結(4)

Louis H. Kauffman 著 · 謝春忠 譯

第八節: 量子力學—簡單的看法

在回顧量子力學的原理之前, 我們先對歷史做個快速的瀏覽。量子力學實起於 P. L-V. De Broglie所引介的物質波 (matter wave) 的概念—也就是波伴隨物質同時存在, 因此有波的折射、散射等現象。

De Broglie 的想法成功地解釋原子光譜的性質。在這個領域, 他的物質波假設成功地推測出原子軌道及原子光譜, 而因此解決了 Niels Bohr 理論所無法釐清的迷思。在 Bohr 的原子理論中, 電子只能在某些橢圓軌道中繞行。加上這個軌道限制, 是爲了讓整個理論與已知的原子光譜一致, 並避免矛盾。這個矛盾是這樣的, 若我們想像電子如古典力學所說繞著原子核運行, 這個粒子必須要加速才能在軌導中運轉, 但加速的電子會輻射出能量, 所以經過一段時間, 這個電子的能量經由輻射消耗而奔向原子核! Bohr假設說電子只能停繞在幾個固定的軌道, 以避免電子奔向原子核的矛盾, 卻因此犧牲了邏輯上的一致性。

De Broglie 假設, 電子是“物質波”, 而且電子的波長的某個整數倍應該是它的軌道的週長。因此, 不是所有的軌道都是可能, 只有幾個離散的軌道可能是物質波的繞行軌道。如此一來, 談理清楚, 提供了不同於 Bohr 的描述。

De Broglie 雖有物質波的想法, 但他卻沒有描述空間分布及時間演進的方程式。這樣的方程被 Erwin Schrödinger 發現了。E. Schrödinger 根據 De Broglie 的物質波假設, 而大膽提出波方程 (wave equation)—稱爲 Schrödinger 方程。這個方程非常成功地描述氫原子光譜的更細更巧的結構及其他許多物理現象。忽然間, 由 De Broglie 音樂性的假說, 而導致一個全新的物理—量子力學—出現了。

伴隨著量子力學的成功, 出現一些異常而有待解釋的問題。例如, Schrödinger 及 De Broglie 的波函數到底是什麼? 是否意謂著物理現實中的一種新元素? 物質是否就是連續的波動? 電子是波, 爲什麼又能在一時一地瞬間引發一個特殊的事件, 比方說讓一點螢光在你的電視銀幕上閃爍?

接著 Max Born 發展出以統計的觀點來解釋波函數— "波"決定了局部粒子現象 (也就是我們所稱的電子) 發生的機率。在這個說法裡波函數 ψ 是複值函數, 而與其相關的機率是 $\psi^*\psi$ (ψ^* 是 ψ 的共軛函數)。這個說法用來解釋理論, 在數學上來說是令人滿意的, 但卻進一步引發對於"統計"的"確定性"的問題。如果量子理論先天上就是具有統計特性的, 那麼它就不能對電子的運行提供完整的訊息。事實上即使在原則上, 也可能根本就沒有所謂"完整的訊息"。電子, 當我們以某些方式觀察時是粒子, 而以其他方式觀察時, 呈現出波的特性。這是 Bohr, Heisenberg, Born 觀點的要義, 其他的物理學家包括 De Broglie, Einstein 和 Schrödinger 則希望對自然有更直接而且具決定性的理論。

在下面的討論, 我們將看到量子力學的機率統計特性, 在形式上有助於我們了解一些一般東西的拓樸性質, 譬如空間中的結、鏈結及利用多面體 (tetrahedron) 構造出的空間本身。這些由量子力學想法所推出的拓樸應用, 本身是饒富趣味的。他們可能照亮了量子理論的內在本質。

以下, 我們介紹一些量子力學所須的數學。首先, 我們談波函數

$$f(x,t)=\sin(\frac{2\pi}{\ell})(x-ct).$$

其中 x 乃表位置, t 表時間, 這個函數描述一個正弦波以 c 的速度行進。我們定義波數 (wave number) $k=\frac{2\pi}{\ell}$ 及頻率 (frequency) $w=\frac{2\pi c}{\ell}$, ℓ 是波長。因此, $f(x,t)=\sin(kx-wt)$。我們注意到速度 c 是頻率與波數的比。

De Broglie 假設二個基本關係: 能量 E 與頻率的關係; 動量 P 與波數的關係。這兩個關係以下列二個方程式表出

$$E=\hbar w,$$
$$P=\hbar k.$$

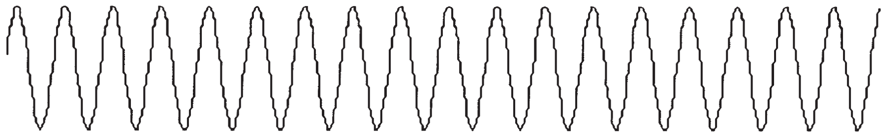
其中 $\hbar=h/2\pi$, h 是蒲朗克 (Planck) 常數。

對於 De Broglie, 氫原子中電子軌道離散的能階, 可以經由限制電子運行時所對應的波動的形式來解釋, 與波相關的能量與動量都不是任意的, 他們應該與"波和電子是與時俱進"的觀念一致。也就是說波動的速度就是相應的粒子的速度。

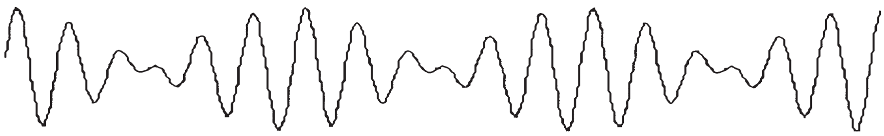
不妨進一步看看 De Broglie 的想法如何解釋波動。現有二個頻率很接近的波, 我們硬生生地合成他們 (superimpose), 就像鋼琴調音師, 將音叉所產生的音加入琴弦振動所生的音, 則它們將產生一新波動, 且此新波將以較小的速度移動。更明確地說, 若原來二波之波函數爲

$$f(x,t)=\sin(kx-wt) \text{ 及 } g(x,t)=\sin(k'x-w't).$$

令 $h(x,t) = f(x,t) + g(x,t) = \sin(kx - wt) + \sin(k'x - w't)$ 則 $h(x,t) = 2\cos(\frac{k-k'}{2}x - \frac{w-w'}{2}t)\sin(\frac{k+k'}{2}x - \frac{w+w'}{2}t)$, 並記 $dk = k - k'$, $dw = w - w'$。現假設 k 與 k' 很接近, 同時 w 與 w' 很接近, 則 $\frac{k+k'}{2}$ 很近似 k, 而且 $\frac{w+w'}{2}$ 很近似 w, 此時 $h(x,t) = 2\cos(\frac{dk}{2}x - \frac{dw}{2}t)f(x,t)$。這表示, 新合成的波 $h(x,t)$ 行如原來波形 (waveform), 但被一較慢波集 (wave packet) $G(x,t) = 2\cos(\frac{dk}{2}x - \frac{dw}{2}t)$ 限制著。如圖四十三所示



$2\sin(kx - wt)$



$h(x,t) = \sin(kx - wt) + \sin(k'x - w't)$

圖四十三. 波與波集

注意到, 這一波集 (wave packet) 的波函數爲 $G(x,t) = 2\cos(\frac{dk}{2}x - \frac{dw}{2}t)$, 由此得知此波集的速度是 $V_g = \frac{dw}{dk}$。我們再次提醒讀者諸君, 波速是頻率除以波數。那麼根據 De Broglie 假設: $E = \hbar w$ 及 $P = \hbar k$, 我們可得到 $V_g = \frac{dE}{dP}$。換言之, 波集 (wave packet) 的波速是能量對動量的微分, 這與古典力學有關粒子的定律完全吻合: 即 $E = \frac{1}{2}mV^2$, $P = mV$, 所以 $\frac{dE}{dP} = \frac{d}{dP}\Big(\frac{P^2}{2Pm}\Big) = \frac{P}{m} = V$。簡單的波動模型, 與古典觀念中能量和動量的驚人關連, 如此開啓了量子理論。

Schrödinger 方程

E. Schrödinger 回答了下列問題: 描述 De Broglie 波動的方程在那裡? 我們用複數來描述簡單的平面波 (plane wave)

$$y = y(x,t) = \exp\Big(i(kx - wt)\Big)$$

其中 $i = \sqrt{-1}$, 注意到由De Broglie 的能量與動量關係式可推出:

$$i\hbar\frac{\partial y}{\partial t} = Ey,\ -i\hbar\frac{\partial y}{\partial x} = Py.$$

由此, Schrödinger 大膽假設: 用算子 (operators) 來表示動態變數 (dynamic variable), 所以, 第一個方程變成波函數的運動方程 (equation of motion)。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}y = Ey,$$

而第二個方程成爲動量算子 (momentum operator) 的定義

$$P = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

一旦動量想成動量算子, 則動量的數值就被算子的固有值所取代, 如上例所算即是 (在上例中 $Py = \hbar ky$)。

在這種 Schrödinger 方程架構下, 位置算子就是乘 x 這個運算。有了位置算子及動量算子, 其他物理量可以這二個算子表達出。我們將動量算子代入古典力學公式而得到能量算子 (energy operator): 由古典力學,

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{1}{2m}P^2 + V$$

所以

$$E = -\Big(\frac{\hbar^2}{2m}\Big)\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

其中 V 是位能 (potential energy), 位能算子視實際應用的情況而定。以這種方式定義能量算子, 我們得到 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}y = -\hbar^2\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}y + Vy.$$

這是一個對時間一次微分, 而對空間二次微分的方程。在這樣架構下考慮這個微分方程的一般解, 由此衍生出許許多多的應用, 得到極佳的結果。在量子理論, "觀測"是以相對應算子的固有值這個觀念做爲模型。"觀測的量子模型就是波函數在一個固有態 (eigenstate) 上的投影 (projection)。"

一個能量的光譜 $\{E_k\}$ 相對應一個滿足 Schrödinger 方程的波函數 y, 以及一組常數 E_k 使得 $Ey = E_k y$。一個可觀測的量 (如能量), E 是一個 Hermitian 算子作用在波函數所構成的希氏 (Hilbert) 空間。由於 Hermitian 算子有實固有値, 可做爲量子理論的測度。

有一點很重要的是, 在這個理論裡並沒有假定一個機制, 如何將波函數由一個可觀測量對應到一個固有態 (eigenstate)。就像數學邏輯不需要要求一個命題導出另一命題時還有背後的因果, 量子力學的邏輯也不要求每一個觀測的後面有特殊的原因。這種在邏輯上不需假設因果性, 並不排除眞實世界有因果的可能。同樣的, 量子觀測不需因果性也不排除物理上的因果性。不過在對量子理論解釋的爭辯中, 常使得參與辯論者倡因果性已被物理排除在外。

我們注意到位置與動量算子滿足 $xp - px = \hbar i$。這正與 Heisenberg 得到的方程相呼應。換言之, 動態變數彼此之間不必然是可交換的。就這樣, De Broglie, Schrödinger 和 Heisenberg 的觀點趨於一致, 而量子力學於焉誕生。在它發展過程中, 各家詮釋紛紜。最終, 物理學家們得到共識, 視波函數爲承載各種可能觀測資訊的載體 (Carrier), 而不是一個廣義的波集。在這個想法之下, $\psi^*\psi$ 代表在時空中某一特定點找到粒子的機率 (粒子是指一個帶有局部空間特徵的可觀測對象)。

Dirac 括號

我們擬探討 Dirac 記號, $< a|b >$, [1]。在此種記號系統中, $< a|$ 及 $|b >$ 分別表示向量 (vector) 及餘向量 (covector), 而 $< a|b >$ 則表示 $< a|$ 在 $|b >$ 上的計值, 所以是個純量 (scalar), 在一般量子力學裡, 這是複值的純量, 我們可把它解釋成由狀態 $< a|$ 到狀態 $< b|$ 的振幅 (amplitude)。也就是說有一個過程 (process) 來轉介從 a 到 b 這個轉換。除了振幅是複數之外, 它們還遵守通常機率的定律。這是說如果一個過程可分解爲一套各個可能的中間狀態 $c_1, \ldots, c_n$, 那麼由 a - - -> b 的振幅是所有 a - - -> c_i - - -> b 的振幅的總和, 而同時 a - - -> c_i - - -> b 的振幅則是二個子相狀 (subconfiguration) a - - -> c_i 和 c_i - - -> b 的振幅的乘積。以式子表示, 我們得到

$$< a|b >= \sum < a|c_i >< c_i|b >$$

其中 $\sum$ 是對所有可能的中間狀態 $i = 1, \ldots, n$ 取和。

一般說來, 一組彼此不相交的過程, 其振幅是各別過程振幅的和。不相交過程的相狀 (con-figuration), 它的振幅是各別振幅的乘積。

Dirac符號將振幅分爲左括 $< a|$ 及右括 $|b >$。在數學上可解釋如下: 令 V 爲左括 $< a|$ 所組成的向量空間 (一個可以是有限維的希氏空間)。它的對偶空間 (dual space) V^* 則是由右括組成。所以 $|b >$ 在 V^* 裡, 表示 $|b >$ 是從 V 映到複數空間 $\mathbb{C}$ 的線性映射。我們可藉著把 V 中的元素看做由複數空間映到 V 的映射, 使二者 (V, V^*) 的定義對稱化。對於任一 $< a| : \mathbb{C} \to V$, $< a|$ 所對應的 V 的元素就是1在這個映射之下的像, 也就是 $< a|(1)$。現在我們有 $< a| : \mathbb{C} \to V$ 和 $|b >: V \to \mathbb{C}$, 它們的合成函數 $< a||b >=< a|b >: \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ 被視爲 $\mathbb{C}$ 中的元素, 其值爲 $< a|b >(1)$。把這個複數想成眞空, 而整個振幅 $< a|b >$ 就是由眞空經過一個過程, 再歸於眞空的振幅, 這個過程包括生出 a 狀態, 再轉換到 b 狀態, 又復歸於眞空。

Dirac記號有它本身的意義。

令 $P = |y >< x|$, 令 $< x||y >=< x|y >$, 由此可得

$$PP = |y >< x|y >< x| =< x|y > |y >< x| =< x|y > P.$$

P 乘或除以一個純數, 變成一個投影算子, 就是說如果我們令 $Q = P/ < x|y >$, 則

$$QQ = PP/ < x|y >< x|y >=< x|y > P/ < x|y >< x|y >= P/ < x|y >= Q$$

所以 $QQ = Q$。在這種“算子”的語言中, 中間狀態的完備性 (completeness) 就成爲“某些投影算子的和等於全算子”的敍述: 即若 $\sum_i |c_i >< c_i| = 1$, 而且 $< c_i|c_i >= 1$ 對所有 i 成立。則

$$< a|b >=< a||b >=< a|\sum |c_i >< c_i||b >=\sum < a||c_i >< c_i||b >=\sum < a|c_i >< c_i|b >$$

重複上面這種將 $< 1 >$ 展開成完整的狀態和可得到 Feynman 積分的最初的形式 [2]。想像初狀態 a 與終狀態 b 分別是在 $x-y$ 平面中鉛直線 $x = 0$, $x = n + 1$ 上的點, 而 $(k, (k)_{i(k)})$ 則是 $x = k$ 上給定的點 $x < i(k) \leq m$。假設對於每一個中間狀態其投影算子之和都是完備的, 也就是我們假設對於所有從1到 $n + 1$ 的 k 下列的和都是1。

$$|C(k)_1 >< C(k)_1| + \cdots + |C(k)_m >< C(k)_m| = 1$$

重複使用上述的完備性質, 我們得到振幅 $< a|b >$ 的下述表法。

$$< a|b >= \sum_{1\leq i(k)\leq m,\ 1\leq k\leq n} < a|C(1)_{i(1)} >< C(1)_{i(1)}|C(2)_{i(2)} > \cdots < C(n)_{i(n)}|b >$$

在上面和中的每一項可以解釋爲 $x-y$ 平面上從 a 到 b 的路徑 (path)。而從 a 到 b 的振幅則可看成所有由 a 到 b 的路徑所產生的振幅的總和。Feynman利用這樣的說明得到量子力學中有名的振幅的路徑積分 (path integral) 表示法。他的路徑積分表示成

$$\int dP \exp(iS)$$

這裡 i 是 -1 的平方根, 積分的範圍涵括所有自點 a 到點 b 的路徑, 而 S 是自 a 沿著給定的路徑到 b 所需的作用 (action), 對於古典力學 (或說牛頓力學) 粒子而言, 作用 S 是沿用從 a 到 b 的給定路徑對 $T - V$ 做積分, 其中 T 是粒子的古典動能而 V 是粒子的古典位能。

Feynman對量子力學的研究, 其優點在於它以一種非常顯明的方式展示出古典與量子力學之間的關係。古典運動中所有相鄰的路徑, 對總和提供正面相加的效應。這種古典路徑是在作用的變分 (variation) 爲零時發生的。要求路徑的變分爲零則是變分學的問題, 它會導出牛頓的運動方程。所以, 在適當給定的作用下, 古典與量子力學有一致的觀點。

但這種研究旳缺點在於直到目前都還沒有適當的測度理論 (measure theory) 來處理 Feynman 積分的所有情形。

總而言之, Dirac 記號明白表示出, 對於振幅所做的機率的解釋, 如何與量子力學系統中狀態空間 (space of states) 的向量空間結構相關連。我們提出量子理論與拓樸之間的關係, 其重點就是在 Dirac 括號 (bracket)。Dirac括號連接起記號 (notation) 與線性代數。在某種實質意義上, 量子力學與拓樸之間的關連可說是 Dirac 記號的一種發揚光大。

下面兩節我們將探討低維拓樸不變量, 如何與量子力學的振幅關連起來。在這些情形裡, 這種關連基本上是數學的, 不過只借用了量子力學的想法與技巧。我們還不清楚這樣的互動對物理本身會產生何種影響。

参考文獻

1. P. A. M. Dirac, *Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University.
2. R. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, 1965.

(本文原是作者爲 *Encyclopedia of Natural and Physical Science* 所寫)

—本文作者任教於美國伊利諾大學, 譯者爲中央研究院數學所研究人員—