從歷史發展的角度談量子物理

余宗臣

" There are two forms in which quamtum mechanics maybe expressed, based on Heisenberg matrices and Shrodinger's wave function respectively ……… " —— P.A.M. DIRAC [1].

• PART I

相對論與量子物理的創立可說是本世紀中，物理學上的兩個里程碑。其中後者，由於在所謂科技的應用較廣，已經不再是一門高深的科目，逐漸地成爲一種基本知識。或受是受了Diras 的名著 " The principle Quantum Mechamics " 一書的影響，加上科學前進的脚步加快。一般介紹量子力學的教科書，都幾乎以類似數學語言的手法，對於量力的概念予以公理性的假設。自然地物理上的結果，就呼之卯出了。而Bohr. Heisenberg Dirac. de Bröglie, Shrödinger ………等人的努力早已被人們所淡忘，而線性算子自律性、期望值、標準差………等專有名詞，就成爲我們對量物的所有記憶了。

對於物理定律，其結構之嚴密性，以及邏輯上的一致性，決非憑個人的冥想就可以加以更改，像量子物理這般具有革命性的突破更是如此。而物理的發展也和歷史一樣，並不一定有其明顯的脈絡可尋，觀念的穿破又常是物理家個人主觀意識下的產物。在此就筆者所知，有關於一些大師們的工作，以及一些發展背景做一粗淺的介紹。

• PART II

對於普朗克常數 h 的提出，自然是量子論發展的第一步。這是由planck 研究黑體輻射現象，而所做的大膽假設。在此不擬從Plank 的工作（ * ）說起，而從1913 年Bohr 的原子模型談起：

在1913 年，Bohr 在英國與Rutherford 共事，提出了一個新的原子模型：

主要的概念，有三：

(1)穩定狀態的存在。

(2)電子以圓型軌道繞著原子核轉，其角動量滿足 $nh=(2\pi)(mvr)$。而電子與原子核之間之交互作用，由古典電動力學所決定。

(3)當原子之狀態，由 m 躍遷至 n，放出能量 $\Delta E=h\nu_{mn}=E_m-E_n$ ($E_m>E_n$)，並由(2)之假設可以得到Balmer 公式

即 $$\nu_{mn}=\frac{(2\pi^2m^2Z^2e^4)}{h^3}\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{m^2}\right)$$

在這三點中，以(3)最爲重要，它提供了計算電子躍遷時的發光頻率的方法，不再借助於古典電磁學的輻射論，因爲利用古典的方法總是不可避免的，只能得到連續光譜的產生。這一個與實驗上不相符的結果，更重要的是由電子的發光頻率與電子的運動周期無關，這對Heisenberg 後來提出的量力理論，有着密切關係。

儘管 Bohr 對於氫原子的 Balmer 光譜系解釋得很圓滿，可惜的是它並未說明光譜綫的强度大小關係，爲了補救這一點，Bohr 於 1918 年提出了「對應原理」(correspondence principle)，它大概是說如果描述系統量子狀態的量子數很大時，如果有微小的改變，那麼量子論的結果就會和古典力學的結果一致。

另外在光譜學上還有一個重要的實驗結果稱爲 Rydeberg-Ritz 結合規則。它是說對於一個原子，它的光譜頻率可以用一個序列 T_1, T_2 ……Tm_1 ……等之間的二個元素的差來表示，也就是 $\nu(n,m)=Tn-Tm$ 而得到 $\nu(n,k)+\nu(k,m)=\nu(n,m)$ 的結合律。(試以Bohr 的理論做一比較)。

根據以上幾個很模糊的原則，Werner Heisenberg 在 1925 年的 Zeitschrift für Physik 上提出一篇有高度原創性的論文。對量子問題有重大的突破，可說是科學史上的重要文獻之一。Heisenberg 認爲在以前的量子論中，質點的位置，或振動的頻率都被假設爲可觀察到的量而做爲系統的變數來計算一些可觀察的量如光譜綫的强度、頻率、極化方向等，我們應該直接利用實驗上可觀察到的物理量做爲描述物理系統的變故。此爲操作型定義。如果我們接受了 Heisenberg 的觀念，那麼原來用以描述電質點「位置」的變數 $x(t)$，要用什麼取代呢？先考慮古典力學中的情形，一個m- folds多重週期運動，位置可以一個Fourier級數($x(t)=\sum_{j_1\cdots j_f}^{\infty} A_{j_1,j_2\cdots\cdots j_f}\, e^{i(j_1w_1+j_2w_2+\cdots j_fw_f)}$ (其中 j_1 …… j_f 由 $\infty\to-\infty$) 來展開，(H.Goldstein. Classical Mech. 2ed)，其中 w_1, w_3 ……wf 爲各個自由度的基頻，$w_i=\nu_it+\alpha_i$。應用在原子系統，電子之 dipole moment $p(t)=-ex(t)$，根據古典電磁輻射論(Roland.H.Good Jr. Classical Theory of Electric Magnetic field)

$x(t)$ 的每一個Fourier級數分量 $A_{j_1,j_2\cdots\cdots j_f}\, e^{i(j_1w_2+j_2w_2+\cdots+j_fw_f)}$ 就對應一條光譜線，頻率 ν 是 $|(j_1\nu_1+j_2\nu_2+\cdots\cdots+j_f\nu_f)|$，强度爲

$(2\pi)^4(\frac{\nu^4}{3c^3})e^2 \mid A_{j1,j2} \cdots\cdots j_f \mid^2$
（在此ν是可由從$-\infty \to \infty$任意的整數j_1 j_f組合而成，且$A_{j1,j2}\cdots\cdots j_f=((A_{-j1,-j8}\cdots\cdots\cdots j_f)^*)$，在新的量子力學中，我們就從這裏着手：仿照古典力學，同樣地，用一組傅利葉分量描述“$x(t)$”，不同之處是頻率ω是由於能階跳渡所產生。$W(n \to m)=(\frac{E_n-E_m}{h})$（在此考慮一維自由度的簡單情況），而用$A_{n,m}$來代表發光的振幅，且$A_{n,m}=A_{m,n}^*$，也就是用一個陣列$\|A_{n,m}e^{i2\pi\nu(n,m)t}\|$來代表“$x(t)$”，那麼“$x^2(t)$”$=$？，Heisenberg認爲仍然可以一個陣列$\|C_{k,l}\ e^{i2\pi\nu(k,l)t}\|$來代表，由組合規則$\nu(k,e)\subset\nu(k,n)+\nu(n,e)$來看似乎意味$C_{k,l}=\sum_n A_{k,n}A_{n,l}$。即$x^2(t)=x(t)\cdot x(t)=\|\sum_n A_{m,k}B_{k,n}\cdot e^{i2\pi\nu(m,n)t}\|$

而古典中$x(t)+x(t)=2x(t)$，在量力上是$\|x\|+\|x\|=\|A_{n,m}e\ e^{i2\pi\nu(m,m)t}\|+\|B_{n,m}e^{i2\pi\nu i(m,n)t}\|$ $\|C_{n,m}\ e^{i2\pi\nu(n,m)t}\|$，其中$C_{n,m}=A_{n,m}+B_{n,m}$這和古典沒有多大的差別。我們再問速度$x(t)=$？ 。

按一般的微積分法則，定義
$x'(t)=\frac{d}{dt}\|x_{m,n}e^{i2\pi\nu(m,n)t}\|$
$=\|\ i2\pi\nu_{(m,n)}x_{m,n}e^{i2\pi\nu(m,n)t}\|$。
比較特殊的一點是$x\cdot y=y\cdot x$。這在量力中並不一定成立（即物理量的相乘沒有交換律）。有一個特殊的例子是

$(m\dot{x})\cdot(x)-x\ (m\dot{x})=(\frac{h}{i})$
（這是Heisenberg利用Bohr的對應原理證明的結果，等一下我們用別的方法證明）。建立了這一套代數法則後，應用在一個振盪系統上，可以自然地求出harmonic oscillator的能階爲$(n+\frac{1}{2})\hbar w$。其與量子論不同的地方是多了$(\frac{hw}{2})$這一項，正所謂之零點位能，是量子力學中最重要的特徵之一。Heisenberg的老師Max Born讀完該文之後，認爲數學上的矩陣運算就正是Heisenberg所要表達的。（當時的Heisenberg並不知道有這一類型的數學運算法則，因爲矩陣在二十世紀初是新的數學）。

於是M.Born.聯合Heisenberg和一位數學家Jordan（在矩陣上有重要貢獻）先後發表了一些論文，爲量子力學奠定了基礎，後世稱爲矩陣力學。所謂矩陣力學的要點是：

1. 任何一物理量，皆以一個Hermitian矩陣代表之（要求其爲Hermitian的理由，主要是保留前述Heisenberg理論中$A_{mn}=A_{nm}^*$的要求）。
2. 對一個物理系統，仿照古典力學定義一個Hamiltonian矩陣H，H是正則變數q、p的函數，而q、p的運動方程式，有如古典力學：

$$(\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p},\quad \dot{p}=\frac{\partial H}{\partial q})$$，而

系統的能階，就是H之對角元素。如何寫下H？只要將古典力學的結果照

抄即可。

一維振子 $H_{class}=\dfrac{p^2}{2m}+\dfrac{k}{2}q^2$

$$\Rightarrow H_{quam}=\frac{1}{2m}p^2+\frac{k}{2}q^2$$

3. 量子化條件。對於一組正則變數 q、p，有下列的關係存在（$qp-pq=\frac{h}{i}$）。

現在，我們用 Dirac 在1925年的證法（對第3點），來加以說明：

先設 x、y之古典力學的一組正則座標，對應於量力的是一組矩陣，$\|x\|$、$\|y\|$。矩陣（$\frac{i}{h}$）（$xy-yx$）的（nm）分量爲：

$$\left(\frac{i}{h}\right)(xy-yx)_{nm}=\left(\frac{i}{h}\right)\sum_{\substack{\alpha\cdot\beta\\ \alpha+\beta=m+n}}$$

$[x(n,n-\alpha)y(n-\alpha,n-\alpha-\beta)-y(n,n-\beta)x(n-\beta,n-\alpha-\beta)]$

$=\left(\frac{i}{h}\right)\{[x(n,n-\alpha)-x(n-\beta,n-\alpha-\beta)][y(n-\alpha,n-\alpha-\beta)]-[y(n,n-\beta)-y(n-\alpha,n-\alpha-\beta)][x(n-\beta,n-\alpha-\beta)]\}$ ……(1)

考慮 α、$\beta\ll n$，n很大時，

$x(n,n-\alpha)-x(n-\beta,n-\alpha-\beta)\doteq x(n,n-\alpha)-x(n-\beta,n-\alpha)$ ……………………………………(a)

$y(n-\alpha,n-\alpha-\beta)\doteq y(n,n-\beta)$ ……………………………………………(b)

應用對應原理，看看(a)、(b)各對應於古典力學的何種形式：

在古典力學中 J（action variable）$=nh$（量子論的假設），$W=\nu t+\alpha$（angle variable）是一組正則座標，

而 $\nu=\dfrac{\partial H}{\partial J}$。因此古典Fourier 展開的分量（$A_\tau e^{i2\pi\tau\nu t}$），在 τ 小時，

$\tau\nu=\tau\dfrac{\partial H}{\partial J}$，而量力求頻法是

$$\nu_{qu}=\frac{\Delta E}{h}=\Delta n\left(\frac{\Delta E}{\Delta J}\right)$$

當 n 大時，$\nu_{qu}\rightarrow(\Delta n)\left(\dfrac{\partial E}{\partial J}\right)$

∴我們猜想古典的

（$A_\tau e^{i2\pi\tau\nu t}$）和（$A_{(n,n-\tau)}e^{i2\pi\nu(n\ n\ \tau)t}$）有對應關係。

因此 $x(n,n-\alpha)-x(n-\beta,n-\alpha)\doteq(\beta h)\dfrac{\partial x_{\alpha(n)}}{\partial J}$

$$y(n,n-\beta)\doteq\left(\frac{1}{2\pi i\beta}\right)\frac{\partial y_{\beta(n)}}{\partial W}$$

代入(1)式，忽略一些 α、$\beta\ll n$ 的效應

$$\Rightarrow\frac{i}{h}(xy-yx)_{nm}=\sum_{\alpha+\beta=n-m}\left[\left(\frac{\partial x_{\alpha(n)}}{\partial J}\right)\left(\frac{\partial y_{\beta(n)}}{\partial W}\right)-\frac{\partial y_{\beta(n)}}{\partial J}-\frac{\partial x_{\alpha(n)}}{\partial rr}\right]$$

這種形式與在古典力學上一個叫 Poissen bracket 的關係很相似，$[q_i\ p_j]_{J\cdot W}$

$$=\left[\frac{\partial q_i}{\partial J}\frac{\partial p_j}{\partial W}-\frac{\partial p_j}{\partial J}\frac{\partial q_i}{\partial W}\right]$$

$=\delta_{ij}$（其中q、p爲正則座標），因此Dirac 大膽假設：

在力學和古典力學之間有對應性，即若 q_i，p_i（$i=1\rightarrow\infty$）是古典力學的正則變數，在量子學它們要滿足量子的 Poisson Bracket $[q_i,p_j]=\delta_{ij}$

$[q_i,q_j]=[p_i,p_j]=0$

其中〔x，y〕=（$\dfrac{xy-yx}{ih}$）
而正則座標的運動方程式，似乎也可以由力學上照抄過來，做爲量力的基本方程式。從Poisson 括號的性質，Dirac 建議以$\dot{q}=[H,q]$，$\dot{p}=[H,p]$爲新的運動方程。這點與Heisenberg 等人的假設不謀而合，在此用Dirac 的證法來說明，是因爲以Poisson 括號來表達似乎更能夠說明古典力學與量子學的相關性，我們也可以看出當$h\to 0$時，〔q，p〕$\to 0$；也就是古典力學與量子有一致的結果，同時也顯示出Plank's const h 的重要性。Dirac 本人談到他這項研究成果時，曾經表示說那是他一生當中最興奮的時刻。

我們也許會問一個問題：如果我們選的正則座標不能使H對角化，那麼要如何選取新的正則座標呢？這時我們找尋一個Hermitian 矩陣u。施在原來的q、p上面，得到新的正則座標 $Q=U^{-1}qU$，$P=U^{-1}PU$，這與古典力學的正則變換有相似的做法，而使新的Hamiltonian 矩陣H'=（$U^{-1}HU$）成爲對角矩陣。由矩陣的性質可以知道H'的對角元素就是H的特徵值。也就是說我們只要求出H的特徵值即可，不必費力去尋求一個特殊的轉換矩陣U了。然而，這種轉換的方法意味著什麼？Hermitian 矩陣U有什麼物理意義呢？在1926年Heisenberg，1927 Jordan Dirac 分別提出他們的看法，那就是機率論或稱爲轉換理論（transformation theory）。在轉換理論中，Dirac 第一次引入"δ"函數，使得矩陣力學的形式與波動力學的形式完全相同。所以我們常說電子力學是到了Dirac 的手上才有統一的結構。

轉換理論牽扯的數學運算式子很多，在此不能多講，玆以一簡單例子說明在波動力學和矩陣力學的相關性：在波動力學中φ_E'（x_0）是指一個能量爲E'的，質點位置在X_0處的機率幅度，換成矩陣力學的說法就是，先取X、P做爲正則座標，因爲（X、P）這種「表象」不能使Hamiltonian 矩陣H對角化，因我們要求的是系統的能階，所以就把（X、P）「表象」用一個轉換矩陣 U 轉換X-表象爲E-表象，而矩陣元素U（E$'$，X'）就是系統能量爲E$'$，質點位置在X'的機率幅度。也就是$\varphi_E(X')\to U(E',X')$。有一點該提的是轉換理論是可以應用到各種「表象」之間的轉換，十分普遍化的。在Dirac 的著作" The Priniple of Quantum Mech. 中前幾節就是在表達他這個觀念。

其實矩力可以解決許多基本的問題，就其物理觀念，數學結構上而言，不失爲一套完整的理論，可惜的是計算時工程繁浩，十分不方便，像Pauli 用矩力解氫原子的能階，就發表過長達十多頁的論文，Dirac 似乎也好不到哪裏去→十頁，這也可能是今天一般的教科書只把矩力當作歷史名詞的介紹，而不願多加解釋的原因。就個人經驗而言，學習矩陣力學不僅使我

了解了量力的歷史發展過程，在閱讀 Dirca 的作品時，幫助也頗大。比較不會因"|>"，"<|"，一些奇怪的符號所困擾。

在 1926 年時，Born 曾經爲了補救矩力在運算上的缺點，與美國MIT的數學教授Wiener 發展一套新的運算法則，但是在同時，奧國的 Schrödinger 一口氣發表好幾篇論文，使得大家不得不把注意力集中在「波動力學」的身上。

正如Dirac所稱的，除了Heisenberg 的矩陣力學之外，今天爲人所熟知的波動力學（Wave Mechanics）應扮演重要的角色。更由於其數學結構優於矩陣力學理，在提供數學解答的能力較爲可能，所以一般的教科書也以Wave Mechanics 作爲介紹量物的出發點，但從物理發展的角度來看，今天的Wave Mechanics 有許多地方與當年 Schrödinger 的想法仍有不少的出入呢！

波動力學的發展，大致上可以說是由法國的Louis de Broglie開始的，（由於其兄長的關係加上本身的興趣，使他能夠一方面研習他的本行—歷史，又能夠與當時物理界的新觀念與發展保持接觸）在1924年，他以「在量子理論上的研究」爲題作爲他的博士論文發表。

他的出發點同樣的基於相對論上的考慮，另外還以Maupertuis 、Fermat原理做爲整篇論文的架構。de Broglie認爲是否可以把 Einstein 對於光子能量的假設 $E=h\nu$ 加以推廣而成爲一個更普遍的規律。他假設一個物質點也有一個內在週期性質（internal periodical property）ν_0，而這個「頻率」ν_0乘以蒲朗克常數 h，如同光子一般就是其靜止能量的大小即 $E=m_0c^2=h\nu_0$。對於一個以ν速度相對於靜止座標而言，這個內在的振盪週期，由於 Lorrentz 轉換的結果，成爲 $\nu_1=\nu_0\sqrt{1-\beta^2}=\dfrac{m_0c^2}{h}\sqrt{1-\beta^2}$。但是若考$E=h\nu$ 一式則可以得到另一個頻率 $\nu_2=\dfrac{m\alpha^2}{\sqrt{1-\beta^2}\,h}$。

在這裏 ν_1 和 ν_2 有明顯的不同，要如何解釋這種差異性呢？de Broglie 提出了一個相當重要的假設—相位一致定理（the theorem of phase agreement）：內在振盪現象（頻率 ν_1）的相變化與一個頻率ν_2，以相速（c/β）傳播出去的相波是相同的。說穿了，這就是利用相ϕ 是一個純量，在Lorrentz 變換之下$\phi=(\vec{r},\vec{k}-\omega t)$爲一不變量的事實，可以自行驗證，而得到下列關係式：

$$\Rightarrow \quad k=\left(\frac{m_0 v}{h\sqrt{1-\beta^2}}\right)$$

$$w=2\pi\nu_2=\left(\frac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}\;h}\right)$$

而 k，ω 與能量，動量的關係就是

$$\Rightarrow \quad E=h\omega=h\nu$$

$$P=hK=h/\lambda$$

另外，再考慮這種相波的群速 $u=\dfrac{d\ \nu_{\text{phace}}}{d(k)}$

$$=\frac{\dfrac{1}{h}\,d\left[\dfrac{m_0c^2}{\sqrt{1-\beta^2}}\right]}{\dfrac{1}{h}\,d\left[\dfrac{m_0c}{\sqrt{1-\beta^2}}\right]}=V$$

相波的群速度，就是該物質點的運動速度！de Broglie 把這個令他十分滿意的結

果，與光學中的Format原理和的最小作用是原理連結起來。

物質點運動的軌跡若與光傳播路徑有對應性，即

$$\delta\int_A^B dt=0=\int_A^B \frac{ds}{U}=\int_A^B \frac{ds}{\nu\lambda}$$

代入 $k=\frac{1}{\lambda}=\frac{m_0 v}{\sqrt{1-\beta^2}}\Rightarrow\delta\int\frac{m_0 v}{\sqrt{1-\beta^2}}ds=0$

而最小作用量原理告訴我們，在能量中恒的條件下：

$$\delta\int p\ dq=0\text{，代入 } p=\frac{m_0 v}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

（相對論的效應）

同樣得到 $\delta\int p\ dq=\delta\int\frac{m_0 v}{\sqrt{1-\beta^2}}ds=0$

似乎Fermat原理和最小作用量原理都在敍述同樣的事實！一個令人怦然心動的結果。另外de Broglie又把以上的結果代入Wilson - Sommerfeld的量子公式：

$\oint p\ dq=nh$ 以 $p=h/\lambda$ 取代後得到

$\oint\frac{h}{\lambda}\ dq=nh$ 也就是令人熟知的駐波現象。de Broglie以爲在他的假設之下可以給予Bohr 的原子模型，一個令人滿意的解釋。

在筆者讀過這篇文章之後，覺得所謂的「物質波」只是一種抽象的概念，並且對現象的解釋十分合理，記得以前老是把這個物質波聯想成和水波一樣，總覺得怪怪的。我覺得倒不如把Davison, Germer, G. P. Thomason等人所做的物質波干涉實驗所看到的繞射條紋也好、干涉條紋也好想成是「物質波」在實驗儀器度量下的一個表象。

指出了波動和粒子所雙重性質後，de Broglie一直想要尋找一個新的力學定律以重新建立一套力學結構，然而卻爲Schrödinger搶先寫出了。儘管結果十分美妙，de Broglie理論起初並不造成太大的震撼。直到1926年，藉著心得討論的機會，Schrödinger注意到了de Broglie理論的重要性。在1926一年之內Schröd'一連在Annalen der Physik上，發表了六篇論文，爲波動力學打下了深厚的基礎。在一系列以「本徵值問題作爲量化條件」的文章中，Schrödinger表達了獨到的見解。在第一篇文章中Schrödinger將問題限制在非相對性的範圍之內，考慮量化的條件。由於早年的數學訓練：使得Schrödinger對如何解Eigenvalue problem確有一手。他認爲Bohr Wilson - Sommerfeld的量化條件中所出現的整數值，如果自然地出現在一些極端值問題的解答內（即eigenvalue），也許這新的方程式才是量力的重點所在。首先考慮Hamiltonian-Jocobian equation在保守力場中的情形，$H\left(q,\frac{\partial s}{\partial q}\right)=E$，先以代數變換 $S=k\ ln\phi\Rightarrow H\left(q,\frac{K}{\phi}\frac{\partial\phi}{\partial q}\right)=E$，這樣做的好處是在於$H$經常是$q_i^2$和$p_i^2$的線性組合，$p$以$\left(\frac{K}{\phi}\frac{\partial\phi}{\partial q}\right)$代換後$H$只會出現$\phi$和$\phi'$的quadratic form。

先以電子在原子內的運動問題試試：

系統之Hamiltonian：$H=\frac{p^2}{2m}-\left(\frac{e^2}{r}\right)$

$r=\sqrt{X^2+Y^2+Z^2}$ 代入上述的Hamiltonian Jacobian equation：

$(E+\frac{e^2}{r})\phi^2]=0$

$[(\frac{\partial\phi}{\partial x})^2+(\frac{\partial\phi}{\partial y})^2+(\frac{\partial\phi}{\partial z})^2-\frac{2m}{K^2}$

考慮下列極端值問題

$$\delta J=\delta\ [(\frac{\partial\phi}{\partial x})^2+(\frac{\partial\phi}{\partial y})^2+(\frac{\partial\phi}{\partial z})^2-\frac{2m}{K^2}(E+\frac{e^2}{r})\phi^2]\ dxdydz=0$$

經過代數運算後（參看Arfken）可以得到一個奇怪的式子：

$\nabla^2\phi+\frac{2m}{K^2}(E+\frac{e^2}{r})\phi=0$，學過量物的同學都知道這就是氫原子系統內電子運動的波動方程式。

對於ϕ這個量 Schrödinger 並沒有作太多的物理解釋，只要求是C^2的有界單值實數函數即可。（實函數一點，後證實有誤）因爲重點是在找 eigenvalue 值，而所得的結果就是 Balmer 公式。至於爲什麼要用一個極端值問題來替代，Schrödinger 在第二篇論文正式地給了一個物理上的解釋同時也對ϕ的意義加以說明。

幾何光學：$\delta\int\frac{ds}{v}=\theta\rightleftharpoons$古典力學

$\delta\int pdq=0$（物質波長很小）

（波長短時適用）

波動光學：$\nabla^2\phi-\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial f^2}\phi=0$

$\rightleftharpoons$（波動力學？）（廣泛的）

由 de Broglie 的物質波假設，可知對於一般平常質點，其物質波長都很小，所以利用古典力學就可以準確的描述，若要完整的說明似乎存在著一種尚未人知的波動力學，也許它的形式就和波動光學的外形差不多。我們知道波動光學的 Helmoltz 形式爲$(\nabla^2+K_1^2)\phi=0$其中$K_1=\frac{2\pi}{\lambda}$。

而由物質波的假設$\lambda=h/p$，而p在非相對論的假設下可寫成爲

$p=\sqrt{2m}(E-V)$ 代入

$\Rightarrow[\frac{h^2}{8\pi^2m}\nabla^2\phi+(E-V)\phi=0]$，

此爲在保守力場下的 Schrödinger 波動方程式（也有人稱之爲 de Broglie 波動方程以與$(ih)\frac{\partial\phi}{\partial f}=H\phi$區別之）。至於$\phi$的物理意義是什麼，當初 Schrödinger 假想ϕ是在(q,p)上的 phase space 的一個相波，對於這點看似頗爲合理，從此一套新的力學就初步的被建立了。

Schrödinger同時也注意到，利用他的理論去解 harmonic oscillator 問題時，同樣有「$h/2\omega$」的 zero-point energy，這與 Heisenberg 的矩陣力學竟然完全一樣。同在 1926 年，他正確地指出這二者在數學上的相關性質。他建議在 Heisenberg 的理論當中，只要將正則實數p寫爲$(\frac{h}{i}\frac{\delta}{\partial q})$的運算子符號。那麼波動力學和矩陣力學就有相同的形式。以量子化條件：「$pq-qp=\frac{h}{i}E$」而言，翻譯成波動力學的表達方法就是

$$(\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial q}q-q\frac{h}{i}\frac{\partial}{\partial q})\phi=(\frac{h}{i})\phi$$

，這樣一來由二個不同的物理觀念出發，竟都得到相同的運動方程。

爲了研究一些共振問題，Schrudinger 將前面只適用於保守力場波動方程式做了一些修改，使得新的方程式也適用於非保守力場的情況。他的做法是：

$(\frac{h^2}{2m}\nabla^2\phi(r)+(E-V)\phi(r)]$

$=0$ 的解 $\phi(r)$ 只是一般波動方程式像

$$\left(\nabla^2 \Psi \cdot \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi\right)=0$$ 中

$\Psi(r, t)$ 的一部份，而 $\Psi(r, t)$ 的通解都可寫成 $\Psi(r, t)=\phi(r)\exp(-i\omega t)$，$\because \omega=\frac{E}{h} \Rightarrow$

$$\Psi(\vec{r}, t)=\phi(\vec{r})\exp\left[-i\frac{E}{h}t\right]$$

$\Psi(r, t)$ 滿足 $E\Psi=\frac{-h}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$，

和 $\left(\frac{h^2}{2m}\nabla^2\phi+(E-V)\phi\right]=0$

比較，把 E 消去 $\Rightarrow \frac{h}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\left(\frac{-h^2}{2m}V^2+v\right)\Psi=0$，即 $H\Psi=ih\frac{\partial\Psi}{\partial t}$，這就得到一個可應用在非保守力場的波動方程式。我對於Schrödinger 這種把“E”消去的方法，總覺得很不自然，反正這只是一種假設，接受就是了。在同一篇文章中，Schrödinger 又再度地修正他對“Ψ”函數的看法，他對 Ψ 的解釋是：以電子而言，$|\Psi|^2$ 是電荷的分佈密度，$|\Psi|^2 d\tau$ 是在 $d\tau$ 體積內的電荷。請注意他和Born 的機率假設有很大的差別。Schrödinger 把電子看成流體一般。而Born 卻相信，電子是一個質點。而Schrödinger 從頭至尾也不曾接受過機率論的說法，這是值得注意的。

在前面所說的，都未涉及到電子Spin的問題。電子自旋早在 1921 年由A. Compton 提出，可是也沒引起任何人的注意。Compton 本人也沒有將他的假設應用在光譜學上的奇異Zeeman 效應，而Pauli 的不相容原理也只是以爲除了 n, ℓ, m_l 之外，對電子還要加上第四個量子數 m_s 而 m_s 的大小只能爲 $\pm\frac{1}{2}$。電子自旋的問題，在歷史的發展上很混亂始終沒有很完整的理論解釋，連 Goldsmit，Uhlenbeck 也都因別人的批評，對自己提出的電子自旋理論都感到懷疑。如何把電子的自旋效應放在量子力學的運動方程式中實在是一個很大的問題！另外，不論是矩陣力學或是波動力學都沒有討論到相對論的效應。Dirac 的電子論就一併解決了上述的兩個問題，在那裏電子的自旋，可以在角動量守恒的原則下自然出現，不需任何額外的假設。至此，物理學開始向基本粒子、場論………等領域伸出了觸角，這不是我現在能談的。

除了物理學家對物理有興趣外，在廿世紀初，一些大數學家像 Hilbert, Poincaré, von Neumam，H. Weyl 等人對近代物理都有很重要的貢獻。像 von Neumam 在他的著作（Math. Foundation of Quantum Mech.）中就以一個數學家的眼光把 Hilbert space 的數學結構應用在量子力學上，使得量力有完整的數學基礎。他也認爲在 Hilbert 空間不可能存在所謂的 hidden variables。

另外值得一提的是，量力借用群論解決問題的地方很多，Wigner，Weyl 的著作都值得一讀，