

# $\hbar \rightarrow 0$ 时非相对论量子力学如何与牛顿力学等价

梅时中

(西北大学电子与计算机工程系, 美国埃文斯顿 60208)

**摘要:** 假设  $\hbar \rightarrow 0$  时一个正确的非相对论量子力学与牛顿力学等价, 以此为出发点, 对目前公认的非相对论量子力学作了细微的修改, 改动后的非相对论量子力学被证明在  $\hbar \neq 0$  时与修改前的完全等价, 在  $\hbar \rightarrow 0$  时, 与牛顿力学等价, 这样做的意义在于, 如果进一步假设  $\hbar \rightarrow 0$  时一个正确的相对论量子力学和爱因斯坦的相对论等价, 那么就有可能得到与现有相对论量子力学预言不同的结论, 这将有助于它的检验或完善.

**关键词:** Schrödinger 方程; Dirac 函数; Hilbert 空间

**中图分类号:** O413.1      **文献标识码:** A

## 1 引言

通常的量子力学系是相对论量子力学和非相对论量子力学的总称. 牛顿力学先于量子力学存在. 对于自然界中众多的现象, 牛顿力学都给出了精确的描述和预测. 所以如果某个非相对论量子力学是对的, 那么在适当的条件下, 由它得到的力学量的值应当和由牛顿力学得到的结果吻合.

对于当前被广泛使用的非相对论量子力学, 最早被提出的条件是量子数极限  $n \rightarrow \infty$ , 它包含在 Bohr 的对应原理中. 后来又有一些其它的条件被陆续提出. 主要有大质量极限  $M \rightarrow \infty$ 、短 de Broglie 波长和宏观尺度等. 值得指出的是, 这些条件可能没有一个能保证在它们得到满足时, 现有的那个非相对论量子力学总能回到牛顿力学. 例如, 只能被前者解释的超导电性经常发生在宏观尺寸的材料中; 又如  $n \rightarrow \infty$  时, 由前者给出的氢原子电子轨道并不总是牛顿力学所预言的椭圆, 等等.

这些条件的共同特征是它们没有把存在于现实世界中的物理学常量, 包括诸如  $\hbar$  之类看成变量. 这是必要的. 因为提出这些条件的动机是为了解释为什么并不普遍成立的牛顿力学能对现实世界中的许多现象作出准确的描述和预测.

与它们相对应的是  $\hbar \rightarrow 0$ . 提出该条件意在期待得到某些渐近结果, 而不是说可以人为地改变  $\hbar$  的

值, 在该文中凡是出现  $\hbar \rightarrow 0$  的地方都作如此理解. 显然, 断定一个正确的非相对论量子力学在该极限条件下应当和牛顿力学等价并没有任何事实依据. 尽管如此, 物理学家曾经期待  $\hbar \rightarrow 0$  时, 现有的那个非相对论量子力学会回到牛顿力学. 但结果与期待相差甚远. 现在确切知道的是, 目前被广泛使用的非相对论量子力学和 Bohr 版本的非相对论量子力学都不具备<sup>[1,2]</sup>这一特性.

另一方面, 至少到目前为止, 没有任何事实否定命题:  $\hbar \rightarrow 0$  时一个正确的非相对论量子力学和牛顿力学等价. 换句话说, 这个命题有正确的可能. 假设该命题正确, 并构成了本文的出发点. 既然现有的那个非相对论量子力学不具备这一特征, 那么我们可以尝试性地对它作出某些修改, 使得修改后的力学具备这一性质. 本文的目的就是介绍如何作出某种修改, 以及论证修改后的非相对论量子力学的确具备那种性质. 文章的结尾部分对这种工作可能的意义作了简略的探讨.

## 2 细微的修改

目前被广泛使用的非相对论量子力学建立在 Von Neumann 归纳出的 5 条公理<sup>[3]</sup>之上. 这 5 条公理是:

公理 1 一个系统对应一个 Hilbert 空间  $\mathcal{H}$ ,

该空间的态矢或波函数  $\Phi$  完全刻划了该系统的状态.

公理 2 一个可观察量  $O$  唯一地对应作用于  $\mathcal{H}$  上的自伴算符  $\hat{O}$ .

公理 3 测量处于状态  $\Phi$  的系统的力学量  $\hat{O}$  的值, 得到  $O_i$  的几率为  $|A_i|^2$ , 其中  $O_i$  为  $\hat{O}$  的某个本征值,  $A_i$  为  $\Phi$  在本征态系  $\{\Phi_i\}$  中的展开系数  $\Phi = \sum_i A_i \Phi_i$ .

公理 4 矢态  $\Phi$  随时间的演化遵循 Schrödinger 方程  $\hat{H}\Phi = i\hbar\partial\Phi/\partial t$ , 其中  $\hat{H}$  为系统的哈密顿量算符,  $\hbar$  为普朗克常量的  $1/2\pi$ .

公理 5 如果在某次对力学量  $\hat{O}$  的测量实验中得到了值  $O_i$ , 那么在测量结束的瞬间被测量系统处于本征态  $\Phi_i$ .

除此之外, 该版本的量子力学还包含了如何计算力学量的期望值, 如何写出一个系统的哈密顿量算符, 以及对波函数的限制条件.

考虑到该力学在其应用范围内从未给出与实验结果不符的结论以及这些公理、力学量期望值的计算公式和指导写出哈密顿量算符的规则优越性, 我们认为试图对它们作出修改是不明智的, 那么似乎可以考虑的就只是围绕  $\Phi$  作出某些修改了.

在该力学中,  $\Phi$  被认为是连续、单值且绝对平方可积的函数. 通常, 将符合这些条件的波函数可以改写为波矢空间, 或  $K$  空间中的积分形式:

$$\Phi(X, t) = \int B(K, t) e^{iK \cdot X} dK, \quad (1)$$

其中, 单值函数  $B(K)$  要么是全  $K$  空间中的连续函数, 要么是  $K$  空间中的分段光滑的函数.  $B(K)$  的这种连续性性质可以表示为

$$\lim_{\Delta K \rightarrow 0} B(K \pm \Delta K) = B(K), \quad (2)$$

其中,  $(K - \Delta K, K + \Delta K)$  究竟代表全  $K$  空间中的任一区间还是代表  $K$  空间中那些不含有不连续点的区间, 取决于  $B(K, t)$  是全  $K$  空间中的连续函数还是  $K$  空间中的分段光滑的函数 (这个解释同样适用于等式 (3) 和等式 (4)), 只是对于后者应以  $P$  代替  $K$ ).

如果在  $e^{iK \cdot X}$  的幂上减去某个单值含时纯虚数因子  $iK \cdot X_0(t)$ , 那么等价的被积函数可写为  $B(K, t) \cdot$

$e^{iK \cdot X_0(t)} e^{iK \cdot (X - X_0(t))}$ . 如此考虑的主要目的是期待当  $\hbar \rightarrow 0$  时, 从波函数中得到因子 Dirac 函数  $\delta(X - X_0(t))$ , 这一点将很快变得明确起来. 另一方面, 我们把  $X_0(t)$  解释成粒子的隐变量, 它的意义只有在  $\hbar \rightarrow 0$  时才显现出来, 此时它就是粒子的位置. 为简洁起见, 让我们引入一个等值的系数  $A(K, t)$  去替代  $B(K, t) e^{iK \cdot X_0(t)}$ . 系数  $B(K, t)$  满足的连续性条件等价于要求  $A(K, t)$  也满足相应的条件:

$$\lim_{\Delta K \rightarrow 0} A(K \pm \Delta K) = A(K). \quad (3)$$

我们知道, 波矢  $K$  通过关系式  $K = P/\hbar$  与动量  $P$  相联系. 把  $A(K, t)$  满足的连续性条件换成

$$\lim_{\Delta P \rightarrow 0} A\left(\frac{P \pm \Delta P}{\hbar}, t\right) = A\left(\frac{P}{\hbar}, t\right) \quad (4)$$

会怎样呢?

分两种情况. 当  $\hbar \neq 0$  时, (3) 和 (4) 式严格地等价. 当  $\hbar \rightarrow 0$  时, (3) 和 (4) 式意味着不同的条件. 按照 (4) 式, 波函数中将出现因子 Dirac 函数  $\delta(X - X_0(t))$ , 它暗示该条件下相应的非相对论量子力学可能与牛顿力学等价. 二者都是我们期待的. 所以, 我们提出的细微修改就是用 (4) 式去取代 (3) 式. 这样新版力学与目前版本的力学的唯一差别在于对于等式

$$\Phi(X, t) = \int A(K, t) e^{iK \cdot (X - X_0(t))} dK, \quad (5)$$

后者要求  $A(K, t)$  满足条件 (3), 而前者要求  $A(K, t)$  满足条件 (4).  $\hbar \neq 0$  时两个版本的力学严格等价.

### 3 牛顿力学的推导

为明确起见, 让我们考虑一个在标量势  $V(X)$  中运动的质量为  $m$  的粒子. 相应的坐标表象中的 Schrodinger 方程是

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(X, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(X) \right] \Phi(X, t). \quad (6)$$

依据 (5) 式, 任一动量值  $P$  的无穷小邻域  $(P - \delta P, P + \delta P)$  上的积分为  $\int_{\frac{P - \delta P}{\hbar}}^{\frac{P + \delta P}{\hbar}} A(K, t) e^{iK \cdot (X - X_0(t))} dK$ , 不妨记作  $\varphi_P(X, t)$ . 因为当  $\hbar \rightarrow 0$  时, 无穷小量  $\delta P$  和  $\hbar$  比值的分量,  $\delta p_x/\hbar$ ,  $\delta p_y/\hbar$  和  $\delta p_z/\hbar$  的取值范围是

半个实数轴  $[0, \infty)$ , 所以  $\hbar \rightarrow 0$  时,

$$\begin{aligned} \varphi_P(X, t) &= \int_{\frac{P-\Delta P}{\hbar}}^{\frac{P+\Delta P}{\hbar}} A(K, t) e^{iK \cdot X - X_0(t)} dK \\ &= A\left(\frac{P}{\hbar}, t\right) e^{\frac{P \cdot (X - X_0(t))}{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iK' \cdot (X - X_0(t))} dK'. \end{aligned} \quad (7)$$

参照  $\delta(X - X_0(t))$  函数的定义

$$\delta(X - X_0(t)) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int_{-\infty}^{\infty} e^{iK \cdot (X - X_0(t))} dK', \quad (8)$$

我们进一步得到  $\hbar \rightarrow 0$  时

$$\begin{aligned} \varphi_P(X, t) &= (2\pi)^3 A\left(\frac{P}{\hbar}, t\right) e^{\frac{P \cdot (X - X_0(t))}{\hbar}} \\ &\quad \delta(X - X_0(t)). \end{aligned} \quad (9)$$

可以看出, 在  $\varphi_P(X, t)$  的表达式中数值  $\hbar \rightarrow 0$  出现在分母上, 表明  $\varphi_P(X, t)$  是一个奇异函数.

注意,  $\varphi_P(X, t)$  中的因子  $e^{\frac{P \cdot (X - X_0(t))}{\hbar}}$  ( $\hbar \rightarrow 0$ ) 不能被某个常数取代, 原因很简单. 尽管  $\delta(X - X_0(t))$  仅在包含  $X_0(t)$  的微小邻域内不为零, 但是当  $X \rightarrow X_0(t)$  且  $\hbar \rightarrow 0$  时,  $\frac{P \cdot (X - X_0(t))}{\hbar}$  是  $\frac{0}{0}$  型的分式, 没有固定值, 所以  $e^{\frac{P \cdot (X - X_0(t))}{\hbar}}$  ( $\hbar \rightarrow 0$ ) 也没有固定值. 这就是说, 我们必须保留该因子的原有形式.

显然  $\varphi_P(X, t)$  是位置算符  $\hat{X}$  的某个本征态, 且本征值为  $X_0(t)$ . 如果用动量算符  $(-i\hbar \nabla)$  作用于  $\varphi_P(X, t)$ , 我们将得到

$$\begin{aligned} -i\hbar \nabla \varphi_P(X, t) &= P \varphi_P(X, t) - i\hbar (2\pi)^3 A\left(\frac{P}{\hbar}, t\right) \\ &\quad e^{\frac{P \cdot (X - X_0(t))}{\hbar}} \nabla \delta(X - X_0(t)). \end{aligned} \quad (10)$$

把  $\delta(X - X_0(t))$  还原为积分:

$$\begin{aligned} \delta(X - X_0(t)) &= \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \int_{-\frac{\Delta P}{\hbar}}^{\frac{\Delta P}{\hbar}} e^{iK' \cdot (X - X_0(t))} dK' \\ &\quad d\frac{P'}{\hbar}, \quad (\hbar \rightarrow 0). \end{aligned} \quad (11)$$

可以看出, 无穷小量  $\hbar$  和函数  $\delta(X - X_0(t))$  的乘积等于零. 它即是说  $\hbar \rightarrow 0$  时等式(10)右边的第二项为零, 所以

$$-i\hbar \nabla \varphi_P(X, t) = P \varphi_P(X, t), \quad \hbar \rightarrow 0. \quad (12)$$

(12)式清楚地表明,  $\hbar \rightarrow 0$  时  $\varphi_P(X, t)$  是本征值为  $P$  的动量的本征态.  $\hbar \rightarrow 0$  时  $\varphi_P(X, t)$  同时为位置 and 动量的本征态, 这对于在该极限条件下从新版的非相对论量子力学中推导出牛顿力学起了非常重要的作用.

值得指出的是,  $\varphi_P(X, t)$  并不绝对平方可积. 按照 Hilbert 空间对该空间中函数性质的要求,  $\varphi_P(X, t)$  不是该空间中的函数. 这是一个非常严重的问题. 如果不采取措施, 我们前面所做的工作将没有任何意义. 好在已有人意识到类似的问题, 把 Hilbert 空间的概念推广<sup>[4]</sup>到了 Rigged-Hilbert 空间. 该空间容纳不绝对平方可积的函数. 严格地讲, 公理1中的空间应该是 Rigged-Hilbert 空间. 只是因为很多人都习惯了, 我们依旧照样引用. 只要记住 Hilbert 空间实际上已被推广为 Rigged-Hilbert 空间, 即使遇到不绝对平方可积的函数, 我们也不会再有任何异议.

简洁而又不失一般性, 我们可以假设粒子的动量算符有不为零的几率, 取  $N$  个不同的动量值  $P_1, P_2, \dots, P_N$ , 相应地系统的波函数可写作

$$\varphi(X, t) = \sum_{j=1}^N \varphi_{P_j}(X, t). \quad (13)$$

采用通用的符号, 记算符  $\hat{O}$  的平均值为  $\bar{\hat{O}}$ . Ehrenfest 定理<sup>[5]</sup>给出了位置算符  $\hat{X}$ 、动量算符  $\hat{P}$  和势场梯度  $\nabla V(X)$  的平均值之间的关系:

$$\frac{d\bar{X}}{dt} = \frac{\bar{\hat{P}}}{m}, \quad (14)$$

$$\frac{d\bar{\hat{P}}}{dt} = -\overline{\nabla V(X)}. \quad (15)$$

因为位置算符  $\hat{X}$  就是位置矢量  $X$  本身, (14)式中略去了它上面的算符标记  $\hat{\phantom{X}}$  (下同). 在推导量子力学中的 Virial 定理时, 有人得到了等式<sup>[6]</sup>

$$\frac{d\overline{X \cdot \hat{P}}}{dt} = \frac{\bar{\hat{P}^2}}{m} - \overline{X \cdot \nabla V(X)}. \quad (16)$$

综合力学量平均值的计算公式,  $\hbar \rightarrow 0$  时波函数分量  $\varphi_{P_j}(X, t)$  ( $j=1, 2, \dots, N$ ) 同时为位置和动量算符本征态, 且本征值分别为  $X_0(t)$  和  $P$ , 以及等式(6), (13), (14), (15), (16), 我们立刻得到如下

的关系式:

$$\begin{aligned}\bar{X} &= X_0(t), \quad \bar{P} = m \frac{dX_0(t)}{dt}, \\ \frac{d\bar{P}}{dt} &= -\nabla V(X_0(t)), \quad \bar{P}^2 = \bar{P}^2, \\ \bar{H} &= \frac{1}{2} m \frac{dX_0(t)}{dt} \cdot \frac{dX_0(t)}{dt} + V(X_0(t)).\end{aligned}\quad (17)$$

这些方程构成了牛顿力学的核心. 可见以这种方式, 新版的非相对论量子力学在极限  $\hbar \rightarrow 0$  下的确与牛顿力学等价.

#### 4 求解 Schrödinger 方程

从  $\varphi_{j_1}(X, t)$  ( $j=1, 2, \dots, N$ ) 中任选两个函数  $\varphi_{j_1}(X, t)$  和  $\varphi_{j_2}(X, t)$ , 并用它们构造任意叠加态  $a_{j_1}\varphi_{j_1}(X, t) + a_{j_2}\varphi_{j_2}(X, t)$ . 既然动量算符是厄密的, 那么它在该叠加态上的平均值应为实数. 考虑到系数  $a_{j_1}$  和  $a_{j_2}$  的任意性, 这一判断要求  $\varphi_{j_1}(X, t)$  正交于  $\varphi_{j_2}(X, t)$ . 由于  $j_1$  和  $j_2$  的任意性, 我们得到结论:  $\varphi_{j_1}(X, t)$  ( $j=1, 2, \dots, N$ ) 中的函数两两正交.

显然  $\varphi(X, t)$  只能归一化为 Dirac 函数. 就像许多量子教科书做的那样, 令

$$\langle \varphi(X, t) | \varphi(X, t) \rangle = \delta(0). \quad (18)$$

不妨把系数  $A\left(\frac{P}{\hbar}, t\right)$  因式分解成两部分: 模  $\left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 C_j$  和相位因子  $C_j$  ( $j=1, 2, \dots, N$ ). 等式 (18) 等价于  $C_j$  满足条件:

$$\sum_{j=1}^N |C_j|^2 = 1. \quad (19)$$

用推导关系式  $\overline{\hat{P}^2} = \overline{P^2}$  的方法可以得到  $\hbar \rightarrow 0$  时

$$\overline{\hat{P}_\sigma^2} = \overline{P_\sigma^2}, \quad (\sigma = x, y, z), \quad (20)$$

用  $P_{j\sigma}$  标记第  $j$  个动量值的  $\sigma$  分量, 于是

$$\overline{\hat{P}_\sigma} = \sum_{j=1}^N |C_j|^2 P_{j\sigma}, \quad (21)$$

$$\overline{\hat{P}_\sigma^2} = \sum_{j=1}^N |C_j|^2 P_{j\sigma}^2. \quad (22)$$

把它们代入到 (20) 式中得到

$$\sum_{j=1}^N |C_j|^2 P_{j\sigma}^2 = \left( \sum_{j=1}^N |C_j|^2 P_{j\sigma} \right)^2, \quad (23)$$

上式在  $N=1$  时恒成立. 考虑  $N \geq 2$  时的情况, 此时 (23) 式可改写为

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^{N-1} |C_j|^2 P_{j\sigma}^2 + |C_N|^2 P_{N\sigma}^2 &= \left( \sum_{j=1}^{N-1} |C_j|^2 P_{j\sigma} \right)^2 + \\ &|C_N|^4 P_{N\sigma}^2 + 2|C_N|^2 \left( \sum_{j=1}^{N-1} |C_j|^2 P_{j\sigma} \right) P_{N\sigma},\end{aligned}\quad (24)$$

它是关于  $P_{N\sigma}$  的二次方程. 化简后的判别式

$$\Delta = -2|C_N|^2 \sum_{m, n=1}^{N-1} [|C_m C_n|^2 (P_{m\sigma} - P_{n\sigma})^2]. \quad (25)$$

因为  $P_{N\sigma}$  是实数, 所以  $\Delta \geq 0$ , 它和条件动量值  $P_1, P_2, \dots, P_N$  互不相等, 一起使得  $N$  只能取 1 且  $C_1 = 1$ . 相应地波函数  $\varphi(X, t)$  简化为

$$\begin{aligned}\varphi(X, t) &= C_1 e^{i \frac{P_1 \cdot (X - X_0(t))}{\hbar}} \delta(X - X_0(t)), \\ &(\hbar \rightarrow 0)\end{aligned}\quad (26)$$

代入到 Schrödinger 方程 (6) 式中确定  $C_j$  值, 进而得到方程的解

$$\begin{aligned}\varphi(X, t) &= e^{i \int_{t_0}^t \frac{1}{2} m \left( \frac{dX_0(t')}{dt'} \right)^2 - V(X_0(t')) dt'} \\ &e^{i \frac{m \frac{dX_0(t)}{dt} \cdot (X - X_0(t))}{\hbar}} \delta(X - X_0(t)), \\ &(\hbar \rightarrow 0)\end{aligned}\quad (27)$$

至此, 我们完整地证明了对于外标量势场中的单粒子系统, 在极限  $\hbar \rightarrow 0$  下, 新版非相对论量子力学与牛顿力学等价.

#### 5 推广及讨论

对于外标量势或矢量势中的多粒子体系, 或者以标量势或矢量势相互作用的多粒子体系, 只需假设相应于 (5) 式右边的积分式  $\int A(K_1, K_2, \dots, K_n, \dots, t) H[e^{iK_j \cdot (X_j - X_{j0}(t))}] dK_j$  中的系数  $A(K_1, K_2, \dots, K_n, \dots, t)$  和因子  $X_{j0}(t)$  分别具备与  $A(K, t)$  和  $X_0(t)$  相似的性质. 前面的证明就可以推广到适用于这些系统. 也就是说,  $\hbar \rightarrow 0$  时两个力学的等价性

对任意非相对论系统都成立. 推广细节此处从略.

本文提出的假设导致的结果对现实世界的预测与常用的非相对论量子力学的预言没有丝毫的不同. 所以目前无法判断假设的真伪. 一个有希望的想法是, 进一步假设一个正确的相对论量子力学在  $\hbar \rightarrow 0$  时必须回到爱因斯坦的相对论. 可以预见的是, 针对这个命题还有更多的工作要做. 有可能修

改后的相对论量子力学和修改前的非相对论量子力学在  $\hbar \neq 0$  时并不完全等价. 如果真是那样, 那么在现实世界中, 我们就可以设计一些实验去检验谁对谁错. 这也是本文的写作意义所在.

**致谢** 作者曾经就量子力学中的一些问题请教于郑玉明老师, 并受益于郑老师的解答, 在此表示感谢.

### 参 考 文 献:

- |  |   |
|--|---|
| [1] Ballentine L E. Quantum Mechanics[M]. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N J, 1990, 296.   | [4] Capri A Z. Nonrelativistic Quantum Mechanics[M]. The Benjamin/Cumming Publishing Company, Inc, 1985, 219—232. |
| [2] Holland P R. The Quantum Theory of Motion[M]. Cambridge University Press, 1993, 218—276. | [5] Ehrenfest P. Ehrenfestsche Theorem[J]. Z Physik, 1927, 45, 455—457.   |
| [3] Jammer M. The Philosophy of Quantum Mechanics[M]. John Wiley Inc, 1974, 5.               | [6] Eugen Merzbacher B. Quantum Mechanics[M]. John Wiley Inc, 1970, 168.  |

## How to Recover Newtonian Mechanics from Non-relative Quantum Mechanics in Limit $\hbar \rightarrow 0$

MEI Shi-zhong

(Department of Electrical and Computer Engineering, Northwestern University, Evanston, IL, 60208, US)

**Abstract:** It's assumed that when  $\hbar \rightarrow 0$ , correct non-relative quantum mechanics should be equivalent to Newtonian mechanics. Starting from this point, we slightly revised the widely accepted non-relative quantum mechanics such that the mechanics after modification is strictly equivalent to that before the modification when  $\hbar \neq 0$ , and equivalent to Newtonian mechanics in the limit  $\hbar \rightarrow 0$ . The significance lies in the possibility that if we further postulate that corrected relative quantum mechanics is equivalent to Einstein's theory of relativity in the case  $\hbar \rightarrow 0$ , then we may obtain different predictions from what produced by the former that will help to verify or improve it.

**Key words:** Schrödinger equation; Dirac function; Hilbert space