Principles of Quantum Mechanics

■陳丕燊

I導　言

Principle 這個字在物理學上的用法是頗含混的。例如在古典力學裡，我們若把 Least Action Principle 看做準設（Postulate），則運動方程式可以由此 Principle 導出。但是像老量子論中的 Correspondence Principle 却只是量子力學極自然的結論之一，並不是一個必要的假設。因此我們可以說一個 Principle 的提出，有時是邏輯結構上的，有時却是一時的權宜之計。不過有一個共同點，就是假定它們是 universal 的。

本文的主要目的，在於由設基化量子力學（Axiomatic Quantum Mechanics），說明量子力學中幾個重要的 Principle 都是一些可以證明的定理。

II量子力學的設基化

使一個物理學的理論設基化已經不是一件新鮮的事了，此處不討論它在經驗科學一如物理學中的地位。就邏輯上言，構成一個理論的所有設基（Axiom）必須至少滿足完備性（Completeness）與一致性（Consistency），至於獨立性（ Indepndence）若在使理論更易推展的情形下是可以犧牲的。不過這些性質（除獨立性較易辨別外）多需要用窮舉法，而反證却方便得多（如有名的 Russell Paradox），因此對以下所提出的設基是是否滿足上述三性質，我們不做討論。

一個物理學理論的設基，我認爲至少包括兩組，一組稱爲對應設基，這一組設基把物理理論中的物理量對應到某一數學理論中的數學量，使兩者間有同構（Isomorphism）的關係。但是物理不同於數學之處，在於物理量和實驗或觀測有關，因此需要有另一組設基，稱爲量度設基，來連繫自然界和理論。有了上述的討論做基礎，我們可展開理論了。

討論物理現象，離不開其範圍，因此我們從 Physical system的定義開始。

【定義】Physical system：將包含一切物理現象及性質的集合稱爲"宇集合"，以U表示者。若U中有部分集合，A，A′滿足 $A\cap A'=\phi$，$A\cup A'=U$，則稱A（或A′）孤立（islated）於A′（或A）。若我們要研究A集合中之現象及互相間的關係，我們稱A爲一Physical systen。

【定義】State：設 p，q，r，s……爲物理量，對 Physical system A存在一函數Ψ（p，q，r，s…）>，其在任一時刻 t。可以描述A之運動，且包含A中最大可能互相一致的條件，則稱 $|\Psi t_0>$ 爲一 state。

【定義】Operator：設S爲由相同定義域的函數 $|\phi>|\phi>$，……所成之空間（space），p爲一使S中任一函數 $|\phi>$ 映至S中另一函數 $|\phi>$ 之關係。

$$|\phi = p|\phi>，$$

則稱 p 爲一operator

若定義域不同，則雖有相同的關係，我們視爲不同的 operator

$\boxed{\text{設基 I（對應設基a）}}$：每一物理量對應一 opertor 若 q_i 之 conjugate momentun 爲 p_i，則 $q_i\leftrightarrow q_i$。$p_i\leftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial q_i}$。若 $q_i\equiv t$，則 $t\leftrightarrow t$，$E\leftrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$。

【定義】Compete set：若對於函數Ψ，存在一組state $|\Psi_1>$，……$|\Psi_n>$，互爲綫性獨立，則稱 $|\Psi_i>$ 形成一組 complete set。記爲 $\{|\Psi_i>\}$。故任一 state $|\Psi>$ 均表爲 $|\Psi>=a_1|\Psi_1>+a_2|\Psi_2>+\cdots+a_n|\Psi_n>$，$a_i$ 爲複數。

【定義】Observable：對於某一物理量所對應爲 operator p，若 $|p_i>=p'|p_i>$（故 p′ 爲複數）則稱 $|p_i>$ 爲 operater p 之一 eigenstate。若所有p之 eigenstate $|p_1>|p_2>\cdots|p_n>$ 形成 complete set，則稱 p 爲一 observable。

【定義】Commute and Commutator：

commutator of u and v

$$\equiv -\frac{1}{i\hbar}(uv-vu)=[u，v]。$$

若 $[u，v]|\Psi>0$，則稱 u 與 v commute。

定理：若 u 與 v commute，則 u 與 v 有一組共同的 complete set，表爲 $\{|u_i v_i>\}$。

$\boxed{\text{設基 II（對應設基b）}}$：設 p，q，r，s ……爲 observable，其 eigenstate 分別 $|p_i>$，$|q_j>$，$|r_k>$，$|S_l>$……對於 physical system A，存在一函數

$|\Psi(p,q,r,s\cdots)\rangle$，可以描述A之運動，具包含最大可能數量互相一致的條件。對此函數之每一 state $|\Psi(p,q,r,s\cdots)\rangle$，恰有Hilbert space 中之一向量 $|p,q,r,s\cdots\rangle = |p\rangle|q\rangle|r\rangle|s\rangle\cdots$與之對應其 eigenstate 表爲 $|p_i q_j r_k s_l\cdots\rangle$，爲 $|p_i\rangle$, $|q_j\rangle$, $|r_k\rangle$, $|s_l\rangle$;……的張量積。

$$|p_i q_j r_k s_e\cdots\rangle = |p_i\rangle|q_j\rangle|r_k\rangle|s_l\rangle\cdots\cdots$$

【定義】$\langle u|$ 爲Hilbert space 中 $|u\rangle$的對應向量，$\langle u|$與任一$|v\rangle$滿足Hilbert space 中的 scalar product 若 $|u\rangle = a_1|u_1\rangle + a_2|u_2\rangle + \cdots\cdots + a_n|u_n\rangle$

則 $$\langle u|u\rangle \equiv \sum_{i=1}^{n}|a_i|^2$$

【定義】operator a 的 expectation value 定義如下: $\langle a\rangle \equiv \Sigma\langle u_i|a|u_i\rangle$

【定義】設 a 爲一operator，定義其 adjoint a^+ 如下:

若 $|a\rangle = a|p,q,r,s\cdots\rangle$

則 $\langle p,q,r,s,\cdots|\ a^+ = \langle a|$

【定義】若 $a = a^+$，則稱 a 爲一Hermitian operator

由設基I及 commutator 的定義可得下定理：

定理：設 $q_1\ q_2\cdots$爲genelized coordinate，$p_1\ p_2\cdots p_n\cdots$爲其 cononical momentun，則

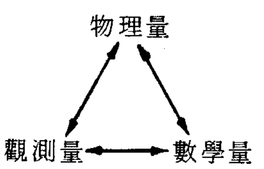
$$[p_i,q_j]=0，[p_i,p_j]=0，[q_r,p_s]=\delta_{rs}$$

此稱爲" fundamental quantum condition"。

定理：若u 爲 v 爲Hermitian，則$[u,v]=W$亦爲Hermitian。

以上的兩個設基，把量子力學變數或函數，與已經設基化了的數學理論Hilbert space 做一對應，因此一些Hilbert space 中的定理我們可加以引用（如 Schwartz inequality 等）。

關係度量與物理及數學變數間的關係，可以用下圖說明：



在相對論裡，關於度量的設基是：在相對運動的兩個慣性系中做相同實驗，所得的物理定律相同。現在讓我們來看量子力學對度量所做的設基

在進行一個實驗時，我們用尺、天平、鐘錶，計數器等等，來獲得時間、空間、質量等等資料。然而這些測量都可以約化（ reduce ）成一組命題，每一命題有"眞"或"非眞"二值。例如量長度時，我們可以問：它是不是比五公分長？是；是不是比六公分長？不是;那麼它在五與六公分之間。整個實驗不過是這些命題的擴大罷了。這些（某一實驗中的）命題，形成一命題系統（Propositionol system）。

設基Ⅲ，設物理實驗的命題系統L中之之元素爲 e_1 $e_2\cdots\cdots$則各元素間除分配律外，滿足邏輯中的命題運算。

【定義】$e_1\subseteq e_2$ 表爲 e_1 導致（ imply ）e_2；$e_1\cup e_2$ 表爲 e_1 或 e_2；$e_1\cap e_2$ 表爲 e_1 且 e_2 故L所不遵守之分配律可表爲：

$$e_1\cap(e_2\cup e_3)=(e_1\cap e_2)\cup(e_1\cap e_3)$$
$$e_1\cup(e_2\cap e)=(e_1\cup e_2)\cap(e_1\cup e_3)$$

其中 e_1，e_2，$e_3 \neq \phi$

此一設基是有實驗支持的因爲我們發現在原子層次的實驗，前後兩個命題是不能互相獨立的（因此是有序的），所以一般而言，它不合於分配律。

【定義】：設命題 e 爲眞之值爲 1，非眞爲 0，且令做 n 次實驗時有 n(e)次爲眞，則一物理系統在此此命題之 state 的或然率爲 $P(e)\equiv\lim\limits_{n\to\infty}\frac{n(e)}{n}$

除了對應設基與度量設基之外，關於eq. of motion 我們設基如下

設基Ⅳ: 設H爲Hamiltonian，則 eq. of motion 爲 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle=H|\Psi\rangle$。

在一個力學理論中，必須有關於 eq. of motion的設基，例如古典力學中，以 F = ma或Least Action 爲設基均可（二者可互相導出）。

Ⅲ幾個 Principle

1. Supperposition Principle: 關於這個 Principle Feynman 曾經以電子通過雙狹縫爲例Dirac 及 Jauch 也以光子的極化爲例，說明量子力學的 Supperposition 觀念與古典的不同。若描述一基本粒子運動的函數爲$|\Psi\rangle$，而我們所觀察的物理量爲一observable，則由定義

$$|\Psi\rangle = a_1|\Psi_1\rangle + a_2|\Psi_2\rangle + \cdots\cdots + a_n|\Psi_n\rangle$$

於是量子力學的 supperosition principle 敘述如下： state $|\Psi\rangle$在 eigenstate $|\Psi_1\rangle$的或然率爲 $|a_1|^2$ 在 $|\Psi_2\rangle$的或然率爲 $|a_2|^2\cdots\cdots$，當我們測量 $|\Psi\rangle$時，它有時候在 $|\Psi_1\rangle$，有時候在 $|\Psi_2\rangle\cdots\cdots$但決不同時爲所有 eigenstates 的混合。

現在我們可以把前述圖解中觀測量與物理量及數學量之間的關係建立起來。上述的 supperpositon principle 中，我們設"$|\Psi\rangle$在 $|\Psi_1\rangle$"的命題爲 e_1

在 $|\Psi_2>$ 的命題爲 e_2 ……，則顯然 e_1 e_2 …… e_n 均不可約化（ irreducibe， $i.e._\forall e \neq \phi$， $x \subset e \rightarrow x = \phi$），且 $e_i \cap e_j = \phi$，因爲每一 eigenstate 均互相獨立。故 e_i 爲眞的或然率 $P(e_1) = |a_1|^2$ … $P(e_n) = |a_n|^2$ 。observable 在 $|\Psi>$ 的或然率爲 $P = P(e_1 \cup e_2 \cup \cdots \cup e_n)$。

爲了證明這個 principle，我們做一簡化，假設此一 physical system 只有兩個 eigenstate，對應於兩個命題 e_1 與 e_2 則 sup. principle 的敘述等值如下：對於命題 e_1，e_2 存在另一（或一些）命題 e_3 不同於 e_1 及 e_2，但是 e_3 導致 $e_1 \cup e_2$（即 $|\Psi_3> = a_1|\Psi_1> + a_2|\Psi_2> \rightarrow P(e_3) = P(e_1 \cup e_2)$）

爲了證明方便，我們用更嚴格的敘述：

【定理】：設 e_1 e_2 爲二不可約化的命題，$e_1 \neq e_2$，則存在一命題 e_3，$e_3 \neq e_1$ $e_3 \neq e_2$；$e_3 \neq \phi$，使式下成立：

$$e_1 \cup e_2 = e_1 \cup e_3 = e_2 \cup e_3$$

證明：設不存在滿足上式之 e_3 則所有命題系統中之命題 e 均不可導致 $e_1 \cup e_2$ 故

$e \cap (e_1 \cup e_2) = \phi$

由條件知 e_1 與 e_2 不可約化故 e_1 或 e_2 與任何命題的交集若非其本身即爲 ϕ，因爲 $e \neq e_1$，$e \neq e_2$ 故

$$(e \cap e_1) \cup (e \cap e_2) = \phi \cup \phi = \phi$$

$$\therefore e \cap (e_1 \cup e_2) = \phi = (e \cap e_1) \cup (e \cap e_2)$$

故 e 合於分配律，此與設基Ⅲ矛盾。故應存在 e_3 滿足 $e_1 \cup e_2 = e_1 \cup e_3 = e_2 \cup e_3$

2. **Uncertainty Principle:** 當初 Heisenberg 提出此一 principle 時如此敘述：如果你對一物體做測量，若你能求得其動量在 x 分量的誤差爲 $\triangle p$，則你對其 x 坐標的資料的精確程度，不大於 $\triangle x = h/\triangle p$，h 爲一宇宙常數。

【定理】：設 p_i，q_i 爲共軛動量與坐標，其期望值分別爲 $<p_i>$，$<q_i>$，定義

$(\triangle p_i)^2 \equiv <\Psi|(p_i - <p_i>)^2|\Psi>$，

$(\triangle q_i)^2 \equiv <\Psi|(q_i - <q_i>)^2|\Psi>$，

則 $\triangle p_i \triangle q_i \geqq h$

證明 （此證明可在多數量力課本中找到）利用 Hibert space 中的 Schwartz inequatity

$$\left(\int |f|^2 d\tau\right)\left(\int |g|^2 d\tau\right) > \left|\int f^* g d\tau\right|^2$$

代入 $f = (p_i - <p_i>)|\Psi>$，

$g = (q_i - <q_i>)|\Psi>$

故 $(\triangle p_i)^2_2 (\triangle q_i)^2 \geqslant$

$$\left|\int <\Psi|(p_i - <p_i>)(q_i - <q_i>)|\Psi> d\tau\right|^2$$

由 quantnm condition：$[q_i, p_i] = 1 \rightarrow$

$q_i p_i - p_i q_i = i\hbar$

$$\therefore (p_i - <p_i>)(q_i - <q_i>) = \{(p_i - <p_i>)(q_i - <q_i>) + (q_i - <q_i>)(p_i - <p_i>)\}/2 + i\frac{1}{2}\hbar = F + i\frac{1}{2}\hbar$$

F 與 $\hbar$ 均爲 Hermtian，故 $<F> =$ real，$<\hbar> = \hbar =$ real

$$\therefore (\triangle p_i)^2 (\triangle q_i)^2 \geqq <F> + \frac{1}{4}\hbar^2 \geqq \frac{1}{4}\hbar^2 \rightarrow \triangle p_i \triangle q_i \geqq \frac{1}{2}\frac{h}{2\pi} \cong \hbar$$

3. **Exclusion Principle:** Pauli 在 1925 年提出此 principle：在多電子原子中不能有一個以上電子在同一量子態。因爲嚴格的證明過於冗長，在此僅做說明。

由公設Ⅳ $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi> = H|\Psi>$。在相對討論情形下 H 不可僅僅將 $p = -i\hbar\nabla$ 代入，因爲這樣會導致對時間及空間微分的不對稱，故令 $H = c\vec{\alpha}\cdot\vec{P} + \beta mc^2 + e\phi$（在原子的中心力下），如此可得 $\alpha_x^2 = \alpha_y^2 = \alpha_z^2 = \beta^2 = 1$

$\alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0$，$i, j = x, y, z.$

並可得出 $\alpha_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$，$\alpha_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$，$\alpha_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$。並且知 $|\Psi>$ 爲 α_z 之 eigenfunction，其 eigenvalue 爲 ± 1 因此即使兩個電子的 classical momentum $\vec{P}$ 有相同的 eigenvalue，其 $<\alpha_z>$ 亦不相同。

Ⅳ結　論

關於一個物理論如何設基化，我沒有機會找到專門的書籍，因此本文的見解不一定是對的。不過它至少反應了我學了這一年量子力學的心得。上面討論了三個 principle，並不是暗示量力只有三個 principle，實在是由於篇幅及能力的緣故。關於命題系統我參考 Jauch: Foundations of Q.M.，其他重要的教科書如 Dirac，Messiah，Schiff，Feynman 也都或多或少參考了。最後謝謝蘇德潤老師及陳文進同學的意見。