[高等量子理论专题系列讲座]

[第 3 讲]

Schrödinger 方程单体和多体效应补充分析

I，前 言

II，*Schrodinger* 方程单体定态解补充分析

1，单体定态解稳定性的理解

2，中心场定态解球对称性缺失的理解

3，两个独立解问题

4，势垒内部情况分析

5，整体位相约定不变性$\rightarrow$定域位相变换不变原理

III, *Schrodinger* 方程奇性问题分析

1，中心场$r\rightarrow 0$自然边条件的导出

2，$\delta-$函数势与概率流守恒及波函数导数连续

3，中心场负幂势$V(r)=-\beta/r^n\ (r\rightarrow 0)$奇性分析，波函数塌缩

4，连续谱中束缚态问题

5，平面波散射发散问题

IV，*Schrodinger* 方程多体效应分析—— 对应原理失效原因分析

1，对应原理简述

2，宏观量子现象对“对应原理”的否定

3，论证失效的原因在于忽视了自旋效应和量子多体效应

※ ※ ※

I，前　言

Schrodinger 方程性质及求解是非相对论量子力学的中心问题，有关叙述很多而且常见。但还是存在一些值得提醒或商榷的问题。除本讲涉及的几个问题，特别是多体效应分析之外，其它讲中还有涉及。下面将后者列出如下，作为本讲内容的再补充：

中心场自然边条件问题（**3.II**）；

解集合完备性问题（**18-III，IV**）；

Schrodinger 方程(甚至整个量子理论)线性性质问题(第 **13** 讲)；

旋量波函数问题（**8-V**）；

散射定态 *Lippmann—Schwinger* 方程求解计算（**11-IV**）[1]。

II，*Schrodinger* 方程单体定态解补充分析

1，单体定态解稳定性的理解

按经典电动力学，带电粒子有核模型是不稳定的。因为圆周运动带电粒子会不断地辐射能量，最后坠落到原点核上，使模型坍缩。但实际上，各类原子都很稳定。量子力学中常见的说法是，由于量子力学的“定态”观点“说明”了原子的稳定性，“解决”了这个困难。其实，这种说法是笼统而表面的[2]。**物理本质上看，这应当归因于电子具有波粒二象的性质，特别是它的波动性质——*de Broglie* 波的自相干涉，结果可以形成驻波，构筑起稳定的状态。于是问题归结为波动方程定态解，这才“不遵守”(针对 *Newton* 质点轨道运动的！）经典**

1　详见张永德《高等量子力学（第 II 版）》，北京：科学出版社，2010 年。第 8，9 章。

2　参见例如，张永德《量子力学(第 II 版)》，北京：科学出版社。2010 年。P.102。

电动力学的预言。

不管怎样说，总是稳定了。但却因此而引发一个新问题：既然稳定了，那么处于激发态的电子就不应当自发地向低能级跃迁。但事实是：存在自发跃迁！这一无法用量子力学定态观点解释的新困难，在继续将量子逻辑向前推进，通过二次量子化进入多体理论后，发现量子电磁场时时处处存在真空涨落！正是由于存在这类固有的扰动，问题获得了解决[3]。虽然此前，*Einstein* 以他的睿智已经笼统而形式地解决了这个问题[4]。

2，中心场定态解球对称性缺失的理解

众所周知，地球绕太阳运动的 ***Hamiltonian*** 具有转动不变性。然而，相应的 ***Kepler*** 问题解不具有球对称，出现对称性缺失。众所周知，缺失的根源是太阳系形成之时地球所获得的初始条件。为了形象地比喻这个初始条件，物理学家用调侃的口吻说：这是“左撇子”上帝用“左”手掴了地球一巴掌！（其实，这只是北半球物理学家的立场。南半球物理学家会说上帝是个“右撇子”，用“右”手掴了地球一巴掌！）

类似地，氢原子是电子在 ***Coulomb*** 场 $V(r)=-\frac{e^2}{r}$ 中束缚运动，***Hamiltonian*** 和地球在太阳引力场中运动的很相似，具有旋转对称性。设 $\psi(r,\theta,\varphi)=NR(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$，径向方程及两个自然边条件分别为[5]：

---

[3] 参见脚注 1 文献，§5.6.3 。

[4] 参见例如，脚注 2 文献，§11.5.4。

[5] 其中 $r=0$ 处的自然边条件为 $rR(r)\xrightarrow{r\to 0}0$。它来源的讨论见脚注 2 文献 §4.3.2。

$$\begin{cases} \dfrac{d^2}{dr^2}(rR)+\left[\dfrac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\dfrac{e^2}{r}\right)-\dfrac{l(l+1)}{r^2}\right](rR)=0 \\ R(r)\xrightarrow{r\to\infty}0,\quad rR(r)\xrightarrow{r\to 0}0 \end{cases} \tag{3.1a}$$

能量本征值、本征函数和归一化系数分别为：

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)=N_{nl}R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=N_{nl}r^l e^{-\frac{1}{n}\frac{r}{\rho_B}}F(-n+l+1,2l+2,\frac{2}{n}\frac{r}{\rho_B})Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$E_n=-A\beta^2=-\frac{e^2}{2\rho_B}\frac{1}{n^2}=-\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}\ ;\quad N_{nl}=\left(\frac{2}{n\rho_B}\right)^l\frac{2}{n^2\rho_B^{3/2}}\frac{1}{(2l+1)!}\sqrt{\frac{(l+n)!}{(n-l-1)!}} \tag{3.1b}$$

其中 ***Bohr*** 半径$\rho_B=\dfrac{\hbar^2}{\mu e^2}=0.529\times10^{-8}$厘米。显然，对应量子数$l\neq0,m\neq0$的解并不具有球对称性质。而且，态的平均流密度在$\varphi$方向分量$j_\varphi\neq0$，表明磁量子数$m\neq0$时电子云绕所选$z$轴旋转运动着。

这些结果看起来有点古怪：**系统 *Hamiltonian* 具有球对称性，而有些解却不具有。追究原因，既不来自初条件的破缺，也不来自基态简并产生的自发对称破缺。因为，这时既不存在初条件，也由于氢原子基态解不简并**[6]**。况且，所用的z轴是"各随人意的选择"，为什么在其中求解出现量子数(l,m)，特别是磁量子数m，导致状态出现"各随人意的选择"的各向异性？是什么原因使 *Hamiltonian* 具有的对称性在有些解中缺失了？这种各向异性的真正物理含义又是什么？**

这些疑问和矛盾向人们提示：**波函数的物理意义应当作如下理解：实质上，波函数描述的是电子所处力学状态能够具有的"能力"**。

---

[6] 《*Broken Symmetries*》，*Scientific Background on the Nobel Prize in Physics* 2008。*Compiled by the Class for Physics of the Royal Swedish Academy of Sciences*。7 *Oct.* 2008。也见文小刚《量子多体理论》，高教出版社，2004 年。P.66。

一旦给定外部实验环境（比如外磁场），空间不再具有各向同性性质，波函数就从潜在“能力”的描述转化为实际“表现”的预言。所以，这里表观上球对称性缺失，实际上球对称性并未缺失！一般地说，$|\psi\rangle$ 描述了粒子所处状态 ψ 具有的“能力”，$\langle\vec{r}|\psi\rangle$、$\langle\vec{p}|\psi\rangle$ 的模平方是关于它在相应情况下实际“表现”的预言。如果这样理解波函数，就能统一解释上面这些疑问。

对于这种“**能力转为表现**”的解释，有个比喻：用一些特性函数曲线全面描述一个人的科学知识、文化素养、体能状况、脾气性格等等内外特质。比如对某个人弹跳力强的描述，假如只让他呆在图书馆里，那些描述他弹跳能力的特性函数只能说描述了他的潜在能力；而一旦让他走向运动场跳高架前，关于他弹跳力强的描述就转化成他实际表现的预期。**“氢原子定态解球对称性表观缺失”现象提醒人们：应当将波函数理解作（可以转为“实际表现”预言的）“潜在能力”的描写。**

3，两个独立解问题

Schrodinger 方程是个二阶微分方程，微分方程通解理论指明应当有两个独立解。吴大猷先生在他书的前言和正文中两次指出[7]：求解时应当将两个相互真正独立的(！)解找到，再按物理要求扔掉不合格的那个。但绝大多数量子力学教材都是找到其实并不独立的两个解，扔掉一个便以为完事。正如他在前言中所强调的：“**兹以氢原子径向函数指数方程两个根 $+l$ 与 $-(l+1)$ 为例。五十年来，几乎所有量子力学书辗转抄袭，皆作同一错误。**”确实，径向方程经变换

[7] 吴大猷《量子力学（甲）》，科学出版社，1984 年。P.7, 103-104。

$R(r)=r^{l}e^{-\beta r}W(r)$后，成为合流超几何方程，得到两个解为[8]：

$$W_1(r)=F(a,b,r)\ ,\quad W_2(r)=r^{1-b}F(a-b+1,2-b,r) \qquad (3.2)$$

由于这时$b=2l+2$是整数，两个解彼此并不独立。于是应当注意吴先生的提醒，不能将$W_2(r)$解扔掉就算结束了求解过程。

附带指出，有时人们会问，为什么自然界的基本动力学规律都是二阶微分方程？可以回答如下：在力学运动范围内，确实如此。在一般的自然科学理论中并不总是如此。物理根源在于，（无自旋等内禀动力学变数的）质点动力学状态的完备描述只需要位置和其一阶导数——速度。由给定初值求解微分方程可以知道，这就决定了基本动力学微分方程的最高阶数不会超过二阶。但如果空间运动还受内禀(或别的)动力学变数的影响，则基本动力学方程就不再是二阶微分的。

4，势垒内部情况分析

当粒子自左入射势垒并隧穿时，将出现所谓的“隧道效应佯谬”。佯谬在于，初看起来似乎可以认为，在势垒内部粒子处在由负动能（虚动量）表示的某个古怪状态中。实际上，在这种纯粹量子现象中，按指数规律减小的只是随着粒子远离边界的势垒深处出现粒子的概率。而在势垒内部，粒子不但具有真实的动量数值分布，而且其真实的动量和坐标依然遵守不确定性关系[9]。

为证实这一点，取势垒$V=C$。当势垒较厚$L>>\lambda$（$\lambda=\hbar\big/\sqrt{2m(V-E)}$）时，势垒内部波函数解$Ae^{-x/\lambda}+Be^{x/\lambda}$中第二项正

---

[8] 见脚注 2 文献，§4.5.1， P.100。

[9] *A.A.* 索科洛夫等,《量子力学原理及其应用》，王祖望译，上海科学出版社，P.126。

指数项可以忽略，波函数将按负指数规律衰减$\psi_{II}(x)=Ae^{-x/\lambda}$。然而，负指数可以写为 ***Fourier*** 积分，

$$e^{-x/\lambda}=\int_0^\infty \frac{2\lambda^{-1}}{\pi\left(\lambda^{-2}+k^2\right)}\cos kxdk\equiv\int_0^\infty f(k)\cos kxdk \qquad (3.3a)$$

此式表明，势垒内部波函数是振幅为 $f(k)$ 的实数（！）动量k 的波函数叠加。显然，叠加振幅 $f(k)$ 主要集中在k 的数值不很大，其量级在$\approx\lambda^{-1}$范围内。这样，动量不确定性的量级等于$\Delta p\approx\hbar\lambda^{-1}$。注意按波动力学，在势垒内部的微观粒子，其位置确定只能到势垒宽度的量级$\Delta x\approx L$。于是得到

$$\Delta p\Delta x\approx\hbar\lambda^{-1}L \qquad (3.3b)$$

由于计算只对$\lambda^{-1}L>>1$情况适合，于是，确定势垒内部粒子动量和位置的精确度仍然遵守不确定性关系。总之，如 ***Landau*** 所说[10]：“如有某一测量过程把粒子定域于空间某一固定点，那末这一测量的结果将使该粒子的态发生改变，使得这个粒子根本不再具有任何确定的动能。”就是说，由于无处不在的不确定性关系以及不可避免的测量干扰，人们是观察不到负动能数值现象的。甚至更进一步，按（3.3a）式，负动能区域的波函数也是由正动能波函数分量按一定的振幅分布相干叠加而成的。

5，整体位相约定不变性$\rightarrow$定域位相变换不变原理

众所周知，任意量子体系的外部整体相因子是可以自由约定的。进一步发现，电磁场中 *Schrodinger* 方程具有定域位相变换（定域规

---

[10] *Л.Д.* 朗道，***E.M.*** 栗弗席茨，量子力学（非相对论理论）上册，高等教育出版社，**1980** 年，**§18**。

范变换）不变性[11]：如果对电磁场4维电磁势实施如下定域规范变换（变换与空间变数$\vec{r}$有关，所以称作定域的）：

$$\left(\vec{A}, i\varphi\right) \rightarrow \left(\vec{A}' = \vec{A} + \nabla f\ ,\ i\left(\varphi' = \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t}\right)\right) \qquad (3.4a)$$

此处导引函数$f\left(\vec{r}t\right)$是具有磁通量纲的任意可微函数。这时，只需波函数也同时经受如下定域位相变换

$$\psi\left(\vec{r}t\right) \rightarrow \psi'\left(\vec{r}t\right) = \exp\left(i\frac{qf\left(\vec{r}t\right)}{\hbar c}\right)\psi\left(\vec{r}t\right) \qquad (3.4b)$$

则方程形式保持不变。就是说，对变换后的$\left(\vec{A}', i\varphi'\right), \psi'$，可以证明有

$$i\hbar\frac{\partial\psi'}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}'\right)^2\psi' + V\psi' + q\phi'\psi' \rightarrow i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2\mu}\left(\vec{p} - \frac{q}{c}\vec{A}\right)^2\psi + V\psi + q\phi\psi$$

（3.4c）

问题在于，电磁势并不是确定的，它们彼此之间可以相差任意定域规范变换。因此，电磁场下带电粒子波函数也就有一个任意定域位相因子的不确定性。

将问题反转来看：如果电子波函数有一个任意定域相因子变换，比如为波函数随意指定一个空间分布位相场，那也就相应于电磁势重新选取了一个规范。现在，无穷自由度的场内每个空间点都可以看作一个量子系统，都可以自由约定它们的初始位相。于是事情就成了人们自由约定位相场了。所以，**电磁场常常直接称作可对易的$U(1)$位相场——*Abelian* 规范场。数学上看，电磁势就是导数∂_μ转为流形协变导数D_μ时必须引入的连络场A_μ：**$\partial_\mu \rightarrow D_\mu = \left(\partial_\mu - \frac{ie}{\hbar c}A_\mu\right)$。

[11] 见脚注2文献，§9.1.2， P.237。

将这个观点推广，用李群不可积元素取代简单的复数相因子，便走向了 ***non-Abelian*** 规范场，也即非对易位相场 [12]。这就有了规范理论的基本主张：**“广义定域规范（位相）变换不变原理”——一个正确物理理论的必要条件是物理结论与人为约定的位相场无关。**于是，基本主张又可以称作**“广义定域位相约定自由原理”。**

III, *Schrodinger* 方程奇性问题分析

1，中心场 $r \to 0$ 自然边条件的导出

详见《量子菜根谭》第 **3** 讲第 **3** 节。

2，δ – 函数势与概率流守恒及波函数导数连续

布洛欣采夫在其《量子力学原理》中，曾经根据概率流密度的连续性导出波函数微商的连续性 [13]。近年有人批评他的论证。

现在先看看布是怎样论证的，再分析批评他的意见。布在他书的[附录 **8**，对波函数的要求]中：由连续性方程得

$$\frac{d}{dt}\int \psi^{*}\psi\, dv = -\int \nabla \cdot \vec{J} dv = -\int J_{N} ds = 0$$

研究沿 x 方向一维情况，设在 $x = x_1$ 点位势 $V(x)$ 有一个间断跳跃，考虑这个点后，沿整个 x 轴积分得

$$J_x(+\infty) - J_x(x_1 + 0) + J_x(x_1 - 0) - J_x(-\infty) = 0$$

假设无穷远处无净流，即得

$$J_x(x_1 + 0) = J_x(x_1 - 0) \qquad \text{（3.5a）}$$

---

[12] 《杨振宁讲演集》，宁平治等主编，南开大学出版社。**1992** 年。**P.342，362，370**。

[13] *Д.И.Блохинцев,《Основы Квантовой Механики》*，*ГИТТЛ*，**1949**，*Дополнения VIII*，*СТР.* 574 。

由此，按流密度表达式，即得波函数微商是连续的

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_1+0}=\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_1-0} \quad 和 \quad (\psi)_{x_1+0}=(\psi)_{x_1-0} \qquad \text{（3.5b）}$$

显然，从数学上看，布洛欣采夫作积分时只涉及势函数是正规的或是有限间断点的情况。

对此批评的意见认为，对$\delta-$函数势$V(x)=-C\delta(x-x_1)$情况,定态 *Schrodinger* 方程积分结果将有

$$\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_1+0}=\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x_1-0}-\frac{2mC}{\hbar^2}\psi(x_1)$$

说明当$\psi(x_1)\neq 0$(其实不一定如此！一般需要物理论证)时，波函数的微商不连续。广泛些说，对于无限跳跃的间断点或奇点都可能如此。于是，布书结论是不对的。

事情真是这样吗？其实，任何奇性位势，实际都只是现实物理世界中比较正规的一类势函数的极限模拟。说到底，它们都应当是有限的！$\delta-$函数势只是一种理想的简化模型而已。追究起来，对$\delta-$函数势应区分三种情况作进一步说明：

其一, 对于不吸收粒子的薄片状势垒（或势阱），当它们足够高（深）又足够窄时，为简化计算，可取极限情况利用$\delta-$函数势来模拟。这时根据概率守恒原则，势两侧概率流密度连续，所以波函数微商仍然连续，不会间断。对于这类$\delta-$函数势，该点必须取作波函数的零点。

其二, 为了模拟吸收电子的物质薄层，也可以引入$\delta-$函数势。这时根据概率守恒原则，势两侧概率流密度不连续。该点波函数不为零，

可根据薄层的吸收率列出相关等式求得。

其三，注意，不能用$\delta-$函数势模拟自旋状态的突变（比如中子干涉量度学中电流片处）。这种情况不属于上面两种。

于是，何时是第一类、第二类、第三类，何时可用$\delta-$函数势，均需要根据边界的具体物理情况而定。非相对论量子力学通常属于力学理论领域，势函数$V(x)$只是引导或局限粒子的时空运动，不会有粒子产生或吸收。势场内处处表现出概率分布定域守恒性质。由此物理分析，对连续性方程积分后，任意点x_1两侧波函数微商应当相等。可以拿$\delta-$函数势来说别的事或许可以，但不能倒过来拿它批评布书的物理分析，因为布书分析并没有错。即便考虑有吸收的第二种情况，充其量也只是补充边界条件的类型，谈不上对布书结论的纠错。而且，在论述补充类型时还应当区分是哪种$\delta-$函数势[14]。

所以，**不要用$\delta-$函数势笼统地论证波函数微商可以不连续。一般说，作为思想方法，不要从数学模型出发导出物理边界条件，只能从物理分析出发拟定边界条件。**

3，中心场负幂势$V(r)=-\beta/r^n\,(r\to 0)$奇性分析，波函数塌缩

---

[14] 附带指出，作为线性泛函的$\delta-$函数，其乘积函数$f(x)$在$\delta-$函数奇点处必须连续。有时见到下面推广的$\delta-$函数定义：

$$\int_a^b dx f(x)\delta(x)=\begin{cases}0 & if\ ab>0\\ (1/2)f(0) & if\ ab=0\\ f(0) & if\ ab<0\end{cases}$$

这种定义和表达式$\int_{-\infty}^{\infty} dx f(x)=\left(f(0^-)+f(0^+)\right)/2$，$\theta(x)\delta(x)=\delta(x)/2$都是有问题的。 详见 *S. M. Dutra,* 《*Cavity Quantum Electrodynamics*》，*John Wiley ＆ Sons , Inc., Appendix F*。P. 333。

i, $V(r)=-\beta/r$ 的 *Coulomb* 场求解无奇性。对束缚定态解，要遵守两个自然边条件的约束 $R(r)\xrightarrow{r\to\infty}0$, $rR(r)\xrightarrow{r\to 0}0$ ，其中后者用于排除由球坐标中 *Laplace* 算符的奇性所带来的多余解（见第 **3** 讲第 **2** 节）。

ii, 中心场为负 2 次幂势 $V(r)=-\beta/r^2$ 。对于 $n=2$ ，有时简单论断为“$n=2$ 时不论 β 数值如何都不可”，稍嫌粗略。其实，这时要求 β 数值不要太大即可——吸引势场不能太强。若 β 数值太大，将出现波函数向中心原点的塌缩，得不到稳定的局域解。鉴于波函数向中心原点的塌缩与系统能量的可观测性有关，而系统能量的可观测性又与系统 *Hamiltonian* 本征函数族完备性等价。于是可以根据完备性分析求得波函数不向中心原点塌缩的条件（见第 **18** 讲（**18.11**）式）[15]

$$V(r)=-\beta/r^2;\quad \beta<\frac{\hbar^2}{8\mu}(2l+1)^2$$

单就 $r\to 0$ 附近而言，超过这个条件的位势原则上不能使用。何况此外还有（按中心场求解自洽性要求所导致的）$r\to 0$ 自然边条件约束。这种约束将主要归结为对中心场奇性的约束（见第 **3** 讲第 **I**、**II**、**IV** 节）。

iii, 中心场为高阶负幂次势 $V(r)=-\beta/r^n$, $n>2$。比如 $n=3$ ，径向 *Schrodinger* 方程为

$$\frac{d^2}{dr^2}(rR)+\left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{\beta e^2}{r^3}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\right](rR)=0$$

若要求束缚定态解还需加上两个自然边条件。注意，由于存在 r^{-3} 项，

---

[15] 也见张永德，《高等量子力学》，北京：科学出版社，**2010** 年。附录 **C**，§**III**。

此微分方程在$r=0$处的奇点已不是正则奇点。鉴于此方程最高阶导数是 2 阶，方程在$r=0$点邻域不存在广义幂级数形式的解。就是说，如果一定要假设在$r=0$点邻域解的形式为广义幂级数$rR(r)=r^{\delta}\sum_{n=0}^{\infty}c_n r^n$（这里设定$c_0\neq 0$，$\delta$为待定实数），代入方程后，由于方程最高阶导数是 2，根据待定级数中最低阶幂次系数和等于零，即得$c_0=0$。然后从级数中抽出r一次幂，再按上面办法，又得到$c_1=0$，等等。**这等于说，由于方程奇性过高，$r=0$点邻域不存在广义幂级数形式的解。**

至此，按照下面"自然无奇性原理"，在$r\to 0$邻域的负能定态解问题分析应当到此为止。

最后补充指出两点，其一，对如r^{-6}形式的 *van der Waals* 力，仅仅是长距离的渐进形式，并不适用于r不大区间。其二，有文献讨论了另一类问题[16]：基于探讨$r\to\infty$处渐进散射问题的需要，针对正能量情况，特别是散射阈值附近，求解了高阶负幂次中心场问题，并讨论了**向经典过渡问题的单体理论**。

4，连续谱中束缚态问题

von Neumann 和 *E.Wigner* 在一篇文章中提出[17]，对于特定位势，在正能连续谱区里可以包含束缚态解。对此 *Landau* 指出[18]，虽然对于特殊数学形状位势，是有束缚态解，但这些解不具有物理意义。

---

[16] 例如，先前有 *Landau*《量子力学》，§18，§35；后来 *B..Gao, PRA, Vol.*58, 1728(1998); *B..Gao, PRL, Vol.*58, 4222(1998)；*B..Gao, PRA, Vol.*59, 2778(1999)。以及关于对应原理的 *B..Gao, PRL*，83，4225（1999）；*PRL*，86，2693（2001）；*PRL*，86，2694（2001）。

[17] *von Neumann and E.Wigner*， *Z. Phys.*， 30(1929)465。

[18] *Л.Д.* 朗道，*E.M.* 栗弗席茨，《量子力学（非相对论理论）》，上册，高教出版社，1980 年。P.66 脚注。

Landau 的意见应当是对的。因为，对这些正能束缚态解，由于它们上边和下边都不存在那怕是非常非常小的能隙禁区，实验上根本制备不出来。因为实验中，不可能将能量数值掌控到绝对的几何点的精度——不存在没有误差的实验！退一步说，即便制备出来，也不可能哪怕是非常短暂地存活下去。因为不存在绝对没有干扰的环境——至少永恒存在的真空涨落要扰动它，使该束缚态波函数舒展成为它上面或下面某个正能量延展态。甚至也难于看出它们在什么场合有理论意义。应当说，这类研究是将几何点概念看得太执着的结果。

5，平面波散射发散问题

与此同时， ***QT*** 中由于物理描述的需要，态矢空间$\mathscr{H}$ 中吸纳了各种不能模平方归一的矢量。比如，无头无尾巴的平面波、位置本征态、动量本征态等等。这都是一些非正规矢量（***improper vector***），不能按通常内积办法来度量模长。所以，**实际上 *QT* 的渐近自由状态空间$\mathscr{H}$ 大于数学的 $L^2(R^3)$ 空间，是一种扩大的 *Hilbert* 空间。所包含的非正规矢量计有：**

i，常见的连续基$\{|\vec{x}\rangle, \forall\vec{x}\}$，$\{|\vec{p}\rangle, \forall\vec{p}\}$；

ii，散射态（各类渐近条件问题）；

iii，周期结构中的 *Bloch* 波；各类延展态。

这种现象根源于一些物理量对应的算符有连续谱（诸如 $\vec{x}$ ， $\vec{p}$ ，$H_0 = p^2/2m$ 等），于是全然没有正规的本征矢量。由此，***Dirac*** 通过引入非正规矢量，把可观察量或自共轭算符处理成好像它们的本征矢量

就是$\mathscr{H}$的基[19]。比如说，即使位置算符$\hat{\vec{x}}$没有正规的本征矢量，但通过引入非正规的本征矢量$|\vec{x}\rangle$，满足本征方程$\hat{\vec{x}}\,|\vec{x}\rangle=\vec{x}\,|\vec{x}\rangle$。这时归一化条件为

$$\langle\vec{x}\,'|\vec{x}\rangle=\delta(\vec{x}\,'-\vec{x})$$

这里δ函数按自变数知是三维的。于是任意正规态矢$|\psi\rangle$可以展开为

$$|\psi\rangle=\int d^3x\psi(\vec{x})|\vec{x}\rangle$$

按照现在的归一化条件，展开系数$\psi(\vec{x})$正是空间波函数。它们现在表示为$\psi(\vec{x})=\langle\vec{x}|\psi\rangle$，意义是$|\psi\rangle$在$\mathscr{H}$中的一个连续的特殊表象（坐标表象）的坐标。同样可以说明动量表象中 ***Dirac*** 的非正规矢量办法。

总之，*QT* 创立者们重视物理的需要，对数学也不十分拘泥，引入了不少人造的概念，还有这个扩大的 *Hilbert* 空间（为简明人们仍称它为 *Hilbert* 空间）。

在散射理论中，人们为了处理简明，对入射波经常使用不能归一化的非正规态矢的平面波。从而将本来是波包型状态在有限时空中完成的散射过程，人为地延展到无限的全时空之中。这就带来了数学发散问题。这种人造的困难只能用人为的办法消除。这就是散射理论中为什么需要人为添加绝热近似——相互作用渐进的加入，或者反过来说是渐进的消除。

就是说，**在散射理论中必须注意区别正规态矢和非正规态矢**。那

[19] 并非必须如此描述。***von Neumann*** 就曾表明，对 ***QM*** 来说，用“谱分解”（***spectral decomposition***）办法可以提供一个适当推广的本征矢量基，并进一步表明：每一个自共轭算符（自共轭算符与厄米算符的关系见脚注 **4** 文献[附录 ***B***]）总有一个谱分解。于是，***QM*** 总是应当假设可观察量对应于自共轭算符，而不是厄米算符。但是，***Neumann*** 等人发展的谱分解体系在物理学家中没有得到广泛的使用。

里有几个结果，对物理的正规矢量显然是对的，而对非物理的非正规矢量却不成立。例如，可以认为，描述碰撞过程的演化矢量在碰撞发生之前和之后很久，其行为应如同自由粒子态矢。当将此结果应用于非正规的散射本征态时，结果是不对的。**设正规矢量$|\varphi\rangle$有渐进条件：**

$$U(t)|\varphi+\rangle \xrightarrow{t\to-\infty} U^0(t)|\varphi\rangle$$

但非正规矢量$|\vec{p}+\rangle$、$|\vec{p}\rangle$之间不满足此渐进条件 (虽然它俩分别是各自时间演化算符的稳定状态$U(t)|\vec{p}+\rangle = e^{-iE_p t}|\vec{p}+\rangle$，$U^0(t)|\vec{p}\rangle = e^{-iE_p t}|\vec{p}\rangle$）。**只当将它们积分叠加$\int d^3p|\varphi(\vec{p})\rangle$构成了正规矢量，有了物理意义，此渐进条件才成立。原因是无限维空间态矢收敛有强弱之分，渐近条件不可以像用于正规态矢那样直接用于非正规态矢** [20]。

IV，*Schrodinger* 方程多体效应分析—— 对应原理失效原因分析

1，对应原理简述

对应原理有不同的表述。**首先，*Bohr* 表述**：大量子数极限下，量子力学体系的行为渐近地趋同于经典力学体系的行为 [21]。

其次，*Ehrenfest* 表述：从 ***Schrodinger*** 方程出发，微观粒子在平均意义上遵从 ***Newton*** 第二定律（但这只限于力场满足$\langle\vec{F}(\vec{r}t)\rangle = \vec{F}(\langle(\vec{r}t)\rangle)$条件的情况，详见[22]。

最后，*Planck-Landau* 表述：$\hbar\to 0$时[23]，若略去$\hbar^2$项，***Schrodinger*** 方程将过渡到经典 ***Hamilton-Jacobi*** 方程，量子力学将返回经典力学。

---

[20] 参见脚注 7 文献，附录 *B*：量子力学算符理论简论。

[21] 《*N.Bohr Collected Works*》, *Vol.3, ed. by J.Nielsen*，*North-Holland*，1976。

[22] *Ehrenfest* 定理论证见脚注 2 文献，P.42。

[23] $\hbar\to 0$ 含义解释及相应推导见脚注 2 文献，P.9、41。

此推导不长[24]，抄录如下，便于分析。

证明：量子效应总离不开 ***Planck*** 常数 $\hbar$ ，如果当一个物理过程中 $\hbar$ 的量级可以忽略时，过程中的量子效应便可以忽略。于是，对于接近经典的量子系统，如果令（a 和 S 均为实函数）

$$\psi(\vec{r},t)=a(\vec{r},t)\exp\left\{i\frac{S(\vec{r},t)}{\hbar}\right\} \tag{3.6}$$

可以预计，当 $\hbar\to 0$ 时 S 将服从 ***Newton*** 力学规律而成为经典粒子的作用量。为表明这点，将此表达式代入 $Schr\ddot{o}dinger$ 方程，得

$$a\frac{\partial S}{\partial t}-i\hbar\frac{\partial a}{\partial t}+\frac{a}{2m}(\nabla S)^2-\frac{i\hbar}{2m}a\Delta S-\frac{i\hbar}{m}\nabla S\cdot\nabla a-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta a+Va=0$$

分开实项和虚项，可得两个方程

$$\begin{cases}\dfrac{\partial S}{\partial t}+\dfrac{1}{2m}(\nabla S)^2+V-\dfrac{\hbar^2}{2ma}\Delta a=0\\ \dfrac{\partial a}{\partial t}+\dfrac{a}{2m}\Delta S+\dfrac{1}{m}\nabla S\cdot\nabla a=0\end{cases}$$

从第一个方程中略去 $\hbar^2$ 项，并将第二个方程乘以 $2a$ ，得

$$\begin{cases}\dfrac{\partial S}{\partial t}+\dfrac{1}{2m}(\nabla S)^2+V=0\\ \dfrac{\partial\left(a^2\right)}{\partial t}+div\left(a^2\dfrac{\nabla S}{m}\right)=0\end{cases} \tag{3.7}$$

这里，第一个方程就是单粒子作用量 S 的经典 ***Hamilton-Jacobi*** 方程[25]。由于 $\nabla S=$ 粒子动量 $\vec{p}$ ，因此 $a^2\dfrac{\nabla S}{m}$ 便是粒子的流密度。于是第二

---

[24] 见脚注 10 文献，**P.36**。也见 ***K. Gottfried, Quantum Mechanics, Vol.1*, P.70 (1965)**。

[25] 参见例如，吴大猷，古典动力学，**P.251**，科学出版社，**1983** 年。***Hamilton-Jacobi*** 方程为

$$H\left(x_i,\frac{\partial S}{\partial x_i}\right)+\frac{\partial S}{\partial t}=0\ ;\quad \frac{\partial S}{\partial x_i}=p_i$$

个方程可以看成连续性方程。如果不把a^2看成粒子的概率密度，而就当做粒子密度，则此方程完全是个经典力学方程。总之，如果认为 *Schrödinger* 方程中$\hbar \to 0$，略去$\hbar^2$项便得到经典力学的规律。或者说，当$\hbar \to 0$时，若在波函数的振幅和位相中，只计及到$\hbar$的一次方项，则它们均服从经典力学规律。

2，宏观量子现象对"对应原理"分析的否定

然而，**物理学发展史实并未遵从上面那些简单的论证**。自量子力学建立以来，迄今出现许多**宏观量子现象**。诸如， ***Josephson*** 结与量子干涉器件、超导电性、超流动性、***Bose-Einstein*** 凝聚、整数和分数量子 ***Hall*** 效应、***Nano*** 结构，以及天体上的中子星、白矮星，等等。它们显然都属于$\hbar \to 0$的大量子数、大粒子数、宏观尺寸的场合，但它们行为并不遵守对应原理过渡到经典体系，却表现出异于经典体系的"**宏观量子效应**"，甚至构成"**宏观量子力学**"[26]。

3，论证失效的原因在于忽视了自旋效应和量子多体效应

面对上述大量宏观量子现象的事实，人们不难接受：**对应原理实际并不普遍成立，已经不能再当作原理**。***Bohr*** 思想的定性性质和局限性很明显；***Ehrenfest*** 定理证明的局限性也明显，都可以不必再行分析。但人们会疑惑：***Planck***、***Landau*** 等人的推导论证怎么会有时不成立了？

问题不出在数学推导上，而是出在物理论述中存在不足和错误：

---

[26] ***A.J.Leggett, Quantum Mechanics at Macroscopic Level, Elsevier Science Publisher B.V.,*** **1987**。

其一，推导论证中显然没有考虑电子自旋和自旋耦合造成的量子纠缠和空间关联效应。鉴于历史原因，出现这方面的局限性很自然。现在人们知道，源于自旋及自旋量子纠缠产生的空间关联性酿造出大量宏观量子效应。

其二，即便不论第一条，也不论让有量纲的物理常数$\hbar \to 0$提法是否科学严谨，**更重要的是，他们推导只是针对单粒子 Schrödinger 方程进行。就是说，两人计算的主要局限在于没有考虑量子多体效应。这和他们将过渡标准不准确地取作$\hbar \to 0$并且只考量单体 Schrödinger 方程过渡密切相关。正是限于这种处理思路，**

i，未能考虑超低温$T \to 0$下粒子波动性增强导致的多体效应。电子 ***de Broglie*** 波长λ_{de}与电子速度成反比，超低温下电子λ_{de}将增大到等于甚至大于电子间的距离l。这时，碱金属不同原子的价电子 ***de Broglie*** 波相互交叠，出现空间相干性，从而产生 ***Bose-Einstein*** 凝聚的宏观量子行为（详见第 **11** 讲）；

ii，未能考虑超高密度导致的多体效应。当引力塌缩使粒子间距l十分小时，相邻粒子波函数产生交叠，出现 ***de Broglie*** 波的量子纠缠。因此推导不适用于天体引力塌缩导致的粒子超高密度的情况。

以上两点既是两人推导论证失效的原因，也是出现他们未曾预料的宏观量子现象的原因。

于是，即便按量子数、系统粒子数或有效空间距离l衡量可以认为$\hbar \to 0$，但这时还有超低温、超高密度两类情况，比值$\dfrac{\lambda_{de}}{l}$并不很小，

$$\begin{Bmatrix} (T\to 0)\to(v\to 0) \\ l\to 0 \end{Bmatrix} \Rightarrow \frac{\lambda\!\!\!{}^{-}_{de}}{l}=\frac{\hbar}{mvl}\neq 0 \qquad (3.8a)$$

这时波动性能够通过多体量子纠缠造成宏观量子效应。例如，在超低温 *Bose-Einstein* 凝聚相变点附近，由（11.3）式，得

$$\frac{\lambda_T^3}{l^3}=\rho(T)\lambda_T^3=2.612 \to \frac{\lambda_T}{l}=1.377 \qquad (3.8b)$$

这里λ_T是电子热 *de Broglie* 波长。

总之，向经典过渡的确切提法不应当是$\hbar\to 0$和局限于单体 *Schrödinger* 方程过渡，而应当在多体效应考量下采用无量纲的相对 *de Broglie* 波波长“极短波长近似”的标准，

$$\frac{\lambda\!\!\!{}^{-}_{de}}{l}=\frac{\hbar}{mvl}\to 0 \qquad (3.8c)$$

作为取极短波长近似的结果，体系中所有微观粒子的波动性和彼此纠缠相干性全部消失，体系成了只具有粒子性的经典粒子集合。描述此体系的多体量子力学经过简化便过渡到宏观体系的 *Newton* 力学。

附带指出，由此可知单纯基于$\hbar\to 0$假定的 *WKB* 准经典近似对于超低温、超高密度等情况是不适用的。