

量子力学普适动量算符的定义 与微观粒子自旋的本质

——揭示贝尔不等式得不到实验支持的真正原因

梅 晓 春

福州原创物理研究所 理论物理与纯粹数学部，福州大学

内容摘要 现有量子力学中动量算符的定义存在一些非常基本问题，需要做进一步改善。例如采用动能算符和动量算符计算微观粒子的动能，得到的结果一般不一样。本文对量子力学的动量算符进行重新定义，提出普适动量算符概念，很好地解决以上问题。普适动量算符只改变粒子动量的方向，不改变粒子的动能和能量。由于这两种动量算符的计算值存在粒子运动方向的差别，就导致附加动量和附加角动量。本文给出附加角动量与微观粒子自旋之间的关系，阐明微观粒子自旋的本质。证明自旋与量子力学角动量算符不能描述的那部分角动量有关，与狄拉克方程的推论达到一致，使用薛定谔方程的描述与狄拉克方程的描述达到统一。所谓电子的自旋不是绕自身的旋转，而是绕原子核的最外层s轨道的转动。微观粒子的自旋算符 $\hat{S} \sim \hbar/2$ 是一个量子数，用它可以方便地做计算。在此基础上证明，贝尔不等式得不到实验支持的真正原因是量子力学对自旋投影概念的理解有误，推导贝尔不等式过程中采用的公式 $A_a(\lambda)B_b(\lambda) = \pm 1$ 不成立。

关键词 量子力学，普适动量算符，普适角动量算符，厄密算符，自伴算符，非本征态波函数，非本征值，自旋的本质，贝尔不等式，隐变量，EPY 动量佯谬，定域性和因果律

原文发表于 Journal of Modern Physics, 2012, No.6, p.451 (<http://www.scirp.org/journal/jmp/>),
本修正版对普适动量算符的定义做了修正，并增加了对动量算符完备性和自伴算符的讨论。

一 前言

自量子力学建立以来，它的正确性已经被大量的实验所证实。但物理学家对其物理意义的理解存在严重的分歧，可以说量子力学至今还没有被很好地解释。然而量子力学的数学结构一般被认为是完备的，我们似乎很难在其中添加些东西。

然而事实并非如此。本文指出，由于以下几个原因，现有量子力学动量算符的定义存在一些非常基本问题，需要进行修改。

1. 对于非自由粒子波函数，采用动量算符计算，得到的动量是一个虚数，这是非常不合理的。采用动能算符和动量算符计算微观粒子的动能，得到的结果一般是不一样的，也就是说量子力学的动量算符与动能算符不是一一对应的。

2. 曲线坐标系中，我们可以很好地定义量子力学的动能算符，但却一直无法合理地定义动量算符。或者说除了直角坐标系外，一般的曲线坐标系中量子力学动量算符的定义仍然是一个没有解决

的问题。

3. 量子力学的算符都是厄密算符，将厄密算符用于本征态波函数，得到的本征值是一个常数。如果将算符作用于非本征态波函数，得到的结果一般是复数，可称之为算符的“非本征值”。对于非本征态波函数，量子力学算符就不是厄密算符，其平均值一般也是复数。由于复数非本征值及其平均值没有物理意义，目前的量子力学不得不将非本征态波函数按算符的本征态波函数展开，并将坐标空间的波函数变换到动量空间描述。

4. 在动量空间中计算，对于动量连续谱分布的情况，动量算符平均值的复数问题解决了，但坐标算符的复数平均值问题却出现了。可见问题并没有被真正解决，而是被转移了。对于动量分立的情况，动量空间中动量算符的复数平均值问题仍然存在，实际上不可能被消除。

此外，由于物理过程的描述与表象的选择无关，坐标空间的平均值是复数，动量空间的平均值是实数，这个结果本身就存在不一致的问题。事实上狄拉克在他的名著《量子力学原理》中只提实算符或线性实算符，不提复算符，遗憾的是其他物理学家似乎至今都没有意识到这里存在的问题。

5. 由于角动量算符是坐标算符与动量算符的矢量积，量子力学中角动量算符的定义也存在类似的问题。事实上微观粒子的自旋是一个物理图像不清的概念，我们至今没有弄清微观粒子自旋的本质，而这恰恰与角动量算符的定义有关。目前物理学在处理实际问题是，实际上把电子的自旋看成绕电子自身的转动，是没有实验根据的和完全错误的。

6. 事实上，物理学从来没有在实验上证实自由电子具有自旋角动量。将自由电子束穿过一个磁场，是不可能使电子束分裂成两束的。1922年斯特恩和格拉赫证明电子存在自旋的实验，实际上不是用电子，而是用银原子来做的。它只能证明，在银原子的最外层的s轨道上，存在两个绕原子核运动且角动量相反的电子，而不是两个绕自身转动的电子。

7. 按照现有的量子力学，由于角量子数 $l=0$ ，原子中s轨道的角动量是零，但这是根本不可能的。如果s轨道上的自旋电子只是绕自身转动，而不是绕原子核转动，就必然会掉入原子核。就如地球如果只有自转，没有绕太阳公转，就必然在太阳引力的作用下掉入太阳。这个问题在目前的量子力学中是一直被掩盖的，量子力学提出一百多年来，物理学家竟然一直没有看出这里存在的问题，是一件非常奇怪的事。

8. 由于需要将非本征态波函数按本征态波函数展开，量子力学还要求算符是自伴算符。自伴算符是具有完备集本征波函数的算符，但量子力学的算符有可能不存在完备集本征波函数，因而不是自伴算符，这将大大限制算符的适用性。比如J. M. Domingos等证明，广义坐标中的动量算符一般不是自伴算符⁽¹⁾。

9. 量子力学中有些算符根本没有本征态波函数，比如直角坐标中的角动量算符 \hat{L}_x ， \hat{L}_y 和 \hat{L}_z ，我们就无法将任意波函数按它们的本征态波函数展开。将它们作用到任意波函数上，以及用它们计算角动量的平均值，结果都是虚数，

但我们能说 \hat{L}_x ， \hat{L}_y 和 \hat{L}_z 没有意义吗？或许我们可以说它们没有确定值，但它们不可能是虚数值。虽然在球坐标系中 \hat{L}_z 有本征函数和本征值，但其他两个分量却没有。况且实际物理过程与坐标系选择无关，不论采用直角坐标系还是球坐标系，结果应当是一样的。如果理论描述与坐标系有关，只能是理论本身有问题。

因此现有量子力学的动量算符实际上不能很好地代表微观粒子的动量，需要进行修正。量子力学必须采用实算符值（非本征值为实数），才能到达逻辑一致。本文提出普适动量算符的概念，试图

解决以上问题。将普适动量算符作用于任意非本征态波函数，得到的非本征值都是实数。它只改变微观粒子的动量的方向，不改变粒子的动能和能量。采用普适动量算符，得到修正的薛定谔方程，由于粒子的能量不变，得到的波函数是薛定谔方程的能量简并态波函数。

在曲线坐标系中，我们也能够合理地定义动量算符。坐标表象中普适动量算符的平均值和动量表象中坐标算符的平均值也都是实数。由于采用普适动量算符后没有必要非将任意波函数按算符的完备集本征态波函数展开，也就没有必要要求量子力学算符是自伴算符。

引入普适动量算符后，我们就能定义普适角动量算符。由此引入附加动量和附加角动量，并给出附加角动量与微观粒子自旋之间的关系，阐明微观粒子自旋的本质。证明量子力学中引入自旋算符是为了弥补角动量算符的缺陷，或者说自旋与量子力学角动量算符不能描述的那部分角动量有关。由此就可以使非相对论的量子力学的角动量，与相对论的狄拉克描述的角动量达到一致。

因此电子的自旋不是电子绕自身的旋转，而是绕原子核的最外层s轨道的运动。微观粒子的自旋算符 $\hat{S} \sim \hbar/2$ 只是一个量子数，用它可以方便地做计算。本文的计算结果是，氢原子s轨道的角动量不是零，也不是 $\pm \hbar/2$ ，而是 $L_s = 2S = \pm \hbar$ 。此结果与氢原子光谱在磁场中分裂的塞曼效应实验完全符合，可以逻辑一致地解释自旋轨道回旋磁比率是轨道角动量回旋磁比率两倍的事实。

通过对微观粒子自旋本质的阐明，能够解释贝尔不等式得不到实验支持的真正原因。这是由于现有量子力学对自旋投影的概念理解有误，自旋所代表的角动量在磁场方向的投影等于 $\pm \hbar/2$ ，在其他任意方向就不可能等于 $\pm \hbar/2$ 。在真实的物理空间中，不可能存在任意方向的投影都一样矢量。因此推导贝尔不等式过程中采用的公式 $A_a(\lambda)B_b(\lambda) = \pm 1$ 是不成立的，结果导致贝尔不等式不成立。贝尔不等式得不到实验支持与隐变量是否存在无关，也与微观过程的定域性是否破坏无关。

本文最后讨论量子力学的 EPY 动量伴谬问题。指出在边界有限的条件下，微观粒子的动量是分立的。但自由粒子的动量连续谱分布波函数定义在无限空间中，在边界有限的空间中不存在动量连续谱分布。因此我们无法将动量分立的波函数用动量连续谱分布的波函数来代替，否则就是自相矛盾。文中通过具体计算表明，无限势阱波函数变换到动量空间，采用动量连续谱分布波函数描述后，动能算符的平均值为无穷大。因此在无限深势阱中粒子的动量不可能是连续谱分布，EYP 动量伴谬被彻底消除。

二 引入量子力学普适动量算符的必要性

2.1 用动量算符和动能算符计算动能结果的不一致

量子力学采用厄密算符代表物理量，厄密算符对其本征函数的作用结果是一个常数。动量算符及其本征态波函数为：

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \quad \psi(\bar{x}, t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\bar{p}\cdot\bar{x} - Et)} \quad (1)$$

我们有 $\hat{p}\psi(\bar{x}, t) = \bar{p}\psi(\bar{x}, t)$ ，因此动量 \bar{p} 是一个常数。然而量子力学更为一般的情况是，波函数不是算符的本征态。动量算符对本征态波函数的作用结果为 $\hat{p}\psi(\bar{x}, t) = \bar{p}(\bar{x}, t)\psi(\bar{x}, t)$ ，此时 $\bar{p}(\bar{x})$ 不是常数，我们称它为动量算符的非本征值。

如果 $\psi(\bar{x})$ 描述单个微观粒子，按照动量算符的定义， $\bar{p}(\bar{x})$ 应当是粒子的动量。由于动量是坐

标的函数，这种表示方式是否违背测不准关系呢？或者说用 $\bar{p}(\bar{x})$ 表示动量是否有意义呢？这其中涉及到对测不准关系真实意义的理解，我们在下文中会仔细讨论这个问题。本节中我们证明，采用动量算符和动能算符计算微观粒子的动能，得到的结果一般是不一样的。

以量子力学中最简单的氢原子基态波函数 $\psi_{100}(\bar{r})$ 和线性谐振子基态波函数 $\psi_0(x)$ 为例，我们有：

$$\psi_{100}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \quad (2)$$

$$\psi_0(x) = N_0 e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad (3)$$

式中 $a_0 = \hbar^2 / (me^2)$ 是氢原子的第一玻尔轨道半径。 $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ ， ω 是谐振子振动的角频率。将动量算符 \hat{p} 作用于 ψ_{100} ，得到：

$$\hat{p}_1 \psi_{100} = -i\hbar \nabla \left(\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \right) = \frac{i\hbar}{a_0} \frac{\bar{r}}{r} \psi_{100}, \quad \bar{p}_1 = \frac{i\hbar}{a_0} \frac{\bar{r}}{r} \quad (4)$$

然而上式的 $\bar{p}_1(\bar{r})$ 不可能是氢原子中基态电子的动量。除了 $\bar{p}_1(\bar{r})$ 是虚数不合理外，它与用动能算符计算得到的值也是不一样的。事实上如果 (4) 式是 $\bar{p}_1(\bar{r})$ 是电子的动量，动能就变成负数：

$$T_1 = \frac{p_1^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2ma_0^2} = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \quad (5)$$

这显然是不可能的。除此之外，如果将动能算符作用到基态波函数 ψ_{100} 上，得到的结果是：

$$\begin{aligned} \hat{T} \psi_{100} &= -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \psi_{100} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{a_0 r} \right) \psi_{100} = T_1 \psi_{100} \end{aligned} \quad (6)$$

因此氢原子中基态电子的动能为：

$$T_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{a_0 r} \right) = -\frac{me^4}{2\hbar^2} + \frac{e^2}{r} = E_1 - U(r) \quad (7)$$

(7) 式与 (5) 式显然是不同的。(7) 式是基态电子的能量守恒式，其中 E_1 是基态电子的总能量， $U(r)$ 是电子的势能。若按照 (5) 式，则有 $T_1 = E_1$ ，动能等于 (7) 式中的总能量，这显然是不可能的，因此 (5) 式肯定是错的。

若将动量算符作用于线性谐振子基态波函数 ψ_0 ，得到：

$$\hat{p} \psi_0(x) = i\hbar N_0 \frac{d}{dx} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} = -i\hbar \alpha^2 x \psi_0(x) \quad p = -i\hbar \alpha^2 x \quad (8)$$

动量 p 也是一个虚数。按照上式得到的动量，粒子的动能为：

$$T = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \alpha^4 x^2}{2m} = -\frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (9)$$

粒子的动能是一个负数，这显然也是不可能的。如果用动能算符计算，我们有：

$$\hat{T}\psi_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_0(x) = \left(\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi_0(x) = T\psi_0(x)$$

$$T = E_0 - U(x) = \frac{\hbar\omega}{2} - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad (10)$$

式中 E_0 是谐振子基态能量。显然用两种方法计算得到的动能也是不一样的，(9) 式的动能实际上是谐振子的势能加上一个负号，即 $T = -U(x)$ ，这个结果肯定是错的。

事实上这个问题在量子力学中普遍存在，动能算符与动量算符不能一一对应。由于动能算符的计算结果是正确的，动量算符的计算结果肯定错的。我们需要对动量算符进行修正，使之对波函数的作用与动能算符一致。

2.3 曲线坐标中动量算符的定义存在的困难

在现有量子力学中，曲线坐标系中动量算符的定义是一个未解决的问题。目前已有几种定义方法，但都是不自洽的⁽³⁾。如果要求曲线坐标系中动量算符各分量互相对易，球坐标系中动量算符的定义就是：

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \quad \hat{p}_\theta = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta} \quad \hat{p}_\varphi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (11)$$

但容易证明 \hat{p}_r 和 \hat{p}_θ 不是厄密算符，它们对氢原子波函数的作用也是复数。更主要的是从 (11) 式不能得到球坐标系中正确的动能算符。经典力学中自由粒子的哈密顿量在球坐标系中的形式是：

$$H = T = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\theta^2 + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} p_\varphi^2 \right) \quad (12)$$

按照量子力学与经典力学的对应原理，如果动量算符用 (11) 式表示，动能算符就应当是：

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \quad (13)$$

然而量子力学中球坐标系的动能算符实际上是：

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \quad (14)$$

显然 (13) 式与 (14) 式不相等。球坐标系中量子力学动量算符的另一种定义是⁽⁴⁾：

$$\hat{p}_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \quad \hat{p}_\theta = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{c t \theta}{2} \right) \quad \hat{p}_\varphi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (15)$$

将 (15) 式代入 (12) 式，得到：

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{1 + \sin^2 \theta}{4 \sin^2 \theta} \right] \quad (16)$$

结果比 (14) 式多出一项，因此 (15) 式的定义也是不自洽的。

还有人建议采用微分几何的协变微分算符 D_i 来定义曲线坐标系中的动量算符⁽⁵⁾。算符 D_i 对标量 ψ 和矢量 V_j 的作用形式是：

$$D_i \psi = \frac{\partial}{\partial q_i} \psi \quad D_i V_j = \frac{\partial}{\partial q_i} V_j - \Gamma_{ij}^k V_k \quad (17)$$

上式中 Γ_{ij}^k 是联络，重复指标不是求和。对于度规为 $ds^2 = g^{ij} dq_i dq_j$ 的曲线坐标，联络是：

$$\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2} g^{ij} \left(\frac{\partial g_{ij}}{\partial q_i} + \frac{\partial g_{ij}}{\partial q_j} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial q_k} \right) \quad (18)$$

按照这种定义，曲线坐标中的动能算符可以写为：

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} g^{ij} \left(\frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_j} + \Gamma_{ij}^k \frac{\partial}{\partial q_k} \right) \quad (19)$$

在球坐标中得到的结果就是量子力学的（14）式。但也有人批评这种定义，认为算符对标量场的作用与对矢量场的作用存在不自洽性⁽⁶⁾。此外按（17）式， D_i 对标量场的作用实际上是（15）式。其中的 \hat{p}_r 和 \hat{p}_θ 对本征函数的非本征值和平均值仍然可能是虚数，直角坐标系中动量算符的所有问题在球坐标中都同样存在。

2.4 动量算符的复数非本征值和复数平均值问题

量子力学中采用厄密算符描述物理量，算符的本征值是一个实的常数，但前提是算符必须作用在本征函数上。如果波函数不是算符的本征算符，算符对非本征态波函数作用得到的结果一般是复数数。动量算符对非本征态波函数的平均值一般也是复数，由于量子力学中物理量的测量值被认为是算符的平均值，这样的结果在物理上是不能接受的。

为了避免这个问题，目前量子力学将非本征函数按算符的本征态波函数展开，然后再求算符的平均值。对于动量算符，这种做法实际上是将波函数变换到动量空间。下文证明这种做法存在两个问题。一是如果动量连续谱分布，动量算符平均值的虚数问题可以消除。但如果动量是分立谱，算符的复数平均值问题是无法消除的。二是虽然在动量空间中计算，动量算符的复数平均值问题消失了，坐标算符的复数平均值问题又出现了。问题并没有被消除，只是被转移。事实上由于物理过程的描述与表象的选择无关，坐标空间的平均值是复数，动量空间的平均值是实数，这里就已经存在不一致的问题。

设 $\psi(\bar{x}, t)$ 和 $\varphi(\bar{x}, t)$ 是坐标空间的任意波函数，按照量子力学的定义，如果算符 \hat{F} 满足以下关系：

$$\int \psi^*(\bar{x}, t) \hat{F} \varphi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} = \int (\hat{F} \psi(\bar{x}, t))^* \varphi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} \quad (20)$$

则称 \hat{F} 为厄密算符。由于（20）式中 $\psi(\bar{x}, t)$ 和 $\varphi(\bar{x}, t)$ 可以是不同的波函数，这种对厄密算符的定义实际上存在问题。比如哈密顿算符对波函数的作用 $\hat{H}\psi(\bar{x}, t) = E_\psi \psi(\bar{x}, t)$ ， $\hat{H}\varphi(\bar{x}, t) = E_\varphi \varphi(\bar{x}, t)$ ，能量 E_ψ 和 E_φ 是实数。如果 $\psi(\bar{x}, t) \neq \varphi(\bar{x}, t)$ ，就有 $E_\psi \neq E_\varphi$ ，因此（20）式对哈密顿算符不成立，然而我们能说 \hat{H} 不是厄密算符，不满足量子力学的要求吗？还有能量算符 $i\hbar \partial / \partial t = \hat{E}$ ，对于定态我们有 $i\hbar \partial \psi / \partial t = E_\psi \psi$ ， $i\hbar \partial \varphi / \partial t = E_\varphi \varphi$ ，也是不满足（20）式的。因此我们实际上应当在（20）式中令 $\psi(\bar{x}, t) \neq \varphi(\bar{x}, t)$ ，厄密算符正确的定义应当是：

$$\int \psi^*(\bar{x}, t) \hat{F} \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} = \int (\hat{F} \psi(\bar{x}, t))^* \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} \quad (21)$$

设厄密算符的本征方程为 $\hat{F} \psi(\bar{x}, t) = \bar{F}_\lambda \psi(\bar{x}, t)$ ，容易证明本征值 \bar{F}_λ 是一个实的常数，我们有：

$$\begin{aligned} \int \psi^*(\bar{x}, t) \hat{F} \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} &= \bar{F}_\lambda \int \psi^*(\bar{x}, t) \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} \\ \int (\hat{F} \psi(\bar{x}, t))^* \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} &= \bar{F}_\lambda^* \int \psi^*(\bar{x}, t) \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} \end{aligned} \quad (22)$$

考虑到 (21) 式，就得到 $\bar{F}_\lambda^* = \bar{F}_\lambda$ 。此时算符对波函数的平均值 \bar{F}_λ 也是一个实数，我们有：

$$\bar{F} = \int \psi^*(\bar{x}, t) \hat{F} \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} = \int (\hat{F} \psi(\bar{x}, t))^* \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} = \left(\int \psi^*(\bar{x}, t) \hat{F} \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} \right)^* = \bar{F}^* \quad (23)$$

设 $\hat{F} \psi_1(x) = \lambda_1 \psi_1(x)$ ， $\hat{F} \psi_2(x) = \lambda_2 \psi_2(x)$ ，从：

$$\int \psi_2^*(x) \hat{F} \psi_1(x) dx = \int (\hat{F} \psi_1(x)) \psi_2(x) dx \quad (24)$$

$$\text{有：} \quad (\lambda_2 - \lambda_1) \int \psi_2^*(x) \psi_1(x) dx = 0 \quad (25)$$

由于 $\lambda_2 \neq \lambda_1$ ，就有：

$$\int \psi_2^*(x) \psi_1(x) dx = 0 \quad (26)$$

因此算符具有不同本征值的本征态波函数是正交的。然而如果算符作用的是非本征态波函数，情况就完全不同。设量子力学算符对非本征态波函数的作用结果是 $\hat{F} \psi(\bar{x}, t) = \bar{F}(\bar{x}, t) \psi(\bar{x}, t)$ ，我们称它为算符 \hat{F} 的非本征值方程，称 $\bar{F}(\bar{x}, t)$ 为算符 \hat{F} 的非本征值。以下证明此时算符就不是厄密算符，我们有：

$$\int \psi^*(\bar{x}, t) \hat{F} \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} = \int \psi^*(\bar{x}, t) \bar{F}(\bar{x}, t) \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} = \int \bar{F}(\bar{x}, t) \rho(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} \quad (27)$$

$$\int (\hat{F} \psi(\bar{x}, t))^* \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} = \int \bar{F}^*(\bar{x}, t) \psi^*(\bar{x}, t) \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} = \int \bar{F}^*(\bar{x}, t) \rho(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} \quad (28)$$

式中几率密度 $\rho(\bar{x}, t) = \psi^*(\bar{x}, t) \psi(\bar{x}, t)$ 是实数。可见如果 $\bar{F}(\bar{x}, t)$ 是复数，(27) 和 (28) 不相等， \hat{F} 就不是厄密的。由于 $\bar{F}(\bar{x}, t)$ 不是实数，算符的平均值也就不是实数，除非平均值等于零，我们有：

$$\bar{F} = \int \psi^*(\bar{x}, t) \hat{F} \psi(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} = \int \bar{F}(\bar{x}, t) \rho(\bar{x}, t) d^3 \bar{x} \neq \text{实数} \quad (29)$$

由于量子力学算符的平均值是具有测量意义的物理量，平均值为复数在物理上是没有意义的。

为了解决这个问题，量子力学一般将非本征态波函数按算符的本征态波函数展开。动量算符的波函数展开式就是傅里叶变换，我们有：

$$\psi(\bar{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \varphi(\bar{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p} \cdot \bar{x}} d^3 \bar{p} \quad (30)$$

动量算符的平均值为:

$$\begin{aligned} \bar{F}_p &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \phi^*(\bar{p}') \bar{p} \phi(\bar{p}) e^{i(\bar{p}' - \bar{p}) \cdot \bar{x} / \hbar} d^3 \bar{x} d^3 \bar{p} d^3 \bar{p}' \\ &= \int \bar{p} \phi^*(\bar{p}) \phi(\bar{p}) d^3 \bar{p} = \int \bar{p} \rho(\bar{p}) d^3 \bar{p} \end{aligned} \quad (31)$$

上式实际上等于将动量平均值变换到动量空间计算, $\rho(\bar{p}, t)$ 是一个实数。可见动量平均值的复数问题消失了。然而问题并没有被解决, 动量空间中坐标算符的复数平均值问题却出现了。坐标空间中坐标和动量的地位互换, 坐标算符变为 $\hat{x} \sim i\hbar \nabla_p$, 对动量空间波函数的作用结果是:

$$\hat{x} \varphi(\bar{p}, t) = i\hbar \nabla_p \varphi(\bar{p}, t) = \bar{x}(\bar{p}, t) \varphi(\bar{p}, t) \quad (32)$$

与坐标空间的动量算符对本征函数的作用结果类似, 一般而言 $\bar{x}(\bar{p}, t)$ 是复数。动量空间坐标算符的平均值一般也是一个复数, 我们有:

$$\bar{\hat{x}} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \phi^*(\bar{p}, t) \hat{x} \phi(\bar{p}, t) d^3 \bar{p} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \bar{x}(\bar{p}, t) \rho(\bar{p}, t) d^3 \bar{p} \quad (33)$$

坐标的平均值为复数也是没有意义的。可见问题依然存在, 我们只是将坐标空间中动量算符的问题转化成动量空间中坐标算符的问题, 非本征值的虚数问题以另外一种方式体现出来罢了。事实上如果物理过程与表象无关, 在坐标空间与动量空间中的计算结果应当一样, 不应当存在一个是实数另一个是复数的问题。

2.5 动量算符的厄密性与边界条件

量子力学中采用厄密算符描述物理量, 然而厄密算符的定义与边界条件有关。考虑一维情况, 如果按照厄密算符 (20) 式的定义, 对动量算符我们有:

$$\begin{aligned} \int_{L_1}^{L_2} \psi^* \hat{p} \varphi dx &= -i\hbar \int_{L_1}^{L_2} \psi^* \frac{d\varphi}{dx} dx = -i\hbar \int_{L_1}^{L_2} \psi^* d\varphi = -i\hbar \psi^* \varphi \Big|_{L_1}^{L_2} + i\hbar \int_{L_1}^{L_2} \varphi d\psi^*(x) \\ &= -i\hbar \psi^* \varphi \Big|_{L_1}^{L_2} - i\hbar \int_{L_1}^{L_2} \left(\frac{d\psi^*}{dx} \right)^* \varphi dx = -i\hbar \psi^* \varphi \Big|_{L_1}^{L_2} + \int_{L_1}^{L_2} (\hat{p} \psi)^* \varphi dx \end{aligned} \quad (34)$$

因此动量算符是厄密算符的条件是, 波函数在边界上为零。如果这个条件不满足, 动量算符就不是厄密的。对动能算符和角动量算符等, 都存在这种边界条件。然而在有些情况下, 波函数在边界上是不为零的。比如对于自由粒子波函数:

$$\psi(x) = A e^{\frac{i}{\hbar} p_1 x} \quad \varphi(x) = B e^{\frac{i}{\hbar} p_2 x} \quad (35)$$

在 $x \rightarrow \pm\infty$ 时波函数不等于零。此时动量算符就不是厄密的, 动量算符具有不同本征值的本征函数就不正交。将 (35) 式代入 (34) 式, 可得:

$$(p_2 - p_1) \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx = -i\hbar \psi^* \psi \Big|_{-\infty}^{\infty} \neq 0 \quad \text{即} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx \neq 0 \quad (36)$$

然而我们总是将 (35) 式看成动量算符的本征函数，根本不考虑在这种情况下动量算符实际上已经不是厄密算符了。即使按照 (21) 式的定义，令 $\varphi = \psi$ ，问题仍然存在。

为了避免这个问题，量子力学不得不采用箱归一化。箱归一化后粒子的动量是分立的，在边界上波函数可能不等于零，动量算符也就不是厄密的，可见问题重重。事实上狄拉克在他的名著《量子力学原理》中只提实算符或线性实算符，从来不提厄密算符。他似乎看出这里存在的问题，遗憾的是其他物理学家似乎至今都没有意识到这里存在的问题。

算符的厄密性与边界条件有关，这会导致许多麻烦，这对量子力学不是好事情。它会使我们不自觉地犯错误，却不知道错在那里。以下我们证明，在空间有限且粒子动量分立的情况下，如果将非本征波函数按动量算符的本征函数展开，动量算符的平均值一般是复数。此时 (30) 式为：

$$\psi(\bar{x}) = \sum_{k=1}^N A_k(\bar{p}_k) e^{\frac{i}{\hbar} \bar{p}_k \cdot \bar{x}} \quad (37)$$

为简单讨论一维情况，波函数只考虑两项，我们有：

$$\psi(\bar{x}) = A_1(p_1) e^{\frac{i}{\hbar} p_1 x} + A_2(p_2) e^{\frac{i}{\hbar} p_2 x} \quad (38)$$

如果边界无限，可以证明动量算符的平均值是实数。利用 δ 函数性质，我们有：

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[\left| A_1(p_1) \right|^2 p_1 + \left| A_2(p_2) \right|^2 p_1 \right. \\ &\quad \left. + A_1^*(p_1) A_2(p_2) p_1 e^{-\frac{i}{\hbar} (p_1 - p_2)x} + A_2^*(p_2) A_1(p_1) p_2 e^{\frac{i}{\hbar} (p_1 - p_2)x} \right] dx \\ &\sim \left| A_1(p_1) \right|^2 p_1 + \left| A_2(p_2) \right|^2 p_2 + A_1^*(p_1) A_2(p_2) p_1 \delta(p_1 - p_2) + A_2^*(p_2) A_1(p_1) p_2 \delta(p_1 - p_2) \end{aligned} \quad (39)$$

考虑到 $p_1 \neq p_2$ 时 $\delta(p_1 - p_2) = 0$ ，就得到：

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx \sim \left| A_1(p_1) \right|^2 p_1 + \left| A_2(p_2) \right|^2 p_2 \quad (40)$$

如果边界有限，无法利用 δ 函数的性质，情况就完全不一样，我们有：

$$\begin{aligned} \psi^*(\bar{x}) \psi(x) &= A_1^* A_1 + A_2^* A_2 + (A_1^* A_2 + A_1 A_2^*) \cos(p_2 - p_1)x \\ &\quad + i(A_1^* A_2 - A_1 A_2^*) \sin(p_2 - p_1)x \end{aligned} \quad (41)$$

令 $A_1 = a_1 + ib_1$ ， $A_2 = a_2 + ib_2$ ，设粒子坐标被限制在 $L_1 \sim L_2$ 的空间范围内，归一化公式为：

$$\int_{L_1}^{L_2} \psi^*(\bar{x}) \psi(x) dx = (a_1^2 + b_1^2 + a_2^2 + b_2^2)(L_2 - L_1)$$

$$\begin{aligned}
& + 2(a_1 a_2 + b_1 b_2) \left[\sin(p_2 - p_1)L_2 - \sin(p_2 - p_1)L_1 \right] \\
& - (a_2 b_1 - a_1 b_2) \left[\cos(p_2 - p_1)L_1 - \cos(p_2 - p_1)L_1 \right] = 1 \quad (42)
\end{aligned}$$

因此 $a_1, a_2, b_1, b_2, p_1, p_2$ 六个参数中可以有五个是独立的。将动量算符作用于 (38) 式, 可得:

$$\begin{aligned}
\psi^*(\bar{x}) \hat{p} \psi(x) &= A_1^* A_1 p_1 + A_2^* A_2 p_2 + (A_1^* A_2 p_2 + A_1 A_2^* p_1) \cos(p_2 - p_1)x \\
& + i(A_1^* A_2 p_2 - A_1 A_2^* p_1) \sin(p_2 - p_1)x \quad (43)
\end{aligned}$$

动量算符的平均值为:

$$\begin{aligned}
\bar{p} &= \int_{L_1}^{L_2} \psi^*(\bar{x}) \hat{p} \psi(x) dx = \left[(a_1^2 + b_1^2)p_1 + (a_2^2 + b_2^2)p_2 \right] (L_2 - L_1) \\
& + \frac{(a_1 a_2 + b_1 b_2)(p_2 + p_1)}{p_2 - p_1} \left[\sin(p_2 - p_1)L_2 - \sin(p_2 - p_1)L_1 \right] \\
& + \frac{(a_1 b_2 - a_2 b_1)(p_2 + p_1)}{p_2 - p_1} \left[\cos(p_2 - p_1)L_2 - \cos(p_2 - p_1)L_1 \right] \\
& - i(a_1 a_2 + b_1 b_2) \left[\cos(p_2 - p_1)L_2 - \cos(p_2 - p_1)L_1 \right] \\
& + i(a_1 b_2 - a_2 b_1) \left[\sin(p_2 - p_1)L_2 - \sin(p_2 - p_1)L_1 \right] \quad (44)
\end{aligned}$$

可见边界有限的情况下, 不论边界上波函数是否为零, 动量算符的平均值一般不是实数。由于我们只讨论边界条件的影响, 可以假设 $a_1 b_2 - a_2 b_1 \neq 0$ 和 $a_1 a_2 + b_1 b_2 \neq 0$ 。要使平均值是实数, 只有令 $L_1 = -L_2 = -L$ 和 $(p_2 - p_1)L = \pm n\pi$, 得动量分立值:

$$p_2 - p_1 = \frac{\pm n\pi}{L} \quad \text{或} \quad p_2 = \frac{\pm m\pi}{L}, \quad p_1 = \frac{\pm k\pi}{L} \quad (45)$$

其中 k, m, n 都是整数。然而问题在于按照归一化公式 (43) 式, 我们没有理由要求存在对称的边界条件 $L_1 = -L_2$, 因而也没有理由要求动量满足 (45) 式的形式。事实上物理过程与坐标系的选择无关, 我们不可能通过坐标变换改变物理结果。假设开始时我们选择任意的边界条件 $L_1 \neq -L_2$, 动量算符的平均值出现复数。我们不可能通过移动坐标系使 $L_1 = -L_2$, 达到消除复数平均值的结果。问题出在理论本身, 而不是坐标系的选择。

然而在边界有限的情况下, 动能算符却没有复数平均值的问题。因为动能算符对一般波函数在作用结果都是实数, 不论边界是否有限, 动能算符的平均值都是实数。这个事实告诉我们, 算符是否是厄密算符实际上不是本质的, 重要的是算符对波函数的作用结果必须是实数。如果算符对波函数的作用结果是实数, 按 (21) 式的定义, 它一定是厄密算符。

2.6 非本征态波函数按动量算符本征态完备集展开的问题

按照量子力学的基本原则，如果波函数不是算符的本征态函数，为了解决算符非本征值的虚数问题，就应当将波函数用算符的本征函数展开。为了使展开式成为可能，数学上还要求算符具有完备的本征函数集。我们将具有完备集本征波函数的算符称为自伴算符，量子力学不但要求算符是厄密算符，还要求算符是自伴算符⁽⁷⁾。狄拉克在他的《量子力学原理》一书中就只提实数算符，不提厄密算符。

如前所述，量子力学算符一般都是定义在无限空间的无界算符，其本征波函数完备集也是定义在无界空间的。然而自伴算符却与边界条件有关，条件要苛刻得多。事实上 J. M. Domingos 等证明，广义坐标中的动量算符一般都不是自伴的。例如在 (15) 式的球坐标中，只有 \hat{p}_ϕ 是自伴算符，其他两个都不是⁽¹⁾。如果要求算符是自伴算符，必将大大限制量子力学算符的有效性。

比如在边界有限的空间内，我们需要对波函数采用箱归一化，边界条件导致自由粒子的动量是分立的。在箱体内我们就不能将动量分立的波函数按动量连续谱波函数展开，因为后者定义在无限空间中的。量子力学中著名的 EPY 动量佯谬恰恰与此有关。在边界有限的无限势阱内，如果将坐标空间中动量分立的波函数按动量连续谱自由粒子波函数展开，就导致自相矛盾。

还有其他严重的问题是，对于某些量子力学算符，我们并不是总能找到合适本征态波函数。比如对于直角坐标系中的角动量算符 \hat{L}_x ， \hat{L}_y 和 \hat{L}_z ，至今没有合适的本征态波函数，我们就无法将任意波函数按它们的本征态波函数展开。将它们作用到任意波函数上，得到的结果都是虚数。用它们计算角动量的平均值，结果都是虚数。或许我们可以说 \hat{L}_x ， \hat{L}_y 和 \hat{L}_z 没有确定值，但我们不可能说它们的平均值是虚数。虽然在球坐标系中 \hat{L}_z 有本征函数和本征值，但其他两个分立却没有。况且物理实质与坐标系选择无关，如果与坐标系有关，只能是理论本身有问题。

将非本征态波函数按算符的本征态波函数展开还会带来另外的问题。比如量子力学认为波函数 $\varphi(\vec{x})$ 可以描写一个粒子，对于处于位形势阱中的一个基态粒子，如果将其波函数按 (30) 式展开，并在动量空间中计算动能算符的平均值，结果是无穷大。这个问题涉及量子力学 EPY 动量佯谬，我们将在本文的最后部分详细讨论这个问题。

再比如氢原子中的一个基态电子，将基态波函数按动量算符本征态展开，(30) 式就代表单个电子在氢原子中的动量分布。有实验表明氢原子中的电子似乎满足这种分布⁽⁴⁾，但实验使用大量氢原子，用电子轰击氢原子使之电离，然后测量电离电子的动量。实验并不是测量一个绕核运动的非自由电子在不同时刻的动量，更不意味着氢原子中的一个非自由电子可以用无穷多个自由电子来代替。事实上氢原子定态波函数不是动能算符的本征函数，但我们一般没有必要将它们按动能算符本征函数展开。动能算符对氢原子定态波函数的作用结果是实数，这才是问题的关键。在两种表象中氢原子动能算符的平均值都是实数，我们才能说量子力学的描述与表象无关。

可见对于非本征态波函数，现有量子力学动量算符的定义有缺陷。要真正解决动量算符非本征值和平均值的复数问题，只有对动量算符进行改造。改造后动量算符对任意非本征态波函数作用，得到的非本征值必须是实数，动量算符在坐标表象中的平均值以及坐标算符在动量表象中的平均值都应当是实数。我们就没有必要将非本征态波函数按算符的完备集本征态波函数展开，也就没有必要要求算符是自伴算符，由此就可以避免自伴算符的麻烦，同时使量子力学的逻辑基础更完备。

2.7 量子力学算符不对易性引起的测量问题

量子力学中动量算符和坐标算符是不对易的，我们有 $[x, \hat{p}] = i\hbar$ 。令 $\Delta x = x - \bar{x}$ 和 $\Delta p = \hat{p} - \bar{p}$ ，其中 \bar{x} 和 \bar{p} 是粒子坐标和动量的平均值，有所谓的测不准关系：

$$\Delta x \cdot \Delta p = (x - \bar{x}) \cdot (p - \bar{p}) \geq \hbar/2 \quad (46)$$

按照量子力学对测不准关系的解释，微观粒子的坐标和动量就不能同时精确确定。因此从公式 $\hat{p}\psi(\bar{x}, t) = \bar{p}(\bar{x}, t)\psi(\bar{x}, t)$ 得到的函数关系 $\bar{p}(\bar{x})$ 没有意义，或者说 $\bar{p}(\bar{x})$ 不代表粒子的动量。

然而 $\bar{p}(\bar{x})$ 是数学计算结果，如果动量算符和波函数的定义都没有问题，我们怎么可以认为计算结果没有意义呢？按照公式 $\hat{p}\varphi(\bar{x}) = \bar{p}(\bar{x})\varphi(\bar{x})$ 计算，我们根本不需要测量动量，只要知道波函数的形式就可以确定动量，有什么理由认为粒子的坐标和动量不能同时具有确定值呢？在引入普适动量算符之前，我们有必要先简单讨论一下，量子力学的测不准关系到底意味着什么。

首先，我们用波函数 $\psi(x, t)$ 描述 t 时刻粒子在 x 点出现的几率。因此 x 是粒子理论上的精确坐标，不是测量值，因为测量值总是有误差的。由于 \bar{x} 是坐标 x 的平均值，因此 $x - \bar{x}$ 不是坐标的测量偏差，而是 t 时刻粒子的精确坐标与平均坐标的差值。它实际上是坐标关于平均值的涨落，其定义与经典统计物理学中的涨落定义是一样的。

同样， $p - \bar{p}$ 是 t 时刻粒子理论上的精确动量与平均动量的差值，或动量关于平均值的涨落，不是动量的测量偏差。在经典统计力学中，涨落代表某种不确定性。它与大量粒子系统的统计性质有关，与测量无关。在这种意义上，(46) 式就不是目前量子力学理解的，对单个粒子的测不准关系。

其次，量子力学中有严格证明的测不准关系不是 (46) 式，而是下式：

$$\square \square \quad \overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} = (\overline{x^2} - \bar{x}^2)(\overline{p^2} - \bar{p}^2) \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad \text{或} \quad \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2} \cdot \sqrt{\overline{p^2} - \bar{p}^2} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (47)$$

(47) 式右边只包含平均值 $\overline{x^2}$ ， \bar{x}^2 ， $\overline{p^2}$ 和 \bar{p}^2 ，代表的是坐标和动量的涨落均方偏差的乘积关系。因此 (47) 式不是单次事件的关系，而是对大量事件的统计平均关系。对于每个单次事件，我们即可以有 $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$ ，也可以有 $\Delta x \cdot \Delta p < \hbar/2$ ，以及 $\Delta x \cdot \Delta p = 0$ 。只不过对于大量事件进行统计平均后，其结果满足 (47) 式罢了。

由于 (47) 式不包含 x 和 p ，它的物理意义与 (46) 式完全不同。量子力学将 (47) 式简化为 (46) 式，然后再推演出所谓的测不准关系，这是毫无道理的。把测不准关系看成量子力学的基本原理更是误解，(47) 式是量子力学的导出结果，不是量子力学的基本假设。

另一方面，按照量子力学，微观粒子的坐标和时间算符是对易的，它们可以同时确定。粒子动量的定义是 $\bar{p} = m\bar{V}$ ，速度的定义是 $\bar{V} = d\bar{x}/dt$ 。我们只要在不同的时刻测量微观粒子的坐标，就可以确定粒子的速度，从而确定动量。也就是说我们可以通过计算确定粒子的动量，完全不需要测量。粒子坐标测量越精确，粒子的动量也越精确。从这种意义上，哪来的测不准关系？

在量子力学中，这种悖论普遍存在，而且问题比我们想象的要严重的多。量子力学动能算符为：

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (48)$$

将动能算符作用于单粒子波函数，得到：

$$\hat{T}\psi(\bar{x},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\bar{x},t) = T(\bar{x},t)\psi(\bar{x},t) \quad (49)$$

容易证明动能算符与坐标算符是对易的，我们有：

$$\begin{aligned} [\bar{x}, \hat{T}] \psi(\bar{x},t) &= \bar{x}\hat{T}\psi(\bar{x},t) - \hat{T}[\bar{x}\psi(\bar{x},t)] \\ &= \bar{x}\hat{T}\psi(\bar{x},t) - \bar{x}\hat{T}\psi(\bar{x},t) + \psi(\bar{x},t)\hat{T}\bar{x} \\ &= \psi(\bar{x},t)\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\bar{x} = 0 \end{aligned} \quad (51)$$

因此即使按照量子力学现有的理解，微观粒子的动能和坐标可以同时确定，将粒子的动能写成 $T = T(\bar{x},t)$ 的形式是有意义的。粒子的动能已知后，就自然得到它的动量 $p(\bar{x},t) = \sqrt{2mT(\bar{x},t)}$ 。由于动量算符与动能算符也是对易的，我们有：

$$[\hat{p}, \hat{T}] = -\frac{\hbar^2}{2m}[\hat{p}, \hat{p}^2] = 0 \quad (51)$$

因此动能和动量可以同时确定。由于粒子的动能是坐标的函数，坐标确定后动能就确定。只要动能确定，我们就能确定动量，这等于说我们可以通过测量粒子的坐标来确定它的动量。

再比如微观粒子的能量算符，将它作用于一般的单粒非本征态波函数，得：

$$\hat{E}\psi(\bar{x},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\bar{x},t) = E(\bar{x},t)\psi(\bar{x},t) \quad (52)$$

容易看出 \hat{E} 与算符 \hat{p} ， \hat{T} 和 \hat{x} 都是对易的，因此粒子的总能量，动能和势能也是可以同时确定的。对于单个定态粒子，总能量可以写为：

$$E = \frac{\bar{p}^2(\bar{x})}{2m} + U(\bar{x}) \quad (53)$$

其中 $U(\bar{x})$ 是粒子的势能。按照上式，只要知道粒子任意时刻的坐标 \bar{x} ，我们不需要测量就能同时知道粒子的动能，势能和动量。另一方面，动能算符与势能算符一般不对易，我们有：

$$[\hat{U}(r), \hat{T}]\varphi(\bar{r}) = \left[U(\bar{r}), -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \right] \varphi(\bar{r}) = \frac{\hbar^2}{2m}\varphi(\bar{r})\nabla^2 U(\bar{r}) \neq 0 \quad (54)$$

例如对于最简单的基态氢原子，势能为算符 $U(r) = -q/r$ ，我们有：

$$\nabla^2 U(r) = -q\nabla^2(1/r) = -q\delta(\bar{r}) \neq 0 \quad (55)$$

如果按照现有量子力学的理解，动能和势能就不能同时确定（即存在量子隧道效应），(53) 式就没有意义。然而 (53) 式也是按照标准量子力学的原则得到的，我们怎么能说它没有意义呢？如果不能同时确定，就没有氢原子光谱的精细结构。微观粒子的能量守恒关系就不能成立，量子力学的所有理论和实验都变得没有意义。

量子力学实际上是关于大量微观过程的统计性理论，所有的测量过程都涉及对大量微观过程，我们不可能通过一次测量就确定一个物理过程。一旦考虑到统计平均结果，量子力学中许多的矛盾都能得到合理解释。这些问题的存在说明我们目前对量子力学的理解可能存在根本性偏差，现有量子力学的标准解释需要做某些根本性的改变。

本文主要讨论量子力学普适动量算符的定义。关于对测不准关系的正确理解和量子力学正统解

释存在的问题，作者将另文讨论。以下的讨论中我们将不考虑测不准关系的限制，认为量子力学算符对非本征态波函数直接作用，得到的结果是有物理意义的， $\bar{p}(\bar{x}, t)$ 代表粒子的动量。

三 量子力学普适动量的定义

3.1 坐标空间普适动量算符的定义

以上我们证明，量子力学必须采用实算符（非本征值是实数），才能到达逻辑一致。为了使动量算符对任意波函数作用的非本征值都是实数，需要对现有的动量算符进行重新定义。

已知用薛定谔方程描述的量子力学运动方程不是完全准确的，采用量子场论的狄拉克方程计算氢原子的能量，比用薛定谔方程的计算多出了几个修正项，而且能够自动得到粒子自旋角动量。这些都是薛定谔方程不能描述的，说明薛定谔方程需要修正。

本文只考虑动量算符的修正，不考虑薛定谔方程的能量的修正。但我们知道，物体运动速度方向的改变不影响动能的数值。假设现有量子力学动量算符除了虚数作用值的问题外，也不能正确描述粒子的真实运动速度方向，对粒子动量算符的修正还包含对粒子速度方向的修正。在直角坐标系中，将普适动量算符的分量定义为：

$$\square\square \quad \hat{p}'_{\alpha} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} + G_{\alpha}(\bar{x}) \quad (56)$$

$\alpha = 1, 2, 3$ 是分量指标。式中 $G_{\alpha}(\bar{x})$ 一般而言是一个复数，具体形式待定。(56) 式满足以下关系：

$$\square\square \quad \hat{p}'_{\alpha} \psi'(\bar{x}) = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} + G_{\alpha}(\bar{x}) \right) \psi'(\bar{x}) = p'_{\alpha}(\bar{x}) \psi'(\bar{x}) \quad (57)$$

其中 p'_{α} 是用动量算符作用于波函数 ψ' 得到的动量值，它是一个实数，同时包含了粒子运动速度方向的修正。如果动量算符作用的是动量算符的本征态或自由粒子波函数，就取 $G_{\alpha}(\bar{x}) = 0$ 。

3.2 普适动量算符中未知函数的确定

在一般的情况下，波函数即可以是处于某个特定状态的波函数 $\psi'(\bar{x}) = \psi'_n(\bar{x})$ ，也可以是 $\psi'_n(\bar{x})$ 的叠加态。令：

$$\square\square \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \psi'(\bar{x}) = (A_{\alpha}(\bar{x}) + iB_{\alpha}(\bar{x})) \psi'(\bar{x}) \quad (58)$$

$$\square\square \quad G_{\alpha}(\bar{x}) = C_{\alpha}(\bar{x}) + iD_{\alpha}(\bar{x}) \quad (59)$$

其中 A_{α} ， B_{α} ， C_{α} 和 D_{α} 都是实数。如果波函数已知， A_{α} 和 B_{α} 可以通过计算 (58) 式得到。将 (58) 和 (59) 式代入 (57) 式，得：

$$\square\square \quad A_{\alpha} + iB_{\alpha} + C_{\alpha} + iD_{\alpha} = p'_{\alpha} \quad (60)$$

将 (60) 式的实部与虚部分开，得到：

$$\square\square \quad A_\alpha + C_\alpha = p'_\alpha \quad B_\alpha + D_\alpha = 0 \quad (61)$$

按照 (57) 式的定义, 单个微观粒子修正的动能算符 \hat{T}' 对波函数 $\psi'(\bar{x})$ 的作用变为:

$$\hat{T}'\psi' = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha=1}^3 \hat{p}'_\alpha{}^2 \psi' = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha=1}^3 \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} - i\hbar \frac{\partial G_\alpha}{\partial x_\alpha} - i\hbar G_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} + G_\alpha^2 \right) \psi' = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha=1}^3 p'^2_\alpha \psi' \quad (62)$$

将 (58), (59) 式和 $D_\alpha = -B_\alpha$ 代入 (62) 式, 得:

$$\begin{aligned} \hat{T}'\psi' = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha=1}^3 \left[\left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} - \hbar \frac{\partial B_\alpha}{\partial x_\alpha} + A_\alpha C_\alpha + C_\alpha^2 + 2B_\alpha^2 \right) \right. \\ \left. - i \left(\hbar \frac{\partial C_\alpha}{\partial x_\alpha} + A_\alpha B_\alpha + 3C_\alpha B_\alpha \right) \right] \psi' = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha=1}^3 p'^2_\alpha \psi' \end{aligned} \quad (63)$$

考虑到 (63) 式右边是实数, 方程左边虚数项为零, 可得:

$$\sum_{\alpha=1}^3 \left(\hbar \frac{\partial C_\alpha}{\partial x_\alpha} + A_\alpha B_\alpha + 3B_\alpha C_\alpha \right) = 0 \quad (64)$$

采用普适动量算符, 设 $U(\bar{x})$ 是粒子的势能, 修正的薛定谔方程变成:

$$-\frac{1}{2m} \sum_{\alpha=1}^3 \left(\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} + \hbar \frac{\partial B_\alpha}{\partial x_\alpha} - A_\alpha C_\alpha - C_\alpha^2 - 2B_\alpha^2 \right) \psi' + U\psi' = E'\psi' \quad (65)$$

假设不考虑动量算符的修正, 用动能算符计算, 粒子的动量是 p_α , 采用修正的动能算符计算, 粒子的动量是 p'_α , 二者的关系是:

$$p'_\alpha = p_\alpha + \delta_\alpha \quad (66)$$

一般而言, δ_α 是一个小量。我们有:

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^3 p'^2_\alpha &= (p'_1 + \delta_1)^2 + (p'_2 + \delta_2)^2 + (p'_3 + \delta_3)^2 \\ &= p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + 2(\delta_1 p_1 + \delta_2 p_2 + \delta_3 p_3) + \delta_1^2 + \delta_2^2 + \delta_3^2 \end{aligned} \quad (67)$$

如果只考虑粒子动量方向的改变, 动能不变, 就有:

$$\sum_{\alpha=1}^3 p'^2 = \sum_{\alpha=1}^3 p^2 \quad 2(\delta_1 p_1 + \delta_2 p_2 + \delta_3 p_3) + \delta_1^2 + \delta_2^2 + \delta_3^2 = 0 \quad (68)$$

(65) 式就变成:

$$-\frac{1}{2m} \sum_{\alpha=1}^3 \left(\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} + \hbar \frac{\partial B_\alpha}{\partial x_\alpha} - A_\alpha C_\alpha - C_\alpha^2 - 2B_\alpha^2 \right) \psi' + U\psi' = E'\psi' \quad (69)$$

如果不考虑普适动量算符引入的修正, 令

$$\sum_{\alpha=1}^3 \left(\hbar \frac{\partial B_\alpha}{\partial x_\alpha} - A_\alpha C_\alpha - C_\alpha^2 - 2B_\alpha^2 \right) = 0 \quad (70)$$

(69) 式就变成现有量子力学的薛定谔方程:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} + U \right) \psi = E \psi \quad (71)$$

因此，采用普适动量算符，薛定谔方程应当用 (69) 式表示。其中的未知函数 C_α 满足 (70) 式的关系，式中的 A_α 和 B_α 可以通过 (58) 式求得。但由于波函数 ψ' 满足的是 (69) 式，如果不知道 A_α 、 B_α 和 C_α ，就不知道 ψ' 。考虑到引入的修正是微小的，我们可以用现有薛定谔方程 (71) 式的解 ψ 来近似地代替波函数 ψ' ，通过 (58) 式求得 A_α 、 B_α ，再通过 (70) 式求出函数 C_α 。将它们代入 (69) 式，得到修正的波函数 ψ' 。

(64) 式包含三个 $C_\alpha = C_1, C_2, C_3$ ，但只有一个求和公式。因此我们可以分别令：

$$\hbar \frac{\partial C_\alpha}{\partial x_\alpha} + A_\alpha B_\alpha + 3B_\alpha C_\alpha = 0 \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (72)$$

(72) 式是关于 C_α 的一阶偏微分方程，由于 A_α 和 B_α 已知，它是容易求解，从而确定 C_α 。普适动量算符对波函数的作用公式变成：

$$\square \square \quad \hat{p}'_\alpha \psi' = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\alpha} + G_\alpha \right) \psi' = (p_\alpha + \delta_\alpha) \psi' = p'_\alpha \psi' \quad (73)$$

它对任意波函数的作用值都是实数，且不改变粒子的动能，但对粒子的速度方向有一个微小的改变。在波函数 ψ' 和 G_α 函数已知的情况下，可以通过 (73) 式计算出量子力学的动量算符与普适动量算符作用值 p_α 和 p'_α 的差值 δ_α 。

由此证明，我们原则上总可以找到一个合适函数 G_α ，使量子普适动量算符对波函数的作用结果是一个实数，并且与用动能算符作用的结果一致。最后可以把修正的薛定谔方程简写为：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\alpha=1}^3 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} + Q_\alpha(\bar{x}) \right) \psi' + U \psi' = E \psi' \quad (74)$$

其中：

$$Q_\alpha = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial C_\alpha}{\partial x_\alpha} + \frac{1}{\hbar^2} (A_\alpha B_\alpha + 3B_\alpha C_\alpha) \quad (75)$$

A_α 、 B_α 和 C_α 满足 (72) 式的关系。这种修正只改变微观量子的动量方向，不改变粒子的能量，得到的修正波函数 ψ' 是原来波函数 ψ 的简并态波函数。

3.3 曲线坐标中普适动量算符的定义

以下给出球坐标系中普适动量算符的定义。与 (56) 式的定义类似，令：

$$\hat{p}'_r = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) + G_r \quad (76)$$

$$\hat{p}'_\theta = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\text{ctg} \theta}{2} \right) + G_\theta \quad (77)$$

$$\hat{p}'_\varphi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} + G_\varphi \quad (78)$$

其中 $G_r(r, \theta, \varphi)$, $G_\theta(r, \theta, \varphi)$ 和 $G_\varphi(r, \theta, \varphi)$ 是复数, 其形式待定。同样假设:

$$G_r = C_r + iD_r \quad G_\theta = C_\theta + iD_\theta \quad G_\varphi = C_\varphi + iD_\varphi \quad (79)$$

$$-i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \psi' = (A_r + iB_r) \psi'$$

$$-i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\text{ctg}\theta}{2} \right) \psi' = (A_\theta + iB_\theta) \psi' \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi' = (A_\varphi + iB_\varphi) \psi' \quad (80)$$

将以上普适动量算符作用到一般的球坐标动量非本征态波函数上, 得到非本征值都是实数, 有:

$$\hat{p}'_r \psi' = (A_r + iB_r + C_r + iD_r) \psi' = p'_r \psi' \quad (81)$$

$$\hat{p}'_\theta \psi' = (A_\theta + iB_\theta + C_\theta + iD_\theta) \psi' = p'_\theta \psi' \quad (82)$$

$$\hat{p}'_\varphi \psi' = (A_\varphi + iB_\varphi + C_\varphi + iD_\varphi) \psi' = p'_\varphi \psi' \quad (83)$$

从而得到:

$$\begin{aligned} A_r + C_r &= p'_r & B_r + D_r &= 0 \\ A_\theta + C_\theta &= p'_\theta & B_\theta + D_\theta &= 0 \\ A_\varphi + C_\varphi &= p'_\varphi & B_\varphi + D_\varphi &= 0 \end{aligned} \quad (84)$$

以下我们来确定 G_r , G_θ 和 G_φ 的形式。将 (76) ~ (78) 式代入曲线坐标的动能算符, 得:

$$\begin{aligned} \hat{T}' &= \frac{1}{2m} (\hat{p}'_r{}^2 + \hat{p}'_\theta{}^2 + \hat{p}'_\varphi{}^2) \\ &= \frac{1}{2m} \left\{ -\frac{\hbar^2}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + G_r^2 + G_\theta^2 + G_\varphi^2 \right. \\ &\quad \left. - i\hbar \left[G_r \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) G_r + G_\theta \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\text{ctg}\theta}{2} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\text{ctg}\theta}{2} \right) G_\theta + G_\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\partial G_\varphi}{\partial \varphi} \right] \right\} \quad (85) \end{aligned}$$

将修正的动能算符对波函数作用, 并将 (80) 式代入, 得到:

$$\begin{aligned} \hat{T}' \psi' &= \frac{1}{2m} \left\{ -\frac{\hbar^2}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \right. \\ &\quad \left. + C_r^2 + C_\theta^2 + A_\varphi^2 + C_r A_r + C_\theta A_\theta + C_\varphi A_\varphi \right. \\ &\quad \left. - \hbar \left(\frac{\partial B_r}{\partial r} + \frac{B_r}{r} + \frac{\partial B_\theta}{\partial \theta} + \frac{\text{ctg}\theta}{2} B_\theta + \frac{\partial B_\varphi}{\partial \varphi} \right) \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -i\hbar \left[3C_r B_r + 3C_\theta B_\theta + 3C_\varphi B_\varphi - A_r B_r - A_\theta B_\theta - A_\varphi B_\varphi \right. \\
& \quad \left. + \frac{\partial C_r}{\partial r} + \frac{C_r}{r} + \frac{\partial C_\theta}{\partial \theta} + \frac{\text{ctg}\theta}{2} C_\theta + \frac{\partial C_\varphi}{\partial \varphi} \right] \psi' \quad (86)
\end{aligned}$$

将方程两边的实部与虚部分开，球坐标中修正的薛定谔方程变成：

$$\frac{1}{2m} \left\{ -\frac{\hbar^2}{r^2} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + Q \right\} \psi' + U\psi' = E\psi' \quad (87)$$

$$\begin{aligned}
Q = & C_r^2 + C_\theta^2 + A_\varphi^2 + C_r A_r + C_\theta A_\theta + C_\varphi A_\varphi \\
& - \hbar \left(\frac{\partial B_r}{\partial r} + \frac{B_r}{r} + \frac{\partial B_\theta}{\partial \theta} + \frac{\text{ctg}\theta}{2} B_\theta + \frac{\partial B_\varphi}{\partial \varphi} \right) \quad (88)
\end{aligned}$$

同样只考虑动量方向的改变，粒子的动能不变，(87)式中的能量 $E' = E$ ，同时要满足条件：

$$\begin{aligned}
& 3C_r B_r + 3C_\theta B_\theta + 3C_\varphi B_\varphi - A_r B_r - A_\theta B_\theta - A_\varphi B_\varphi \\
& + \frac{\partial C_r}{\partial r} + \frac{C_r}{r} + \frac{\partial C_\theta}{\partial \theta} + \frac{\text{ctg}\theta}{2} C_\theta + \frac{\partial C_\varphi}{\partial \varphi} = 0 \quad (89)
\end{aligned}$$

考虑到坐标 r, θ, φ 的独立性，可以将上式分成三个公式：

$$3C_r B_r - C_r A_r + \frac{\partial C_r}{\partial r} + \frac{C_r}{r} = 0 \quad (90)$$

$$3C_\theta B_\theta - A_\theta B_\theta + \frac{\partial C_\theta}{\partial \theta} + \frac{\text{ctg}\theta}{2} C_\theta = 0 \quad (91)$$

$$3C_\varphi B_\varphi - A_\varphi B_\varphi + \frac{\partial C_\varphi}{\partial \varphi} = 0 \quad (92)$$

假设粒子的动量方向的改变很小，能量不变，可以现有用薛定谔方程的波函数 ψ 近似地代替 (87) 式的 ψ' ，通过 (80) 计算出 $A_r, A_\theta, A_\varphi, B_r, B_\theta, B_\varphi$ ，代入 (90) ~ (92) 式，解出 C_r, C_θ, C_φ ，最终确定修正的薛定谔方程 (87) 式的形式。

至此我们完成了球坐标系的普适动量算符的定义，并解决了现有量子力学曲线坐标系动量算符定义的一致性问题。按照同样的方法，我们可以得到任意曲线坐标的普适动量算符，本文就不赘述。

四 普适角动量算符的定义和微观粒子自旋的本质

4.1 原子基态 S 轨道角动量为零的不合理性

按照目前的量子力学，氢原子中电子的轨道角动量计算公式是：

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2 \quad l = 0, 1, 2, 3 \dots \quad (93)$$

角量子数 $l=0$ 的轨道被称为 s 轨道，在 s 轨道上运动的电子被称为基态电子或 s 电子。然而按照 (93)

式， s 轨道的电子的角动量等于零。角量子数 $l=1$ 的电子则被称为 p 电子，角量子数 $l=2$ 的电子被称为 d 电子，角动量都不等于零。

另一方面，按照量子力学的计算，氢原子 s 轨道半径为：

$$\alpha = \frac{4\pi\hbar^2}{me^2} \quad (94)$$

它是一个常数，被称为玻尔第一轨道半径，表示 s 轨道是一个圆。于是就导致一个很奇怪的结果，基态电子在原子核中心力场中的 s 轨道中运动，角动量却为零，这是根本不可能的。如前文所述，根据斯特恩和格拉赫实验，量子力学认为电子存在内秉自旋角动量。但却没有解决原子 s 轨道角动量为零，导致电子落入原子核的问题。就如地球只有自转，没有绕太阳的公转，就必然会落入太阳。

考虑量子力学动量算符的计算值与真实的动量存在差距，引入附加动量和附加角动量的概念，通过阐明附加角动量与微观粒子自旋的关系，就可以阐明微观粒子自旋的本质，解决量子力学这个被长期掩盖的基本问题。证明氢原子 s 轨道角动量是 $L_s = 2S = \pm\hbar$ ，与氢原子光谱在磁场中分裂的塞曼效应完全一致。

4.2 普适角动量算符的定义

量子力学的角动量算符与动量算符密切相关，定义为 $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ 。由于动量算符与动能算符不一致，也会导致粒子的动能 T 和与角动量 \hat{L} 不一对应。

如果认为微观粒子的动量不是可以直接观察的物理量，它的具体数值不重要，微观粒子的角动量就与原子的磁矩相关，磁矩却是一个可以直接测量的物理量。由于现有量子力学动量算符可能导致虚的动量，将角动量算符作用在波函数上，也有可能导致虚的角动量和角动量平均值。因此量子力学的角动量算符也需要修正。

在直角坐标系中，量子力学的角动量算符定义为：

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right) \quad \hat{L}_y = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad \hat{L}_z = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (95)$$

采用球坐标，上式变成：

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= i\hbar \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + \text{ctg}\theta \cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} - \text{ctg}\theta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) \quad \hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\varphi} \end{aligned} \quad (96)$$

其中 \hat{L}_z 是氢原子波函数 φ_{nlm} 的本征算符，本征值是 $m\hbar$ 。量子力学中我们知道 \hat{L}_x 和 \hat{L}_y 都不是 φ_{nlm} 的本征算符，将 \hat{L}_x 和 \hat{L}_y 作用到 φ_{nlm} 上，得到的 L_x 和 L_y 一般都是虚数值。 \hat{L}_x 和 \hat{L}_y 对 φ_{nlm} 的平均值 \bar{L}_x 和 \bar{L}_y 一般也是虚数。但角动量算符的平方是：

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right] \quad (97)$$

将 \hat{L}^2 作用在氢原子波函数 φ_{nlm} 上，得到实数值 $L^2 = \hbar^2 l(l+1)$ 。将对动量算符重新定义后，就得考虑

角动量算符的重新定义问题。为了使算符 \hat{L}_x 和 \hat{L}_y 对一般的波函数作用都能得到实数值，按照 (56) 式的原则，将 (95) 式的角动量算符重新定义为：

$$\hat{L}_x = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - G_y \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} - G_z \right) \quad (98)$$

$$\hat{L}_y = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z} - G_z \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - G_x \right) \quad (99)$$

$$\hat{L}_z = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - G_x \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - G_y \right) \quad (100)$$

将修正的角动量算符作用在一般非本征态波函数上，得到：

$$\hat{L}_x \psi = (z p_y - y p_z) \psi \quad \hat{L}_y \psi = (x p_z - z p_x) \psi \quad \hat{L}_z \psi = (y p_x - x p_y) \psi \quad (101)$$

按照这种定义，普适角动量算符对一般的非本征态波函数作用的非本征值和平均值都是实数。

按照这种方法，与球坐标系中动量算符类似，我们可以构造曲线坐标中的普适角动量算符的形式，使球坐标中角动量算符的平方 \hat{L}^2 和 \hat{L}_z 的形式保持不变，本文就不具体讨论了。

4.3 附加动量和附加角动量

令 \hat{p}_0 代表现有量子力学中微观粒子的动量算符， \bar{p}_0 是动量算符的计算值（不考虑虚数）。前文已证明， \bar{p}_0 实际上也不能代表微观粒子的真实动量。令 \hat{p} 代表上文定义的普适动量算符，它作用在波函数上，得到的是一个实数 \bar{p} ，代表微观粒子真实的动量值，即 $\hat{p}\psi = \bar{p}\psi$ 。前文指出，普适动量算符只改变粒子动量的方向，不改变粒子的动能和能量，因此就有 $|\bar{p}_0| = |\bar{p}|$ 。

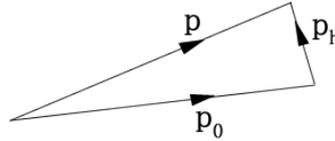


图 1. 动量算符对应的动量、普适动量与附加动量

令 \hat{p}_h 代表二者之差，或称为附加动量算符， \bar{p}_h 是附加动量的值，即 $\hat{p}_h \psi = \bar{p}_h \psi$ 。三者的关系如图 1 所示，我们有：

$$\hat{p} = \hat{p}_0 + \hat{p}_h \quad (104)$$

令：

$$\hat{L}_0 = \hat{r} \times \hat{p}_0 \quad \hat{L}_h = \hat{r} \times \hat{p}_h \quad (105)$$

其中 \hat{L}_h 是附加动量引起的附加角动量，微观粒子真实的角动量算符就应定义为：

$$\hat{J}_p = \hat{r} \times \hat{p} = \hat{r} \times (\hat{p}_0 + \hat{p}_h) = \hat{L}_0 + \hat{L}_h \quad (106)$$

其中 \hat{J}_p 是考虑到附加角动量后新的总角动量， $\hat{L}_0 = \hat{r} \times \hat{p}_0$ 是现有量子力学中定义的角动量算符， $\hat{L}_h = \hat{r} \times \hat{p}_h$ 是附加角动量算符，它们之间的关系如图 2 所示。

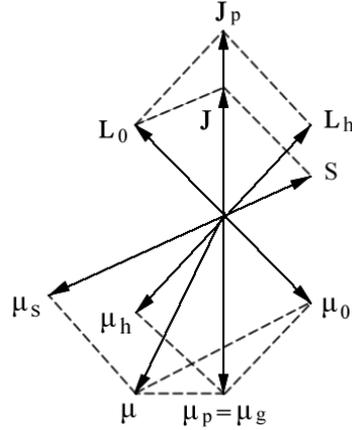


图 2. 附加角动量、自旋和磁矩的关系

微观粒子的附加角动量算符 \hat{L}_h 与自旋算符 \hat{S} 有关，以下讨论它们之间的关系。我们将证明，量子力学中引入自旋算符是为了弥补角动量算符的缺陷，或者说自旋与现有量子力学角动量算符不能描述的那部分角动量有关，由此就能弄清微观粒子自旋的本质。

4.4 微观粒子自旋的本质

量子力学中，为了解释光谱的精细结构，必须假设电子存在一个称为自旋的物理量 \hat{S} 。电子自旋在空间任何方向上的投影只能取两个值，即 $S = \pm\hbar/2$ 。自旋好像是角动量，又不完全像角动量。有时将自旋理解为粒子绕自身的对称轴自转，但却会导致电子表面切向速度是光速的 137 倍的荒谬结果⁽⁹⁾。从经典力学的角度，微观粒子的自旋概念是难以理解的，它没有经典的对应物理量。虽然量子力学诞生至今已经得到很好的发展和应用，微观粒子自旋的本质仍然是个谜。

按照现有的量子力学，原子在磁场中由自旋引起的磁矩为：

$$\bar{\mu}_s = \frac{e}{mc} \bar{S} \quad (107)$$

由角动量 \bar{L}_0 引起的磁矩为：

$$\bar{\mu}_0 = \frac{e}{2mc} \bar{L}_0 \quad (108)$$

原子物理学中将原子磁矩与角动量的比值称为回旋磁比率。按照 (108) 式 $\mu_0/L_0 = e/(2mc)$ 。如果将 \hat{S} 也视为角动量，按照 (107) 式则有 $\mu_s/S = e/mc = 2\mu_0/L_0$ 。也就是说自旋的轨道回旋磁比率是轨道角动量回旋磁比率的两倍，因此自旋被认为不是一般的角动量。

设带电粒子在磁场中的总磁矩是 $\bar{\mu}$ ，如图 2 所示，它绕着总角动量 \bar{J} 进动。因此 $\bar{\mu}$ 被认为不是一个可直接测量的物理量，物理上可测量的是 $\bar{\mu}$ 在 \bar{J} 方向的分量 μ_g ，我们有：

$$\mu_g = \frac{e}{2mc} gJ \quad (109)$$

式中 g 是朗德因子。令 \bar{J}_p 是本文考虑到附加角动量后引入的新的总角动量，假设 \bar{J}_p 和 \bar{J} 的关系为：

$$\bar{J}_p = g\bar{J} \quad (110)$$

上式给出朗德因子新的物理意义。按照新的总角动量定义，粒子在磁场中的磁矩变为：

$$\square\square \quad \bar{\mu}_p = \frac{e}{2mc} \bar{J}_p = \frac{e}{2mc} g \bar{J} = \bar{\mu}_g \quad (111)$$

可见粒子的磁矩在引入新的总角动量后不变，并且磁矩的方向与角动量方向变得一致，我们就不必再假定 $\bar{\mu}$ 绕着总角动量 \bar{J}_p 旋进。由于粒子的角动量是不可直接观察的，实验上能测量的是粒子的磁矩，我们实际上是通过测量磁矩来求粒子的角动量，新角动量的引入在实验上不会产生任何不一致。相反地，它使角动量理论变得更合理。

以下来求出附加角动量与自旋的关系。由于在有心力场中物体的轨道运动被局限在一个平面上，可以假设 \bar{S}_p 、 \bar{J} 、 \bar{J}_p 、 \bar{L}_0 和 \bar{L}_h 均在一个平面上。如图 2 所示，有以下关系：

$$S^2 = J^2 + L_0^2 - 2JL_0 \cos \alpha \quad (112)$$

$$L_h^2 = J_p^2 + L_0^2 - 2J_p L_0 \cos \alpha \quad (113)$$

$$L_0^2 = J_p^2 + L_h^2 - 2J_p L_h \cos \beta \quad (114)$$

$$L_0^2 = J^2 + S^2 - 2JS \cos \theta \quad (115)$$

从 (110)，(112) 和 (113) 得：

$$L_h = \sqrt{g(g-1)J^2 + (1-g)L_0^2 + gS^2} \quad (116)$$

从 (114) 和 (115) 式，得：

$$\cos \beta = \frac{(2g-1)J^2 - L_0^2 + S^2}{2J \left[g(g-1)J^2 + (1-g)L_0^2 + gS^2 \right]^{1/2}} \quad (117)$$

通过量子力学可以求出 J 、 S 和 L_0 ，朗德因子 g 可以从实验中求出，因此从 (116) 和 (117) 式， L_h 和 β 可以被确定。例如当 $L_0 = 0$ ， $g = 2$ ， $J = S$ 时，有 $L_h = 2S$ 和 $\beta = 0$ 。此时的 L_h 就是氢原子基态电子的角动量。也就是说对于基态电子 $L_0 = l = 0$ ，**正是角动量 L_h 使基态电子绕核做稳定运动，免于落入原子核。** 此时由附加角动量引起的磁矩是：

$$\bar{\mu}_h = \frac{e}{2mc} \bar{L}_h = \frac{e}{mc} \bar{S} \quad \text{或} \quad L_h = 2S \quad (118)$$

这就解释了自旋的轨道回旋磁比率是轨道角动量回旋磁比率的两倍这一事实。也就是说对于在原子中运动的电子，附加角动量 L_h 才是真正的角动量。自旋不是真正的角动量，我们只能将其视为某种量子数，从它可得到电子真正的角动量 \bar{J}_p 。如图 2 所示，有如下关系：

$$\bar{J}_p = g(\bar{L}_0 + \bar{S}) = \bar{L}_0 + \bar{L}_h \quad (119)$$

事实上量子力学中，我们用泡利方程描述氢原子光谱在磁场中分裂的塞曼效应，运动方程是⁽¹⁰⁾：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi_1 + U(r)\psi_1 + \frac{eH}{2\mu c} (\hat{L}_z + \hbar)\psi_1 = E\psi_1 \quad (120)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 \psi_2 + U(r)\psi_2 + \frac{eH}{2\mu c} (\hat{L}_z - \hbar)\psi_2 = E\psi_2 \quad (121)$$

式中 $(\hat{L}_z + \hbar)\psi_1 = (m+1)\hbar\psi_1$, $(\hat{L}_z - \hbar)\psi_2 = (m-1)\hbar\psi_2$, 角动量在 z 轴方向上的分量与自旋算符产生 $\pm\hbar$ 是并列的。这个结果实际上已经说明, 电子自旋算符对应的真实角动量是 $\pm\hbar$, 而不是 $\pm\hbar/2$ 。之所以要将电子的自旋算符在任意方向上的投影写成 $S = \pm\hbar/2$, 只是一种方便的数学表示方法。正确地说, 我们应当将 $S = \pm\hbar/2$ 看成一种量子数, 利用它我们能够得到微观粒子正确的角动量。

在一般的情况下 $L_0 \neq 0$, 粒子的角动量就比较复杂。以氢原子的 $2P_{1/2}$, $2P_{2/3}$ 和 $2D_{2/3}$ 态为例, 按 (116) 和 (117) 式分别计算 L_h , β 和 J_p 的值, 结果如下:

$$\begin{aligned}
 2P_{1/2}: \quad & g = \frac{2}{3} & L_h = \hbar & L_0 = \sqrt{2}\hbar & S = \frac{\sqrt{3}\hbar}{2} \\
 & J = \frac{\sqrt{3}\hbar}{2} = 0.87\hbar & \beta = 125^\circ 44' & J_p = 0.74\hbar \\
 2P_{2/3}: \quad & g = \frac{3}{4} & L_h = \sqrt{2}\hbar & L_0 = \sqrt{2}\hbar & S = \frac{\sqrt{3}\hbar}{2} \\
 & J = \frac{\sqrt{15}}{2}\hbar = 1.94\hbar & \beta = 23^\circ 36' & J_p = 2.60\hbar \\
 2D_{2/3}: \quad & g = \frac{4}{5} & L_h = \frac{2\sqrt{15}\hbar}{5} & L_0 = \sqrt{6}\hbar & S = \frac{\sqrt{3}\hbar}{2} \\
 & J = \frac{\sqrt{15}}{2}\hbar = 1.94\hbar & \beta = 135^\circ & J_p = 2.82\hbar & (122)
 \end{aligned}$$

由此我们就可以揭示微观粒子自旋概念的真正含意。自旋不是真正的角动量, 虽然它与微观粒子的角动量相关。之所以需要引入自旋, 是由于量子力学角动量算符的不完备。

对于微观粒子而言, 自旋 \vec{S} , 角动量 \vec{L} 和附加角动量 \vec{L}_h 实际上都只是一种有用的数学工具, 我们用它们来构造微观粒子真实的总角动量 \vec{J}_p 。附加角动量 \vec{L}_h 不能自动地出现在量子力学中, 引入 \vec{L}_h 后微观粒子总角动量与磁矩的关系就变得正常了, 我们也不必再假定磁矩绕着总角动量旋进。对微观粒子而言, 只有一个真实的角动量 \vec{J}_p , 不存在单独的 \vec{L}_0 , \vec{L}_h 和 \vec{S} 。

五 贝尔不等式得不到实验支持的真正原因

5.1 贝尔不等式的推导

贝尔不等式得不到实验支持的原因有两点, 一是微观粒子满足的是量子统计方法, 贝尔不等式的推导采用的是经典统计方法; 二是量子力学对微观粒子自旋角动量投影概念的理解有误。

我们先简述贝尔不等式的导出过程⁽¹¹⁾。设两个自旋为 $\hbar/2$ 的粒子组成总自旋为零的系统, $\hat{\sigma}$ 是自旋算符, 取 $\hbar/2$ 为单位。令代表 A_a 代表粒子 1 在 \vec{a} 方向自旋的测量值, B_b 代表粒子 2 在 \vec{b} 方向自旋的测量值。按照量子力学, $A_a \cdot B_b$ 是关联算符 $\hat{E}(\hat{a} \cdot \hat{b}) = \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{a} \hat{\sigma}_2 \cdot \hat{b}$ 对波函数的平均值, 计算可得:

$$A_a \cdot B_b = E_\psi(\hat{a} \cdot \hat{b}) = \langle \psi | \hat{E}(\hat{a} \cdot \hat{b}) | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{a} \hat{\sigma}_2 \cdot \hat{b} | \psi \rangle \quad (123)$$

系统的波函数为:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_+(A)\psi_-(B) - \psi_-(A)\psi_+(B) \right] \quad (124)$$

$$\text{可得:} \quad E_\psi(\hat{a} \cdot \hat{b}) = -\hat{a} \cdot \hat{b} \quad (125)$$

当 $\hat{a} = \hat{b}$ 时, 得 $E_\psi(\hat{a} \cdot \hat{b}) = -1$, 这是量子力学的结果。如果存在描述微观粒子确定性运动的隐变量, 设粒子的自旋由隐变量 λ 描述, 隐变量对应的系综分布函数是 $\rho(\lambda)$, $\rho(\lambda)$ 是归一化的, 有:

$$\int \rho(\lambda) d\lambda = 1 \quad (126)$$

将关联算符对隐变量做统计平均, 就有:

$$E_\lambda(\hat{a} \cdot \hat{b}) = \int A_a(\lambda) B_b(\lambda) \rho(\lambda) d\lambda \quad (127)$$

如果理论是定域的, 没有超距作用, 对粒子 1 的测量只依赖于 λ 和 \hat{a} , 与 \hat{b} 无关。对粒子 2 的测量也只依赖于 λ 和 \hat{b} , 与 \hat{a} 无关。对于任意的 \hat{a} 和 \hat{b} , 就有:

$$(A_a \cdot B_b)(\lambda) = A_a(\lambda) B_b(\lambda) \quad (128)$$

由于两个粒子的自旋方向相反, 当 \hat{a} 和 \hat{b} 在同一个方向时, 按照 (125) 式就有 $E_\lambda(\hat{a} \cdot \hat{a}) = -1$, 就有:

$$A_a(\lambda) = -B_a(\lambda) \quad \text{或} \quad A_a(\lambda) B_a(\lambda) = -1 \quad (129)$$

令 \hat{c} 是另外一个方向矢量, 如果 $A_a(\lambda) B_b(\lambda) = -1$, 就有:

$$\begin{aligned} E_\lambda(\hat{a} \cdot \hat{b}) - E_\lambda(\hat{a} \cdot \hat{c}) &= \int \left[A_a(\lambda) B_b(\lambda) - A_a(\lambda) B_c(\lambda) \right] \rho(\lambda) d\lambda \\ &= \int \left[A_a(\lambda) B_b(\lambda) + A_a(\lambda) B_b(\lambda) A_a(\lambda) B_c(\lambda) \right] \rho(\lambda) d\lambda \\ &= \int A_a(\lambda) B_b(\lambda) \left[1 + A_a(\lambda) B_c(\lambda) \right] \rho(\lambda) d\lambda \end{aligned} \quad (130)$$

再考虑到 $|A_a(\lambda) B_b(\lambda)| = 1$, 代入上式就得到贝尔不等式:

$$\left| E_\lambda(\hat{a} \cdot \hat{b}) - E_\lambda(\hat{a} \cdot \hat{c}) \right| \leq \int \left[1 + A_a(\lambda) B_c(\lambda) \right] \rho(\lambda) d\lambda = 1 + E_\lambda(\hat{a} \cdot \hat{b}) \quad (131)$$

从上式可以证明隐变量的关联可能与量子力学的关联相矛盾。令 \hat{a} , \hat{b} 和 \hat{c} 是三个共面矢量, \hat{a} 和 \hat{b} 之间的夹角是 60° , \hat{b} 和 \hat{c} 之间的夹角也是 60° , \hat{a} 和 \hat{c} 之间的夹角就是 120° 。

量子力学关联 $E_\psi(\hat{a} \cdot \hat{b}) = E_\psi(\hat{b} \cdot \hat{c}) = -\cos 60^\circ = -1/2$, $E_\psi(\hat{a} \cdot \hat{c}) = -\cos 120^\circ = 1/2$ 。如果令 $E_\psi(\hat{a} \cdot \hat{b}) = E_\lambda(\hat{a} \cdot \hat{b})$ 代入 (131) 式, 就得到 $1 \leq 1/2$ 的荒谬结果, 也就是说贝尔不等式与量子力学是不可能完全一致的。

贝尔不等式建立后, 物理学家做了大量实验, 结果大多支持量子力学, 不支持贝尔不等式。因此目前一般认为隐变量是不存在的, 对微观粒子不可能进行确定性的描述。

5.2 贝尔不等式得不到实验支持的真正原因

按照本文有两个原因导致贝尔不等式不成立, 这两个原因实际上都与隐变量无关。

1. 微观粒子遵从量子统计规律, (108) 式是粒子统计平均的结果。然而对关联算符 $\hat{E}_\lambda(\hat{a} \cdot \hat{b})$ 求

统计平均时，采用的（112）式实际上是经典统计力学的公式。由于两种统计平均计算方法不一致，肯定会引出结果的不一致，这种不一致与是否存在隐变量无关。

2. 现有量子力学对自旋投影的概念理解有误，以下对此做详细分析。

自旋被认为是角动量，角动量是矢量。按照现有的量子力学对自旋的理解，自旋在空间任意方向的投影分量均等于 ± 1 （取 $\hbar/2$ 做为单位）。然而这样的矢量在真实的几何空间是不可能存在，设矢量 $\vec{A} = A_x \vec{i} + A_y \vec{j} + A_z \vec{k} + A_z \vec{k}$ ，模为 $|\vec{A}|$ 。如果 \vec{A} 在 \vec{k} 方向的投影为 $\pm |\vec{A}|$ ， \vec{A} 在 \vec{i} 和 \vec{j} 方向的投影只能是零，不可能有任何真实的物理量在不同空间方向的投影都一样。

事实上由于自旋一般总是与磁场耦合成相互作用哈密顿量，对微观粒子自旋的正确理解应当是，如果我们选择磁场的方向为 z 轴，自旋在磁场方向的投影就为 $\pm \hbar/2$ 。也就是说是我们实际上是假设自旋在磁场方向的投影为 $\pm \hbar/2$ ，而不是在任意方向（包括在 z 轴方向的投影）为 $\pm \hbar/2$ 。更明确地说，量子力学中自旋是以 $\pm \hbar/2$ 的数值与磁场耦合形成相互作用能的。如果磁场的方向确定，自旋与磁场的耦合也就确定，在其他方向上不可能观察到自旋的物理效应。

事实上现有量子力学是用矩阵算符来描述自旋的，其形式为：

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (132)$$

将它们作用在自旋波函数 $\chi_{1/2} = |1/2\rangle$ 和 $\chi_{-1/2} = |-1/2\rangle$ 上，我们有：

$$\hat{\sigma}_x |1/2\rangle = |-1/2\rangle \quad \langle 1/2 | \hat{\sigma}_x |1/2\rangle = 0 \quad \hat{\sigma}_x |-1/2\rangle = |1/2\rangle \quad \langle -1/2 | \hat{\sigma}_x |-1/2\rangle = 0 \quad (133)$$

$$\hat{\sigma}_y |1/2\rangle = i |-1/2\rangle \quad \langle 1/2 | \hat{\sigma}_y |1/2\rangle = 0 \quad \hat{\sigma}_y |-1/2\rangle = -i |1/2\rangle \quad \langle -1/2 | \hat{\sigma}_y |-1/2\rangle = 0 \quad (134)$$

$$\hat{\sigma}_z |1/2\rangle = |1/2\rangle \quad \langle 1/2 | \hat{\sigma}_z |1/2\rangle = 1 \quad \hat{\sigma}_z |-1/2\rangle = -|-1/2\rangle \quad \langle -1/2 | \hat{\sigma}_z |-1/2\rangle = -1 \quad (135)$$

因此只有（135）式才是自旋算符 $\hat{\sigma}_z$ 的本征方程，本征值为 ± 1 。 $\hat{\sigma}_y$ 和 $\hat{\sigma}_x$ 都不是 $\chi_{1/2}$ 和 $\chi_{-1/2}$ 的本征算符，都没有确定的本征值，甚至还会出现算符作用值为虚数，就不能认为微观粒子的自旋在空间任意方向的投影都是 ± 1 。

量子力学实际上是将自旋与轨道角动量等价对待，将自旋的平方定义为：

$$S^2 = \frac{\hbar^2}{4} (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2) = \frac{3\hbar^2}{4} = \hbar^2 s(s+1) \quad (136)$$

粒子的自旋实际上是：

$$S = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar = \hbar \sqrt{s(s+1)} \quad s = \frac{1}{2} \quad (137)$$

因此将 S 看成是一种量子数，而不是自旋角动量本身是更合适的。需要注意的是，以上只是对粒子自旋角动量的一种方便的描述方法，自旋的真正物理意义已经在上节给出。严格按照数学规则，作为物理矢量的自旋算符 $\hat{\sigma}$ 在空间任意 \hat{a} 方向的投影应当是 $\hat{\sigma} \cdot \hat{a} = \hat{\sigma}_x \cdot \hat{a}_x + \hat{\sigma}_y \cdot \hat{a}_y + \hat{\sigma}_z \cdot \hat{a}_z$ 。因此自旋在 z 方向的投影是 $\hat{\sigma}_z \cdot \hat{a}_z$ ，它与方向余弦 $\cos\theta$ 有关，其数值不等于 $\pm \hbar/2$ 。在计算（125）式时，就是这样考虑的，采用的是以下结果：

$$\hat{\sigma}_x \cdot \hat{a}_x = \begin{pmatrix} 0 & a_x \\ a_x & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y \cdot \hat{a}_y = \begin{pmatrix} 0 & -ia_y \\ ia_y & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z \cdot \hat{a}_z = \begin{pmatrix} a_z & 0 \\ 0 & -a_z \end{pmatrix} \quad (138)$$

其中 a_x , a_y 和 a_z 是单位矢量 \hat{a} 在 x , y 和 z 轴方向的投影, 我们有:

$$a_x = \sin \theta \cos \varphi \quad a_y = \sin \theta \sin \varphi \quad a_z = \cos \theta \quad (139)$$

上式意味着自旋算符在空间任意方向的投影根本不是 ± 1 , 而是在 $1 \sim -1$ 之间任何值。比如在 z 轴方向的投影是 $\pm \cos \theta$, 而不是 ± 1 。计算 $\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{a}$ 对单粒子波函数的作用和平均值时, 我们有:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{a} |\psi_+\rangle &= a_z |\psi_+\rangle = \cos \theta |\psi_+\rangle & \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{a} |\psi_-\rangle &= -a_z |\psi_-\rangle = -\cos \theta |\psi_-\rangle \\ \langle \psi_+ | \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{a} | \psi_+ \rangle &= a_z = \cos \theta & \langle \psi_- | \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{a} | \psi_- \rangle &= -a_z = -\cos \theta \end{aligned} \quad (140)$$

$$\langle \psi_+ | \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{a} | \psi_- \rangle = a_x - ia_y = \sin \theta \cos \varphi - i \sin \theta \sin \varphi$$

$$\langle \psi_- | \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{a} | \psi_+ \rangle = a_x + ia_y = \sin \theta \cos \varphi + i \sin \theta \sin \varphi \quad (141)$$

量子力学对关联函数的计算结果就是以 (140) 和 (141) 式为前提的。按照 (140) 式, 自旋算符对单粒子波函数的期望值是 $\pm \cos \theta$, 因而可以取 $1 \sim -1$ 之间任何值。

然而在推导贝尔不等式的时候, 却令 $A_a(\lambda)B_b(\lambda) = \pm 1$ 。意味着粒子的自旋在空间任意方向上的投影只能取 ± 1 , 这样的结果除了与 (139) ~ (141) 式不一致外, 在物理和数学上也都是不可实现的。贝尔不等式与量子力学不一致, 不可能得到实验的支持也是必然的。贝尔不等式实际上是一个数学上的误会, 与物理隐变量假设无关。它不但不可能与量子力学一致, 而且也不可能与经典力学和任何数理逻辑达到一致。

事实上按照本文, 自旋不是真实的可直接测量的物理量, 实验上能进行测量的是磁矩。而磁矩与附加角动量直接关联, 按照 (119) 式附加角动量在 \bar{a} 方向的投影为:

$$\bar{L}_h \cdot \bar{a} = (g-1)\bar{L}_0 \cdot \bar{a} + g\bar{S} \cdot \bar{a} = (g-1)\bar{L}_0 \cdot \bar{a} \pm g \frac{\hbar}{2} \quad (142)$$

考虑到 \hat{L}_0^2 的本征值等于 $l(l+1)\hbar^2$, 假设 \bar{L}_0 和 \bar{a} 之间的夹角为 θ , 上式变为:

$$\bar{L}_h \cdot \bar{a} = \left[2(g-1)\sqrt{l(l+1)} \cos \theta \pm g \right] \frac{\hbar}{2} \quad (143)$$

取 $\hbar/2$ 为单位, 设 $\theta = 0$, 对于原子中的 $2P_{1/2}$ 态电子, 有 $\bar{L}_h \cdot \bar{a} = -1.64$ 或 -0.27 , 对于 $2P_{2/3}$ 态电子, $\bar{L}_h \cdot \bar{a} = 2.27$ 或 $\bar{L}_h \cdot \bar{a} = -0.39$, 对 $2D_{2/3}$ 态电子 $\bar{L}_h \cdot \bar{a} = -1.78$ 或 -0.10 , 对于基态电子 $l=0$, $\bar{L}_h \cdot \bar{a} = 2S = \pm 2$ 。故在一般的情况下我们有 $\bar{L}_h \cdot \bar{a} \neq \pm 1$ 。若令 $\bar{L}_h \cdot \bar{a} \sim A_a$ 和 $\bar{L}_h \cdot \hat{b} \sim B_b \sim B_b$, 则有 $A_a(\lambda)B_b(\lambda) \neq -1$, 不可能得到贝尔不等式。

E. P. Wigner 还提供了一种贝尔不等式的证明, 可以不依赖于隐变量假设⁽¹²⁾, 而被认为仅依赖于定域性等爱因斯坦提出的三个基本假设。然而这个证明也是建立在假定单个粒子自旋在空间任意方向的单次测量值等于 ± 1 的基础上的, 因而它得不到实验支持也是必然的。

5.3 光子的极化偏振与贝尔不等式

目前大多数用来检验贝尔不等式的实验都与测量光子的偏振极化相关性有关⁽¹³⁾。在这类实验的贝尔不等式推导过程中, 当光子穿过偏振器时被认为具有极化值 $+1$, 当光子未穿过偏振器时被认为

极化值 -1 ⁽¹⁴⁾。由此导出的贝尔不等式同样得不到实验的支持，其原因与采用自旋投影概念有类似之处。光的极化或偏振是个宏观概念，对单个光子而言，谈论其极化是没有意义的。我们仅能从宏观统计平均的角度来谈论光的极化问题，因为极化或偏振代表电磁场的振动方向，而电磁场的振动是一个宏观概念，反映了大量光子的统计平均行为。

在经典光学中我们知道，光的偏振方向被定义为电场的振动方向，一个线偏振光通过偏振器后电场的振动方向会发生改变。比如一束线偏振光进入方解石晶体后，变成 e 光和 o 光，两种光的电场的振动方向都与原先不同。因此如果非要给每个光子定义极化概念的话，只能认为每个光子的极化方向等于电场的振动方向。光子通过方位角为 θ 偏振器后，电场的方向转过一个角度 θ ，我们应当认为光子的极化变成 $\cos\theta$ 。对于未穿过偏振器的被反射光子，则按被反射光的电场振动方向的变化定义光子的新的极化值。也就是说光子极化值在任意方向上的投影与偏振器的方位角以及是穿过还是被反射有关，不可能都等于 ± 1 。

然而在推导贝尔不等式时，却假设单个光子的偏振都是 ± 1 ，所犯错误与计算粒子自旋相关时的错误是一样的。用单个光子极化为 ± 1 的前提推导贝尔不等式不可能是正确的，得不到实验支持也是必然的。事实上用量子力学计算光子偏振关联时，所使用的公式也与 (140) 和 (141) 式类似，都与方向角有关。

由于贝尔不等式不被实验支持，目前人们认为隐变量不存在。同时认为微观领域定域性因果关系受到破坏，量子力学与狭义相对论不相容。然而按照本文以上讨论，贝尔不等式不被实验支持的原因在于现有量子力学对微观粒子自旋和光子极化概念的理解有误，与是否存在隐变量和微观过程定域性是否被破坏无关。

六 量子力学 EPY 动量佯谬的消除

量子力学中的 Einstein-Pauli-Yukawa 动量佯谬是令人困惑的基本问题，它实际上量子力学波函数的箱归一化有关。我们知道自由粒子波函数如果采用箱归一化，粒子动量的连续谱就会变成分立谱。变换到动量空间描述，也会产生 EPY 动量佯谬问题。以下先简述这个佯谬，然后讨论如何消除它。考虑一维无限深势阱内粒子的运动，势阱的形式是：

$$U(x) = \begin{cases} 0 & (-a < x < a) \\ \infty & (|x| \geq a) \end{cases} \quad (144)$$

通过量子力学运动方程，得到的势阱内粒子的能量为：

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} = \frac{p_n^2}{2m} \quad p_n = \frac{n\pi\hbar}{2a} \quad (145)$$

m 是粒子的质量，在 $-a < x < a$ 的取域，的波函数是：

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{n\pi x}{2a} & n = \text{奇数} \\ \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{n\pi x}{2a} & n = \text{偶数} \end{cases} \quad (146)$$

在 $|x| \geq a$ 的区域 $\psi_n = 0$ ，基态波函数也能写成：

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{\pi x}{2a} = \frac{1}{2\sqrt{a}} \left(e^{ip_1 x/\hbar} + e^{-ip_1 x/\hbar} \right) \quad (147)$$

将现有量子力学的动量算符 $-i\hbar d/dx$ 作用其上，得到动量本征值 $\pm p_1$ 。结果表明基态波函数似乎可以看成两个动量 $\pm p_1 = \pm \pi\hbar/(2a)$ 的粒子波函数的叠加。因此爱因斯坦，泡利和汤川秀树等人认为基态中粒子只有两个独立的动量 p_1 和 $-p_1$ ，出现的几率各为 $1/2$ 。

另一方面，将 (147) 式变换到动量空间，就有：

$$\varphi_1(\bar{p}) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi\hbar a}} \int_{-a}^a \left(e^{i(p_1-p)x/\hbar} + e^{-i(p_1+p)x/\hbar} \right) dx = \frac{\sqrt{\pi}\hbar^{3/2}}{\sqrt{2a^{3/2}}} \frac{\cos(ap/\hbar)}{p^2 - p_1^2} \quad (148)$$

在动量空间，基态波函数的几率是：

$$\rho_1(p) = |\varphi_1(p)|^2 = \frac{\pi\hbar^3}{2a^3} \frac{\cos^2(ap/\hbar)}{(p^2 - p_1^2)^2} \quad (149)$$

上式不是 $\pm p_1$ 几率各为二分之一的分布，就出现矛盾，即所谓 EPY 动量佯谬。由于这个矛盾一直无法解决，有人因此认为量子力学的逻辑基础存在不自洽性⁽¹⁵⁾。

EPY 动量佯谬的关键问题在于，势阱是一个边界有限的区域，在其中运动的粒子动量是分立的，波函数就不可能有连续谱分布。如果边界无限，(148) 式的积分区域从 $-\infty$ 到 ∞ ，就不存在矛盾，我们有：

$$\varphi_1(\bar{p}) = \lim_{a \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2a}} \left[\frac{\sin((p_1-p)a/\hbar)}{\pi(p_1-p)} + \frac{\sin((p_1+p)a/\hbar)}{\pi(p_1+p)} \right] = \sqrt{\frac{\pi\hbar}{2a}} (\delta(p_1-p) + \delta(p_1+p)) \quad (150)$$

然而量子力学中我们知道，箱体内自由粒子的波函数是箱归一化的，粒子的动量是分立的。设立方体的边长是 L ，归一化的波函数为：

$$\psi_n(\bar{x}) = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\bar{p}_n \cdot \bar{x}} \quad p_n = \frac{2\pi\hbar n_\alpha}{L} \quad (151)$$

一维无限势阱的波函数和动量与上式基本一样，只不过空间维数不同罢了。这个事实告诉我们，在空间有限的区域中是无法定义动量连续谱波函数的。然而我们在将 (148) 式变换到动量空间的时候，却采用动量连续谱的形式，由此产生了矛盾，导致动量佯谬。

事实上如果采用动量连续谱波函数，还会产生更严重的问题。按照算符几率平均计算方法，考虑到对称性，在动量空间中粒子动量算符的平均值为零，动量算符平方的平均值为：

$$\bar{p}^2 = \int_{-\infty}^{\infty} p^2 \rho(p) dp = \frac{\pi\hbar^3}{2a^3} \int_{-\infty}^{\infty} p^2 \frac{\cos^2(ap/\hbar)}{(p^2 - p_1^2)^2} dp \quad (152)$$

上式被积函数在 $p = p_1$ 处存在奇点，我们来证明积分结果是无穷大。我们有：

$$\int_{-\infty}^{\infty} p^2 \frac{\cos^2(ap/\hbar)}{(p^2 - p_1^2)^2} dp = \int_{-\infty}^{p_1} \frac{p^2 \cos^2(ap/\hbar)}{(p-p_1)^2(p+p_1)^2} dp + \int_{p_1}^{\infty} \frac{p^2 \cos^2(ap/\hbar)}{(p-p_1)^2(p+p_1)^2} dp \quad (153)$$

令 $u = p - p_1$ ，得：

$$\begin{aligned} \int_{p_1}^{\infty} \frac{p^2 \cos^2(ap/\hbar)}{(p-p_1)^2(p+p_1)^2} &= \int_{p_1}^{\infty} \frac{(p-p_1+p_1)^2 \cos^2(ap/\hbar)}{(p-p_1)^2(p-p_1+2p_1)^2} dp = \int_0^{\infty} \frac{(u+p_1)^2 \cos^2(a(u+p_1)/\hbar)}{u^2(u+2p_1)^2} du \\ &= \int_0^{\varepsilon} \frac{(u+p_1)^2 \cos^2(a(u+p_1)/\hbar)}{u^2(u+2p_1)^2} du + \int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{(u+p_1)^2 \cos^2(a(u+p_1)/\hbar)}{u^2(u+2p_1)^2} du \end{aligned} \quad (154)$$

设 ε 是一个很小的数，但不等于零，我们有：

$$\begin{aligned} \int_0^{\varepsilon} \frac{(u+p_1)^2 \cos^2(a(u+p_1)/\hbar)}{u^2(u+2p_1)^2} du &\approx \frac{(\varepsilon+p_1)^2 \cos^2(a(\varepsilon+p_1)/\hbar)}{(\varepsilon+2p_1)^2} \int_0^{\varepsilon} \frac{du}{u^2} \\ &= \frac{(\varepsilon+p_1)^2 \cos^2(a(\varepsilon+p_1)/\hbar)}{(\varepsilon+2p_1)^2} \frac{1}{u} \Big|_0^{\varepsilon} = \frac{(\varepsilon+p_1)^2 \cos^2(a(\varepsilon+p_1)/\hbar)}{(\varepsilon+2p_1)^2} \left(\frac{1}{0} - \frac{1}{\varepsilon} \right) = \infty \end{aligned} \quad (155)$$

(154) 式右边的第二项是有限的，计算如下。令：

$$\begin{aligned} &\int_{\varepsilon}^{\infty} \frac{(u+p_1)^2 \cos^2(a(u+p_1)/\hbar)}{u^2(u+2p_1)^2} du \\ &= \int_{\varepsilon}^g \frac{(u+p_1)^2 \cos^2(a(u+p_1)/\hbar)}{u^2(u+2p_1)^2} du + \int_g^{\infty} \frac{(u+p_1)^2 \cos^2(a(u+p_1)/\hbar)}{u^2(u+2p_1)^2} du \end{aligned} \quad (156)$$

设 $p_1 \ll g < \infty$ ，我们有：

$$\begin{aligned} \int_g^{\infty} \frac{(u+p_1)^2 \cos^2(a(u+p_1)/\hbar)}{u^2(u+2p_1)^2} du &\approx \int_g^{\infty} \frac{\cos^2(a(u+p_1)/\hbar)}{u^2} du \\ &\sim -\frac{1}{u} \Big|_g^{\infty} = \frac{1}{g} - \frac{1}{\infty} = \frac{1}{g} = \text{有限值} \end{aligned} \quad (157)$$

而 (156) 式等号右边第一项的积分则是有限的，即：

$$\int_{\varepsilon}^g \frac{(u+p_1)^2 \cos^2(a(u+p_1)/\hbar)}{u^2(u+2p_1)^2} du = \text{有限值} \quad (158)$$

同理可证，(153) 式右边第一项的积分也是无限的。因此 (152) 式的积分无穷大，动能算符在动量空间的平均值为无穷大，不可能等于 (145) 式。由于能量是可测量值，与参考系无关，无限势阱内粒子的动量只能是 $\pm p_1$ ，不可能是 (149) 式的连续分布。

这个问题不仅在无限势阱中存在，在其他边界有限的量子力学过程中都存在。在一个边界有限的区域中，如果粒子的动量是分立的，我们就无法将有分立谱的非自由波函数写成动量连续谱的自由平面波的叠加形式。

我们来讨论边界有限情况下，无限深势阱中粒子的动量算符。将量子力学动量算符对波函数 (146) 式作用，坐标空间的非本征值 $p_1(x)$ 是一个虚数，我们有：

$$\hat{p}_1 \psi_1(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi_1(x) = i \frac{\pi\hbar}{2a^{3/2}} \operatorname{tg} \frac{\pi x}{2a} \psi_1(x) \quad (159)$$

$$p_1(x) = i \frac{\pi \hbar}{2a^{3/2}} \operatorname{tg} \frac{\pi x}{2a} \quad (160)$$

按本文以上讨论，一维情况下我们无法合理定义动量算符，但粒子的动量可以通过动能来计算，为了确定粒子的动量算符，我们考虑二维空间无限深势阱。设势阱的长和宽都是 a ，势阱的形式是：

$$U(x) = \begin{cases} 0 \\ \infty \end{cases}, \quad U(y) = \begin{cases} 0 \\ \infty \end{cases}, \quad \begin{matrix} (-a < x < a), & (-a < y < a) \\ (|x| \geq a), & (|y| \geq a) \end{matrix} \quad (161)$$

解量子力学运动方程，基态波函数和基态能量是：

$$\psi_1(x) = \frac{1}{a} \cos \frac{\pi x}{2a} \cos \frac{\pi y}{2a} = \frac{1}{4a} \left(e^{i p_{1x}/\hbar} + e^{-i p_{1x}/\hbar} \right) \left(e^{i p_{1y}/\hbar} + e^{-i p_{1y}/\hbar} \right) \quad (162)$$

$$E_1 = \frac{p_{1x}^2 + p_{1y}^2}{2m} = \frac{p_1^2}{2m} \quad p_{1x} = p_{1y} = \pm \frac{\pi \hbar}{2a} \quad (163)$$

按照 (64) 式 $G_\alpha(\bar{x}) = a_\alpha(\bar{x}) + i b_\alpha(\bar{x})$ ，考虑波函数及 (159) 式，就有 $b_\alpha(\bar{x}) = 0$ 和：

$$a_x(\bar{x}) = -\frac{\pi \hbar}{2a^{3/2}} \operatorname{tg} \frac{\pi x}{2a} \quad a_y(\bar{x}) = -\frac{\pi \hbar}{2a^{3/2}} \operatorname{tg} \frac{\pi y}{2a} \quad (164)$$

从 (65) 和 (66) 式得到：

$$\hbar^2 \left(\frac{\partial a_x}{\partial x} + \frac{\partial a_y}{\partial y} + a_x^2 + a_y^2 \right) + Q_x^2 + Q_y^2 = 0 \quad \frac{\partial Q_x}{\partial x} + \frac{\partial Q_y}{\partial y} = 0 \quad (165)$$

将 (164) 式代入 (165) 式，解偏微分方程，就可以得到 $Q_x(\bar{x})$ 和 $Q_y(\bar{x})$ 。结果将是很复杂的，本文就不具体计算。然后再由 (68) 式和 (160) 式确定 $g_x(\bar{x})$ 和 $g_y(\bar{x})$ ，我们有：

$$\frac{\pi \hbar}{2a} = Q_x(\bar{x}) + g_x(\bar{x}) \quad \frac{\pi \hbar}{2a} = Q_y(\bar{x}) + g_y(\bar{x}) \quad (166)$$

在二维空间中量子力学动量算符的形式就被确定。用动量算符作用在波函数上，得到非本征值 $Q_x(\bar{x})$ 和 $Q_y(\bar{x})$ 。但它们不是真正的动量，二维无限势阱中粒子的动量是 $p_{1x} = p_{1y} = \pm \pi \hbar / 2a$ 。

可见在边界有限的势阱中，虽然 (148) 式的傅里叶变换在数学上合法，在物理上却是不合理的。在边界有限的区域内，动量分立的波函数不可能按边界无限空间中自由粒子动量连续谱分布的波函数展开。在边界有限的无限势阱内 (148) 式及其几率密度 (149) 式不成立，EPY 动量佯谬被消除。

七 结 论

现有量子力学动量算符对本征态波函数作用，得到的非本征值一般都是复数。用动量算符和动能算符计算微观粒子的动能，得到的结果是不一样的。因此量子力学的动量算符与动能算符不是一一对应的，产生这种不一致性的原因至今没有得到解释。曲线坐标系中动量算符一直无法合理定义。量子力学的角动量算符也存在类似的问题。这些问题涉及量子力学逻辑基础的自洽性，但没有引起物理学家的注意，我们必须认真对待。

本文通过对动量算符的重新定义，引入普适动量算符后，以上所有问题都能得到合理的解决。普适动量算符对一般非本征态波函数作用得到的非本征值都是实数，并假设动量算符只改变粒子的动量方向，不改变量粒子的动能，得到修正的薛定谔方程和能量简并态的波函数。对于自由粒子波

函数，普适动量算符就退化为现有的形式。在此基础上还能解决曲线坐标系中动量算符的定义问题，使量子力学的逻辑基础更完备。

考虑普适动量算符后，就引入附加动量和附加角动量的概念。本文给出附加角动量与微观粒子自旋之间的关系，阐明微观粒子自旋的本质。证明量子力学中引入自旋算符是为了弥补角动量算符的缺陷，或者说自旋与量子力学角动量算符不能描述的那部分角动量有关。

微观粒子的自旋算符 $\hat{S} \sim \hbar/2$ 只是一个量子数，用它可以方便地做计算。计算结果显示，氢原子 s 轨道的角动量不是零，也不是 $\pm \hbar/2$ 而是 $\pm \hbar$ ，与氢原子光谱在磁场中分裂的塞曼效应一致。由此解释了自旋轨道回旋磁比率是轨道角动量回旋磁比率两倍的事实，以及为何角动量量子数 $l=0$ 为零的 s 轨道基态电子能稳定运动，不落入原子核的原因。

由于贝尔不等式不被实验支持，目前人们认为隐变量不存在。同时认为微观领域定域性因果关系受到破坏，量子力学与狭义相对论不相容。然而按照本文以上讨论，贝尔不等式不被实验支持的原因在于现有量子力学对微观粒子自旋和光子极化概念的理解有误，与是否存在隐变量和微观过程定域性是否被破坏无关。

本文还证明，在边界有限的空间内，动量分立的波函数不可能按边界无限空间中动量连续谱波函数展开，EPY 动量佯谬被彻底消除。经此改造，量子力学的逻辑基础变得更为完善。

参考文献

1. J. M. Domingos, M. H. Caldeira, H. Self-Adjointness of Momentum Operators in Generalized Coordinates, *Foundation of Physics* 14, 147~154, (1984).
2. A Einstein, *Science Paper Presented to Max Born, on His Retirement from the Tait Chair of Natural Philosophy in the University of Edinburgh*. New York, Hafner, 1953. W. Pauli, *Pauli Lecture on Physics*, Vol., 5, Wave Mechanics, Cambridge: (Mass), MIT, Press, 1973. H. Yukawa, *Quantum Mechanics*, Vol I, 2nd Ed, Tokyo, YanBo, Bookshop, 1978.
3. 硃兴林，正则动量的量子化，*大学物理*，5 期，4 页，(2001).
4. 詹佑邦，曲线坐标下的动量算符和动能算符，*大学物理*，1 期，6 页，(1988). 王正行，广义坐标中的量子化，*大学物理*，8 期，1 页，(1988).
5. 徐湛，也谈正则量子化，*大学物理*，9 期，16 页，(1991).
6. 梁灿斌，经典系统的量子化，*北京师范大学学报*，30 卷，1 期，(1994).
7. 关洪. 量子力学的基础. 83~85 页，高等教育出版社，(1996).
8. Vos, M.; McCarthy, I., Electron-Momentum Spectroscopy and the Measurement of Orbits, *Am. J. Phys.* 1997, 65, 544-553.
9. 张永德，*量子力学*，科学出版社，2008，183 页.
10. 周世勋，*量子力学*，上海科学技术出版社，1962.
11. J. S. Bell, On the problem of hidden variables in quantum mechanics, *Physics* 1, 195 (1965).
12. E. P. Wigner, *Am. J. Phys.*, 38, 1005, (1970).
13. J.F Clauser, M.A. Horne, A. Shimony, R.A. Holt, *Phys. Rev. Lett.*, 23,880, (1969).
L. R. Kasday, J. D. Ullman, 吴剑雄, *Nuovo Cimen*, 25, 633 (1975).
G. Faraci, D.Gutkowski, S. Notarrigo & A.R.Pennis: *Nuvo Cimento Letter*, 9, 607(1974).
Applied Physics, 5, 63 (1974).

14. S. J. Freedman, J. F. Clauser, *Phys. Rev. Lett.*, 28, 938 (1973).

J. P. Vigièr, C. R. Hebed, *Seance Acad. SciB. (France)*, 279, 1, (1974).

15. 陶宗英. 关于量子力学基础的一个质疑. *光子学报*, 26 卷, 769 页, (1997).