第 36 卷　第 2 期　　西南师范大学学报(自然科学版)　　2011 年 4 月
Vol. 36　No. 2　　Journal of Southwest China Normal University (Natural Science Edition)　　Apr.　2011

文章编号: 1000-5471(2011)02-0182-04

单缝衍射实验和不确定度关系的量子力学描述[①]

张昌芳，　杨晓培，　王　洋

装甲兵工程学院 基础部，北京 100072

摘要： 基于 Marcella 对单缝衍射的量子力学描述，利用电子通过单缝时的等概率分布假设，得到其在坐标空间的波函数，通过傅里叶变换求得其动量空间的波函数．重新考察电子在单缝衍射实验中位置和动量的不确定度，得到 $\Delta x = \frac{a}{2\sqrt{3}}$, $\Delta p_x \geqslant \frac{2\hbar}{a}$, $\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{\sqrt{3}}$.

关　键　词： 单缝衍射实验；不确定度关系；量子力学

中图分类号： O413.1　　**文献标志码：** A

大多数大学物理教材以及期刊文章对于位置-动量不确定度关系式 $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h$ 的诠释及其证明基本都采用电子(或分子)的单缝衍射实验来说明[1-2]．如图 1 所示，一束电子沿 oy 方向射向 AB 屏上的狭缝，缝宽为 a．通过狭缝后，在照相底片 CD 上形成衍射图样．其中，φ 是第一级暗纹对应的衍射角．

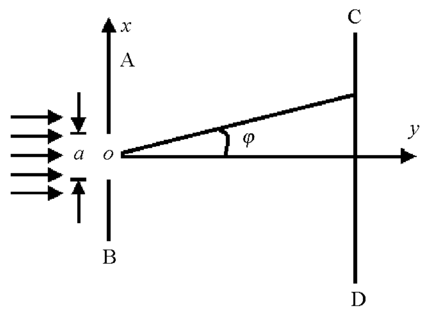

图 1　电子的单缝衍射

考虑一个电子，它在通过狭缝时，在 ox 方向的位置坐标有一个不确定范围：$\Delta x = a$．假设通过狭缝后电子动量是 p，则落在第一级暗纹处的电子，其动量在 x 轴正向的分量为 $p\sin\varphi$，即：落在中央明纹范围内的电子，动量在 x 轴方向的分量介于 0 与 $p\sin\varphi$ 之间，若将其它级次的衍射明纹也考虑在内，则其动量分量的不确定范围为：$\Delta p_x \geqslant p\sin\varphi$．由此得到

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant a \cdot p\sin\varphi$$

因为 $\sin\varphi = \lambda/a$，$p = h/\lambda$，所以

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant h \tag{1}$$

用单缝衍射实验来说明不确定度关系，尽管比较形象，便于学生理解，但却存在以下问题：首先，错误地理解了不确定度关系式 $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h$ 中"Δ"符号的含义，这里的"Δ"符号被错误地认为是随机变量 x 和 p_x 的取值范围(domain size)或偏差(deviation)，而非量子力学中所定义的方均根偏差(root-mean-square deviation)，此处概念的偷换很容易误导初学者[3]．其次，对于粒子和缝的量子力学作用以及与之相应的不确定度关系，用经典波动光学的理论来诠释是不合适的．还有很重要的一点是，学生在此过程中并没有获得用量子力学方法来分析具有量子特性的物理问题的技巧．因此，要正确地分析电子的单缝衍射实验，必须借助于量子力学理论．

本文基于两点：①Δ 符号的定义为"方均根偏差"或"标准偏差"；②Marcella 对电子单缝衍射的量子力

① 收稿日期：2010-04-12

作者简介：张昌芳(1971-)，女，江苏盐城人，讲师，主要从事物理学史的研究．

学描述[4]．在这个基础上用量子力学理论对电子单缝衍射实验及其位置和动量的不确定度和不确定度关系进行重新说明．

根据 Marcella 的量子力学描述，量子力学是关于观察量及其测量的理论，根据量子力学的波恩概率假设，当微观体系处于一个给定的初态，其观察量的概率分布是唯一确定的．

电子的单缝衍射实验装置(图 1)是一个位置测量装置，单缝决定粒子在 x 方向的位置，电子通过单缝时将会处于相应的一个位置状态 $|\psi(x)>$．由于位置算符和动量算符是不对易的，因此电子通过单缝时在 x 方向的动量分量总是存在不确定性，并以一系列连续的本征值 $p_x = p\sin\varphi(-\pi/2 \leqslant \varphi \leqslant \pi/2)$ 衍射，其本征态为 $|p_x>$．通过计算电子以动量 $p_x = p\sin\varphi$ 被单缝装置衍射的概率密度 $|<p_x|\psi>|^2$，来确定电子与单缝的干涉情况，进而获得动量和位置的不确定度的具体值．

文献[5-6]对类似问题也有研究，得出 $\Delta p = \infty$，进而认为 $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h$ 不能恰当地表述不确定度关系．本文认为，在动量的不确定度 Δp 的表达式中，p_x 有上限，而且 $p_x = \dfrac{2\pi\hbar}{a}$ 是一个合理的取值，所以能够得到恰当的不确定度关系．

1　坐标空间和动量空间的波函数

设电子出现在单缝的各个位置的概率相等[4-6]，即概率密度函数 $\rho(x)$ 为定值，令 $\rho(x) = c$，以单缝中心位置为坐标原点，向上为 x 轴正向，建立如图 1 所示的坐标系．根据归一化条件 $\int_{-a/2}^{a/2}\rho(x)\mathrm{d}x = 1$，可得 $\rho(x) = \dfrac{1}{a}$．对于一个通过狭缝的电子，它在该坐标空间中的波函数可表示为：

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < -a/2 \\ \dfrac{1}{\sqrt{a}} & -a/2 \leqslant x \leqslant a/2 \\ 0 & x > a/2 \end{cases} \tag{2}$$

根据傅里叶变换，如果存在一个归一化的密度分布函数 $f(x)$，则必有函数 $F(y)$ 满足下面关系[7]：

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}F(y)\exp(-ixy)\mathrm{d}y \qquad F(y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)\exp(ixy)\mathrm{d}x \tag{3}$$

这两个函数称为傅里叶变换对．

因此，利用傅里叶变换，由坐标空间的波函数((2)式)得到电子通过单缝时在动量空间的归一化波函数为

$$\psi(p_x) = \int_{-a/2}^{a/2}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(-\frac{ip_x x}{\hbar}\right)\frac{1}{\sqrt{a}}\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{2\hbar}{\pi a}}\,\frac{\sin\left(\dfrac{p_x a}{2\hbar}\right)}{p_x} \tag{4}$$

根据量子力学，电子通过单缝时，不同动量的电子出现的概率为 $|\psi(p_x)|^2$．取狭缝的宽度为 $a = a_0$ ($a_0 = 0.052\ 9$ nm，是玻尔半径)，可以得到 $|\psi(p_x)|^2$ 随 p_x 变化的图像(图 2)，其中 p_x 的单位是 $2\pi\hbar/a$．

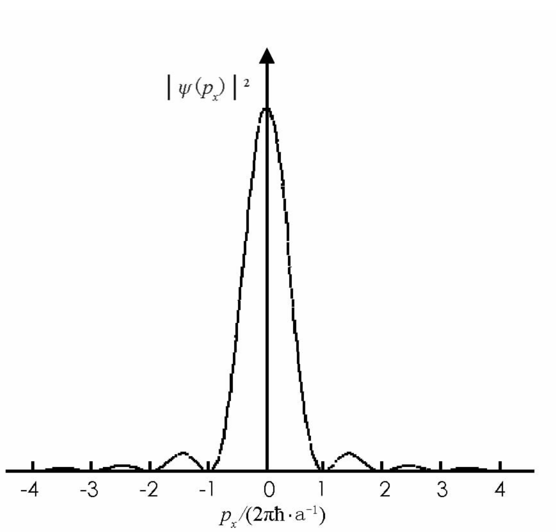

图 2　$|\psi(p_x)|^2$ 随 p_x 变化的关系曲线

2　位置和动量的不确定度和不确定度关系

1929 年，文献[8]给出在一般情况下怎样从对易关系求出不确定度关系式的方法，并明确 Δ 为方均根偏差，

其定义为：

$$(\Delta A)^2 = \int \psi^* (A - A_0)^2 \psi \mathrm{d}\tau \tag{5}$$

其中：$A_0 = \int \psi^* A \psi \mathrm{d}\tau$. 这正是量子物理对不确定度的定义所普遍采用的形式.

利用(2)、(4) 式给出的电子在坐标空间和动量空间的波函数，可得：

$$x_0 = \int_{-a/2}^{a/2} \psi^*(x) x \psi(x) \mathrm{d}x = 0 \qquad p_{x_0} = \int_{-p_x}^{p_x} \psi^*(p_x) p_x \psi^*(p_x) \mathrm{d}p_x = 0$$

进而利用(5) 式得：

$$(\Delta x)^2 = \int_{-a/2}^{a/2} \psi^*(x)(x-0)^2 \psi(x) \mathrm{d}x = \frac{a^2}{12} \tag{6}$$

$$(\Delta p_x)^2 = \int_{-p_x}^{p_x} \psi^*(p_x)(p_x - 0)^2 \psi(p_x) \mathrm{d}p_x = \frac{2\hbar p_x}{\pi a} + \frac{2\hbar^2}{\pi a^2} \sin \frac{p_x a}{\hbar} \tag{7}$$

所以：

$$\Delta x = \frac{a}{2\sqrt{3}} \tag{8}$$

$$\Delta p_x = \sqrt{\frac{2\hbar p_x}{\pi a} + \frac{2\hbar^2}{\pi a^2} \sin \frac{p_x a}{\hbar}} \tag{9}$$

由(4) 式可知，当$\frac{p_x a}{2\hbar} = \pm n\pi$，即 $p_x = \pm \frac{2n\pi\hbar}{a}$，$n = 1, 2, 3, \cdots$，$\left[\frac{p_x}{2\pi\hbar}\right]$时，在动量空间电子出现的概率为 0，对应图 2 中各级暗纹处.

因为电子有 95% 的概率落在中央明纹内[5]，所以用它来衡量不确定度是合理的. 取 $n = 1$，对应的是图 2 中第一级暗纹处，这时 $p_x = \frac{2\pi\hbar}{a}$，从而可以得到

$$\Delta p_x \geqslant \frac{2\hbar}{a} \tag{10}$$

所以，用电子的单缝衍射来说明的不确定关系的形式应该是

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{\sqrt{3}} \tag{11}$$

3 结　　论

本文基于 Marcella 对单缝衍射的量子力学描述以及 Δ 符号的正确定义，获得了电子通过单缝时在坐标空间和动量空间的波函数，重新考察了在单缝衍射实验中位置和动量的不确定度的精确下界.

粒子和缝的量子力学作用以及与之相应的不确定度关系，是不能用经典波动光学的理论来诠释位置-动量不确定度关系 $\Delta x \cdot \Delta P_x \approx h$ 的，虽然，这种传统方法形象直观. 在实践中，常用不确定度关系式 $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h$ 来估算一些物理量的数量级. 诚然，关系式 $\Delta x \cdot \Delta p_x \approx h$，$\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \frac{\hbar}{2}$ 和 $\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \hbar/\sqrt{3}$ 对数量级的估算不会带来很大的差别，然而这个“≈”往往掩盖了某些物理概念的本质. 例如，作为不确定性原理的典型案例的 $\Delta x \cdot \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$，就只有波函数为高斯函数(谐振子的基态 $\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$) 时才成立.

最后，建议在利用单缝衍射实验讲授不确定度关系时，首先，应讲明不确定度的概念和物理内涵；其次，应介绍求得不确定度的技术线路；最后，在给出 $\Delta x \cdot \Delta p_x \geqslant \hbar/\sqrt{3}$ 后，应说明用量子力学理论证明的严格结果，并强调不确定度关系的物理意义，从而避免误导.

致谢：非常感谢许世蒙教授在澄清方均根偏差和标准偏差概念方面给予的无私帮助，以及刘家福教授对本文的修改提出的宝贵建议.

参考文献：

[1] FEYNMAN R P. Feynman Lectures on Physics(Vol. 3) [M]. NewYork：I Addison Wesly，2004.

[2] OLAF N，MARKUS A，ANTON Z. Experimental Verification of the Heisenberg Uncertainty Principle for Hot Fullerene molecules [J]. Phys Rev A，2002，65：1－4.

[3] 张昌芳. 用单缝衍射实验诠释不确定度关系的不妥之处 [J]. 西南师范大学学报：自然科学版，2010，35(4)：216－219.

[4] MACELLA T V. Quantum Interference with Slits [J]. Eur J phys，2002，23：615－621.

[5] HILGEVOORD J，UFFINK J B M. Uncertainty Principle and Uncertainty Relations [J]. Foundation of Physics，1985，15：925－944.

[6] JORGE S R. Position-Momentum Entropic Uncertainty Relation and Complementarity in Single-Slit and Double-Slit Experiments [J]. Phys Rev A，1998，57(3)：1519－1525.

[7] Fowrier Transforms and Uncertainty Relations [EB/OL]. [2010－01－22]. http：//www. mathpages. com/home/kmath488/kmath488. htm.

[8] ROERTSON H P. The Uncertainty Principle [J]. Phys Rev，1929，34：163－164.

The Quantum Mechanics Description of Single-Silt Diffraction and the Uncertainty Relation

ZHANG Chang-fang，　YANG Xiao-pei，　WANG　Yang

Department of Basic，the Academy of Armored Forces Engineering，Beijing 10072

Abstract：Following Marcella's quantum mechanics description of the single-slit diffraction，the coordinate-space and momentum-space wave functions for an electron passing through the single-slit are derived，and then，the uncertainties of the position and momentum are reconsidered.

Key words：single-slit diffraction experiment；the uncertainty relation；quantum mechanics

责任编辑　潘春燕