一维无限深势阱中粒子的位置－动量不确定关系：基于计算的讨论

刘家福[1]　张昌芳[1]　曹则贤[2,†]

（1　装甲兵工程学院基础部　北京　100072）

（2　中国科学院物理研究所　北京　100190）

摘　要　不确定性原理是一个长期被误解和滥用了的概念.文章计算了一维无限深势阱中粒子的位置和动量的不确定度$\triangle x$和$\triangle p$，指出它们遵守不确定性关系$\triangle x\cdot\triangle p\geq\hbar/2$的一般性结论，但$\triangle x$和$\triangle p$总是同向变化的.所谓"此一量不确定度越大，彼一量不确定度越小"式的表述是没有根据的.类似地，$\triangle t$和$\triangle E$（注意，$\triangle$意义已变）的同向变化也早在实验上被观察到.

关键词　一维无限深势阱，不确定性原理，不确定性关系，不确定度

Position-momentum uncertainty relation for a particle in the one-dimensional infinite potential well: revisited after calculation

LIU Jia-Fu[1]　ZHANG Chang-Fang[1]　CAO Ze-Xian[2,†]

(1 *Department of Physics, The Academy of Armored Forces Engineering, Beijing* 100072, *China*)

(2 *Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100190, *China*)

Abstract　Position and momentum uncertainties, Δx and $\triangle p$, for a particle in the one-dimensional infinite potential well are calculated. It shows that they obey the general uncertainty relation $\triangle x\cdot\triangle p\geq\hbar/2$ though, yet they follow the same trend in changing among different states. Similar phenomenon for $\triangle t$ and $\triangle E$ (where $\triangle$ has a distinct definition) also has been confirmed in some spectral measurements.

Keywords　one-dimensional infinite potential well, the uncertainty principle, the uncertainty relation, uncertainty

1　引言

不确定性原理(the uncertainty principle，此前有汉译测不准原理)是量子力学语境中时常出现的一个概念[1]. 相应的不确定性关系，如$\triangle x\triangle p\geqslant\hbar/2$，$\triangle t\triangle E\geqslant\hbar/2$等等，时常会被用来估算粒子的能级、粒子的大小或者碰撞实验所需的特征能量，有时还会被当作支撑某些结论的基本论据.有必要指出，不确定性原理纠结着太多的错误、误解和生硬的应用[2,3].举例来说，上述的坐标－动量不确定性关系和时间－能量不确定性关系，其中的$\triangle$就具有完全不同的数学定义，而这显然不是一个原理级的关系可以容忍的.又比如，一般理解中不确定性关系是某种量子世界里才有的事物，而实际上早在1931年薛定谔就推导了经典扩散方程主导的不确定性关系[4].关于不确定性原理及其传播和应用，有太多值得探讨和批评的地方，本文作者之一（曹则贤）

2010－03－22收到

†　通讯联系人. Email：zxcao@aphy.iphy.ac.cn

另有专门介绍[3]，此处不再赘述.

1927 年，海森堡（W · Heisenberg）第一次指出粒子的位置和动量的不确定度的乘积不小于某个下界——普朗克常量的量级[5]. 但是，海森堡没有赋予不确定度具体的定义（原文中他接连用了 Unbestimmtheit（不确定性），Unsicherheit（拿不准）和 Ungenauigkeit（误差）三个不同的名词），也没有试图给出数学证明. 1929 年，罗伯特森（H. P. Robertson）将力学量的不确定度定义为算符在指定状态下的值之均方差（variance），并“严格”证明了不确定性关系[4, 6].

设表示粒子力学量 A、B 的算符为 $\hat{A}$、$\hat{B}$，存在不对易关系 $[\hat{A},\hat{B}]=\mathrm{i}\hat{C}$. 当粒子处于波函数 $\boldsymbol{\Psi}(\boldsymbol{r})$ 描述的定态时，罗伯特森定义

$$\begin{aligned}\bar{A}&=\int\bar{\Psi}(\boldsymbol{r})\hat{A}\Psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r},\\ \bar{B}&=\int\bar{\Psi}(\boldsymbol{r})\hat{B}\Psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r},\\ \bar{C}&=\int\bar{\Psi}(\boldsymbol{r})\hat{C}\Psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r},\end{aligned}\tag{1}$$

$$\begin{aligned}\overline{(\hat{A}-\bar{A})^2}&=\int\bar{\Psi}(\boldsymbol{r})(\hat{A}-\bar{A})^2\Psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r},\\ \overline{(\hat{B}-\bar{B})^2}&=\int\bar{\Psi}(\boldsymbol{r})(\hat{B}-\bar{B})^2\Psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3\boldsymbol{r},\end{aligned}\tag{2}$$

其中，积分在粒子可能出现的整个坐标空间内进行.

记 $\triangle A=\sqrt{\overline{(\hat{A}-\bar{A})^2}}$，$\triangle B=\sqrt{\overline{(\hat{B}-\bar{B})^2}}$，罗伯特森证明了

$$\triangle A\cdot\triangle B\geqslant|\bar{C}|/2\,.\tag{3}$$

在最简单的一维情况下，坐标和动量算符分别为 $\hat{x}=x$，$\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$，它们是不对易的：$[\hat{x},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar$. 因此有

$$\triangle x\cdot\triangle p\geqslant\hbar/2\tag{4}$$

这就是人们常说的位置－动量不确定性关系.

上述一段推导在相当多的量子力学书中被认为是数学上严格的证明，其实它远远不是. 比如，在得到(3)之前把含 $\{\hat{A},\hat{B}\}=\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$ 的一项给舍弃了，而此项却恰恰可能取大的值，比 $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ 项能给出的更大的值. (4)式当且仅当波函数为高斯函数时才能取等号，是特例而非一般性结论，基于等号的讨论可能会（实际上经常）导致无稽之谈. 特别地，推导中(2)式中的 $\bar{A}$ 无须定义为(1)式中的算符 $\hat{A}$ 的平均值. 这一点的证明涉及深度的数学讨论，已经超出本文的范围. 笔者指出这些事实，只是为了让读者朋友理解，不确定性原理的误用是有其深刻的根源的.

不确定性关系被当作是微粒波动性的体现，在量子物理中具有基础性的地位. 因此，量子力学的教科书中都会对其进行介绍. 本文所关切的一个问题是，不确定性关系常常是以 $\triangle x\cdot\triangle p\sim\hbar/2$ 的形式被曲解和误用. 绝大多数的教科书会据 $\triangle x\cdot\triangle p\geqslant\hbar/2$ 进一步地发挥：在更精确地知道粒子位置的同时，必然不能更精确地知道其动量；如果位置的不确定度为零，则动量的不确定度必然趋于无穷大. 有的还加上“反之亦然”的字样. 更有甚者，一些作者干脆把这里的“知道”一词换作“测量”，中文的“测不准原理”一词更强化了这种印象. 上述论断也存在于对待时间－能量的不确定性关系上，虽然所谓时间－能量不确定性关系最早出现于 1925 年发表的 Eugene Wigner 的博士论文工作中（早于海森堡 1927 年的论文）[7]，且对时间－能量的不确定性不存在上述罗伯特森式的证明.

本文中我们将指出，上述关于不确定性关系的说法是不恰当的. 通过对一维无限深势阱中粒子的位置和动量不确定度的精确计算，我们将表明，$\triangle x$ 和 $\triangle p$ 的乘积，以及各自的变化趋势，都取决于具体体系的波函数. 就一维无限深势阱这个体系而言，$\triangle x$ 和 $\triangle p$ 具有相同的变化趋势. 最后，连同关于时间和能量不确定度在一些体系中同样地改变的实验观察，再简略地做些讨论.

2　一维无限深势阱中粒子的不确定度

考虑一质量为 m 的微观粒子，处于一维无限深势阱

$$U(x)=\begin{cases}\infty, & |x|\geqslant a/2\\ 0, & |x|<a/2\end{cases}$$

中. 在势阱之中（$|x|<a/2$），定态波函数 $\Psi(x)$ 满足薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\Psi(x)=E\Psi(x)\,,$$

考虑到粒子在势阱之外出现概率为零的事实（即 $\Psi(x)=0$；$|x|\geqslant a/2$），以及连续性（即 $\Psi(\pm a/2)=0$）和归一化要求，解定态薛定谔方程得到粒子的波函数和能量分别为

$$\Psi(x)=\Psi_n(x)=\sqrt{\frac{1}{2a}}\left[e^{\mathrm{i}(\frac{n\pi}{a}x+\frac{k}{2}\pi)}+e^{-\mathrm{i}(\frac{n\pi}{a}x+\frac{k}{2}\pi)}\right]\,,\tag{5}$$

和

$$E = E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad , \tag{6}$$

其中，$n=1,2,3,\cdots$是能量量子数，k 是奇偶性与 n 相异的整数.

利用罗伯特森的定义(1)式和(2)式，很容易求出

$$\bar{x} = \int_{-a/2}^{a/2} \Psi^*(x) x \Psi(x) \mathrm{d}x = 0 \ ,$$

$$\bar{p}_x = \int_{-a/2}^{a/2} \Psi^*(x) \hat{p}_x \Psi(x) \mathrm{d}x = 0 \ ,$$

$$\overline{(\hat{x}-\bar{x})^2} = \int_{-a/2}^{a/2} \Psi^*(x)(\hat{x}-\bar{x})^2 \Psi(x) \mathrm{d}x$$

$$= \left(\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}\right) a^2 \quad ,$$

$$\overline{(\hat{p}_x-\bar{p}_x)^2} = \int_{-a/2}^{a/2} \Psi^*(x)(\hat{p}_x-\bar{p}_x)^2 \Psi(x) \mathrm{d}x$$

$$= \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{a^2} \quad ,$$

亦即

$$\triangle x = \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}}\, a \ , \ \triangle p_x = \frac{n\pi\hbar}{a} \quad , \tag{7}$$

由此，给出确切的粒子位置－动量的不确定性关系为

$$\triangle x \cdot \triangle p_x = \sqrt{\frac{n^2\pi^2}{3} - 2} \cdot \frac{\hbar}{2} \ . \tag{8}$$

3　讨论

从计算结果(7)式和(8)式，可以看出

(1)由于能量量子数 $n \geqslant 1$，此系统的位置－动量不确定度的乘积 $\triangle x \cdot \triangle p \geqslant \sqrt{\frac{\pi^2}{3} - 2} \cdot \frac{\hbar}{2} > \hbar/2$，遵守(4)式所示的位置－动量不确定性关系的一般性结论.

(2)粒子的位置不确定度、动量不确定度以及位置－动量不确定度的乘积与粒子所处的状态有关. 对于给定的状态，它们都有确定的值.

(3)只有当粒子所处的状态改变时，其位置、动量的不确定度才发生变化，而且它们的变化总是同向的：当粒子状态向较高能级方向改变时，它们同时增大. 这一点实际上可以从波函数平方的图像上很直观地看出. 显然，在这里所谓的“如果更精确地知道(或者测量)了一个量(不确定度小)，必然会导致另一个量更加不确定”的说法是不恰当的.

(4)当粒子处于基态时($n=1$)，位置和动量的不确定度最小

$$(\triangle x)_{\min} = \sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2\pi^2}}\, a \quad , \quad (\triangle p_x)_{\min} = \frac{\pi\hbar}{a} \tag{9}$$

而当 $n \to \infty$ 时，

$$(\triangle x)_{n\to\infty} = (\triangle x)_{\max} = \frac{a}{2\sqrt{3}} \ , \quad (\triangle p_x)_{n\to\infty} \to \infty \tag{10}$$

由此看来，对于给定的体系，并不一定存在粒子位置或者动量的不确定度无限趋于零的可能；而且，有趣的是，这里当动量不确定度无限增大时，位置的不确定度不是要趋于零，而是趋近于一个最大值. 这个位置不确定度的极限实际上就是平均分布下的均方差.

行文至此，有必要提及类似的时间－能量不确定性关系对物理学和一些物理学家的影响. 注意到时间在量子力学中不能被当作算符，因此时间－能量不确定性关系不存在罗伯特森式的证明；相应地，所谓的$\triangle t$ 也不是均方差意义上的不确定度. 人们曾为时间－能量不确定性关系中的$\triangle t$ 和$\triangle E$ 附会上各种不同的解释，其中之一是$\triangle E$ 是跃迁能量而$\triangle t$ 是能级寿命或者谱线的频宽[4]. 一个广为流传的诠释是能量宽度(或者差别)越大，相应的寿命应该越短. 2003 年夏天的某一天，日本关西大学的小山泰(Yasushi Koyama)教授敲开了笔者之一曹则贤的办公室，讲述了他研究中的遭遇. 在研究一类复杂分子的发光时，他们注意到谱线能量越高，而谱线寿命越长的现象. 当小山泰教授在一次会议上报告他们的测量结果时，他遭到了以“能量宽度(或者差别)越大，相应的寿命应该越短”为基本出发点的一通乱批，被指责缺乏起码的常识. 这种以对非严格知识的似是而非的诠释之漫无节制的推广为基本出发点的态度，甚至强大到怀疑严肃的测量结果. 小山泰教授后来将结果发表在 Chemical Physics Letters 上[8]，但是审慎地不触及所谓的时间－能量不确定性问题. 关于不确定性原理的“此一量不确定度越大，彼一量不确定度越小”式的描述之威力，由此可见一斑.

所谓的不确定性关系，实际上只是指明了这样的一个事实，即由非对易关系，或者仅仅是在方程中的耦合关系(考虑经典扩散方程导出的不确定性关系)，决定了一对共轭变量的不确定度(均方差)的乘积具有某个下限. 但是，必须强调，不确定度由系统所处的具体状态来确定，一对共轭变量的不确定度之间并不必然存在相反趋势的变化. 这从不确定性关系为一不等式表达的形式上就可以明显看出. 奇怪的是文献中广泛流传着“此一量不确定度越大，彼一量不确定度越小”式的表述，并且一定程度上占据了部分物理学

家的思想,被当作一些物理问题讨论的基本出发点,因而也就造成了相当多的混乱认识.此一现象发生的深层原因,留待科学史家详细探讨.

参考文献

[1] Hilgevoord J, Uffink J. Uncertainty Principle, in The Stanford Encyclopedia of Philosophy by Edward N *et al*. (ed.), 2008. Online version is available under URL=http://plato.stanford.edu/archives/fall2008/entries/qt-uncertainty/

[2] 关洪.大学物理,1983, 9:6;1983, 10:1[Guan H. College Physics,1983,9:6;1983,10:1 (in Chinese)]

[3] 曹则贤. Uncertainty of the Uncertainty principle,PPT

[4] Jammer M. The Philosophy of Quantum Mechanics. John Wiley & Sons, 1974

[5] Heisenberg W. Z. Phys., 1927, 43: 172

[6] Robertson H P. Phys. Rev., 1929, 34: 163

[7] Polanyi M, Wigner Z E. f. Physik, 1925, 33: 429

[8] Fujii R, Fujino T, Inaba T *et al*. Chemical Physics Letters, 2004,V 384 (1-3): 9