国防科技大学学报
JOURNAL OF NATIONAL UNIVERSITY OF DEFENSE TECHNOLOGY
第18卷第2期 1996年6月 Vol. 18 No. 2

自由粒子的稳定波包表示*

谭暑生

(国防科技大学应用物理系 长沙 410073)

摘 要 本文接受爱因斯坦关于发展完备的量子理论的基本观点和德布罗意的双重解原理，提出波粒假设和波粒物理量假设，由此求得包含表示可移动的小奇异区的广义 δ 函数因式的波粒函数解。这个波粒函数稳定，永不自发扩散。它是自由粒子的真正表示。普通波函数描述统计系综。普通波函数和波粒函数相结合，给出单个自由粒子的完备的决定论描述。

关键词 波粒，波粒函数，波粒假设

分类号 O413

Description for Free Particle by Steady Wave Packet

Tan Shusheng

(Department of Applied Physics, Changsha, 410073)

Abstract Based upon the basic viewpoints of A. Einstein on quantum mechanics and de Broglie's double wave functions principle, the wave-particle postulate and the wave-particle physical quantities postulate are presented. The wave-particle function as a free wave packet is obtained in which is involved a generalized δ-function factor as representations for the center of the extensive wave phenomena. The free wave packet is steady, not spreading with time, and is the real representation for the free particle. The wave function ψ describes the statistical ensemble. Combining the wave function with the wave-particle function gives the complete description for the single free particle.

Key words wave-particle; wave-particle function; wave-particle postulate

1 引言

现有量子力学提供了一整套计算规则，利用它可以计算出微观体系的各种物理量的取值和取值的

* 1995年9月9日收稿

几率，其结果均与实验的观察相一致。但是，量子力学整个计算过程所涉及的对象，都没有对应的物理图象。尽管在所有的叙述和论证过程中，始终保留粒子的观念，量子力学没有提供在空间和时间上确定粒子位置的方法，它完全丧失了对单个微观体系的运动过程的因果描述和物理过程的想象力。

按量子力学，自由粒子与平面波相联系，它的动量完全确定，而位置则完全不确定，在空间任何一处找到它的几率都相同。单个自由粒子如何运动？它究竟是一个点粒子，还是一个波包，或其它什么东西？谁也说不清。现有量子力学不赋予自由粒子以运动轨道和物理模型。按量子力学规则，求自由粒子力学量的期待值几乎都会得到零或无限大的结果。这些都是令人难以置信的。

R. P. Feynman 认为[1]，世界上没有人懂量子力学。M. Gell-Mann 在 1980 年写道："量子力学是一门神秘的令人糊涂的学科，人们知道如何使用它，但谁也无法理解它。在描述物理实在方面它工作得很出色，但是它十分不直观。量子力学不是一个理论，而只是（将来）任何正确的理论都必须适合于它的一个框架。"

关于量子力学的意义、解释、地位和未来，爱因斯坦学派和玻尔的哥本哈根学派的观点截然相反，他们之间发生过一场旷日持久、空前激烈的大争论。爱因斯坦和玻尔俩人都是本世纪最最杰出的人物，问题是：他们之中究竟谁是正确的？

哥本哈根学派的重要人物、活到了八十年代的著名的狄拉克后来改变了自己的观点。他在 1975 年写道："我认为也许结果会证明爱因斯坦是正确的，因为不应当认为量子力学的现有形式是最后的形式。关于现有的量子力学，存在一些很大的困难……，不应当认为它能永远地存在下去。我认为很可能在将来的某个时候，我们会得到一个改进了的量子力学，使其回到决定论，从而证明爱因斯坦的观点是正确的。但是，这种重新返回决定论，只有以放弃某些基本思想为代价才能办到。"[2]

本文和随后交付的几篇论文将考察一下，在爱因斯坦的方向上，量子物理学是否可以期望新的进展。本文从简单的也是关键性的自由粒子问题开始我们的探索和讨论。

2 爱因斯坦关于量子力学的主要观点

哥本哈根学派认为，即使对于单个体系，量子力学的几率描述也是完备的，波函数 ψ 概括描述了关于单个量子体系运动状态的全部信息和知识。对于原子结构，不可能有描绘式的说明，因为所有这类说明都必须以经典概念为基础，而经典概念在原子中已不再成立。人类无法用基于日常经验的语言和概念清楚地描述单个微观体系的性状，例如，谈论自由粒子的物理模型和运动轨道，是不可能和无意义的。

果真如此吗？以爱因斯坦为代表的许多物理学家不同意哥本哈根学派的观点。爱因斯坦的观点可以简述如下：ψ 函数所描述的是量子统计系综，它关于单个体系的描述是对实在状态的一种不完备的描述；不相信电子具有自由意志，对客观实在的理论描述原则上应当是决定论的，而量子力学的非决定论是主观的非决定论，是我们自己无能为力去弄清单个原子的物理过程并预见它们的行为；因此，用几率语言表达的量子力学最多也只能是物理学发展进程中的一个暂时的权宜之计，它终究要被一种关于实在的完备描述的决定论理论所代替。

爱因斯坦希望从非线性统一场论出发，通过场的奇异区的运动和场的某种无规涨落，为完备的量子理论提供一个解决办法。爱因斯坦用其毕生的精力，仍然未获成功。1972 年以来诸多违反贝尔不等式的实验结果表明，爱因斯坦的定域实在论思想是错误的。尽管如此，许多物理学家仍然相信，上段所概述的爱因斯坦关于发展完备描述的决定论性量子理论的基本观点是正确的，它代表着科学的良知和人类的自信，最终必将取得成功。

3 德布罗意的双重解理论

德布罗意是波动力学的首创者，他不想放弃在时空框架中取得物理世界明晰表示的愿望。他认为，粒子永远缔合着一个波存在，微观客体既是粒子又是波，是波和粒子的缔合和共存。德布罗意把粒子表

示成一种嵌入广延波动现象中的奇异点（或很小的奇异区）来获得波与粒子的结合。

在上述观念的基础上，德布罗意于1927年提出双重解理论。双重解原理可叙述如下[3]：

对于线性波动力学方程的每一个满足一定边界条件的连续解

$$\psi(r,t) = a(r,t)e^{i\phi(r,t)/\hbar} \tag{1}$$

必然有一个服从未知的非线性方程式的奇异解

$$u(r,t) = f(r,t)e^{i\phi'(r,t)/\hbar} \tag{2}$$

存在，它满足同样的边界条件，同时其振幅 $f(r,t)$ 包含一个一般是可以移动的小奇异区，并且至少在小奇异区附近，$\phi'(r,t)=\phi(r,t)$。

德布罗意认为，用两个波函数（双波函数）来描述量子体系的状态，其中普通波函数 ψ 的绝对值平方表示粒子出现的几率密度，另一个波函数 u 的奇异区是微观粒子的真正表示。

双重解原理得到爱因斯坦的支持。爱因斯坦在给德布罗意的信中[4]称赞“这将真正是一个新理论。”然而，双重解理论在数学上遇到了很大的困难。按德布罗意的说法，“双重解理论的数学论证即使是可能的，也超出了我的能力”。[5]在我看来，更主要的是由于未能突破某些传统思想和观念的束缚，该理论几十年来未能取得突破性的进展。奇异解 u 所服从的非线性方程没有找到。试图用波的迭加构成 u 波，又无法克服波包自发扩散的困难。双重解理论实际上停留在原理假设和一般观念的阶段上。

尽管如此，正如沈惠川所言[6]：“德布罗意的非线性波动力学和哥本哈根学派纯几率诠释的量子力学之间的对抗，只有在它们随后的发展中以及与实验进行比较后，才能判定谁是最后的赢家，而这最后的输赢，将历史地确定德布罗意和玻尔在20世纪物理学中的席位次序。”

4 基本假设

德布罗意双重解原理是一个正确的观念，引它为双波函数假设如下：

单个体系的状态由一对波函数 $\psi(r,t)$ 和 $u(r,t)$ 完全描述，从这对波函数可以得出体系的所有性质。波粒函数 $u(r,t)$ 满足波函数 $\psi(r,t)$ 所满足的同样的边界条件，它的振幅包含一个以粒子速度移动、大小相当于粒子尺度的小奇异区。

在现有量子力学中，用薛定谔方程解的线性迭加来构成波包函数，企图用这种波包表示粒子，至少给粒子的运动提供一个说明，尽管是模糊的想象的类比式的说明。但这只是一厢情愿，关键的困难是：这种波包（我们称它为薛定谔波包）迅速地和无限地自发扩散。如考虑一维运动的自由粒子波包

$$\Phi(x,t) = (2\pi)^{-1/2}\int_{-\infty}^{+\infty} f(k-k_0)e^{i(kx-\omega t)}\mathrm{d}k$$

由德布罗意关系式得到

$$\omega = \hbar k^2/(2m), \beta = \left(\frac{\mathrm{d}^2\omega}{\mathrm{d}k^2}\right)_{k_0} = \frac{\hbar}{m} \neq 0 \tag{3}$$

若权重函数 $f(k-k_0)$ 为高斯分布，则波包宽度[7]

$$\Delta x \approx \Delta x_0[1 + \beta^2 t^2/(\Delta x_0)^4]^{1/2} \tag{4}$$

式中 Δx_0 为 $t=0$ 时波包的宽度。因此，只要 $\beta\neq0$，自由粒子波包一定扩散。粒子质量 m 愈小，波包初始尺度 Δx_0 愈小，波包扩散得愈迅速。例如电子波包在 10^{-8} 秒内就扩散为 Δx_0 的 10^8 倍。因此，薛定谔波包不可能是粒子的真正表示。这表明，在现有量子力学范围内，即单从薛定谔方程出发，不可能对微观客体的粒子性质作出符合客观实在的描述。

稳定的不自发扩散的波包才是微观粒子的真正表示，稳定的波包函数才是双波函数假设中的波粒函数 $u(r,t)$。我们把稳定的波包称之为波粒。要构建波粒函数，只有以放弃或改善量子力学的某些基本思想为代价才能办到。这首先就是著名的德布罗意物质波假设和德布罗意关系式。德布罗意假设把每一个微观粒子与一个波相联系。我们提出波粒假设如下：

与单个体系即单个自由粒子相缔合的不是一个具有确定角频率和波矢的（平面）波，而是由不同角频率 ω 和不同波矢 $\boldsymbol{k}$ 的平面波迭加构成的波包，微观粒子的能量 E 和动量 $\boldsymbol{P}$，与其波包中心组分的（中心）角频率 ω_0 和（中心）波矢 $\boldsymbol{k}_0$ 相关联，并且满足关系式

$$E=\hbar\omega_0,\qquad \boldsymbol{P}=\hbar\boldsymbol{k}_0 \tag{5}$$

这个假设是自然的。一个稳定的微观粒子，至少对于一个确定的时刻，有一个能量值 E 和一个动量值 $\boldsymbol{P}$，而其波包组分却涉及到许多（一般是无限多个）不同的角频率 ω 和不同的波矢 $\boldsymbol{k}$。自然的假定是：让其中心角频率 ω_0 和中心波矢 $\boldsymbol{k}_0$ 按波粒关系式（5），与粒子的能量 E 和动量 $\boldsymbol{P}$ 相关联。至于如何确定波包函数一般组分中的 ω 和 k 的关系，留下了另外选择的余地。这样，可以避免波包成为薛定谔波包，为构建稳定的波包创造了可能性。

如何确定单个体系的物理量？注意至少在稳定的力场中，单个体系处于一个确定的能量本征态。因此，应当针对确定的能量本征态来考察单个体系的行为。兹提出波粒物理量假设如下：

在定态波函数 ψ_n（$\boldsymbol{r}$，t）和相应的波粒函数 u_n（$\boldsymbol{r}$，t）描述的状态下，测量单个体系的物理量 F（$\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{P}$）将得到确定的值

$$F_c(t)=\int u_n^*(\boldsymbol{r},t)\hat{F}(\boldsymbol{r},-i\hbar\nabla)\psi_n(\boldsymbol{r},t)\mathrm{d}\tau \tag{6}$$

式中，算符 $\hat{F}$（$\boldsymbol{r}$，$-i\hbar\nabla$）是按量子力学通常规则，由经典力学中对应的物理量 F（$\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{P}$）的表示式，实施代换 $\boldsymbol{P}\to-i\hbar\nabla$ 得到的，积分遍及变量变化的整个空间区域。

由计算式（6）得到自由波粒的坐标、动量和能量计算公式如下：

$$x_c=\int_{-\infty}^{+\infty}u^*(x,t)x\psi(x,t)\mathrm{d}x \tag{7}$$

$$P_c=\int_{-\infty}^{+\infty}u^*(x,t)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)\mathrm{d}x \tag{8}$$

$$E_c=\int_{-\infty}^{+\infty}u^*(x,t)i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)\mathrm{d}x \tag{9}$$

为满足质量守恒和电荷守恒定律，由(6)式得到

$$\int_{-\infty}^{+\infty}u^*(x,t)\psi(x,t)\mathrm{d}x=1 \tag{10}$$

以上四式中的 $u(x,t)$和 $\psi(x,t)$都是对具有确定能量 $E=\hbar\omega_0$ 和确定动量 $P=\hbar k_0$ 的自由粒子而言的。薛定谔方程给出(加入一个相因子 $e^{i(k_0x_0-\omega_0t_0)}$)

$$\psi(x,t)=(2\pi)^{-1/2}e^{i[k_0(x-x_0)-\omega_0(t-t_0)]} \tag{11}$$

或

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=(2\pi)^{-3/2}e^{i[\boldsymbol{k}_0\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)-\omega_0(t-t_0)]} \tag{12}$$

总之，按照爱因斯坦的观念，我们接受和采纳量子力学的所有成果，但认为它只是对量子系综的正确描述，不能提供关于单个体系的完备知识。本节提出了三个假设，由此出发试图寻求一种关于单个体系的决定论性的完备描述。

5 波粒函数

按波粒假设，自由粒子波粒函数可表示为

$$u(x,t)=\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k}c(k)e^{i[k(x-x_0)-\omega(k)(t-t_0)]}\mathrm{d}k \tag{13}$$

式中 $c(k)$为权重系数，注意被积函数即波粒分量函数

$$\phi(x,t,k)=c(k)^{i[k(x-x_0)-\omega(k)(t-t_0)]} \tag{14}$$

当且仅当 $\omega=\omega_0,k=k_0$(注意(5)式)才是薛定谔方程的解。当 $\omega\neq\omega_0,k\neq k_0,\phi(x,t,k)$是满足

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}=\hbar\omega f(t),f(t)=c_1e^{-i\omega(t-t_0)} \tag{15}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x)=w\psi(x),\psi(x)=c_2e^{ik(x-x_0)},k=\left(\frac{2mw}{\hbar^2}\right)^{1/2} \tag{16}$$

两个方程的解之乘积，式中 $\hbar\omega$ 和 w 作为两个不同的参数都不代表能量，因而 $\omega\neq\hbar k^2/(2m)$。这就是说，一般而言 $\phi(x,t,k)$ 并不是薛定谔方程的解（除非 $\omega=\omega_0,k=k_0$）。这也是波包稳定条件所要求的。因此，波粒函数 u 不满足薛定谔方程。

作为上节三个基本假设的直接推论，可以提出下面两个原则，来确定波粒函数式中的迭加系数和相应的角频率：(1)广义 δ 函数原则，因此，作为波粒函数广延性量度的方均偏差应当趋于零，即 $\langle x^2\rangle_c=\langle x_c\rangle^2$；(2)物理量实数原则，即物理量都必须取实数值。在一般情况下，唯动量 P_c 可能有例外，但自由粒子动量必为实数值。

可以更简单地处理自由粒子问题。首先，波粒中心位置 x_c 由(13)式的相因子 φ 的极值条件 $\frac{\partial\varphi}{\partial k}=0$ 确定，即

$$x_c=x_0+\frac{d\omega}{dk}(t-t_0),\text{或}\frac{d\omega}{dk}=v=\frac{P}{m} \tag{17}$$

另一方面，二阶导数 $\beta=\frac{d^2\omega}{dk^2}$ 和更高阶导数 $\frac{d^n\omega}{dk^n}$ 为零，是波包稳定的条件。由此得到

$$\omega-\omega_0=v(k-k_0)=\frac{P}{m}(k-k_0) \tag{18}$$

其次，由稍后所述，可视 $u(x,t)$ 之积分限为 $(-\infty,+\infty)$，代入归一化条件(10)式易得权重系数 $c(k)=(2\pi)^{-1/2}$。将(18)式和 $C_k=(2\pi)^{-1/2}$ 代入(13)式，求得波粒函数

$$\begin{aligned}u(x,t)&=(2\pi)^{-1/2}\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k}e^{ik[(x-x_0)-v(k-k_0)]}dk\cdot e^{-i(\omega_0-k_0v)(t-t_0)}\\&=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2}\frac{\sin\xi}{\xi}\Delta k e^{i[k_0(x-x_0)-\omega_0(t-t_0)]}\\&=(2\pi)^{1/2}\frac{\sin\Delta k(x-x')}{\pi(x-x')}e^{i[k_0(x-x_0)-\omega_0(t-t_0)]}\end{aligned} \tag{19}$$

式中，$\xi=\Delta k(x-x')$，$x'=x_0+v(t-t_0)$

$\sin\xi/\xi$ 是一个类 δ 函数，把 $\sin^2\xi/\xi^2$ 看作是集中在间隔 $\xi=\pm\pi$ 之间，其误差不会超过 5%。在这个间隔之外，可视它为零，而且实际上随 ξ 增大，它迅速趋于零。由 $\xi=\pm\pi$ 得波粒尺度

$$\Delta x=2\pi/(\Delta k) \tag{20}$$

显然，这波粒函数不随时间自发扩散，它是稳定的波包，中心位于 $x_c=x'=x_0+v(t-t_0)$，以速度 v 移动，局限于 $\Delta x=2\pi/(\Delta k)$ 区域内。当 $t=t_0$，波粒中心位于 x_0，这就是实参数 x_0 和 t_0 的物理意义。

为组成有一定尺度 Δx 的波粒函数，连续变化的波矢间隔 Δk 不能小于某一定值，因为微观粒子尺度 Δx 很小，间隔 Δk 是很大的。如电子尺度上界为 10^{-18} 米，由式(20)得 $\Delta k\approx2\pi\times10^{18}$ 米$^{-1}$。另一方面，$k_0=P/\hbar=mv\hbar^{-1}(1-v^2/c^2)^{-1/2}=8.7\times10^4v(1-v^2/c^2)^{-1/2}$。因此，至少在非相对情况下，$k_0\ll\Delta k$，在波粒函数积分式中，可近似地视 Δk 为无穷大，故有

$$\lim_{\Delta k\to\infty}\frac{\sin\Delta k(x-x')}{\pi(x-x')}=\delta(x-x') \tag{21}$$

$$u(x,t)=(2\pi)^{1/2}\delta(x-x')e^{i[k_0(x-x_0)-\omega_0(t-t_0)]} \tag{22}$$

类似的讨论，可得三维自由波粒函数如下

$$\begin{aligned}u(r,t)&=(2\pi)^{-3/2}\iiint_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k}e^{i[k\cdot(r-r_0)-\omega(t-t_0)]}dk_xdk_ydk_z\\&=\left(\frac{2}{\pi}\right)^{3/2}\frac{\sin\xi_x}{\xi_x}\frac{\sin\xi_y}{\xi_y}\frac{\sin\xi_z}{\xi_z}\Delta k_x\Delta k_y\Delta k_z e^{i[k_0\cdot(r-r_0)-\omega_0(t-t_0)]}\end{aligned}$$

$$= (2\pi)^{3/2} \frac{\sin\Delta k_x(x-x')}{\pi(x-x')} \frac{\sin\Delta k_y(y-y')}{\pi(y-y')} \frac{\sin\Delta k_z(z-z')}{\pi(z-z')} e^{i[\boldsymbol{k}_0\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)-\omega_0(t-t_0)]}$$

$$= (2\pi)^{3/2}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')e^{i[\boldsymbol{k}_0\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)-\omega_0(t-t_0)]} \tag{23}$$

式中，$\xi_a=\Delta k_a(x_a-x'_a)$，$x'_a=x_{a0}+v_a(t-t_0)$，$a=1,2,3$ 分别对应于 x,y,z 分量。

6 波粒方程的探索

如果已知关于波粒分量 ϕ 和波粒函数 u 的方程，ϕ 和 u 便可直接求出。寻求波粒方程是一个严肃而困难的工作。但是，不作假设就无法前进。利用前节结果的提示，这里对波粒方程作探索性的研究。

显然 ϕ 一般不满足薛定谔方程，否则 u 波必然自发扩散。但是，当 $k=k_0$，ϕ 方程应变成薛定谔方程。波包的稳定和移动速度要求(18)式成立，故值得一试的也是最简单的考虑是寻找一个线性方程式。根据已得的 ϕ 和 u 函数式，提出自由粒子的波粒方程假设如下：

波粒分量 ϕ（$\boldsymbol{r}$，t，k）和波粒函数 u（$\boldsymbol{r}$，t）满足方程

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}=\hat{T}\phi, \qquad i\hbar\frac{\partial u}{\partial t}=\hat{T}u \tag{24}$$

式中算符

$$\hat{T}=\frac{\boldsymbol{P}}{m}\cdot(-i\hbar\nabla)+\left(E-\frac{P^2}{m}\right) \tag{25}$$

m，$\boldsymbol{P}$ 和 E 分别表示粒子的质量，动量和能量。

因为 u 表示为 ϕ 的迭加，故 ϕ 和 u 满足同样形式的方程。在逻辑上，波粒方程假设和上节的波粒函数假设是能够相互替代的。

自由粒子波粒分量方程，可以用分离变量法求解。为简便计，讨论一维情况，令 $\phi=f(t)\varphi(x)$，代入方程(24)，得到

$$i\hbar\frac{1}{f}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}=-i\hbar\frac{P}{m}\frac{1}{\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}-\frac{P^2}{2m}$$

令左右两边都等于常数 $\hbar\omega$，得到

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}=-i\omega f, f(t)=c_1e^{-i\omega(t-t_0)}$$

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}=-ik\varphi, \varphi(x)=c_2e^{ik(x-x_0)}$$

式中，

$$k=\frac{m}{\hbar k_0}(\omega-\omega_0)+k_0, \text{或 } \omega-\omega_0=\frac{\hbar k_0}{m}(k-k_0)=v(k-k_0) \tag{26}$$

$$\phi(x,t,k)=(2\pi)^{-1/2}e^{i[k(x-x_0)-\omega(t-t_0)]} \tag{27}$$

这就是前节得到的(18)和(14)式，可以进一步求得波粒函数式(19)。

可以证明：当 $k=k_0$，因为 $\phi(x,t,k)=\psi(x,t)$，并且 $\hat{P}\phi(x,t,k)=\boldsymbol{P}\psi(x,t)$，有下式成立

$$\frac{\boldsymbol{P}}{m}\cdot(-i\hbar\nabla\phi)+(E-\frac{P^2}{m})\phi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi$$

故波粒分量方程变成薛定谔方程。

求解关于 u 的方程即波粒方程(24)，可以直接得到含 δ 函数的解

$$u(x,t)=(2\pi)^{1/2}\delta(x-x')e^{i[k_0(x-x_0)-\omega_0(t-t_0)]}$$

为篇幅计，这里略去详细的求解过程。将函数式(22)代入波粒方程，可确定它满足该方程。

自由粒子的波粒方程是否可取？如何修改它以推广到在一般力场中运动的单个体系上去？这些问题都不容易作出肯定的回答。因此，作者宁可把本节的内容仅仅作为一种探索和一种参考，更多地将与本节无关地从第四节提出的三个基本假设出发展开问题的讨论。

7 自由波粒的物理量

自由粒子的状态由波函数 $\psi(x,t)$ 和波粒函数 $u(x,t)$ 完备地描述。将求得的波粒函数式(19)和(11)式代入公式(7)~(9),容易求得自由波粒的能量、动量和位置坐标

$$E_c=\int_{-\infty}^{+\infty}u^*(x,t)i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin\Delta k(x-x')}{\pi(x-x')}i\hbar(-i\omega_0)\mathrm{d}x=\hbar\omega_0 \tag{28}$$

$$P_c=\int_{-\infty}^{+\infty}u^*(x,t)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x,t)\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin\Delta k(x-x')}{\pi(x-x')}(-i\hbar)(ik_0)\mathrm{d}x=\hbar k_0 \tag{29}$$

$$x_c=\int_{-\infty}^{+\infty}u^*(x,t)x\psi(x,t)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{+\infty}x\frac{\sin\Delta k(x-x')}{\pi(x-x')}\mathrm{d}x$$

为完成最后一个积分,根据积分中值定理可以断言,在区间 $(x'-\frac{1}{2}\Delta x,x'+\frac{1}{2}\Delta x)$,$\Delta x$ 为粒子尺度,可以找到一点 x'',使得

$$x_c=x''\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin\Delta k(x-x')}{\pi(x-x')}\mathrm{d}x=x''$$

成立。但是,粒子尺度 Δx 极小,故用区间的中心点 x' 代替 x'',实际误差可忽略不计(对于电子,误差小于 10^{-18} 米),故上式可改写为

$$x_c=x'\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin\Delta k(x-x')}{\pi(x-x')}\mathrm{d}x=x'=x_0+\frac{P}{m}(t-t_0) \tag{30}$$

同样可以计算得到

$$(P^n)_c=\int_{-\infty}^{+\infty}u^*(x,t)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})^n\psi(x,t)\mathrm{d}x=(\hbar k_0)^n \tag{31}$$

$$(x^n)_c=\int_{-\infty}^{+\infty}u^*(x,t)x^n\psi(x,t)\mathrm{d}x=[x_0+\frac{P}{m}(t-t_0)]^n \tag{32}$$

即

$$(P^n)_c=(P_c)^n,(x^n)_c=(x_c)^n \tag{33}$$

如果采用含 $\delta(x-x')$ 因式的波粒函数式(22),将更容易得到上述结果。

此外,容易证明,下式成立

$$\int_{-\infty}^{+\infty}u^*(x,t)\psi(x,t)\mathrm{d}x=1$$

由以上讨论可见,可以同时精确地确定自由粒子的位置和动量,从而确定它的运动轨道。这意味着测不准关系并不适用于单个体系。

8 单个体系和统计系统

爱因斯坦强调,普通波函数 ψ 描述的是统计系综。本文讨论的自由粒子实例,清楚地表明爱因斯坦这一论断的正确性。单个自由粒子在确定时刻 t_0(可取为初始时刻)处于确定位置 x_0,但是,对于自由粒子系综,大量的不同的自由粒子在初始时刻 t_0 所处的位置 x_0 各不相同。这是一个有相同动量 $\boldsymbol{P}=\hbar\boldsymbol{k}_0$ 但初始位置 x_0 各不相同的量子系综。x_0 成为描述该量子系统综各粒子个体特性的参量。可以证明:按量子力学计算的物理量 F 的平均值 $\langle F\rangle$,等于单个体系的物理量 F_c 对于该量子系综关于初始位置参量 x_0 的统计平均值。

为更好地表述和证明这一论断,先设想粒子被限制在区间 $(-L/2,+L/2)$,采用箱归一化的动量本征函数(乘上时间因子)[8]

$$\psi(x,t)=(L)^{-1/2}e^{i[k_0(x-x_0)-\omega_0(t-t_0)]},k_0=2\pi n_0/L \tag{34}$$

波粒分量函数 ϕ 满足波函数 ψ 满足的同样的边界条件，故有

$$\phi(x,t,k) = (L)^{-1/2}e^{i[k(x-x_0)-\omega(t-t_0)]}, k = 2\pi n/L \tag{35}$$

k_0 和 k 均取分立值，ω 和 k 的关系仍如(20)式。因此可以得到波粒函数

$$u(x,t) = \sum \varphi(x,t,k) = (L)^{1/2}\delta(x-x')e^{i[k_0(x-x_0)-\omega_0(t-t_0)]} \tag{36}$$

注意算符 $\hat{F}$ 不涉及 x_0 和 t_0，可得

$$\begin{aligned}\lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2}F_c\mathrm{d}x_0 &= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2}\left[\int_{-L/2}^{+L/2}u^*(x,t)\hat{F}\psi(x,t)\mathrm{d}x\right]\mathrm{d}x_0 \\ &= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2}\left[\int_{-L/2}^{+L/2}\delta(x-x')e^{-i[k_0(x-x_0)-\omega_0(t-t_0)]}\hat{F}e^{i[k_0(x-x_0)-\omega_0(t-t_0)]}\mathrm{d}x\right]\mathrm{d}x_0 \\ &= \lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2}\left[\int_{-L/2}^{+L/2}\delta(x-x')\mathrm{d}x_0\right]e^{-i[k_0x-\omega_0t]}\hat{F}e^{i[k_0x-\omega_0t]}\mathrm{d}x \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x,t)\hat{F}\psi(x,t)\mathrm{d}x\end{aligned}$$

等式右边正是量子力学计算物理量 F 的平均值的公式，因此得到

$$< F > = \lim_{L\to\infty}\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2}F_c\mathrm{d}x_0 \tag{37}$$

完全对称地，也可以把时间 t_0 看作是描述自由粒子量子系统中各粒子个体特征的参量，该量子系综包含大量的具有相同动量 $P=\hbar k_0$ 的不同的自由粒子，它们处于确定位置 x_0 的时刻 t_0 各不相同。可以类似地证明：按量子力学计算的物理量 F 的平均值 $<F>$，等于单个体系的物理量 F_c 对于该量子系综关于时间参量 t_0 的统计平均值，即

$$< F > = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{-T/2}^{+T/2}F_c\mathrm{d}t_0 \tag{38}$$

普通波函数 ψ 描述量子系综，不能完全确定单个体系的行为。波函数 ψ 和波粒函数 u 相结合，能够给出自由粒子的完备的决定论性的描述，可以完全确定粒子的运动轨道，粒子的位置和动量同时具有确定值。稳定的波包是作为广延波动现象中心的微观粒子的真正表示。

参考文献

1 Feynman R P. The Character of Physical Law. 1967a：129

2 Dirac P A M. Directions in Physics. John Wiley，1978

3 德布罗意. 非线性波动力学. 上海科学技术出版社，1966. 87，195.

4 爱因斯坦与德布罗意，科学史译丛，1982（2）

5 同［3］，166

6 沈惠川. 德布罗意的非线性波动力学. 自然杂志，1992：620

7 曾谨言. 量子力学（下册），北京：科学出版社，1981

8 席夫. 量子力学，北京：人民教育出版社，1981