关于波函数的测量问题

潘 忠 诚

（南开大学物理系）

一、完备测量并不完备

我们知道，在量子力学中，系统的态是由波函数Ψ表征的．如知道系统的哈密顿算符，可以通过求解相应的薛定谔方程，便可得到该系统的波函数．或者根据量子力学的测量理论，通过所谓的完备力学量组的测量来确定波函数[1]．例如，对完备组 $\{\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \cdots\}$ 的测量，设其本征函数为$|\alpha\rangle$（其中 α 为本征值指标），而相应的测量几率为 $|C(\alpha)|^2$．这样，波函数 $\boldsymbol{\Psi}$ 可表示为如下形式（为简便起见，只考虑分立谱）：

$$\boldsymbol{\Psi} = \sum_{\alpha} C(\alpha)|\alpha\rangle. \tag{1}$$

由于现有的测量理论只能确定 $|C(\alpha)|^2$，因而在 (1) 式中的每个 $C(\alpha)$ 可以有一个与 α 有关的相因子 $\exp[i\varepsilon(\alpha)]$ 不能确定．因此就允许存在着许多个相因子不同的波函数，例如

$$\boldsymbol{\Psi}_j = \sum_{\alpha} |C(\alpha)| e^{i\varepsilon_j(\alpha)}|\alpha\rangle, \quad (j = 1, 2\cdots). \tag{2}$$

它们对 $\{\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \cdots\}$ 的测量结果相同，或者说这些波函数对 $\{A, B, \cdots\}$ 来说在物理上等价．

但是，当我们对另一完备组 $\{\boldsymbol{K}, \boldsymbol{L}, \cdots\}$（设它们与 $\{A, B, \cdots\}$ 不对易）进行测量时，不同的 Ψ_j 就可能给出不同的结果．这样，不同的 Ψ_j 对 $\{K, L, \cdots\}$ 来说在物理上就不等价了．

下面，我们以对角动量的测量为例来加以说明．和通常一样，取 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{L}_z$ 的公共本征态，即球函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$，此时有

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

根据测得不同本征值的几率 $|C_{lm}|^2$，可得出系统的波函数为

$$\boldsymbol{\Psi}(\theta, \varphi) = \sum_{l,m} C_{lm} Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

在系数中可以有任意的相因子：

$$C_{lm} = |C_{lm}| e^{i\varepsilon_{lm}}.$$

并且

$$\langle L_z \rangle = \hbar \sum_{l,m} m|C_{lm}|^2.$$

此时相因子 $\exp(i\varepsilon_{lm})$ 不起作用．然而，如对此态进行与 L_z 不对易的量 L_x, L_y 的测量（这时是非本征测量），其结果如下[2]：

$$\langle L_x \rangle = \frac{-\hbar}{2} \sum_{l,m} [\sqrt{(l+1+m)(l-m)}\, C^*_{l,m+1} + \sqrt{(l+1-m)(l+m)}\, C^*_{l,m-1}] C_{lm};$$

$$\langle L_y \rangle = \frac{-\hbar}{2i} \sum_{l,m} [\sqrt{(l+1+m)(l-m)}\, C^*_{l,m+1} - \sqrt{(l+1-m)(l+m)}\, C_{l,m-1}] C_{lm}.$$

不难看出，在这个结果中，相因子 $\exp(i\varepsilon_{lm})$ 的作用就显示出来了：不同相因子给出的是不同的结果．

由此看来，对于系统的态，所谓的完备测量并不能给出确定的波函数，而是给出一系列含有不同相因子的波函数；由这些波函数得到的物理结果可能是不同的．在这个意义上说，通常量子力学所谓的完备测量并不完备；要说“完备”应该能够确定这些相因子．

但是，从上述例子也可看出，相因子常常是在非本征测量中显示出来．据此，我们可以通过一组非对易量的测量来确定相因子．

下面讨论在一般情况下如何通过非对易量的测量来确定波函数的相因子．

二、相因子的测量

设两组不对易的力学量分别是$\{A, B, \cdots\}$与$\{K, L, \cdots\}$，而相应的本征态（不失一般性，只取分立谱）是$|\alpha\rangle$与$|\beta\rangle$. 所以，一般的态函数Ψ可按这两个系列展开：

$$\Psi = \sum_{\alpha} |C(\alpha)| e^{i\varepsilon(\alpha)} |\alpha\rangle = \sum_{\beta} |B(\beta)| e^{i\varepsilon(\beta)} |\beta\rangle, \quad (\alpha, \beta = 1, 2, \cdots n). \tag{3}$$

为了确定相因子$\exp[i\varepsilon(\alpha)]$，上式左边乘以$\langle\beta|$，于是得

$$|B(\beta)| e^{i\varepsilon(\beta)} = \sum_{\alpha} |C(\alpha)| e^{i\varepsilon(\alpha)} \langle\beta|\alpha\rangle. \tag{4}$$

再乘以它的共轭式，得

$$|B(\beta)|^2 = \sum_{\alpha,\alpha'} |C(\alpha)||C(\alpha')| e^{i[\varepsilon(\alpha)-\varepsilon(\alpha')]} \times \langle\alpha'|\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle = \sum_{\alpha,\alpha'} Q(\beta;\alpha,\alpha') f_\alpha f_{\alpha'}^*, \quad (\alpha, \alpha', \beta = 1, 2\cdots n). \tag{5}$$

式中

$$e^{i\varepsilon(\alpha)} = f_\alpha, \quad e^{-i\varepsilon(\alpha')} = f_{\alpha'}^*, \quad f_\alpha f_\alpha^* = 1;$$
$$Q(\beta; \alpha, \alpha') = |C(\alpha)||C(\alpha')| \langle\alpha'|\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle. \tag{6}$$

在(5)式中，$|B(\beta)|$与$|C(\alpha)|$可通过测量得到，而在(6)式中的$\langle\alpha'|\beta\rangle$与$\langle\beta|\alpha\rangle$是不同本征系列间的展开系数，所以它们都是已知的和确定的. 因此，通过(5)式原则上可确定相因子f_α等. 以上是对有限系列的情况，(5)式是有限个方程. 如果是无限的本征系列，则得到无穷多个方程，显然求解是不方便的. 不过，在这时根据收敛情况可取有限个方程近似求解.

下面讨论一种最简单的情况，即1/2自旋的情况，作为确定相因子的例子.

对于自旋$\{S^2, S_z\}$这一组力学量而言，按通常表象，其本征态$|\alpha\rangle$是

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\alpha = 1,2). \tag{7}$$

而态函数可表示为

$$\Psi = \sum_{\alpha=1}^{2} C(\alpha)|\alpha\rangle, \tag{8}$$

相应的几率是$|C(\alpha)|^2$. 再取另一组与之不对易的力学量$\{S^2, S_x\}$，其本征态$|\beta\rangle$是

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad (\beta = 1, 2). \tag{9}$$

此时态函数又可表示为

$$\Psi = \sum_{\beta=1}^{2} B(\beta)|\beta\rangle, \tag{10}$$

相应的几率是$|B(\beta)|^2$. 根据(5)式，有

$$|B(\beta)|^2 = \sum_{\alpha,\alpha'=1}^{2} Q(\beta; \alpha, \alpha') f_\alpha f_{\alpha'}^*, \quad (\beta = 1, 2). \tag{11}$$

其次，根据(6)式求出$Q(\beta; \alpha, \alpha')$:

$$\left.\begin{aligned}
&Q(1;1,1) = Q(2;1,1) = \frac{1}{2}|C(1)|^2; \\
&Q(1;1,2) = Q(1;2,1) = \frac{1}{2}|C(1)||C(2)|; \\
&Q(1;2,2) = Q(2;2,2) = \frac{1}{2}|C(2)|^2; \\
&Q(2;1,2) = Q(2;2,1) = \frac{-1}{2}|C(1)||C(2)|.
\end{aligned}\right\} \tag{12}$$

代入(5)式，得

$$\left.\begin{aligned}
|B(1)|^2 = {} & \frac{1}{2}|C(1)|^2 + \frac{1}{2}|C(1)||C(2)|(f_1 f_2^* + f_1^* f_2) + \frac{1}{2}|C(2)|^2; \\
|B(2)|^2 = {} & \frac{1}{2}|C(1)|^2 - \frac{1}{2}|C(1)||C(2)|(f_1 f_2^* + f_1^* f_2) + \frac{1}{2}|C(2)|^2.
\end{aligned}\right\} \tag{13}$$

考虑 $C(\alpha)$ 与 $B(\beta)$ 的归一化条件，便可求出：

$$
\begin{aligned}
f_1 f_2^* &= e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)} \\
&= \frac{|B(1)|^2-|B(2)|^2}{2|C(1)||C(2)|} \\
&\qquad \pm i\left\{1-\left[\frac{|B(1)|^2-|B(2)|^2}{2|C(1)||C(2)|}\right]^2\right\}^{1/2},
\end{aligned}
\tag{14}
$$

或写为如下形式：

$$
\left.
\begin{aligned}
\cos(\varepsilon_1-\varepsilon_2) &= \frac{|B(1)|^2-|B(2)|^2}{2|C(1)||C(2)|}; \\
\sin(\varepsilon_1-\varepsilon_2) &= \pm\left\{1-\left[\frac{|B(1)|^2-|B(2)|^2}{2|C(1)||C(2)|}\right]^2\right\}^{1/2}.
\end{aligned}
\right\}
\tag{15}
$$

而且应满足条件：

$$
[|B(1)|^2-|B(2)|^2]^2 \leqslant 4|C(1)|^2|C(2)|^2,
\tag{16}
$$

式中 $(\varepsilon_1-\varepsilon_2)$ 表示两本征态之间的相角差，而相因子 $f_1f_2^* = e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)}$ 表示相对相因子．事实上，相因子对实际起作用的也只是相对相因子．这是因为由 (8) 式可将态函数写成

$$
\Psi = f_2[|C(1)|f_1f_2^*|1\rangle + |C(2)|2\rangle],
$$

而 f_2 可合并到 Ψ 的归一化系数中，它是绝对相因子，对测量不产生影响．由此可推知，对于纯态，相因子不起作用．

由 (15) 式可看出，当 $|B(1)| = |B(2)|$ 时，

$$
\varepsilon_1-\varepsilon_2 = \left(m+\frac{1}{2}\right)\pi, \quad (m = 0, 1, 2\cdots).
\tag{17}
$$

如果取 S_z 的纯态，即 $C(1)$ 或 $C(2)$ 等于零，根据 (16) 式，有 $|B(1)| = |B(2)|$，再根据 (14) 式便知 $f_1f_2^*$ 不定，也就是说，在纯态时是不存在相角差问题的．

其次，由 (15) 式可看出，虽然 $|B(\beta)|$ 与 $|C(\alpha)|$ 确定，但相角差 $(\varepsilon_1-\varepsilon_2)$ 还能相对实轴取两个值．因此要想完全确定相角差，我们可以再对 S_y 进行测量，其本征态 $|\gamma\rangle$ 是

$$
\left.
\begin{aligned}
&|1\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ i/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \\
&(\gamma = 1, 2).
\end{aligned}
\right\}
\tag{18}
$$

相应的几率为 $|D(\gamma)|^2$．根据 (5) 式，可得

$$
|D(\gamma)|^2 = \sum_{\alpha,\alpha'=1}^{2} Q'(\gamma;\alpha,\alpha')f_\alpha f_{\alpha'}^*, \quad (\gamma = 1, 2).
\tag{19}
$$

根据 (6) 式计算 $Q'(\gamma;\alpha,\alpha')$ 为

$$
\left.
\begin{aligned}
&Q'(1;1,1) = Q'(2;1,1) = \frac{1}{2}|C(1)|^2; \\
&Q'(1;1,2) = Q'(2;2,1) \\
&\qquad = \frac{i}{2}|C(1)||C(2)|; \\
&Q'(1;2,1) = Q'(2;1,2) \\
&\qquad = \frac{-i}{2}|C(1)||C(2)|; \\
&Q'(1;2,2) = Q'(2;2,2) = \frac{1}{2}|C(2)|^2.
\end{aligned}
\right\}
\tag{20}
$$

考虑 $D(\gamma)$ 的归一化条件，求出

$$
\begin{aligned}
f_1f_2^* &= e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)} \\
&= \pm\left\{1-\left[\frac{|D(2)|^2-|D(1)|^2}{2|C(1)||C(2)|}\right]^2\right\}^{1/2} \\
&\qquad + i\,\frac{|D(2)|^2-|D(1)|^2}{2|C(1)||C(2)|},
\end{aligned}
\tag{21}
$$

或写为

$$
\begin{aligned}
\cos(\varepsilon_1-\varepsilon_2) &= \pm\Bigg\{1 \\
&\qquad -\left[\frac{|D(2)|^2-|D(1)|^2}{2|C(1)||C(2)|}\right]^2\Bigg\}^{1/2}; \\
\sin(\varepsilon_1-\varepsilon_2) &= \frac{|D(2)|^2-|D(1)|^2}{2|C(1)||C(2)|}.
\end{aligned}
\tag{22}
$$

同理要求

$$
[|D(2)|^2-|D(1)|^2]^2 \leqslant 4|C(1)|^2|C(2)|^2.
$$

容易看出，当 $|D(1)| = |D(2)|$ 时，相角差

$$
\varepsilon_1-\varepsilon_2 = m\pi, \quad (m = 0, 1, 2\cdots).
\tag{23}
$$

容易知道，对于确定的态 Ψ，相角差应是一定的，比较 (15) 式与 (22) 式，则有

$$
\left[\frac{|D(2)|^2-|D(1)|^2}{2|C(1)||C(2)|}\right]^2 + \left[\frac{|B(2)|^2-|B(1)|^2}{2|C(1)||C(2)|}\right]^2 = 1.
\tag{24}
$$

这样，我便确定了相对相因子 $e^{i(\varepsilon_1-\varepsilon_2)}$，因

（下转第 62 页）