关 洪 (中山大学物理系,广州 510275)

0413.1

摘要 讨论了在量子力学里建立动量算符的一些原则性问题 关键词 量子力学;动量;自伴算符 分类号 O413.1

近年来,《大学物理》等刊物对量子力学里的动量算符进行了一系列的讨论,其中包括了在一般坐标系里如何建立适当形式的动量算符^[1,2],以及在某些具体例子里计算粒子动量分布的困难^[3-6]等问题,都涉及到对量子力学的一些基本原理的理解.笔者觉得有必要在这些方面,谈谈几点原则性的意见.

1 不存在先验的"经典对应"

首先必须强调,量子力学的全部基本原理,都不是经典力学原理的推广或者改良;因为,两者是在截然不同的两种概念基础上建立起来的.在这个意义上,量子力学是完全独立于古老的经典物理学的、崭新的一门动力学理论.

因此,谁也不能先验地保证,把经典力学的任何命题,"对应"地移植到量子力学里来,一定会得到正确的结果.例如,用哈密顿算符里的库仑势去描写静电作用,再由薛定谔方程解出(在一定的程度上)与实际符合的有关原子能级和散射截面,才能证明在微观世界里,这一相互作用形式是恰当的.又如,尽管牛顿引力势的形式与库仑势完全一样,但长期以来,人们并不知道在量子力学里它是否合用.这是因为,从逻辑上讲,采用反平方力项的牛顿方程,可以解出宏观物体在引力场中的正确运动,并不能保证采取

相应势项的薛定谔方程,也一定能够正确地描写微观粒子在引力场中的运动.这毕竟是完全不同的两种理论方法.只是到了70年代中期,运用中子干涉术所进行的有关实验,才为那样的引力势在微观领域的应用,提供了第一个经验的依据.

至于我们所关心的动量,在经典物理学里,它是描写质点运动状态所不可缺少的.大家知道,牛顿运动方程是用动量的变化率来表示的;在分析力学里,动量也是构造哈密顿函数所必需的变量.可是,虽然在量子力学创立之初,坐标同动量之间的对易关系,起到过一种不可忽视的关键作用,但在后来概括出来的量子力学所必需的基本假设里,并没有哪一条规定系统的哈密顿算符里,必须含有动量这个算符.

我这样说有几层意思:第一,在量子力学处理某些问题时,可以把坐标和动量撤开.因为,在量子力学里,有相当一部分动力学变量,是不需要也不能够用坐标和动量表示的,亦即没有经典对应物的.例如,在粒子理论里讨论自旋、同位旋和 SU(3)等"内部对称性"时,系统的哈密顿算符里是用不着坐标和动量的.第二,在普通的问题里,也会遇到无法建立动量算符的情形,本文最后会谈到这方面的两个例子.第三,即使是氢原子问题,在运用从粒子理论移植过

第 18 巻

来的"超对称性"方法求解时,所写出的哈密顿量,亦未必含有动量等有"经典对应"的算符,总之,没有动量就没有牛顿力学,可是没有动量仍然可以有量子力学,不管是哪一种情况,动量不出现并不说明量子力学有什么缺陷,而更体现了它能够处理许多非经典动力学变量的无比活力.

2 经典对应规则的困难

其次,即使在有经典模仿的情况,用什么规则去实现这种对应,也还是一个问题.我们常常听到说,将经典力学里用坐标 x 和动量 p 表示的物理量,对应地过渡到量子力学的方法,是把它厄米化.例如,在量子力学里 xp 这个算符不是厄米的,就应当选取把它厄米化了的(xp + px)/2.这当然很好.

但事情并不总是那么简单.例如,算符 x^2p 的厄米化,可以有 $(x^2p+px^2)/2$ 和 xpx两种形式.又如,同经典力学里的 x^2p^2 相对应的厄米算符,亦可以有 $(x^2p^2+p^2x^2)/2$ 、(xpxp+pxpx)/2和 $xp^2x(=px^2p)$ 等三种形式.不难看出,x和p的幂次越高,可能的选择就越多.那么,取哪一种量子力学的厄米算符来同经典量相对应呢?

历史上,冯·诺意曼、狄拉克、外尔等几位著名的大师,在量子力学创立早期,以及后来的若干作者,分别提出过一些选择同经典动力学变量相对应的量子力学算符的不同规则.根据文献[7]的介绍,由这几种对应规则产生的算符,或者缺乏唯一性,或者在运算的时候,会出现同量子力学的通常解释相背高的古怪结果.总而言之,在这方面还没有见到一种完善的办法.由此可见,把量子力学看做是经典力学的推广的主张,即使在两者确有相仿之处的范围内,彻底实行起来也是有困难的.也许这正表现了,量子力学和经典力学这两种理论,是很难完全协调到一起的.

其实,在我们看来,这个困难只是一种纯粹理论上的困难.一来我们未必会遇到很多同时含有 x-和 p 的高幂次量;二来在微观物理学里

应当使用怎么样的算符,也许不必采取从经典力学过渡过来的办法;而更重要的是,纯理论上的可能性,如果不同实际观察的现实性相结合的话,很可能只是一种"纸上谈兵"的游戏罢了.

针对这个问题,维格纳曾经在题为"量子力学的解释"的一份讲义里指出:"第一,找到对一个算符的测量结果的一种数学表达式这种可能做,则是地并不保证这种测量本身的可能性.第一定,[量子力学]理论假定测量是对应于算符的,而不是对应于经典量的.起初,做出过对应经典量来定义算符的尝试.而现今的理论并不致力于这样的协调."[8]的确,早就不必把经典对应方法当做唯一合理和有效的方法了.

3 算符自伴性要求的意义

文献[2]的作者,在承认了用该文式(1)(即下文里的式(1))定义的动量算符"的某些分量不是自伴的"之后,又在为自己辩护时反问道:"从什么样的物理考虑出发,提出了算符应是厄米(或自伴)算符的要求?"和"要求……算符为自伴算符是不是有点缺乏根据?"我们现在就来讲一讲这种"考虑"和"根据".

众所周知,量子力学的数学程式的物理解释,即这套理论体系同经验事实联系的核心,是被函数的概率诠释.这一诠释的一种比较普遍的形式,简单讲起来是:"以一个算符的完备本征函数组为基,将任意波函数进行展开,那么相应于其中某一本征函数的展开系数的绝对值平方,等于在该波函数描写的状态上测量那个算符所描写的动力学变量时,观察值取相应本值的概率."在这里,明确要求描写动力学变量的情况,必须具有完备的本征函数组,否则就不能做这种展开.而从泛函分析的"谱定理"知道,只有自伴算符,才能够有完备的本征函数组.这就是量子力学里要求使用自伴算符来描写动力学变量的依据.

以上的陈述并不新鲜,不过也许会认为太 数学化而难于理解.下面试举一个别的方面的 例子来详细说明.大家知道,人眼的颜色视觉, 决定于所看到的光的谱分布.用分光光度计之 类的仪器去满量一种样品光,就可以了解到它在可见光范围内的这种谐分布函数.这种分解是完备的.即是说,它告诉了我们,样品光所含有的每一种单色光的成分.这种连续函数的维数,在数学上是无限的,在物理学上虽然受到分辨率的限制,相信至少也有好几百、

但是,人的颜色视觉只有三维,即所谓"三原色"的三个自由度,所以,颜色视觉是对无限(或近似为无限)自由度的谐函数的一种极不完备的展开或分解^[9].因此,正像许多形状不同的三维物体,都会在一个二维平面上留下同样的投影一样,人眼看到的一种颜色,可以对应着很多(原则上是无限多)种不同的谐函数,这就是"同色异谱"现象,这些不同的谐,当然具有在连续的单色光范围上的不同分布.反过来说,在一般情况下,我们就无法确定人眼看到的一种颜色,含有多少成分的任何一种单色光!

回到量子力学,不难明白,如果一个算符没有完备的本征函数组,亦即没有包含足够的自由度,那么,就会说不出测量该算符所描写的动力学变量时,其观察值取其某一本征值的概率是多大.这样一来,作为量子力学理论同经验事实联系的基础的、波函数的概率诠释就会失效,这在物理上是绝对不可以接受的.

4 不存在半径方向的动量算符

从数学里我们知道,自伴算符一定是厄米的,而厄米算符不一定是自伴的.可是,自伴算符同厄米算符两者的区别,不是用几句话就可以讲清楚的.于是,物理学家们通常不理会它们之间的差别,只讲厄米算符而不讲自伴算符,并且在教科书里说,厄米算符的本征函数组必定是完备的.其实这种讲法在数学上是不严格的.虽然在绝大多数场合下,这种马虎的做法也不一定会出什么错,但在某些特别的问题上,就会产生出一些误解和误导^[5,10].

例如,在狄拉克的(量子力学原理)里 $^{[11]}$, 提出说满足对易式 $[r,p]=i\hbar$ 的算符

$$p_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \tag{1}$$

"不是实的",第一次给出了一个替代的"径向动量"算符

$$\bar{p}_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \tag{2}$$

并且称后者"是实的以及是真正与 r 共轭的动量". 他所说的"实的", 即是具有实的本征值的 厄米算符的意思.

然而,数学家告诉我们,用式(2)表示的算符 \bar{p}_r ,虽然是厄米的,但却不是自伴的.而且,在 $0 < r < \infty$ 的半轴上,不可能建立形式为一 $i\hbar\partial/\partial r$ 之类的任何自伴的"径向动量"算符.因此,狄拉克的定义式(2),早就受到了不止一次指名的否定[12].

现在,关于量子力学里的"径向动量",文献 [2]主张的是由式(1)定义的一个非厄米的算符;文献[1]主张的是由式(2)定义的一个虽则 厄米而非自伴的算符.在方法上,两者都坚持同 经典力学的对应;在结果上,两者都不符合量子 力学的要求.

实际上,在这个问题上,文献[1]和[2]所追求的,可能是在现实中并不存在的东西.这是因为,量子力学里自由粒子的球面波波函数,描写的是从一个中心点出发,向四面八方自由散开的粒子;它在半径方向上的概率密度和概率流密度并不存在什么不变性,也许这就是不可能在这个维度上建立动量算符的原因.

即使在平直坐标系里,也会遇到无法建立动量算符的情况.在这方面的一个已经受到注意的例子,就是关于一维无限深方势阱问题,在采取波函数两端等于零的边界条件时,基态(或其他状态)粒子动量分布的争论.在这种情况下,通常用来描写动量的算符,也只是厄米的而不是自伴的,因而不能用来描写任何动力学变量.于是,在这种情况下,动量并不存在.针对文献[4](以及后来的文献[6])由此问题面提出的"关于量子力学基础的一个质疑",文献[5]已经做了专门的回答,就不在这里重复了.

5 参考文献

1 梁灿彬,正则动量算符之争,大学物理,1994,13(4):1~5,

第18条

- 8;在此文所引用的参考文献里,可以找到国内较早的儿篇 讨论文章的出处。
- 2 徐湛. 也谈正则动量算符之争. 大学物理,1998,17(5);28 ~29.47
- 3 "关于无限深势阱内粒子动量概率分布的讨论". 大学物理,1994,13(7):17~23 所载两篇文章和"编者的话".
- 4 陶宗英、关于量子力学基础的一个质疑、光子学报,1997, 26(9):770~771
- 5 关拱,也谈量子力学的基础、光子学报,1998,27(4):309~ 311
- 6 陶宗英. 也读一维无限深势阱内粒子(基态)的动量概率分布. 大学物理, 1998, 17(7): 19~21; "编者的话", 同期, 21~22, 18
- 7 Shewell J R. On the formation of quantum mechanical operators. Am J Phys, 1959,27(1):16~21

- 8 Wigner E P. Interpretation of quantum mechanics, in quantum theory and measurement. Wheeler J A, Zurek W H ed. Princeton; Princeton U P,1983. 275~276
- 9 关洪,物理学史选讲,北京:高等教育出版社,1994.143~ 154
- 11 Dirac P A M. The principles of quantum mechanics. 4th ed. Oxford, 1958.153
- 12 例如: Domingos J M, Caldeira M H. Self Adjiontness of Momentum Operators in Generalized Coordinates. Found Phys, 1984, 14(2):147~154; 中译文:广义坐标中动量算符的自伴性、大学物理, 1988, 7(2):12~15, 以及其中引用的一些参考文献。

ON THE MOMENTUM OPERATOR IN QUANTUM MECHANICS

Guan Hong

(Dapartment of Physics, Zhongshan University, Guangahou, 510275, China)

Abstract Some principles on establishing the momentum operator in quantum mechanics are discussed.

Key words quantum mechanics; momentum; self-adjiont operator

新书推荐

物理演示实验是物理教学中不可缺少的辅助教学手段.物理演示实验使学生加深对讲授内容的理解、巩固记忆、激发兴趣、诱导思考、纠正错误观念、建立正确图像、开阔眼界等方面,起着很好的作用,因而深受广大师生的普遍欢迎.在当前面向 21 世纪数学内容和课程体系改革方面,物理演示实验也将起到积极的推动作用.

1982 年,北京大学和南京大学物理演示实验室合编、由高等教育出版社出版的《物理演示实验》一书早已绝版.近年来,全国各地高校在发展物理演示实验方面做了大量工作.为了适应物理教学改革的需要,集中大家的发明创造,吉林大学王秉超教授在全国各高校广泛征稿的基础上,经过筛选、编辑、加工,由高等教育出版社出版了(普通物理演示实验新编》一书,这是物理教学事业上的一件大好事.

(普通物理演示实验新编)一书收入力学、分子物理和热学、电磁学、光学部分近年来新研制的 91 个演示实验,其中大部分是配合课堂数学的演示实验,也有少部分是用于课后实习和走廊陈列的实验.每个实验的演示目的、装置与原理、演示现象和操作以及讨论,都交待得细致、具体和实用;有的实验有多种演示方法.因此该书是演示实验工作者以及任课数师的很好的数学参考书.我们相信它一定会对我国高校的物理演示实验工作以及物理数学起到积极的推动作用.

该书为大 32 开本,453 页,37 万字,定价 14.10元,可到吉林大学物理系购买,邮购另加 15%邮寄费、联系人;吉林省长春市吉林大学物理系樂浩(邮编;130023).

(北京大学物理系 陈熙谋)