论量子态的实在性：从经典力学到量子力学的教学性综述

Moncy V. John，圣雄甘地大学纯粹与应用物理学院，印度戈德亚姆

arXiv:2602.02617v1 [quant-ph] 2 Feb 2026

2026年2月4日

摘要

近期一些实验声称，任何将量子态视为关于系统底层物理实在的纯粹信息的模型，都必然会作出与量子理论预测相矛盾的预言。本文从经典力学的哈密顿-雅可比方程出发，沿着更为基础的路径，探究实在性问题，直至量子力学的薛定谔方程。其动机源自一条类似的路径：从几何光学的程函方程走向电磁理论中的波动方程。我们将经典哈密顿-雅可比方程改写为波动方程，并尝试推广德布罗意波粒二象性，要求粒子波和光波都可以用任意平方可积函数来描述。这一推广使物质波函数也能够叠加，并帮助我们导出薛定谔方程；可以看出，其解与经典力学波函数一样具有客观性。在量子力学中写出的其他若干方程，例如可观测量的本征值方程，以及将能量态按能量以外的可观测量的本征态展开的级数等，在经典情形下也都可以写出。经典领域中不存在波函数坍缩、纠缠等现象，其根源在于经典波动方程的非线性。这些考量表明，量子力学中的许多难题在经典力学中也以潜伏的形式存在；这一事实将有助于在很大程度上消解量子力学的神秘性。

1 引言

埃尔温·薛定谔受路易·德布罗意波粒二象性原理的启发，于1926年提出了著名的量子力学波动方程。波函数 Ψ 是所研究系统的薛定谔波动方程的解，人们假定它能够描述系统在任意时刻的状态。此后，实验结果一再证实， Ψ包含了某一特定时刻系统的所有可用信息，因此这一假设是量子理论 [1, 2]的核心。

在量子力学发展的早期，人们只能对由大量粒子组成的系统（一个系综）进行实验，当时大多数物理学家认为， Ψ 代表的是我们对系统的认知。因此，它的用途仅限于借助玻恩概率公理，根据重复测量结果计算期望值。于是， Ψ 也被称为“概率幅”。就连薛定谔本人也倾向于不承认 Ψ具有超出这一层面的现实性。

量子力学的其他主要奠基者，即维尔纳·海森堡和尼尔斯·玻尔，通过采取这样一种立场，绕开了德布罗意提出的波粒二象性：任何经典的世界观都存在局限，人们只能了解对物理系统进行实验所得到的结果。海森堡在其量子力学的哥本哈根诠释中，强烈反对用心智图像描绘微观世界，例如将其想象成波或点粒子，并将系统状态视为一种抽象的数学对象（线性向量空间中的一个向量，这种空间称为希尔伯特空间）。他认为自己的“态矢量”仅仅代表实验者对现实某个方面的认识或信息。然而，玻尔愿意承认，一个物体的行为会在粒子性与波动性之间变化，同时该物体的波动性和粒子性彼此互补，无法同时显现。这一观点后来被称为玻尔互补原理。不过值得注意的是，在过去一百年里，物理学的每一位从业者所依赖的量子力学理论框架，在各种实验情境中都表现出卓越的效果，无论人们如何诠释它。

随着现代实验和观测技术的发展，如今人们甚至可以对单个原子或光子进行实验，“知识状态”观点普遍不再受到青睐，波函数的实在性也越来越为人们所接受。一项近期实验结果 [3] 声称表明，任何将量子态视为关于系统底层状态的纯粹信息的模型，都会作出与量子理论相矛盾的预测。这重新点燃了关于量子波实在性的古老争论，也引发了人们对与哲学领域相交的话题的浓厚兴趣。

遵循科学的方法，探寻此类谜题的解决方案，最佳途径莫过于回归理论的基本原理。在这项工作中，我们回溯量子力学的起源，探讨量子波函数是否真实存在（即是否独立于观察者而存在），抑或仅仅代表观察者的知识状态。回想一下，直到19世纪末，人们都认为经典力学 [4]能够提供完整的图景，只剩下少数尚待解决的问题。如今，通过考察从经典力学到量子力学的直接路径，我们发现，对量子波函数实在性的新看法是可能的。

在第一部分，我们将仔细考察程函方程与电磁波方程之间的联系。程函方程是几何光学的基础，而电磁波方程则构成波动光学的基础 [5]。后者由詹姆斯·克拉克·麦克斯韦提出，具有划时代的意义，因为电磁现象因此得以统一 [6]。它们提供了一幅普遍而完整的图景，几何光学则是其极限情形。这种普遍形式体系中的一个关键要素是叠加原理，它适用于电磁波方程，却不适用于程函方程。因此，电磁信号可以具有任意平方可积的函数形式，同时也是麦克斯韦方程组的解。在第二部分，我们从经典力学中著名的哈密顿-雅可比（HJ）方程出发。该方程是非线性的，不满足叠加原理。我们注意到，经典哈密顿-雅可比方程可以写成波动方程的形式（其解可称为经典力学波函数），而这个波动方程同样是非线性的，不允许叠加。本文提出，应将德布罗意的波粒二象性原理加以推广，使光子波函数和粒子波函数都可以是属于位置坐标平方可积函数集合的任意函数，同时还必须是各自基本方程的解。这也意味着，粒子波动方程必须允许叠加原理。由此可以修正哈密顿-雅可比方程（或者等价地，经典力学波动方程），并得到所需的基本方程；我们认为，这就是量子力学中的薛定谔方程。反过来，我们还注意到，薛定谔方程也可以写成量子哈密顿–雅可比方程的形式，后者与经典哈密顿-雅可比方程十分相似 [7]。可以看出，当普朗克常数被视为非常小时，前一个方程会约化为后一个方程。

在量子力学中会遇到的若干其他方程，例如动量和位置本征值方程，也可以

写成经典力学中的形式。我们可以为粒子的位置指定概率（玻恩公理），同样也可以像在量子力学中那样，为可观测量的每个本征值指定概率。基本粒子的内禀自旋常被视为一种没有经典对应物的性质。但我们可以看到，粒子之所以具有内禀自旋，是因为它们的波函数不止一个分量，而这并非全然奇特。这一切都清楚地表明，量子力学与经典力学的区别在于叠加原理。我们可以看到，量子力学中的大多数谜题在经典力学中早已以潜在的形式存在，这一事实在很大程度上消除了量子力学的神秘感。特别是，我们可以看出，没有理由担心波函数的实在性。

大多数量子力学教科书都从希尔伯特空间的概念讲起，其中所讨论的系统状态是一个向量。希尔伯特空间形式体系的一个优点是，它将量子系统的一项基本性质自然地纳入理论之中：系统各状态的叠加也可以是一个可能的状态。此外，这种形式体系及其简洁的符号有助于清晰、准确地进行计算。然而，将量子态视为线性向量空间中的抽象向量也有缺点：整个学科因此显得深奥难懂，仿佛是在研究与现实几乎毫无关联的数学对象，只有到了计算实验结果的最后阶段才与现实有所联系。如果把量子力学讲成一门与经典力学几乎没有联系的独立学科，这一缺点就会更加突出。

本研究旨在将量子力学呈现为经典力学的自然发展，希望这能帮助学生清晰地理解这门学科。这种方法通过揭示量子力学中诸多谜题的根源其实已存在于经典力学之中，消解了其中的一些疑惑。

2 几何光学与波动光学

2.1 几何光学中的程函方程

光学中的费马原理 [5] 有助于确定光线在折射率为 $n(x,y,z)$ 的介质中从一点传播到另一点所经过的路径。该原理通过一个积分来表述，该积分给出的光程 Λ 为

$$\Lambda = \int_A^B n(x,y,z)\, ds, \tag{1}$$

其中， ds 是路径上线元的无穷小长度。光线实际经过的路径是使该积分取极值的路径；即， $\delta\Lambda = 0$。

威廉·罗 wan·哈密顿发现了一个偏微分方程，其解描述了光线通过光学系统的路径。德国数学家海因里希·布伦斯后来重新发现了这个方程，并将其命名为几何光学的 $eikonal\ equation$ （也称为“光线追迹方程”） [5]，其表达式为

$$(\nabla\Lambda)^2 = n^2(\mathbf{r}). \tag{2}$$

请注意，这是关于 Λ 的非线性微分方程，它有助于追踪光线穿过非均匀介质时可能经过的所有路径。求解该方程后，可以得到一个不定积分 Λ 。我们可以注意到，它看起来与方程(1)中的定积分相似，但并不相同。

下面我们将证明，程函方程可由更一般的电磁波动方程得到。在某些条件下，程函可视为后者的极限情形。这意味着，当这些条件成立时，几何光学可由波动光学导出。为此，我们从用标势写出的麦克斯韦方程出发。（它也可以利用其矢量场的分量推导出来。）标量场的微分方程为

$$\nabla^2\phi = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = \frac{n^2(\mathbf{r},t)}{c^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}, \tag{3}$$

其中，$v = v(\mathbf{r}\ t)$ 是介质中的光速，而折射率 $n(\mathbf{r}\ t) = c/v(\mathbf{r},\ \mathbf{t})$，其中 c 是真空中的光速。注意，这是关于 ϕ 的线性微分方程。

如果折射率仅是$\mathbf{r}$ 的函数，即当 $n = n(\mathbf{r})$ 时，可以通过假设下式，按变量$\mathbf{r}$ 和 t 对该方程进行分离：

$$\phi(\mathbf{r},t) = u(\mathbf{r})f(t). \tag{4}$$

Th所得方程（其中分离常数记为 $-1/\lambda^2$）为

$$\frac{d^2f}{dt^2} = -\frac{c^2}{\lambda^2}f(t), \tag{5}$$

and

$$\nabla^2u(\mathbf{r}) = -\frac{n^2(\mathbf{r})}{\lambda^2}u(\mathbf{r}). \tag{6}$$

第一个方程的解为

$$f(t) = \exp(\pm ict/\lambda). \tag{7}$$

在折射率为 $n = 1$ （真空）的特殊情况下，第二个方程的解为

$$u(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}, \tag{8}$$

其中 $|\mathbf{k}| = 1/\lambda$。若令 $\lambda \equiv \lambda/(2\pi)$，便得到通常的表达式 $k = 2\pi/\lambda$。对于一般情况，我们假设标势 ϕ 的空间部分 $u(\mathbf{r})$ 具有如下形式

$$u(\mathbf{r}) = N\exp\left(\frac{i\Lambda(\mathbf{r})}{\lambda}\right), \tag{9}$$

其中，$\Lambda(\mathbf{r})$ 和 λ 的量纲为长度。此外，N 是一个适当的常数，其量纲为 ϕ。在这种情况下，我们可以将方程 (4) 中的乘积函数 ϕ 表示为

$$\phi(\mathbf{r},t) = u(\mathbf{r})f(t) = N\exp\left(\frac{i[\Lambda(\mathbf{r}) \pm ct]}{\lambda}\right). \tag{10}$$

如上文所述，λ 具有长度的量纲，但其数值尚未确定。事实上，只有根据求解方程（6）时所采用的边界条件，才能确定其数值。由该方程可见，对于真空（其中 $n = 1$），

$$\phi(\mathbf{r},t) = Ne^{i(\mathbf{k}.\mathbf{r}\pm\omega t)} \tag{11}$$

其中 $\omega = 2\pi c/\lambda$ ，而 λ 是真空中平面电磁波的波长。

将假设形式代入方程 (9)，关于 u 的线性微分方程 (6) 可改写为关于 Λ 的形式：

$$[\nabla\Lambda(\mathbf{r})]^2 - n^2(\mathbf{r}) = i\lambda\nabla^2\Lambda(\mathbf{r}). \tag{12}$$

请注意，这仍然是同一个线性微分方程 (6)，到目前为止我们没有作任何近似。但如果我们将讨论范围限制在 λ 非常小（即 $\lambda \to 0$）的情形，那么右边的项（二阶导数项）相对于其他项可以忽略。于是，上述微分方程 (12) 就化为非线性程函方程 (2)。

在这种情况下，我们证明了以程函方程为特征的几何光学，是波动光学（由电磁波方程描述）的一种极限情形（当 $\lambda \to 0$ 时）。可以看出，对于上文提到的 $n = 1$ 情形所得到的平面波解，波长 λ 非常小这一条件，等价于平面波的频率非常高这一条件。一般而言，要达到几何光学极限，λ 与 n 的变化尺度相比必须非常小。对于折射率与时间无关的情况，我们可以将完整的方程 (12) 称为 *electromagnetic eikonal equation*。

如上所述， Λ 在方程 (1) 中（即费马原理表述中涉及的积分）与 Λ 在方程 (2) 或方程 (12) 的解中有些相似。区别在于，前者是定积分，积分范围是空间中的两个给定点；而后者只是空间坐标的函数。

2.2 含时折射率下的程函方程

现在我们尝试将程函方程推广到折射率随时间变化的情形 $n(\mathbf{r}, t)$。为此，我们必须假设解 $\phi(\mathbf{r}\ t)$ 具有一般形式，而不是采用方程 (10) 中的形式：

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{N} e^{i\xi(\mathbf{r},t)/\lambda}. \tag{13}$$

这里， $\xi(\mathbf{r}\ t)$ 是一个新的函数，其量纲为长度； $\mathcal{N}$ 是某个适当的常数，其量纲为 ϕ。与前一种情形一样，令 λ 为一个量纲为长度的常数。（λ 用于使相位无量纲。）采用 ϕ 的这种形式，波动方程 (3) 可以用 ξ 表示为：

$$(\nabla\xi)^2 - \frac{n^2}{c^2}\left(\frac{\partial\xi}{\partial t}\right)^2 = i\lambda\left(\nabla^2\xi - \frac{n^2}{c^2}\frac{\partial^2\xi}{\partial t^2}\right) \tag{14}$$

这个方程是（12）的推广，可称为适用于时变折射率的**电磁程函方程**。在 $\lambda \to 0$ 的极限下，该方程右端可以忽略。在此极限情况下，方程变为

$$(\nabla\xi)^2 = \frac{n^2}{c^2}\left(\frac{\partial\xi}{\partial t}\right)^2 \tag{15}$$

这可以称为 *time-dependent eikonal equation*，它是介质折射率随时间变化时（2）的对应形式。值得注意的是，方程（14）仍是相同的电磁波方程，而（15）则是一个非线性微分方程。这里， $\Lambda(\mathbf{r})$被 $\xi(\mathbf{r}\ t)$ 取代。我们注意到，当 n 仅是$\mathbf{r}$ 的函数时，该方程可以分离变量，因此最终可能得到相同的程函方程（2）。

为了在 $\lambda \to 0$ （几何光学极限）下将约化方程（15）改写回电磁波方程的形式，我们可以定义一个新函数

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{N} e^{i\xi(\mathbf{r},t)/\lambda} \tag{16}$$

并将其代入上述方程（15），得到

$$(\nabla\Phi)^2 = \frac{n^2}{c^2}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2, \tag{17}$$

其形式与（15）相同，但以 Φ表示。我们可以将其视为几何光学极限下的电磁波方程，并称之为 *geometrical optics wave equation*。这是一个非线性微分方程，与原始电磁波方程（3）的情况不同。

2.2.1 波动光学中的叠加原理

电磁波方程（3）的一个重要性质是，它允许像（11）那样对解进行叠加。例如，考虑方程（3）的一维情形，其中取 $n = 1$。波函数 $\phi_1 = A\exp(k_1 x - \omega_1 t)$和 $\phi_2 = B\exp(k_2 x - \omega_2 t)$（其中 $k_1 v = \omega_1$ 和 $k_2 v = \omega_2$）是该方程的解。（这两个解对应于分离常数的两个不同取值，即 $\lambda_1 = 1/k_1 = \lambda_1/2\pi$ 和 $\lambda_2 = 1/k_2 = \lambda_2/2\pi$。）那么，由 $c_1\phi_1 + c_2\phi_2$给出的两个波的叠加（其中 c_1 和 c_2 是两个常系数）也是该方程的解。

解的叠加是求解偏微分方程的重要特性，有助于获得满足特定初始条件的解。在本例中，采用分离变量法来求出形式为（3）的波动方程的通解，其形式可以写为

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \sum_i c_i \exp\left(\frac{i[\Lambda_i(\mathbf{r}) \pm \mathbf{ct}]}{\lambda_i}\right) \tag{18}$$

其中， c_i 可由初始条件确定。对于真空，当折射率为 $n = 1$时，上述级数为

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \sum_i c_i e^{i(\mathbf{k_i}.\mathbf{r} \pm \omega_i t)} \tag{19}$$

这具有傅里叶级数的形式。值得注意的最重要特性是，叠加原理使电磁信号能够呈现任何满足狄利克雷条件的所需形式。

另一方面，在 $\lambda \to 0$的极限情况下，可由原始波动方程导出的程函方程（2）或（17）是非线性微分方程，不允许解进行叠加。

与时间无关的折射率 $n(\mathbf{r})$

电磁学 **波动方程 for** $n = n(\mathbf{r})$ $\nabla^2\phi = \frac{n^2(\mathbf{r})}{c^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}$	$\Longrightarrow \phi\ (\mathbf{r}\ t)\ = \mathcal{N}e^{i\Lambda(\mathbf{r})/\lambda}f\ (t)\ \Longrightarrow$	**电磁学** **程函方程** $[\nabla\Lambda(\mathbf{r})]^2 - n^2(\mathbf{r})\ = i\lambda\nabla^2\Lambda(\mathbf{r})$ $\frac{d^2f}{dt^2} = -\frac{c^2}{\lambda^2}f(t)$
$\Uparrow$		$\Downarrow \lambda \to 0$
几何光学 **波动方程** $(\nabla\Phi)^2 = \frac{n^2}{c^2}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2$	$\Longleftarrow \Phi(\mathbf{r}\ t)\ = \mathcal{N}e^{i\Lambda(\mathbf{r})/\lambda}f(t)\ \Longleftarrow$	**程函方程** (几何光学) $[\nabla\Lambda(\mathbf{r})]^2 = n^2(\mathbf{r})$ $\frac{d^2f}{dt^2} = -\frac{c^2}{\lambda^2}f(t)$

表 1. 顶行对应完整电磁方程，底行对应几何光学极限下的方程。左列对应波动方程，右列对应程函方程。

含时折射率 $n(\mathbf{r}\ t)$

电磁学 **关于** $n = n(\mathbf{r}\ t)$**的波动方程** $\nabla^2\phi = \frac{n^2(\mathbf{r}\ t)}{c^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2}$	$\Longrightarrow \phi(\mathbf{r}\ t)\ = \mathcal{N}e^{i\xi(\mathbf{r},t)/\lambda} \Longrightarrow$	**电磁学** **程函方程** $(\nabla\xi)^2 - \frac{n^2}{c^2}\left(\frac{\partial\xi}{\partial t}\right)^2 = i\lambda\left(\nabla^2\xi - \frac{n^2}{c^2}\frac{\partial^2\xi}{\partial t^2}\right)$
$\Uparrow$		$\Downarrow \lambda \to 0$
几何光学 **波动方程** $(\nabla\Phi)^2 = \frac{n^2}{c^2}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2$	$\Longleftarrow \Phi(\mathbf{r}\ t)\ = \mathcal{N}e^{i\xi(\mathbf{r},t)/\lambda} \Longleftarrow$	**含时** **程函方程** (几何光学) $(\nabla\xi)^2 = \frac{n^2}{c^2}\left(\frac{\partial\xi}{\partial t}\right)^2$

表 2。上排对应完整电磁方程，下排对应几何光学极限下的方程。左列对应波动方程，右列对应程函方程。

3 与力学的比较

3.1 哈密顿-雅可比理论

在经典力学中含时哈密顿量的一般情形下，哈密顿-雅可比方程 [4]可写为

$$H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}, t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \tag{20}$$

其中， S 是哈密顿主函数。一般来说，这是关于 q^i 和 t 的任意函数，并带有常参数 α^i。在哈密顿量 H 不显含时间的情况下，哈密顿-雅可比方程可写为

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = -a. \tag{21}$$

其中， a 是某个常数。最后一步是由该情况下哈密顿量为运动常数这一事实得出的。对该方程积分可得

$$S(q, \alpha, t) = -at + W(q, \alpha), \tag{22}$$

其中，与时间无关的 $W(q, \alpha)$称为哈密顿特征函数。该关系连接了哈密顿主函数和哈密顿特征函数。

哈密顿特征函数 W的受限（与时间无关的）哈密顿-雅可比方程是广义坐标 n 和积分常数 n 的函数；即，$W = W(q^1, q^2, ...q^n, \alpha^1, \alpha^2, ..\alpha^n) \equiv W(q, \alpha)$，其形式为

$$H\left(q, \frac{\partial W}{\partial q}\right) = a, \tag{23}$$

其中， a是积分常数 α^i 之一，或它们的某种组合。当哈密顿量与时间无关且为运动常数时，该方程成立。对于动能T完全是速度分量的二次函数、且势能 V 与速度无关的情况，我们可以将 $a = E$识别为系统的总能量。对于三维空间中的单粒子情形，可以将上述方程写成

$$\frac{1}{2m}\left(\nabla W\right)^2 + V(\mathbf{r}) = E. \tag{24}$$

or

$$\left(\nabla W\right)^2 - 2m[E - V(\mathbf{r})] = 0. \tag{25}$$

我们注意到，该方程与式（2）中的程函方程非常相似，其中 W 起着光程 Λ 的作用，而 $\sqrt{2m[E - V(\mathbf{r})]}$ 起着折射率 n的作用。事实上，这种相似性根深蒂固，是量子力学定律与经典力学定律之间联系的关键。

下面我们来考虑哈密顿-雅可比方程的一种特殊形式，它适用于动能只包含广义速度的二次项且势能 V随时间变化的情形。在这种情况下，我们有

$$\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \tag{26}$$

经典力学中的这个哈密顿-雅可比方程可视为几何光学中含时程函方程（如式（15）所示）的对应形式。上述受限形式的哈密顿-雅可比方程（25）和哈密顿-雅可比方程（26）显然是非线性的，因为它们分别包含 $(\nabla W)^2$ 和 $(\nabla S)^2$，项。

3.2 经典力学波动方程

观察到几何光学与点粒子力学之间的相似性后，我们进一步深入探究这种相似性。为此，我们首先用一个新函数改写上述哈密顿-雅可比方程（26），该函数定义为

$$X(\mathbf{r},t) \equiv e^{iS(\mathbf{r},t)/\hbar}, \tag{27}$$

其中 $\hbar$ 是一个具有作用量 S量纲的常数。由此得到的方程形式如下

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}(\nabla X)^2 + V(\mathbf{r},t)X = i\hbar\frac{\partial X}{\partial t} \tag{28}$$

这可以称为一个 *classical mechanics wave equation*。如上所述，它的光学对应物是几何光学波动方程（17）。我们将把 $X(\mathbf{r}\ t)$称为一个 *classical mechanics wave function*。

我们必须特别注意，方程（27）中的常数 $\hbar$只是作为一个参数引入，用来使 X 的相位无量纲。将形式（27）代入上述方程（28），便可重新得到哈密顿-雅可比方程（26），而参数 $\hbar$ 则消失。因此，将理论与实测物理量联系起来的运动方程也与常数 $\hbar$ 无关，所以在本例中，它可以是任意常数。

在经典力学中，哈密顿主函数 $S(\mathbf{r}\ t)$定义在给定积分常数值的位形空间中，借助哈密顿-雅可比方程，它给出了经典系统的动力学。类似地，也可以认为上述方程（27）中的经典力学波函数 $X(\mathbf{r}\ t)$能够给出系统的轨迹。

作为经典力学波函数的一个例子，让我们考虑质量为m、角频率为 ω的简谐振子。在这种情况下，哈密顿主函数由方程 [4]给出

$$S = -Et + \sqrt{2mE}\int dq\sqrt{1-\frac{m\omega^2q^2}{2E}} \tag{29}$$

它可以积分以得到显式表达式

$$S = -Et + \frac{E}{\omega}\arcsin\left[\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}q\right] + \frac{q}{2}\sqrt{2mE-m^2\omega^2q^2} + C \tag{30}$$

相应的经典力学波函数为

$$X(q,t) = e^{iS(q,t)/\hbar} = Ae^{-iEt/\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\left[\frac{E}{\omega}\arcsin\left(\sqrt{\frac{m\omega^2}{2E}}q\right)+\frac{q}{2}\sqrt{2mE-m^2\omega^2q^2}\right]} \tag{31}$$

其中 $A = e^{iC/\hbar}$。

尽管在上述方程中使用了 S 的已知表达式来得到 $X(q,t)$，但人们也可以直接从方程(28)出发来求解力学问题。在这种情况下，人们试图求解(28)，以得到具有适当边界条件的 $X(\mathbf{r}\ t)$，然后从中识别出哈密顿主函数 S 。随后，可以不加修改地采用HJ形式主义中获取轨迹的通常方法。

4 力学中的叠加

现在让我们仔细探讨经典哈密顿-雅可比理论中的叠加问题。正如我们之前所见，当动能 T 完全是速度分量的二次函数，且势能与速度无关时，哈密顿-雅可比方程可以写成方程（28）的形式，我们将其称为

经典力学波动方程。当 $V = V(\mathbf{r})$ 时，哈密顿量是一个运动常数，因此我们可以假设解具有如下形式，从而将该方程分离为空间部分和时间部分

$$X(\mathbf{r}, t) = \chi(\mathbf{r}) f(t). \tag{32}$$

在这种情况下，我们将分离常数记为 E。容易看出，经典力学波动方程的空间部分为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\chi_i(\mathbf{r})}[\nabla\chi_i(\mathbf{r})]^2 + V(\mathbf{r})\chi_i(\mathbf{r}) = E_i\chi_i(\mathbf{r}). \tag{33}$$

这不是一个线性微分方程，因为第一项包含 χ的导数的平方，并除以 χ。将 $\chi_i(\mathbf{r}) = \exp[iW_{E_i}(\mathbf{r})/\hbar]$ 代入该方程，可知它等价于受限（与时间无关的）哈密顿-雅可比方程 (24)。容易看出，经典力学波动方程的含时部分与方程 (5) 类似，其解为

$$f_i(t) = e^{-iE_it/\hbar}. \tag{34}$$

To此外，经典力学波函数可写为

$$X_i(\mathbf{r}, t) = \chi_i(\mathbf{r}) f_i(t) = e^{i[W_{E_i}(\mathbf{r}) - E_it]/\hbar}. \tag{35}$$

由此可见，微分方程 (28) 和 (33) 分别等价于哈密顿-雅可比方程和受限哈密顿-雅可比方程。后一类方程的解应与$\hbar$无关，因此在本讨论中， $\hbar$ 可以取任意值。

现在可以将哈密顿-雅可比理论与光学的情形进行比较。我们注意到，几何光学波动方程 (17) 和经典力学波动方程 (28) 都是非线性微分波动方程，因此不满足叠加原理。例如，即使 X_1 和 X_2 是经典力学波函数的两个解，分别对应能量 E_1 和 E_2，它们的线性组合 $c_1X_1 + c_2X_2$ 也不是该方程的解。一般而言，此类乘积的线性组合可写成

$$\sum_i c_iX_i(\mathbf{r}, t), \tag{36}$$

不能成为方程 (28) 的一般解。这种情况与几何光学波动方程 (17) 类似。事实上，这一数学结果与经典系统的一项重要物理性质有关：经典系统只能由满足适当边界条件的某些确定函数来描述。任意函数都无法描述系统状态，正如下文所述。

4.1 叠加缺失的物理意义

哈密顿-雅可比函数 $S(q, \alpha, t)$ 是由积分常数集合 $\{\alpha^i\}$ 所对应的哈密顿-雅可比方程的解，因此可以说它代表系统的一种状态。等价地，我们可以说，对应波动方程 (28) 的解——经典力学波函数 $X(\mathbf{r},\mathbf{t})$——代表系统的同一种状态。我们将这样的状态称为系统的 $energy\ state$ 。我们使用“能量态”这一术语，以区别于通常所说的、由相空间中的一个点表示的系统“状态”。在牛顿力学中，要确定相空间中一个点的位置，需要知道系统在给定时刻所有广义坐标和广义动量的值。

另一方面，借助能量态，我们只能在系统的位置（构形）空间中描绘一组轨迹 $q^i(\alpha, \beta, t)$。前文指出，积分常数 α^i 中的一个，或它们的某种特定组合，可以被认定为系统的能量 E。因此，我们将由方程 (28) 的解波函数 X 所对应的状态称为系统的一个 $energy\ state$。

经典力学波动方程不满足叠加原理，这表明在经典力学中，物理系统在任一时刻只能处于某一个能量态。当系统由 $X(\mathbf{r})$ 描述时，它具有明确的能量，而该能量也是一个运动常数。假设 $X_1(\mathbf{r})$ 和 $X_2(\mathbf{r})$ 是方程的两个此类解，分别对应不同的能量 E_1 和 E_2。如果线性组合 $c_1X_1 + c_2X_2$ 也能成为一个解，那就意味着系统同时对应两种不同的能量。经典哈密顿-雅可比理论中不存在叠加现象，这可以理解为表明这种情况是不允许的。

同样重要的是，在经典情形下，系统状态不能用任意的（波）函数来描述。这与波动光学的情形形成鲜明对比：在波动光学中，波的叠加使电磁信号能够呈现任意函数形式。

5 在哈密顿-雅可比理论中求解力学问题

现在我们来讨论一种用于求解哈密顿-雅可比理论中力学问题的方法。我们的目标是说明方程

$$p^i = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial q^i}, \tag{37}$$

可以通过直接积分来求解轨迹。要将其用作运动方程，必须将正则动量 p^i 表示为 q^i、$\dot{q}^i$ 和 t的函数。这可以利用

$$p^i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i}, \tag{38}$$

来完成，其中 L是该问题的拉格朗日量。（必须注意，在这个方程中，变量 p^i 并不总是力学动量。不过，在这种情况下，可以找到联系二者的关系。）

作为这种方法的一个例子，我们来通过直接积分方程 (37)，求解简谐振子问题；此时，该问题的哈密顿-雅可比方程的完整解 S 已知。因此，在这种方法中，我们首先求解哈密顿-雅可比方程，得到 S，如方程 (29) 或 (30) 所示。将

$$p = \sqrt{2mE - m^2\omega^2 q^2}. \tag{39}$$

与方程 (38) 结合，可得简谐振子的运动方程 (37)；方程 (38) 给出了正则动量：

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}.$$

由此可得

$$m\dot{q} = \sqrt{2mE - m^2\omega^2 q^2}$$

or

$$\dot{q}^2 + \omega^2 q^2 = \frac{2E}{m}. \tag{40}$$

对其关于时间积分，得到解为

$$q = A\sin(\omega t + \epsilon) \tag{41}$$

其中 A，振荡振幅由$\sqrt{2E/m\omega^2}$给出。

5.1 能量态与轨迹

获得 $X(\mathbf{r})$后，系统的能量态可以用轨迹表示。这些解对应于值集 α^i。然后根据形式（27）得到哈密顿主函数 S ，即

$$S = \frac{\hbar}{i}\log X. \tag{42}$$

现在可以按照 HJ方法求出表示能量态的轨迹。从该空间中的一组初始点出发，可以绘制各种轨迹 $q^i(\alpha^i, \beta^i, t)$。

5.2 运动方程与动量本征函数

得到形式为（35）的经典力学波函数后，就可以如上所述利用运动方程求出经典轨迹。在三维空间中，后一种方法依赖于对运动方程（37）进行积分，即

$$\mathbf{p} = \nabla S = \nabla W = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{X}\nabla X = \frac{\hbar}{i}\frac{1}{\chi(\mathbf{r})}\nabla\chi(\mathbf{r}). \tag{43}$$

这里，$\mathbf{p}$ 是三维笛卡尔坐标中单粒子的正则动量。现在可以将这个运动方程改写为一阶微分方程的形式

$$-i\hbar\nabla\chi(\mathbf{r}) = \mathbf{p}(\mathbf{r})\chi(\mathbf{r}). \tag{44}$$

对于自由粒子的特殊情况，$\mathbf{p}$ 是一个常向量，我们将 $\chi(\mathbf{r})$替换为 $u(\mathbf{r})$，将该方程写为

$$-i\hbar\nabla u(\mathbf{r}) = \mathbf{p}\, u(\mathbf{r}). \tag{45}$$

该方程的解具有以下形式

$$u(\mathbf{r}) = \mathcal{N}e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar} \tag{46}$$

其中 $\mathcal{N}$ 是某个常数。方程 (45) 具有本征值方程的形式，对应于微分算子 $-i\hbar\nabla$。现在，我们可以将 $u(\mathbf{r})$ 称为 $-i\hbar\nabla$ 的本征函数，即对应于本征值$\mathbf{p}$ 的 $momentumeigenfunction$。对于处于任意非零势下的系统，经典力学波动方程 (33) 的一般解可以写成这些动量

本征函数 $u(\mathbf{r})$ 的线性组合。当系统被限制在有限体积内或具有周期性边界条件时，动量本征值将是离散的，可记为$\mathbf{p}_i$。于是，我们可以将$\chi(\mathbf{r})$ 展开为求和级数，这实际上就是 $\chi(\mathbf{r})$ 的傅里叶级数展开：

$$\chi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \, u_i = \sum_i c_i \, e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar}. \tag{47}$$

这里， c_i 是展开式中的适当系数。此处用求和符号表示，并假定$\mathbf{p}_i$ 取离散值。我们用系统的各种动量态所对应的基函数 $u_i(\mathbf{r})$来展开 $\chi(\mathbf{r})$。

对于$\mathbf{p}$ 是连续变量的非束缚单粒子系统的一般情形，上述表达式中的求和必须改为积分，因此可以写成

$$\chi(\mathbf{r}) = \int c(\mathbf{p}) e^{i\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}{\hbar}} d^3\mathbf{p}. \tag{48}$$

这是将函数 $c(\mathbf{p})$变换为 $\chi(\mathbf{r})$时熟悉的傅里叶（逆）变换。我们将在后续各节中进一步讨论这些关系。

6 量子力学——薛定谔波动方程

这个（方程）是从哪里来的？哪儿也没来。它无法从你所知道的任何东西推导出来。它来自薛定谔的头脑。

Richard Feynman

Isaac Newton 的光的微粒说解释了光学中的多种现象，例如反射、折射、色散等。（这一主题如今被称为几何光学。）但是，对于干涉、衍射等其他光学现象的解释，则需要 Christiaan Huygens 的光的波动说。1905 年，Albert Einstein 运用 Planck 的“辐射能量量子”概念解释了光电效应，并由此引出了如今所谓光子的概念。Einstein 认为，量子思想赋予了辐射以粒子性。显然，他希望以某种新的形式复兴 Newton 的光的微粒图景。1909 年，他甚至尝试为电磁辐射的能量量子推导一条运动定律，但没有进一步发展这一理论。1923 年，Luis de Broglie 提出，正如光子一样，物质粒子也可能具有二重性，因此同样可能具有波动性质。他的假设是，大自然崇尚对称性，因此波粒二象性必然同时存在于光子和电子之中。在 1924 年的博士论文中，他提出了相波的思想，而这一思想真正成为人们期待已久的触发因素，推动了后来被称为“量子革命”的发展。

尽管量子力学源自德布罗意提出的“波粒二象性”假说，但其早期发展却沿着看似截然不同的方向展开。这些分歧源于20世纪20年代激烈而两极化的争论；新量子力学要被接受为一门成熟的科学理论，还必须克服重重障碍。这或许是人类知识史上最激烈的一场论战，不仅动摇了力学的概念基础，也撼动了人类最根本的世界观。量子理论引发的余波至今仍未平息。

德布罗意提出开创性思想几年后，维尔纳·海森堡、马克斯·玻恩和帕斯夸尔·约当提出了一种名为 *matrix mechanics* 的量子力学表述。几乎在同一时期，埃尔温·薛定谔发现了他的波动方程。受德布罗意关于

相波的假设启发，薛定谔试图为氢原子中的电子寻找一个波动方程。将德布罗意的相位波记作 $\Psi = \Psi(\mathbf{r}\ t)$，薛定谔起初尝试使用标准波动方程

$$\nabla^2\Psi = \frac{1}{v_p^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}, \tag{49}$$

对于单粒子系统，其中 v_p 是粒子的相速度。然而，将此方程用于氢原子并预测其能级时，所得结果与实验不符，因此他放弃了这一方程。（此方程如今被称为薛定谔原始相对论方程。）直到后来，他才尝试提出它的一个非相对论版本，也就是如今著名的 *Schrodinger equation*

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}. \tag{50}$$

这里，$V(\mathbf{r}\ t)$ 是粒子运动所处的势能。薛定谔发现，基于这一方程的新力学与氢原子光谱的观测特征高度吻合。

根据标准量子理论，薛定谔方程的解 Ψ称为量子波函数，它代表系统的“状态”。通常强调，Ψ包含了有关该系统的一切可用信息。

6.1 量子哈密顿-雅可比方程

如上所述，薛定谔方程在准确描述微观世界方面起着关键作用。现在让我们退一步，在方程（50）中代入 $\Psi = \exp(iS/\hbar)$，写出一个与薛定谔方程等价的方程。结果为

$$\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V(\mathbf{r},t) + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S. \tag{51}$$

这个方程看起来与方程（26）相似，只是其右端不为零。它通常被称为 *quantum HJ equation*。我们稍后将看到，与方程不同，上述量子哈密顿-雅可比方程及其解始终包含常数 $\hbar$。这个常数的值只能通过实验确定。在方程中含有 $\hbar$ 的项与其他项相比可以忽略的情况下，可以重新得到经典哈密顿-雅可比方程。这就是量子力学的经典极限。

7 获得薛定谔方程的另一种方法

上文引用费曼的话提到，薛定谔方程无法从任何事物中推导出来；是薛定谔的天才帮助我们得到了这个方程。然而，人们经常提出一些启发式论证来支持这一方程。这里我们提出一种基于叠加原理的替代性论证，有助于推导出该方程。

我们已经看到，麦克斯韦电磁波动方程 (3) 是线性的，并遵循叠加原理，而几何光学中的程函方程是非线性的，因此不遵循叠加原理。我们还注意到，当我们在电磁程函方程 (12) 或 (14) 中取极限 $\lambda \to 0$ 时，它们趋于几何光学中的程函方程，使叠加原理不再适用。除此之外，我们还看到，在经典力学中，HJ方程以及与之等价的经典力学波动方程 (28) 都是非线性的，因此无法像线性方程那样通过叠加能量态来构造其解

。这一点意味着光子波函数与粒子波函数之间存在差异；前者可以采取任意平方可积的函数形式，同时也是麦克斯韦方程组的解，而后者在经典哈密顿–雅可比形式中则无法享有这种自由。现在可以提出这样的观点：光子与粒子之间的德布罗意波粒二象性或许可以延伸到更深的层次：既然光子可以用波函数描述，而该波函数可以是麦克斯韦波动方程各解的叠加，那么物质粒子也必须用波函数描述，且该波函数可以是允许能量态叠加的线性波动方程的解。下文将展示，这种对称性考量有助于推导出薛定谔方程。

为此，我们必须探究能否将一种推广应用于经典哈密顿-雅可比理论，例如从几何光学中的非线性程函方程推广到更一般的线性电磁波方程。换言之，我们要考察能否证明经典力学波动方程（28）是某个满足叠加原理的（量子）波动方程的极限情形。稍后我们将看到，量子力学中的种种谜题，其根源就在于引入了这一叠加原理。

为此，第一步是确认经典力学波动方程（28）中的动能项为 $-(\hbar^2/2m)(1/X^2)(\nabla X)^2$。事实上，这与哈密顿-雅可比方程中的同一项（$\nabla S$）$^2/2m$，正是导致经典力学波动方程呈现非线性的原因。我们注意到，只需在动能项中添加一项 $\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\left(\frac{1}{X}\nabla X\right)$，即可使方程（28）变为线性；即，

$$\text{Classical } K.E. = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{X}(\nabla X)\right]^2 \to -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{X}(\nabla X)\right]^2 + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla\left(\frac{1}{X}\nabla X\right). \tag{52}$$

加入这一项实际上会在量子力学中产生零点能。对方程（28）作相应修改，并将 X 重新标记为 Ψ，即可得到二阶线性薛定谔微分方程（50）。

薛定谔的量子力学波动方程以及与之等价的量子哈密顿-雅可比方程显示在下表的第一行。在 $\hbar \to 0$的极限下，后者过渡为经典哈密顿-雅可比方程。这又等价于经典力学波动方程，二者均显示在第二行。通过如方程（52）那样添加一项而使后一方程线性化，我们重新得到薛定谔的量子波方程。

含时势 $V = V$（$\mathbf{r}$ t）

量子力学 **波动方程** $V = V(\mathbf{r}\ t)$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\mathbf{r}\ t)\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$	$\Longrightarrow \Psi(\mathbf{r}\ t) = \mathcal{N}e^{i\hat{S}(\mathbf{r}\ t)/\hbar} \Longrightarrow$	**量子** **哈密顿-雅可比方程** $-\frac{1}{2m}(\nabla\hat{S})^2 + V(\mathbf{r}\ t) + \frac{\partial\hat{S}}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\hat{S}$
$\Uparrow$		$\Downarrow \hbar \to 0$
经典力学 **波动方程** $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}(\nabla X)^2 + V(\mathbf{r}\ t)X = i\hbar\frac{\partial X}{\partial t}$	$\Longleftarrow X(\mathbf{r}\ t) = \mathcal{N}e^{iS(\mathbf{r},t)/\hbar} \Longleftarrow$	**哈密顿-雅可比方程** **(经典力学)** $-\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V(\mathbf{r}\ t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0$

表 3。上排对应量子力学方程，下排对应经典力学方程。左列对应波动方程，右列对应哈密顿-雅可比型轨迹

方程。

8 定态势

在势能 V 与 t无关的情况下，可以预期将薛定谔方程分离为其时间部分和空间部分。与先前电磁波方程（34）的情形一样，通过假定 $\Psi(\mathbf{r}\ t) = \psi(\mathbf{r})f(t)$，我们可以将薛定谔方程分离为其空间部分和时间部分。该方程的时间部分为

$$i\hbar\frac{df}{dt} = Ef(t),$$

其解为

$$f(t) \propto e^{-iEt/\hbar},$$

分离常数为 E。上述乘积波函数可写成

$$\Psi_E(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r},E)e^{-iEt/\hbar}, \tag{53}$$

这里的 $\psi(\mathbf{r}\ E)$ 是方程空间部分的解，表示为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},E) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},E) = E\psi(\mathbf{r},E). \tag{54}$$

这称为 不含时薛定谔方程，其形式为本征值方程。

与上表中各方程相对应、针对定态势能$V(\mathbf{r})$的方程如下。

与时间无关的势能 $V = V(\mathbf{r})$

量子力学 **波动方程** $V = V(\mathbf{r})$ $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V(\mathbf{r})\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$	$\Longrightarrow \Psi(\mathbf{r}\ t) = \mathcal{N}e^{\hat{iW}(\mathbf{r})/\hbar}f(t) \Longrightarrow$	**定态量子** **哈密顿-雅可比方程** $-i\hbar\nabla^2\hat{W}(\mathbf{r}) + [\nabla\hat{W}(\mathbf{r})]^2 = 2m(E-V)$ $i\hbar\frac{df}{dt} = Ef(t)$
$\Uparrow$		$\Downarrow \hbar \to 0$
经典力学 **波动方程** $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X}(\nabla X)^2 + V(\mathbf{r})X = i\hbar\frac{\partial X}{\partial t}$	$\Longleftarrow X(\mathbf{r}\ t) = \mathcal{N}e^{iW(\mathbf{r})/\hbar}f(t) \Longleftarrow$	**定态（受限）** **哈密顿-雅可比方程** （经典力学） $(\nabla W)^2 = 2m(E-V)$ $i\hbar\frac{df}{dt} = Ef(t)$

表 4。上行为量子力学方程，下行为经典力学方程。左列为波动方程，右列为 HJ 型轨迹方程。

9 动量算符与哈密顿算符

我们用符号$\mathcal{L}_{op}$表示微分算子，例如 $\frac{d}{dx}$、 $\frac{d^2}{dx^2}$ 等，或它们的某些组合。该算符的本征值方程可写成一般形式

$$\mathcal{L}_{op} y_i(\mathbf{r}) = \kappa_i \; y_i(\mathbf{r}), \tag{55}$$

其中， κ_i 是本征值， y_i是相应的本征函数。本节中，我们假设本征值 κ_i 取离散值，而 i 是标记本征值的整数。连续本征值的情形将在后续各节讨论。

9.1 动量算符

回想一下，我们将方程（45）作为经典运动方程（43）的一个特例推导出来，并将其写成了本征值方程的形式

$$-i\hbar\nabla u(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \mathbf{p}\; u(\mathbf{r},\mathbf{p}). \tag{56}$$

这里，$\mathbf{p}$ 是某个具有动量量纲的常向量，也是本征值。在这个方程中，$-i\hbar\nabla$是一个微分算子

$$\mathbf{p}_{op} \equiv -i\hbar\nabla, \tag{57}$$

这称为动量算符，而 $u(\mathbf{r},\mathbf{p})$是它的本征函数。现在我们将本征值方程写为

$$\mathbf{p}_{op} u(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \mathbf{p}\; u(\mathbf{r},\mathbf{p}).$$

由方程 (46) 可知，与本征值$\mathbf{p}$ 相对应的动量算符本征态为

$$u(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \mathcal{N} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}. \tag{58}$$

这里 $\mathcal{N}$ 是一个常数。作为第 5.2 小节讨论的延伸，我们注意到，任意量子力学波函数都可以按动量算符的本征函数展开为傅里叶级数。

9.2 哈密顿算符

不含时薛定谔方程 (54) 也可以视为本征值方程。在这种情况下，微分算子

$$H_{op} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \tag{59}$$

可用于将方程 (54) 写成

$$H_{op}\psi_E(\mathbf{r},E)=E\psi_E(\mathbf{r},E). \tag{60}$$

这里，能量 E 是本征值，而 $\psi_E(\mathbf{r}\ E)$ 是对应的本征函数。由于 E 可以被认作系统的能量，因此 H_{op} 被称为哈密顿算符。（需要指出的是，目前这种命名并没有其他依据。我们稍后会看到， H_{op} 是一个“厄米算符”，因此其本征值 E为实数。）采用 H_{op}的这种形式，薛定谔方程（50）可写为

$$H_{op}\Psi(\mathbf{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}. \tag{61}$$

求解方程（60）时，我们发现能量本征值可能是离散的，这取决于边界条件。将这些离散值记为 E_i，本征值方程（59）为

$$H_{op}\psi_i(\mathbf{r})=E_i\psi_i(\mathbf{r}) \tag{62}$$

由于该方程具有线性性质，任何形如 $\psi_i(\mathbf{r})$ 的本征函数的线性组合；也就是说，

$$\psi(\mathbf{r})=\sum_i c_i\ \psi_i(\mathbf{r}), \tag{63}$$

也将是该方程的解。换言之，不含时薛定谔方程的任意解 $\psi(\mathbf{r})$ 都可以展开为上述形式的级数。同样，由于方程（50）具有线性性质，单粒子系统的任意一般态 $\Psi(\mathbf{r}\ t)$ 都可以表示为能量本征函数的叠加

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\sum_i c_i\ \psi_i(\mathbf{r})e^{-iE_it/\hbar}. \tag{64}$$

值得注意的是，我们使用了

$$\Psi(\mathbf{r},0)\equiv\psi(\mathbf{r}), \tag{65}$$

如方程 (63) 所示。一旦求出系数 c_i ，就可以用这个表达式得到波函数态未来的时间演化。方程 (63) 等式中的系数 c_i ，可以利用哈密顿算符的厄米性这一性质求得。

必须注意，这适用于势能为 $V(\mathbf{r})$、仅是$\mathbf{r}$ 的函数的情况。在这种情况下，由于 c_i 是常数，基于线性这一性质，上述函数在所有未来时刻都将继续是薛定谔方程的解。

对于自由粒子， $V(\mathbf{r})\ =0$。在这种情况下，不含时薛定谔方程的解为

$$\psi(\mathbf{r})=\mathcal{N}e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}, \tag{66}$$

其中 $|\mathbf{k}|=\sqrt{2mE}/\hbar$。这里，能量本征值 E 是一个连续变量。由于此函数满足本征值方程

$$\mathbf{p}_{op}\psi(\mathbf{r})=\hbar\mathbf{k}\psi(\mathbf{r}),$$

我们注意到，$\psi(\mathbf{r})$ 与方程 (66) 中的一样，是方程 (46) 中的动量本征函数 $u(\mathbf{r})$，其中 $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$。因此，在自由粒子的这个特殊情形下，哈密顿算符的本征函数与动量算符的本征函数相同。

10 量子力学中的概率公设

10.1 玻恩概率公理

量子力学中波函数的统计解释由马克斯·玻恩提出。我们已经提到，玻恩是量子力学最初一种表述——“矩阵力学”的重要贡献者之一。他与维尔纳·海森堡和帕斯夸尔·约当共同提出了这一表述。然而，马克斯·玻恩主要因将 $|\Psi|^2$ 解释为概率密度而受到认可；这项工作由他独立完成，并于1926年发表。为此，他于1954年获得诺贝尔奖。他的公理与电磁理论中的一条原理非常相似：某点处光波的强度正比于该点处电磁波振幅的平方。

玻恩公理指出，当一个粒子由波函数 $\Psi(\mathbf{r}\ t)$描述，并对其位置进行测量时，在点$\mathbf{r}$ 周围体积元 dV 内找到该粒子的概率为$\Psi^\star(\mathbf{r}\ t)\Psi(\mathbf{r}\ t)dV = |\Psi(\mathbf{r}\ t)|^2 dV$。我们将 $|\Psi(\mathbf{r}\ t)|^2 \equiv P(\mathbf{r}\ t)$记作概率密度。（因此，将 $\Psi(\mathbf{r}\ t)$称为概率幅是恰当的。）如果粒子是稳定的，不会以其他方式消失，那么可以确定在空间某处能找到它。因此，玻恩公理自然得出结论：在空间“任何地方”找到该粒子的概率等于一。现在可将条件写为

$$\int \Psi^\star(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\ dV = \int |\Psi(\mathbf{r},t)|^2\ dV = 1. \tag{67}$$

当满足这一条件时，$\Psi(\mathbf{r}\ t)$ 就称为归一化为 1。利用薛定谔方程 (61) 可以证明，如果波函数在某一时刻 t 归一化，那么它在所有时刻都将保持归一化。为此，我们还需要薛定谔方程的复共轭

$$(H_{op}\Psi(\mathbf{r},t))^\star = -i\hbar\frac{\partial\Psi^\star(\mathbf{r},t)}{\partial t}. \tag{68}$$

通过证明 $\int \Psi^\star(\mathbf{r}\ t)\Psi(\mathbf{r}\ t)\ dV$ 的时间导数为零，即证明

$$\frac{d}{dt}\int \Psi^\star(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\ dV = 0. \tag{69}$$

利用薛定谔方程及其复共轭，可以写出

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\int \Psi^\star(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)\ dV &= \int\left(\frac{\partial\Psi^\star}{\partial t}\Psi + \Psi^\star\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)dV &(70)\\
&= \frac{1}{i\hbar}\left[\int -(H_{op}\Psi)^\star\Psi dV + \int \Psi^\star H_{op}\Psi dV\right] &(71)\\
&= 0. &(72)
\end{aligned}$$

最后一步是由哈密顿算符的厄米性得出的。这证明了我们的断言。

10.1.1 位置的期望值（均值）

上述概率公理可直接用于计算粒子在位置测量中的位置期望值。设对大量相同制备的系统进行测量，这些系统均处于同一状态 $\Psi(\mathbf{r}\ t)$。根据上述概率密度公设，可以计算位置的期望值或平均值，记为 $\langle\mathbf{r}\rangle$，即

$$\langle\mathbf{r}\rangle = \int_V \mathbf{r}|\Psi(\mathbf{r},t)|^2 dV \tag{73}$$

我们将在第15节中看到，概率公理同样可以扩展到其他可观测物理量。

11 厄米算符

像方程（59）中的哈密顿算符或方程（57）中的动量算符这样的线性算符，具有称为 *Hermiticity* 的重要性质。为了了解这一性质是什么，我们首先定义与任意算符 $\mathcal{L}_{op}$ 相对应的伴随算符。算符 $\mathcal{L}_{op}$ 的伴随 $\mathcal{L}_{op}^{\dagger}$ 是满足以下条件的算符：

$$\int_{x_1}^{x_2} f^{\star}(x)[\mathcal{L}_{op}g(x)]dx = \int_{x_1}^{x_2} [\mathcal{L}_{op}^{\dagger}f(x)]^{\star}g(x)dx. \tag{74}$$

请注意，积分是在区间 $x_1 \leq x \leq x_2$ 上进行的，内积正是在该区间上定义的。如果线性算符 $\mathcal{L}_{op}$ 等于其自身的伴随算符，即具有以下性质，则称其在该区间上是 *Hermitian*（或 *self-adjoint*）：

$$\int_{x_1}^{x_2} f^{\star}(x)[\mathcal{L}_{op}g(x)]dx = \int_{x_1}^{x_2} [\mathcal{L}_{op}f(x)]^{\star}g(x)dx, \tag{75}$$

其中，$f(x)$ 和 $g(x)$ 是任意两个函数。

11.1 Real本征值的正交性以及本征函数的正交性

现在，考虑一维中形式如方程（55）的本征值方程

$$\mathcal{L}_{op}y_i(x) = \kappa_i y_i(x), \tag{76}$$

并假设 $\mathcal{L}_{op}$ 是厄米的。

定理： 厄米算符具有一个特殊性质：它们的本征值总是实数，并且对应于不同本征值的两个本征函数彼此正交。

如果任意一个本征值是g 重简并的（这意味着有 g 个本征函数对应于同一本征值），则总能构造出 g 个与该本征值对应的正交本征函数。（用于此目的的过程称为 *Gram-Schmidt orthogonalisation*。）归一化本征函数 $y_i(x)$ 与 $y_j(x)$ 之间的正交关系可以方便地用下列方程表示：

$$\int_{x_1}^{x_2} y_i^{\star}(x)y_j(x)dx = \delta_{ij}, \tag{77}$$

其中 δ_{ij} 是克罗内克 δ符号，定义为

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= 1, \qquad \text{when } i = j \quad (78)\\ &= 0, \qquad \text{when } i \neq j. \quad (79)\\ & \quad (80) \end{aligned}$$

如果所有本征函数都已归一化，且彼此正交，我们可以将这样一组本征函数称为 *orthonormal*组。

11.2 本征函数的完备性与展开公设

如果厄米算符的本征函数集合能够将定义在给定 x 取值域内的任意平方可积函数 $\phi(x)$ 展开为该本征函数集合的级数，则称此集合为完备集。其形式如下:

$$\phi(x) = \sum_i c_i \, y_i(x). \quad (81)$$

现在可以说明如何求出展开式（81）中的系数 c_i 。将该方程两边乘以 $y_j^\star(x)$，并在上述区间内积分，得到

$$c_j = \int_{x_1}^{x_2} y_j^\star(x)\phi(x)dx, \quad (82)$$

利用 $y_i(x)$的正交性质。

这一结果有助于我们对方程（81）中所设想的 *completeness property* 作出形式化表述。我们将该方程改写为

$$\phi(x) = \sum_i y_i(x) \int_{x_1}^{x_2} y_i^\star(x')\phi(x')dx' = \int_{x_1}^{x_2} \left[\sum_i y_i(x) y_i^\star(x')\right] \phi(x')dx'. \quad (83)$$

方括号中的表达式可认作狄拉克 δ函数；即，

$$\sum_i y_i(x) y_i^\star(x') = \delta(x - x'). \quad (84)$$

此处的 狄拉克 δ-符号，记作 $\delta(x - x')$，具有如下定义性质

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)\delta(x - x')dx = f(x'), \quad (85)$$

对于所有函数 $f(x)$，只要积分上下限 $[x_1, x_2]$ 包含点 $x = x'$。方程 (84) 称为本征函数的完备性或 *closure property* 。只有完备的基函数集才能满足完备关系。

12 可观测量

在量子力学中，每个物理量都对应一个算符。上文指出，厄米算符具有实数本征值，且对应不同本征值的本征函数彼此正交。如果一个厄米算符的标准正交本征函数构成完备基，能够用于展开物理系统的波函数态，那么就可以说该算符表示一个 $observable$。

首先，让我们检查由方程 (57) 定义的动量算符 $\mathbf{p}_{op}$ 和由方程 (59) 定义的哈密顿算符 H_{op} 是否为厄米算符并代表可观测量。

12.1 动量

容易看出，动量算符 $\mathbf{p}_{op} \equiv -i\hbar\nabla$ 满足方程 (75)，因此是厄米算符。为说明这一点，我们考虑一个简单情形：系统是一个被限制在一维空间区间 $[x_1, x_2]$ 内的单粒子。在这里，它的波函数在 $x \leq x_1$ 和 $x \geq x_2$ 处均为零。设 $f(x)$ 和 $g(x)$ 是任意两个这样的函数。分部积分后可得，方程 (75) 左边（其中 $\mathcal{L}_{op} = p_{op} = -i\hbar\frac{d}{dx}$）为

$$\begin{aligned}
\int_{x_1}^{x_2} f^\star(x)[p_{op}g(x)]dx &= -i\hbar\int_{x_1}^{x_2} f^\star(x)\left[\frac{d}{dx}g(x)\right]dx &(86)\\
&= -i\hbar\left\{[f^\star(x)g(x)]_{x_1}^{x_2} - \int\left[\frac{d}{dx}f^\star(x)\right]g(x)dx\right\} &(87)\\
&= \int_{x_2}^{x_2}[p_{op}f(x)]^\star g(x)dx, &(88)
\end{aligned}$$

这与右边相等，表明 p_{op} 是厄米的。在这里，我们利用了 $f(x)$ 和 $g(x)$ 在 x_1 和 x_2 处为零这一事实。对于三维空间中的多粒子系统的一般情形，也可以得到相同的结果。因此，$\mathbf{p}_{op}$ 是厄米的。

如第9节所示，离散情形下$\mathbf{p}_{op}$ 的本征态为

$$u_i(\mathbf{r}) = \mathcal{N}e^{i\mathbf{p}_i\cdot\mathbf{r}/\hbar}. \tag{89}$$

此处，$\mathcal{N}$ 是归一化常数。当粒子被限制在盒子中时，便出现离散情形。我们考虑一个长度为 L的一维盒子，边界位于 $x = -L/2$ 和 $x = +L/2$。在边界处为零的动量本征函数应具有如下形式

$$u_{xi}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ip_{xi}x/\hbar}, \qquad p_{xi} = \frac{2\pi\hbar n_{xi}}{L}, \qquad n_{xi} = 0, \pm1, \pm2, ... \tag{90}$$

此情形下的正交关系表现为

$$\int u_{xi}^\star(x)u_{xj}(x)dx = \delta_{ij}. \tag{91}$$

在方程 (90) 中，归一化因子选为 $\mathcal{N} = \frac{1}{\sqrt{L}}$，以与该方程一致。在三维情况下，我们可以将正交关系写为

$$\int_V u_i^\star(\mathbf{r})u_j(\mathbf{r})dV = \delta_{ij}. \tag{92}$$

这里必须将方程 (89) 中的归一化因子选为 $\mathcal{N} = \frac{1}{L^{3/2}}$。

对于占据整个空间而非盒子的粒子，动量本征值$\mathbf{p}$是一个连续变量，动量本征函数为 $u(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \mathcal{N} e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar}$。在这种情况下，归一化常数必须选取为

$$\mathcal{N} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}, \tag{93}$$

以得到正交关系

$$\int_V u^\star(\mathbf{r}, \mathbf{p}) u(\mathbf{r}, \mathbf{p}') dV = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \tag{94}$$

函数 $u_i(\mathbf{r}) = \mathcal{N} e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar}$或 $u(\mathbf{r}, \mathbf{p}') = \mathcal{N} e^{i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}/\hbar}$（其中$\mathbf{p}/\hbar = \mathbf{k}$）分别是傅里叶级数或傅里叶变换中使用的基函数，因此已知它们构成一个完备集。这就确立了动量按上述定义是一个可观测量这一事实。

现在我们将明确写出任意平方可积波函数 $\psi(\mathbf{r})$在整个空间中按动量本征函数展开的表达式，即

$$\psi(\mathbf{r}) = \int c(\mathbf{p}) u(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d^3p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int c(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar} d^3p, \tag{95}$$

其中积分遍及整个动量空间。系数 $c(\mathbf{p})$按方程(82)求得：

$$c(\mathbf{p}) = \int u^\star(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \psi(\mathbf{r}) dV = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar} dV, \tag{96}$$

其中积分遍及整个位形空间。用传播常数$\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$表示时，上述关于 $\psi(\mathbf{r})$的方程是 $c(\mathbf{p})$的傅里叶变换，这是一个众所周知的结果。因此可以合理地推断，动量本征函数构成一个完备集，且动量是一个可观测量。

12.2 能量

同样地，我们可以看出，系统的能量由哈密顿算符表示，是一种可观测量。方程（59）中给出了在势能 $V(\mathbf{r})$ 中运动的单粒子的哈密顿算符：

$$H_{op} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}). \tag{97}$$

要证明它是一个可观测量，我们需要证明 H_{op} 是一个厄米算符，并且其本征函数构成一个完备集。为简单起见，我们先考虑一维中的单个自由粒子，它满足 $V(x) = 0$。在这种情况下，可以将方程（75）写成

$$\int_{x_1}^{x_2} f^\star(x) H_{op} g(x) dx = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{x_1}^{x_2} f^\star(x)\frac{d^2}{dx^2}g(x)dx \tag{98}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{x_1}^{x_2} f^\star(x) d\left(\frac{d}{dx}g(x)\right) \tag{99}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left[f^\star(x)\frac{d}{dx}g(x)\right]_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2}\left[\frac{d}{dx}f^\star(x)\right]\left[\frac{d}{dx}g(x)\right]dx\right\} \tag{100}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\left[\frac{df^\star(x)}{dx}g(x)\right]_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2}\left[\frac{d^2}{dx^2}f^\star(x)\right]g(x)dx\right\} \tag{101}$$

$$= \int_{x_1}^{x_2}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}f(x)\right]^\star g(x)dx. \tag{102}$$

$$\tag{103}$$

这里， $f(x)$ 和 $g(x)$ 是在 x_1 和 x_2处均为零的任意两个函数。这个结果表明，在不存在势能时， H_{op} 是厄米的。不难看出， $V(x)$ 是实变量x的函数，本身已经具有厄米形式。因此，在一般情况下， H_{op} 也是一个厄米算符。

离散情形的能量本征值方程见方程（62）。我们记得，指标i 标记本征值为 E_i的能量本征态。在此，对 i的求和意味着对离散能级求和。相反，在将能量视为连续变量 E时，我们将本征值方程写为

$$H_{op}\psi_E(\mathbf{r}, E) = E\psi_E(\mathbf{r}, E), \tag{104}$$

其中参数 E 写在括号内。

能量本征函数的正交性 对于离散情形和连续情形，分别写为

$$\int_V \psi_i^\star(\mathbf{r})\psi_j(\mathbf{r})dV = \delta_{ij}, \tag{105}$$

and

$$\int_V \psi_E^\star(\mathbf{r}, E)\psi_E(\mathbf{r}, E')dV = \delta(E - E'), \tag{106}$$

当能量本征态构成一个完备集时，能量本征态在离散情形和连续情形下的完备关系（84）可写为

$$\sum_i \psi_i(\mathbf{r})\psi_i^\star(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{107}$$

and

$$\int \psi_E(\mathbf{r}, E)\psi_E^\star(\mathbf{r}', E)dE = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{108}$$

分别地。当这些结果成立时，我们可以认为 H_{op} 表示一个可观测量，即系统的能量。注意，这里 H_{op} 的本征函数的完备性仅仅是一个假设。

现在，可以将某个波函数 $\psi(\mathbf{r})$ 的线性展开式（63）用属于连续能量本征值 E 的本征函数表示为

$$\psi(\mathbf{r}) = \int c(E)\psi_E(\mathbf{r}, E)dE. \tag{109}$$

系数 $c(E)$ 可以按照上文在方程（82）中的讨论求得，如下：

$$c(E) = \int \psi_E^\star(\mathbf{r}, E)\psi(\mathbf{r})dV. \tag{110}$$

12.3 位置

在经典力学的哈密顿形式中，动量和位置几乎是等价对待的。在以上各节中，我们写出了动量和能量的本征值方程。可以假设位置满足一个类似的本征值方程：

$$\mathbf{r}_{op} w(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathbf{r}'\ w(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \tag{111}$$

要使位置的本征值为实数，我们必须假定 $\mathbf{r}_{op}$ 是一个厄米算符。我们预期位置矢量 $\mathbf{r}$ 是一个连续变量。在上式中，算符 $\mathbf{r}_{op}$ 的本征值为$\mathbf{r}'$ ，本征函数为 $w(\mathbf{r},\mathbf{r}')$。假设该算符为厄米算符，则算符 $\mathbf{r}_{op}$ 可以具有正交本征函数，并满足以下关系：

$$\int_V w^\star(\mathbf{r}, \mathbf{r}')w(\mathbf{r}, \mathbf{r}'')dV = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}''), \tag{112}$$

与方程（94）和（106）类似。

位置本征函数的完备关系，其形式应与方程（108）中的情形类似，即

$$\int_V w(\mathbf{r}, \mathbf{r}')w^\star(\tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}')dV' = \delta(\mathbf{r} - \tilde{\mathbf{r}}). \tag{113}$$

当完备关系成立时，任意波函数都应可以用 $w(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ 展开为

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_V c(\mathbf{r}')w(\mathbf{r}, \mathbf{r}')dV'. \tag{114}$$

我们稍后将看到，算符 $\mathbf{r}_{op}$ 的本征函数 $w(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 与 $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ 相同，后者是狄拉克 δ-函数。在这种情况下，很容易看出上述方程 (112) 和 (113) 成立，因此 $w(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ 构成一个完备正交集。因此，根据上述定义，位置是一个可观测量。

13 与其他物理量对应的算符

我们已经看到，每个物理系统都对应一个波函数，用以描述该系统的能量态；这个波函数应当是薛定谔方程（50）的解。在上文

一节中，我们证明了对于所讨论的物理系统，位置、动量和能量分别具有厄米算符$\mathbf{r}_{op}$、$\mathbf{p}_{op}$ 和 H_{op}。这些算符的本征态可以构成完备基；在这种情况下，它们满足完备关系。因此，可以将它们视为该物理系统的“可观测量”。

现在的问题是，其他算符的本征态是否也能用作基函数，来展开 $\Psi(\mathbf{r}',0)$。答案是肯定的，前提是这些算符用 $\mathbf{r}_{op}$和 $\mathbf{p}_{op}$表示，它们是厄米算符，且其本征函数构成一个完备集。我们已经看到，哈密顿算符 H_{op} 在方程（59）所示的特定形式下是厄米的，而形式为 $\Psi(\mathbf{r}\ t)$ 的波函数可以写成能量本征态的线性组合。可以利用 $\mathbf{r}_{op}$ 和 $\mathbf{p}_{op}$ 构造一个对应于物理量 $A = A(\mathbf{r},\mathbf{p})$ 的厄米算符 $A_{op} = A(\mathbf{r}_{op}, \mathbf{p}_{op})$。此外，如果这些算符是“可观测量”，也就是说，其本征函数构成一个完备集，那么系统的任何可接受量子波函数 $\Psi(\mathbf{r}\ t)$ 都可以按此类本征函数展开。

如上所述，可以通过将系统中这类动力学变量的位置和动量变量分别替换为相应的量子力学算符，来找到与之对应的算符。这一过程有时可能会涉及一些算符排序歧义。当这类算符的本征函数构成一个完备集时，它们也被视为可观测量。

14 例：角动量

作为一个求取与某物理量对应的算符的例子，我们来考察角动量的情形。经典力学中，单粒子的角动量定义为

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \tag{115}$$

其中，$\mathbf{r}$ 是粒子的位置坐标，$\mathbf{p}$ 是动量。与$\mathbf{L}$ 对应的算符取为

$$\mathbf{L}_{op} = \mathbf{r}_{op} \times \mathbf{p}_{op} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla. \tag{116}$$

这是一个厄米算符。我们可以构造一个算符，即它的平方，记作 L^2_{op}。它的本征函数是著名的球谐函数。在量子力学中的若干三维问题里，我们会遇到这些算符。

14.1 自旋角动量与电磁场中的运动

考虑一个质量为 m 、电荷为 e 的粒子处于电磁场中，其中矢势用$\mathbf{A}$ 表示，标势用 ϕ表示。此时经典哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)^2 + e\phi(\mathbf{r},t) \tag{117}$$

这个问题的薛定谔方程写作

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + e\phi\right]\Psi \tag{118}$$

现在考虑电子的情况。实验表明，电子具有（内部）角动量（自旋），其在任意选定方向上的分量只能取

值 $+\hbar/2$ 和 $-\hbar/2$。许多其他基本粒子也具有非零自旋。自旋取上述值的半整数倍 $\hbar$ 的粒子称为费米子，取整数倍 $\hbar$ 的粒子称为玻色子。

正是沃尔夫冈·泡利发现，如果薛定谔方程的波函数包含两个分量，并以列矩阵形式表示，

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix}, \tag{119}$$

磁矩的影响

$$\mu_s = g\frac{e}{2mc}\mathbf{S} \tag{120}$$

就可以考虑与自旋角动量 $\mathbf{S}$ 相对应的磁矩。这里，g 称为朗德 g因子。他提出的薛定谔方程版本称为泡利方程，可写为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \left[\left(\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)^2 + e\phi(\mathbf{r},t)\right)\mathbf{1} + \mu_s\,\sigma.\mathbf{B}\right]\begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} \tag{121}$$

其中，σ 对应于三个泡利矩阵 $\sigma = \sigma_1,\ \sigma_2\ \sigma_3$，其形式为

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{and} \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{122}$$

而**1** 表示 2×2 单位矩阵。实际上，方程（**121**）对应于以下两个方程

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_+}{\partial t} = \left[\left(\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)^2 + e\phi(\mathbf{r},t)\right)\right]\Psi_+ + \mu_s[B_z\Psi_+ + (B_x - iB_y)\Psi_-] \tag{123}$$

and

$$i\hbar\frac{\partial\Psi_-}{\partial t} = \left[\left(\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right)^2 + e\phi(\mathbf{r},t)\right)\right]\Psi_- + \mu_s[(B_x + iB_y)\Psi_+ - B_z\Psi_-] \tag{124}$$

上述泡利形式体系将电子的波函数态扩展为具有两个分量的状态；这一特征实际上表现为电子与磁场相互作用时的内禀自旋，据说没有经典对应物。此处所谓没有经典对应物，应理解为经典情形中不存在多分量波函数。即使在量子领域，不具有任何内禀自旋的粒子，其波函数也只有一个分量，这可直接从方程（**121**）看出。在 $\mu_s = 0$ 的情形下，方程（**123**）和（**124**）可化为一个方程，波函数也只有一个分量。需要注意的是，由于 μ_s 含有因子 $\hbar$，它的值在经典极限下可能可以忽略。虽然自旋并非量子力学公设的必要组成部分，但仍被视为一种量子现象。在经典极限下，实际上不会有自旋角动量，因为多分量波函数的所有分量都会化为同一个函数。

14.2 展开公设：一般情形

如上所述，量子波函数 $\psi(\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{r}\ t = 0)$ 可以按系统某一可观测量的本征函数展开。该可观测量 A_{op} 在离散情形下的本征值方程具有如下形式

$$A_{op}v_i(\mathbf{r}) = a_i v_i(\mathbf{r}). \tag{125}$$

当 A_{op} 为厄米算符时，本征值 a_i 应为实数。（此处我们仅考虑离散情形。该讨论可以很容易地推广到连续本征值的情形。）

现在可以明确表述最一般情形下的展开公设。设系统状态由归一化波函数 $\Psi(\mathbf{r}\ t)$ 表示。将该状态按系统任意可观测量的归一化本征右矢 v_i 展开，可得

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_i c_i(t)v_i(\mathbf{r}), \tag{126}$$

其中 $c_i(t)$ 是相应的系数。与前面的情形一样，可利用方程求得 c_i ： (82)

$$c_i(t) = \int v_i^\star(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},t)dV. \tag{127}$$

这使量子力学的数学形式体系保持一致，即任何平方可积波函数都可以是薛定谔方程的解，并且可以按其任意可观测量的本征态展开。

15 任意可观测量的概率

现在我们将推广玻恩概率公理，以得到其更一般的形式。该公理在第 10.1 小节中已有阐述，仅涉及 $|\Psi(\mathbf{r}\ t)|^2dV$ 的作用，即将其视为在位形空间中点 $\mathbf{r}$ 周围体积 dV 内找到粒子的概率。不过，现在可以将这一公设推广为更一般的表述，使其适用于任意可观测物理量。

首先，我们考虑系统在非简并情形下的波函数 $\Psi(\mathbf{r}\ t)$ 展开，如方程 (64) 所示。假设这是一个归一化波函数，则有

$$\int \Psi^\star(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)dV = \sum_i |c_i|^2 = 1. \tag{128}$$

由于右侧是一个概率，求和中的每一项也必定是一个概率。因此，$|c_i|^2$ 可以解释为在测量中得到 i^{th} 能量本征值 E_i 的概率。在非简并情形下，这个能量值仅对应于能量本征态 $\psi_i(\mathbf{r})$。在简并情形下，我们需要对所有具有相同能量值的本征态对应的量求和。相应的方程可写为

$$\sum_i \sum_{k=1}^{g_i} |c^{k_i}|^2 = 1. \tag{129}$$

我们知道，当 i^{th} 能量本征值 g_i重简并时，在测量中得到能量为 E_i 的概率可以

$$\sum_{k=1}^{g_i} |c^{k_i}|^2.$$

现在我们考虑任意可观测量 A_{op}的一般情形，其展开公设如方程（126）所示。这里我们可以假设，$|c_i\ (t)\ |^2$ 是在系统处于时间 t的归一化态 Ψ时，对物理量 A 进行测量而得到非简并本征值 a_i的概率。此外，我们还假设，对物理量 A的测量必定会得到某个本征值 a_i。

当本征值 a_i 均为非简并时，概率公设可扩展至所有可观测量：在时刻 t对可观测量 A_{op} 进行测量时，得到本征值 a_i 的概率为

$$\mathcal{P}(a_i,t)=|c_i(t)|^2. \tag{130}$$

利用展开公设，得到任一本征值的总概率可写为

$$\Sigma_i|c_i(t)|^2=1. \tag{131}$$

利用方程（82），可得

$$\mathcal{P}(a_i,t)=|c_i(t)|^2=\left|\int_V v_i^\star(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},t)dV\ \right|^2. \tag{132}$$

为涵盖简并情形，我们考虑一个 a_i 重简并的本征值，其中 g_i 为简并度。这意味着可能有 g_i 个线性无关本征函数对应于本征值 a_i。此情形下的本征值方程为

$$A_{op}v_i^k(\mathbf{r})=a_iv_i^k(\mathbf{r}),\quad k=1,2,3,..g_i. \tag{133}$$

现在，展开公设（126）可改写为

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\sum_i\sum_{k=1}^{g_i}c_i^k(t)v_i^k(\mathbf{r}). \tag{134}$$

现在，概率公设指出，在对 A 进行测量时，得到本征值 a_i 的概率为

$$\mathcal{P}(a_i,t)=\sum_{k=1}^{g_i}\ \left|c_i^k(t)\right|^2=\sum_{k=1}^{g_i}\ \left|\int_a^b(v_i^k)^\star(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},t)dV\ \right|^2. \tag{135}$$

最后，我们陈述 A 的谱为连续谱时的概率公理。在这种情况下，本征值方程可写为

$$A_{op}v(\mathbf{r},a)=a\ v(\mathbf{r},a). \tag{136}$$

此时，展开公设变为

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\int c(a,t)v(\mathbf{r},a)da. \tag{137}$$

由于物理量的测量值是连续变量，我们必须定义概率密度 $\rho(a,t)$。设 $d\mathcal{P}(a)$ 为在时刻 t 得到可观测量的测量值介于a 与 $a+da$ 之间的概率。则

$$d\mathcal{P}(a,t) = \rho(a,t)da. \tag{138}$$

连续本征值情形下的概率公设是：在时刻 t，得到 A 在 a附近的测量值的概率密度（即 a的单位区间概率）由下式给出

$$\rho(a,t) = |c(a,t)|^2 = \left| \int_V v^\star(a)\Psi(\mathbf{r},t)dV \right|^2. \tag{139}$$

利用归一化条件，可以证明积分

$$\int \rho(a,t)da = \int |c(a,t)|^2 da = 1. \tag{140}$$

15.0.1 位置本征态

我们假设位置算符 $\mathbf{r}_{op}$ 是厄米的，且其本征态 w 具有完备性。因此，我们预期可以用位置本征函数$w(\mathbf{r},\mathbf{r}')$展开任意波函数 $\psi(\mathbf{r})$；即，

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_V c(\mathbf{r}')w(\mathbf{r},\mathbf{r}')dV'. \tag{141}$$

现在，我们通过考察 $c(\mathbf{r}')$ 在方程（141）中的作用，来求出 $w(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ 的显式形式。在这种情况下，$|c(\mathbf{r}')|^2$ 必定是粒子出现在$\mathbf{r}'$点附近的概率密度。结合玻恩概率公理，我们得出结论：$c(\mathbf{r}')$ 必须与 $\psi(\mathbf{r}')$ 相同。根据方程（85）给出的狄拉克 δ函数的定义，我们从上面的方程得出，$w(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ 必定是狄拉克δ函数。即，

$$w(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{142}$$

因此，概率公理有助于　　我们将位置本征函数确定为狄拉克δ函数。

16 可观察场

在本节中，我们偏离量子力学的标准表述，引入可观察场的概念，例如动量场和能量场。在经典力学中，存在一种利用HJ形式主义求解力学问题的方法，正如第5小节所述。在这里，我们只需对经典运动方程（37）进行积分即可获得轨迹。在三维空间中，运动方程由（43）给出。在第9.1小节中，我们取经典运动方程（43）的一个特殊情形（自由粒子），得到（45），即动量的本征值方程。（这帮助我们确定了动量算符，其本征函数为平面波。）在量子力学中，我们同样可以使用与（43）形式相同的方程，并将其作为运动方程来获得量子轨迹。对于单粒子情形，该量子运动方程为

$$\mathbf{p}(\mathbf{r},t) = -i\hbar\frac{1}{\Psi(\mathbf{r},t)}\nabla\Psi(\mathbf{r},t) = \frac{\mathbf{p}_{op}\Psi(\mathbf{r},t)}{\Psi(\mathbf{r},t)}. \tag{143}$$

这里必须注意，该动量是正则动量，而不是力学动量。一旦我们用 $\dot{\mathbf{p}}$ 表示 $\dot{\mathbf{r}}$，就可以对其关于 t 进行积分，从而得到轨迹。需要指出的是，以这种方式得到的轨迹通常是复轨迹 [8]。

上述表达式的另一个显著特点是，它给出了动量场$\mathbf{p}$，且该场定义在系统的位形空间上。能量场也可以类似地定义为

$$E(\mathbf{r},t)=\frac{H_{op}\Psi(\mathbf{r},t)}{\Psi(\mathbf{r},t)}. \tag{144}$$

对于单粒子情形，我们可以将其更明确地写为

$$E(\mathbf{r},t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\Psi(\mathbf{r},t)}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t)+V(\mathbf{r},t) \tag{145}$$

其他物理量也可以定义类似的场。与任意可观测量 A_{op} 相对应的场 $A(\mathbf{r})$ 的一般表达式为

$$A(\mathbf{r},t)=\frac{A_{op}\Psi(\mathbf{r},t)}{\Psi(\mathbf{r},t)}. \tag{146}$$

请注意，在所有情况下， $\Psi(\mathbf{r}\ t)$ 都是系统在给定时刻的波函数，定义在位形空间上。不难看出，如果系统状态是某个算符的本征态，那么相应的场在整个位形空间中都将是一个常数，等于其本征值。但这只适用于该特定可观测量；此时所有其他物理量的场都可能是变化的。具体而言，当 Ψ 是能量本征态的叠加时，能量场将随$\mathbf{r}$和 t而变化。但对于能量本征态，能量场将是一个常数，如方程（145）所示。

我们将在下文看到，这类场对于计算相应物理量的期望值很有用，只需借助概率论中期望值的标准定义。

16.1 场的经典极限

可以看到，在极限 $\hbar\to 0$ 下，量子哈密顿-雅可比方程 (51) 约化为经典哈密顿-雅可比方程。因此，在经典极限下，薛定谔方程 (50) 约化为经典力学波动方程 (28)。自然可以预期，量子波函数 $\Psi(\mathbf{r}\ t)$ 的经典极限就是经典力学波函数 $X(\mathbf{r}\ t)$。在经典情形中，我们也继续按上述方式定义场。于是，对于算符 A_{op}，同一表达式 (146) 仍然成立，只是将 $\Psi(\mathbf{r}\ t)$ 替换为 $X(\mathbf{r}\ t)$。能量场的经典表达式与方程 (144) 中的形式相同，其中

$$E(\mathbf{r},t)=\frac{H_{op}X(\mathbf{r},t)}{X(\mathbf{r},t)}\equiv-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X^2(\mathbf{r},t)}[\nabla X(\mathbf{r},t)]^2+V(\mathbf{r},t). \tag{147}$$

这里的 H_{op} 是经典哈密顿算符，可以由方程（28）推导得出。请注意，这不是一个线性算符。当哈密顿量与时间无关 t 时，可以将经典情形下的能量场定义为

$$E=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{X^2(\mathbf{r},t)}[\nabla X(\mathbf{r},t)]^2+V(\mathbf{r}), \tag{148}$$

在这种情况下，由于解 $X(\mathbf{r}\ t)$ 是经典 H_{op} 的本征态，因此能量场处处为常数。但其他可观测量的场会随位置变化。

17 物理量的测量

量子力学中的测量公设指出，物理可观测量唯一可测得的值，是相应可观测量的各个本征值。当对处于状态 $\Psi(\mathbf{r}\ t)$ 的系统进行物理量测量，得到结果 a_i 时，测量后系统的状态立即变为 $v_i(\mathbf{r})$，即与可观测量的值 a_i 相对应的本征函数。

17.1 期望值

利用系统的波函数 Ψ，可以求出任意物理量的期望值。设 A_{op} 是物理量 A 对应的算符。在量子力学中，公设 A 在测量中的期望值为

$$\langle A\rangle = \int_V \Psi^\star(\mathbf{r},t)\ A_{op}\ \Psi(\mathbf{r},t)dV. \tag{149}$$

我们在第 10.1 小节中已看到，概率公理可用于求出某次位置测量中粒子位置的期望值。根据量子力学中的概率公设，粒子动量 $\mathbf{p}$ 的期望值为

$$\langle \mathbf{p}\rangle = \int_V \Psi^\star(\mathbf{r},t)\ \mathbf{p}_{op}\ \Psi(\mathbf{r},t)dV = -i\hbar\int_V \Psi^\star(\mathbf{r},t)\ \nabla\Psi(\mathbf{r},t)dV, \tag{150}$$

这里我们使用了 $\mathbf{p}_{op} = -i\hbar\nabla$。同样，粒子能量 E 的期望值可计算为

$$\langle E\rangle = \int_V \Psi^\star(\mathbf{r},t)\ H_{op}\ \Psi(\mathbf{r},t)dV. \tag{151}$$

若粒子位置变量所对应的算符就是$\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}^{op}$ 本身，则方程(73)可等价地写为

$$\langle \mathbf{r}\rangle = \int_V \Psi^\star(\mathbf{r},t)\ \mathbf{r}_{op}\ \Psi(\mathbf{r},t)dV, \tag{152}$$

这与动量和能量的期望值表达式相一致。应当指出，给出可观测量期望值的表达式(149)在量子力学中只是一个公设。

17.2 A　期望值的更基本表达式　　$\mathbf{s}$

在第 16 节中，我们将系统的动量场和能量场定义为位置和时间的函数。后来，这一概念被推广到任意可观测量。我们将与可观测量 A对应的场定义为

$$A(\mathbf{r},t) = \frac{1}{\Psi(\mathbf{r},t)} A_{op}\Psi(\mathbf{r},t). \tag{153}$$

借助这一定义，可以将任意可观测量的期望值写作

$$\langle A\rangle = \int_V A(\mathbf{r},t)\Psi^\star(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)dV. \tag{154}$$

例如，很容易看出，动量的平均值可以写成在整个空间上对动量场 $\mathbf{p}(\mathbf{r}\ t)$ 取平均，其中 $\Psi^\star(\mathbf{r}\ t)\Psi(\mathbf{r}\ t)$ 作为概率密度。

$$\langle \mathbf{p}\rangle = \int_V \mathbf{p}(\mathbf{r},t)\Psi^\star(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)dV \tag{155}$$

可以看出，这将得到与方程（150）中相同的表达式。类似地，在这种替代方法中，能量的平均值可以计算为

$$\langle E\rangle = \int_V E(\mathbf{r},t)\Psi^\star(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)dV, \tag{156}$$

这与方程（151）中的表达式相同。

我们注意到，与可观测量相关的场这一概念在此语境中很有用。期望值的表达式符合概率的标准定义，其中相应的场作为随机变量。

18 总结与讨论

德布罗意的波粒二象性原理，是促成现代量子力学发展的一系列革命性思想中的第一个。这一二象性原理源于对光的基本本质的思考：光既表现出波的性质，也表现出粒子的性质。光的波动性已通过电磁理论得到充分确立，而其粒子性则通过对光电效应和康普顿效应的解释而显现出来。一旦应用二象性原理，就必须认为，像电子这样的物质粒子既然要用波来描述，就应当遵循适当的波动方程。直到薛定谔在1926年提出他的方程之前，这种描述粒子的波动方程一直都不存在。薛定谔的这些尝试，是基于经典波动理论的框架，而不是严格意义上的经典力学。

众所周知，海森堡于1925年提出的矩阵力学表述早于薛定谔的研究。海森堡的形式体系完全没有采用波的概念，却能得到与薛定谔通过波动力学获得的结果几乎相同的结论。不过，值得注意的是，从波动力学很容易得到矩阵力学。在波动力学中求解问题的最后一步，便是像矩阵力学中那样计算矩阵元。但从矩阵推导出波的反向路径并不为海森堡所认同，因为他认为量子波不过是用于计算的数学工具，并无真实存在。此外，他认为系统的量子态纯属主观，只代表我们对系统的认知状态。近来，波函数的客观实在性（即其是否独立于观察者而存在）已成为热门议题。这是因为新的实验声称，量子态是真实存在的，并非仅仅是我们对系统的认知或信息。

在经典力学中，多粒子系统中所有粒子的位置和动量值决定了系统状态；而在量子力学中，系统状态被假定由波函数表示

为 Ψ。在本文中，我们针对“系统状态”的定义，在传统的经典力学观点中引入了一个新要素。我们选择了 $X(\mathbf{r}\ t) = \exp(iS(\mathbf{r}\ t)/\hbar)$（其中 $S(\mathbf{r}\ t)$ 是经典哈密顿-雅可比方程的解）来表示系统的经典“能量态”，并将其命名为经典力学波函数。这种方法帮助我们将薛定谔波动力学发展为经典力学的自然延伸。

我们的第一步是回顾如何将几何光线传播的经典程函方程作为极限情形，从麦克斯韦电磁波动方程推导出来。这两者的主要区别在于，后者允许其解进行叠加，而前者没有这种自由。随后，我们将其与经典哈密顿-雅可比方程或等价的经典力学波动方程进行了比较，并指出它们是非线性的，不允许解的叠加。这意味着，光子波函数可以是任意平方可积函数，并且仍是麦克斯韦方程组的解；而经典力学波函数只有取某些特定形式，才能成为（非线性的）经典力学波动方程的解。我们提出，德布罗意波粒二象性必须以这样的方式扩展：波态和粒子态都可以由所有平方可积函数构成的集合中的任意函数表示，同时分别满足各自的基本方程。我们指出，只需在经典哈密顿-雅可比方程中加入一个量级为$\hbar$ 的项，就能使等价的经典力学波动方程变为线性方程，并允许叠加原理。由此得到的便是量子力学中的薛定谔方程。本文将此作为推导薛定谔方程的一种替代方法加以展示。

如果沿着这条路径，从经典力学波动方程出发而得到薛定谔形式体系，那么量子力学的诠释就不会显得如此怪异。对于自由粒子，经典哈密顿-雅可比理论中的运动方程呈现为动量的本征值方程形式。显然，诸如经典力学波函数之类的函数可以按该动量算符的完备本征函数组展开成级数。这实际上就是系统能量态的傅里叶级数展开。我们还注意到，量子概率规则也可以应用于经典力学波函数 $X(\mathbf{r}\ t) \equiv e^{iS(\mathbf{r},t)/\hbar}$。将其用于任何力学问题，我们都可以得到归一化概率分布。由于在经典情形下作用量 S 是实数，概率密度在经典允许区域内可发现为常数。超出该区域后，概率分布函数急剧下降为零。当该波函数按动量本征函数（傅里叶级数）展开时，可以为每个动量本征值指定一个概率。例如，在经典离散情形中，可以将 n^{th} 本征值的概率指定为 $|\ c_n\ |^2$，即与该动量对应项的系数的模平方。对于任何其他具有完备本征函数组的可观测量，也可以作出类似的陈述。但现在的问题是，这个量是否就是对系统进行该可观测量的测量时获得其某一取值的概率。如下文所见，在经典情形中不能作这样的诠释，因为波函数坍缩现象在那里不可能发生。

系统的波函数坍缩意味着，在测量过程中，其能量态转变为某个可观测量的本征态。由此可见，这纯粹是一种量子力学效应；由于叠加原理，可观测量的本征态也可以是能量态，因此这种转变才有可能发生。另一方面，由经典力学波函数描述的系统经典能量态只能取特定形式（即经典哈密顿算符的本征态），而观测并不会使波函数坍缩为被测可观测量的本征态。这是因为这类本征态通常不可能是经典力学波动方程的解。在所有经典情形下，波函数都不可能坍缩为另一个可观测量的本征函数。因此，在这类情形下，诸如 $|\ c_n\ |^2$ 这样的概率没有物理意义。经典情况下，测量至多只能使系统从一个能量态转变为另一个能量态。这将涉及系统与测量装置之间的某种能量转移，可称为物理相互作用

。我们认识到，对于量子系统，波函数也只有在发生影响系统状态的物理变化时才会坍缩。测量过程中也可能发生同样的情况。由此看来，可以得出结论：波函数坍缩和波函数本身都是真实的现象，而不仅仅是观察者主观的“知识状态”。

在这一背景下，很容易看出为什么纠缠现象不会出现在经典领域中。当不存在波函数坍缩时，就无法有意义地谈论纠缠，而经典力学中正是如此。

另一个被认为没有经典对应物的特征，是粒子的内禀自旋。但我们已经看到，内禀自旋可以理解为这类粒子的多分量波函数所产生的结果。对于波函数仅有一个分量的粒子，不会存在内禀自旋。即使在分量多于一个的情况下，我们也已经看到，在 $\hbar$ 可忽略的极限下，实际上只有一个分量，因此内禀自旋不会显现出来。因此可以理解为，在经典极限下，缺乏内禀自旋，无非就是粒子缺乏由多个彼此不同的分量组成的波函数。

我们在经典领域和量子领域中都发现的另一个显著特征，是存在与系统的每个可观测量相关的场，例如能量场、动量场等。这些场与波函数直接相关。在两个领域中，我们对这些可观测量的期望值所作的表达式，将 $|\Psi|^2$视为位置概率密度，并将这些场视为随机变量，正是概率论中的标准表达式。因此，上述期望值表达式可以被视为本体论意义上的，即它取决于物理上实际存在的场。这再次肯定了这些场的实在性，并进而肯定了量子波函数本身的实在性。

由此我们看到，量子力学与经典力学真正的区别在于叠加原理是否成立。由于遵循这一原理，在量子力学中，能量态可以用属于平方可积函数集合的任意函数来描述，而任意可观测量的本征函数都可以按其他可观测量的本征函数展开，其中也包括哈密顿量的本征函数。不过，用波函数表示系统的能量态、将这类态函数按能量以外的可观测量的完备本征函数组展开、为这些可观测量的每个本征值赋予概率等，显然也都可以在经典情形下定义。在经典力学中，其他可观测量的本征函数并非系统可能处于的状态，因为它们无法按能量态展开。正因如此，在经典极限下才不会观察到波函数坍缩、系统各部分之间的纠缠等现象。量子力学中的大多数谜题都源于这些特征，但我们也看到，它们在经典力学中同样有其根源。可以合理地预期，沿着从经典力学到量子力学的这条恰当路径前进时，这些谜题会逐渐消失。

参考文献

[1] Cohen-Tannoudji、Claude、Bernard Diu 和 Frank Laloe。《量子力学 1：基本概念、工具与应用》，第 2 版，Wiley-VCH（2020年）[2] Sakurai、Jun John 和 Jim Napolitano。《现代量子力学》，剑桥大学出版社（2020年）[3] Pusey、M.、Barrett、J. 和 Rudolph、T.。《量子态的实在性》，Nature Phys 8，475–478（2012年）[4] Goldstein、H.、C. P Poole 和 Safko、J.L.。《经典力学》，第 3 版，Addison Wesley（2001年）

[5] 马克斯·玻恩、埃米尔·沃尔夫。《光学原理：电磁传播理论、干涉 nce
与光的衍射，爱思唯尔（2013年）[6] 约翰·戴维·杰克逊，《经典电动力学》，约翰·威立父子（2021年）[7] 赫伯特·戈尔茨坦，《经典力学》，第2版，艾迪生-韦斯利（1980年）[8] M.V.John，《物理学基础快报》（1988–2006年）15(4)，329（2002年）