

PEARSON

时代教育·国外高校优秀教材精选

(美) 大卫·J·格里菲斯(DAVID J.GRIFFITHS) 著

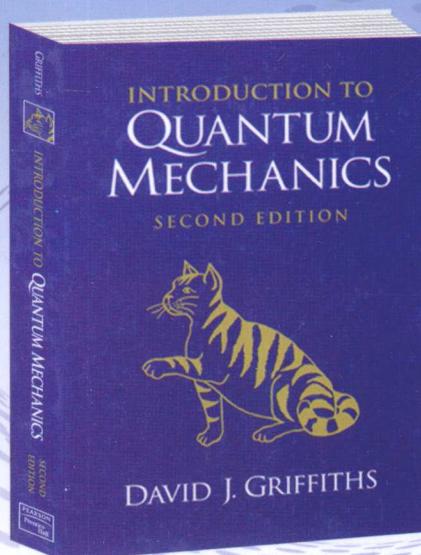
INTRODUCTION TO QUANTUM MECHANICS

量子力学概论

(翻译版)

原书第2版

贾瑜 胡行 李玉晓 译



机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS



时代教育·国外高校优秀教材精选

量子力学概论

(翻译版) 原书第2版

INTRODUCTION TO QUANTUM MECHANICS

(美) DAVID J. GRIFFITHS 著
贾瑜 胡行 李玉晓 译



机械工业出版社

本书译自美国 David J. Griffiths 教授所著《Introduction to Quantum Mechanics》(Second Edition)，是“时代教育·国外高校优秀教材精选”系列之一，其内容包含了我国大学量子力学最主要的内容。

本书的特色是：强调量子力学的实验基础和基本概念，讲解直接从薛定谔方程开始，同时力图体现现代物理学内容，把问题扩展到多个前沿的研究领域，如统计物理、固体物理、粒子物理等；在写法上，作者从务实的角度出发，着重于交互式的写作，采用对话式的语言，叙述简明，文笔流畅。力图改变量子力学难于理解、难于接受的教学状况。

本书内容分理论和应用两部分。理论部分包括：波函数、定态薛定谔方程、形式理论、三维空间中的量子力学和全同粒子；应用部分包括：不含时微扰理论、变分原理、WKB 近似、含时微扰理论、绝热近似、散射和后记。为使读者更好的理解量子力学，书后还提供了附录线性代数。

本书为高等学校物理学专业以及相关专业量子力学的基础教材，也可供有关专业教师、科研人员和工程技术人员参考。

Authorized translation from the English language edition, entitled INTRODUCTION TO QUANTUM MECHANICS, 2E, 978013118927 by DAVID J. GRIFFITHS, published by Pearson Education, Inc., publishing as Addison-Wesley, Copyright © 2005.

All rights reserved. No part of this book may be reproduced or transmitted in any form or by any means, electronic or mechanical, including photocopying, recording or by any information storage retrieval system, without permission from Pearson Education, Inc.

CHINESE SIMPLIFIED language edition published by PEARSON EDUCATION ASIA LTD., and China Machine Press Copyright © 2009.

本书翻译版由培生教育出版集团授权机械工业出版社在中国境内独家出版发行，未经出版者书面许可，不得以任何方式复制或节录本书中的任何部分。原书 INTRODUCTION TO QUANTUM MECHANICS, 2E, 作者 DAVID J. GRIFFITHS, 由培生教育出版集团 Addison-Wesley 出版，Copyright © 2005 Pearson Education Inc. 版权所有，侵权必究。

本书翻译版由培生教育出版亚洲有限公司与机械工业出版社合作出版
© 2009。

北京市版权局著作权合同登记：图字：01-2008-4630 号

图书在版编目(CIP)数据

量子力学概论：翻译版·原书第2版/(美)格里菲斯(Griffiths, D. J.)著；
贾瑜等译。—北京：机械工业出版社，2009.8
(时代教育·国外高校优秀教材精选)
书名原文：Introduction to Quantum Mechanics
ISBN 978 - 7 - 111 - 27877 - 1

I. 量… II. ①格…②贾… III. 量子力学－高等学校－教材 IV. 0413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2009) 第 129254 号

机械工业出版社(北京市百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

策划编辑：李永联 责任编辑：姜凤 责任校对：李婷

封面设计：张静 责任印制：杨曦

北京蓝海印刷有限公司印刷

2009 年 11 月第 1 版第 1 次印刷

184mm × 260mm · 20 印张 · 2 插页 · 496 千字

标准书号：ISBN 978 - 7 - 111 - 27877 - 1

定价：39.80 元

凡购本书，如有缺页、倒页、脱页，由本社发行部调换

电话服务

网络服务

社服务中心：(010)88361066

门户网：<http://www.cmpbook.com>

销售一部：(010)68326294

教材网：<http://www.cmpedu.com>

销售二部：(010)88379649

封面无防伪标均为盗版

读者服务部：(010)68993821

基本方程

薛定谔方程：

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

定态薛定谔方程：

$$H\psi = E\psi, \quad \psi = \psi e^{-iEt/\hbar}$$

哈密顿算符：

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla + V$$

动量算符：

$$P = -i\hbar \nabla$$

期望值随时间变化：

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, Q] \rangle + \langle \frac{\partial Q}{\partial t} \rangle$$

广义不确定原理：

$$\sigma_A \sigma_B \geq \left| \frac{1}{2i} \langle [A, B] \rangle \right|$$

海森伯不确定原理：

$$\sigma_x \sigma_p \geq \hbar/2$$

对易式：

$$[x, p] = i\hbar$$

角动量：

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x, \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y$$

泡利矩阵：

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

基本常数

普郎克常数:	$\hbar = 1.054\ 57 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
光速:	$c = 2.997\ 92 \times 10^8 \text{ m/s}$
电子质量:	$m_e = 9.109\ 38 \times 10^{-31} \text{ kg}$
质子质量:	$m_p = 1.672\ 62 \times 10^{-27} \text{ kg}$
质子电荷:	$e = 1.602\ 18 \times 10^{-19} \text{ C}$
电子电荷:	$-e = -1.602\ 18 \times 10^{-19} \text{ C}$
真空介电常数:	$\epsilon_0 = 8.854\ 19 \times 10^{-12} \text{ C}^2 / (\text{J} \cdot \text{m})$
玻尔兹曼常数:	$k_B = 1.380\ 65 \times 10^{-23} \text{ J/K}$

氢原子常数

精细结构常数:	$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = 1/137.036$
玻尔半径:	$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{\alpha m_e c} = 5.291\ 77 \times 10^{-11} \text{ m}$
玻尔能量:	$E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2} = \frac{E_1}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$
结合能:	$-E_1 = \frac{\hbar}{2m_e a^2} = \frac{\alpha m_e c^2}{2} = 13.605\ 7 \text{ eV}$
基态:	$\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$
里德伯公式:	$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$
里德伯常数:	$R = -\frac{E_1}{2\pi\hbar c} = 1.097\ 37 \times 10^7 / \text{m}$

序

目前国内已经出版了不少的量子力学教材，其中不乏一些优秀之作。但我觉得释译出版 Griffiths 教授所著《Introduction to Quantum Mechanics》(Second Edition) 仍然是非常值得的。

首先，我认为物理学教学现代化关键在于量子力学，因为量子力学是现代高技术、新材料的基础。量子力学基础知识不仅对从事物理学工作是必须的，对从事材料科学、化学、生命科学以及其他技术科学也是十分必要的。本书把讲授量子力学的基础定义在较低的物理基础上，从简单的概率论和微分方程入手，讲解直接从薛定谔方程开始，注重量子力学的基本思想和基本方法的讲授，而不是把量子力学引入繁琐的理论推导，而内容又涉及到各个研究领域，又非一般的量子力学教材所能及，这在量子力学教学现代化方面的确是很成功的尝试。其次，该书是欧美许多一流理工科大学物理学专业学生使用的、颇受欢迎的教科书，取材合适且基本，涵盖了量子力学最主要的内容和最基本的解决问题的方法。该书着重从实验基础引入基本概念，叙述由易至难、循序递进。最后，该教材在写作上也有很大的特色，全书分为 2 部分：第 1 部分讲述基本理论，其中也含有相关的应用举例；第 2 部分讲述基本应用，介绍了实际研究工作中需要的近似方法，简单介绍势散射理论和量子物理实验基础。这样的处理便于国内具有各种不同培养目标的各类学校灵活选择讲授内容（例如只讲授基本理论，或另外讲授部分或全部基本应用），而不破坏量子力学作为一门学科课程应当具有的基本完整性。

有鉴于此，特写序。希望该书中译本的出版能够为国内的量子力学教学起到积极的作用。

中国科学院院士、郑州大学教授



2009 年 6 月 10 日

译者的话

本书译自 David J. Griffiths 教授所著《Introduction to Quantum Mechanics》(Second Edition)。Griffiths 教授是美国著名的物理学教育家，他所撰写的许多教材都被美国著名高校所使用。其中《Introduction to Quantum Mechanics》一书是美国许多一流理工科大学，包括麻省理工学院 (MIT) 和加州大学洛杉矶分校 (UCLA) 等一些著名高校物理学专业学生的教学用书，在欧美被认为是最适合、最现代的教材之一。

本书的特点为：

1. 立足于“量子力学入门水平”，包含了大学量子力学最主要的内容，讲解直接从薛定谔方程开始。强调实验基础和基本概念，力图改变量子力学难于理解、难于接受的教学状况。作者从务实的角度出发，着重于交互式的写作，采用对话式的语言，叙述简明，文笔流畅，使人感到耳目一新。

2. 不仅仅局限于知识的讲授，而是让读者真正从具体问题中体会到量子力学的精髓。针对量子力学不易理解的特点，本书首先从简单的概率论和微分方程入手，让学生能迅速对一些简单的量子力学问题“上手”，而不仅仅是望着深奥的知识兴叹。

3. 充分体现现代物理学内容，在讲述量子力学的同时，把问题扩展到多个前沿的研究领域，如统计物理、固体物理、粒子物理等。在物理学各个分支中常用的部分既有精辟的叙述，又有实际举例。

4. 作者通过把一些内容移到课外习题的方式来缩减内容，使学生可以通过自学来掌握量子力学相当大的一部分内容，使得本书主线清晰，内容简练。为此，作者在习题选择上特别下功夫。例题与习题对数学的要求并不高；习题分为容易、中等和较难三个层次，可供不同基础的学生选择。对难的题目还附有提示。有利于学生对量子力学的掌握。

鉴于上述特点，我们认为这本书非常适合我国学生在学习量子力学中使用。该书的翻译出版会对量子力学的教学起到积极的作用。

本书由郑州大学贾瑜、胡行和李玉晓翻译，第 1~4 章、12 章由胡行翻译，第 5~10 章由贾瑜翻译，第 11 章由李玉晓翻译，最后由贾瑜、胡行对全书进行了统稿。在翻译过程中，对我国读者熟悉的外国人名则直接给出中译名，对某些不常见的外国人名将采取音译并给出英文名。原著者给出了很多有教益的脚注，为了使读者能够方便的查阅脚注所给出的参考文献，脚注中的人名、书名、文章名、杂志名和出版社名将不再翻译，直接给出英文。由于时间紧迫，加之译者水平有限，不妥或错误之处，敬请广大读者批评指正，以便再版改正。

本书在翻译过程中得到了郑州大学物理工程学院霍裕平院士、美国橡树岭国家实验室张振宇教授、武汉大学物理与技术学院刘觉平教授等的关心和指导。郑州大学李新建教授、姚乾凯教授给了很多帮助。在此，对他们表示感谢！

译者

2009 年 7 月于郑州大学

前 言

与牛顿力学，或麦克斯韦电动力学，或爱因斯坦相对论不同，量子力学不是由个别人建立的，直到现在，对它令人振奋但有创伤的初期仍缺乏足够的了解。它的基本原理是什么，如何去思考它，它到底“意味”着什么，至今没有普遍一致的看法。任何一个有能力的物理学家可以“谈论”量子力学，但是我们告诉我们自己关于我们正在做什么的故事就像舍赫拉查德（Scheherazade）传说一样千变万化，几乎是难以置信的。玻尔曾说过，“如果你没有被量子力学搞迷惑，则你根本就没有理解量子力学”；费恩曼曾评述过，“我想我可以说我有把握地说，没有人明白量子力学。”

本书的目的是教你如何学习量子力学。除了在第1章中某些必备基础知识外，深刻的准哲学的问题将留在书尾。我不相信一个人在对“量子力学是干什么的”有一个牢固理解之前，他可以明智地讨论量子力学意味着什么。但是如果你急不可待，在学习过第1章后可立即阅读后记。

量子力学不仅概念丰富，技术上也比较难，除了人为的课本范例外，严格解十分罕见。因此发展处理实际问题的特殊技术十分必要。相应地，本书分为两部分¹；第1部分涵盖基本理论；第2部分汇集了近似方法，同时配以直观的有启发性的应用示例。尽管在逻辑上保持两部分的独立性是重要的，但是学习时也没必要一定按照目前的次序。例如，有些教师可能希望在第2章之后能立即开始学习定态微扰理论。

本书可供大学三年级或四年级学生一个学期或一个学年使用。一个学期的课程应主要集中在第1部分；一个学年的课程在第2部分之外还可以学习一些补充材料。读者必须具备线性代数（总结在附录之中）、复数、微积分的基础知识；熟悉一些傅里叶变换和狄拉克 δ 函数的知识是很有帮助的。当然，基本经典力学是必要的，一些电动力学的知识也会很有帮助。一般总是如此，你对物理和数学知道得越多，学习起来就越容易，通过学习获得的就越多。但是我要强调的是，以我的观点，量子力学不是早期理论自然平滑的产物。相反，它代表着对经典思想一种急剧的、革命性的变革，唤起一种全新的、完全反直觉的思考自然世界的方法。这也正是它成为一个如此有魅力学科的原因所在。

乍看起来，你可能被书中可怕的数学所震惊。我们遇到勒让德、厄密和拉盖尔多项式，球谐、贝塞尔、诺伊曼和汉开尔函数、艾里泛函，甚至是黎曼 ζ 函数——更不用说傅里叶变换、希尔伯特空间、厄密算符、克莱布希-高登系数和拉格朗日乘子。所有这些东西都是必要的吗？也许是不必要的，但是物理学家像木匠一样：使用正确的工具能使工作简易，减少困难，学习量子力学而没有适当的数学工具就像让学生用螺丝刀去挖地基一样。（另一方面，如果教师讲授使用每一个工具的完善复杂的课程，学习就会枯燥乏味，而且会使重点偏移。我自己的经验是给学生铁铲告诉他们开始挖掘。也许开始他们会遇到困难，但是我仍然认为这是最有效、最激励的学习方式。）在任何情况下，我可以向你保证本书没有很深的数

¹ 这种结构受 David Park 经典教本的启发，Introduction to the Quantum Theory, 3rd ed., McGraw-Hill, New York, 1992。

前　　言

学，如果你遇到不熟悉的事物，并且认为我的解释不充分，务必请教他人，或钻研它。关于数学方法有很多优秀的书籍——我特别推荐 Mary Boas, *Mathematical Methods in the Physical*, 2nd ed., Wiley, New York, 1983, 或者 George Arfken, Hans-Jurgen Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 5th ed., Academic Press, Orlando, 2000。但是无论如何，不要让数学——对我们来说它仅是工具——干扰物理。

一些读者已经注意到，和通常的教科书相比，本书中例题较少，一些重要的内容放在了习题中。这并非偶然。我不认为你们不做大量的习题而能学懂量子力学。当然，如果时间允许，教师应当在课堂上给出更多的例题，但是学生们应当注意这不是任何一个人都有直观感觉的课题——这里你们正在开发的是一个全新的肌体，运动是不可替代的。马克·西蒙（Mark Semon）建议我对习题给出一个“米歇尔（Michelin）导引”，用不同数目的星号标出其重要性和难度。这看起来是一个好主意（虽然，像一个饭店的品质一样，一个习题是否重要在一定程度上是取决于每个人的兴趣）；我将采取下面的分级方案：

- * 每个读者都应该研究的基本问题；
- * * 有点难度或辅助问题；
- * * * 极有挑战性的问题，可能需要 1 个小时以上的时间。

（没有星号的意味着快餐：如果你饿了，这可以解决你的问题，但是快餐营养不太丰富。）大多数的 1 星习题出现在相关一节的后面，而大多数的 3 星习题出现在一章的后面。出版商可提供习题答案（仅供教师）。

在改写第 2 版时，我试图尽可能地保持第 1 版的精神。仅有第 3 章是完全改写，原有的太长而且偏离主题，并在附录中归入了有限维矢量空间（对授课水平上的学生此内容是适当的）的背景材料。在第 2 章中增加了一些例题（修改了原先对谐振子升降阶算符的别扭的定义）。在后面的章节中我尽可能地仅做了少量改动，甚至在可能情况下尽量保持习题和公式的标号。内容的编排和处理是流畅的（例如，第 4 章中对角动量的一个很好的介绍，第 10 章中对绝热定理的一个更简洁的证明，第 11 章中分波相移的一个新的节段）。不可避免地，我很抱歉，第 2 版要比第 1 版略长一些，但是我希望它更清晰、更容易接受和理解。

许多同事的建议和意见使我受益匪浅，他们阅读初稿，指出第 1 版的不足（或错误），提出在表述上的改进，提供有趣的习题。我特别致谢 P. K. Aravind (Worcester Polytech), Greg Benesh (Baylor), DaVid Boness (Seattle), Burt Brody (Bard), Ash Carter (Drew), Edward Chang (Massachusetts), Peter Collings (Swarthmore), Richard Crandall (Reed), Jeff Dunham (Middlebury), Greg Elliott (Puget Sound), John Essick (Reed), Gregg Franklin (Carnegie Mellon), Henry Greenside (Duke), Paul Haines (Dartmouth), J. R. Huddle (Navy), Larry Hunter (Amherst), David Kaplan (Washington), Alex Kuzmich (Georgia Tech), Peter Leung (Portland State), Tony Liss (Illinois), Jeffry Mallow (Chicago Loyola), James McTavish (Liverpool), James Nearing (Miami), Johnny Powell (Reed), Krishna Rajagopal (MIT), Brian Raue (Florida International), Robert Reynolds (Reed), Keith Riles (Michigan), Mark Semon (Bates), Herschel Snodgrass (Lewis and Clark), John Taylor (Colorado), Stavros Theodorakis (Cyprus), A. S. Tremsin (Berkeley), Dan Velleman (Amherst), Nicholas Wheeler (Reed), Scott Willenbrock (Illinois), William Wootters (Williams), Sam Wurzel (Brown), Jens Zorn (Michigan)。

目 录

序

译者的话

前言

第1部分 理 论

第1章 波函数	1
1.1 薛定谔方程	1
1.2 波函数的统计诠释	1
1.3 概率	4
1.4 归一化	8
1.5 动量	10
1.6 不确定原理	12
第2章 定态薛定谔方程	16
2.1 定态	16
2.2 一维无限深方势阱	20
2.3 谐振子	26
2.4 自由粒子	39
2.5 δ 函数势	45
2.6 有限深方势阱	51
第3章 形式理论	62
3.1 希尔伯特空间	62
3.2 可观测量	64
3.3 厄密算符的本征函数	67
3.4 广义统计诠释	71
3.5 不确定原理	73
3.6 狄拉克符号	79
第4章 三维空间中的量子力学	88
4.1 球坐标系中的薛定谔方程	88
4.2 氢原子	96
4.3 角动量	106
4.4 自旋	112
第5章 全同粒子	132
5.1 双粒子体系	132
5.2 原子	139
5.3 固体	144
5.4 量子统计力学	151

第2部分 应 用

第6章 不含时微扰理论	164
6.1 非简并微扰理论	164
6.2 简并微扰理论	168
6.3 氢原子的精细结构	174
6.4 塞曼效应	181
6.5 超精细分裂	185
第7章 变分原理	192
7.1 理论	192
7.2 氦原子基态	195
7.3 氢分子离子	199
第8章 WKB 近似	206
8.1 “经典”区域	206
8.2 隧穿	209
8.3 连接公式	212
第9章 含时微扰理论	222
9.1 二能级系统	222
9.2 辐射的发射与吸收	228
9.3 自发发射	232
第10章 绝热近似	242
10.1 绝热定理	242
10.2 贝瑞相	247
第11章 散射	259
11.1 引言	259
11.2 分波分析	262
11.3 相移	266
11.4 玻恩近似	268

目 录

第 12 章 后记	277	A. 1 矢量	287
12.1 EPR 佯谬	277	A. 2 内积	289
12.2 贝尔定理	278	A. 3 矩阵	290
12.3 无复本定理	282	A. 4 基矢变换	294
12.4 薛定谔猫	283	A. 5 本征矢和本征值	296
12.5 量子齐诺佯谬	285	A. 6 厄密变换	300
附录 线性代数	287	索引	303

第1部分 理 论

第1章 波函数

1.1 薛定谔方程

假设一个质量为 m 的粒子被限制沿 x 轴运动，所受的力为 $F(x, t)$ （如图 1.1）。经典力学中要解决的问题是确定在给定任意时刻这个粒子的位置： $x(t)$ 。并由此可以求出速度 ($v = dx/dt$)，动量 ($p = mv$)，动能 ($T = (1/2)mv^2$)，或者其他任何感兴趣的力学量。如何决定 $x(t)$? 我们应用牛顿 (Newton) 第二定律： $F = ma$ 。（对保守体系——我们将仅考虑的体系，并且很幸运，也是在微观尺度所需考虑的惟一体系——力可以表示为势能函数的导数¹， $F = -\partial V/\partial x$ ，牛顿第二定律可以写为 $md^2x^2/dt^2 = -\partial V/\partial x$ 。）这个方程和适当的初始条件一起（一般讲在 $t=0$ 时刻的位置和速度），可以确定 $x(t)$ 。

量子力学求解这个问题是完全不同的。我们要寻找的是粒子的波函数 $\Psi(x, t)$ ，得到这个波函数是通过解薛定谔 (Schrödinger) 方程：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi. \quad (1.1)$$

这里 i 是 -1 的平方根， \hbar 是普朗克 (Planck) 常数——或者最初的常数 (h) 除以 2π ：

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054\,572 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}. \quad (1.2)$$

薛定谔方程的作用和地位从逻辑上讲就像牛顿第二定律：给定适当的初始条件（一般来说， $\Psi(x, 0)$ ），薛定谔方程确定以后所有时刻的波函数 $\Psi(x, t)$ ，就像经典力学中牛顿定律确定以后所有时刻的 $x(t)$ 一样²。

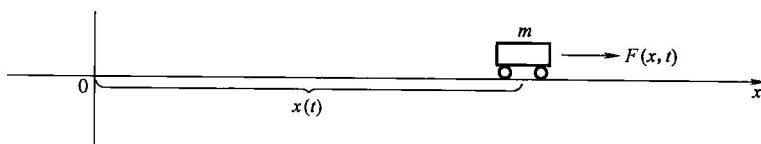


图 1.1 一个“粒子”在一个指定力的作用下限制在一维运动

1.2 波函数的统计诠释

但是，在严格的意义上讲“波函数”是什么，一旦你得到波函数它可以为你做什么？

¹ 磁力是一个例外，但是现在我们无需担心它们。另外，在本书中我们假设运动是非相对论的 ($v \ll c$)。

² 对薛定谔方程起源的第一手资料，参看 Felix Bloch 在 Physics Today, December, 1976 的有趣文章。

首先，一个粒子由其本质，是位于一个点，而波函数（像它的名字暗示那样）是在空间的一个分布（在任何给定时间 t ，它是 x 的一个函数）。这样一个波函数如何表示一个粒子的状态呢？答案由玻恩（Born）关于波函数的统计诠释给出，这个诠释指出， $|\Psi(x, t)|^2$ 给出在 t 时刻位置位于 x 处发现这个粒子的概率——或者更精确地说³，

$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \{ \text{在 } t \text{ 时刻发现粒子处于 } a \text{ 和 } b \text{ 之间的概率.} \} \quad (1.3)$$

这个概率是 $|\Psi|^2$ 的图形中由 a 到 b 之间所包围的面积。对图 1.2 所给的波函数，你将非常可能在 A 点附近区域发现粒子，因为这里的 $|\Psi|^2$ 比较大，而在 B 点附近可能发现不了粒子。

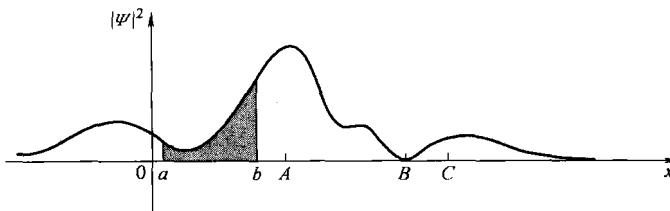


图 1.2 一个典型的波函数。阴影区域表示发现粒子处于 a 和 b 之间的概率
在 A 附近最有可能发现粒子，而在 B 附近最没有可能发现粒子

波函数的统计诠释在量子力学中引入了一种不确定性，即便你根据这个理论知道了一个粒子的所有信息（它的波函数），你仍然不能在一个简单的测量它位置的实验中确切地预言实验结果——量子力学所能提供的仅是一些可能结果的统计信息。这个不确定性曾严重困惑了物理学家和哲学家们。人们很自然要问，这种不确定性是事物的本质，还是理论的缺陷？

假定我们确实测量了这个粒子的位置并且发现它在 C 点⁴。问题：在我们恰好进行测量之前这个粒子在哪里？对这个问题有三种可能的回答，它们代表三种主要学派对不确定性的不同看法。

1. 现实主义学派：粒子还是在 C 点。听起来像一个很合理的回答，这也是爱因斯坦（Einstein）所持的观点。可是注意，如果这是真实的，这就意味着量子力学是一个不完备的理论，如果粒子在测量前就在 C 点，而量子力学本身没有能力告诉我们这一点。对现实主义而言，不确定性不是自然的本性，而是反映了我们对自然的无知。德埃斯帕纳特（d'Espagnat）强调说“粒子的位置从来就不是不可确定的，而仅是实验者不知道而已。”⁵ 显然 Ψ 不是全部的故事——需要提供某些附加的信息（称为隐变量）才能提供对粒子的完全描述。

2. 正统学派：粒子哪也不在。是测量强迫粒子“在某处露面”（尽管我们无法知道为什么及如何它决定在 C 点露面）。乔丹（Jordan）更加明确指出：“观测者不仅扰动了被观测量，而且产生了它……我们强迫（粒子）出现在特定的位置⁶。”这种观点（称为哥本哈根（Copenhagen）学派解释），源于玻尔（Bohr）和其追随者。在物理学家中这是被最广泛

³ 波函数本身是复数，但是 $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ (Ψ^* 是 Ψ 的复共轭) 是一个非负值实数，就像一个概率必须是正的实数那样。

⁴ 当然，任何测量仪器的精度都是有限的；这里是说在仪器所允许偏差范围内在 C 点附近发现粒子。

⁵ Bernard d'Espagnat, "The Quantum Theory and Reality", Scientific American, November, 1979, 第 165 页。

⁶ 引自 Mermin N. David 一篇可爱的文章，“Is the moon there when nobody looks？”，Physics Today, April, 1985, 第 38 页。

接受的观点。可是注意，如果这种观点是正确的，测量的作用将非常独特——对其争论了半个世纪但少有进展。

3. 不可知论学派：拒绝回答。这个回答并不是像它听起来那样糊涂愚蠢——首先，知道你的回答是否正确的惟一途径是进行一个精确的测量，那么什么情况可以叫做“测量前”？在这种情况下，对测量前粒子的状态进行论断有什么意义？为某些由其本质是不可能被检测的事而担忧是故弄玄虚。泡利（Pauli）曾说过：“和讨论一个针尖上能坐多少个天使的远古问题一样，我们无需为某些我们根本无法知道的事情浪费脑力”⁷。数十年来，大多数物理学家采取这种回避的姿态。他们向你兜售正统学派的观点，但是如果你坚持，他们停止对话，又会回到不可知论的观点。

直到最近，所有三种观点还都有自己的支持者。但是在 1964 年约翰·贝尔（John Bell）震惊了物理学界，他宣布粒子在测量前有没有一个确定的位置在观测上会导致不同的测量结果。贝尔的发现排除了不可知论作为一种可能的观点，并且把判断正统观点和现实主义观点谁是正确的变成一个实验的问题。我们将在本书结尾重回到这个问题，那时你们的知识能使你们更好地欣赏贝尔的论述。至于现在，只需指出实验已经决定性地证实了正统观点⁸：一个粒子在测量前没有一个确定的位置，就像水面的波纹，是测量的过程给出了一个具体数量，在这个意义上，给出了受波函数统计权重限定的特定的结果。

如果紧接着第一次测量

进行第二次测量，能测量到什么结果？粒子还是在 C 点？还是每次都测量到一个完全的不同的新结果？在这个问题上所有人都是完全一致的：一个重复实验（对同一粒子）将产生同样的结果。的确，如果紧接着的第二次测量不能证实粒子在 C 点，它将是很困难证明粒子在第一次测量确实出现在 C。正统观点如何解释第二测量结果限制粒子在 C 点？事实是第一次测量完全改变了波函数，所以它现在是在 C 点尖锐地耸起（图 1.3）。我们称之为由于测量产生的波函数的坍缩，在 C 点生成针状波形（由于波函数遵从薛定谔方程，这个波将很快弥散开来，所以第二次测量要立即进行）。所以存在两类完全不同的物理过程：“正常”类，波函数按薛定谔方程“从容不迫”的演化；“测量”类，由于测量，波函数突然和不连续的坍缩⁹。

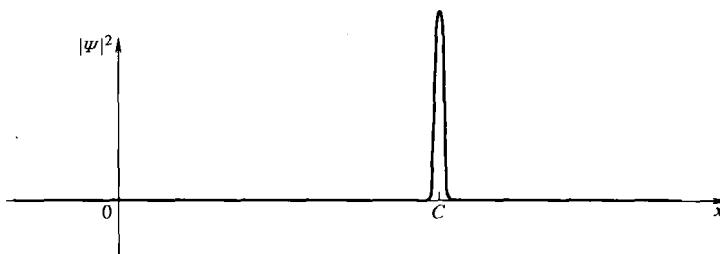


图 1.3 波函数的坍缩：在测量发现粒子处于 C 点后瞬时 $|\Psi|^2$ 的图形

⁷ 引自 Mermin（脚标 6），第 40 页。

⁸ 这个论断可能过于强烈：现在还有一些理论和实验的漏洞。我将在以后讨论其中的一些。非局域隐变量理论（著名的有大卫·玻姆（David Bohm）和其他表达（如多世界解释），这些不能非常明确地划归到我的三种分类中。但是我想它是明智的，至少从教学法的观点，从一开始就采取一个清晰自洽的框架。其余的以后再说。

⁹ 测量的作用在量子力学如此关键奇异，你可能困惑什么精确构成一个测量？在微观（量子）体系和宏观（经典）测量仪器之间必须存在相互作用么（像玻尔坚持的那样）？或者是由留下一个永久的“记录”来刻划（像海森伯（Heisenberg）宣称的那样）？或者它卷入了一个有意识“观测者”的干涉（像维格纳（Wigner）建议的那样）？后面，我会将重提这个棘手的话题；现在，让我们采取一个朴素的看法：一个测量就是一个科学家在实验室用尺子，秒表，盖革（Geiger）计数器等所做的那样一类事情。

1.3 概率

1.3.1 分立变量

由于统计诠释，概率在量子力学中起着非常重要的作用，所以现在我们偏离主题简短讨论一下概率理论。以一个简单的例子，介绍一些术语和概念。

假设一个屋子中有 14 个人，他们的年龄分布为：

14岁	1人，
15岁	1人，
16岁	3人，
22岁	2人，
24岁	2人，
25岁	5人.

如果我们用 $N(j)$ 表示年龄为 j 的人数，则

$$\begin{aligned}N(14) &= 1, \\N(15) &= 1, \\N(16) &= 3, \\N(22) &= 2, \\N(24) &= 2, \\N(25) &= 5.\end{aligned}$$

而其余 $N(j)$ （例如 $N(17)$ ）为零。屋子中的总人数为

$$N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j). \quad (1.4)$$

（当然，在上面例子中， $N = 14$ 。）图 1.4 是以上数据的直方图。下面是关于这个分布的一些我们可能要问的一些问题。

问题 1：如果随机从这组人群中选出一个人，并且年龄为 15 岁，其概率为多少？答案： $1/14$ ，因为有 14 种可能的选择，每种机会相等，而只有一人年龄符合要求。如果 $P(j)$ 是选出年龄为 j 的概率，则 $P(14) = 1/14$, $P(15) = 1/14$, $P(16) = 3/14$, ...。一般有，

$$P(j) = \frac{N(j)}{N}. \quad (1.5)$$

注意到选出年龄为 14 或 15 岁的概率为年龄为 14 岁的概率同年龄为 15 岁的概率之和（本例中，为 $1/7$ ）。特别有，如果不限定选出人的年龄，所有的概率之和为 1；

$$\sum_{j=0}^{\infty} P(j) = 1. \quad (1.6)$$

问题 2：最概然年龄是那个年龄？答案：显然为 25 岁；5 个人具有这个年龄，而另外的年龄，至多只有 3 人有一样的年龄。普遍有，最概然 j 是使 $P(j)$ 取最大值的 j 。

问题 3：中值年龄是多大？答案：23 岁，因为 7 人比这个年龄大，7 人比它小。（普遍地，中值 j 是指比它大的值的概率和比它小的值的概率各占一半的值。）

问题 4：平均年龄是多大？答案：

$$\frac{(14) + (15) + 3(16) + 2(22) + 2(24) + 5(25)}{14} = \frac{294}{14} = 21.$$

普遍地, j 的平均值 (我们将写做 $\langle j \rangle$) 是

$$\langle j \rangle = \frac{\sum jN(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} jP(j). \quad (1.7)$$

注意可能没有任何人的年龄是平均年龄或中值年龄——本例中没有人年龄是 21 岁或 23 岁。在量子力学中平均值是通常最感兴趣的物理量; 在这个意义上它被称为期待值。这是个容易产生误解的叫法, 因为它暗含着在一次测量中这是你最可能得到的结果 (其实最可能得到的应该是最概然值, 而不是平均值)——不过我们还是保留这个称呼。

问题 5: 年龄平方的平均是多少? 答案: 你有 $14^2 = 196$, 概率为 $1/14$, $15^2 = 225$, 概率为 $1/14$, $16^2 = 256$, 概率为 $3/14$, 等。因此平均值为

$$\langle j^2 \rangle = \sum_0^{\infty} j^2 P(j). \quad (1.8)$$

普遍地, 可以给出 j 的函数的平均值

$$\langle f(j) \rangle = \sum_0^{\infty} f(j) P(j). \quad (1.9)$$

(式 1.6, 式 1.7 和式 1.8 是上式的特殊形式。) 注意: 平方的平均 $\langle j^2 \rangle$ 一般情况下是不等于平均的平方的。例如, 屋子里仅有两个婴儿, 一个 1 岁, 另一个 3 岁, 则 $\langle j^2 \rangle = 5$, 而 $\langle j \rangle^2 = 4$ 。

在图 1.5 所给的两个直方图中, 即便它们有着同样的中值、平均值、最概然值和同等数目的元素, 它们仍然有着明显的不同: 第一个是非常集中地位于平均值附近的地方, 而第二个很宽很平。(第一个可能代表一个大城市学校班级中学生年龄的分布, 而第二个可能代表偏远地区仅有一个教室的学校中学生年龄的分布。) 我们需要一个分布对平均值“弥散”数量上的量度。这个量度一种最明显的方法是找出每一个个体对平均值的偏差是多少, 即

$$\Delta j = j - \langle j \rangle, \quad (1.10)$$

然后计算 Δj 的平均值。这样做的问题在于, 由于平均值的性质, Δj 的值有正有负, 正负相消, 你得到的结果为零:

$$\begin{aligned} \langle \Delta j \rangle &= \sum (j - \langle j \rangle) P(j) = \sum jP(j) - \langle j \rangle \sum P(j) \\ &= \langle j \rangle - \langle j \rangle = 0. \end{aligned}$$

(注: $\langle j \rangle$ 是一个常数, 在求和中是不变的, 所以可以提到求和号外) 你也许认为对 Δj 的绝对值求平均可以避开这种问题, 但是绝对值是不方便使用的也达不到我们的目的。所以我们通过在求平均值前先平方来解决的问题:

$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta j)^2 \rangle. \quad (1.11)$$

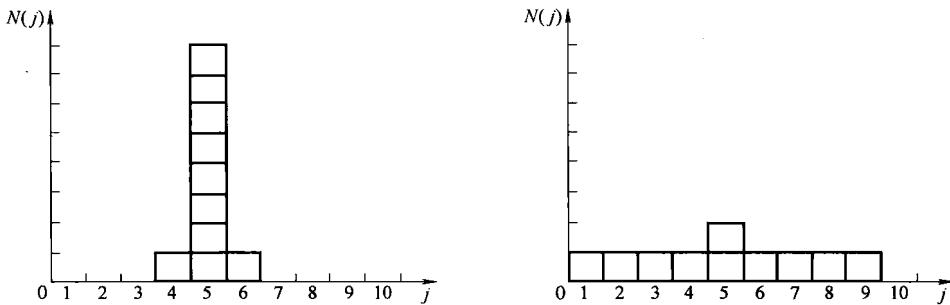


图 1.5 具有同样的中值、平均值、最概然值，但是不同的标准方差的两个直方图

这个量称为分布方差； σ 本身（对平均值偏差平方的平均的平方根——好绕嘴！）称为标准差。 σ 是关于对 $\langle j \rangle$ 弥散的惯用量度。

对方差有一个很有用的小定理：

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \langle (\Delta j)^2 \rangle = \sum (\Delta j)^2 P(j) = \sum (j - \langle j \rangle)^2 P(j) \\ &= \sum (j^2 - 2j\langle j \rangle + \langle j \rangle^2) P(j) \\ &= \sum j^2 P(j) - 2\langle j \rangle \sum j P(j) + \langle j \rangle^2 \sum P(j) \\ &= \langle j^2 \rangle - 2\langle j \rangle \langle j \rangle + \langle j \rangle^2 = \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2. \end{aligned}$$

取平方根，标准差可以写做

$$\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2}. \quad (1.12)$$

实用上，这是最快得到 σ 的方法：计算 $\langle j^2 \rangle$ 和 $\langle j \rangle^2$ ，二者相减，然后开平方根。同前面一样再一次提醒，一般来讲 $\langle j^2 \rangle$ 不等于 $\langle j \rangle^2$ 。由于 σ^2 显然是非负值的（从它的定义式 1.11 可以看出），式 1.12 意味着

$$\langle j^2 \rangle \geq \langle j \rangle^2, \quad (1.13)$$

等号仅当 $\sigma = 0$ 时才成立，也就是说仅对没有弥散的分布（每一个元素有相同的值）成立。

1.3.2 连续变量

到目前为止，假定我们处理的仅是分立变量——即变量所取的值仅是某些孤立值（在上面的例子中，由于我们以年为单位给出年龄，所以 j 是一个整数）。但是以上结果可以非常简单地推广到连续的分布。如果我们在大街上随机挑选出一个人，他的年龄精确地是 16 岁 4 小时 27 分 3.333… 秒的概率是零。在这种情况下，有意义的是他的年龄位于某个区间内——比方说，在 16 和 17 岁之间的概率是多少。如果这个区间足够小，这个概率是正比于区间的长度的。例如他的年龄是在 16 到 16 另两天之间的机会大概是在 16 到 16 另一天之间的两倍。（除非，我们假定某些极不寻常的婴儿在 16 年前的这一天大量出生——在这种情况下要应用这个规则，我们选择的时间间隔太长了。如果婴儿的大量出生维持六小时，为安全起见，间隔应该选为 1 秒或更短。技术上，我们讲的是无限小间隔。）这样

$$\{\text{一个个体(随机选择的)处在 } x \text{ 和 } (x + dx) \text{ 之间的概率}\} = \rho(x) dx. \quad (1.14)$$

比例因子 $\rho(x)$ 常被不严格地称为“取值为 x 的概率”，但是这是一种不规范的语言；一个更好的术语是概率密度。 x 位于 a 和 b （有限间隔）之间的概率由概率密度 $\rho(x)$ 的积分