

对冯·诺意曼“量子概率论”的两点质疑*

陶宗英 丁立峰 胡蓓华 范伟民

(上海交通大学 应用数学系)

摘 要

本文对于公认的量子力学数学基础—冯·诺意曼概率论提出了两点质疑。从物理上讲,它将导致“粒子的势能以一定的概率超过总能量”这种违背能量守恒原理的结论。从数学上讲,它在某些方面还不如玻恩的概率解释(即常被物理学家称为“经典概率论”的数学意义的概率论)。因此,量子力学的数学基础似乎需要进一步发展和完善。

* * * *

自从冯·诺意曼 1932 年为量子力学奠定数学基础以来^[1],它已经经受了时间的考验,为大家所公认。最近十年,以算子为主要研究对象的“量子概率论”(也称“冯·诺意曼概率论”或“不可交换的概率论”)又有了很大的发展,其中随机场的概念还可应用于量子场论。Reed, Simon 的专著^[2]和 Gudder 的专著^[3]对此作了很好的总结。[3]把冯·诺意曼概率论概括为四条公理:

1. 量子系统的纯态是复希尔伯特空间 H 中的任意一个单位矢量。
2. 观察值是 H 中的某个自共轭算子。
3. 当系统处于态 ψ 时,对于每个直线上的 Borel 集 Δ , 观察值 A 落在集 Δ 中的概率是 $(P^A(\Delta)\psi, \psi)$, 其中 $P^A(\cdot)$ 是 A 的谱测度。
4. 若在 $t=0$ 时初态是 ψ , 则在时刻 $t(t>0)$ 的态是 $\psi_t = \exp(-it\hat{H}/\hbar)\psi$, 其中 $\hat{H}$ 是能量观察值, 即哈密顿算子。

[3]和几乎所有的物理著作(例如[4]、[5])都认为冯·诺意曼概率论是对玻恩概率解释的发展,而且它包括了普朗克、波尔、德布罗意、薛定谔、海森堡、玻恩等物理大师的量子力学基本概念。

我们丝毫不否认冯·诺意曼概率论在描述量子物理时的辉煌成就;但是经过初步研究,我们认为“把冯·诺意曼概率论看成是柯尔莫哥洛夫概率论的发展^[3]的观点是欠妥的,不全面的。下面我们分别从数学和物理两个方面对量子概率论提出一些质疑。

* 1981年9月5日收到。

一、从物理角度看,量子概率论与经过实验证实的量子力学中的能量守恒原理(即在每个态中,粒子的总能量等于它的动能与势能的和)相抵触.换句话说,如果承认能量守恒原理,则上述四条公理便不能自圆其说了.我们举一维谐振子(基态)的能量分布为例,来说明这个问题.[6]中已经给出,此时粒子势能 U 的概率密度是:

$$p(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar\omega}} x^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{2x}{\hbar\omega}}, & x > 0, \\ 0 & , x \leq 0, \end{cases}$$

众所周知,按传统的量子理论,此时粒子的总能量具有确定值 $-\frac{1}{2}\hbar\omega$ [7].由于

$$P\left\{U > -\frac{1}{2}\hbar\omega\right\} = \beta > 0$$

而动能算子 $\hat{T}$ 是正算子, T_ψ (对一切态 ψ)都是非负随机变量,所以量子概率论便导致了出现“粒子的势能以一定的概率超过总能量”这种明显违背能量守恒原理的现象.产生这个现象的原因,关键在于本征值理论和玻恩的概率解释两者本身在物理上是不相容的.任何数学家企图用一种数学工具或公理化的方法把它们统一起来显然是有本质困难的.从方法论上讲,对于 $\hat{H}$ 的本征态 ψ 来说,如果仅仅孤立地考察 X_ψ, P_ψ 和 E_ψ 这三个力学量,“冯·诺意曼概率论”确实是把本征值理论和玻恩的概率解释统一起来了.但是如果同时考察 $X_\psi, P_\psi, U_\psi, T_\psi, E_\psi$ 这五个力学量及其相互关系,便产生了矛盾.这个现象之所以长期没有被人们注意,是由于迄今为止的物理文献,几乎都不研究 T_ψ 和 U_ψ 这两个力学量的概率分布,因此量子力学基础中固有的矛盾便长期被掩盖了.

二、微分方程、特殊函数、变分法、群论、泛函分析等数学工具,在描述量子力学时,无疑都起了重要的作用.但是作为量子力学的公理体系及数学基础,迄今为止都公认是希尔伯特空间的理论——前面提到的四条公理.我们对于[3]中说的“冯·诺意曼概率论包括玻恩的概率解释为其特殊情形”提出一些不成熟的商榷意见.

(1) 作为描述量子力学的数学工具,柯尔莫哥洛夫概率论(常被许多科学家不恰当地称为“经典概率论”,主要原因是由于认为它不能适用于量子力学.我们认为,这只能说明描述量子力学需要同时采用多种数学工具或创造崭新的数学工具,而不是说作为一个数学工具的通常意义的概率论不适用于量子力学)比起冯·诺意曼概率论(常被不少学者称为“量子概率论”.我们认为它是包含一定概率内容的泛函分析)来说,物理态的适用范围显然要广泛得多.

例如,对于作为固体物理基础的“箱归一化的平面波”或“方脉冲”来说[8],

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2a}} e^{i\frac{p_0}{\hbar}x}, & |x| < a, \\ 0 & , |x| > a. \end{cases}$$

通过傅立叶变换,容易求出动量空间的波函数是:

$$\varphi(p) = \sqrt{\frac{\hbar}{\pi a}} \frac{1}{(p - p_0)} \sin \frac{(p - p_0)a}{\hbar}, \quad (-\infty < p < \infty)$$

此时显然 $E(p_\phi)$ 不存在, 但 p_0 是 p_ϕ 的最可几值. 如果从“量子概率论”角度来看, 平均值 $\langle \hat{p}\psi, \psi \rangle$ 却是没有意义的, 因为 $\psi \notin \mathcal{D}(\hat{p})$ ^[9], 严格来说, p_0 也不是 $\hat{p}$ 的本征值^[10].

(2) 再者, 对于著名的测不准关系来说, 也有类似的情况.

例如, 对于一维无限深方势阱中的基态粒子^[7],

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{\pi}{2a} x, & |x| < a, \\ 0 & , |x| \geq a. \end{cases}$$

容易求出动量空间的波函数为:

$$\phi(p) = \frac{\pi}{\sqrt{2a^3\hbar}} \frac{\cos\left(\frac{a}{\hbar} p\right)}{\left(\frac{\pi^2}{4a^2} - \frac{p^2}{\hbar^2}\right)}, \quad (-\infty < p < \infty)$$

通过计算, 此时容易知道 ψ 是满足测不准关系的. 但是从“量子概率论”的观点来看, $\Delta(\hat{p}_\phi)$ 是不存在的, 因为

$$\Delta(\hat{p}_\phi) \equiv \sqrt{\langle \hat{p}^2 \psi, \psi \rangle - [\langle \hat{p} \psi, \psi \rangle]^2},$$

而 ψ 显然不属于自共轭算子 $\hat{p}^2$ 的定义域^{[10][11]}.

我们再举一个态的例子说明, 按概率论的观点, 它是满足测不准关系的, 但是按“量子概率论”的方法, 却无法判定它是否服从测不准关系^[11].

设

$$f(x) = \begin{cases} n \left[x - \left(n - \frac{1}{n^4} \right) \right], & x \in \left(n - \frac{1}{n^4}, n \right), \\ n \left[\left(n + \frac{1}{n^4} \right) - x \right], & x \in \left(n, n + \frac{1}{n^4} \right), \\ 0 & , \text{其余}, \end{cases} \quad (n = 2, 3, 4, \dots)$$

令 $\psi(x) = cf(x)$, 其中 c 是归一化常数. 容易证明 ψ 是局部绝对连续函数, 且满足

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx < +\infty,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi'(x)|^2 dx < +\infty,$$

但

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi'(x)|^2 dx = +\infty.$$

根据[11]中的结果, $\Delta_\phi x, \Delta_\phi p \geq \frac{\hbar}{2}$ 成立, 但是由于 $x\psi \notin \mathcal{D}(\hat{p})$, 所以不能根据“量子概率论”的结果, 判定 ψ 满足测不准关系^{[3][11]}.

(3) 对于某些有物理意义的势场, 例如对于无限深方势阱的情形, “量子概率论”方法便失效了. 这是因为

$$U(x) = \begin{cases} +\infty, & |x| > a, \\ 0 & , |x| < a, \end{cases}$$

根本不可能是定义在希尔伯特空间 $L_2(-\infty, \infty)$ 中某个定义域上的自共轭算子。但是此时“经典概率论”方法却能得出一些有趣的严格的物理结论来^[10]。这些结论与传统量子力学或固体物理教科书的结论是不同的。这里不再详细讨论了。

总之,我们认为,量子力学的数学基础似乎需要进一步发展和完善。

参 考 文 献

- [1] von Neumann J., *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*.
- [2] Reed, M., Simon, B., *Methods of Modern Mathematical physics*.
- [3] Gudder, S. P., *Stochastic Methods in Quantum Mechanics*, 1979.
- [4] 汤川秀树, 丰田利幸編集, 《量子力学》1978.
- [5] 李政道, 《物理学中的数学方法》.
- [6] 陶宗英, 《潜科学》1980年第1期.
- [7] 周世勋, 《量子力学教程》.
- [8] Messiah, A., *Quantum Mechanics*.
- [9] 夏道行等编著《实变函数论与泛函分析》.
- [10] 胡蓓华、陶宗英, “关于一维无限深方势阱中粒子能量在“能量本征态”中几率分布的佯谬”《上海交通大学八十五周年校庆学术报告会论文集》.
- [11] 陶宗英, 倪光炯, 《上海交通大学学报》1980年第4期.

Two Queries About von Neumann's "Quantum Probability"

By Tao Zongying (陶宗英), Ding Lifeng (丁立峰)

Hu Beihwa (胡蓓华), Fan Weimin (范伟民)

Abstract

The paper raises two queries about the generally accepted mathematical foundation of quantum mechanics—von Neumann's quantum probability. From the point of view of physics, von Neumann's theory will lead to the result that “the potential energy of a particle may be over the total energy with a definite probability”, it contradicts the law of conservation of energy. From the point of view of mathematics, in some branches von Neumann's theory is not as good as the Born's probabilistic interpretation (i. e. the so-called “classical probability”, or the probability in mathematical sense). Consequently, it looks as if the mathematical foundation of quantum mechanics needs to be further developed and perfected.