

量子力学第一讲：经典力学回顾

刘宁

2026 年 9 月 3 日

量子力学的许多基本概念，如状态、算符、对易关系、时间演化等，都与经典力学中的相空间、泊松括号和正则方程有着深刻的对应关系。为了理解量子力学为何必须诞生，我们首先简要回顾经典力学中最核心的概念和框架：从最小作用量原理到拉格朗日方程，再从哈密顿力学的正则方程，到哈密顿-雅克比方程和泊松括号等。

1 经典力学中的状态与相空间

考虑质量为 m 的质点，牛顿第二定律为

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}, t). \quad (1)$$

这是一个关于位置 $\mathbf{r}(t)$ 的二阶微分方程。求解它需要两个初始条件：初始位置 $\mathbf{r}(0)$ 和初始速度 $\dot{\mathbf{r}}(0)$ 。该方程告诉我们：单独的位置并不能告诉我们关于状态的所有信息，只有同时知道位置和速度才能确定质点的状态。

引入动量

$$\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{r}}, \quad (2)$$

则牛顿方程可写为一阶方程组

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}. \quad (3)$$

此时，**经典力学系统的状态完全由位置和动量 $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ 共同确定。**

对于 N 个质点组成的系统，共有 $3N$ 个位置坐标，它们张成 $3N$ 维位形空间（无约束）。但位形空间只描述系统“在哪里”，不包含“将向何处去”的信息。为此，我们引入由所有位置坐标和动量坐标张成的相空间。相空间中的一个点对应系统的一个状态，随着时间演化，状态点沿相轨道运动。给定初始状态，相轨道唯一确定。

例 1.1 (一维自由粒子). 自由粒子不受力， $F = 0$ 。由牛顿第二定律，加速度为零，于是速度和动量均为常数

$$\dot{x} = v_0, \quad p = mv_0 = p_0.$$

位置随时间线性变化： $x(t) = x_0 + v_0 t$ 。相空间中的轨道方程为

$$p = p_0, \quad -\infty < x < \infty. \quad (4)$$

这是一条平行于 x 轴的水平直线（图 1）。不同的初始动量对应不同高度的水平线。动量不变，位置无限延展——自由运动不改变动量。

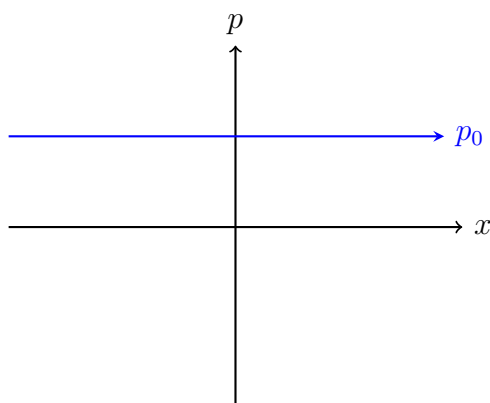


图 1: 一维自由粒子的相轨道。箭头表示状态点随时间移动的方向。

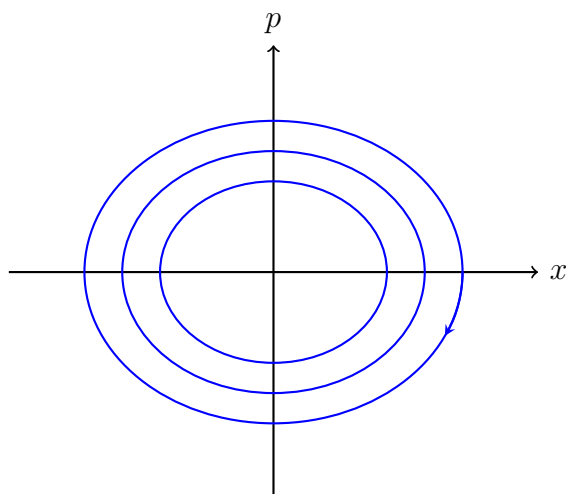


图 2: 一维谐振子的相轨道（椭圆）。箭头表示顺时针绕行方向。不同能量对应不同大小的椭圆。

例 1.2 (一维谐振子). 质量为 m , 劲度系数为 k 的谐振子, 受力 $F = -kx$ 。牛顿方程为

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0, \quad \omega = \sqrt{k/m}.$$

通解:

$$x(t) = A \cos(\omega t + \phi), \quad p(t) = m\dot{x} = -m\omega A \sin(\omega t + \phi). \quad (5)$$

能量守恒给出：

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2.$$

于是可得到相轨道方程

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/(m\omega^2)} = 1. \quad (6)$$

这是一族以原点为中心、半轴分别为 $\sqrt{2mE}$ 和 $\sqrt{2E/(m\omega^2)}$ 的椭圆（图 2）。能量越大，椭圆越大。

2 拉格朗日力学

2.1 广义坐标与拉格朗日量

实际力学系统常常受到约束，例如单摆被限制在圆弧上运动。此时独立坐标数小于 $3N$ 。确定系统位形所需的最少独立坐标数目称为自由度。设自由度为 n ，则可选取广义坐标 $q_1, q_2, \dots, q_n$ 。

定义拉格朗日量为动能与势能之差：

$$L(q, \dot{q}, t) = T - V. \quad (7)$$

系统在固定初末位形之间实际走过的路径，使作用量

$$S[q(t)] = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt \quad (8)$$

取极值，这就是最小作用量原理。注意这里的作用量 $S[q(t)]$ 是一个泛函，其变量为函数，从函数到数的映射。最小作用量原理可表示为，

$$\boxed{\delta S[q(t)] = 0.} \quad (9)$$

2.2 欧拉—拉格朗日方程

对路径作微小变分

$$q_i(t) \rightarrow q_i(t) + \delta q_i(t), \quad (10)$$

并要求端点固定，即

$$\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0. \quad (11)$$

对作用量的变分可以写到定义式的积分号里面，假设 L 不显含 t ，于是

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right] dt. \quad (12)$$

这里的变分是等时变分，即在同一时刻 t 比较两条相邻路径 $q_i(t)$ 与 $q_i(t) + \delta q_i(t)$ 。因此

$$\delta \dot{q}_i = \frac{d}{dt}(q_i + \delta q_i) - \frac{dq_i}{dt} = \frac{d}{dt}(\delta q_i). \quad (13)$$

所以

$$\delta \dot{q}_i = \frac{d}{dt}(\delta q_i). \quad (14)$$

于是作用量变分写为

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d}{dt}(\delta q_i) \right] dt. \quad (15)$$

对第二项做分部积分：

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d}{dt}(\delta q_i) dt = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \delta q_i dt. \quad (16)$$

由于固定端点条件 $\delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$ ，边界项为零。于是

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \right] \delta q_i dt. \quad (17)$$

因为各 δq_i 独立且任意，于是括号里各项都应该为 0，即

$$\boxed{\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0.} \quad (18)$$

这就是欧拉-拉格朗日方程。

例 2.1 (一维谐振子). 取 $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2$ ，代入得欧拉-拉格朗日方程 $m\ddot{x} + kx = 0$ ，与牛顿结果一致，作为习题。

3 哈密顿形式：正则方程

3.1 正则动量与哈密顿量

定义正则动量为¹

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}. \quad (19)$$

通过勒让德变换构造哈密顿量

$$H(q, p, t) = \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}, t), \quad (20)$$

勒让德变换不仅将 L 变成了哈密顿量 H ，还将原来 L 所在的 $(q, \dot{q})$ 空间变为了相空间 (q, p) 。为了看清这一点，我们对哈密顿量取全微分：

$$dH = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i \right] + \frac{\partial H}{\partial t} dt. \quad (21)$$

¹可尝试代入例 2.1 观察。

另一方面，由定义 $H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L$ 出发：

$$dH = \sum_{i=1}^n [\dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i] - dL. \quad (22)$$

而拉格朗日量的全微分为

$$dL = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i \right] + \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (23)$$

利用 $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$ ，代入可得

$$dH = \sum_{i=1}^n \left[\dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i \right] - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (24)$$

从这里就可以看出，哈密顿量的微分只跟 dq ， dp 和时间有关，与速度 $d\dot{q}$ 无关。

对于常见的定常（不含时）、无耗散系统，**哈密顿量 H 等于总能量 $T + V$** 。我们可以展示这一点，将勒让德变换按照正则动量的定义，改为

$$H = \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L \quad (25)$$

对于不含时无耗散的系统，势能中不显含时间和速度，也就是说， $\dot{q}_i$ 只包含在动能项 T 中，于是 (25) 等号右边第一项等于 $2T$ ，这是因为

$$\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = \sum_i \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = 2T \quad (26)$$

于是哈密顿量

$$H = 2T - L = 2T - (T - V) = T + V. \quad (27)$$

这就展示了哈密顿量就是能量函数。

3.2 从勒让德变换导出正则方程

将 (24) 与 dH 的一般表达式比较，得到

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{\partial L}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (28)$$

再利用动量的定义

$$\dot{p}_i = \frac{\partial L}{\partial q_i}. \quad (29)$$

于是

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i. \quad (30)$$

最终得到**哈密顿正则方程**

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i}, \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \end{aligned}} \quad (31)$$

这组一阶方程给出了相空间中的速度场。状态点沿由 H 的梯度决定的方向流动。

例 3.1 (一维谐振子的正则方程). 取哈密顿量

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad \omega = \sqrt{k/m}.$$

代入正则方程

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 x,$$

联立可得简谐振动方程

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0,$$

与牛顿力学结果一致。完整求解作为习题。

4 泊松括号

对于任意两个力学量 $f(q, p, t)$ 与 $g(q, p, t)$, 定义泊松括号

$$\{f, g\} = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right]. \quad (32)$$

设 $f(q, p, t)$ 为相空间中的任意力学量。根据多元函数链式法则, 其全时间导数为

$$\frac{df}{dt} = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \right] + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (33)$$

利用哈密顿正则方程

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (34)$$

代入上式可得

$$\frac{df}{dt} = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right] + \frac{\partial f}{\partial t}. \quad (35)$$

方括号中的表达式正是泊松括号 $\{f, H\}$ 的定义, 因此任意力学量 $f(q, p, t)$ 的时间演化可以写为紧凑形式

$$\boxed{\frac{df}{dt} = \{f, H\} + \frac{\partial f}{\partial t}}. \quad (36)$$

特别地, 若 f 不显含时间, 则演化完全由与哈密顿量的泊松括号决定:

$$\frac{df}{dt} = \{f, H\}. \quad (37)$$

例 4.1 (一维谐振子的泊松括号). 取哈密顿量

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad \omega = \sqrt{k/m}.$$

直接计算泊松括号:

$$\{x, H\} = \frac{p}{m},$$

$$\{p, H\} = -m\omega^2 x.$$

与正则方程

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 x$$

一致。此外

$$\{x, p\} = 1.$$

该结果在量子力学中对应基本对易关系 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ 。完整计算和讨论作为习题。

5 哈密顿-雅可比方程

哈密顿正则方程给定了相空间中的一阶微分方程组，它完整描述了经典系统的演化。但在某些问题中，我们更希望找到一个单一的标量函数，使得系统的全部运动信息都编码在这个函数的微分方程之中。这类似于几何光学中用一个相位函数来描述波前传播：波前是等相位面，光线沿波前法线方向前进。在经典力学中，如果存在一个标量函数 $S(q, t)$ ，其等值面在相空间中的移动恰好给出粒子的运动轨迹，那么力学问题就可以转化为求解关于 S 的偏微分方程。这正是哈密顿-雅可比方程的核心思想，也是经典力学过渡到量子力学的重要桥梁。

为构造这样的函数，回顾作用量泛函

$$S[q(t)] = \int_{t_0}^t L(q, \dot{q}, t) dt.$$

现在固定初始时刻 t_0 和初始位形 q_0 ，但让末端时刻 t 和末端位形 q 可变。沿着连接 q_0 与 q 的真实路径计算作用量，得到末端坐标和时间的函数

$$S(q, t) \equiv \int_{t_0}^t L(q, \dot{q}, t) dt. \quad (38)$$

这个函数称为哈密顿主函数，即从固定起点出发到达不同终点所需的作用量值。

利用逆勒让德变换，将 (38) 中的拉氏量变为哈密顿量，

$$S(q, t) \equiv \int_{t_0}^t \left(\sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - H \right) dt. \quad (39)$$

将考虑末端发生微小变化：位形改变 dq_i ，时间改变 dt 。沿真实路径，作用量的变化可以写为

$$dS = \sum_i p_i dq_i - H dt. \quad (40)$$

由上式立即读出

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -H. \quad (41)$$

将 p_i 的表达式代入哈密顿量中，即得

$$\boxed{H\left(q_1, \dots, q_n; \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_n}; t\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.} \quad (42)$$

这就是**哈密顿-雅可比方程**。它是一个关于 $S(q, t)$ 的一阶偏微分方程，其独立变量是 n 个广义坐标 q_i 和时间 t 。

哈密顿-雅可比方程的解 $S(q, t)$ 是一个标量函数，其梯度给出动量场， $\mathbf{p} = \nabla S$ 。等值面 $S = \text{常数}$ 在相空间中沿法线方向推进，法线方向正是粒子实际运动的轨迹方向。从这个角度看，经典力学与几何光学之间的类比十分清晰： S 相当于光波的相位，粒子轨迹相当于光线。事实上，薛定谔在建立波动力学时正是从这一类比出发，将经典力学中的哈密顿-雅可比方程视为某种波动方程的短波极限。因此，**哈密顿-雅可比方程常被视为从经典力学通往量子力学的桥梁**。

如果求得了哈密顿-雅可比方程的一个完全解 $S(q, t)$ ，则由 $p_i = \partial S / \partial q_i$ 得到动量场，再解代数方程即可获得相空间轨迹，等价于正则方程的解。对于保守系统， H 不显含时间，可以分离变量 $S(q, t) = W(q) - Et$ ，其中 E 为能量常数， $W(q)$ 满足约化方程

$$H\left(q, \frac{\partial W}{\partial q}\right) = E.$$

这正是**定态哈密顿-雅可比方程**。

例 5.1 (一维谐振子的哈密顿-雅可比方程). 取哈密顿量

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

令 $p = \partial S / \partial x$ ，代入哈密顿-雅可比方程

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

得到

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

因 H 不显含时间，令 $S(x, t) = W(x) - Et$ ，分离变量得约化方程

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{dW}{dx}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = E.$$

求解 $W(x)$ 并利用变换方程即可得到谐振子的运动方程，与正则方程结果一致，具体过程省略。

6 结语

在经典力学中，测量被认为是原则上不扰动系统的理想过程。任何力学量在被测量之前就具有确定值，坐标和动量可以同时被无限精确地测定。系统演化严格遵守哈密顿正则方程，给定初始状态，未来和过去唯一确定。这种严格决定论常被称为拉普拉斯妖式的决定论。

习题

1. 拉格朗日形式。一维谐振子的拉格朗日量

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2.$$

由欧拉-拉格朗日方程导出运动方程；求通解 $x(t)$ 和 $p(t) = m\dot{x}$ 。

2. 哈密顿形式。一维谐振子的哈密顿量

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad \omega = \sqrt{k/m}.$$

由正则方程导出运动方程；证明相轨道为椭圆

$$\frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/(m\omega^2)} = 1.$$

3. 泊松括号。对一维谐振子，计算

$$\{x, H\}, \quad \{p, H\}, \quad \{x, p\}, \quad \{x, x\}, \quad \{p, p\}.$$

并验证前两个结果与正则方程一致。