典对称性出发导出量子动力学、运动学的理论框架的基本过程，并概述了对称性及经典对应在量子场论中的核心地位。

第三章则基于 Schrödinger 方程及其特征，探讨了经典作用量在量子力学中的意义，由此讨论了经典对应的一种基本形态——几何光学近似，并通过经典对应的方式自然地导出了 Feynman 路径积分表述。与之相对，第四章则重点讨论了经典极限的另一表现形式——相干态，并以三势阱玻色子^[3,4]这一具体体系为例，介绍了其在量子混沌等前沿领域研究中的应用。

关键词：量子力学，经典对应，形式理论，量子混沌

On the Classical Limit of Quantum Mechanics

Bryan Lai (Physics Major)

Directed by Prof. Biao Wu

ABSTRACT

Classical limit (or classical correspondence) suggests that a quantum theory should always recover its classical behavior under certain limit of some characteristic parameter (e.g. Planck's constant $\hbar \rightarrow 0$). This concept was formulated by Niels Bohr as *correspondence principle*, in as early as 1920^[1], to be a reasonable criterion for any realistic quantum theory.

Based on the formal theory of modern quantum mechanics and its development, this thesis attempts to summarize the current theory and ongoing research about quantum-classical correspondence. The first part contains chapter I and II, which gives a formal derivation of the kinematics and dynamics of quantum theory based on the correspondence of classical symmetries. It summarizes the symmetry proposal by Eugene Wigner^[2], where the essential value of geometry and classical limit is clearly emphasized.

Following the basic properties of Schrödinger equation, chapter III intends to extract the meaning of classical action in quantum mechanics, which leads to a basic form of classical limit: geometric optics approximation, and by classical correspondence naturally leads to the Feynman path integral formulation of quantum mechanics. In contrast, chapter IV discusses another form of classical limit: the coherent state. By examining the case of a triple-well bosonic system, this chapter serves as an introduction of quantum-classical correspondence in current research, such as the study of quantum chaos.

KEYWORDS: quantum theory, classical limit, quantum formalisms, quantum chaos

目录

第一章 引言	1
1.1 量子态及其所处空间	2
1.2 测量与不确定性原理	3
第二章 形式理论及其经典来源	7
2.1 动量算符的形式定义	7
2.2 时间演化与 Schrödinger 方程	9
2.3 形式理论的经典极限	11
2.4 量子力学中的对称性综述	13
第三章 经典力学与量子力学中的作用量	17
3.1 从分析力学中发现 Schrödinger 方程	17
3.2 作用量、波函数与准经典近似	19
3.3 光学极限的基本图像	22
3.4 路径积分表述	23
第四章 相干态的动力学演化	31
4.1 谐振子系的量子力学	31
4.2 相干态与动力学对称性	34
4.3 可积与混沌体系的相干态演化	37
4.4 利用 BEC 研究混沌体系的经典对应	39
第五章 总结	47
参考文献	49
附录 A 时间反演对称性简介	53
附录 B 三阱 BEC 系统的数值模拟	55
致谢	57

第一章 引言

1913 年, Niels Bohr 通过额外引入氢原子轨道的量子化条件 [5], 克服了 Rutherford 行星原子模型的辐射失稳疑难, 并成功地解释了氢原子的分立光谱。在讨论这一模型的基本特征时, Bohr 指出, 当能级量子数 $N \gg n$ 跃迁级数时, 系统的行为与经典电动力学的描述一致。随后 Bohr 将这一观点总结为所谓**对应原理** (correspondence principle), 即在大量子数极限下, 系统的表现应当回归经典。

对应原理作为一朴素的信念, 在量子力学的发展过程中起到了显著的指导作用。所谓经典极限 (classical limit) 或经典对应 (classical correspondence) 可视为对应原理在形式和定量上的丰富, 这一方法与形式理论的建立、近似手段的发展以及具体体系的研究都有重要的联系。事实上, 1926 年 Erwin Schrödinger 关于其波动方程的诠释 [6] 正是基于光学极限, 而随后发展的 WKB (Wentzel–Kramers–Brillouin) 近似 [7–9] 则是据此图像自然得到的准经典近似方法。

随后, Paul Dirac 与 John von Neumann 等人采用严谨的语言与简洁的记号对量子力学进行了重新组织 [10, 11], 这一形式理论 (mathematical formalism) 使量子力学抽象化为关于 Hilbert 空间及其算符的研究。表面上, 将波函数抽象为 Hilbert 空间中的量子态似乎对讨论经典图像造成了一定的困难; 不过, 数学上的抽象使我们得以清晰地比较量子力学与分析力学的对应。事实上, 根据几何 (对称性) 上的经典对应, 我们可以强有力地限制量子力学的具体形式; 这一思路最早由 Eugene Wigner 倡导 [2], 并深刻地影响了量子力学的发展。

本文的讨论并未完全遵循历史的轨迹, 而是首先从形式理论出发, 借助其简洁的记号、利用经典对称性的对应自然地给出量子力学的运动方程, 以及关键的 Ehrenfest 定理。在此基础上, 进一步探讨作用量在量子力学中的意义, 从而引出准经典近似与路径积分表述。

最后, 我们试图介绍经典对应方面的研究前沿。众所周知, 直到如今, 量子—经典过渡时的诸多重要疑难仍尚无定论, 其中最具有代表性的正是所谓测量问题 (measurement problem), 即如何处理波函数的坍缩 (collapse)。由此引出的一系列课题, 如所谓弱测量 (weak measurement)、退相干 (decoherence)、量子混沌 (quantum chaos) 等则是现今研究的重点。本文试图通过考察相干态在三势阱中的演化 [3, 4] 这一具体实例, 探讨这一方向的基本研究手段, 以及尚待研究的问题。

下面我们首先归纳量子力学形式理论的基本构造（参考 [12–14]），并以此作为本文的记号约定。在此基础上我们将概述量子力学中的测量，这是讨论经典对应的重要动机；不过，测量问题本身将不是本文讨论的重点。

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，而量子态 $|\Psi\rangle$ 生活在完备^①的内积空间—— N 维 Hilbert 空间当中，其中 $N \leq \infty$. 适当选取基底后，可将量子态展开为基底的线性组合，组合系数正是波函数；以一维非相对论情形为例，这里记为 $\Psi = \Psi(x, t)$.

从波函数中“提取”粒子的运动信息（即可观测量，observables），需要通过相应的算符（operator）来实现。参考经典的波动力学，考虑简谐波 $\Psi = e^{i(kx - \omega t)}$ ，波函数中的参数给出了粒子的能量、动量等参数；在旧量子论中，推广光子的能量、动量与波矢、频率之联系，有 de Broglie 关系：

$$E = \hbar\omega = pv_p, \quad p = \hbar k$$

将波函数分别对 x, t 微分，可得 $E\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$, $p\Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}$ ，即对一维非相对论情形的波函数来说，能量 E ，动量 p 可形式地简化为算符 / 算子：

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

考虑能量关系，有 $E = \frac{1}{2m}p^2 + V$ ，便得到算子形式的 Schrödinger 方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

补上波函数，可得常见的一维非相对论性 Schrödinger 方程 $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$.

上述讨论先验地基于旧量子论给出的 de Broglie 关系，因此并不构成 Schrödinger 方程的合法推导。不过，通过波函数与经典波动的对比，可以帮助我们接收形式理论中“可观测量由实数升级为算符”的基本设定。记号上，

• **本文约定：**在不致混淆时，将算符 $\hat{\mathcal{O}}$ 略去帽子（hat），简记为 \mathcal{O} .

可观测量均可用算符表示，然算符并不全对应可观测量。我们期待，可观测量算符在一定条件下退化为经典的实数；仍考虑谐波 $\Psi = e^{i(kx - \omega t)}$ ，可见它实际上是前述

^①完备（complete）意味着该空间对极限运算封闭，因此有良定义的微积分。

E, p 算符的本征态，而物理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，由此引出量子力学的另一基本假定：可观测量是自伴算符 / Hermitian 算符^②；这便自然保证了其本征值满足实际要求。

1.2 测量与不确定性原理

在量子力学中，测量过程本身会对系统造成影响；据 Copenhagen 诠释，测量后系统的量子态立刻会坍缩 (collapse) 为对应算符本征值的本征态。可以认为，测量是 Hilbert 空间中的投影操作，或是对波函数的滤波 (quantum filtering) [13].

不过，Copenhagen 诠释并没有指明坍缩的本质和动力学，反而是在量子系统与经典观测中构筑了一条不连续的鸿沟 (有时称为 Heisenberg cut, 参见 [15])，这显然是不能令人满意的。原则上，量子力学应当适用于包含观测者在内任何物理体系，而不应将观测割裂出来，用另一套语言加以描述。另一方面，测量过程客观上与一般的相互作用并无本质差别，没有任何理由将其特殊对待。

基于此，Hugh Everett III 提出 [16]，应当将观测对象和观测者用统一的波函数 (universal wavefunction) 加以描述；设测量对象和观测者的 Hilbert 空间分别为 $\mathcal{H}, \mathcal{H}_{\text{obs}}$ ，则整体 Hilbert 空间将由二者基矢的两两组合张成，数学上表现为张量积 $\mathcal{H} \otimes \mathcal{H}_{\text{obs}}$ 。所谓观测，只不过是相互作用使得测量对象与观测者之间产生了纠缠 (entanglement)：

$$\left(\sum_{\alpha} |\alpha\rangle \right) \otimes |\text{Obs: null}\rangle \xrightarrow{\text{Observation}} \sum_{\alpha} (|\alpha\rangle \otimes |\text{Obs: } \alpha\rangle)$$

观测者之所以认为波函数坍缩到了本征态 $|\alpha_0\rangle$ 上，只不过因为这是相对于态 $|\text{Obs: } \alpha\rangle$ 的结论；这便避免了坍缩疑难，故 Everett 诠释又称为相对态 (relative state) 诠释。

相对态诠释在理论上是最为简洁的，因无须引入额外的坍缩动力学；不过，这一诠释也带来了一些新的困难。首要的一个问题便是认知上的不自然：按 Everett 对叠加态的诠释，似乎表明存在多个平行的现实 (multiple realities)，这一特征使得 Bryce DeWitt 将 Everett 诠释称为多世界 (many-worlds) 诠释。这一方面的阐述可参见 [17]，本文将不做更多讨论。

另一方面，当系统与观测者及环境之间存在复杂的相互作用 (信息交换) 时，在上述 Everett 框架下描述测量过程原则上可行，但实际上非常困难。例如，考虑 Stern-

^②部分参考文献 (如 [14]) 还对自伴 (self-adjoint) 与 Hermitian 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；这主要是一个数学严格性的问题，本文不作额外的区分。

Gerlach 实验，若取观测者为磁场和电子接收屏，则相应的动力学过程可以直截了当地精确计算（如参见 [18]）；不过，若考虑环境的影响，则情况大不相同 [19]。

一般来说，叠加态极易受周围环境的影响，与之发生纠缠，逐渐丧失其**相干性** (coherence)，最终回归经典（或呈现经典的统计规律，如干涉现象的消失）；此处相干性的定义与光学中的一致。这一过程称为**退相干** (decoherence)，该方面的研究极大地丰富了我们对于量子-经典过渡的认识。另外，由于动力学上的混沌 (chaos)，初态为相干态的系统可能脱离准经典近似的描述，这也是退相干现象的一种具体表现；我们将在第四章具体探讨这一问题。



直观上，无论采用何种诠释，测量对波函数的影响似乎自然地导致了测不准原理；然而，即使不涉及测量，量子力学本身便具有内蕴的不确定性。考虑量子态的波函数表示，自由空间中的波动不可能同时具有良定义的精确坐标或动量。形式上，这体现为算符的不可对易——考虑可观测量 A, B ，定义：

$$[A, B] = AB - BA, \quad \{A, B\} = AB + BA$$

$[A, B] \neq 0$ 即算符不可对易，表明 A, B 的观测结果与观测顺序相关。相应地，对于对易的算符来说，容易证明，可以取同一组基底作为两者共同的本征矢（用矩阵的语言描述，即两者可同时对角化）。也就是说，测量结果与 A, B 的测量顺序无关。

本质上， $[A, B]$ 描述了这两个可观测量的不相容程度或不“独立”程度；非零的 $[A, B]$ 表征了两个可观测量之间存在关联。事实上，据 Cauchy-Schwarz 不等式，

$$\sigma_A \sigma_B \geq |\text{Cov}(A, B)| = |\langle \Delta A \Delta B \rangle| = \frac{1}{2} \sqrt{\langle [A, B]/i \rangle^2 + \langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle^2}$$

其中 $\sigma_A^2 = \langle (\Delta A)^2 \rangle$, $\sigma_B^2 = \langle (\Delta B)^2 \rangle$ 。这便是著名的不确定性原理，当且仅当 $\Delta A |\Psi\rangle \parallel \Delta B |\Psi\rangle$ 时取到等号。粗略估计时，往往去掉其中的第二项实数部分，从而有：

$$\sigma_A \sigma_B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|$$

要使上式中等号成立，不仅得有 $\Delta A |\Psi\rangle \parallel \Delta B |\Psi\rangle$ ，两者的比值还应当为 $i\mathbb{R}$ ；我们期待，当上式取等时，应当给出经典对应——即恢复到算符几乎对易的情形，从而接近经典的可观测量（数量）。事实正是如此：对 A, B 取 x, p ，这一条件给出最小不确定波包（是一个高斯波包），这样的量子态正是物理上的**相干态** (coherent state)，参见第四章的具体讨论。



上述量子力学的基本构造已为常识，其抽象化过程本身就源自于经典对应，这将在后续第三章进一步加以探讨。下面我们遵循普遍思路 [12–14]，首先接受上述设定，在此基础上形式地给出量子世界的运动学和动力学。这一过程依然是由经典对应出发。

第二章 形式理论及其经典来源

基于前述形式理论框架，结合经典对应，可以很强地限制量子力学的容许形式；如前所述，这一思路源自 Wigner [2]，使得经典分析力学中的方法可以完全类比应用于 Hilbert 空间上。

类似的讨论在 [12–14, 20] 中均有所涉及，本文将重新进行了组织，意在强调经典对应在这一过程中的重要地位。我们首先试图由经典对应给出量子运动学与动力学，最后再于第 2.4 节给出量子力学作为经典对称性之表示的一般性论述。

这里强调，下面的讨论仅仅基于形式理论框架和经典对应，完全不依赖旧量子论的任何结果。我们将看到，这已经可以近乎唯一地确定量子力学的具体形式。

2.1 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。简洁起见，依然以一维的情形为例，对经典情形而言，空间平移 $x \rightarrow x + \delta x$ 导致 Lagrangian:

$$L'(x, \dot{x}, t) \simeq \left(1 - \delta x \frac{\partial}{\partial x}\right) L(x, \dot{x}, t) = L(x, \dot{x}, t) - \delta x \frac{dp}{dt} \quad (2.1.1)$$

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。对于自由粒子，我们期待 Lagrangian 保持空间平移不变性，即不显含 x ，则有动量守恒： $\frac{dp}{dt} = 0$ 。

对量子情形，设 $U(\delta x)|x\rangle = |x + \delta x\rangle$ ，由此，将任意的态 $|\Psi\rangle$ 按 $|x\rangle$ 展开，有：

$$\begin{aligned} U(\delta x)|\Psi\rangle &= \int dx |x + \delta x\rangle \langle x|\Psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x - \delta x|\Psi\rangle, \\ \langle x|U(\delta x)|\Psi\rangle &= \langle x - \delta x|\Psi\rangle, \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

要求 U 作用前后态矢应当保持归一化，这自然给出幺正性 $U^\dagger U = \mathbb{1}$ ；除此之外，还应有连续性： $U(\delta x)|\Psi\rangle \xrightarrow{\delta x \rightarrow 0} |\Psi\rangle$ ，即 $\lim_{\delta x \rightarrow 0} U(\delta x) = \mathbb{1}$ 。同时，不难理解，平移应当可以简单复合： $U(\delta x')U(\delta x) = U(\delta x + \delta x')$ 。

为写出 U 的具体形式，考虑其对 δx 的展开，类比 (2.1.1)，有：

$$U(\delta x) = \mathbb{1} - \delta x \frac{\mathcal{P}}{\hbar} + \cdots$$

其中，引入分母 \hbar 意在使分子具有动量纲。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纲的常数。

将上面这一含有未知算符 \mathcal{P} 的表达式代入么正性条件，得到：

$$\mathbb{1} = U^\dagger U = \mathbb{1} - \delta x \frac{\mathcal{P}^\dagger + \mathcal{P}}{\hbar} + \dots$$

显然，满足么正性的必要条件是 \mathcal{P} *anti*-Hermitian，即 $\mathcal{P}^\dagger = -\mathcal{P}$ 。再次类比 (2.1.1)，自然可设 $\mathcal{P} = ip$ ， p 为空间平移的生成元 (generator)，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)。

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：我们通过空间平移对称性得到了形式理论中的动量算符，虽说其意义与经典分析力学中的广义动量一致，不过我们仍须说明两者在数值乃至形式上的一致性；这将在后文 2.3 中通过经典对应的重要结论——Erhenfest 定理——加以实现。

根据 (2.1.2) 及 $U(\delta x) = \mathbb{1} - i \frac{p}{\hbar} \delta x + \dots$ ，联立两式，我们可以解出与波动方程一致的动量算符表示：

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

比较 Lagrangian 的变化规律 (2.1.1)，我们发现，经典动量其实也可与算符 $\frac{\partial}{\partial x}$ 联系在一起；这一事实具有丰富的几何意义。具体而言，参见 [21]，Lagrangian 实际上是定义在位型流形 (configuration manifold) 切丛上的函数，而这里的 $\frac{\partial}{\partial x}$ 正是位型流形 $\mathcal{M} = \mathbb{R}$ 上保矩变换 (isometry) 的生成元，称为 Killing 矢量场。

所谓位型流形实际上就是广义坐标容许值构成的几何结构，与通常所说的实空间相近；不过当存在约束时，位型流形并不总是平直空间（如考虑在碗中滚动的小球）。速度矢量场则生活在切丛 (tangent bundle) $T\mathcal{M}$ 上，其分量随坐标变换逆变，与方向导数的变化规律一致，故微分几何中就将其基底记为 $\partial_j = \frac{\partial}{\partial x^j}$ 。

类似的几何图像在广义相对论中是司空见惯的（如参见 [22] 中的大量讨论），不过在（非相对论性）量子力学中较少涉及；事实上，在非相对论情形下，我们并不很关心弯曲空间中的量子化，而是基本从平直空间出发。然而，上述几何语言的另一优势在于，其并不只适用于弯曲空间，而完全可适用于平直空间中的其他坐标系；例如，考虑 \mathbb{R}^3 中的球坐标系，此时对应的 Hilbert 空间基底为 $|r, \theta, \varphi\rangle = |r\rangle \otimes |\theta\rangle \otimes |\varphi\rangle$ 。但应当注意，此时的实空间基底 $\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial \theta}$ 并不是归一化的，相应的 Hilbert 空间基底（对应实

空间中的元素) 也不是归一化的 [20]. 事实上,

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi r^2 \sin \theta |r, \theta, \varphi\rangle \langle r, \theta, \varphi| \\ &= \int_0^\infty dr r^2 |r\rangle \langle r| = \int_0^\pi d\theta \sin \theta |\theta\rangle \langle \theta| = \int_0^{2\pi} d\varphi |\varphi\rangle \langle \varphi| \end{aligned}$$

可见, 对 \mathbb{R}^3 球坐标系而言, r, θ 贡献了非平庸的 Jacobian 行列式, 而 φ 方向虽是平直的, 但其拓扑等价于紧的 \mathbb{S}^1 而非 \mathbb{R} , 由此导致了角动量的量子化。若考虑 \mathbb{R}^3 的球面子流形 $\mathbb{S}^2 \ni (\theta, \varphi)$, 有 Killing 方程 [22]:

$$0 = \mathcal{L}_K g_{ij} = \nabla_i K_j + \nabla_j K_i, \quad g_{ij} dx^i dx^j = d\Omega^2 = d\theta^2 + \sin^2 \theta d\varphi^2$$

其中 \mathcal{L} 为 Lie 导数, 而 ∇ 为协变导数。由此求解 \mathbb{S}^2 上的保距变换生成元 K^j , 得到的正是角动量算符在坐标表象下的表示 (相差一个 $-i\hbar$ 系数, 参见 [12]):

$$J_x \sim -\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad J_y \sim \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad J_z \sim \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (2.1.3)$$



分析力学与量子力学中变换生成元的一致性将在 2.4 节更一般地加以论证。作为动力学形式理论的总结, 最后我们具体考察动量本征态 $|p\rangle$ 在坐标表象下的波函数; 只须令 $|\Psi\rangle = |p\rangle$, 求解微分方程组, 即可得到:

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

系数是通过额外要求 $\{|p\rangle\}$ 正交归一: $\int dx \langle p'|x\rangle \langle x|p\rangle = \delta(p-p')$ 得到的。由此可见, 前面设 $\mathcal{P} = ip$, 引入系数 $+i$, 得到平面波的空间相因子形如 e^{ikx} , 这恰与光学中的约定一致。若取 $-i$, 则将导致与光学约定相反的结果。

2.2 时间演化与 Schrödinger 方程

在引言中, 我们采用了旧量子论的 de Broglie 关系, 在波动力学的框架下给出了 Schrödinger 方程; 事实上, Schrödinger 方程描述的是量子态的时间演化——这一节中我们打算参考引入动量的方式, 通过考察时间平移对称性重新导出 Schrödinger 方程。

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, 这实际对应方程的 Green 函数或传播子 (propagator); 有 $U(t; t_0) |\Psi(t_0)\rangle = |\Psi(t)\rangle$. 类似于空间平移算符, U 也应当满足类似的么正性和连续性

要求；考虑 U 对时间 δt 的展开，有：

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

这里借用了同样的常量 \hbar 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 Hamiltonian.

改变时间演化的终点 $t \rightarrow t + \delta t$ ，我们得到：

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

其中， $\delta U(t; t_0) \sim (U(t + \delta t; t) - U(t; t)) U(t; t_0) = (U(t + \delta t; t) - \mathbb{1}) U(t; t_0)$. 由此可以定义 U 的时间微商，即得算符满足的 Schrödinger 方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t; t_0) = H(t) \hat{U}(t; t_0)$. 将算符方程作用到态 $|\Psi(t_0)\rangle$ 上，便得到一般形式的 Schrödinger 方程：

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

自然，Schrödinger 方程是牛顿第二定律 $F = m \frac{d^2 x}{dt^2}$ 在量子力学中的对应。注意到，Schrödinger 方程是关于时间 t 的一阶方程，而 $F = m \frac{d^2 x}{dt^2}$ 却是二阶；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信息，因此无需更高阶的导数。

类似地，分析力学中的 Hamilton–Jacobi 方程 (HJE)：

$$\frac{\partial S(x, t)}{\partial t} = -H\left(x, \frac{\partial S}{\partial x}, t\right)$$

也仅包含对时间的一阶微分，两者的原理是一致的；这里 $S(x, t)$ 是解的作用量函数。关于 Schrödinger 方程与 HJE 两者之间更深刻的联系，将在第三章进一步加以讨论。



经典 Hamiltonian 是函数 $H = H(x, p, t)$ ，几何上它是位型流形余切丛 (cotangent bundle) 上的函数 [21]；所谓位型流形的余切丛，正是物理上相空间 (phase space) 的几何结构。分析力学中的 Lagrangian 到 Hamiltonian 通过 Legendre 变换： $H = p_j \dot{x}^j - L$ 给出，几何上，这是切丛 $T\mathcal{M}$ 到余切丛 $T^*\mathcal{M}$ 的变换：

$$\dot{x}^j \frac{\partial}{\partial x^j} \longleftrightarrow p_j dx^j$$

不过，量子力学中 $H = H(x, p, t)$ 升级为算符，而其依赖的 x, p 亦是算符，因此我们有必要讨论如何定义算符的函数。首先，只要这一函数关系充分地好，我们总可以

将其按级数展开定义；此外，若这一函数的宗量是自伴算符（对应某一可观测量 A ），则可以将其对角化为投影算符的叠加 $A = \sum_{a'} a' |a'\rangle\langle a'|$ ，从而将 $f(A)$ 表示为关于本征值的函数：

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

对 H 而言，与经典情形类似，其对 x 的依赖往往可以分离出来，得到动能项和势能项：

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

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 $f = f(A, B, \dots)$ ，且 A, B, \dots, 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：

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

即可用反对易括号 $\{A, B\} = AB + BA$ 代替简单的相乘；不过，这一代换过程可能并不唯一，据 [23]，此时正确的量子化形式应当由物理实际确定。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”，以便于分析讨论；这一技巧将在 3.2 节具体加以应用。

2.3 形式理论的经典极限

前几节中，我们从系统的对称性出发，结合经典对应，即要求时空对称性在量子力学的形式理论中得以保持，由此导出了一套平行于经典力学的微观动力学体系；然而，应当强调，这一切推导都是抽象的——我们并不能确悉 H 的函数形式，甚至尚未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，我们将比较运动方程，从而确认 p, H 等算符的经典物理意义。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 $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$ ，利用乘法的微分法则，对其左矢、算符、右矢三部分分别微分，得到：

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle = \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \langle [A, H] \rangle / \langle [x, p] \rangle \quad (2.3.1)$$

对左、右矢的时间微分可以用 Schrödinger 方程代入，最终给出上式。记经典 Poisson 括号为： $[\cdot, \cdot]_{x,p}$ ，不难看出，上式与经典 Hamilton 力学的运动方程一致：

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + [A, H]_{x,p}$$

进一步，取 $\hat{A} = \hat{x}$ ，在动量表象下考察，有：

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

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：

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

注意在上述推导中体现出的一般规律：对关于坐标或动量构成的微分算符 D 而言， $[D, X] = D(X)$ ；这实际上正是位形流形上的 Lie 导数。若 D 不是微分算符，则不然；容易举出反例： $[1, X] = 0 \neq 1(X) = X$ 。注意，这里说“微分”实际上是暗中取了坐标或动量表象；若在抽象的 Hilbert 空间中考察，它只是一平凡的线性算符，并没有“微分”的含义。因此，这里的微分作用于位形流形（可取坐标或动量表象），不是相空间，也不是 Hilbert 空间。

将这一表达式子代回到 (2.3.1)，我们得到：

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p} \right\rangle$$

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

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial H}{\partial x} \right\rangle$$

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。由于式 (2.3.1) 的一般性，有时将其也称为 Erhenfest 定理。

进一步，对自由粒子而言，我们试图给出其 $H(x, p, t)$ 的形式。首先， H 作为时间平移生成元，与粒子所处的空间位置无关，自然有 $\frac{\partial H}{\partial x} = 0$ ，亦即势能 $V(x) \equiv 0$ ；同时，还有 $\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t} = 0$ 。无论 H 是经典 Hamiltonian 还是算符 \hat{H} ，上述对称性论述都是成立的；即自由粒子的 Hamiltonian 应当形如 $H = H(p) = T(p)$ 。自然，试取 \hat{H} 对 \hat{p} 的

依赖与经典情形相同： $\hat{H} = \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ ，则有：

$$\left\langle \frac{\partial H}{\partial p} \right\rangle = \frac{\langle p \rangle}{m} = \frac{\partial H(\langle x \rangle, \langle p \rangle, t)}{\partial \langle p \rangle} \quad (2.3.2)$$

等式左边是算符的期望，而等式右边则是完全经典的函数。结合 Erhenfest 定理，可见动能项为 $\frac{p^2}{2m}$ 时，粒子动量算符的经典极限就是经典动量，且粒子 Hamiltonian 的函数形式与经典 Hamiltonian 一致，两者至多相差一个共同的比例系数——这一系数可以通过调整 \hbar 消去；也就是说，

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k$$

其中 E, p 是宏观物理量，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 de Broglie 关系。

需要说明的是，(2.3.2) 并不总是成立，当 H 依赖于 p （或 x ）的高次幂（ > 2 次）时便会失效；当然，这种情形已偏离了经典范畴，不过在一定条件下仍可以视为经典附近的修正。作为例子，取势能 $V = \frac{1}{4}x^4$ ，则：

$$\left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle = \langle x^3 \rangle \longleftrightarrow \langle x \rangle^3 = \frac{\partial H(\langle x \rangle, \langle p \rangle, t)}{\partial \langle p \rangle}$$

至于这种准经典近似在何时有效，这将在 3.2 节详细加以讨论。

更进一步，我们还可以重新定义可观测量算符，使之包含态的时间演化，相应地态本身不再具有动力学，那么上面诸式中的期望值符号均可以直接去除，得到算符满足的运动方程；形式上它们和经典运动方程完全一致。此即 Heisenberg 绘景 (picture)，矩阵力学正是在这一绘景下诞生的。

2.4 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——结合经典对应过程自然地导出。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 $\delta \in \mathbb{R}$, $\delta \simeq 0$ 时的无限小变换可以展开为：

$$g \simeq \mathbb{1} + \delta \cdot G$$

G 正是变换的生成元；如果将 g 构成的集合看成一个群流形（即 Lie 群），则 G 实际上是其切空间中的元素（Lie 代数）。

这里约定， g, G 作用于相空间中的物理实体上，即对物理实体采用“主动”变换的观点；注意，所谓物理实体也包含依赖于坐标的势场。这是为了区别于所谓“被动”变换，即物理实体不变、只改变坐标系；两者在本质上是等价的，但为了讨论中不致混乱，这里作此约定。

相应地，考察这一变换对作用量或波函数（处于函数空间）形式的影响；简单起见，假定 g 仅关于 (x, t) ，则有：

$$\begin{aligned} \Psi'(x', t') &= \Psi(x, t), \\ L'(x', \dot{x}', t') &= L(x, \dot{x}, t), \end{aligned} \quad (x', t') = g(x, t)$$

化简后，我们得到适用于连续对称性^①的变化规律：

$$\begin{aligned} \Psi'(x, t) &= \Psi \circ g^{-1}(x, t), \\ L'(x, \dot{x}, t) &= L \circ g^{-1}(x, \dot{x}, t), \end{aligned} \quad (2.4.1)$$

这一结果自然地解释了 2.1 节中动量算符等对称生成元在坐标表象下与经典分析力学的一致性。形式上，定义 Hilbert 空间 \mathcal{H} 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 在坐标表象下的具体形式则与 $\Psi \circ g^{-1}(x, t)$ 的展开式直接相关。

注意，对物理实体的主动变换体现为对波函数参量的逆变换 g^{-1} ，这说明若将 O_g 按参数 δ 展开，则其符号将由正变负：

$$O_g \simeq \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \delta \cdot \hat{G}$$

如前所述，引入 i 只是为了保证 G 的自伴性，从而自然是可观测量。

g, O_g 分别作用在相空间和 \mathcal{H} 上，它们看似对应但实际不同；事实上， $g \mapsto O_g$ 正是变换群的表示（representation）， G 则对应变换群切空间——Lie 代数——的表示。例如，前述 $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 即是一维平移群（即 $(\mathbb{R}, +)$ 加法群）在无穷维函数空间上的生

^①对于离散对称性（如时间反演）而言，由于不要求变换连续地过渡到恒等情形，故情况有所不同，见附录 A.

成元，类似地 $J_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ 则是定 z 轴旋转 $\text{SO}(2) \simeq \text{U}(1)$ 群在 \mathbb{S}^1 上函数空间中的生成元。更进一步，式 (2.1.3) 给出的 (J_x, J_y, J_z) 则对应完整的三维旋转对称性 $\text{SO}(3)$ 在函数空间中的表示；不难发现 (2.1.3) 不依赖径向坐标 r ，故表示空间可进一步约化为球面上的函数空间，即由球谐函数 (spherical harmonics) 构成。

此外，正则对易关系 $[x, p] = i\hbar \mathbb{1}$ 作为抽象的 Lie 代数时称为 Heisenberg 代数，相应的对称群称为 Heisenberg 群，它实际上是相空间对称性 (symplectic geometry) 的量子对应 [24]；据 Stone-von Neumann 定理 [25]，在一定物理条件的限制下（如 x, p 是自伴算符， $\mathbb{1}$ 是单位元），则 $\hat{x} \sim x, \hat{p} \sim -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 本质上是 Heisenberg 代数的唯一表示。

具体考察经典对称性在 Hilbert 空间上的表示时，我们还拥有一个强有力的限制条件，此即重要的 Wigner 定理 [26]。为满足概率守恒的要求，我们期待，对称变换应当体现为 Hilbert 空间中保持内积绝对值的可逆变换。在此基础上，Wigner 指出 [2]，这类变换总可以表示为么正或反么正变换；其中，反么正变换可视为么正变换和共轭操作的复合，时间反演变换在 Hilbert 空间上的表示正是反么正变换，参见附录 A。据 Wigner 定理，我们只需考虑经典对称性在 Hilbert 空间上的么正表示或反么正表示，这大大缩小了对称算符的可取范围。



一般来说，经典物理在 Galilean 变换下不变；所有 Galilean 变换（包括时空平移）构成伽利略群。粗略地讲，取 g 为 Galilean 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 Lorentz 变换，以及相应的 Lorentz 群或包含时空平移的 Poincaré 群，我们可以构建相对论性的量子力学，乃至量子场论 [26]。进一步，连续对称性与守恒律的关系则由著名的 Noether 定理给出。

不过，这一经典对称性的对应过程却导致了一个超出经典对称性的产物，即半奇数的自旋 (spin)；其与通常的角动量矢量（张量）相似而不同，称为旋量 (spinor)。如前所述，角动量算符为经典旋转对称性 $\text{SO}(3)$ 的生成元，这导致对易关系：

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

其中 ϵ^{klm} 为 Levi-Civita 全反对称记号。数学上，这相当于给出了 Lie 群 $\text{SO}(3)$ 对应的 Lie 代数 $\mathfrak{so}(3)$ 。代数上的分析表明 [20]，这一关系不仅容许 J_z 具有整数倍的本征值 $m\hbar$ （对应本征态为球谐函数 Y_l^m ），还允许半奇数倍的本征值 $\frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar, \dots$ 。几何上，这是由于角动量的对易关系不仅对应 $\text{SO}(3)$ 群的 Lie 代数，还同时对应 $\text{SU}(2)$ 的 Lie 代数，即 $\mathfrak{so}(3) \cong \mathfrak{su}(2)$ ； $\text{SO}(3)$ 群和 $\text{SU}(2)$ 群整体不同，但在局部上是微分同胚的。这一对应的直观理解参见图 2.1。

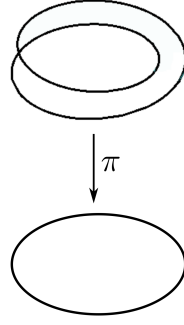


图 2.1 $SU(2) \xrightarrow{\pi} SO(3)$ 局部微分同胚的直观理解；这是一个 2 对 1 的映射，可粗略类比为图示的 $S^1 \xrightarrow{\pi} S^1$ 双重覆盖。

自然， $SU(2)$ 实际上超出了球面 S^2 乃至全空间 \mathbb{R}^3 的对称性；事实上，对半奇数本征态，实空间中的 360° 旋转将导致波函数反号（而非复原），这可由具体计算空间旋转算符得到：

$$\lim_{\delta\varphi \rightarrow 0} \left(1 - i \frac{J_z}{\hbar} \delta\varphi \right)^{\frac{\pi}{\delta\varphi}} = e^{-i \frac{J_z}{\hbar} \cdot 2\pi} = e^{-i\pi \cdot 2m} = (-1)^{2m} = -1, \quad m: \text{半奇数} \quad (2.4.2)$$

这意味者，半奇数角动量的存在本身就破坏了空间旋转对称性，这似乎是非物理的；不过令人惊讶的是，费米子的内禀角动量——即自旋——确为半奇数，且根据 Dirac 方程 [10]，对时间微分阶数的一阶限制（结合相对论协变性）亦从理论上要求波函数具有 4 个分量，这直接预示了自旋（以及反粒子）的存在。更进一步，上述 (2.4.2) 给出的 4π 对称性也于 1975 年通过干涉实验验证，参见 [27, 28]。

由此可见，经典对应的思路在限制量子理论时也存在一定的局限性，即可能使我们忽略完全超出经典对应范畴的物理。不过，在确认超出经典对应的现象后，我们还可利用经典对应反过来改进经典图像；例如，半奇数自旋的存在性改进了我们对现实空间的認識，几何上这通过赋予额外的自旋结构（spin structure）实现 [29]。

有趣的是，源自量子力学的旋量竟成为了经典引力研究中的一个强大的工具；事实上，“容许自旋结构”这一假定本身即对时空带来了额外的限制 [30]。一个著名的实例即是 Edward Witten 于 1981 年给出的经典引力中正能量定理^②的一个证明 [32]，其核心正是基于时空流形上的自旋结构。

^②正能量定理（或称为正质量猜想，positive mass conjecture）指出，对于满足主能量条件（dominant energy condition）的渐进平坦时空，其质量应当非负；且质量为 0 对应平直 Minkowski 时空。这里的主能量条件是对能动量张量 $T_{\mu\nu}$ 的限制，即要求在任一观测者（四速度 u^μ ）看来，质量流均不应超光速，即 $-T^\mu{}_\nu u^\nu$ 应当是指向未来的类光矢量 [29]。这一定理在物理上是自然的，不过数学上须严格证明；最早的一个版本的证明由 R. Schoen 与 丘成桐于 1979 年给出 [31]。

第三章 经典力学与量子力学中的作用量

在前文讨论中我们已经指出，一般形式的 Schrödinger 方程与经典的 Hamilton-Jacobi 方程 (HJE)：

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

形式上十分相似，其中作用量函数 $S = S(x, t)$ 通过求解方程给出，由此可进一步给出粒子的运动轨迹。

事实上，Schrödinger 对波动方程的诠释 [6] 正是基于力学中的最小作用量原理，或光学中的 Fermat 原理。事实上，从 Huygens 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。下面，我们尝试给出这一自然过渡；这一过渡可视为前述形式理论经典对应应在坐标表象下的具体表现之一。

3.1 从分析力学中发现 Schrödinger 方程

回顾历史 [6]，Schrödinger 首先考虑的是保守系统 $E = H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ ，此时，HJE 简化为 $\frac{\partial S(x, t)}{\partial t} = -E = \text{const.}$ 。注意 E 的值一般来说是待定的；此时有 $S(x, t) = S_0(x) - Et$ ，方程化为：

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

注意，这里我们从经典思路出发，即到目前为止， x, p, H, V 等等都是实在的物理数量，并不是算符。

我们希望进一步化简这一方程，遂考虑常用的对数代换：

$$S_0 = \hbar \ln \psi$$

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：

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2 + (V(x) - E) \psi^2 = 0 \quad (3.1.1)$$

上式是关于 $x, \frac{\partial \psi}{\partial x}$ 的二次齐次方程；此时 Schrödinger 提出 [6]，由于能量 E 是一个待定参数，此时我们不急于找出这一方程对任意 E 值的解，而试图关注其所谓稳定

解；这通过考察泛函：

$$I = \int_{\Omega} dx \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + (V(x) - E) \psi^2 \right\} \quad (3.1.2)$$

并要求 $\delta I = 0$ 实现。这一额外的变分步骤看似无中生有且令人困惑^①，不过其背后的物理动机是清晰的——这正是量子化 (quantization) 的一种实现。

首先，直接求解 (3.1.1)，我们将得到与经典情形完全一致的结果；额外引入此稳定解条件，相当于 Bohr 模型中附加的量子化条件，不允许经典场 ψ 取任意轨道，而只容许其取某些稳定轨道 (对应 de Broglie 驻波)。此外，观察 (3.1.2)，不难发现其具有经典场的作用量形式 $\{(\cdot)(\partial\psi)^2 - (\cdot)\psi^2\}$ ，这也进一步支持了上述变分操作。对这一步骤更为仔细的探讨参见 [33]。

不难发现，变分结果给出：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (V(x) - E) \psi = 0, \quad \frac{\partial \psi}{\partial x} \delta \psi \Big|_{\partial \Omega} = 0 \quad (3.1.3)$$

正是定态 Schrödinger 方程及其边界条件；其中， ψ 与前文形式理论中引入的波函数 (消去时间相因子 $e^{-iEt/\hbar}$ 后) 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，Schrödinger 参考了 de Broglie 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：

$$\Psi \propto \psi e^{-iEt/\hbar}, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\frac{E^2}{\hbar^2} \Psi \quad (3.1.4)$$

注意，这一步中的复数仅表征相位；原则上，这里的解完全可以用实的三角函数进行表示。联立 (3.1.3) 和 (3.1.4) 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 2.2 节已经提及，我们不希望 ψ 或 S 依赖于时间的二阶微商；经典对应下这意味着运动不仅依赖于初速度，还依赖于更高阶的加速度，即需要额外的初始条件。这与我们熟识的力学规律显然不一致，不过在某些非经典问题的经典近似中可见一斑，如著名的辐射阻尼问题 [34]，Abraham-Lorentz 近似下的阻尼力 $F \propto \dot{\mathbf{a}} = \ddot{\mathbf{v}}$ 。

更糟糕的是，数学上新的初值意味着新的正则变量，传统的 Hamilton 力学失效而须相应地进行修正；由此得到的运动方程不可避免地存在奔离 (run-away) 解，相应地

^①Schrödinger 本人亦在原文 [6] 的脚注中指出，*Es entgeht mir nicht, daß diese Formulierung nicht ganz eindeutig ist* (It does not escape me, that this formulation is not entirely clear).

Hamiltonian 将没有下界。这一情况称为 Oströgradski 不稳定性, 参见 [35] 中的介绍; 上述辐射阻尼的 Abraham–Lorentz 方程正是一例。

综上, 为避免高阶微分带来的种种困难, 宜直接考虑复方程: $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \Psi$, 与定态方程联立消去 E , 得到对时间变量 1 阶微商、对空间变量 2 阶微商的方程:

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

这正是通常形式下的含时 Schrödinger 方程。注意这一步中的复数与前面的时间相因子 $e^{-iEt/\hbar}$ 不尽相同, 它不再是一个数学技巧, 而是不可避免地出现在了基本方程当中。这意味着, 复数 (带有额外的相位) 在波动力学中是必要的存在; 参见杨振宁先生对此的论述 [36].

此时, 式 (3.1.4) 中 $\Psi \propto \psi e^{-iEt/\hbar}$ 的比例系数可以是复数, 带有初相的信息; 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, 不妨要求:

$$\|\Psi\|^2 = \|\psi\|^2 = \int_{\Omega} \Psi^\dagger \Psi \, dx = \int_{\Omega} \psi^\dagger \psi \, dx = 1$$

综上所述, 波函数起源于作用量的对数代换; 通过引入稳定解条件, 并利用复数降阶, 波动力学即可由经典力学的框架中产生。不过, 这一过程仍存在若干不自然之处; 尤其是稳定解条件的引入, 有必要以更加精确的语言加以讨论, 这将在下一节通过准经典近似的手段解决。

3.2 作用量、波函数与准经典近似

在使 $\Psi = \psi e^{-iEt/\hbar}$ 复化后, 我们破坏了 S_0 与 ψ 之间的函数关系。注意到, 对保守系统, 我们有 $S = S_0 - Et$, 故可以此重建 S 与 ψ, Ψ 的联系:

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

即 $\Psi \propto e^{iS/\hbar}$. 当然, 这是在保守系前提下给出的特例; 对一般的系统, 将上一节中的变量替换 $S_0 = \hbar \ln \psi$ 写成指数 $\psi = e^{S_0/\hbar}$, 再更新为复数的形式, 即可一般性地取定代换 $\Psi \propto e^{iS/\hbar}$; 也就是说,

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

在这一代换下, 考虑 HJE, 我们似乎再次发现了 “Schrödinger 方程”:

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

但这只是表象而已, 因为上式中的 $p = \frac{\partial S}{\partial x}$, 并非 Schrödinger 方程中的微分算符 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. 不过, 相比于前一节讨论的定态特例, 此时的 H 可取任意形式, 不再受制于保守系统。

事实上, 此时我们可以比较 $p = \frac{\partial S}{\partial x}$ 与 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 的差距, 有:

$$p = \frac{\partial S}{\partial x} = -i\hbar \frac{1}{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x} + i\hbar \left(\frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial x} \right), \quad A = \sqrt{\rho(x, t)} \quad (3.2.1)$$

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 $(\frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial x})$. 直观上, 第二项在振幅 $A = \sqrt{\rho(x, t)}$ 对 x 缓变时可以略去。这一限定类似上一节中 Schrödinger 给出的稳定解条件, 对应经典的 (近) 平面波解; 带入平面波相因子, 我们可以印证这一假定的自洽性, 此时 p 自然简化为:

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

由此, 我们终于得到了含时波动方程:

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

综上所述, 一定条件下, Ψ 可看作系统作用量的另一种表示; 它满足的 Schrödinger 方程则可看作 HJE 的另一种形式。这种等价当 Ψ 振幅缓变时成立, 故又称为短波近似, 这里的 “短” 可通过相对于势场的变化 $\frac{\partial V}{\partial x}$ 衡量 [13]; 此时 Ψ 波形接近于平面波, 对应光学中的几何光学近似。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 (可认为是矩阵力学的经典对应)。

反之, HJE 实际上是 Schrödinger 方程在 $\hbar \rightarrow 0$ 极限下的 $\mathcal{O}(\hbar)$ 阶近似 [23]. 为了较为严格地说明这一事实, 从 Schrödinger 方程出发, 记经典动量为 p_c ; 由前述计算 (3.2.1) 可知, 单次作用动量算符 $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 等价于:

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

下面我们将 \hat{H} 按 $\Delta\hat{p} = \hat{p} - p_c$ 展开, 由上可见, 展开项的阶数可由 \hbar 的次数刻画^②。具体而言, 对一般的波函数 $\Psi = \sqrt{\rho} e^{iS/\hbar}$, 将其代入 Schrödinger 方程并化简, 整理可得, $\mathcal{O}(1)$ 正是 HJE, $\mathcal{O}(\hbar)$ 则是概率流 $j = \rho v$ 的流守恒方程 [23].

此外, 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:

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

这里 $H_c = H(x, p_c, t)$, p_c 是经典动量, 而 x 是坐标算符; 不过这里取坐标表象, 因此 x 也就是个普通的数量, 故 H_c 退化为数量函数, 而非原先的算符函数。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, 括号中的各种成分均源于此。

类似地, 约去了 $i\hbar$ 等共同系数后, 虚部为:

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

取前两项即构成通常形式下的流守恒方程, 守恒流 $j = \rho \frac{\partial H_c}{\partial p_c}$; 将 $\mathcal{O}(\hbar^2)$ 项吸收进 $\frac{\partial}{\partial x}$ 中, 即可得守恒流的量子修正 $j = \rho \frac{\partial H_c}{\partial p_c} + \mathcal{O}(\hbar^2)$ 。

作为例子, 考虑 $H = \frac{p^2}{2m} + V(x, t)$, 因 H 对 p 的依赖 ≤ 2 阶, 此时恰有精确方程:

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

这一方程与 Schrödinger 方程 $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right) \Psi$ 完全等价。同时, 参见 [37], Schrödinger 方程给出的严格的守恒流也恰与经典结果完全一致:

$$j = \frac{1}{2m} (\Psi^\dagger \hat{p} \Psi - \Psi \hat{p} \Psi^\dagger) = \rho \frac{\nabla S}{m} = \rho \frac{p_c}{m}$$

$\hbar \rightarrow 0, \epsilon \rightarrow 0$ 极限下, 按经典办法求解 $-\frac{\partial S}{\partial t} = H_c$, 我们将得到 Schrödinger 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 Schrödinger 方程的思路正是著名的准经典近似 (semiclassical limit), 又称为 WKB 近似 [7–9].

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; 有趣的是, 在经典极限下, 这将给出定态满足的 Sommerfeld–Wilson 量子化条件 [13]:

$$\oint p \, dq \sim \left(n + \frac{1}{2} \right) h$$

^②表观上, 似乎只须要求 \hbar 和 $\epsilon = \frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial x}$ 的乘积 $x\epsilon$ 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, 故若在保证展开式收敛, 则必须要求 \hbar 充分小。

当然, Sommerfeld 与 Wilson 的版本 [38, 39] 未能给出零点能对应的 $\frac{1}{2}h$, 这是波动力学带来的全新修正; 若不关心零点能, 考虑相邻的稳定轨道, 我们期待 $\Delta S/\hbar = 2\pi$, 这自然给出 $\Delta S = h$.

3.3 光学极限的基本图像

求解 Schrödinger 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, Schrödinger 方程给出的是正确的描述。这表明, 在非经典情形下, HJE 失效, 此时我们就应当以 Schrödinger 方程取而代之。

直观上看, 此时平面波近似失效, 从而轨迹的概念不再成立, 这自然导致依赖轨迹定义的 HJE 失效。但是, 作用量泛函的概念依然有效, 正如波动光学中依然可以利用光程分析衍射的极值。事实上, 这自然导致了作用量形式的量子力学, 其严格形式由 Feynman 路径积分给出 [40]; 我们将在下一节具体讨论其形式。

反之, 准经典近似给出的解则 (近似地) 同时满足 Schrödinger 方程和 HJE; 粗略地看, 可认为准经典近似是 Schrödinger 方程和 HJE 解空间的交集。以氢原子的行星模型为例, Bohr 量子化给出的分立圆轨道在 n 充分大时便是既满足 Schrödinger 方程、又满足 HJE 的解, 这与对应原理一致; 而不符合经典对应的解有两类:

1. 量子化能级间隙中的经典轨道, 这些解满足经典 HJE 但不满足 Schrödinger 方程, 此时 $\hbar \rightarrow 0$ 的近似不再成立; 直观上, 此时的 de Broglie 行波无法再叠加为稳定的驻波, 即破坏了 Schrödinger 的稳定解条件;

2. 量子数较低时的量子能级, 这些解满足 Schrödinger 方程但不满足经典 HJE, 此时波函数的振幅缓变条件 $\epsilon = \frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial x} \rightarrow 0$ 不再成立; 直观上, 由于轨道接近 Coulomb 势场的中心, 势能变化剧烈, 使波函数振幅在小尺度上有显著变化, 故短波近似不再准确。这一方面的极端例子便是轨道角动量 $L = 0$ 的能级, 这在经典物理中显然是不存在的。

此外, 这里特别指出, 形式理论中的经典对应往往并不是通过波包给出的; 与此相反, 我们感兴趣的对象正是完全弥散的平面波。类比光学, 这是十分自然的, 但这确实和牛顿力学中坐标空间“粒子”的图像有所不符。这可以从两方面加以理解:

1. 首先, 即便在经典极限下, 我们也没有理由要求量子粒子本身具有经典波包的形态, 而只是要求其动力学规律与经典粒子一致。事实上, 据量子场论的观点 [41], 粒子不过是场的特定激发模式; 具有特定参数的激发均可以称作“粒子”, 这其中既包含

传统的波包，也包含最简单的平面波。对于自由场而言^③，据 Fourier 变换的精神，最为自然的基底显然是平面波；物理上，这体现为色散关系不依赖坐标，系统具有空间平移不变性。

总而言之，若接受量子场论的世界观，则“粒子”并不求定域；平面波完全可以被称作“粒子”，甚至可以认为是其中最为“基本”的一类。

2. 此外，在经典极限下，平面波与经典波包确实相同的运动规律；平面波可以看作一束波包构成的稳态，而波包亦可分解为平面波的叠加。在满足准经典近似条件时，结合 Schrödinger 方程的线性特点，波包的各色成分将保持近平面波的形态 $\propto e^{i(kx - \omega(k)t)}$ ，相应地波包的色散将不甚显著，保持充分好的相干性，基本遵循对应中心频率的平面波的运动规律 [20]。这一观点我们将在下一节讨论路径积分时进一步应用，而波包的动力学则是下一章讨论的核心。

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。这里我们将光学和力学之间的对应关系总结如下：

光学	力学
光程	作用量泛函
Fermat 原理	各种最小作用量原理 ^④ ，如 Hamilton 原理 [21]
光线微分方程	Euler-Lagrange 方程、正则方程、HJE 等
波动方程	Schrödinger 方程
衍射积分	路径积分

3.4 路径积分表述

在前文的基础上，我们这里讨论光学对应的最后一环——路径积分。早在量子力学建立之初，Dirac 即明确指出了波函数相位与经典作用量的对应，以及相稳定条件与作用量极值的对应 [43]。不过，这一思路的应用与推广当属 Feynman [44]。

考虑 $t_0 \rightarrow t$ 的时间演化，首先将 t_0 时的波函数分解为 δ -分布：

$$\Psi(x, t_0) = \int dx' \Psi(x', t_0) \delta(x - x')$$

^③参见 (4.1.1)，自由标量场的 Lagrangian (密度)： $\mathcal{L} = -\frac{1}{2}\partial_\mu\varphi\partial^\mu\varphi - \frac{1}{2}m^2\varphi^2$ ，注意其中包含空间部分的微分 $\nabla\varphi$ ，可见场点之间并非独立而是存在（局域的）关联。

^④严格意义上应当称为作用量极值（extremum）原理，因为极大或极小值实际上都是容许的；参见 [42] 给出的光学中的实例。

波包的演化遵循准经典近似；然而，如上一节所述， δ -分布在物理上并不“基本”，我们应当进一步将其展开为平面波： $\delta(x - x') = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(x-x')}$ ，注意在 δ -分布当中，各种动量的成分具有相同的权重；结合态叠加的线性特征及准经典近似，有：

$$\delta(x - x') \xrightarrow{t_0 \rightarrow t} \frac{1}{w} \sum_k \exp\left(i \frac{S_{x' \rightarrow x}}{\hbar}\right) = K(x, t; x', t_0) \quad (3.4.1)$$

这里，求和遍历各种动量（速度）成分， w 是归一化系数。

然而，注意到势场可以非平凡，因此运动过程中动量完全可能发生变化；故只有在 $t - t_0 = \Delta t$ 充分小时，“遍历动量”才有良定义；这正是 WKB 近似中的短波极限。而 $\Delta t \rightarrow 0$ 时，形式上：

$$S = L(x, \dot{x}, t) \Delta t \simeq L\left(x, \frac{\Delta x}{\Delta t}, t\right) \Delta t$$

只取决于初末态，不再依赖于 \dot{x} ，可以去掉求和符号，即有：

$$\delta(x - x') \xrightarrow{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{Z} \exp\left(i \frac{S_{x' \rightarrow x}}{\hbar}\right) \quad (3.4.2)$$

当然，若 $t - t_0$ 不再是小量，也总可以将时间演化无穷细分，每一段都是对所有可能的动量求和；最终的结果正是遍历所有容许的路径 ℓ ：

$$K(x, t; x', t_0) \propto \sum_{\ell} \exp\left(i \frac{S_{x' \rightarrow x}}{\hbar}\right)$$

$K(x, t; x', t_0)$ 称为传播子；重新叠加波包，即得时间演化后的结果。此即路径积分的基本想法。

作为例子，考察 $H = \frac{p^2}{2m} + V$ 情形 [12]，此时：

$$L = p\dot{x} - H = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - V, \quad S|_{\Delta t} = \frac{1}{2}m\left(\frac{\Delta x}{\Delta t}\right)^2 \Delta t - \bar{V}\Delta t,$$

$$K|_{\Delta t} \propto \exp\left(i \frac{S|_{\Delta t}}{\hbar}\right) = \exp\left(i \frac{m(\Delta x)^2}{2\hbar(\Delta t)} - i \frac{\bar{V}}{\hbar} \Delta t\right)$$

为满足么正性，归一化得：

$$K|_{\Delta t} \simeq \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \exp\left(i \frac{m(\Delta x)^2}{2\hbar(\Delta t)} - i \frac{\bar{V}}{\hbar} \Delta t\right), \quad \frac{1}{z} \simeq \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \quad (3.4.3)$$

这里强调， $\Delta t \rightarrow 0$ 时，积分本质上只需在 $x = x'$ 附近进行，此时势场 \bar{V} 对归一化系数 z 的贡献是高阶小量，不影响路径积分，故略去；其对相角的贡献虽同为高阶小量，但处在指数之上，积分后有动力学效应，故应保留。这一技术问题的更详细讨论

参见 [45]. 直观上, 只要时间尺度足够小, 粒子总可以看作近自由的, 因此 $z = z(\Delta t)$, 这是很自然的。

对路径进行等时 Δt 的划分, 可给出传播子的一种可计算表达式:

$$K(x, t; x', t_0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{z^N} \int dx_1 \int dx_2 \cdots \int dx_{N-1} \exp \left(i \frac{S_\ell}{\hbar} \right),$$

$$\ell: \quad x' = x_0 \rightarrow x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow \cdots \rightarrow x_N = x,$$

$$S_\ell = \sum_{j=0}^{N-1} S_{x_j \rightarrow x_{j+1}}$$

对 $H = \frac{p^2}{2m}$, $V = 0$, 经过一段略微繁复的计算后, 可得完全类似于 $K|_{\Delta t}$ 的简洁公式:

$$K(x, t; x', t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar (t'' - t')}} \exp \left(i \frac{m (x'' - x')^2}{2\hbar (t'' - t')} \right)$$

再积分一次, 即得自由粒子波函数。



上述讨论从经典对应出发, 自然保证了路径积分方法与 Schrödinger 方程在经典极限下一致; 但这并不能严格肯定非经典领域内两者的一致性。下面参考 [20], 从 Schrödinger 方程出发, 进一步 (更为严格地) 论证两种表述的等价性。

首先, 利用时间演化算符, 传播子可以重新书写为:

$$\begin{aligned} K(x, t; x', t') &= \langle x | U(t; t') | x' \rangle \\ &= \langle x | U(t; 0) U^\dagger(t'; 0) | x' \rangle \\ &= \langle x, t | x', t' \rangle \end{aligned}$$

这里, $|x, t\rangle = U^\dagger(t; 0) |x\rangle$ 正是 Heisenberg 绘景下的基矢:

$$\hat{x}(t) |x, t\rangle = x |x, t\rangle$$

经典对应下, $x(t)$ 正是粒子的路径, 而 $\langle x, t | x', t' \rangle$ 则是指定了起止条件。在不致混淆的情况下, 往往记 $|x, t\rangle = |x(t)\rangle$ 。然而, 应当注意, $|x(t)\rangle$ 与 $|\Psi(t)\rangle$ 完全不同, 后者是 Schrödinger 绘景下的波矢, 而前者为 Heisenberg 绘景下的基矢, 按“相反”的 U^\dagger 规律演化。

如果 $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$, 或 $\delta t = t - t'$ 充分小, 则 H 基本上是常量, 故可以进一步展开:

$$\begin{aligned} K(x, t; x', t') &= \left\langle x \left| \exp \left(-i \frac{H}{\hbar} \delta t \right) \right| x' \right\rangle \\ &= \sum_n \langle x | n, t \rangle \langle n, t' | x' \rangle \\ &= \sum_n \psi_n(x, t) \psi_n^\dagger(x', t') \end{aligned}$$

n 是 H 的本征谱指标。利用这一简洁公式, 可以方便地计算 $H = \frac{p^2}{2m}$ 的传播子, 我们得到基于 Schrödinger 方程、与路径积分完全一致的结果:

$$\begin{aligned} \langle x, t | x', t' \rangle &= \exp \left(i \frac{m(x - x')^2}{2\hbar(t - t')} \right) \cdot \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \left(-i \frac{p^2}{2m}(t - t') / \hbar \right) \\ &= \exp \left(i \frac{m(x - x')^2}{2\hbar(t - t')} \right) \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar(t - t')}} \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

一般来说, 对任意的 \hat{H} , $\delta t \rightarrow 0$ 时的传播子:

$$\begin{aligned} \langle x, t | x', t' \rangle &= \left\langle x \left| \exp \left(-i \frac{H}{\hbar} \delta t \right) \right| x' \right\rangle \\ &= \int dp \langle x | p \rangle \left\langle p \left| \exp \left(-i \frac{H}{\hbar} \delta t \right) \right| x' \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp e^{\frac{i}{\hbar} p x} \left\langle p \left| \exp \left(-i \frac{H}{\hbar} \delta t \right) \right| x' \right\rangle \end{aligned}$$

这里插入了动量算符, 构成 $\langle p | U | x \rangle$ 的形式, 目的在于将时间演化算符 \hat{U} 约化为数量 U , 从而逐步向经典结果靠近。

具体而言, 约定 H 取正规乘序 (normal ordering) ^⑤, 即 p 总在 x 的左边, 则:

$$\begin{aligned} \left\langle p \left| \exp \left(-i \frac{H}{\hbar} \delta t \right) \right| x \right\rangle &= \left\langle p \left| \left(1 - i \frac{H}{\hbar} \delta t \right) \right| x \right\rangle + \mathcal{O}((\delta t)^2) \\ &= \left(1 - i \frac{H}{\hbar} \delta t \right) \langle p | x \rangle + \mathcal{O}((\delta t)^2) \\ &= \exp \left(-i \frac{H}{\hbar} \delta t \right) \langle p | x \rangle + \mathcal{O}((\delta t)^2) \end{aligned}$$

^⑤参见 [20], 此处的正规乘序与场论中产生-湮灭算符的正规乘序异曲同工。

这是最为关键的一步；我们观察到，在一阶近似下，算符可以用数量来代替，这一思路与 WKB 近似完全一致；有：

$$\begin{aligned}\langle x, t | x', t' \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \left(\frac{i}{\hbar} \left(p(x - x') - H \delta t \right) \right) + \mathcal{O}((\delta t)^2) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \left(i \frac{\delta S(p)}{\hbar} \right) + \mathcal{O}((\delta t)^2)\end{aligned}$$

可见，我们从 Schrödinger 方程出发重新得到了作用量 $\delta S_{(p)} = p \delta x - H \delta t$. 此式完全类似于 (3.4.1)，是其基于 Schrödinger 方程的严格化。注意到此处的作用量 $S = S(p, x, t)$ 是定义在相流形上的，积分掉 p 方能得到 $L \delta t$. 事实上， L, H 通过 Legendre 变换相联系，与统计物理中的各种热力学函数类似；相应的配分函数也是指数积分，与此相近。据 (3.4.2)， $\delta t \rightarrow 0$ 时，无需具体计算，可以直接完成对 p 的积分：

$$\delta t \rightarrow 0: \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \exp \left(i \frac{S(p)}{\hbar} \right) = \frac{1}{z} \exp \left(i \frac{S_{x' \rightarrow x}}{\hbar} \right)$$

不幸的是，这一论断难以给出归一化系数 z ，还是得依靠具体计算；例如，对 $H = \frac{p^2}{2m}$ ，可直接计算左手边的积分，过程与 (3.4.4) 完全一致；也可对右手边的表达式进行归一化，这则与 (3.4.3) 完全相同。这便给出了完整的 $K|_{\delta t}$.

在此基础上，有限时间演化由无限小传播的复合给出：

$$\begin{aligned}K(x, t; x', t') &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle x \left| \prod_{n=1}^N \exp \left(-i \frac{H(t_n) t - t_0}{\hbar N} \right) \right| x' \right\rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int d^{N-1}x \prod_{n=1}^N \langle x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1} \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int d^{N-1}x \int d^N p \prod_{n=1}^N \left\{ \exp \left(i \frac{S_{(p_n)}}{\hbar} \right) + \mathcal{O} \left(\frac{1}{N^2} \right) \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{Z^N} \int d^{N-1}x \prod_{n=1}^N \left\{ \exp \left(i \frac{S_{(n-1) \rightarrow n}}{\hbar} \right) + \mathcal{O} \left(\frac{1}{N^2} \right) \right\}\end{aligned}$$

这里写出了近似造成的余项 $\mathcal{O}(\frac{1}{N^2})$ ；累乘将导致余项被放大为 $N \times \frac{1}{N^2} = \frac{1}{N}$ ，在 $N \rightarrow \infty$ 时仍可安全地略去 [45]. 终于，我们从 Schrödinger 方程出发给出了路径积分表达式：

$$\begin{aligned}K(x, t; x', t') &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int d^{N-1}x \int d^N p \exp \left(i \frac{S_{(p, x, t)}}{\hbar} \right) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{z^N} \int d^{N-1}x \exp \left(i \frac{S_{(x, \dot{x}, t)}}{\hbar} \right)\end{aligned}$$

形式上，往往将路径积分记为：

$$\langle x, t | x', t' \rangle = \int_{(x', t') \rightarrow (x, t)} \mathcal{D}x \exp \left(i \frac{S_{(x, \dot{x}, t)}}{\hbar} \right)$$

记号上引入 $\mathcal{D}x$ 实际上蕴含了更为深刻的数学图像：积分可以视为函数空间中取特定测度下的积分，积分限制在满足起止条件的子空间中；也就是说，

$$\begin{aligned} \langle x, t | x', t' \rangle &= \int \mathcal{D}x \exp \left(i \frac{S_{(x, \dot{x}, t)}}{\hbar} \right) \\ &= \int_{x|_{t', t}} \mathcal{D}[x(t)] \exp \left(i \frac{S_{[x(t)]}}{\hbar} \right) \end{aligned}$$

路径积分表述因其协变性（对应经典的 Langrangian 表述），可以自然地推广至量子场论 [41]. 事实上，考虑 $n+1$ 维空间中的格点（其坐标由 x^μ 给出，常简记为 x ），考察格点的振动，振幅记为 φ ，则路径积分表述在连续极限下自然给出量子场论。为避免记号混淆，首先检验 $n=0$ 时的情形，此时的量子场论正是量子力学：

$$\langle \varphi, t | \varphi', t' \rangle = \int_{\varphi(x^0)|_{t', t}} \mathcal{D}\varphi e^{i \frac{S}{\hbar}}$$

注意量子化对象的记号由坐标 x 变为了振幅 φ 。在此基础上，增加空间维度，则：

$$\begin{aligned} \langle \varphi(\mathbf{x}), t | \varphi'(\mathbf{x}), t' \rangle &= \int_{\varphi(x)|_{t', t}} \mathcal{D}\varphi e^{i \frac{S}{\hbar}}, \\ S &= \int_{t'}^t dt \int d^3\mathbf{x} \mathcal{L}[\varphi(x)] = \int_{t' \rightarrow t} d^4x \mathcal{L}[\varphi(x)] \end{aligned}$$

以上正是量子场论的路径积分表述。不致混淆时，常记 $|\varphi(\mathbf{x}), t\rangle = |\varphi(x)\rangle$ ，它是 Heisenberg 绘景下的坐标基矢，并不是波函数；可将其理解为某种赝指标，具体计算中将与初末态缩并，得到最终结果。相应地，其时间演化也是由 U^\dagger 描述，与 $|x(t)\rangle$ 一致而与 $|\Psi(t)\rangle$ 完全不同。事实上，如果愿意的话，我们也可以强行写出量子场论的波函数，它应当是泛函：

$$\Psi[\varphi(x)] = \langle \varphi(x) | \Psi_0 \rangle = \langle \varphi_0(\mathbf{x}) | \Psi(t) \rangle = \Psi[\varphi_0(\mathbf{x}), t]$$

左两式对应 Heisenberg 绘景，右两式对应 Schrödinger 绘景。显然此时 Schrödinger 绘景并不如 Heisenberg 绘景便捷，因此量子场论中普遍基于 Heisenberg 绘景加以讨论^⑥。



综上所述，量子与经典的作用量具有丰富的共性；从 Schrodinger 发现波动力学到 Feynman 的路径积分表述，作用量均是经典与量子之间重要的桥梁。

按照本章的思路，量子化相当于将经典的动力学转化为对应的经典场论（如晶格的振动），只不过此时场强应当是复数；进一步，量子场论则可以视为某种“经典场论之上的场论”，即用场论（而非一个简单的数量振幅）来描述单个格点的振动。这大概可以视为“二次量子化”（second quantization）这一名词的合理诠释。与之相对，若采用正则量子化的观点，则“二次量子化”的说法是不甚恰当的，因“数量升级为非对易算符”的操作只发生在经典场的振幅上，而并没有发生在背景时空当中。

^⑥计算中普遍使用的相互作用绘景可视为 Heisenberg 绘景基础上的微扰。

第四章 相干态的动力学演化

上一章讨论的光学对应是理论研究中普遍采用的经典对应形式，不过其并不便于进行具体的动力学模拟。在动力学经典对应的研究中，我们尤其对另一类初态感兴趣——它们最接近于经典的物体，其波函数是一最小不确定波包；如引言 1.2 节所述，此即所谓的相干态 (coherent state)。

可以预见，对于具有经典对应的体系而言，相干态最初一段时间的演化规律应当基本符合经典轨迹；不过由于量子效应的累积，其长时间演化的结果可能显著偏离经典预测。我们希望通过考察这类系统的时间演化，以了解量子与经典动力学的差异。

这里我们首先介绍最简单的例子：谐振子的相干态；此时由于势能、动能均是二次齐次函数，根据 Erhenfest 定理，相干态将始终保有经典对应，且在长时间演化下并不会发生色散；对此特例，量子动力学与经典动力学始终一致。在此基础上，我们将考察更为一般、复杂的情形，试图更深刻地理解动力学上的量子、经典对应。

4.1 谐振子系的量子力学

我们以一维谐振子模型出发，考察量子动力学体系及经典对应；有 $H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 。首先从代数角度入手，Hamiltonian 算符可以有分解：

$$H = \hbar\omega \cdot \frac{1}{2\hbar} \left(\left(\sqrt{m\omega}x - i\frac{p}{\sqrt{m\omega}} \right) \left(\sqrt{m\omega}x + i\frac{p}{\sqrt{m\omega}} \right) - i[x, p] \right) = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right)$$

这里引入了互相伴随的算符 a^\dagger, a ，其中 $a = \sqrt{m\omega}x + i\frac{p}{\sqrt{m\omega}}$ 。

利用正则对易关系，不难验证 $[a, a^\dagger] = 1$, $[H, a] = -\hbar\omega a$, $[H, a^\dagger] = +\hbar\omega a^\dagger$ ，从而：

$$H(a|E\rangle) = (E_n - \hbar\omega)(a|E\rangle),$$

$$H(a^\dagger|E\rangle) = (E_n + \hbar\omega)(a^\dagger|E\rangle),$$

可见 a^\dagger, a 作用在能量本征矢上，分别得到能量 $\pm\hbar\omega$ 的能量本征矢，故称 a^\dagger, a 为升、降算符。谐振子的代数理论本和前文 2.4 提及的角动量代数理论是十分相似的；两者甚至可以通过具体的代换相联系，参见 [46–48]。

事实上，多自由度系统（在一定近似下）均可约化为相互独立的简正模，进而定义升降算符，即：

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q_j}{q_{j0}} + \frac{i}{\hbar} p_j q_{j0} \right)$$

这里 q_{j0} 是 q_j 对应的某一特征尺度；对一维谐振子模型，自然 $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. 在此基础上，总可以把 Hamiltonian 关于 (x, p) 的依赖变换为关于 (a, a^\dagger) 的函数。

进一步，考察对易括号；设 $q_j = x_j$ 是实空间的标准直角坐标，考虑正则量子化 $[x_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}$ ，则有：

$$[a_j, a_k] = 0, \quad [a_j, a_k^\dagger] = \delta_{jk} \quad \implies \quad [\hat{n}, a] = -a, \quad [\hat{n}, a^\dagger] = +a^\dagger$$

这里引入了自伴算符 $\hat{n} = a^\dagger a$ 以标记能级数目。利用上述简洁的代数关系，可以一般性地得到谐振子乃至多谐振子的本征谱；具体可参见 [20, 37] 等。特别地，对一维谐振子， H 具有分立谱 $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, $n = 0, 1, 2, \dots$

考察谐振子的量子动力学，与经典显著不同的一大特征即是所谓零点能 $\frac{1}{2}\hbar\omega$. 取坐标表象后可见，基态波函数正是一静止的高斯波包，且是一最小不确定波包 [37]. 物理上，可以认为它是不确定性原理的直接后果；具体而言，当 $\langle p \rangle = 0$ 时， $\langle E \rangle$ 与 $\sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle$ 是一致的， σ_p 的非零特性自然导致 E 的下限为一正数。根本上，这还是归因于 H 分别是 x, p 的二次齐次函数，由此导致存在稳定平衡的真空态 $|0\rangle$.

利用 $\hat{n} = a^\dagger a$ ，有 $H = \hbar\omega(\hat{n} + \frac{1}{2})$ ；由 a^\dagger, a 对易关系可知 $\hat{n}^\dagger = \hat{n} + 1$ ，从而给出 a^\dagger, a 作用于归一化定态上的表示系数：

$$a|n\rangle = \sqrt{n}e^{i\theta}|n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle = a^\dagger a \frac{|n+1\rangle}{e^{i\theta}\sqrt{n+1}} = \sqrt{n+1}e^{-i\theta}|n+1\rangle$$

对定态而言，相因子上的 θ 与时间无关，因此不妨取定为 0，由此便定义了 $|n\rangle$ 包含的相因子与 $|0\rangle$ 一致。在此约定下，有简洁表示：

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle$$

取坐标表象，不难得到 $|n\rangle$ 对应的波函数 [37]，若取 $m = \omega = 1$ ，则其大致形式及其在大 n 情形下的渐进展开如下：

$$\psi \propto e^{-\frac{x^2}{2}} \cdot H_n(x) \propto \left(\frac{2n}{e}\right)^{\frac{n}{2}} \sqrt{2} \cos\left(x\sqrt{2n} - \frac{n\pi}{2}\right) \left(1 - \frac{x^2}{2n}\right)^{-\frac{1}{4}}$$

这里的 H_n 是 Hermite 多项式 [37]. 不难确认 $n = 0$ 基态波函数正是一静止的最小不确定波包。大 n 极限下, 解为驻波, 对应于两列相向行波解的叠加, 这与上一章准经典近似的相关讨论一致; 此时势阱内的振幅: $A(x, t) \propto (1 - \frac{x^2}{2n})^{-1/4}$ 确实满足缓变条件。



对多个谐振子的耦合系统而言, 遵循上述引入升降算符的方案, 其量子化和动力学的推广是直接了当的; 若考虑其连续极限, 即通过经典场论与上述方案的结合, 可自然地给出场论的正则量子化方案。首先, 参考 [41], 由连续极限导出经典场的作用量的过程是直截了当的, 我们得到经典标量场的 Lagrangian 密度:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2}\partial_\mu\varphi\partial^\mu\varphi - \frac{1}{2}m^2\varphi^2 \quad (4.1.1)$$

这里沿用了 3.4 节的记号, 并暂时启用自然单位制 $c = \hbar = 1$, 度规约定 $\eta \sim (-, +, +, +)$.

如前所述, 已知经典作用量时, 形式上最为简洁优美的量子化方案正是 Feynman 路径积分; 不过, 形式上的简洁往往隐瞒了计算上的困难。对许多问题而言, 我们依然需要正则量子化, 以提供一种互补的图像; 这不仅可能便于具体计算, 还有利于全面地认识问题 [41]. 幸运的是, 采用 Heisenberg 绘景, 正则量子化在形式上也并不复杂: 只要将场 φ 升级为算符, 并引入正则动量 $\varpi = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\dot{\varphi}}$ 与 (等时) 对易关系:

$$\left[\frac{\varphi_{\mathbf{x}}}{\epsilon^{\frac{N}{2}}}, \frac{\varpi_{\mathbf{x}'}}{\epsilon^{\frac{N}{2}}}\right] = i\hbar \frac{\delta_{\mathbf{x}, \mathbf{x}'}}{\epsilon^N} \quad \longrightarrow \quad [\varphi(\mathbf{x}, t), \varpi(\mathbf{x}', t)] = i\hbar \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

其中左侧是离散情形, ϵ 对应场点间的格距。进一步, 引入 Hamiltonian 密度^① $\mathcal{H} = \varpi\dot{\varphi} - \mathcal{L}$ 并升级为算符, 量子化后的运动方程依然由 Heisenberg 绘景下的 Erhenfest 定理给出:

$$\frac{d\mathcal{O}}{dt} = \left.\frac{\partial\mathcal{O}(\varphi, \varpi, t)}{\partial t}\right|_{\varphi, \varpi} + \frac{1}{i\hbar} [\mathcal{O}, H]$$

此外, 借用谐振子的研究方法, 我们依然可以引入升降算符, 不过此时我们将发现更丰富的现象——振动模式表现为粒子, 而升降算符也由此升级为产生、湮灭算符 (creation & annihilation operators)。这在前述讨论光学对应时业已提及。

以自由标量场为例, 可以类似地定义: $a(\mathbf{x}) = m\varphi + i\varpi$, $a^\dagger(\mathbf{x})$ 作用在真空态 $|0\rangle$ 上, 即对应在 \mathbf{x} 处激发了一局域振动; 事实上, 在后文讨论多阱 Bose-Einstein 凝聚时, 采用的正是这样的定义 [49]. 不过, 对于自由空间中的自由场而言, 这样定义的产

^①此时算符乘序会带来微妙的影响, 这里暂且不论, 可参阅如 [20] 等文献中更加深入的讨论。事实上, 这一问题在前述 2.2 节讨论时间演化时、3.4 节讨论路径积分时均可见一斑。

生算符并不理想——当场点之间存在耦合时，这样的算符并不能对应能量本征态；具体而言，

$$\varpi = \dot{\varphi}, \quad \hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2}\varpi^2 + \frac{1}{2}(\nabla\varphi)^2 + \frac{1}{2}m^2\varphi^2, \quad H = \int d^3\mathbf{x}' \mathcal{H}(\mathbf{x}'),$$

$$[a^\dagger a_{(\mathbf{x})}, H] = \int d^3x' \left[\varpi^2(\mathbf{x}), \frac{1}{2}(\nabla\varphi_{(\mathbf{x}')})^2 \right] \neq 0$$

直观上，局域激发 $a^\dagger(\mathbf{x})$ 不可能作为能量本征态的原因是自然的，其在经典场中的对应形态 $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ 可分解为一系列平面波，而对具有极大对称性的自由空间而言，平面波才是能量本征态；这使我们又一次回到了光学极限。

形式上，我们寻求先将 Hamiltonian “对角化”，即引入基底变换；对 \mathbf{x} 等间隔离散的情形，参照固体物理中的经验，自然取 Fourier 级数，所得的谐波恰为能量本征态；这本质上源于系统的空间周期性。连续极限下，空间周期性升级为平移不变性，而 Fourier 级数升级为 Fourier 变换，从而有：

$$\varphi(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \int d^N\mathbf{x} \varphi(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

ϖ 亦然。对 $\varphi(\mathbf{k}), \varpi_{\mathbf{k}}$ 进行线性组合，即得到产生平面波模式的算符 $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ ，其与 H 满足的代数关系与经典多谐振子完全一致。

4.2 相干态与动力学对称性

对谐振子系统而言，注意到前述高能级驻波解 $|n\rangle$ 虽是两列光学极限行波的叠加，但并非直观上点粒子的经典对应态；不难验证其 $\langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$ ，而我们希望找到 $\langle x \rangle, \langle p \rangle$ 按经典规律谐振变化的态。

在 x - p 坐标构成的相空间中，由不确定性原理，系统某一时刻的状态大致由一尺度下限为 $\frac{\hbar}{2}$ 的相格构成（而非经典的相点）；相干态则是逼近这一下限的波包。与一般的波包相比，它应当最不易弥散，从而与经典点粒子情形保持最大程度的一致性。对于谐振子体系，下面我们实际求解出相干态的具体形式，并验证上述论断。

设 $t = 0$ 时刻， $\langle x \rangle = x_0, \langle p \rangle = p_0$ ，套用 1.2 节中给出的最小不确定波包须满足的条件，应当有 $m\omega(x - x_0)|\psi\rangle = \pm i(p - p_0)|\psi\rangle$ ， $\omega \in \mathbb{R}_+$ ，其中的 $m\omega$ 保证了量纲的一致；整理之，得到：

$$(m\omega x \mp ip)|\psi\rangle = (m\omega x_0 \mp ip_0)|\psi\rangle$$

比较上式与升降算符的定义式，不难发现：如果升降算符有本征矢，其本征矢就是最小不确定波包。首先，在升算符作用下，所有能量成分的能级数目 +1，显然作用结果不可能和原来的态成比例，故升算符并没有本征矢；同样，在降算符作用下，所有能量成分的能级数目 -1，但由于能级数无上限而有下限，如果某叠加态是能量本征态的无穷求和，则它可能是 a 的本征函数。

具体而言，设 $t = 0$ 时，

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad |\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |n\rangle, \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

从而有递归关系： $\alpha c_n = c_{n+1}\sqrt{n+1}$, $n = 0, 1, 2, \dots$ ，这导致 $c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}c_0$ ，进一步通过归一化确定 $c_0 = e^{-|\alpha|^2/2}$ ，得：

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

经过时间 t 的演化， $|\alpha\rangle$ 态变为：

$$|\Psi\rangle_{(t)} = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} = e^{-i\omega t/2} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$$

从而，谐振子相干态的时间演化结果 $|\Psi\rangle_{(t)}$ 依然是相干态。进一步，我们可以就此验证相干态的相轨迹；直接计算或引用推广的 Erhenfest 定理 (2.3.1)，均可得到：

$$\langle a \rangle_{(t)} = \alpha e^{-i\omega t}, \quad \langle a \rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} (m\omega\langle x \rangle + i\langle p \rangle)$$

可见，相干态的相轨迹确实是相空间中半径为 α 的（椭）圆，相点在轨迹圆上的运动规律与经典情形完全一致。

最后，我们考察相干态能级数 n 的期望：

$$\langle n \rangle = \alpha^\dagger \alpha = \frac{1}{\hbar\omega} \left(\frac{1}{2} m\omega^2 x_0^2 + \frac{1}{2m} p_0^2 \right)$$

这一结论直接表明，除去零点能 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ 后，相干态的能量与经典能量完全一致；而相干态中各本征态按能级数 n 的分布正是典型的 Poisson 分布：

$$|\langle n | \Psi \rangle|^2 = e^{-\langle n \rangle} \frac{\langle n \rangle^n}{n!} \propto \frac{\langle n \rangle^n}{n!}$$



综上，我们从多角度检验了谐振子相干态的经典特性，其中最为关键的一点在于，其时间演化结果 $|\Psi\rangle_{(t)}$ 依然保持相干性。可以预计，一般的系统不具有这一特征；初

始的最小不确定波包往往会随时间扩散，至于扩散的程度及复现的可能，则与系统的动力学密切相关 [50]。这一问题将在后文中更深入地加以讨论。

对于谐振子系而言，初始相干态不发生色散的根源在于其动力学对称性(dynamical symmetries)。在前面第二章我们已经仔细讨论了时空对称性对量子体系的限制，那时我们假定系统的作用量保持时空对称性，不过尚未探讨 Lagrangian / Hamiltonian 本身具有的额外对称性，这便是动力学对称性 [51]。

对于谐振子系，其 Hamiltonian 是 (x, p) 的二次齐次函数，这显示了其在相空间中的“旋转”对称性；不过相空间中的坐标变换并不能是完全任意的，而应当是正则变换 (canonical transformation)，从而保持其几何结构 (symplectic structure) [21]，故与实空间中的旋转并不完全一致。具体的分析表明 [52]， M 维谐振子系具有的对称为 $SU(M)$ ；特别地，对于 $M = 3$ 三维谐振子而言，这给出 6 个对称生成元，可以引入守恒张量：

$$A_{ij} = \frac{1}{2} (p_i p_j + m^2 \omega^2 x_i x_j)$$

在能量、角动量的约束下 (对应 Lie 代数的 Casimir 算子)，这给出 5 个独立的守恒量，进而导致了三维谐振子在 6 维相空间中的一维闭合轨迹。

有趣的是，量子化后， M 维谐振子的 $SU(M)$ 对称性在引入升降算符时自然地呈现了出来，此时我们无须考虑正则变换的限制问题；具体而言，对 Hamiltonian:

$$H = \frac{M}{2} \hbar \omega + \hbar \omega \sum_i a_i^\dagger a_i \quad (4.2.1)$$

注意到该式第二项是 a_i 的二次型，考虑么正变换：

$$\tilde{a}_j \equiv \sum_{i=1}^M \psi_j^i a_i, \quad \psi \in SU(M)$$

由于 $\psi^\dagger \psi = 1$ ，变换后 H 的形式不发生改变，同时 $\tilde{a}_j, \tilde{a}_j^\dagger$ 的对易括号也不发生改变，由此自然体现了 $SU(M)$ 对称性。

分析力学指出 [21]，对称性导致守恒量，而守恒量导致相空间中的约束；充分多守恒量的积累使得系统具有了可积性 (Liouville integrability)，从而系统的运动方程可通过直接积分给出，无须求解运动方程。Liouville–Arnold 定理表明 [53]， M 维系统一旦具有 M 个独立的守恒量，即可保证 Liouville 可积，或称为完全可积。

对具有 $SU(3)$ 对称性的三维谐振子而言，其守恒量个数 $5 = 2M - 1 > M$ ，这是典型的超可积系统 (superintegrable system)，由此导致了其规则一维轨道；类似的例子

还有三维空间中的平方反比力场，这一系统实际上具有 $SO(4)$ 对称性 [51]，其中额外的动力学守恒量为 Laplace–Runge–Lenz 矢量：

$$\mathbf{A} = \mathbf{p} \times \mathbf{L} - mk\hat{\mathbf{r}}, \quad \mathbf{F}(r) = -\frac{k}{r^2}\hat{\mathbf{r}}$$

对于具有经典对应的量子体系而言，对称性表现为特定的能级结构，如能级或能级间距的简并。规则的能级结构进而有利于维持波包的相干性，从而抑制了波包的色散；相反，不规则的能级结构促使波包各成分的相位在时间演化下离散： $e^{-i\Delta Et/\hbar}$ ，从而导致波包散开，使得点粒子的经典对应不再成立；这一现象可视为热力学第二定律一种微观根源 [54]。

4.3 可积与混沌体系的相干态演化

如上可见，对谐振子而言，初始相干态不会发生色散，这是超可积性带来的特殊情况。对一般的系统而言，波包将会扩散，经过一段时间 τ_h 后，其动力学不再能以点粒子的经典运动方程刻画，不过仍可以由经典系综加以描述 [55]。时间尺度 τ_h 称为 Erhenfest 时长，它刻画了给定系统中波包色散的特征时长。

对于能级数目较小的量子系统而言，此时 Hilbert 空间的维数较低，由于量子动力学的线性特征，进一步时间演化 T_r 后将出现经典系综无法解释的量子重现 (quantum revival) 现象 [56]；这一现象完全类似于经典的 Poincaré 重现，即有限相流形内的动力学都可在一定时间内实现充分好的初态重现，只不过量子能级的分立特征大大缩小了重现的时间尺度。另外，在充分长的时间演化后，经典系综未能描述的额外量子效应 (如典型的隧穿效应) 也将使动力学进一步偏离经典预测，导致经典对应的彻底崩溃。

上述规律均可利用相干态作为初始态进行仔细的考察；对于可积体系，[55] 给出了 τ_h, T_r 两个特征时长的具体估计，参见图 4.1。

对于混沌体系，可以预见，波包的扩散应当更加迅猛，从而 τ_h 应当较可积系统显著减小；相反，混沌效应对应的能级不规则性将延缓量子复现，从而 T_r 应当显著增大。按照 [55] 的估计，考虑到混沌系统扰动随指数增长的特性， T_r 很可能按指数规律增长，即 $T_r \propto \exp(\frac{1}{\hbar})$ 。对于特定系统，额外的非经典效应则往往会先于 T_r 出现，典型的有双阱之间的隧穿，以及 [57] 所研究的周期激励转子 (kicked rotator) 的量子共振 (quantum resonance) 现象 (该现象出现的特征时间 $T_q \propto (\frac{1}{\hbar})^2 \ll T_r$)。

为更深入地了解混沌体系的量子特征，下面我们将具体考察一类典型的经典对应体系，它源于对 Bose–Einstein 凝聚 (Bose–Einstein condensate, BEC) 的研究 [49]。这

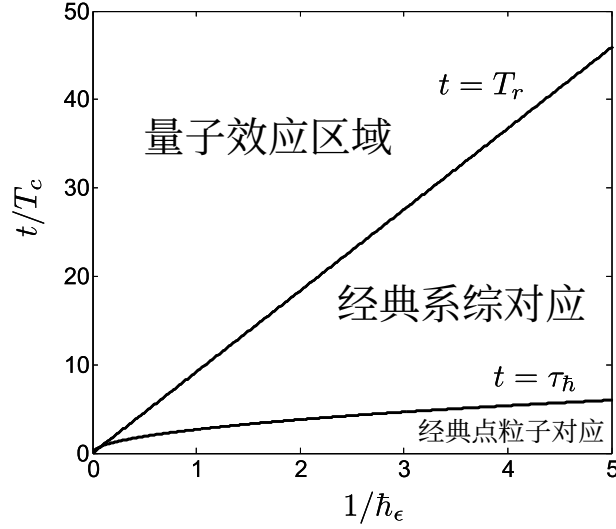


图 4.1 可积系统的量子-经典对应图示 (Erhenfest diagram), 引自 [55]. 这里, 量子效应的强度由参量 $(\frac{1}{h_\epsilon})$ 刻画, 两个临界尺度作为 $(\frac{1}{h_\epsilon})$ 的函数, 有 $\tau_h \propto (\frac{1}{h_\epsilon})^{\frac{1}{2}}$, $T_r \propto (\frac{1}{h_\epsilon})$. 时间尺度的具体数值源于 [55] 中的一维 x^4 势场模型, 具体形式为 $V(x) = m\omega_0^2 x^2 + m^2\omega_0^3 x^4 / h_\epsilon$.

一类模型依赖于下述普遍规律, 即玻色子系统在大粒子数极限 $N \rightarrow \infty$ 时近似于经典体系 [58, 59], 因此可以方便地检验或探索经典对应的现象. 由于粒子数 N 可以方便地调节 (不同于固定的 \hbar), 此时我们可以通过实验 (如 [60]) 具体地检验经典对应给出的有关论断. 对于 [4] 给出的三势阱 BEC 体系, 等效地有玻色子数目 N 反比于量子效应的强度, 即 $N \propto \frac{1}{\hbar}$, 由此可进一步给出该体系的 Erhenfest 尺度:

$$\tau_h \propto \frac{1}{\gamma} \ln N \propto \frac{1}{\gamma} \ln \frac{1}{\hbar}$$

其中 γ 是该动力学体系的 Lyapunov 指数, 它刻画了初始扰动的增长速率: $\propto e^{\gamma t}$, 也标志了初始波包散开的速率. 可见 τ_h 对量子效应参数的依赖为对数形式, 确实显著小于可积体系的 $\frac{1}{2}$ 幂律增长.

下面我们进一步具体介绍三势阱 BEC 模型的理论构造, 以及其在经典对应研究中的已知结果和可能的应用.

4.4 利用 BEC 研究混沌体系的经典对应

对于现实中的 BEC 体系，由于多粒子间的相互作用不可忽略，其准确的理论描述应当由场论出发；据 [49]，我们首先形式地写出体系的 Hamiltonian:

$$H = \int d^3\mathbf{r} \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\varphi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\varphi}(\mathbf{r}') \hat{\varphi}(\mathbf{r}) \quad (4.4.1)$$

其中 $\hat{\varphi}(\mathbf{r})$ 为场算符， $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 刻画了玻色子间的相互作用，而 $V(\mathbf{r})$ 则刻画了势阱的形态。对本文关注的三势阱模型而言，三个弱耦合的势阱处于等边三角形的顶点上，其强度一致，即具有 \mathbb{Z}_3 对称性，如图 4.2 所示。

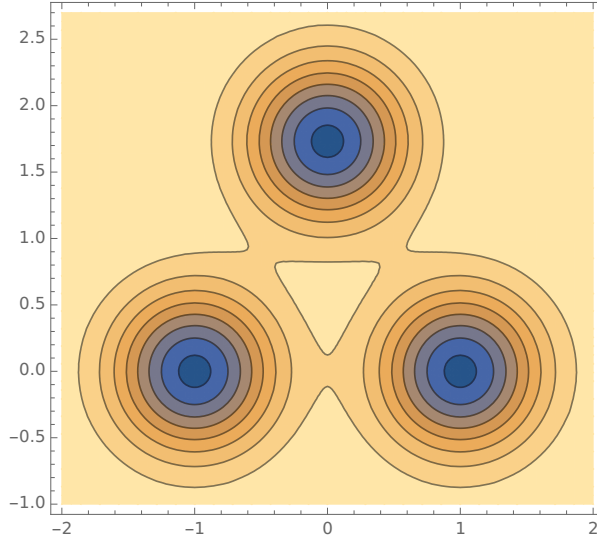


图 4.2 本文考察的 BEC 模型势场分布图示，参考 [3]。与 [3] 中研究的一般模型相比，此处有所简化，即令三阱深度一致，使得无耦合情况下三阱的基态简并。

发生 BEC 后， $T \approx 0\text{ K}$ ，绝大多数的粒子凝聚在势阱的基态，此时我们主要关心阱间的隧穿动力学，而并不关注少数的激发，故取单带近似 [3, 49]，即：

$$\hat{\varphi}^\dagger(\mathbf{r}) \simeq \sum_j w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \hat{a}_j^\dagger$$

这里 $w_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ 是局域在阱 j 的 Wannier 函数 [61, 62]（大致形如单阱的基态波函数），而 \hat{a}_j^\dagger 表明局域于阱 j 基态上的玻色子激发；在此基础上，重取能量零点、无量纲化后，Hamiltonian 简化为：

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^M \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} \frac{c}{N} \sum_{i=1}^M \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_i \quad (4.4.2)$$

此 Hamiltonian 即为著名 Bose-Hubbard 模型 [63, 64], 式中 $i, j = 1, \dots, M$ 为势阱的指标; 对此处具体考察的三阱问题, 则有 $M = 3$. 式中第一项对应 (4.4.1) 中的第一项, 描述阱间的隧穿动力学; 而第二项则表征了玻色子间的非线性相互作用。

由此可见, 通过上述近似, 这一场论中的三阱玻色子问题简化为了三个格点上的动力学问题; 进一步比较 (4.2.1), 可见这一 Hamiltonian 可直观地视为三维空间中的一个类谐振子体系。同样类似于三维谐振子, 该体系具有守恒量:

$$N = \sum_i n_i = \sum_i a_i^\dagger a_i, \quad [N, H] = 0$$

这里表现为三阱中的总粒子数守恒; 记阱 i 中的粒子数为 $N_i = Nx_i$, 则有 $\sum_i x_i = 1, x_i \geq 0$. 这表明运动实际上限制在三维空间中的一个三角形平面截面上, 如图 4.3 所示。这一参数空间也保留了势场的 \mathbb{Z}_3 对称性。系统的另一守恒量——能量 E 则包含对正则动量的依赖, 故只能表现在相空间上, 而不可完整地实现为参数空间 (位型流形) 中的约束。

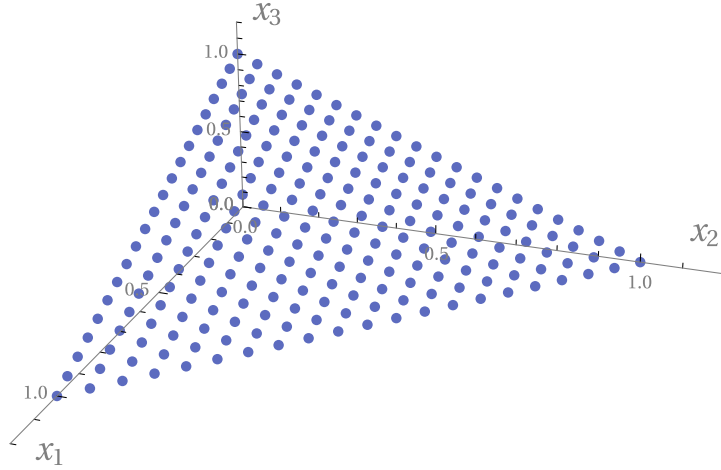


图 4.3 本文所研究体系的参数空间及量子态图示, 这里 $N = 20$, 图中每一点对应一个量子态 $|n_1, n_2, n_3\rangle$. 变量 $x_i = n_i/N$ 为阱 i 的相对粒子数, $x_1 + x_2 + x_3 = 1$. 经典极限 $N \rightarrow \infty$ 下, 参数可在三角形内连续地变化。

在此基础上, 系统的经典运动方程可通过两种方式得到: 一是采用平均场近似, 即将其余 $N - 1$ 个粒子的作用等效为平均场而得到单粒子 (ψ_1, ψ_2, ψ_3) 的运动方程, 这里的 ψ_i 是该粒子在阱 i 处的复振幅, 参见 [3, 49]; 另一方案是考虑波包近似, 参见 [4], 取 $SU(M)$ (准) 相干态:

$$|\Psi\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}} \left(\sum_{i=1}^M \psi_i a_i^\dagger \right)^N |0\rangle, \quad M = 3,$$

$$\langle n_1, n_2, n_3 | \Psi \rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_1! n_2! n_3!}} \psi_1^{n_1} \psi_2^{n_2} \psi_3^{n_3} |n_1, n_2, n_3\rangle \quad (4.4.3)$$

其中 $\sum_i |\psi_i|^2 = 1$. 不难验证其是定域在 $\langle x_i \rangle = |\psi_i|^2$ 处的波包, $\sigma_{x_i}^2 = \langle (\Delta x_i)^2 \rangle = |\psi_i|^2(1 - |\psi_i|^2)/N$.

注意到在谐振子系统中, 这样的态在 $N \rightarrow \infty$ 满足光学极限意义下的准经典近似, 但并非相干态 (参见本章前两节的讨论); 不过此处它确为一合理的相干态, 原因在于关注的参数空间发生了变化——我们不再关心单阱内的波函数, 而是关注 N 个激发在三阱间的分布。在这一意义下, 考虑到上述 $|\langle n_1, n_2, n_3 | \Psi \rangle|^2$ 为二项分布, 在 $N \rightarrow \infty$ 时形态趋近于 Gaussian 波包, 确为接近经典极限的相干波包, 参见图 4.4.

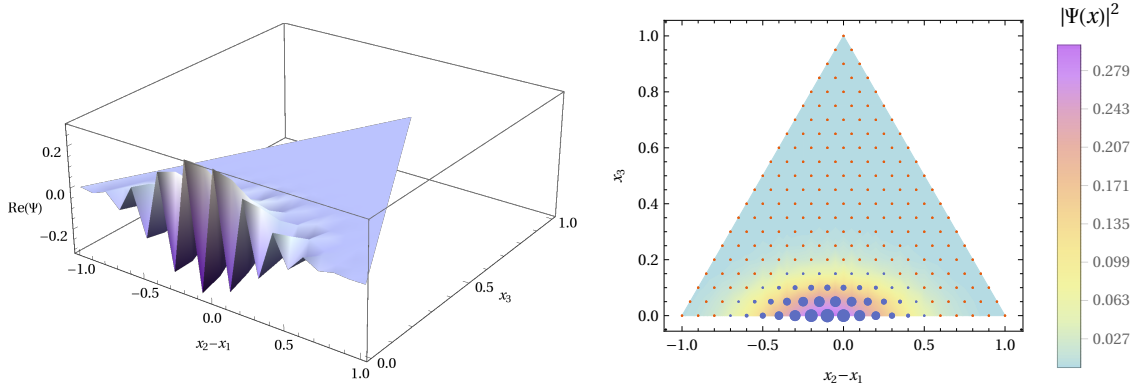


图 4.4 本文所取的 BEC 数值模拟初态图示, 这里 $N = 20$, 三角形参数空间的坐标取为 $(x_2 - x_1, x_3)$. 图中的颜色热度及点的尺度均表征了 $(\psi_1, \psi_2, \psi_3) = (\sqrt{0.531}, -\sqrt{0.438}, \sqrt{0.031})$ 对应的初态 $|\Psi\rangle$ 分布; 左图为 $\text{Re } \Psi(x)$ 的分布 (对此 Ψ 有 $\text{Im } \Psi(x) \equiv 0$), 右图中点径正比于 $|\langle n_1, n_2, n_3 | \Psi \rangle| = |\Psi(x)|$, 从而点的面积正比于 $|\Psi(x)|^2$, 而颜色表征 $|\Psi(x)|^2$.

上述两种方案均给出变量 $(\psi_1, \psi_2, \psi_3) \in \mathbb{C}^3$ 满足的准经典运动方程 [3, 4], 此时粒子数守恒体现为概率守恒 $\sum_i |\psi_i|^2 = 1$, 而运动方程为:

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c|\psi_1|^2 - 1/2 & -1/2 & -1/2 \\ -1/2 & c|\psi_2|^2 - 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & -1/2 & c|\psi_3|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} \quad (4.4.4)$$

其中对角元体现玻色子间的非线性相互作用, 而非对角元刻画阱间的隧穿动力学。

此外, 注意到 $(\psi_1, \psi_2, \psi_3) \in \mathbb{C}^3$, 因此该方程本质上是准经典的; 相应的经典运动方程由上述变量重新组合得到。注意到 (ψ_1, ψ_2, ψ_3) 隐含的 6 个实变量满足约束 $\sum_i |\psi_i|^2 = 1$, 同时存在一个全局的相位冗余度, 由此得到 4 个实自由度, 可以组织为两对正则变量 $(J_1, \theta_1), (J_2, \theta_2)$. 参见 [4], 有:

$$J_1 = |\psi_1|^2 - |\psi_3|^2 = x_1 - x_3, \quad J_2 = |\psi_3|^2 = x_3, \quad \theta_1 = \arg \frac{\psi_2}{\psi_1}, \quad \theta_2 = \arg \frac{\psi_2^2}{\psi_1 \psi_3}$$

在由此刻画的 2×2 维相空间中，仅有一个守恒能量 E ，因此系统不完全可积，存在混沌区域；[65–67] 等已对这一类经典混沌动力学进行了仔细分析，这里我们可利用 Poincaré 截面直观地可视化体系由规则轨道到混沌行为的转变，参见图 4.5.

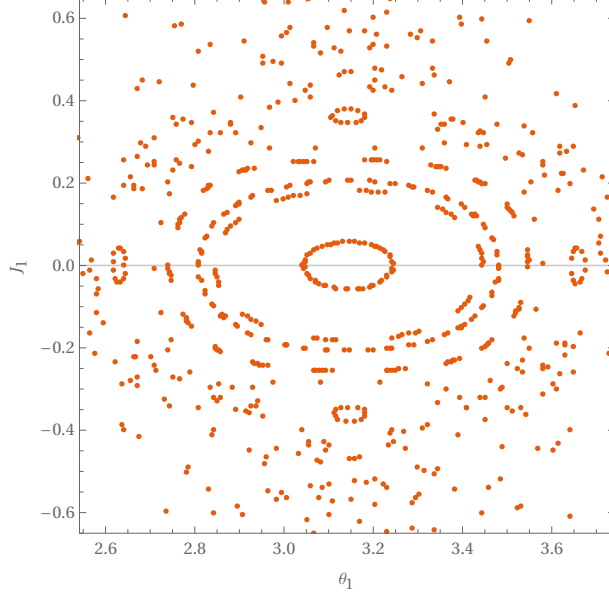


图 4.5 本文所研究 BEC 体系对应的经典动力学 Poincaré 截面，该截面处于相空间中 $\theta_2 = 0$ 处，且限制 $\theta_2 < 0$ 。此外 $c = 1.25$, $E \approx 0.767$ ，演化由 $t = 0$ 至 $t = 100$ 。可见中心的规则轨道，以及周围的混沌区域；前图 4.4 中的初态 $(\psi_1, \psi_2, \psi_3) = (\sqrt{0.531}, -\sqrt{0.438}, \sqrt{0.031})$ 对应 $J_1 = 0.5, \theta_1 = \pi$ ，处于混沌区域中。图中各点的初态通过在图示范围内均匀撒点得到。

进一步，为了刻画态与态之间的差异，我们引入保真度 (fidelity) [4]：

$$\mathcal{F}(\rho, \rho') = \frac{1}{N^2} \text{tr}(\rho^\dagger \rho'), \quad \rho_{ij}(\Psi) = \sum_{i,j=1}^M |\#i\rangle \langle \Psi | a_i^\dagger a_j | \Psi \rangle \langle \#j|$$

这里引入了约化密度矩阵 ρ ，使得阱 i 体现为态 $|\#i\rangle$ ，以读取并比较三阱内的粒子数；有对应关系：

$$|n_1, n_2, n_3\rangle \longmapsto n_1 |\#1\rangle \langle \#1| + n_2 |\#2\rangle \langle \#2| + n_3 |\#3\rangle \langle \#3|$$

经典极限下，

$$\mathcal{F} \longrightarrow |\psi^\dagger \psi'|^2, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix}$$

此外，量子情形下还可定义相干度 (coherenece) $\mathcal{C} = \mathcal{F}(\rho, \rho)$ ，不难验证 $\mathcal{C} = 1$ 当且仅当 $|\Psi\rangle$ 为如 (4.4.3) 所示的相干态。

在此基础上，我们由图 4.4 所示初态出发，进一步比较该体系的量子与经典动力学。由于涉及非线性动力学，须注意模拟算法的精度问题，详见附录 B；量子部分的模拟则通过求解 $\frac{(N+1)(N+2)}{2}$ 维的本征值问题实现。我们考虑 $c = 1.25$, $t = 100$ 内的动力学，取图 4.4 初态并引入微扰，比较两者的经典与量子演化，结果如图 4.6, 4.7 所示。

首先关注动力学的短期图像，如图 4.6 及图 4.8 的上部分，可见我们重现了 [4] 中观察到的现象，即混沌参数下体系相干性的迅速衰减；同时，随 N 增大量子动力学逐渐逼近经典情形，此即验证了这一模型中的量子-经典对应关系。这也印证了我们对量子混沌（quantum chaos）的基本认识：虽说 Hilbert 空间的动力学是线性的，但在经典极限下 Hilbert 空间的维数（能级数目）显著增大，逼近经典极限，此时经典动力学中的混沌现象将展现在量子体系中。

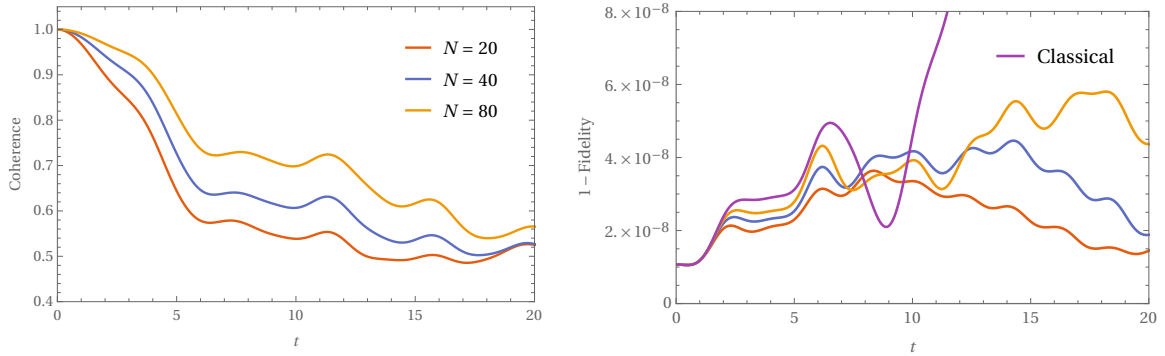


图 4.6 本文考察的三势阱玻色子体系相干性的短期表现，时间演化至 $t = 20$. 准经典初态 $\psi = (\psi_1, \psi_2, \psi_3)$ 及对应的量子态 $|\Psi\rangle$ 参见图 4.4, 其中保真度 (fidelity) 相对于微扰态 $\psi' = (\psi_1, \psi'_2, \psi'_3)$ 计算得到, 其中 $\psi'_3 = \psi_3 + 0.0001$. 保真度为与经典结果比较而进行了归一化, 即图中 $1 - \text{Fidelity} = 1 - \mathcal{F}(\Psi, \Psi') / \sqrt{\mathcal{C}(\Psi)\mathcal{C}(\Psi')}$.

有趣的是，进一步考察体系的长期演化，如图 4.7 所示，我们似乎观察到了小 N 时初态复现的特征；相应时刻的概率分布如图 4.8 所示。

不过，这里尚不能排除这类复现源自额外的量子动力学效应（如前述 [57] 提及的量子共振）；参见图 4.9, 可见波包首次复现的时刻并不单调地依赖于粒子数 N , 甚至当 N 很小时（如 $N = 14$ 时），也有一定可能在 $t = 100$ 时间内没有复现。我们猜想这其中可能存在额外的因素，有待下一步更深度研究。

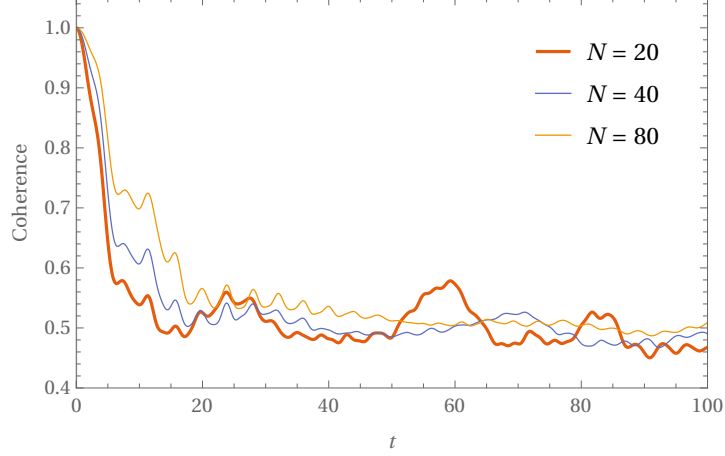


图 4.7 本文考察的三势阱玻色子体系相干性的长期表现, 时间演化至 $t = 100$, 其余参数参见图 4.6. 注意 $N = 20$ 时, $t \approx 25, 60, 83$ 附近出现的峰值。

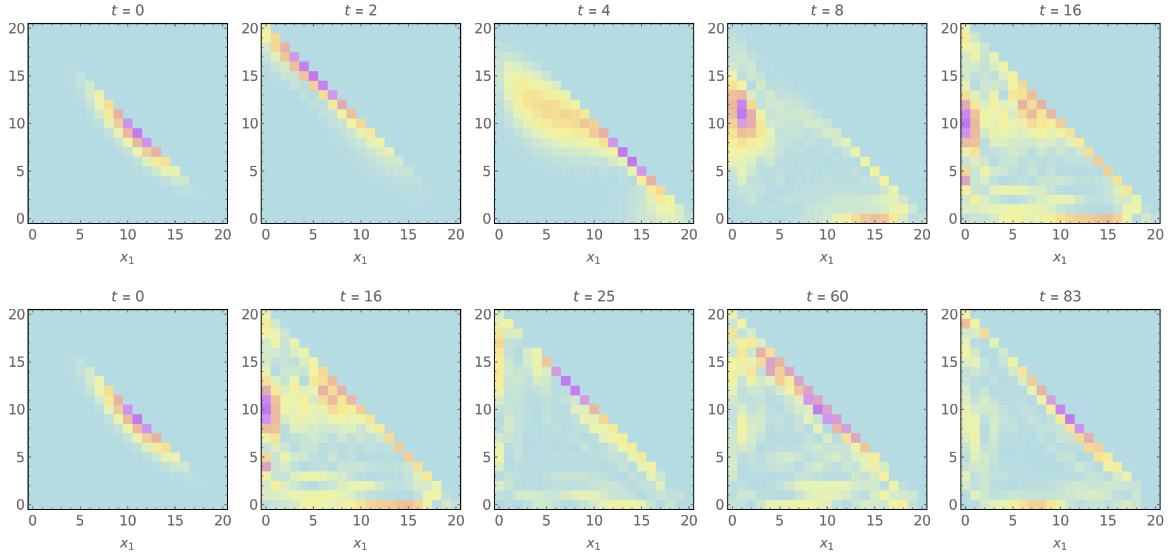


图 4.8 本文考察的 BEC 体系参数空间的演化图示, $N = 20$, 横纵轴分别为 x_1, x_2 , 初态等参数参见图 4.6. 第一行展现了短时间内的波包发散, 第二行则展现了长时间演化后出现的复现迹象。

另一方面需要检验的是这类初态复现能否由经典系综进行描述; 若可以在经典系综的模拟中得到类似的复现情况, 则表明这类复现迹象严格意义下并非“量子”复现, 而只不过是源自量子化后的初态具有的额外结构, 如图 4.4 所示。

经典系综的构造可参考 [55], 即对量子化的初态进行 Fourier 变换而得到系综关于动量的分布; 不过, 对此问题而言, 由于参数空间是如图 4.4 的三角形区域 (与 [55] 中所研究的一维等间距格点不同), 此时 Fourier 变换须恰当地处理边界和度量。这一问题也有待后续进一步研究。

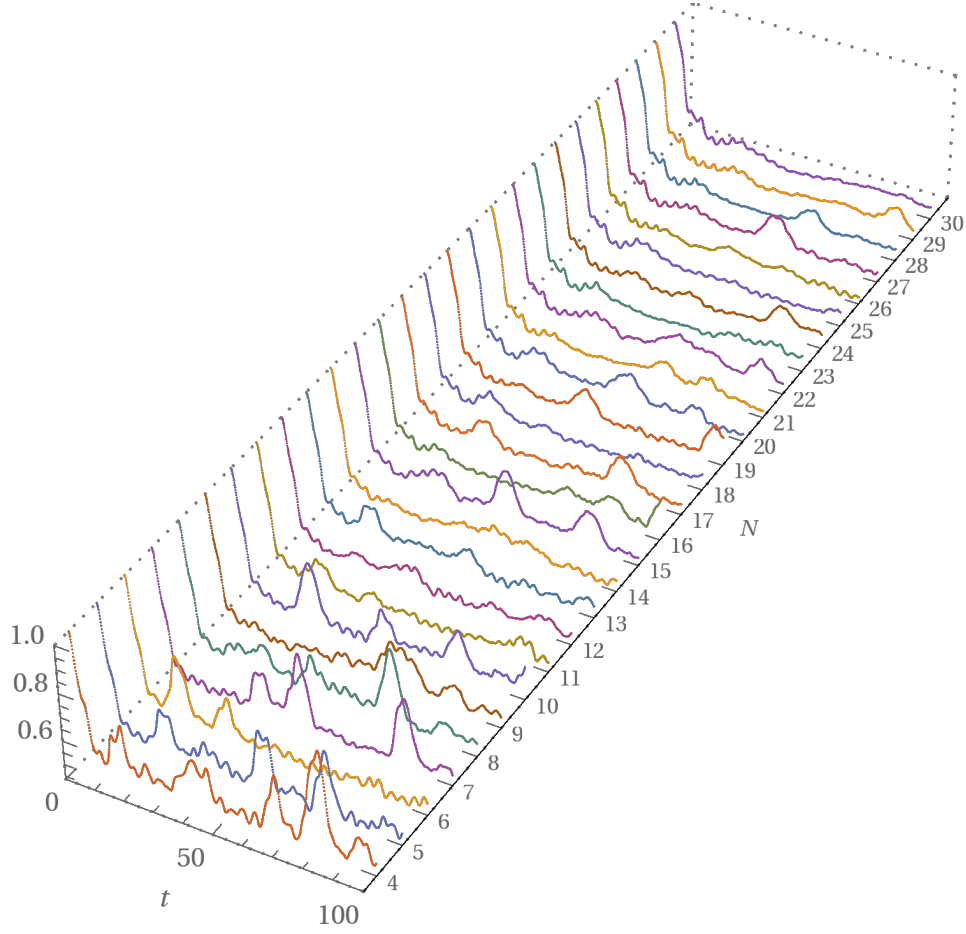


图 4.9 本文考察的 BEC 体系相干度演化与对粒子数 N 的依赖图示, 纵轴 (z 轴) 即相干度 (coherence), 且 $N = 4, 5, \dots, 30$. 相干度的峰值对应可能的量子复现, 可见随 N 增大在 $t = 100$ 内复现的概率和强度均显著减小, 不过在 N 较小时也可能出现在 $t = 100$ 内没有明显复现的情况, 如图中 $N = 14$ 时。

第五章 总结

本文采用形式推演与具体计算相结合的方式，从几何结构、物理直观乃至历史发展的角度，系统地归纳了量子力学经典对应的理论体系与核心内容。

第一部分（含第一、二章）的讨论止于经典对应中的关键结论：Erhenfest 定理，我们强调可由基本的数学框架、结合简单的几何对应与经典对称性，较为严格而不失优雅地导出这一结论以及量子动力学的完整体系。第二部分（第三章）的讨论止于光学对应与路径积分，我们概述了经典作用量在量子力学中的意义，从而清晰地归纳了坐标表象下的经典对应图像。第三部分（第四章）则止于对波包动力学的模拟，我们通过谐振子的动力学引入了升降算符与相干态，作为与光学对应互补的经典极限图像，并以三势阱玻色子这一具体体系为例，介绍了相干态动力学模拟在量子混沌等前沿领域研究中的应用。

由于篇幅及作者学识所限，仍有许多关于量子物理基础及经典对应的深刻话题本文未能仔细讨论。首先，4.4 节中的动力学模拟还有待改进，尤其是对其经典系综的模拟和初态复现的研究；其次，理论研究中还有诸多令人振奋的发展有待介绍，这包括但不限于几何量子化（geometric quantization）的系统理论 [68]，相空间上的量子力学（Weyl quantization）[24]，退相干理论，以及引力导致的退相干与经典对应效应 [69, 70] 等。这均有待后续研究进一步加以补充。

参考文献

- [1] N. Bohr. “Über die Serienspektren der Elemente”. *Zeitschrift für Physik*, 1920-10: 423–469. <https://doi.org/10.1007/BF01329978>.
- [2] Eugene Paul Wigner. “Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren”.
- [3] Qiuyi Guo, XuZong Chen and Biao Wu. “Tunneling dynamics and band structures of three weakly coupled Bose-Einstein condensates”. *Optics express*, **2014**, 22(16): 19219–19234.
- [4] Xizhi Han, Biao Wu *et al.* “Ehrenfest breakdown of the mean-field dynamics of Bose gases”. *Physical Review A*, **2016**, 93(2): 023621.
- [5] Niels Bohr. “On the constitution of atoms and molecules”. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **1913**, 26(153): 476–502.
- [6] Erwin Schrödinger. “Quantisierung als eigenwertproblem”. *Annalen der physik*, **1926**, 385(13): 437–490.
- [7] Gregor Wentzel. “Eine verallgemeinerung der quantenbedingungen für die zwecke der wellenmechanik”. *Zeitschrift für Physik*, **1926**, 38(6-7): 518–529.
- [8] Hendrik Anthony Kramers. “Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung”. *Zeitschrift für Physik*, **1926**, 39(10-11): 828–840.
- [9] Léon Brillouin. “La mécanique ondulatoire de Schrödinger; une méthode générale de résolution par approximations successives”. *Compt. Rend. Hebd. Seances Acad. Sci.* **1926**, 183: 24–26.
- [10] Paul Adrien Maurice Dirac. *The principles of quantum mechanics*. Oxford university press, **1981**.
- [11] John Von Neumann. *Mathematical foundations of quantum mechanics: New edition*. Princeton university press, **2018**.
- [12] J. Townsend. *A Modern Approach to Quantum Mechanics*. University Science Books, **2012**.
- [13] J.J. Sakurai and J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, **2011**.
- [14] L.E. Ballentine. *Quantum Mechanics: A Modern Development*. World Scientific, **1998**.
- [15] Guido Bacciagaluppi and Elise Crull. “Heisenberg (and Schrödinger, and Pauli) on hidden variables”. *Studies In History and Philosophy of Science Part B: Studies In History and Philosophy of Modern Physics*, **2009**, 40(4): 374–382.
- [16] Hugh Everett III. “The theory of the universal wave function”. **1956**.
- [17] Bryce Seligman DeWitt and Neill Graham. *The many worlds interpretation of quantum mechanics*. Princeton University Press, **2015**.
- [18] GB Roston, Montserrat Casas, A Plastino *et al.* “Quantum entanglement, spin-1/2 and the Stern–Gerlach experiment”. *European journal of physics*, **2005**, 26(4): 657.

- [19] A Venugopalan, Deepak Kumar and R Ghosh. “*Environment-induced decoherence I. The Stern-Gerlach measurement*”. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **1995**, 220(3-4): 563–575.
- [20] 王正行. 量子力学原理, **2003**.
- [21] Jorge José and Eugene Saletan. *Classical dynamics: a contemporary approach*. AAPT, **2000**.
- [22] 梁灿彬, 周彬. 微分几何入门与广义相对论. 北京: 科学出版社, **2006**.
- [23] 杨泽森. 高等量子力学. 北京: 北京大学出版社, **2007**.
- [24] Maurice A De Gosson. *Symplectic geometry and quantum mechanics*. Springer Science & Business Media, **2006**.
- [25] Brian Hall. *Lie groups, Lie algebras, and representations: an elementary introduction*. Springer, **2015**.
- [26] Steven Weinberg. *The quantum theory of fields. Vol. 1: Foundations*. Cambridge University Press, **1995**.
- [27] Helmut Rauch, Anton Zeilinger, Gerald Badurek *et al*. “*Verification of coherent spinor rotation of fermions*”. *Physics Letters A*, **1975**, 54(6): 425–427.
- [28] Samuel A Werner, Roberto Colella, Albert W Overhauser *et al*. “*Observation of the phase shift of a neutron due to precession in a magnetic field*”. *Physical Review Letters*, **1975**, 35(16): 1053.
- [29] Robert M Wald. “*General relativity(Book)*”. *Chicago, University of Chicago Press, 1984, 504 p*, **1984**.
- [30] H Blaine Lawson Jr and Marie-Louise Michelsohn. “*Spin geometry, volume 38 of*”. *Princeton Mathematical Series*, **1989**.
- [31] Richard Schoen and Shing-Tung Yau. “*On the proof of the positive mass conjecture in general relativity*”. *Communications in Mathematical Physics*, **1979**, 65(1): 45–76.
- [32] Edward Witten. “*A new proof of the positive energy theorem*”. *Communications in Mathematical Physics*, **1981**, 80(3): 381–402.
- [33] David B Cook. *Probability and Schrödinger’s Mechanics*. World Scientific, **2002**.
- [34] JD Jackson. “*Classical Electrodynamics*”. *Classical Electrodynamics, New York: Wiley, 1962, 1962*.
- [35] 郑汉青. 量子场论. 北京: 北京大学出版社, **2018**.
- [36] Chen Ning Yang. “*Square root of minus one, complex phases and Erwin Schrödinger*”. In: *Selected Papers of Chen Ning Yang II: With Commentaries*. World Scientific, **2013**: 94–105.
- [37] D.J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson Prentice Hall, **2005**.
- [38] Arnold Sommerfeld. “*Zur quantentheorie der spektrallinien*”. *Annalen der Physik*, **1916**, 356(17): 1–94.
- [39] William Wilson. “*LXXXIII. The quantum-theory of radiation and line spectra*”. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, **1915**, 29(174): 795–802.

-
- [40] RP Feynman. “*Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics*”. *Reviews of Modern Physics*, **1948**, 20(2): 367–387.
 - [41] Anthony Zee. *Quantum field theory in a nutshell*. Princeton university press, **2010**.
 - [42] E. Hecht. *Optics*. Pearson, **2012**.
 - [43] PAM DIRAC. “*The Lagrangian in quantum mechanics*”. *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion*, **1933**, 3: 312–320.
 - [44] Richard Phillips Feynman and Laurie M Brown. *Feynman’s thesis: a new approach to quantum theory*. World Scientific, **2005**.
 - [45] Ramamurti Shankar. *Principles of quantum mechanics*. Springer Science & Business Media, **2012**.
 - [46] T Holstein and HI Primakoff. “*Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet*”. *Physical Review*, **1940**, 58(12): 1098.
 - [47] P Jordan. “*Der Zusammenhang der symmetrischen und linearen Gruppen und das Mehrkörperproblem*”. *Zeitschrift für Physik*, **1935**, 94(7-8): 531–535.
 - [48] Julian Schwinger. “*On angular momentum*”. In: *Quantum Mechanics*. Springer, **2001**: 149–181.
 - [49] Andrew Scott Parkins and Daniel F Walls. “*The physics of trapped dilute-gas Bose–Einstein condensates*”. *Physics Reports*, **1998**, 303(1): 1–80.
 - [50] Sheldon Goldstein, Joel L Lebowitz, Roderich Tumulka *et al*. “*Long-time behavior of macroscopic quantum systems*”. *The European Physical Journal H*, **2010**, 35(2): 173–200.
 - [51] Walter Greiner and Berndt Müller. *Quantum mechanics: symmetries*. Springer Science & Business Media, **2012**.
 - [52] DM Fradkin. “*Three-dimensional isotropic harmonic oscillator and SU_3* ”. *American Journal of Physics*, **1965**, 33(3): 207–211.
 - [53] Vladimir Igorevich Arnol’d. *Mathematical methods of classical mechanics*. Springer Science & Business Media, **2013**.
 - [54] Xizhi Han, Biao Wu *et al*. “*Entropy for quantum pure states and quantum H theorem*”. *Physical Review E*, **2015**, 91(6): 062106.
 - [55] Yiqiang Zhao and Biao Wu. “*Quantum-classical correspondence in integrable systems*”. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, **2019**, 62(9): 997011.
 - [56] P Bocchieri and A Loinger. “*Quantum recurrence theorem*”. *Physical Review*, **1957**, 107(2): 337.
 - [57] Felix M Izrailev. “*Simple models of quantum chaos: spectrum and eigenfunctions*”. *Physics Reports*, **1990**, 196(5-6): 299–392.
 - [58] Laurence G Yaffe. “*Large N limits as classical mechanics*”. *Reviews of Modern Physics*, **1982**, 54(2): 407.
 - [59] Hagar Veksler and Shmuel Fishman. “*Semiclassical analysis of Bose–Hubbard dynamics*”. *New Journal of Physics*, **2015**, 17(5): 053030.

- [60] Leonardo Fallani, Luigi De Sarlo, Jessica E Lye *et al.* “*Observation of dynamical instability for a Bose-Einstein condensate in a moving 1D optical lattice*”. *Physical review letters*, **2004**, 93(14): 140406.
- [61] Dieter Jaksch and Peter Zoller. “*The cold atom Hubbard toolbox*”. *Annals of physics*, **2005**, 315(1): 52–79.
- [62] Dirk-Sören Lühmann, Ole Jürgensen and Klaus Sengstock. “*Multi-orbital and density-induced tunneling of bosons in optical lattices*”. *New Journal of Physics*, **2012**, 14(3): 033021.
- [63] HA Gersch and GC Knollman. “*Quantum cell model for bosons*”. *Physical Review*, **1963**, 129(2): 959.
- [64] John Hubbard. “*Electron correlations in narrow energy bands*”. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, **1963**, 276(1365): 238–257.
- [65] K Nemoto, CA Holmes, Gerard J Milburn *et al.* “*Quantum dynamics of three coupled atomic Bose-Einstein condensates*”. *Physical Review A*, **2000**, 63(1): 013604.
- [66] Roberto Franzosi and Vittorio Penna. “*Chaotic behavior, collective modes, and self-trapping in the dynamics of three coupled Bose-Einstein condensates*”. *Physical Review E*, **2003**, 67(4): 046227.
- [67] Bin Liu, Li-Bin Fu, Shi-Ping Yang *et al.* “*Josephson oscillation and transition to self-trapping for Bose-Einstein condensates in a triple-well trap*”. *Physical Review A*, **2007**, 75(3): 033601.
- [68] Sean Bates and Alan Weinstein. *Lectures on the Geometry of Quantization*. American Mathematical Soc., **1997**.
- [69] Claus Kiefer. “*Decoherence in quantum electrodynamics and quantum gravity*”. *Physical Review D*, **1992**, 46(4): 1658.
- [70] Shahar Hod. “*Bohr’s correspondence principle and the area spectrum of quantum black holes*”. *Physical Review Letters*, **1998**, 81(20): 4293.
- [71] William H Press, Saul A Teukolsky, William T Vetterling *et al.* *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge university press, **2007**.

附录 A 时间反演对称性简介

正文第二章中的讨论以连续对称性为主；至于时间反演、空间反演这类离散对称性，情况略有不同。作为例子，考察时间反演变换： $(\xi, t) \xrightarrow{g} (\xi, -t)$ ，根据 (2.4.1)，自然可以猜想时间反演态：

$$|\Psi'(t)\rangle \stackrel{?}{=} |\Psi(-t)\rangle, \quad |\Psi'(t')\rangle = U'(t'; 0) T |\Psi(0)\rangle \quad (\text{A.1})$$

这里 $U'(t'; 0)$ 是时间反演变换后的时间演化算符，注意记号的变化： $t' = -t$ 。然而，上式并不成立；特别地， $t' = t = 0$ 时，时间反演应导致动量反号： $\langle p \rangle_{\Psi'} = -\langle p \rangle_{\Psi}$ ，上述 $|\Psi'\rangle = |\Psi\rangle$ 显然不满足这一要求。

事实上，所谓 $|\Psi(-t)\rangle$ 根本就是非物理的；设 $|\Psi(t)\rangle$ 满足 Schrödinger 方程，则 $|\Psi(-t)\rangle$ 一般来说并不满足变换后的运动方程。参考 [20]，为找到满足变换后 Schrödinger 方程的量子态，首先考察变换 $t \rightarrow t' = -t$ 作用后的运动方程，我们期待有：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} |\Psi'(t')\rangle = H'(x', p', t') |\Psi'(t')\rangle$$

其中， $H'(x', p', t')$ 是变换后的 H 。而对原本的时间坐标 t ，有共轭的 Schrödinger 方程：

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi^\dagger(t)\rangle = H^\dagger(x, p, t) |\Psi^\dagger(t)\rangle$$

v.s.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} |\Psi^\dagger(-t')\rangle = H^\dagger(x', -p', -t') |\Psi^\dagger(-t')\rangle$$

比较两式，可见实际应当有：

$$|\Psi'(t')\rangle = |\Psi^\dagger(-t')\rangle = |\Psi^\dagger(t)\rangle, \quad \neq |\Psi(t)\rangle,$$

$$H'(x', p', t') = H^\dagger(x', -p', -t') = H^\dagger(x, p, t),$$

前已引用时间演化算符： $U'(t'; 0)$ ，其函数形式正是由变换后的 H' 确定：

$$U'(t' + \delta t'; t') \simeq 1 - i \frac{H'(x', p', t')}{\hbar} \delta t' \simeq U^\dagger(t + \delta t; t), \quad \delta t' = -\delta t$$

前述错误猜想 (A.1) 是在假定： $\Psi'(x', t') = \Psi(x, t)$ 的前提下给出的，而实际上，我们有 $\Psi'(x', t') \propto \Psi^\dagger(x, t)$ ，与连续对称性的规律不尽相同。换回原本的时空坐标 x, t ，得时间反演的综合效果：

$$|\Psi'(t)\rangle = |\Psi'(-t')\rangle = |\Psi^\dagger(-t)\rangle, \quad H'(x, p, t) = H^\dagger(x, -p, -t)$$

进一步，若系统具有时间反演对称性，则

$$U'(t + \delta t; t) \simeq \mathbb{1} - i \frac{H^\dagger(x, -p, -t)}{\hbar} \delta t = \mathbb{1} - i \frac{H(x, p, t)}{\hbar} \delta t \simeq U(t + \delta t; t)$$

即 $U' = U$ 具有完全一致的函数形式；也就是说，时间反演不改变动力学演化规律。若系统不具有时间反演对称性，则 U' 和 U 可以很不相同。



前面通过共轭 Schrödinger 方程引入了记号 $|\Psi^\dagger\rangle$ ，可由其对坐标本征矢 $|x\rangle$ 的作用规律加以严格定义^①，实际上正是波函数的共轭：

$$\langle x | \Psi^\dagger \rangle = \langle x | \Psi \rangle^\dagger$$

暂且忽略时间演化，考虑纯粹的时间反演，有： $T|\Psi\rangle = |\Psi^\dagger\rangle$ ，可见 T 并不是线性算子；事实上， T 正是所谓共轭变换 $|\Psi\rangle \mapsto |\Psi^\dagger\rangle$ 的算符表示^②：

$$T \sum_i c_i |\Psi_i\rangle = \sum_i c_i^\dagger |\Psi_i^\dagger\rangle$$

T 对叠加态作用时，叠加系数变为其复共轭；具有这一性质的算符称为反线性算符。进一步，不难验证 T 保持内积不变，这使其进一步成为反么正算符。由此可见，时间反演算符正是 Wigner 定理中反么正算符的一个实例。

^①不难发现，这一定义依赖于基底 $|x\rangle$ ；不过这并无大碍，事实上，另设 $\langle \xi | \Psi^\dagger \rangle = \langle \xi | \Psi \rangle^\dagger$ ，则：

$$\begin{aligned} \langle \xi | \Psi^\dagger \rangle &= \langle \xi | \Psi \rangle^\dagger = \langle \xi^\dagger | \Psi \rangle, \\ |\Psi^\dagger\rangle &= \int d\xi |\xi\rangle \langle \xi | \Psi^\dagger \rangle = \int d\xi |\xi\rangle \langle \xi^\dagger | \Psi \rangle \end{aligned}$$

也就是说， $|\Psi^\dagger\rangle$ 与 $|\Psi\rangle$ 仅相差一个么正变换： $\int d\xi |\xi\rangle \langle \xi^\dagger|$ 。

^②事实上，定义 T 时存在一个额外的全局相位冗余度： $|\Psi\rangle \rightarrow e^{i\theta} |\Psi\rangle$ ，但因其全局性并无可观测效应（这与时间演化带来的相位不同），因此往往直接取定 $e^{i\theta} = 1$ 。

附录 B 三阱 BEC 系统的数值模拟

如 4.4 节所述, 对混沌系统进行模拟时应当注意数值方法的稳定性和精度。在考察经典动力学 (4.4.4) 的演化时, 本研究中实现了多种算法, 通过不同算法、不同离散步长间的交叉比较以确定合适的算法与步长。不同解之间的吻合度通过参数空间 (x_1, x_2, x_3) 中的距离加以衡量, 即:

$$\Delta(t) = \left\| \Delta \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}_{(t)} \right\| = \left\| \Delta \begin{pmatrix} |\psi_1|^2 \\ |\psi_2|^2 \\ |\psi_3|^2 \end{pmatrix}_{(t)} \right\|$$

算法参考 [71] 改进后实现, 具体实现的有:

- 矩阵指数演化: $\psi_{t+\delta t} = e^{-iH(\psi_t)\delta t}\psi_t$, 此方法为 [4] 中采用的原始方法, 是一阶差分方案的升级版, 可以较好地保证模 $\|\psi\|$ 守恒, 不过要确保 $-t = 100$ 内的精度需要很小的步长 ($\delta t \simeq 0.0001$), 计算代价过高;

- Crank-Nicolson 格式: $e^{+iH(\psi_{t+\delta t})\frac{\delta t}{2}}\psi_{t+\delta t} = e^{-iH(\psi_t)\frac{\delta t}{2}}\psi_t$, 这是求解 Schrödinger 方程的典型数值方法 [71], 可以很好地保证模守恒; 不过这是一个隐式方法, 计算代价更高, 且精度阶数未有显著提升;

- 预估-校正方法: 预估: $\tilde{\psi}_{t+\delta t} = e^{-iH(\psi_t)\delta t}\psi_t$, 校正: $\psi_{t+\delta t} = e^{-iH(\tilde{\psi}_{t+\delta t})\frac{\delta t}{2}}e^{-iH(\psi_t)\frac{\delta t}{2}}\psi_t$, 这一方法在 $-t < 75$ 内表现十分优秀, 可以在较大的步长 ($\delta t \simeq 0.01$) 内实现充分好的精度, 不过在 $-t < 75$ 后表现一般, 且减小步长带来的改善十分有限;

- 普适的 Runge-Kutta 四阶方法 (RK4): 这一方法与前述采用矩阵演化的各方案不同, 似乎并不能显示地保证模守恒, 不过有显著较高的 4 阶精度。

交叉比较后, 发现朴素的 RK4 方法实际表现最佳, 可以在 $\delta t = 0.01$ 时保证 $-t = 100$ 内的可靠性, 因此取其为 (4.4.4) 的最终计算方法。对于量子动力学 (4.4.2) 的模拟可直接由矩阵对角化实现, 结果的可靠时长 T 可由 $\delta E \cdot T \sim 1$ 估计; δE 接近机器精度, 足以确保 $-t = 100$ 内解的可靠性。

