从体系计算中讨论海森伯不确定关系

游佩林[1,†]　　黄湘友[2]

（1　广东海洋大学量子电子学研究所　湛江　524025）

（2　北京大学物理学院　北京　100871）

摘　要　文章作者对量子力学与经典力学中的几个典型体系进行了计算，求出了粒子位置与动量的不确定量$\overline{x^2}-\overline{x}^2$和$\overline{p^2}-\overline{p}^2$. 计算结果表明，不同状态下的不确定量之积是不一样的. 谐振子和无限深势阱的实例计算还说明，与量子力学不确定关系相类似的关系在经典力学中也存在. 它使人们对海森伯不确定关系有了新的认识，并对量子力学的波函数有了更深刻的了解. 文章最后讨论了两个相关的实验现象.

关键词　不确定量，谐振子，无限深势阱，波函数，粒子系综

A discussion on Heisenberg's uncertainty relation based on the calculation of some typical systems

YOU　Pei-Lin[1,†]　　HUANG　Xiang-You[2]

（1　*Institute of Quantum Electronics*, *Guangdong Ocean University*, *Zhanjiang* 524025, *China*）

（2　*College of Physics*, *Peking University*, *Beijing* 100871, *China*）

Abstract　We calculate the uncertain quantities of particle position and momentum, $\overline{x^2}-\overline{x}^2$ and $\overline{p^2}-\overline{p}^2$, using a few typical systems from classical and quantum mechanics. The results show that the product of the uncertain quantities varies with different states. Taking the harmonic oscillator and infinitely deep potential well as examples, we show that a relation analogous to the uncertainty relation of quantum mechanics also exists in classical mechanics. This gives a new understanding of the Heisenberg uncertainty relation, and provides additional insight into the wave function of quantum mechanics. Finally, two related experimental phenomena are discussed.

Keywords　uncertain quantities, harmonic oscillator, infinitely deep potential well, wave function, particle ensemble

1　引言

在量子力学的发展中，尤其在唤起人们对量子力学与经典力学巨大差别的关注中，海森伯建立的不确定关系（ $\Delta x\ \Delta p\geqslant\hbar/2$）起了巨大的作用. 它不仅在物理学界，而且在哲学界和其他领域都引起极大的兴趣与关注. 著名物理学家朗道在其名著《量子力学》（非相对论理论）一书中，第一节就是不确定原理，可见对它的重视. 数学上不确定关系的来源是由于量子力学用一个波函数表示粒子的状态，而坐标和动量这样的不可对易力学量不存在共同的本征函数，因而这两个力学量不可能同时有完全确定的本征值. 海森伯还指出，测量会造成不可控制的干扰，测量粒子位置时引入的不可控制的相互作用，要影响粒子的动量. 同样，测量粒子动量时引入的不可控制的相互作用会影响粒子的位置. 近年来在*Nature*上报道的实验和量子力学的理论研究表明，海森伯对不确定关系的这一说法不对[1—3].

不确定关系的确切意义还和对量子力学完备性

2012－08－03 收到

†　通讯联系人. Email：youpeli@163.com

的理解密切相关. 例如,L. E. 巴仑廷和一些物理学家就认为:“一个波函数不能描述单个粒子而只能描述粒子系综,不确定关系是粒子系综中所述物理量的统计弥散关系.”[2—4] 因此,不确定关系的确切意义和量子力学的理论解释一样,过去几十年来也争论不休. 爱因斯坦始终坚持认为“量子理论是不完备的”,玻尔和爱因斯坦的争论在他俩生前和身后的几十年里有大量文献论及. 比如,海森伯在他逝世前一年发表的《量子论历史中概念的发展》一文中写道:“1954 年,爱因斯坦死前几个月,他同我讨论了这个问题. 那是我同爱因斯坦度过的一个愉快的下午,但一旦谈到量子力学的诠释时,仍然是他不能说服我,我也不能说服他. 他总是说:是的,我承认,凡是能用量子力学算出结果的实验,是如你所说的那样出现的,然而这样的方案不可能是自然的最终描述”[5].

另一方面,正是爱因斯坦的观点,促成了海森伯建立不确定关系. 以下摘自海森伯的同一篇文章. 1927 年早春,海森伯遇到如下问题:“在初始位置,电子可用波包来表示. 波包要向前运动,于是我们获得了有些像穿过云室的电子径迹那样的东西,但困难的是,波包要越变越大.”[5] 怎么理解在威耳逊云室里看到的电子径迹呢? 海森伯苦苦思索,突然他想起前一年在柏林和爱因斯坦就可观察量的意义进行的谈话. 当时他说“一个完善的理论必须以直接可观察量作为依据”; 而爱因斯坦则指出:“原则上试图单靠可观察量去建立理论,那是完全错误的. 实际上刚好相反,正是理论决定什么是我们可以观测到的.”[5] 想到爱因斯坦的这句话,海森伯茅塞顿开. 他写道:“因此我简单地提这个问题:如果从‘只有能用量子力学的数学程式表示的那些情况,才能在自然界中找到’这样的基本原则出发,那么,当我们想知道一个波包的速度同时又想知道它的位置时,所能获得的最佳准确度是怎样的呢? **这是一个简单的数学问题,其结果便是测不准原理**,它看来与实验情况相符.”[5] 爱因斯坦的观点对于海森伯建立不确定关系的重要作用往往被人们忽视或强调得不够,显然,这与量子力学发展的历史状况不符.

虽然,目前要得到对不确定关系的统一认识仍有困难,但我们可以不断加深对它的理解. 最近,曹则贤先生在一篇讨论海森伯不确定关系的文中提出了一个很妙的问题:“奇怪的是,为什么几十年来就没有人计算一下 $\Delta x\ \Delta p$ 在具体体系中的数值呢? 它本来就该依赖于具体的波函数呀?”[6] 现在我们就来具体算一下它在不同体系中的数值.

本文将从量子力学和经典力学的几个例子中分析不确定量的真实物理含义. 我们将看到不同状态下同一体系的不确定量之积是不一样的. 对谐振子和无限深势阱的对比计算说明,与量子力学不确定关系相类似的关系在经典力学中也存在. 平面转子的计算还表明,同一体系不确定量的数值在不同坐标系中并不相同.

2 经典力学中的不确定性

不确定关系的真正物理阐述是量子力学中一个相当深奥的问题. 自从 1927 年海森伯将它引入物理学以来,这个问题之所以众说纷纭,不仅因为它与量子力学的解释密切有关,而且还与测量理论、观测者、统计性来源及互补原理纠缠在一起. 笔者认为,先在经典力学范围内研究不确定性较为有利. 因为经典力学不存在解释问题,便于我们摆脱上述问题的纠缠. 换句话说,要想深入了解海森伯不确定关系的物理实质,从经典力学与量子力学的类比入手不失为一条方便的途径. 文献[6]以“经典不确定性”为题对此作了精辟的论述.

经典力学中一个粒子的运动状态由牛顿方程和初始条件决定. 如果初始条件完全给定,我们将得到完全描述. 如果初始条件以概率分布给出,我们将得到统计描述. 在后一种情况下,描述对象成为一个经典统计系综,或者说统计地描述一个粒子. 粒子在势场 $U(x)$ 中运动时,令 $x(E,t)$ 为牛顿方程满足初始条件 $x(E,0)=x_0$ 的特解(式中 E 为能量). 设初始条件有一概率分布 $\rho(E,t')\geq 0, 0\leq t'\leq T$,且满足归一化条件:$\int_0^\infty \mathrm{d}E\int_0^T \rho(E,t')\,\mathrm{d}t'=1$, 则任一力学量 f 的平均值为

$$\overline{f}=\int_0^\infty \mathrm{d}E\int_0^T \rho(E,t')f(x,p)\,\mathrm{d}t' \quad . \tag{1}$$

令 $A=x-\overline{x}, B=p-\overline{p}$, 设 ξ 为实参数,因 $(A\xi+B)^2$ 的平均值恒为正,故 $\overline{(A\xi+B)^2}=\int_0^\infty \mathrm{d}E\int_0^T \rho(E,t')(A\xi+B)^2\,\mathrm{d}t'\geq 0$, 于是 $\overline{A^2}\xi^2+2\,\overline{AB}\xi+\overline{B^2}\geq 0$. 上式成立的条件为

$$\overline{A}^2\cdot\overline{B}^2\geq\overline{AB}^2 \quad \text{或}$$

$$\overline{(x-\overline{x})^2}\cdot\overline{(p-\overline{p})^2}\geq\overline{[(x-\overline{x})(p-\overline{p})]}^2 \quad . \tag{2}$$

这可称为经典力学中的不确定关系.

2.1 经典力学中的不确定性例 1

设有一经典的点粒子位于某处. 测量它的位置

时，依仪器的精密程度和测量人的经验不同，会有一误差分布（如正态分布）. 令 $\rho(x)$表示测得粒子位于 x 处的频度，则 $\overline{x}=\int_{-\infty}^{\infty}x\rho(x)\mathrm{d}x$ 为粒子位置的平均值. $\overline{x^2}-\overline{x}^2=\int_{-\infty}^{\infty}(x-\overline{x})^2\rho(x)\mathrm{d}x$ 表示测量的不确定度. 这一数值越小，表示测量的准确度越高. 这一理解以经典点粒子为前提.

2.2 经典力学中的不确定性例 2

设有一经典粒子在势场 $U(x)$中运动，其运动方程已知，但初始条件以几率分布形式给出. 这时位置的不确定量$\overline{x^2}-\overline{x}^2$ 与动量的不确定量$\overline{p^2}-\overline{p}^2$ 之间有类似量子力学中的不确定关系，可称作不确定关系的经典类比. 对于这个点粒子，$\overline{x^2}-\overline{x}^2$ 与$\overline{p^2}-\overline{p}^2$ 也可称作预言经典粒子位置和动量的准确度.

3 量子力学中的粒子

量子力学中的粒子是物质波，不能看作点粒子. 也许有人会认为，当测量位置时，量子力学中的粒子也是点粒子，只是其出现位置不确定而已，有时出现在这点，有时以一定几率出现在另一点. 然而粒子的相关性实验表明，粒子能感知远处另一粒子的存在. 射向质谱仪的粒子，能感知远处磁场的存在；射向干涉仪的粒子，能感知远处障碍物的存在；Aspect 实验表明非定域关联的存在. 因此，量子力学中的粒子不能看作是传统观念上的点粒子[7—9].

3.1 例 1：一维无限深势阱

处于$[-a,a]$间的一维无限深势阱中的粒子的定态波函数为 $\Psi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a)$，能量本征值为 $E_n=n^2\pi^2\hbar^2/8ma^2$. 显然，位置和动量的平均值为零：$\overline{x}=0$，$\overline{p}=0$. 由量子力学中的平均值公式，粒子位置和动量平方的平均值为：$\overline{x^2}=a^2/3-2a^2/n^2\pi^2\hbar^2$，$\overline{p^2}=2mE_n$. 因此，一维无限深势阱中的粒子的不确定关系为

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2=\frac{2}{3}ma^2E_n(1-6/n^2\pi^2)$$
$$=(\frac{n^2\pi^2}{3}-2)\frac{\hbar^2}{4}\quad.\qquad(3)$$

它与刘家福等三位计算的结果相同[6]. 它表明，不同状态下一维无限深势阱中的粒子的不确定量之积是不一样的，例如在 $n=1$ 时，$\Delta x\cdot\Delta p=1.14\hbar/2$；在 $n=6$ 时，$\Delta x\cdot\Delta p=10.8\hbar/2$；而当 $n\geqslant 8$ 时，$(\Delta x)^2(\Delta p)^2=0.99\,\frac{2}{3}ma^2E_n\approx\frac{2}{3}ma^2E_n$.

下面我们在经典力学范围内对比. 设有经典粒子处在$[-a,a]$间的无限深势阱中，初始时刻 t'为粒子到达 $x_1=-a$ 的时刻. 考虑这体系的一个系综，系综中每一成员都有相同的能量 E_n，但初始时刻 t'则完全是随机的. 粒子在势阱中的势能为零，粒子的速度 $V=\sqrt{\frac{2E}{m}}$，粒子的动量 $p=mV$. 粒子的运动方程为

$$x(E,t+t')=\begin{cases}V(t+t')-a & 0\leq t+t'\leq T/2\ ,\\ -V(t+t')+3a & T/2\leq t+t'\leq T\ .\end{cases}$$

初始时刻 t'的概率分布为 $\rho(E,t')=\frac{1}{T}\delta(E-E_n)$，$0\leq t'\leq T$，式中 E 为能量，T 为运动周期，$\rho(E,t')$满足归一化条件. 由(1)式可算得位置和动量的平均值为：$\overline{x}=0$，$\overline{x^2}=\mathrm{a}^2/3$；$\overline{p}=0$，$\overline{p^2}=2mE_n$. 经典粒子系综的不确定量之积为

$$\overline{(x-\overline{x})^2}\cdot\overline{(p-\overline{p})^2}=\frac{2}{3}ma^2E_n\quad.\qquad(4)$$

将(4) 式与(3) 式对比可知，当 $n\geqslant 8$ 时，量子力学的不确定量之积与经典力学系综的不确定量之积的形式基本相同[9].

3.2 例 2：线性谐振子

量子力学中线性谐振子的定态波函数为

$$\Psi_n(x)=N_n\exp[-\alpha^2x^2/2]H_n(\alpha x)\quad,$$

式中 $H_n(\alpha x)$为厄米函数，N_n 为归一化常数，$\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}$. 能量本征值为 $E_n=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})$，$n=0,1,2,\cdots$. 由量子力学平均值公式可得：$\overline{x}=0$，$\overline{x^2}=E_n/m\omega^2$；$\overline{p}=0$，$\overline{p^2}=mE_n$. 不确定量之积为

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2=E_n{}^2/\omega^2\quad.\qquad(5)$$

计算结果表明，不同状态下量子力学中线性谐振子的不确定量之积是不一样的. 下面我们在经典力学范围内进行对比. 考虑经典线性谐振子的一个系综，系综中每一成员都有相同的能量 E_n，但初位相 θ'则完全是随机的. 经典线性谐振子的运动方程为 $x(E,t+t')=-\frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}\cos(\omega t+\theta')$，$\theta'=\omega t'$为初位相. 动量为 $p(E,\theta',t)=m\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}=\sqrt{2mE}\sin(\omega t+\theta')$. 对这一系综，初始条件的概率分布为：$\rho(E,\theta')=\frac{1}{2\pi}\delta(E-E_n)$，它满足归一化条件. 由(1)式可算得 $\overline{x}=0$，$\overline{p}=0$；$\overline{x^2}=E_n/m\omega^2$，$\overline{p^2}=mE_n$. 经典线性谐振子不确定量之积为

$$\overline{(x-\overline{x})^2}\cdot\overline{(p-\overline{p})^2}=E_n{}^2/\omega^2\quad.\qquad(6)$$

将(6)式与(5)式对比可知,量子力学中线性谐振子的不确定量之积与经典力学中线性谐振子系综的不确定量之积形式相同[9].

这两个计算实例生动说明,经典力学与量子力学之间并不像人们想象的那样,存在不可逾越的鸿沟.狄拉克在其名著《量子力学原理》第四章"量子条件"中写道:"经典类比法将构成本章的主题.经典类比法在发展量子力学中的意义是由下述事实决定的,即经典力学在某些情况下提供量子力学系统的正确描述.""因此,我们应当期望,在经典力学中可以找到一些重要概念,它们是与量子力学中的重要概念相当的;并且,根据对经典力学与量子力学之间的类比的普遍性质的了解,我们可能希望得到量子力学中的一些规则与定理,它们表现为经典力学中一些周知的结果的简单推广"[10].

4 不同坐标系中不确定量的计算

4.1 不同坐标系中不确定量的计算例1

平面转子的定态波函数为 $\Psi_m(\theta)=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\mathrm{e}^{im\theta}$,求位置和动量的不确定关系.本题是一种平面转子模型[11],质量为 m 的粒子在 x-y 平面上沿半径 R 圆环运动,转轴为 Z 轴.哈密顿算符为 $\hat{H}=\frac{1}{2mR^2}\hat{L}_z^2$,$\theta$ 为旋转角.选取笛卡儿坐标,设 $r^2=x^2+y^2$,$r_0^2=\overline{r^2}$,由圆周对称性考虑,$\bar{x}=\bar{x}^2=0$,$\bar{p}_x=\bar{p}_x^2=0$,$r_0^2=2\overline{x^2}$.因此,$(\Delta x)^2=\overline{x^2}-\bar{x}^2=r_0^2/2$,$(\Delta p_x)^2=\overline{p_x^2}-\bar{p}_x^2=m^2\hbar^2/2r_0^2$.

$$(\Delta x)^2(\Delta p_x)^2=\hbar^2m^2/4\ . \tag{7}$$

4.2 不同坐标系中不确定量的计算例2

平面转子的定态波函数为 $\Psi_m(\theta)=\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\mathrm{e}^{im\theta}$,求角位置和角动量的不确定关系.选取圆柱坐标,哈密顿算符为 $\hat{H}=\frac{1}{2I}\hat{L}_z^2$,$I=mR^2$ 为转动惯量.$\overline{L_z}=m\hbar$,$\overline{L_z}^2=\overline{L_z^2}=m^2\hbar^2$,$\overline{L_z^2}-\overline{L_z}^2=0$;$0\leq\theta\leq2\pi$,$\overline{\theta^2}-\bar{\theta}^2=4\pi^2/3-\pi^2=\pi^2/3$,

$$(\Delta\theta)^2(\Delta L_z)^2=0\ . \tag{8}$$

上式表明,在这个体系中,两个不可对易力学量 L_z 和 θ 并不满足海森伯不确定关系,这一结果有人称为Judge-Lewis困难,它说明同一体系的不确定量之积还与坐标系的选取有关,这是出人意料的.造成这一困难的根源,有人认为是由于限制平面转子的定态波函数为周期函数所致[12].在几种避免该困难的方案中,有一种就是把圆柱坐标系中的角量 θ 换成 $\cos\theta$ 和 $\sin\theta$,其实质就是回到笛卡儿坐标系.在量子力学中,一般总是将量子化在笛卡儿坐标系下完成,再经过坐标变换到合适的曲线坐标系[10].由此可知,曲线坐标系与笛卡儿坐标系.在量子力学中的地位并不相同,也不像它在经典力学中那样具有独立性.从上面的例子可以看到,笛卡儿坐标系在量子力学中具有特别重要的地位[13].当然,出现两个不确定量(uncertainty)乘积为零的根源究竟是什么还值得深入研究,希望能引起大家的关注和讨论.但奇怪的是,过去量子力学教科书很少注意这个问题.

5 讨论

在上世纪40年代,苏联物理学家布洛欣采夫曾提出波函数的系综解释[14].以后很多物理学家也认为,由于一个波函数包含的信息量不够,它不能描述单个粒子,而只能描述粒子系综,这个系综中每一粒子都有相同的能量[2—4].对不确定关系的系综解释除了有概念性实验说明外[2],还有实际实验支持.下面两个实验对海森伯不确定关系提供了新的认识.

(1)最新的纳米技术已制出单个分子的晶体管[15].晶体管的基本特点是可控制在截止态和导通态.在截止态时,电子的动量很小,接近于零.在导通态时,电子的动量可以很大.如果海森伯不确定关系普遍适用,则由于限制在单分子晶体管中电子的 Δx 很小,电子的 Δp 很大,这就使得控制该晶体管处在截止状态成为不可能.同样,当该晶体管处在导通态时,由于电子 Δp 很大,该管会随机地出现截止现象.单分子晶体管能正常工作,说明海森伯不确定关系对该管不适用.

(2)1988年,有人用俄歇电子做了实验,在铜板表面镀一两个原子层厚度的金.在垂直表面方向测量来自金原子的俄歇电子的动量 p,由于能量不同,来自金和铜的俄歇电子可以区分,记金原子层厚度为 Δx,结果表明,$\Delta x\ \Delta p<\hbar/2$[16].

(3)量子力学中不确定关系的解释大体上可分为两个流派.正统解释认为,波函数可描述单个粒子,不确定关系来源于测量一个量时对与之共轭的另一个量产生干扰.统计系综解释认为,波函数只能描述粒子系综,不确定关系是粒子系综中所述物理量的统计弥散关系.量子力学的基本成就来源于波

函数及薛定谔方程，统计性来源于平均值公式. 平均值公式本来就是统计平均之意. 问题是造成统计性的根源是什么？这又有两种解释：一种解释认为，统计性是由于测量造成的干扰；另一种解释认为，统计性是由于一个波函数包含的信息量不够.

总之，在量子力学的基础研究中，究竟波函数只能描述粒子系综还是可以描述单个粒子，海森伯不确定关系只适用于粒子系综还是适用于单个粒子的普遍原理，现在看来，这两个问题无论从理论上和实验上都是有条件得到解决的. 不确定关系是量子力学中的一个重要关系式，弄清它的物理实质有重要意义.

参考文献

[1] Dürr S. Nonn T，Rempe G. Nature，1998，395：33

[2] Ballentine L E. Rev. Mod. Phys.，1970，42：358

[3] Ballentine L E *et al*. Phys. Rev. A，1994，50：2854

[4] Ballentine L E. Quantum Mechanics a modern development. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.，1998. 280—287，373

[5] 海森伯 W. 著，范岱年译. 物理学和哲学. 北京：商务印书馆，1999

[6] 曹则贤. 物理，2012，41(2)：119；物理，2012，41(3)：188 [Cao Z X. Wuli(Physics)，2012，41(2)：119；41(3)：180(in Chinese)]

[7] Huang X Y. Phys. Lett. A，1986，115：310；Phys. Lett. A，1987，121：54

[8] Huang X Y. Chin. Phys. Lett.，1987，4：153

[9] 黄湘友. 中国科学(A辑)，1991，(1)：34[Huang X Y. Science China A，1991，(1)：34(in Chinese)]黄湘友. 物理学报，1996，45：353[Huang X Y. Acta Physics Science，1996，45：353 (in Chinese)]

[10] 狄拉克著，陈咸亨译. 量子力学原理. 北京：科学出版社，1979

[11] 钱伯初. 量子力学. 北京：高等教育出版社，2006. 64

[12] Judge D，Lewis J T. Phys. Lett.，1963，5：190

[13] 刘全慧. 物理学报，1993，42：522[Liu Q H. Acta Physics Science，1993，42：522 (in Chinese)]

[14] 布洛欣采夫著，吴伯泽译. 量子力学原理(上册). 北京：高等教育出版社，1959. 36—72.

[15] Science，2001年12月20日报道

[16] Gotsch K *et al*. Problems in Quantum Physics. Singapore：World Scientific，1988. 510