

# 边界条件, 无限涨落和不确定关系\*

关 洪

(物理学系)

**摘 要** 通过几种有限波列的具体例子论证了具有一定的坐标不确定度  $\Delta x$  的空间波函数  $\psi(x)$  所描写的状态, 其动量不确定度  $\Delta p$  的数值强烈地依赖于  $\psi$  的边界条件。当采用阶跃式的尖锐边界条件时, 便会导致无限大的动量涨落  $\Delta p$ 。而当采用较为合理的平缓边界条件时, 则不会出现发现的结果。

**关键词** 涨落, 不确定关系

## 1 引 言

在量子力学里, 坐标  $x$  和动量  $p$  之间的 Heisenberg 不确定关系取以下形式

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \quad (1)$$

式中坐标和动量的不确定度  $\Delta x$  和  $\Delta p$  分别定义为

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) (x - \langle x \rangle)^2 \psi(x) dx \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2)$$

$$\Delta p \equiv \sqrt{\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle} = \left[ \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(p) (p - \langle p \rangle)^2 \varphi(p) dp \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

这里的  $\psi(x)$  是在坐标表象里满足归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = 1 \quad (4)$$

的系统波函数; 而在动量表象里的波函数是

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx \quad (5)$$

它也满足相应的归一化条件。为简单起见, 只讨论一维的情况。

事实上,  $\psi(x)$  和  $\varphi(p)$  之间满足的是 Fourier 变换关系, 而  $\Delta x$  和  $\Delta p$  则分别是在该状态中的坐标和动量的方均根偏差(标准差), 本质上也是一种统计涨落。

1958年, Beck 和 Nussenzveig<sup>[1]</sup> 通过对电子被具有尖锐边缘的单狭缝衍射问题的分析, 运用两种不同的计算方法, 证明了在这种情况下, (1)式左边的乘积  $\Delta x \Delta p$  总是发散的。这一结论使得通常基于把(1)式里的大于符号换成近似符号<sup>[2]</sup>而作出的一些论证失掉了根据。从1983年开始, Uffnik 和 Hilgevoord 屡次提出主张说<sup>[3]</sup>, 这里出现

本文1991年1月26日收到

\* 国家教委博士点基金资助项目

的发散性,是由于不恰当地使用了如象(2)和(3)两式那样的不确定度定义的缘故。他们并且提出,应当使用一套新定义的波函数宽度来描写坐标和动量分布的集中程度,这样就可以避免发散而建立一种比较有意义的不确定关系。

另一方面, Feynman假设了一种Gauss型狭缝来处理单缝衍射问题<sup>[4]</sup>,解出的电子衍射波函数仍然是Gauss型的,肯定会同时存在有限的 $\Delta x$ 和 $\Delta p$ 。

由此可见,文献[3]关于电子单缝衍射波函数所对应的乘积 $\Delta x \Delta p$ 趋于无限大这一结论,不是最后的定论。在这个问题上出现或者不出现发散,取决于缝隙边界条件的选择,而不是由于 $\Delta x$ 和 $\Delta p$ 的定义合适不合适的缘故。

此外,我们曾经指出<sup>[5]</sup>,不仅在单缝衍射,而且在具有尖锐边界条件的有限等幅波列,同样会出现无限大的动量涨落 $\Delta p$ 。因为衍射问题的精确解比较复杂,人们也常常采用同有限波列相类似的波包模型来近似描写狭缝衍射现象<sup>[1]</sup>。为了进一步弄清楚空间波函数边界条件对动量涨落发散性的影响,我们选择了几种不同包迹的有限波列对此进行了讨论。

## 2 有限波列问题

### 2.1 矩形包迹波列

这是一种在始端和末端都具有尖锐的阶跃边界条件的等幅正弦波列(以下采用Planck常数 $\hbar = 1$ 的自然单位制):

$$\psi(x) = \begin{cases} (1/\sqrt{2a}) e^{ip_0 x} & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases} \quad (6)$$

它满足(4)式的归一化条件,用(2)和(5)式求出

$$\Delta x = a/\sqrt{3} \quad (7)$$

$$\varphi(p) = (1/\sqrt{\pi a}) (\sin ka/k) \quad (8)$$

$$k = p_0 - p = \langle p \rangle - p$$

将(8)式代入(3)式,所求得的动量不确定度即动量涨落是

$$\Delta p = \left[ (1/\pi a) \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2 ka dk \right]^{1/2} \quad (9)$$

这一结果明显是无限大。这里出现发散的原因是,虽然(8)式里的 $1/k$ 因子保证了 $\varphi(p)$ 是平方可积的,但在(3)式积分内的 $k^2$ 因子又增强了大动量的贡献,使得(9)式的积分在整条动量轴上都有等权而不收敛的贡献。

于是,与(6)式的波函数对应的有限的 $\Delta x$ 和无限的 $\Delta p$ 的乘积,使得不确定关系(1)式失去了任何积极的意义。这就是文献[3]要提出新定义分布宽度来代替 $\Delta x$ 和 $\Delta p$ 的主要依据。

### 2.2 Gauss型包迹波列

上节出现的发散性,是否来源于(6)式的波函数在 $x = \pm a$ 两个端点上的不连续性,为此,换用一种充分连续的波函数Gauss型包迹的波列

$$\psi(x) = ce^{-x^2/a^2 - ip_0 x} \quad (10)$$

式中 $c$ 为适当的归一化常数。由Gauss型分布的性质得

$$\Delta x = a/2 \quad (11)$$

再从(5)式算出

$$\varphi(p) = (ca/\sqrt{2}) e^{-a^2 k^2/4} \quad (12)$$

这种动量分布也是Gauss型的, 因此有

$$\Delta p = 1/a \quad (13)$$

最后得出

$$\Delta x \Delta p = \hbar/2 \quad (14)$$

亦即(1)式取等号情况下的“最小”不确定关系, 这是为大家所熟知的<sup>[2]</sup>。

在坐标空间和动量空间中同时呈现Gauss分布, 以及这种分布在两侧边缘上的良好的收敛性, 保证了以上两种涨落的乘积采取一切可能值当中的最小值。然而, 正是这种良好的收敛性忽略了动量分布高低起伏的细节, 只留下了(12)式所表示的动量空间里平淡的单峰结构。在文献[4]里所得到的Gauss型狭缝衍射问题的解, 亦表现出同样的性质。因此, 应当认为Gauss型分布所决定的边界条件, 只是一种很特别的情形, 在此模型的基础上得出的结论是没有普遍意义的。为了单独估计坐标空间里波函数边界条件对动量涨落的影响, 必须再考虑别的一些例子。

### 2.3 梯形包迹波列

为了避免阶跃式的边界条件, 选取一种其幅度(模)连续变化的波函数。它依次经历了一段长度为 $b$ 的线性增幅段, 一段长度为 $2a$ 的等幅段和一段长度亦为 $b$ 的线性减幅段这三个阶段, 亦即是一种等腰梯形包迹的波列

$$\phi(x) = \begin{cases} c e^{i p_0 x} & |x| \leq a \\ (c/b) (-|x| + a + b) e^{i p_0 x} & a \leq |x| \leq a + b \\ 0 & |x| \geq a + b \end{cases} \quad (15)$$

由(4)式定出的归一化常数是

$$c = [2(a+b/3)]^{-1/2} \quad (16)$$

为了便于观察, 把按照(5)式计算的 $\varphi(p)$ 分成等幅段的贡献 $A$ 以及增幅和减幅段的贡献 $B$ 两部分, 即

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a}^a \phi(x) e^{i p_0 x} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{c}{k} \sin k a \quad (17a)$$

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left( \int_{-a-b}^{-a} + \int_a^{a+b} \right) \phi(x) e^{i p_0 x} dx \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{c}{b} \left[ \frac{2}{k^2} \sin k \left( a + \frac{b}{2} \right) \sin k \frac{b}{2} - \frac{b}{k} \sin k a \right] \end{aligned} \quad (17b)$$

$$\varphi(p) = A + B = 2\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{c}{b} \frac{1}{k^2} \sin k \left( a + \frac{b}{2} \right) \sin k \frac{b}{2} \quad (17c)$$

可见, 当 $b=0$ 时, (17b)式的 $B=0$ , 这时(17a)式的 $A$ 就回到了(8)式、即矩形包迹波列的状态。而当 $b \neq 0$ 时, (17b)式里后面含 $1/k$ 因子的那一项恰好同(17a)式相抵

销, 结果使得(17c)式里的 $\varphi(p)$ 只剩下含 $1/k^2$ 因子的那一项。这样, 就必定会降低积分式(3)的发散度, 得到有限的动量涨落 $\Delta p$ 。

计算出的答案果然如此。运用定积分公式<sup>[6]</sup>

$$\int_0^{\infty} x^{-2} \sin^2 ax \sin^2 \beta x dx = \frac{\pi}{4} \min(\alpha, \beta) \quad (18)$$

得到的动量不确定度是

$$\Delta p = [b(a + b/3)]^{-1/2} \quad (19)$$

结果, 当 $b \neq 0$ , 即采取非阶跃的连续边界条件时, 动量涨落 $\Delta p$ 的确保持有限。另一方面, (15)式的空间分布显然具有有限的标准差 $\Delta x < a + b$ 。这样, 在不确定关系式(1)的左方就不再出现发散。

运用(2)式和(15)式的波函数可算出

$$\Delta x = \left[ (a^3 + a^2b + \frac{1}{2}ab^2 + \frac{1}{10}b^3) / (3a + b) \right]^{1/2} \quad (20)$$

$$\Delta x \Delta p = \left[ \hbar / (a + b/3) \right] \left[ (a^3 + a^2b + \frac{1}{2}ab^2 + \frac{1}{10}b^3) / 3b \right]^{1/2} \quad (21)$$

以下讨论两种极端情况:

①当取等幅段长度 $2a = 0$ , 即取底边长为 $2b$ 的等腰三角形包迹的波函数时, 有

$$\begin{aligned} \Delta x &= b/\sqrt{10}, \quad \Delta p = \sqrt{3}/b, \\ \Delta x \Delta p &= \sqrt{3/10} \hbar \approx 0.548 \hbar \end{aligned} \quad (22)$$

这一结果相当接近于Gauss型包迹波列的结果(14)式里的极小值。

②从(21)式容易看出, 当比值 $a/b$ 从零开始逐渐增大时, 乘积 $\Delta x \Delta p$ 的数值也随着不断增加, 无止地离开(22)式所示的最小值。而当 $a/b \gg 1$ 时, 有

$$\begin{aligned} \Delta x &\approx a/\sqrt{3}, \quad \Delta p \approx 1/\sqrt{ab}, \\ \Delta x \Delta p &\approx \sqrt{a/3b} \hbar \end{aligned} \quad (23)$$

于是, 当 $b/a \rightarrow 0$ 时, 乘积 $\Delta x \Delta p$ 按 $\sqrt{a/b}$ 趋于无限大。这样就回到了2.1节的结果。在文献[1]里, 也把这种情形当做是单缝衍射问题的初步描写。

当 $b \ll a$ 时, (23)式表示 $\Delta x \Delta p$ 强烈地依赖于波函数 $\psi(x)$ 的边界条件, 并且仅决定于等幅段同增(减)幅段长度的比值 $a/b$ 。因为,  $b = 0$ 时 $\psi(x)$ 在两端不连续的边界条件, 只是一种不现实的理想化情况; 这种结果意味着, 动量涨落无限大的不合理结果, 来源于所采用的不现实的边界条件。

## 2.4 双梯形包迹波列

为了进一步提供双缝衍射问题的一种简化模型, 我们再研究两个其中心相距 $2l$ 的相同的上述梯形包迹波列。

$$\psi(x) = \begin{cases} c e^{ip_0 x}, & l - a \leq |x| \leq l + a \\ (c/b)(|x| - l + a + b) e^{ip_0 x}, & l - a - b \leq |x| \leq l - a \\ (c/b)(-|x| + l + a + b) e^{ip_0 x}, & l + a \leq |x| \leq l + a + b \\ 0, & |x| \geq l + a + b, |x| \leq l - a - b \end{cases} \quad (24)$$

$$l > a + b, \quad c = (a + b/3)^{-1/2} / 2$$

计算得出

$$\begin{aligned}\varphi(p) &= 2 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{c}{b} \frac{1}{k^2} \sin k \frac{b}{2} \left[ \sin k \left( l + a + \frac{b}{2} \right) - \sin k \left( l - a - \frac{b}{2} \right) \right] \\ &= 4 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{c}{b} \frac{1}{k^2} \cos k l \sin k \left( a + \frac{b}{2} \right) \sin k \frac{b}{2}\end{aligned}\quad (25)$$

当取  $b \rightarrow 0$  时, (25) 式变成

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi a}} \frac{1}{k} \cos k l \sin k a \quad (26)$$

这就是具有尖锐边缘的双狭缝衍射问题的一种近似描写。不难看出, (26) 式同 (8) 式的  $\varphi(p)$  一样, 会导致无限大的动量涨落  $\Delta p$ 。

在  $b \neq 0$  时, 运用定积分公式 (18) 和<sup>[7]</sup>

$$\begin{aligned}\int_0^{\infty} x^{-2} \sin^2 \alpha x \sin \beta x \sin \gamma x \, dx &= \frac{\pi}{16} (|\beta - 2\alpha - \gamma| + |\beta + 2\alpha - \gamma| - 2|\beta - \gamma|) \\ \alpha, \beta, \gamma &> 0\end{aligned}\quad (27)$$

可求出动量涨落为

$$\Delta p = [b(a + b/3)]^{-1/2} \quad (28)$$

结果同 (19) 式完全一样。亦即是说, 重复布置同样形状的波列, 并不影响其动量涨落。

在  $l \gg a + b$ , 即两缝间的距离比缝的宽度大得多的情况下, 显然有

$$\Delta x \approx l \quad (29)$$

于是, 不确定关系变成

$$\Delta x \Delta p \approx l \hbar / \sqrt{b(a + b/3)} \quad (30)$$

当  $b \neq 0$  时, (28) 和 (30) 式都保持有限。但在这种情况下, (30) 式的右方取决于缝距对缝宽的关系, 不会等于  $\hbar$  的一个简单分数或倍数。例如, 当  $a = 0$ , 即取双三角形包迹波列时, 有

$$\begin{aligned}\Delta p &= \sqrt{3}/b \\ \Delta x \Delta p &\approx \sqrt{3} (l/b) \hbar\end{aligned}\quad (31)$$

式中因子  $l/b$  的出现, 正反映了这种空间分布的特点。又如, 当  $b \ll a$  时, 则有

$$\begin{aligned}\Delta p &\approx 1/\sqrt{ab} \\ \Delta x \Delta p &\approx (l/\sqrt{ab}) \hbar\end{aligned}\quad (32)$$

得到类似于 (23) 式的结果。

### 3 讨论

(1) 文献[1]和[3]的有限空间分布的状态会出现无限动量涨落的一些例子, 发散性都是同阶跃式边界条件相联系的。只要采取较平缓的连续边界条件, 就可以消除发散。对于物理上可能的情况, 例如宏观障碍物对微观粒子运动的影响等等, 使用理想的阶跃式边界条件未必总是合适的。有理由相信, 一旦采用了较为符合实际情况的空间边界条件, 就会得出较为合理的结果。因此, 文献[3]所提出的修改不确定度的定义, 用新规定的意义不够清楚的波函数宽度去代替它的建议, 是不必要的。

(2) 一般认为, 只在多相共存的相变区域, 才会出现无限大的涨落。所以, 在普通的稳定状态下, 无限涨落应当被认为是不合理的。

早在1902年, Gibbs就注意到刚性容器的阶跃式边界条件对气体压强涨落的影响。为了克服这一困难, 1936年Fowler曾经使用过非理想刚性的器壁来计算压强涨落。1955年, Weageland又用一种具体模型证明了, 当所设定的器壁连续边界条件趋向于阶跃式理想刚性条件时, 原来保持为有限的压强涨落就会趋于无限大<sup>[8]</sup>。这一结论同本文的结果相似。这种现象可能是具有一定的普遍意义的。

(3) 总之, 在平均值计算对统计分布的边缘行为并不敏感的情况下, 一些涨落的计算结果则强烈地依赖于分布函数的边界条件。这一问题还没有引起足够的注意。无限涨落的出现, 到底意味着需要修改涨落公式, 还是要舍弃一些常用的边界条件, 这场争论看来还将继续深入下去。

作者感谢郝柏林教授和谭天荣教授的有益讨论。

### 参 考 文 献

- 1 Beck G, Nussenzveig H M. *Nuovo Cimento*, 1958, 9: 1068
- 2 Heisenberg W (王正行等译). 量子论的物理原理. 北京: 科学出版社, 1983: 19~21
- 3 Uffink J B M, Hilgevoord J. *Phys Lett*, 1983, A95: 474; *Found Phys*, 1985, 15: 925; and in van der Merwe A *et al* eds. *Microphysical Reality and Quantum Formalism*, Kluwer Academic Press, 1988, 1: 91~114.
- 4 Feynman R P, Hibbs A R. *Quantum Mechanics and Path Integral*. McGraw-Hill, 1965: 47~57
- 5 关洪. 量子力学的基本概念. 北京: 高等教育出版社, 1990: 165~172
- 6 Gradshteyn I S, Ryzhik I M. *Tables of Integrals, Series and Products*. Academic Press, 1980: 451
- 7 Erdelyi *et al*. *Tables of Integral Transforms*. McGraw-Hill, 1954, I: 79.
- 8 Münster A. *Statistical Thermodynamics*, Vol. I, English ed. Springer-Verlag, 1969: 188~190; 谭天荣, 青岛大学学报, 1988, 1: 67

## Boundary Conditions, Infinite Fluctuation and Uncertainty Relation

Guan Hong\*

**Abstract** By means of a few examples of wave trains with finite space distributions, it is shown that the amount of momentum uncertainty,  $\Delta p$ , strongly depends on the boundary condition of  $\psi(x)$ . The momentum fluctuation  $\Delta p$  will tend to be infinite for a sharp boundary condition such as a step function. On the other hand,  $\Delta p$  becomes finite when a reasonable smooth boundary condition is used.

**Keywords** fluctuation, uncertainty

\* Department of Physics