

包含在连续谱量子体系中的决定论性*

刘 全 慧

湖南大学应用物理系,长沙 410082

1991年5月13日收到;1991年6月19日收到修改稿

当一连续谱量子体系具有某一确定能量时,通常的量子力学用单个连续定态来描写它的性质,所得到的任何力学量的期待值都将为零或无穷大.本文以数学定理的形式指出该体系具有一类新的决定论的、物理内容明显的结果.经典力学结果是这些结果的经典极限,通常的量子力学期待值作为一种统计结果而包含在本文结果之内.

PACC: 0365; 0320

一、引 言

连续定态是连续谱量子体系中具有确定能量的态.在数学上,由于连续定态在无穷远处亦有非零值,导致它只能是 δ 函数归一化.但在物理上,在该态上求任何力学量时,几乎无所例外地得零或无穷大值却令人费解.因为作为一个具有确定能量的态,没有理由不认为它们描写了物理学的实在.而实在的物理学体系在有限的时间内给出的任何值必将是有限的.因此,那些平凡的零或无穷大值的得来可能意味着用连续定态来描写具有确定能量的态时有某种不足.从这种新的思想出发,发现的确有一种一般性的、自洽的联系蕴含于我们在具有确定能量的连续谱量子体系的处理中.出于紧凑和简洁的考虑,本文有关公式的详细推导均置于附录中.我们将证明一个数学定理.由于该定理给出一个全新的量子力学和经典力学间的对应关系,姑且称为等价定理.该定理如下:当一连续谱量子体系具有某一确定能量 E_0 时,力学量 f 随时间的演化 $\langle f \rangle_{E_0}$ 在极限

$$\hbar \rightarrow 0, \text{ 能量 } E_0 = \text{经典能量 } E_0. \quad (1)$$

下将精确地服从牛顿力学.一般情况下亦将近似地服从牛顿力学.这里 $\langle f \rangle_{E_0}$ 由下式表达:

$$\begin{aligned} \langle f \rangle_{E_0} &= \frac{1}{2} \left[\int \varphi^*(x, t) f \psi_{E_0}(x, t) dx + \text{c.c.} \right] \\ &= \text{Re} \int \varphi^*(x, t) f \psi_{E_0}(x, t) dx, \end{aligned} \quad (2)$$

其中 $\psi_{E_0}(x, t) = \phi_{E_0}(x) \exp[-iE_0(t - t_0)/\hbar]$ (3)
为用能量 E_0 表示的通常的连续定态.波函数 $\varphi(x, t)$ 具有如下形式:

$$\varphi(x, t) = \int \phi_E(x, t) dE. \quad (4)$$

* 国家自然科学基金与中国科学院理论物理研究所资助的课题.

从简单的数学运算得知, 通常的量子力学在态 $\phi_{E_0}(x, t)$ 上测力学量 f 时所得期待值 $f_{E_0 E_0}$ 是本文的值 $\langle f \rangle_{E_0}$ 在“均匀系综”或“时间系综”中的统计结果。

对均匀场中单粒子体系处理作为一个例子, 它优美而具体地表明本文结果的自然性及明显的物理意义。

为简洁起见, 本文只涉及一维情况。高维情况可以同法讨论。

二、等价定理及其主要结果

首先考虑一个数学方程

$$\begin{aligned} & \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \langle f \rangle_{E_0} dt_0 \\ &= \int dx \left\{ \left[dE \phi_E^*(x) f \phi_E(x) \right] \frac{1}{2} \left\{ \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T dt_0 \exp[i(E - E_0)(t - t_0)/\hbar] \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + \text{c.c.} \right\} \right. \\ & \quad \left. - \int dx \phi_{E_0}^*(x) f \phi_{E_0}(x) = f_{E_0 E_0}, \end{aligned} \quad (5)$$

其中利用了方程

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T \exp[i(E - E_0)(t - t_0)/\hbar] dt_0 = \begin{cases} 0 & E \neq E_0; \\ 1 & E = E_0. \end{cases} \quad (6)$$

(5)式告诉我们一个有趣的事实: 假若 $\langle f \rangle_{E_0}$ 是力学量 f 在时刻 t 的值, 则 $f_{E_0 E_0}$ 就是一种统计平均值。这种统计是对初始时刻 t_0 均匀地分布在区间 $(-\infty, \infty)$ 中的大量的具有相同能量的粒子体系在同一时刻 t 测力学量 f 后, 对所得值求算术平均的结果。这种统计其实是一种在“均匀系综”^[1]中进行的系综平均。由于(5)式中的 t_0 用 t 代换而结果不变, 则可以对同一体系在时间演化过程中连续地取值后进行平均, 这种统计可以认为是在“时间系综”^[2]中进行的系综平均。

(5)式是否有意义完全取决于(2)式是否有物理意义。否则, 只能认为是数学游戏而必须抛弃。很幸运, $\langle f \rangle_{E_0}$ 具有鲜明的物理意义, 具体而言, 有

1) 当 $f = 1$ 时, 容易求得

$$\text{Re} \int \phi^*(x, t) \phi_{E_0}(x, t) dx = 1. \quad (7)$$

2) 当 $f = H$ 时, 容易求得

$$\text{Re} \int \phi^*(x, t) \hat{H} \phi_{E_0}(x, t) dx = E_0. \quad (8)$$

3) 当 $f = x, p$ 时, 与证明 Ehrenfest 定理^[3]相似, 不难得到

$$\begin{aligned} m \frac{d\langle x \rangle_{E_0}}{dt} &= \langle p \rangle_{E_0}, \\ \frac{d\langle p \rangle_{E_0}}{dt} &= - \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle_{E_0} \end{aligned}$$

$$= - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\langle (x - \langle x \rangle_{E_0})^n \rangle_{E_0}}{n!} \frac{d^{n+1}V}{dx^{n+1}} \Big|_{x=\langle x \rangle_{E_0}} \quad (9)$$

4) 一般地,有(证明见附录 A)

$$\langle x^n \rangle_{E_0} = \langle x \rangle_{E_0}^n + O(\hbar^2) \quad (n = 2, 3, \dots). \quad (10)$$

注意 $\langle x \rangle_{E_0}$ 总是 $O(1)$ 级的。在这里,有一种特殊情况,只要满足条件

$$\sum_{n=2}^{\infty} \frac{\langle (x - \langle x \rangle_{E_0})^n \rangle_{E_0}}{n!} \frac{d^{n+1}V}{dx^{n+1}} \Big|_{x=\langle x \rangle_{E_0}} = 0. \quad (11)$$

根据(9)式, $\langle x \rangle_{E_0}$ 将具有与经典力学解 $x(t)$ 完全一样的形式。由于(11)式相当于条件

$$\frac{d^3V}{dx^3} = 0. \quad (12)$$

故对自由粒子体系 $V(x) = 0$, 均匀场体系 $V(x) = -Fx$ 等,可以直接把有关经典力学解作为物理量 $\langle x \rangle_{E_0}, \langle p \rangle_{E_0}$ 等的明显形式。同时,对上述体系,由于另一个条件

$$\frac{d^2\langle x \rangle_E}{dE^2} = 0 \quad (13)$$

满足,因此,对该类体系,有(见附录一(A.8)式)

$$\langle x^2 \rangle_{E_0} = \langle x \rangle_{E_0}^2. \quad (14)$$

5) 在经典极限(1)式下或略去 $O(\hbar^2)$ 的影响,有

$$m \frac{d\langle x \rangle_{E_0}}{dt} = \langle p \rangle_{E_0},$$

$$\frac{d\langle p \rangle_{E_0}}{dt} = - \frac{dV}{dx} \Big|_{x=\langle x \rangle_{E_0}}, \quad (15)$$

$$\langle x^n \rangle_{E_0} = \langle x \rangle_{E_0}^n \quad (n = 2, 3, \dots). \quad (16)$$

因此,在物理学感兴趣的大小范围内,可以认为本文结果是决定论性的。而量子力学期待值只是这些结果的统计平均值。注意这里的结论只当体系为连续谱体系成立。尽管本文的探索可以推广到离散谱的情况,但结果不大一样。详情可见文献[4]。

三、示例——均匀场 $V(x) = -Fx$ 中的单粒子体系

这里只给出给定能量 $E = E_0$ 时的结果,具体运算见附录二。

1) 经典力学结果

$$x = \frac{1}{2m} F(t - t_0)^2 - \frac{E_0}{F}, \quad p = F(t - t_0). \quad (17)$$

2) 通常的量子力学结果 (schrödinger 表象)

$$H_{E_0 E_0} = E_0 \delta(E - E_0), \quad x_{E_0 E_0} = \infty, \quad x_{E_0 E_0}^2 = \infty, \quad p_{E_0 E_0} = 0, \quad p_{E_0 E_0}^2 = \infty \quad (18)$$

3) (2)式给出的结果

$$\langle x \rangle_{E_0} = \frac{1}{2m} F(t - t_0)^2 - \frac{E_0}{F}, \quad \langle p \rangle_{E_0} = F(t - t_0), \quad \langle H \rangle_{E_0} = E_0,$$

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle_{E_0} &= \langle x \rangle_{E_0}^2, \quad \langle x^3 \rangle_{E_0} = \langle x \rangle_{E_0}^3 - \frac{\hbar^2}{mF}, \\
 &\vdots \\
 \langle x^n \rangle_{E_0} &= \langle x \rangle_{E_0}^n + O(\hbar^2) \quad (n = 4, 5, \dots), \\
 \langle p^n \rangle_{E_0} &= \langle p \rangle_{E_0}^n \quad (n = 2, 3, \dots).
 \end{aligned} \tag{19}$$

即经典力学结果(17)式是本文理论(19)式的经典极限(1)式下的结果。量子力学结果(18)式是本文结果(19)式的统计平均值,从而只能是平凡的零或无穷大值。本文结果(19)式表明,在实空间中粒子的运动是完全可以计算的,故本文结果可以认为是决定论性的。

四、讨论与结论

对于熟悉量子力学中旷日已久的爱因斯坦-哥本哈根学派之间的争论的物理学家工作者而言,他会发现本文支持爱因斯坦对量子力学和微观世界的理解。因为爱因斯坦毕生坚持现有的量子力学只是一种统计性的理论这一观点^[2]。值得提醒的是,统计解释是目前最流行的对量子力学的诠释^[5,6],爱因斯坦和哥本哈根学派对它的正确性并无疑义。问题在于,爱因斯坦认为它之所以是统计性的理论是由于理论的不完备,哥本哈根学派则认为这是由于微观世界本身具有不确定性,只能有此理论^[7]。

但是,本文不支持爱因斯坦的定域实在论的思想。其思想也被1972年以来诸多违反Bell不等式的实验证明是错误的^[8]。这里有一个几乎是普遍的误解,因为爱因斯坦的该思想被证明是错误的,所以爱因斯坦对微观世界和量子力学的理解便一无是处。事实当然远非如此^[6]。

直到1986年,在量子力学体系内,统计是在什么具体结构的系综中进行的这一问题,在经典极限下才有圆满的解决^[1]。这一系综被称为“均匀系综”^[1]。既然量子力学在经典极限下描写的是这一系综,是否一般情况下也在描写“均匀系综”呢?这一思想导致1986年黄湘友、钱尚武用(2)式去计算自由粒子体系^[9]及相对论性的自由电子体系^[10]。后经他们及何祚庥等人的讨论^[11],发现这种思想在理论上是自洽的、简洁的。本文以数学定理的形式,一般性地论证其在处理连续谱量子体系时的正确性。

最后应该指出,在本文的探索中,具有确定能量的连续谱量子体系的状态,不是用单个的连续定态(3)式来描写的,而是和另一个共同的波函数(4)式一起来定义的。本文结果表明,对于该状态,忽略 $O(\hbar^2)$ 的影响,经典力学的处理已足够精确。通常量子力学所得期待值可以近似认为是相应力学量之经典力学结果的统计平均值。这是个很自然的结果,因为连续定态在无穷远处亦有非零值,原本就不是微观领域中的态。

笔者感谢中国科学院理论物理研究所何祚庥教授的指教,加拿大 Simon Fraser 大学 L. E. Ballentine 教授的鼓励。笔者在郑州大学学习期间,与该校的赵祖森教授(导师)、吴又麟教授、张立仕教授进行过多次即兴讨论,获益匪浅,在此一并致以深切的谢意。

附录一、关于(10)式的证明

这里只给出 $n = 2$ 时的证明过程, 该过程可以推广到 $n > 2$ 时的情形。

为了方便, 定义

$$[f]_{E_0} \equiv \int \varphi^*(x, t) f \phi_{E_0}(x, t). \quad (\text{A.1})$$

很明显, 有

$$\langle f \rangle_{E_0} = \text{Re}[f]_{E_0}, \quad (\text{A.2})$$

$$[f]_{E_0} = \langle f \rangle_{E_0} + iO(\hbar^{2k+1}) \quad k = 0, 1, 2, \dots. \quad (\text{A.3})$$

(A.3) 式成立的理由是, 在 Schrödinger 方程中, 虚数单位 i 必以形式 $(i\hbar)$ 一起出现。故求得的波函数(3)式及定义的物理量 (A.1) 式的虚数部分, 必以 $(i\hbar)^{2k+1}$ 为系数出现。

当 $f = x$ 时, 由 (A.1) 式得

$$\begin{aligned} [x]_{E_0} &= \int dx \int dE \phi_E^*(x, t) x \phi_{E_0}(x, t) \\ &= \int dE x_{EE_0} \exp[i(E - E_0)(t - t_0)/\hbar], \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

其中 $x_{EE_0} = \int dx \phi_E^*(x) x \phi_{E_0}(x)$ 。当 E 和 E_0 稍有不同时, $\exp[i(E - E_0)(t - t_0)/\hbar]$ 将是一个振荡得极快的函数。故 (A.4) 式的积分值将主要来自 $E \sim E_0$ 的贡献。

当 $f = x^2$ 时, 由 (A.1) 式得

$$[x^2]_{E_0} = \int dx \int dE \phi_E^*(x, t) x^2 \phi_{E_0}(x, t) \quad (\text{A.5})$$

$$\begin{aligned} &= \int dx \left[\int dE \phi_E^*(x, t) \right] x \left[\int dE' \phi_{E'}(x, t) \phi_{E_0}^*(x', t) \right] \\ &\quad \cdot x \phi_{E_0}(x, t) \\ &= \int dE' \left\{ \int dx \left[\int dE \phi_E^*(x, t) \right] x \phi_{E'}(x, t) \right\} \\ &\quad \cdot \left[\int dx' \phi_{E'}^*(x', t) x' \phi_{E_0}(x', t) \right] \\ &= \int dE' [x]_{E'} \left[\int dx' \phi_{E'}^*(x', t) x' \phi_{E_0}(x', t) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

与对 (A.1) 式类似的分析, 可知 (A.5) 式的积分值亦将主要来自于 $E \sim E_0$ 的项。故 (A.6) 式中积分 $[x]_{E'}$ 在 E_0 附近的性质是我们感兴趣的。把 $[x]_{E'}$ 在 E_0 附近作 Taylor 展开至 $E' - E_0$ 的二级项(下面将看到这样已足够), 有

$$\begin{aligned} [x]_{E'} &= [x]_{E_0} + (E' - E_0) \frac{\partial}{\partial E'} [x]_{E'} \Big|_{E'=E_0} \\ &\quad + \frac{1}{2} (E' - E_0)^2 \frac{\partial^2}{\partial E'^2} [x]_{E'} \Big|_{E'=E_0}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

代入 (A.6) 式中得

$$\begin{aligned}
[x^2]_{E_0} &= [x]_{E_0}^2 + \frac{\partial}{\partial E'} [x]_{E'} \Big|_{E'=E_0} \int dE' (E' - E_0) x_{E'E_0} \exp[i(E' - E_0)(t - t_0)/\hbar] \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial E'^2} [x]_{E'} \Big|_{E'=E_0} \int dE' (E' - E_0)^2 x_{E'E_0} \exp[i(E' - E_0)(t - t_0)/\hbar] \\
&= [x]_{E_0}^2 + \frac{\partial}{\partial E'} [x]_{E'} \Big|_{E'=E_0} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \int dE' x_{E'E_0} \exp[i(E' - E_0)(t - t_0)/\hbar] \\
&\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial E'^2} [x]_{E'} \Big|_{E'=E_0} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} [x]_{E_0} \right) \\
&= [x]_{E_0}^2 - \frac{i\hbar}{m} [p]_{E_0} \frac{\partial}{\partial E'} [x]_{E'} \Big|_{E'=E_0} \\
&\quad + \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{dV}{dx} \right]_{E_0} \frac{\partial^2}{\partial E'^2} [x]_{E'} \Big|_{E'=E_0}. \tag{A.8}
\end{aligned}$$

考虑到 (A.3) 式, 总有

$$\langle x^2 \rangle_{E_0} = \langle x \rangle_{E_0}^2 + O(\hbar^2). \tag{A.9}$$

附录二、均匀场中单粒子体系 $\langle f \rangle_{E_0}$ 的具体计算

这里不给出简单求算可得到的结果(17), (18)式的详细过程. 只给(19)式的计算过程.

量子力学对该体系的定态波函数解 $\phi_{E_0}(x, t)$ 为^[12]

$$\phi_{E_0}(x, t) = \frac{\alpha}{2\pi\sqrt{F}} \int du \exp \left\{ i \left[\frac{u^3}{3} - u \left(x + \frac{E_0}{F} \right) \alpha \right] - iE_0(t - t_0)/\hbar \right\}, \tag{A.10}$$

其中 $\alpha = (2mF/\hbar^2)^{1/3}$. 波函数 $\varphi(x, t)$ 为

$$\begin{aligned}
\varphi(x, t) &= \int \phi_E(x, t) dE \\
&= \sqrt{F} \int du \exp \left[i \left(\frac{u^3}{3} - u x \alpha \right) \right] \delta \left[u + \frac{F(t - t_0)}{\alpha \hbar} \right]. \tag{A.11}
\end{aligned}$$

下面计算 $[f]_{E_0}$. 当 $f = x^k$ 时, 有

$$\begin{aligned}
[x^k]_{E_0} &= \int dx \varphi^*(x, t) x^k \phi_{E_0}(x, t) \\
&= \frac{\alpha}{2\pi} \int dx du dv \delta \left[u + \frac{F(t - t_0)}{\alpha \hbar} \right] \\
&\quad \cdot \left(\frac{i}{\alpha} \right)^k \frac{\partial^k}{\partial u^k} \exp \left[-i \frac{(u^3 - v^3)}{3} + i(u - v)x\alpha \right. \\
&\quad \left. - \frac{i\alpha E_0 v}{F} - \frac{iE_0(t - t_0)}{\hbar} \right] \\
&= \int du dv \delta \left[u + \frac{F(t - t_0)}{\alpha \hbar} \right] \left(\frac{i}{\alpha} \right)^k \frac{\partial^k}{\partial v^k} \delta(u - v) \\
&\quad \cdot \exp \left\{ -i \frac{(u^3 - v^3)}{3} - iE_0 \left[\frac{\alpha v}{F} + \frac{(t - t_0)}{\hbar} \right] \right\} \\
&= \int du \delta \left[u + \frac{F(t - t_0)}{\alpha \hbar} \right] (-1)^k \left(\frac{i}{\alpha} \right)^k
\end{aligned}$$

$$\left\{ \frac{\partial^k}{\partial U^k} \exp\{\dots\} \right\} \Big|_{u=v} = (-1)^k \left(\frac{i}{\alpha} \right)^k \left\{ \frac{\partial^k}{\partial v^k} \exp\{\dots\} \right\} \Big|_{u=v=-\frac{F(t-t_0)}{\alpha \hbar}} \quad (\text{A.12})$$

考虑到(A.2)式, 当 $k = 1, 2, 3, \dots$ 时, 不难由上式给出(19)式。再用同法不难得到(19)式

$$\langle p^k \rangle_{E_0} = [F(t - t_0)]^k \equiv \langle p \rangle_{E_0}^k. \quad (\text{A.13})$$

- [1] S. W. Qian (钱尚武), X.Y. Huang (黄湘友), *Phys. Lett. A*, **115**(1986), 319; **117**(1986), 166; **121**(1987), 211.
- [2] W. Pauli, *Pauli Lectures on Physics Vol. 4*, MIT, Mass. (1973), p. 21.
- [3] L.I. Schiff *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York, (1968), p. 28—30.
- [4] 刘全慧、王发伯, 物理学报, **10**(1991), 1562.
- [5] L. E. Ballentine *Rev. Mod. Phys.*, **42**(1970), 358.
- [6] 关洪, 量子力学基本概念, 高等教育出版社, 北京, (1990).
- [7] 吴大猷, 量子力学(甲部), 科学出版社, 北京, (1984), 198 页.
- [8] d'Espagnat, 科学, **3**(1980), 64.
- [9] X. Y. Huang (黄湘友), *Phys. Lett. A.*, **115**(1986), 310.
- [10] S. W. Qian (钱尚武) et al., *J. Phys. A.*, **19**(1986), L849.
- [11] X. Y. Huang (黄湘友), S.W. Qian (钱尚武), Q. H. Liu (刘全慧), Z.X.He (何祚麻), *Chin. Phys. Lett.*, **7**(1990), 152.
- [12] Liu Quanhui (刘全慧), *Chin. Sci. Bull.*, **35**(1990), 703.

DETERMINISTIC PROPERTIES CONTAINED IN QUANTUM SYSTEMS WITH CONTINUOUS SPECTRUM

LIU QUAN-HUI

Department of Applied Physics, Changsha, 410082

(Received 13 May 1991; revised manuscript received 19 June 1991)

ABSTRACT

When a quantum system with continuous spectrum has a definite energy, ordinary quantum mechanics uses a single continuous stationary state to describe its properties, the expectation values for arbitrary physical quantities are therefore either infinity or zero. In this paper we point out in the form of mathematical theorem that the system possesses new and deterministic results with evident physical meanings. Classical results for the system are the classical limit cases of these results, and the ordinary expectation values are the statistical cases of our results.

PACC: 0365; 0320