第五章　量子力学与经典力学

§5.1 量子力学与经典力学的关系

在绪论部分，我们已经指出：**20** 世纪物理学取得的两个最大的进展是相对论和量子理论。相对论的建立从根本上改变了人们原有的空间和时间的概念，指明了牛顿力学的适用范围（即物理的运动速度 $v << c$）。

而量子力学的建立，开辟了人们认识微观世界的道路，并由此开创了物理学的新时代，至此，我们已学完了《量子力学》的基本原理。于是，人们要问：《量子力学》与《经典力学》之间又有什么关系呢？或者说：在什么样的条件下，《量子力学》将回到《经典力学》呢？

本章主要内容：

（1）讨论《量子力学》如何回到《经典力学》的，首先是从一般物理意义上讨论，其次是从理论的数学结构上加以分析。

（2）介绍一种准经典的近似方法——**W. K. B.**法来求解这个定态的薛定谔方程。

1. 一般讨论

当一个物体的运动速度$v << c$（光速）时，相对论效应便可忽略，《相对论力学》将回到《牛顿力学》。形式上，可以表述为：在$c \to \infty$的极限情况下，相对论力学$\to$牛顿力学。

与此相仿，《量子力学》与《经典力学》的关系，亦可形式地表述为：在普朗克常数$h \to 0$的情况下，量子效应便可以忽略，量子力学$\to$经典力学。这一点是狄喇克首先指出的，它比玻尔的对应原理更准确地反映了量子力学与经典力学的关系。

实际上，普朗克常数$h \neq 0$。其表现之一是：某些力学量（如角动量、束缚态下的能量等）的本征值是量子化的，相邻本征值之差$\sim O(h)$。只有当这个差别可以忽略时，才能得出经典力学中“所有力学量的变化都是连续的”这一结论。但有一些现象，如测不准关系，纯属量子效应，并不与某些力学量的本征值的不连续性有关，当$h \to 0$时，$\Delta x \bullet \Delta p_x \sim h \to 0$，粒子的坐标$x$与动量$p_x$就可以同时取确定的值，此时，“经典轨道运动概念就完全适用了”。

2. 泊松括号与运动方程

在经典力学中，任何两个力学量的乘积是满足交换律的，即

$$AB - BA = 0$$

而在量子力学中，表达力学量的算符则遵守不可对易代数运算规则。狄喇克首先指出：在$h \to 0$极限下

$$\frac{[\hat{A},\hat{B}]}{ih} \to \{A,B\} \qquad (1)$$

这里$\{A,B\}$是经典的泊松括号，定义为

$$\{A,B\} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i} \right) \qquad (2)$$

其中(q_i, p_i)分别代表体系的一对共轭正则坐标和动量，

$i=1,2,\ldots,n$（n为体系的自由度，）A,B是(p_i,q_i)的整函数。

[（1）式的证明可参见曾谨言教材。]

因此，量子力学中的海森伯方程

$$\frac{d}{dt}\hat{q}_i = \frac{[\hat{q},\hat{H}]}{i\hbar}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{p}_i = \frac{[\hat{p},\hat{H}]}{i\hbar} \qquad (3)$$

在$h \to 0$极限情况下，将回到经典力学的正则方程

$$
\frac{d}{dt} q_i = \{q_i, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_i}
$$

$$
\frac{d}{dt} p_i = \{p_i, H\} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \qquad (4)
$$

3. 薛定谔方程与雅可比-哈密顿方程的关系

设粒子在势场中$V(\vec{r})$运动，薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi \qquad (5)$$

试将波函数的模与相角分开，令

$$\psi=R\times e^{iS/\hbar}, \quad （R,S\text{ 为实函数}） \qquad (6)$$

将（6）代入（5），经过计算（参见曾谨言教材），然后分别令：实部=实部，虚部=虚部，得：

$$\boxed{\frac{\partial R}{\partial t}=-\frac{1}{2m}(R\nabla^2S+2\nabla R\bullet\nabla S)} \qquad (7a)$$

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial t}=-\left(\frac{(\nabla S)^2}{2m}+V-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2R}{R}\right)} \qquad (7b)$$

方程（7）与（5）完全等价，（7a）式就是连续性方程。

下面来推导（7a）式：

因为

$$\rho = |\psi|^2 = R^2, \quad （几率密度） \tag{8}$$

$$j = \frac{1}{2}\left[\psi^* \frac{\hat{p}}{m}\psi + c.c.\right] = \frac{1}{2m}\left[\psi^* \frac{\hbar}{i}\nabla\psi + c.c.\right]$$
$$= \frac{1}{2m}\left[R(\frac{\hbar}{i}\nabla R + R\nabla S) + c.c.\right] = \frac{R^2}{m}\nabla S \tag{9}$$

因此：

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla j = 2R\frac{\partial R}{\partial t} + \nabla\bullet\left(\frac{R^2}{m}\nabla S\right)$$

$$= 2R\frac{\partial R}{\partial t} + \frac{2R}{m}\nabla R\bullet\nabla S + \frac{R^2}{m}\nabla^2 S \tag{10}$$

又由于连续方程（几率守恒）

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + j = 0 \qquad (11)$$

将（11）代入（10），得

$$\frac{\partial R}{\partial t} = -\frac{1}{2m}(R\nabla^2 S + 2\nabla R \bullet \nabla S) \qquad (12)$$

这就是（7a）式。

在$h \to 0$的情况下，（7b）式变成

$$\boxed{\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V = 0} \qquad (13)$$

它与《经典力学》中的雅可比-哈密顿方程相同。

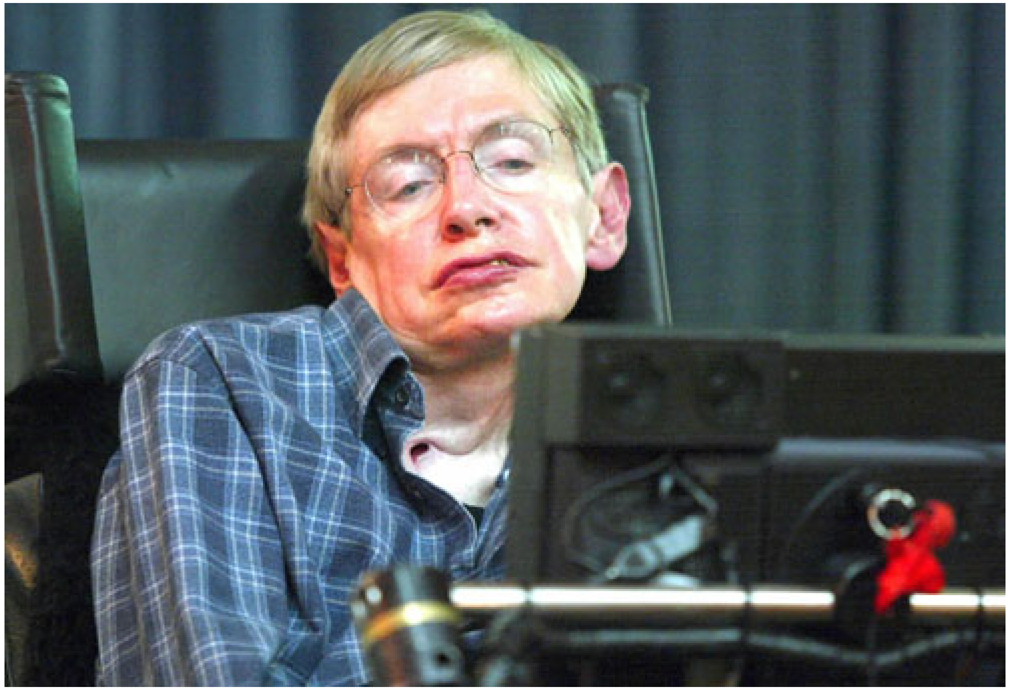
4. 超弦理论——“大统一理论”？

爱因斯坦在生命的最后30年里一直在寻找“统一场论”：一个能在独立的、包罗万象的、协和的数学框架下描写自然界所有力的理论。

超弦理论是现在最有希望将自然界的基本粒子和四种相互作用统一起来的理论，它将20世纪的两大基础理论：广义相对论和量子力学结合到一个数学框架里。超弦理论有可能解决一些长期困扰物理学家的世纪难题，如黑洞的本质和宇宙的起源，它的实验证实将从根本上改变人们对物质、空间和时间的认识。

什么是弦理论？弦理论的一个基本观点：就是自然界的基本不是像电子、光子、中微子、夸克等等的粒子，这些看起来像粒子的东西实际上都是很小很小的弦的闭合圈（称为闭合弦或闭弦），闭弦的不同振动和运动就给出这些不同的基本粒子。

超弦理论是在弦理论基础上发展起来的。超弦理论认为：弦是物质的最基本单元，所有的基本粒子如电子、光子、中微子、夸克等都是弦的不同振动激发态。

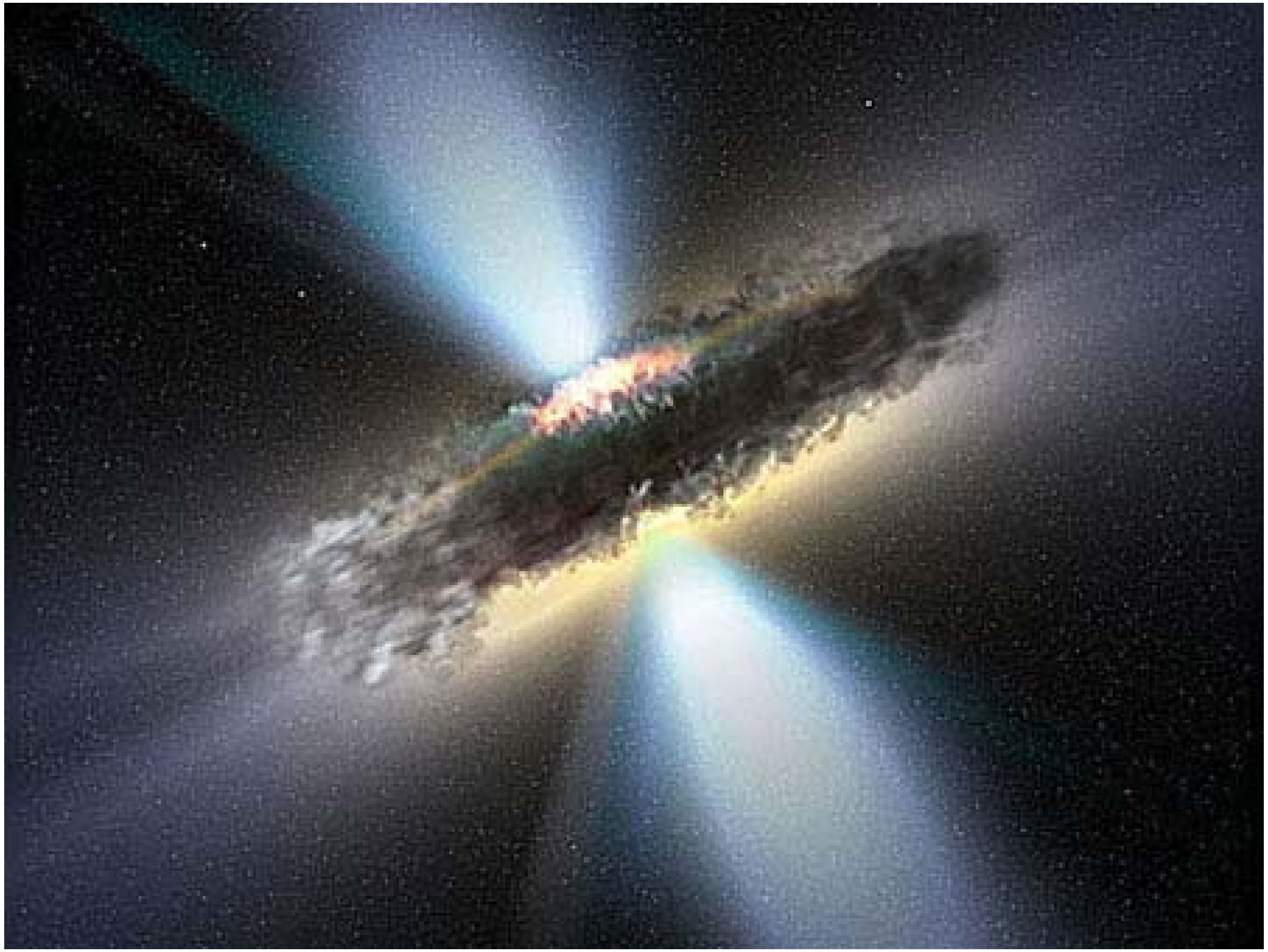


斯蒂芬·霍金(**Stephen Hawking**)，国际著名数学家、理论物理学家，英国剑桥大学应用数学和理论物理系终身教授。当代享有盛誉的杰出学者，被称为在世的最伟大的科学家之一。

霍金因在统一 20 世纪物理学的两大基础理论（相对论和量子论）方面走出了重要一步，被称为当代的爱因斯坦：

1974 年，在 Nature 上发表论文，发现黑洞是有辐射的。

1988 年，《时间简史：从大爆炸到黑洞》，试图回答人类有史以来一直在探索的问题：时间有没有开端？空间有没有边界？（为何我们在此？我们从何而来？我们将到哪里去？）。



没有人知道宇宙中到底有没有黑洞。从黑洞这个概念提出的第一天起，科学家关于黑洞存在与否的争论就没有停止过。尽管黑洞理论能够解释一些问题，但宇宙也变得越发"诡异"和难以捉摸。

2006年，美国科学家在**Physical Review D**上撰文指出，黑洞是不可能存在的。如果他们的认识是正确的，那么天文物理学将经历一次新的变革，困扰科学家40余年的难题也将不攻自破。

简单说来，黑洞就是空间中的一个点，它的万有引力趋于无限大。在距离黑洞中心一定范围之内，它的引力大得连光都无法逃脱，这个范围就是所谓的“视界”。1974年，理论物理学家史蒂芬•霍金提出，量子物质能够以某种“狡猾”的方式逃出黑洞。他认为，粒子-反粒子对有一定的随机几率能够瞬间以实物形式“跨”于“视界”之上——其中一个坠入黑洞，另一个则将能够自由。这就是著名的“霍金辐射”。这一理论表明：黑洞并非只进不出，它可以缓慢地释放出一些物质，被吸入黑洞的一切事物都最终能在几十亿甚至几万亿年后“重见天日”。

这样看来，黑洞就成了一个矛盾体：即“密不透风”，又有所疏漏。这个两难的问题已经困扰了科学家40年之久。

在最新的研究中，美国凯斯西储大学（Case Western Reserve University）的物理学家Lawrence Krauss和同事构建了一个复杂的数学公式，能够证明黑洞并不存在。Krauss表示，公式的关键在于引入了爱因斯坦提出的时间延缓效应（relativistic effect of time）。

爱因斯坦在广义相对论中指出，飞向黑洞的宇宙飞船中的乘客会感觉到飞船在加速，而在黑洞外部的观测者看来，飞船的速度却在变慢。而当飞船到达“视界”时，这个速度可以慢到观测者认为飞船似乎会永远停在那里，但永远不会被湮没。Krauss表示，时间能够在那个点上停止下来，这就意味着时间对于黑洞而言是无限的。如果黑洞会不断向外释放物质，质量逐渐减少，那么它们在形成之前就已经蒸发消失了。他说，这就好比是向一个没有底的瓶子里倒水，永远倒不满。

Krauss表示，没有人真正见过黑洞。科学家会认为宇宙中遍布着黑洞，可能是由能够产生巨大引力的特大质量恒星遗骸引起的类似效果。实际上，Krauss不是第一个这样认为的人。2005年3月，美国天体物理学家乔治•钱普拉因表示，宇宙中没有黑洞，所谓的黑洞是由“暗能量”组成的巨大星体。而在2006年7月，另一位美国科学家席尔德也发现了一个一直被当作黑洞的类星体。

NASA戈达德空间飞行中心（Goddard Space Flight Center）的天文学家Kimberly Weaver评论说，人们对黑洞和宇宙的认识不会如此之快。尽管她十分欣赏凯斯西储大学科研小组所描述的结论，但问题是人类目前的观测还没有找到任何能够支持这一观点的事实证据。Weaver说，天文学家确实在银河系中央的超大黑洞附近观测到星际物质毫无踪迹地消失。不过，到目前为止，也没有人真正探测到“霍金辐射”，找到黑洞蒸发的证据。

§5.2 W. K. B.法

设有一个一维运动粒子，哈密顿量为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \qquad (1)$$

薛定谔方程为

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi + V(x)\psi = E\psi} \qquad (2)$$

以下我们将用一种准经典的近似方法——**W. K. B. (G. Wenzel, H. M. Kramers, L. Brillouin)**法来求解这个薛定谔方程。G. Wenzel, Zett. Physik 38, (1926)518; H. M. Kramers, Zett. Physik 39, (1926)828; L. Brillouin, Cimpes Rendus 183, (1926)24; J. de Physigue et le Rad. 7, (1926)353

令

$$\boxed{\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar}} \qquad (3)$$

将（3）代入（2）式，得$S(x)$满足的微分方程

$$\frac{1}{2m}\left(\frac{dS}{dx}\right)^2+\frac{\hbar}{i}\frac{1}{2m}\frac{d^2S}{dx^2}=E-V(x) \qquad (4)$$

前面已经提到：量子效应是用普朗克常数h来表征的。当$h\to 0$时，《量子力学》将回到《经典力学》。

准经典近似方法处理问题的精神在于：将$S(x)$按h（或$\hbar$）的幂级数作渐近展开，然后按问题要求的精度，逐级近似求解。

令:

$$\boxed{S = S_0 + \frac{\hbar}{i} S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \ldots} \qquad \textbf{(5)}$$

将（5）代入（4）式，得

$$\frac{1}{2m} S_0'^{\,2} + \frac{\hbar}{i}\frac{1}{2m}\left(S_0'' + 2S_0'S_1'\right) + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\left(S_1'^{\,2} + 2S_0'S_2' + S_1''\right) + \cdots$$

$$= E - V(x) \qquad \textbf{(6)}$$

比较$\hbar$同幂次项，得

$$\frac{1}{2m} S_0'^{\,2} = E - V(x) \qquad \textbf{(7a)}$$

$$2S_0'S_1' + S_0'' = 0 \qquad \textbf{(7b)}$$

$$2S_0'S_2' + S_1'^2 + S_1'' = 0 \qquad (7c)$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

由（7 a）式，可求出零级近似解为

$$S_0(x) = \pm\int^x p dx \qquad (8)$$

其中 $p = \sqrt{2m(E - V(x))}$，在经典极限下， p 与粒子的动量相当， S_0 称为作用量。

由（7 b）式，并利用（8）式，得

$$S_1' = -\frac{1}{2}\frac{S_0''}{S_0'} = -\frac{1}{2}\frac{p'}{p} = \left(\ln p^{-\frac{1}{2}}\right)',$$

积分得

$$S_1 = \ln p^{-\frac{1}{2}} + \text{常数} \qquad (9)$$

因此，在$O(\hbar)$的近似下，薛定谔方程（2）的解可表示为：

(a) $E > V(x)$情况（经典允许区）

$$\boxed{\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p}} e^{\frac{i}{\hbar}\int^x p dx} + \frac{C_2}{\sqrt{p}} e^{-\frac{i}{\hbar}\int^x p dx}}$$

$$\boxed{= \frac{C}{\sqrt{p}} \sin\left[\frac{1}{\hbar}\int^{x} p dx + \alpha\right]} \qquad \textbf{(10)}$$

其中C_1及C_2（或C 与α）由具体问题的边界条件与归一化条件确定。

(b) $E < V(x)$**情况（经典不允许区）**

令

$$p = i|p| = i\sqrt{2m(V(x) - E)}$$

则：

$$\boxed{\psi(x) = \frac{C_1^{'}}{\sqrt{|p|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int^{x}|p|dx} + \frac{C_2^{'}}{\sqrt{|p|}} e^{\frac{1}{\hbar}\int^{x}|p|dx}} \qquad \textbf{(11)}$$

其中C_1'及C_2'由边界条件与归一化条件确定。

以上给出了精确到$\hbar$的近似解，若要近似到$\hbar^2$，则较为麻烦，平常不用。下面讨论一级近似解的适用条件。

由（6）式可看出，一级近似解成立的条件为

$$\left|\hbar S_0''\right| << \left|S_0'^{\,2}\right| \qquad \textbf{(12a)}$$

$$\left|2\hbar S_0' S_1'\right| << \left|S_0'^{\,2}\right| \qquad \textbf{(12b)}$$

利用（**8**）式，（**12a**）式可表示成

$$\left|\frac{\hbar}{p^2}\frac{dp}{dx}\right| << 1 \qquad \textbf{(13)}$$

即

$$\left|\hbar\frac{1}{dx}\frac{1}{p}\right| << 1$$

或 $\left|\frac{d\lambda}{dx}\right| << 1$，

其中

$$ƛ = \frac{\hbar}{p} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E - V(x))}}$$

或

$$\boxed{\left|\frac{\hbar}{2(E - V(x))}\frac{dV}{dx}\right| << 1} \qquad (13^1)$$

因此在使用 **W. K. B.**法求解薛定谔方程时，要求：

（**1**） $V(x)$变化缓慢，在德布罗意波长范围内，$V(x)$变化很小，使$ƛ\frac{dV}{dx}$比起粒子“动能”（$E - V(x)$）要小得多。对于自由粒子或通常的实验装置中，这个条件是满足的，但在原子或原子核内部，这条件不一定满足。

（2）在$E \sim V(x)$的地方，即所谓“转折点”附近，$p \to 0$。近似条件（13^1）是不成立的，因而近似解（10）与（11）式不适用，需要用另外的办法求解薛定谔方程。