

论薛定谔方程建立过程中的理论直觉判据

田 真

(暨南大学物理系 广州 邮编 510632)

摘 要 本文通过回顾分析薛定谔导出著名的定态薛定谔方程的过程,剖视理论直觉判据在科学发现中的作用。特别是通过理论直觉判据在上述方程的实际导出中非逻辑成分和逻辑成分的不同影响,以及与矩阵力学形式导出背景的比较,对理论直觉判据在新理论建立过程中的正负面影响作出分析。

关键词 物质波 理论直觉

中图分类号 O413.1

物理学在各个历史时期都建立起形式各异理论直觉判据,所谓理论直觉判据即物理学家在一定的理论形态和理论经验中形成的关于理论形式或结构关系的直觉判据。如今天物理学中公认的对称性、不变性等等。这些理论直觉判据常常隐含着已有理论的形式特点和未来发展的方向性表征。在物理学的突破性发展时期,这些理论直觉判据作为旧理论向新理论过渡的桥梁,又作为研究者试探未知领域的并不一定十全十美的心理支持,引导物理学家完成非逻辑的思维跳跃,获得划时代意义的发现。在心理层面和逻辑关系的结合中,回顾薛定谔方程的建立过程,将有助于我们更好地理解如何从理论直觉判据的功能把握理论发展的脉搏。

与其它物理基本方程的导出机制相区别,薛定谔方程是无法完全逻辑地从当时已由实验验证的理论前提或薛定谔本人所接受的理则导出的。无论是德布罗意波的理论表述和实验结果,还是薛定谔方程发明者本人对波动图象的倚重,都无法保证薛定谔方程成为必然的逻辑结果,这一突出特点,使得薛定谔方程的导出过程具有独特的研究价值。可从相对性原理和光速不变原理逻辑地导出狭义相对论的洛仑兹变换。但是只包含量子客体的体系,没有特有的动力学标志,势必完全不可能建立起任何逻辑上独立的力学。因此作为反映动力学规律的薛定谔方程,当然不存在这样一条逻辑的必然通道。在后者的建立过程中,非逻辑的理论直觉判据自始至终发挥着关键作用。

当薛定谔着手寻找波动方程的时候,关于量子现象的描述,已形成两种不同的研究方式。一种是以玻尔和海森伯为代表的“唯像”的研究方式,主张直接从现象之间的数量关系中寻找规律性,他们不强调理论解释的自然性,更注重理论结果对现象的直接有效性。而另一种研究方式则更富有经典气质,他们注重理论解释的自然性,力图从一般性的原则出发,自然而然地引入描述量子过程的各种理论机制。薛定谔就属于后一类的物理学家。

收稿日期:1996-12-30

上述两种研究方式在量子力学建立过程中都发挥了重要作用。玻尔根据氢原子光谱的不连续性,首先把能量的量子性引进关于核外电子轨道的限定中来。玻尔假设,只有当氢原子核外电子的能量 E 满足^[1]

$$E = n \cdot \frac{1}{2} h\gamma \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

时,才会形成稳定的轨道。根据这一假设计算出的氢原子频谱与实验值完全吻合。

德布罗意的对玻尔“强加”给氢原子核外电子轨道的限制条件,从更为一般的原则出发,寻求问题的解决方案。德布罗意分析光的量子性描述,认为对实物粒子的认识,和对光的本质的认识,发生了相反的片面性,忽视了实物粒子的波动性,提出物质波的假设,把光子的能量 E 和动量 P 的公式

$$E = h\gamma \quad P = \frac{h\gamma}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

推广到普通实物粒子,得出具有质量 m 和运动速度 v 的粒子的波动描述,即提出著名的德布罗意关系:

$$P = \frac{h}{\lambda_m} = mv \quad \lambda_m = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

这样,可以把玻尔的核外电子轨道条件理论解释为,当核外电子圆形轨道的长度恰为 λ_m 的整数倍时,该轨道上可以形成德布罗意驻波的结果。其推导如下^[1]

$$n\lambda_m = 2\pi r \quad n \frac{h}{mv} = 2\pi r \quad nh = 2\pi r mv$$

两边乘以 r 除以 2

$$\frac{mv2\pi r^2}{2} = n \cdot \frac{1}{2} h\gamma$$

由 $2\pi r\gamma = v$ 得

$$\frac{1}{2} mv^2 = E = n \cdot \frac{1}{2} h\gamma$$

上式右边即为玻尔核外电子轨道条件,这样,玻尔条件可以从 $n\lambda_m = 2\pi r$ 这一具有明确驻波意义的前提自然推出。德布罗意波的存在于 1927 年得到实验的证实。

薛定谔在 1925 年得知上述结果后,开始着手把德布罗意的成果推广为一般性的波动力学形式。德布罗意的工作在当时给人留下深刻印象之处就在于它不仅符合关于光的研究进展的一般途径,揭示出实物粒子波动性的本质,从而隐含着为量子过程提供更为自然的解释,乃至建立系统的量子理论的可能。但一方面,在核外电子轨道条件的解释中,仍保留圆形轨道的概念,而根据已有的波动机制,在没有任何特殊空间限制的情形中,很难想象一个波沿送一条线状的轨道传播。在德布罗意工作的基础上,薛定谔以更为确切的理论直觉判据为前导,他继承哈密顿、德布罗意把经典力学比拟于几何光学,而把要寻找的波动动力学比拟于波动光学的思想。在几何光学中,所讨论的问题限于光在与其波长相比足够大的物体中传播的规律,诸如透镜成像、小孔成像问题;由于德布罗意的波长与物理客体的质量成反比,在宏观条件下,波长远小于物体的尺度,因此类似于几何光学的情形,其波动特征可以不加考虑。当光的波长在与其相比为同一数量级的物体中传播时,光的波动特性必须予以考虑,如在光栅衍射等情况中就是如此。与此相对应,在微观条件下,德布罗意波的波长不能忽略,必

须以波动机制作为描述方式。结合这一考虑,薛定谔坚信象征性的比例式^[2]。

经典力学:波动力学=几何光学:波动光学显然,在这一类比思想中,包含着两种十分明确的理论直觉判据,一是经典力学中的物理客体的确定轨道和边界分明的刚体性与几何光学中光路的确定性和光像的边界性都只不过是同类的近似描述,它们的确切描述应该由波动图像给出;二是,粒子图像可以完全由波动图像代替。事后的研究表明,这后一点不能成立,微观物理行为具有波粒二象性,而非单纯的波动性。但薛定谔的上述理论直觉却把他引导到卓有成效的研究上来。

在薛定谔最初的理论设想中^{[1]~[4]},微观粒子被设想成德布罗意波在空间传播的结果。在原子情形中,核外电子则被理解为受有正X库仑场约束的驻波的结果。这样,核外电子被理解为围绕原子核弥漫的电子云,在稳定的驻波区域,电子云的密度最大,在其它区域,电子云密度为零。这些驻波区域对应于玻尔的原子轨道,只是现在线状的轨道概念被放弃,电子也不作为边界分明的粒子,而只是集中于某一区域的气状存在物。对于远离约束源的自由粒子,观测结果显示出突出的粒子图像,而不是一团边界模糊的电子气,为此,薛定谔曾建议,这些粒子由波矢在某一范围内有所不同的德布罗意波叠加成波色束构成。但这显然是行不通的。因为容易证明,这样的波色将很快在空间中膨胀并消失在无穷大的空间中,从而导致粒子图象的丧失。至此,可以清楚地看到,在薛定谔的基本构想中,包含着许多合理因素的同时,也掺杂着不那么自圆其说的瑕疵。在这里,最值得我们注意的是,这些并不自圆其说的部分并没有影响薛定谔导出正确的微分方程。让我们通过回顾他导出这一方程的某些细节,对此作一分析。^[5]

薛定谔从一开始就采用完整的经典波动方程作为他寻找基本微分方程的形式起点,这反映出薛定谔较彻底的波动解释意向。经典波动方程的形式为

$$\nabla^2 u - \frac{1}{a^2} \frac{\partial u}{\partial t} = 0$$

式中,在经典情形下,u为传播媒介的位移量,即波的振动幅度的变化,a为波动传播速度。考虑德布罗意波的性质,介质位移量的概念显然不合适,只宜把波的振动幅度的概念保留。对于a,也不能直接看作是德布罗意单色波的波速,因为这无法把粒子图象的要求考虑在内,因此,a的确定应兼顾粒子和波动两种性质,并应考虑经典力学与波动力学的联系。薛定谔唯象地寻找到了这种过渡性联系。他以雅克比形式的哈密顿原理与费马原理在数学形式上完全等价为前提,考虑以频率和相速略有不同的光信号构成的波色等同于某一粒子的运动,通过波色的群速度得到

$$a = \frac{E}{\sqrt{2m(E-U)}}$$

然后,把上述结果推广到包括以小于光速传播的德布罗意波的一般情形,再结合德布罗意波的性质,考虑波动方程u的解的可能形式,最后得到

$$\nabla^2 \Psi + \frac{8\pi^2 m}{h} (E - U) \Psi = 0$$

这就是著名的定态薛定谔方程。

薛定谔在解释这一方程时,把电子云的思想运用到波函数 Ψ 上,他把电子云的电荷密度 ρ 误解为

$$\rho = \Psi \bar{\Psi}$$

但按照这一解释,核外电子以密度 ρ 弥漫于某一驻波区域,而总电荷量恰为电子电量 e ,他还由此成功导出了关于原子能级受电场扰动的塞曼效应和受磁场扰动的斯塔克效应的实验结果。把有的库仑场的表达式代入定态薛定谔方程的 U 中还可求得氢原子的玻尔电子轨道条件等结果,虽然薛定谔关于带电电子云的设想作为一般性结论是错误的,但它并不影响上述正确结果的导出。后来波恩才给出了关于 $\Psi\Psi^*$ 的几率解释。

在薛定谔的上述推导中,经典波动方程只是在形式意义上被借用,经典意义上的波速 α 通过哈密顿原理和费马原理之间的形式互通性过渡为在极限速度光速条件下可同时容纳波动和粒子图象的另一种注释。而媒质的位移量 u 则被更换为可容纳德布罗意波动图象的波函数 Ψ 。经过这一改造后,经典波动方程的含义已面目全非。从这一改造的内容可以明显看到,经典波动方程所提供的是联接粒子图象和波动图象的纯粹数学形式。正因为如此,尽管薛定谔在诸如粒子图象的波动说明和波函数意义的分析等方面不尽人意,却不影响他正确地导出这一方程。因为,这一方程所真正包含的内容是就波动和粒子两种图像之间的形式关系作出的,而不是就波动图像本身或粒子图像本身作出的。推导过程中引入哈密顿原理与费马原理的形式等价性,作为波动力学方程的导出条件,就清楚不过地表明这一点。在这里运用于刚性粒子经典描述的哈密顿原理和运用于弥漫的波动描述的费马原理通过数学形式的等价性为容纳波动和粒子两种图像提供了共同的形式框架。这一形式框架的建立就直接得益于把经典力学与波动力学这间的关系类比于几何光学与波动光学之间的关系所引入的理论直觉判据。

值得一提的是,几乎与薛定谔发现他的微分方程同时,海森伯稍先于薛定谔发现了可以有效刻画微观粒子状态的矩阵形式的描述。后来,薛定谔证明海森伯的理论实质上与薛定谔理论只差了一个变换,是两种不同的表达形式,两种理论是等价的。但海森伯的描述是通过直接考虑在核外电子能级跃迁过程中,各个可观测量的关系,再给合微观情形向宏观情形的过渡特征,唯象地作出的。这一理论可以从结果上准确刻划出相应的实验结果。但是,由于当时人们对矩阵方程的了解,远不如微分方程那么熟悉,因而薛定谔方程则更容易掌握,立即被广泛采用,并受到广大物理学家的赞扬。新理论和旧理论之间的继承性,最初正是通过薛定谔的理论直觉判据而引入到新理论中来的。理论直觉判据的意义由此可见一斑,从而充分说明,理论直觉判断不仅仅是一种理论外观形式上的感受性所得,而往往包含着旧理论形式精髓的表征,以及揭示出新理论的可能生长点。

另一方面,还必须看到,尽管薛定谔方程在引入能量、动量等力学量的算符对应方面有极大的便利性,但关于量子描述的性质上的说明和系统解释则主要是由主张“唯象”研究方式的波尔为代表的哥本哈根学派完成的。薛定谔不止一次地力图回复到经典图象中寻找这种说明,但却最终无功而返。这表明,由于理论直觉判据主要是从已有理论发展和已有理论在新问题面前突出表现出来的可能关系中产生的,理论直觉判据在以非逻辑地使思想因循于旧理论的框架,从而有可能成为实现从旧理向新理论的非逻辑跳跃的羁绊。由于薛定谔一贯坚持经典运动概念的绝对适应性,他试图把波函数 Ψ 直观地解释为三维空间的振动,把 $\Psi^*\Psi$ 解释为电荷密度,一直拒绝统计观点,认为电子是波的半经典解释,被泡利批评为“苏黎世的地方偏见”。恰 好表明理论直觉判据的负面影响。正是在这种意义上,不仅量子科学家们所发现的理论对粒子和波动两种图象给出互补的解释机制,而且,这一互补解释机制的建立也是在以玻尔、海森伯为代表的研究方式和以德布罗意、薛定谔为代表的另一种研究方式的互补中取得的。

(下转 99 页)

5 钱宁等. 泥沙手册. 中国环境科学出版社. 1992

6 张红武等. 河流桥渡设计. 中国建材工业出版社. 1993. 7

7 张淑英, 邵素梅. 细沙多沙河流桥墩附近冲刷及其模拟. 郑州工学院学报. 1993 年第 4 期

Synthetical Review of Calculation Methods for

Non—clay Local Scour Around Bridge Pier

Dong nianhuDuan Wenzhong

(Institute of Hydraulic Research, YRCC, 450003) (Wuhan University of Hgdraulic and electric, 430072)

Abstract In this paper, the calculation methods for non—clay local scour around pier have been sumed up. The methods used in other countries have limit in China. In China the 65—1 formula is a common method, and Zhanghongwu formula is batter for much fine sediment river.

Keywords bridge pier local scour

上接 82 页

参 考 文 献

1 杨基芳、黄高年译. 物理学发展简史. 知识出版社. 1983 年

2 张华夏、杨住曾《自然科学发展史》. 中山大学出版社. 1985 年

3 乔治·伽莫夫. 物理学发展史. 商务印书馆. 1981 年

4 玻思. 我这一代的物理学家候德彭等译. 商务印书馆. 1964 年

5 Mas Jammer The Conceptual Dere copment of Quantum Mechanics, McGraw—Hill, New York 1966.

6 L. I 席夫. 量子力学. 李淑婧、陈崇光译. 人民教育出版社. 1982 年

7 郭土. 理论力学 (下册). 高等教育出版社. 1982 年

8 Van der Waerden Sources of Quantum Mechanics Amsterdam, North-Holland, 1967

9 薛定谔. 关于波动力学的四次讲演. 代山译. 商务印书馆. 1965 年

10 E. U. 康登. 量子物理的发展. 物理通报. 1964 年第 10 期

on the Theoretical Intuitive Judgement on

the Inferring Process of Schrodinger Equation

Tian Zhen

(Dept of physics, Jinan University, 510632, Guanzhou)

Abstract The paper discusses the function of the theoretical intuitive judgement on the scientific discovery by reviewing the inferring process in particular the positive and negative reflection of the judgement on the erection of a new theory by the different influ-ences of logical and non-logical factors contained in the judgement and by the comparison to the deducting backgrownd of matrix mechanics.

Keywords Matter wave theory intuition.