1. 一个粒子的波函数为:

$$\psi\left(x,t\right)=Aexp\left(-\frac{1}{2}ax^{2}-i\omega t\right)$$

将该波函数归一化

相关概念与定义:

- **波函数与概率密度:** $\psi(x,t)=\langle x|\psi(t)\rangle$ 为位置表象波函数，概率密度 $\rho(x,t)=|\psi(x,t)|^2$。
- **归一化条件:** $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t)|^2\,dx=1$。
- **高斯积分:** $\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ax^2}dx=\sqrt{\pi/a}$ （$a>0$）。

解答:

$$\int\left|\psi\left(x,t\right)\right|^{2}=A^{2}\int exp\left(-ax^{2}\right)dx=A^{2}I=1$$

$$\begin{aligned}I^{2}&=\int exp\left(-ax^{2}\right)dx\int exp\left(-ay^{2}\right)dy\\&=\iint exp\left(-a\left(x^{2}+y^{2}\right)\right)dxdy\\&=\iint rexp\left(-ar^{2}\right)drd\theta=\frac{\pi}{a}\\I&=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\\A&=\left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\end{aligned}$$

2. 证明 $\frac{d}{dt}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi\left(x,t\right)\right|^{2}dx=0$

知识点:

- **概率守恒:** 总概率不随时间变化，等价于 $\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2\,dx=0$。
- **连续性方程:** 一维形式 $\partial_t\rho+\partial_x j=0$，连接概率密度与概率流，给出守恒的局域表达。
- **含时薛定谔方程:** 用其与共轭式消去势能项并形成全导数结构。
- **分部积分与边界条件:** 可归一化态满足 $\psi(\pm\infty)=0$，使边界项消失，从而得到守恒结论。

相关概念与定义:

- **概率密度与归一化:** $\rho(x,t)=|\psi(x,t)|^2$，概率守恒等价于 $\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty}\rho\,dx=0$。
- **乘积法则与共轭求导:** $\partial_t(\psi^*\psi)=\psi^*\partial_t\psi+(\partial_t\psi^*)\psi$，且 $\partial_t\psi^*=(\partial_t\psi)^*$。
- **含时薛定谔方程（1D）:** $i\hbar\partial_t\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi+V(x)\psi$。
- **边界条件:** 可归一化态满足 $\psi(\pm\infty)=0$，积分分部的边界项消失。

详细步骤:

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^2\,dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x,t)|^2\,dx\quad\text{(交换求导与积分)}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2=\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi)=\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\psi\quad\text{(乘积法则)}$$

由含时薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x)\psi$$

得

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{i}{\hbar}V(x)\psi,$$

对其取共轭可得

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

代回得到

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^2=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\psi\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\right)=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right).$$

因此

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2\,dx&=\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial x}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)dx\\&=\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)\Bigg|_{-\infty}^{+\infty}=0,\end{aligned}$$

其中最后一步使用边界条件 $\psi(\pm\infty)=0$。

3. 已知波函数 $\psi=\frac{1}{r}e^{ikr}$，计算其概率流密度。

知识点：

- **概率流密度：**定义 $\vec{j}=\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)$，表示概率在空间中的“流动方向与强度”。
- **梯度与链式法则：**对 $\psi=(1/r)e^{ikr}$ 需用乘积法则、$\nabla(e^g)=e^g\nabla g$ 等规则。
- **球对称径向关系：**$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$，$\nabla r=\hat{r}$，从而 $\nabla(1/r)=-\hat{r}/r^2$。

相关概念与定义：

- **概率流密度：**$\vec{j}=\frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)$。
- **梯度算符：**$\nabla=(\partial_x,\partial_y,\partial_z)$。
- **径向变量与单位矢量：**$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$，$\nabla r=\left(\frac{x}{r},\frac{y}{r},\frac{z}{r}\right)=\hat{r}$。

详细步骤：

$$r=\sqrt{x^2+y^2+z^2},\qquad\nabla r=\left(\frac{x}{r},\frac{y}{r},\frac{z}{r}\right)=\hat{r}.$$

这里

$$\nabla=\left(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z}\right),\quad\nabla f=\left(\frac{\partial f}{\partial x},\frac{\partial f}{\partial y},\frac{\partial f}{\partial z}\right).$$

对 $\psi=\frac{1}{r}e^{ikr}$ 有

$$\nabla\psi=\nabla\left(\frac{1}{r}\right)e^{ikr}+\frac{1}{r}\nabla\left(e^{ikr}\right).$$

其中

$$\nabla\left(\frac{1}{r}\right)=-\frac{1}{r^2}\nabla r=-\frac{1}{r^2}\hat{r},$$

以及

$$\nabla\left(e^{ikr}\right)=e^{ikr}\nabla(ikr)=ik\,e^{ikr}\nabla r=ik\,e^{ikr}\hat{r}.$$

这里用到多元链式法则：若 $g(\vec{r})$ 为标量函数，则

$$\nabla(e^{g}) = e^{g}\nabla g.$$

代回得

$$\nabla\psi = -\frac{\hat{r}}{r^2}e^{ikr} + \frac{1}{r}\left(ik\,e^{ikr}\hat{r}\right) = \left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2}\right)e^{ikr}\hat{r}.$$

同理

$$\nabla\psi^* = \left(-\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2}\right)e^{-ikr}\hat{r}.$$

因此

$$\psi^* = \frac{1}{r}e^{-ikr}, \quad \psi = \frac{1}{r}e^{ikr}.$$

先算

$$\psi^*\nabla\psi = \left(\frac{1}{r}e^{-ikr}\right)\left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2}\right)e^{ikr}\hat{r} = \left(\frac{ik}{r^2} - \frac{1}{r^3}\right)\hat{r},$$

$$\psi\nabla\psi^* = \left(\frac{1}{r}e^{ikr}\right)\left(-\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2}\right)e^{-ikr}\hat{r} = \left(-\frac{ik}{r^2} - \frac{1}{r^3}\right)\hat{r}.$$

代入

$$J = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi\right)$$

得

$$J = \frac{\hbar k}{mr^2}\hat{r} = \frac{\hbar k}{mr^3}\vec{r}.$$

4. 氢原子处于基态，$\psi\left(r,\theta,\varphi\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}$，求

知识点：

- **势能期望值：** 对库仑势 $V(r) = -e^2/r$，$\langle V\rangle = \int \psi^* V(r)\psi\,dV$，只需计算 $\langle 1/r\rangle$。
- **动能期望值：** $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$，因而 $\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \psi^*(\nabla^2\psi)\,dV$。
- **球对称拉普拉斯：** 若 $\psi = \psi(r)$，$\nabla^2\psi = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi}{dr}\right)$。
- **角向积分：** 球对称态有 $\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\sin\theta\,d\theta d\varphi = 4\pi$，将三维积分化为径向积分。

相关概念与定义：

- **期望值：** $\langle A\rangle = \int \psi^* A\psi\,dV$，特别地 $\langle r\rangle = \int r|\psi|^2\,dV$。
- **球坐标体积元：** $dV = r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi$。
- **球对称拉普拉斯：** $\nabla^2 f(r) = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{df}{dr}\right)$。
- **常用积分：** $\int_0^{\infty} r^n e^{-\alpha r}dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}$ $(\alpha > 0)$。

已知：

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-r/a_0}, \quad |\psi|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3}e^{-2r/a_0}, \quad dV = r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi.$$

归一化核对（$\int|\psi|^2 dV = 1$）：

$$\int|\psi|^2\,dV = \int_0^{\infty}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\frac{1}{\pi a_0^3}e^{-2r/a_0}\,r^2\sin\theta\,d\varphi\,d\theta\,dr = \frac{4}{a_0^3}\int_0^{\infty}r^2 e^{-2r/a_0}\,dr.$$

用公式 $\int_0^\infty r^2 e^{-\alpha r} dr = \frac{2}{\alpha^3}$（$\alpha > 0$），取 $\alpha = 2/a_0$：

$$\int |\psi|^2 \, dV = \frac{4}{a_0^3} \cdot \frac{2}{(2/a_0)^3} = 1.$$

因此归一化成立。这里 $\vec{r}$ 表示位置**矢量**，$r = |\vec{r}|$ 表示**模长**。因此 $\psi(\vec{r})$ 与 $\psi(r, \theta, \varphi)$ 是同一波函数在不同坐标下的写法。角向积分给出 $\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin\theta \, d\theta d\varphi = 4\pi$，因此只剩径向积分。

(1) $\langle r \rangle$**：**

$$\langle r \rangle = \int r|\psi|^2 \, dV = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r \, \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} \, r^2 \sin\theta \, d\varphi \, d\theta \, dr.$$

先做角向积分：

$$\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin\theta \, d\theta \, d\varphi = 4\pi,$$

因此

$$\langle r \rangle = \frac{4}{a_0^3} \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_0} \, dr.$$

用公式 $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$（$a > 0$），得

$$\langle r \rangle = \frac{4}{a_0^3} \cdot \frac{3!}{(2/a_0)^4} = \frac{3}{2} a_0.$$

(2) $\langle V \rangle$**：**

$$\left\langle -\frac{e^2}{r} \right\rangle = -\int \frac{e^2}{r} |\psi|^2 \, dV = -\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{e^2}{r} \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} \, r^2 \sin\theta \, d\varphi \, d\theta \, dr.$$

角向积分给出 4π，因此

$$\left\langle -\frac{e^2}{r} \right\rangle = -\frac{4e^2}{a_0^3} \int_0^\infty r e^{-2r/a_0} \, dr = -\frac{4e^2}{a_0^3} \cdot \frac{1!}{(2/a_0)^2} = -\frac{e^2}{a_0}.$$

(3) $\langle T \rangle$**：**球对称情形

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right).$$

等价快公式：$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi)$，可直接作用于 $r\psi$ 以减少计算量。**用快公式再算一遍：**令 $u(r) = r\psi$，则

$$u(r) = \frac{r}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \quad u'(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \left(1 - \frac{r}{a_0} \right),$$

$$u''(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \left(-\frac{2}{a_0} + \frac{r}{a_0^2} \right).$$

于是

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} u''(r) = \left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{a_0 r} \right) \psi,$$

与下式一致。先求导:

$$\frac{d\psi}{dr} = -\frac{1}{a_0}\psi,$$

$$r^2\frac{d\psi}{dr} = -\frac{r^2}{a_0}\psi,$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\psi}{dr}\right) = -\frac{2r}{a_0}\psi + \frac{r^2}{a_0^2}\psi.$$

因此

$$\nabla^2\psi = \left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{a_0 r}\right)\psi.$$

动能期望值

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \psi^*(\nabla^2\psi)\,dV = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \psi^*\left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{a_0 r}\right)\psi\,dV$$

展开积分为

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{a_0^2}\int |\psi|^2\,dV - \frac{2}{a_0}\int \frac{1}{r}|\psi|^2\,dV\right].$$

利用归一化 $\int |\psi|^2\,dV = 1$，并记

$$\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle = \int \frac{1}{r}|\psi|^2\,dV,$$

得到

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{a_0}\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle\right).$$

而

$$\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle = \int \frac{1}{r}|\psi|^2\,dV = \frac{4}{a_0^3}\int_0^\infty re^{-2r/a_0}dr = \frac{4}{a_0^3}\cdot\frac{1!}{(2/a_0)^2} = \frac{1}{a_0}.$$

于是

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{a_0^2} - \frac{2}{a_0^2}\right) = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}.$$

5. 写出角动量算符的表达式，并且计算 L_x 和 L_y 的对易关系

相关概念与定义：

- **角动量算符：** $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$，位置表象中 $\vec{p} = -i\hbar\nabla$。
- **基本对易关系：** $[x_i, x_j] = 0$，$[p_i, p_j] = 0$，$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$。

角动量算符：

$$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p},\quad L_x = yp_z - zp_y,\quad L_y = zp_x - xp_z,\quad L_z = xp_y - yp_x.$$

分量展开的详细计算： 写成分量

$$\vec{r} = (x, y, z),\quad \vec{p} = (p_x, p_y, p_z).$$

叉乘用行列式记忆:

$$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} = \begin{vmatrix} \vec{e}_x & \vec{e}_y & \vec{e}_z \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix}.$$

按第一行展开:

$$\vec{L} = \vec{e}_x(yp_z - zp_y) - \vec{e}_y(xp_z - zp_x) + \vec{e}_z(xp_y - yp_x).$$

因此得到

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x.$$

这里 p_x, p_y, p_z 的含义: 它们是动量算符的三个分量。在位置表象中

$$p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

代入即可得到 L_x, L_y, L_z 的微分算符形式:

$$L_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad L_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \quad L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right).$$

在位置表象中 $p_i = -i\hbar\,\partial_i$，于是

$$L_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad L_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right).$$

对易关系计算: 使用基本对易关系

$$[x_i, x_j] = 0, \quad [p_i, p_j] = 0, \quad [x_i, p_j] = i\hbar\,\delta_{ij}.$$

因此有

$$[p_i, x_j] = -[x_j, p_i] = -i\hbar\,\delta_{ij}.$$

并用到对易子的乘积法则:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B, \qquad [A, BC] = [A, B]C + B[A, C].$$

例如

$$[yp_z, zp_x] = y[p_z, zp_x] + [y, zp_x]p_z = y([p_z, z]p_x + z[p_z, p_x]) + ([y, z]p_x + z[y, p_x])p_z.$$

由于 $[p_z, p_x] = [y, z] = [y, p_x] = 0$，仅剩

$$[yp_z, zp_x] = y[p_z, z]p_x.$$

再代入基本对易关系 $[p_z, z] = -i\hbar$:

$$[yp_z, zp_x] = y(-i\hbar)p_x = -i\hbar\,yp_x.$$

先展开

$$[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y,\ zp_x - xp_z].$$

用线性与 $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ 得

$$[L_x, L_y] = [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z].$$

逐项计算:

$$[yp_z, zp_x] = y[p_z, z]p_x = -i\hbar\,yp_x,$$

因为 $[p_z, z] = -i\hbar$，其余对易子为 0。

$$[yp_z, xp_z] = 0, \qquad [zp_y, zp_x] = 0$$

（不同分量互对易）。最后

$$[zp_y, xp_z] = x[z, p_z]p_y = +i\hbar\, xp_y.$$

合并得到

$$[L_x, L_y] = i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z.$$

结论： $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$。

6. 对于一个动量为 p，势能为 $V(x)$ 的基本微观粒子，证明牛顿力学的基本方程

相关概念与定义：

- **动量算符与期望值：** $\hat{p} = -i\hbar\partial_x$，$\langle p\rangle = \int \psi^* \hat{p}\psi\, dx$。
- **含时薛定谔方程（1D）：** $i\hbar\partial_t\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi + V(x)\psi$。
- **分部积分与边界条件：** $\psi(\pm\infty) = 0$ 使边界项消失。

整体思路：

- 写出动量期望值 $\langle p\rangle$ 的积分表达式；
- 对时间求导并用乘积法则展开；
- 用含时薛定谔方程（及其共轭）替换 $\partial_t\psi, \partial_t\psi^*$；
- 对含空间导数项分部积分，并利用边界条件消去边界项；
- 最终得到 $\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle$。

详细推导：

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\, dx.$$

对时间求导:

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle p\rangle}{dt} &= \frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \left(-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) dx \\
&= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x} + \psi^*\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) dx \quad (\text{交换求导与积分} + \text{乘积法则})
\end{aligned}$$

对第二项做分部积分:

$$\begin{aligned}
\int \psi^*\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial t}\, dx = \text{取}u = \psi^*,\ dv = \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial t}\, dx,\ du = \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\, dx,\ v = \frac{\partial\psi}{\partial t} \\
\Rightarrow \int u\, dv = uv - \int v\, du \\
= \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\bigg|_{-\infty}^{+\infty} - \int \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial t}\, dx \\
= -\int \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial t}\, dx \quad (\psi(\pm\infty) = 0),
\end{aligned}$$

代回得到

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -i\hbar\int \left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial\psi}{\partial t}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right) dx$$

含时薛定谔方程与其共轭:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}-\frac{i}{\hbar}V\psi,\quad \frac{\partial\psi^*}{\partial t}=-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}+\frac{i}{\hbar}V\psi^*.$$

代入得

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt}=-\frac{\hbar^2}{2m}\int\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)dx+\int V\frac{\partial}{\partial x}(|\psi|^2)\,dx.$$

第一项是全导数并在边界消失，第二项分部积分:

$$\int\left(\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)dx=\int\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)dx=\left.\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|_{-\infty}^{+\infty}=0,$$

其中利用可归一化态在无穷远处 $\psi,\partial_x\psi\to 0$。

$$\int V\frac{\partial}{\partial x}(|\psi|^2)\,dx=V|\psi|^2\Big|_{-\infty}^{+\infty}-\int\frac{\partial V}{\partial x}|\psi|^2\,dx.$$

边界项为 0，因此

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt}=\left\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle.$$

为什么这就是牛顿方程: 经典力学中

$$\frac{dp}{dt}=F(x)=-\frac{\partial V}{\partial x}.$$

经典力学回顾（1D）:

- 牛顿第二定律: $F=ma$，而 $p=mv$，因此 $\frac{dp}{dt}=F$。
- 势能与力: 对保守力有 $dW=F\,dx=-dV$，故 $F(x)=-\frac{dV}{dx}$。

量子力学得到的是“期望值版本”:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt}=\left\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle,$$

说明动量平均值的变化率等于力的平均值 (Ehrenfest 定理)。当波包足够窄、势能变化平缓时,

$$\left\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle\approx-\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{x=\langle x\rangle},$$

于是回到经典牛顿方程形式。

7. 证明时间和频率的测不准关系: $\Delta t\Delta\omega\geq\frac{1}{2}$

相关概念与定义:

- **傅里叶变换(时间-频率):** $F(\omega)=\int f(t)e^{i\omega t}dt$,逆变换 $f(t)=\frac{1}{2\pi}\int F(\omega)e^{-i\omega t}d\omega$。
- **Parseval 定理:** $\int|f(t)|^2dt=\frac{1}{2\pi}\int|F(\omega)|^2d\omega$。
- **方差定义:** 若均值取 0，则 $\sigma_t^2=\int t^2|f(t)|^2dt$，$\sigma_\omega^2=\frac{1}{2\pi}\int\omega^2|F(\omega)|^2d\omega$。
- **柯西-许瓦兹不等式:** $\left|\int fg^*\right|^2\leq\left(\int|f|^2\right)\left(\int|g|^2\right)$。

一个信号的时域和频域表达式可以通过傅里叶变换来表示:

$$F(\omega)=\int f(t)e^{i\omega t}dt$$

此时 $|f(t)|^2$ 可以表示瞬时的能量, 信号总的能量可以表示为: $\|f\|^2=\int|f(t)|^2\,dt$ 则 $\frac{|f(t)|^2}{\|f\|^2}$ 可以看成概率密度函数，为了简单起见，我们假设 $\|f\|^2=1$ 由此可以得到时间的平均值和时间的方差，我们假设均值为 0，时间的方差可以表示为:

$$\sigma_t^2=\int t^2\,|f(t)|^2\,dt$$

同理，利用傅里叶变换关系，能量也可以在频域中表示，由此可以得到频率的方差为:

$$\sigma_\omega^2=\int\omega^2\frac{|F(\omega)|^2}{2\pi}d\omega$$

由此可得:
$\sigma_t^2\sigma_\omega^2=\frac{1}{2\pi}\int t^2\,|f(t)|^2\,dt\int\omega^2\,|F(\omega)|^2\,d\omega$、
由傅里叶变换的微分性质和帕斯瓦尔定理:

$$f^{'}(t)=i\omega F(\omega)$$

$$\int\left|f^{'}(t)\right|^2dt=\frac{1}{2\pi}\int\omega^2\,|F(\omega)|^2d\omega$$

$\sigma_t^2\sigma_\omega^2=\int t^2\,|f(t)|^2\,dt\int\left|f^{'}(t)\right|^2dt$
利用柯西-许瓦兹不等式:

$$\left|\int f(x)g^*(x)dx\right|^2\leq\left(\int|f(x)|^2\,dt\right)\left(\int|g(x)|^2\,dx\right)$$

因此有:

$$\sigma_t^2\sigma_\omega^2=\int t^2\,|f(t)|^2\,dt\int\left|f^{'}(t)\right|^2dt\geq\left|\int tf^*(t)\frac{d}{dt}f(t)dt\right|^2$$

注意到:

$$\begin{aligned}\int tf(t)\frac{d}{dt}f^*(t)dt&=t\,|f(t)|^2\Big|_{-\infty}^{+\infty}-\int f^*(t)d\,(tf(t))\\&=-\int f^*(t)d\,(tf(t))\\&=-\int f^*(t)\left(f(t)+tf^{'}(t)\right)dt\\&=-1-\int f^*(t)tf^{'}(t)dt\end{aligned}$$

因此有:

$$\int f^*(t)tf^{'}(t)dt+\int tf(t)\frac{d}{dt}f^*(t)dt=-1$$

$$\Rightarrow 2Re\left(\int f^*(t)tf^{'}(t)dt\right)=-1$$

由于 $\int f^*(t)tf^{'}(t)dt$ 是一个复数，利用 $|Re(z)|\leq|z|\Rightarrow|Re(z)|^2\leq|z|^2$
因此有:

$$\frac{1}{4}=\left(Re\left(\int f^*(t)tf^{'}(t)dt\right)\right)^2\leq\left|\int f^*(t)tf^{'}(t)dt\right|^2$$

因此有:

$$\sigma_t^2\sigma_\omega^2=\int t^2\left|f(t)\right|^2dt\int\left|f^{'}(t)\right|^2dt\geq\left|\int tf^*(t)\frac{d}{dt}f(t)dt\right|^2\geq\frac{1}{4}$$

因此有：$\sigma_t\sigma_\omega\geq\frac{1}{2}$

8. 粒子处于状态:

$$\psi(x)=\left(\frac{1}{2\pi\xi^2}\right)^{\frac{1}{2}}exp\left(\frac{i}{\hbar}p_0x-\frac{x^2}{4\xi^2}\right)$$

求粒子的动量平均值，并且计算测不准关系

$$\overline{\Delta x^2\Delta p^2}=?$$

解：由归一化已求得 $\xi=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$，因此可直接写成

$$\psi(x)=\exp\left(\frac{i}{\hbar}p_0x-\frac{\pi x^2}{2}\right),\quad|\psi|^2=e^{-\pi x^2},\quad\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi|^2dx=1.$$

动量的平均值:

$$\overline{p}=\int\psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\,dx.$$

先求导

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)=\left(\frac{ip_0}{\hbar}-\pi x\right)\psi(x).$$

因此

$$\psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi=\left[p_0+i\hbar\pi x\right]|\psi|^2.$$

积分得

$$\overline{p}=p_0\int|\psi|^2dx+i\hbar\pi\int x|\psi|^2dx=p_0.$$

$$\overline{\Delta x^2\Delta p^2}=?$$

$$\overline{x}=\int x|\psi|^2dx=\int_{-\infty}^{+\infty}xe^{-\pi x^2}dx=0,$$

$$\overline{x^2}=\int x^2|\psi|^2dx=\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-\pi x^2}dx.$$

分部积分：取 $u=x$，$dv=xe^{-\pi x^2}dx$，则 $du=dx$，$v=-\frac{1}{2\pi}e^{-\pi x^2}$。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\pi x^2} dx = -\frac{x}{2\pi}e^{-\pi x^2}\Big|_{-\infty}^{+\infty} + \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\pi x^2} dx = \frac{1}{2\pi},$$

因此

$$\overline{x^2} = \frac{1}{2\pi}, \quad \overline{\Delta x^2} = \frac{1}{2\pi}.$$

动量方差所需的 $\overline{p^2}$（按二阶导数展开）：

$$\overline{p^2} = -\hbar^2 \int \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} dx.$$

先求二阶导数：

$$\psi'' = \left(-\pi - \frac{p_0^2}{\hbar^2} - \frac{2i\pi p_0}{\hbar}x + \pi^2 x^2\right)\psi.$$

因此

$$-\hbar^2\psi^*\psi'' = \left(p_0^2 + \hbar^2\pi + 2i\hbar\pi p_0 x - \hbar^2\pi^2 x^2\right)|\psi|^2.$$

积分得

$$\overline{p^2} = p_0^2 + \hbar^2\pi + 2i\hbar\pi p_0 \int x|\psi|^2 dx - \hbar^2\pi^2 \int x^2|\psi|^2 dx.$$

其中 $\int x|\psi|^2 dx = 0$（奇函数），且 $\int x^2|\psi|^2 dx = \frac{1}{2\pi}$，因此

$$\overline{p^2} = p_0^2 + \hbar^2\pi - \hbar^2\pi^2 \cdot \frac{1}{2\pi} = p_0^2 + \frac{\pi}{2}\hbar^2.$$

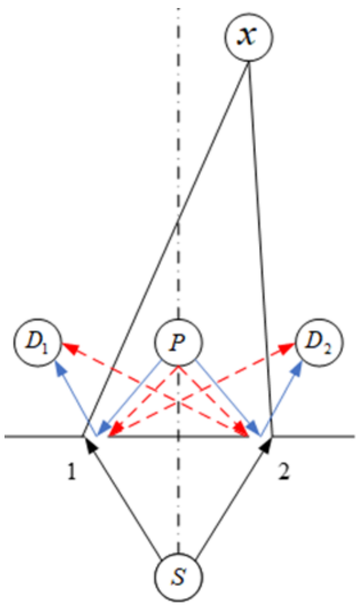
于是

$$\overline{\Delta p^2} = \overline{p^2} - \overline{p}^2 = \frac{\pi}{2}\hbar^2.$$

因此

$$\overline{\Delta x^2 \Delta p^2} = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\pi}{2}\hbar^2 = \frac{\hbar^2}{4}.$$

9. 运用概率叠加原理解释电子的双缝干涉现象：
   1. 电子双缝干涉的解释
   2. 为什么加入光源探测电子是从那一条缝通过时，干涉条纹会消失



解答：

简化背诵版（按答案推导法）：

(1) 双缝干涉：幅度相加

$$\alpha_1 = \langle x|1\rangle\langle 1|S\rangle = |\alpha_1|e^{i\varphi_1}, \quad \alpha_2 = \langle x|2\rangle\langle 2|S\rangle = |\alpha_2|e^{i\varphi_2}.$$

$$I_1 = |\alpha_1|^2, \quad I_2 = |\alpha_2|^2, \quad I = |\alpha_1+\alpha_2|^2 = I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2}\cos(\varphi_1-\varphi_2).$$

最后一项是干涉项，随位置变化 $\Rightarrow$ 明暗条纹。

(2) 加探测光源：路径可区分用探测器态标记“哪条缝”。设正确探测幅度为 β_1，误探为 β_2，则

$$\langle xD_1|SP\rangle = \alpha_1\beta_1 + \alpha_2\beta_2, \quad \langle xD_2|SP\rangle = \alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1.$$

总概率

$$I = |\langle xD_1|SP\rangle|^2 + |\langle xD_2|SP\rangle|^2.$$

若能确定哪条缝（$\beta_2 \to 0$），则

$$I = |\beta_1|^2\left(|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2\right),$$

干涉项消失。

记忆句：不可区分 $\Rightarrow$ 幅度相加有干涉；可区分 $\Rightarrow$ 概率相加无干涉。

10. 假设体系的势场与时间无关，波函数可以分解为各个本征态的叠加

简化背诵版：

- **展开：**$\psi(x,t) = \sum_n c_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$，$\hat{H}u_n = E_n u_n$。
- **正交：**$\int u_m^*(x) u_n(x)\,dx = \delta_{mn}$。
- **结论：**$\langle \hat{H}\rangle = \langle \hat{E}\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n$。

证明思路（记三行即可）：

$$\langle \hat{H}\rangle = \int \psi^* \hat{H}\psi\,dx = \sum_{mn} c_m^* c_n e^{i(E_m-E_n)t/\hbar} E_n \int u_m^* u_n\,dx = \sum_n |c_n|^2 E_n.$$

$$\langle \hat{E}\rangle = \int \psi^* (i\hbar\partial_t)\psi\,dx = \sum_{mn} c_m^* c_n e^{i(E_m-E_n)t/\hbar} E_n \int u_m^* u_n\,dx = \sum_n |c_n|^2 E_n.$$

记忆口诀：定态展开 + 正交归一 $\Rightarrow$ 只留下 $m=n$ 项。

11. 在一维无限深势阱中，势阱内 $0 \le x \le a$，$V(x)=0$，其余位置势能函数为无穷大，如果已知粒子的波函数在初始时刻 $\psi(x\ 0) = Ax(a-x)$，求
  1. 归一化常数 A
  2. 任意时刻 t 的波函数 $\psi(x\ t)$。

知识点与方法：

- **无限深势阱边界条件：**势阱外 $V \to \infty$，故波函数在边界满足 $\psi(0,t) = \psi(a,t) = 0$，且阱外 $\psi = 0$。
- **定态本征解：**阱内 $V = 0$，定态薛定谔方程 $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} = Eu$，本征函数 $u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$，本征值 $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$。

- **展开与系数：** 任意初态可展开为 $\psi(x,0)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n u_n(x)$，系数由正交归一给出 $c_n=\int_0^a u_n^*(x)\psi(x,0)\,dx$。
- **时间演化：** 势能与时间无关时，$\psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n u_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$。
- **归一化：** 由 $\int_0^a|\psi(x,0)|^2dx=1$ 决定常数 A。

解答：

$$\int_0^a (Ax(a-x))^2\,dx=A^2\frac{a^5}{30}=1\Rightarrow A=\sqrt{\frac{30}{a^5}}$$

由势阱内的一维定态薛定谔方程：

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi(x)=E\psi(x)$$

令 $k=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$，方程的通解为：$\psi(x)=A\sin(kx)+B\cos(kx)$

由边界条件 $\psi(0)=0$，可知 $B=0$，$\psi(a)=0$，可知，$k=\frac{n\pi}{a}$。

由于波函数是归一化的，由此可得：

$$u_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\psi(x,t)=\sum_n c_n u_n(x)\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)$$

$$c_n=\int_0^a u_n^*(x)\psi(x\ 0)dx$$

因此：$\psi(x,t)=\sqrt{\frac{30}{a}}\left(\frac{2}{\pi}\right)^3\sum\limits_{n=1,3,5,7\ldots}\frac{1}{n^3}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\exp\left(-i\frac{n^2\pi^2\hbar}{2ma^2}t\right)$

12. 1）写出位置算符 x 的本征值和本征函数

2）写出动量算符 $-i\hbar\frac{d}{dx}$ 的本征值和本征函数

解答：
由于：$x\delta(x-x_0)=x_0\delta(x-x_0)$
位置算符 x 的本征值是 x_0 处的坐标，其本征函数是一个冲击函数：

$$\delta(x-x_0)$$

设动量算符的本征函数是 $f(x)$，根据本征函数的定义为：

$$-i\hbar\frac{df(x)}{dx}=p_xf(x)$$

因此有：

$$\frac{df(x)}{f(x)} = i\frac{p_x}{\hbar}dx$$

两边积分:

$$\int \frac{df}{f} = \int i\frac{p_x}{\hbar}\,dx$$

得到

$$\ln f = i\frac{p_x}{\hbar}x + C_0$$

两边取指数:

$$f(x) = C\exp\left(i\frac{p_x}{\hbar}x\right), \quad C = e^{C_0}.$$

因此:

$$f(x) = Cexp\left(i\frac{p_x}{\hbar}x\right)$$

本征函数具有归一化的特点:

$$\begin{aligned} 1 &= |C|^2\int exp\left(i\frac{p_x - p_x^{'}}{\hbar}x\right)dx \\ &= |C|^2\hbar\int exp\left(i\frac{p_x - p_x^{'}}{\hbar}x\right)d\left(\frac{x}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

做变量代换: $x_1 = \frac{x}{\hbar}$，因此有

$$\begin{aligned} 1 &= |C|^2\hbar\int exp\left(i\left(p_x - p_x^{'}\right)x_1\right)dx_1 \\ &= 2\pi|C|^2\hbar \end{aligned}$$

因此

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

动量算符的本征值是粒子的动量，本征函数是一个复指数函数:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}exp\left(i\frac{p_x}{\hbar}x\right)$$

说明: 这是**一维**动量本征函数。三维情形下本征函数为

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right),$$

可理解为三个一维平面波的直积，因此归一化因子不同。

13. 一维无限深势阱中坐标算符和动量算符在能量表象中的矩阵元

解答 1:

一维无限深势阱中，本征函数为 $u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$

坐标算符的对角元: **由定义:** 能量表象矩阵元

$$x_{mn} = \langle m|\hat{x}|n\rangle = \int_0^a \langle m|x\rangle\, x\,\langle x|n\rangle\,dx = \int_0^a u_m^*(x)\,x\,u_n(x)\,dx.$$

因此对角元 x_{nn} 就是取 $m=n$ 后的积分。

$$\begin{aligned} x_{nn} &= \int_0^a \frac{2}{a} sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) x sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= \frac{2}{a}\int_0^a x sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = \frac{a}{2} \end{aligned}$$

当 $m \neq n$ 时

$$\begin{aligned} x_{mn} &= \int_0^a \frac{2}{a} sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) x sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= \frac{1}{a}\int_0^a x\left[cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) - cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)\right] dx \\ &= \frac{1}{a}\left[\left(\frac{a^2}{(m-n)^2\pi^2} cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) + \frac{ax}{(m-n)\pi} sin\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right)\right)\Bigg|_0^a\right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{a^2}{(m+n)^2\pi^2} cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right) + \frac{ax}{(m+n)\pi} sin\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)\right)\Bigg|_0^a\right] \\ &= \frac{a}{\pi^2}\left[(-1)^{m-n} - 1\right]\left[\frac{1}{(m-n)^2} - \frac{1}{(m+n)^2}\right] \\ &= \frac{a}{\pi^2}\frac{4mn}{(m^2-n^2)^2}\left[(-1)^{m-n} - 1\right] \end{aligned}$$

动量算符的对角元为:

$$\begin{aligned} p_{nn} &= \int u_n^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right) u_n(x) dx \\ &= -i\hbar\int \frac{2}{a} sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\left(\frac{d}{dx}\right) sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= -i\hbar\frac{2n\pi}{a^2}\int_0^a sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\ &= -i\hbar\frac{n\pi}{a^2}\int_0^a sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) dx \\ &= i\hbar\frac{n\pi}{a^2}\frac{a}{2n\pi}\int_0^a d cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \\ &= i\hbar\frac{1}{2a}\, cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)\Bigg|_0^a = 0 \end{aligned}$$

动量算符的非对角元为:

$$
\begin{aligned}
p_{mn} &= \int u_m^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)u_n(x)dx \\
&= -i\hbar\int\frac{2}{a}sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\left(\frac{d}{dx}\right)sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx \\
&= -i\hbar\frac{2n\pi}{a^2}\int\limits_0^a sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx \\
&= -i\hbar\frac{n\pi}{a^2}\left[\int\limits_0^a sin\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)+sin\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right)\right]dx \\
&= i\hbar\frac{n\pi}{a^2}\left[\frac{a}{(m+n)\pi}cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)+\frac{a}{(m-n)\pi}cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right)\right]\Bigg|_0^a \\
&= i\hbar\frac{n}{a}\left[\frac{1}{(m+n)}+\frac{1}{(m-n)}\right]\left[(-1)^{m-n}-1\right] \\
&= \frac{i2mn\hbar}{a\left(m^2-n^2\right)}\left[(-1)^{m-n}-1\right]
\end{aligned}
$$

14. 在动量表象中，角动量算符 L_x 的矩阵元。

解答:

前置知识（表象/基底 vs 空间，以本题为例）:

- **表象/基底**是希尔伯特空间中的一组基向量；**空间变量**（如 x、$\vec{p}$）只是用来给基矢贴标签。
- 位置表象用 $\{|x\rangle\}$ 作基底，动量表象用 $\{|p\rangle\}$ 作基底；它们都是同一希尔伯特空间中的不同基，不是“不同物理空间里的态”。
- 本题是**动量表象**：矩阵元写成 $\langle p'|\hat{L}_x|p\rangle$，规则为 $\hat{\vec{p}}\to\vec{p}$（乘法），$\hat{\vec{r}}\to i\hbar\nabla_p$（微分）。

更详细的解读（避免“自变量 = 表象”的误解）: 这里的“表象”是**选哪组基矢**来表示态与算符。本题的 $\langle p'|\hat{L}_x|p\rangle$ 已经固定了基是 $\{|p\rangle\}$，所以最终结果必须写成对 $\vec{p}$ 的乘法或对 $\vec{p}$ 的微分。中间步骤出现 x,y,z 只是因为插入了位置完备性 $\int d^3r\,|r\rangle\langle r|=\mathbb{I}$，把矩阵元写成空间积分以便使用已知的 $\hat{L}_x$ 在位置表象的形式。这并不意味着“改用了位置表象”，而是**在动量表象问题中暂时借用位置基做积分**。

关键思路:

- 先在位置基下让 $\hat{L}_x=-i\hbar(y\partial_z-z\partial_y)$ 作用到 $\langle r|p\rangle\propto e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$;
- 再用恒等式 $y\,e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$（同理对 z）把 r 换成对 p 的导数;
- 最后把导数移到动量变量上，得到 $\hat{L}_x=-i\hbar\left(p_z\frac{\partial}{\partial p_y}-p_y\frac{\partial}{\partial p_z}\right)$，这就是**动量表象**中的角动量算符形式。

动量算符的本征函数为:

$$\psi_p(r)=\frac{1}{\left(\sqrt{2\pi\hbar}\right)^3}exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)$$

其中 $\vec{p}\cdot\vec{r}=p_xx+p_yy+p_zz$

角动量算符 $\hat{L_x}$ 的表达式为 $\hat{L_x}=-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)$
因此其矩阵元可以表示为如下的积分:

$$
\begin{aligned}
\left(\hat{L_x}\right)_{p_1p} &= \int \psi_{p_1}^{*}\hat{L_x}\psi_p dV \\
&= \int \frac{1}{\left(\sqrt{2\pi\hbar}\right)^3} exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right) \\
&\quad \times \left(-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right)\frac{1}{\left(\sqrt{2\pi\hbar}\right)^3} exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right) \\
&\quad \times \left(-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)-z\frac{\partial}{\partial y}exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)\right)\right)dV \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right) \\
&\quad \times \left(-i\hbar\left(y\left(\frac{i}{\hbar}\right)p_z exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)-z\left(\frac{i}{\hbar}\right)p_y exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)\right)\right)dV \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right)(yp_z-zp_y)\,exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV
\end{aligned}
$$

注意到:

$$\frac{\partial}{\partial p_y}exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)=\frac{i}{\hbar}yexp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)$$

$$\Rightarrow yexp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)$$

同理：$zexp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)$
因此有:

$$
\begin{aligned}
\left(\hat{L_x}\right)_{p_1p} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right)(yp_z-zp_y) \\
&\quad \times exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV \\
&= \frac{(-i\hbar)}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right) \\
&\quad \times \left(\frac{\partial}{\partial p_y}p_z-\frac{\partial}{\partial p_z}p_y\right)exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV \\
&= (-i\hbar)\left(p_z\frac{\partial}{\partial p_y}-p_y\frac{\partial}{\partial p_z}\right) \\
&\quad \times \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right)exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV\right)
\end{aligned}
$$

由正交归一性可以知道:

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right)exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV$$
$$=\delta\left(\vec{p}-\vec{p_1}\right)$$

因此:

$$\left(\hat{L_x}\right)_{p_1p}=-i\hbar\left(p_y\frac{\partial}{\partial p_z}-p_z\frac{\partial}{\partial p_y}\right)\delta\left(\vec{p}-\vec{p_1}\right)$$

等价写法: 这就是动量空间中的角动量算符

$$\hat{L}_x=-i\hbar(\vec{p}\times\nabla_p)_x=-i\hbar\left(p_y\frac{\partial}{\partial p_z}-p_z\frac{\partial}{\partial p_y}\right),$$

行列式推导:

$$\vec{p}\times\nabla_p=\begin{vmatrix}\hat{e}_x & \hat{e}_y & \hat{e}_z\\ p_x & p_y & p_z\\ \frac{\partial}{\partial p_x} & \frac{\partial}{\partial p_y} & \frac{\partial}{\partial p_z}\end{vmatrix},$$

因此

$$(\vec{p}\times\nabla_p)_x=p_y\frac{\partial}{\partial p_z}-p_z\frac{\partial}{\partial p_y},$$

从而

$$\hat{L}_x=-i\hbar(\vec{p}\times\nabla_p)_x=-i\hbar\left(p_y\frac{\partial}{\partial p_z}-p_z\frac{\partial}{\partial p_y}\right).$$

因此矩阵元也可写成

$$\left(\hat{L_x}\right)_{p_1p}=\hat{L}_x\,\delta\left(\vec{p}-\vec{p}_1\right).$$

解答 2(不借用位置基,直接在动量表象计算):

(1) 先写出动量表象中的算符形式: 动量表象中用替换规则 $\hat{\vec{p}}\to\vec{p}$、$\hat{\vec{r}}\to i\hbar\nabla_p$,所以

$$\hat{\vec{L}}=\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}}\ \Rightarrow\ \hat{\vec{L}}\to-i\hbar(\vec{p}\times\nabla_p),$$

从而

$$\hat{L}_x=-i\hbar\left(p_y\frac{\partial}{\partial p_z}-p_z\frac{\partial}{\partial p_y}\right).$$

(2) 先把"本征函数/特征值/自变量"说清楚: 动量算符的本征矢与特征值由本征方程给出:

$$\hat{\vec{p}}|\vec{p}_1\rangle=\vec{p}_1\,|\vec{p}_1\rangle.$$

动量表象中 $\hat{\vec{p}}\to\vec{p}$,因此对应的本征函数满足

$$\vec{p}\,\phi_{\vec{p}_1}(\vec{p})=\vec{p}_1\,\phi_{\vec{p}_1}(\vec{p}).$$

动量算符的本征矢是 $|\vec{p}\rangle$,其特征值就是标签 $\vec{p}$。在动量表象中,对应的本征函数写成

$$\phi_{\vec{p}_1}(\vec{p})=\langle\vec{p}|\vec{p}_1\rangle=\delta(\vec{p}-\vec{p}_1),$$

这里 $\vec{p}$ 是**自变量**,$\vec{p}_1$ 是**特征值标签**。

(3) 用这些基函数算矩阵元（类比第 13 题的写法）： 为避免把“自变量”与“本征值标签”混在一起，记 $|\vec{p}_2\rangle$ 为右侧本征矢（题目中的 $|\vec{p}\rangle$）。则

$$\langle\vec{p}_1|\hat{L}_x|\vec{p}_2\rangle = \int d^3p\, \phi^*_{\vec{p}_1}(\vec{p})\, \hat{L}_x^{(\vec{p})}\, \phi_{\vec{p}_2}(\vec{p}).$$

代入 $\phi_{\vec{p}_2}(\vec{p}) = \delta(\vec{p}-\vec{p}_2)$ 得

$$\langle\vec{p}_1|\hat{L}_x|\vec{p}_2\rangle = \int d^3p\, \delta(\vec{p}-\vec{p}_1)\, \hat{L}_x^{(\vec{p})}\, \delta(\vec{p}-\vec{p}_2).$$

这里用到 δ 的取值性质：

$$\int d^3p\, \delta(\vec{p}-\vec{p}_1)F(\vec{p}) = F(\vec{p}_1),$$

令 $F(\vec{p}) = \hat{L}_x^{(\vec{p})}\delta(\vec{p}-\vec{p}_2)$，即可。对 $\vec{p}$ 积分后

$$\langle\vec{p}_1|\hat{L}_x|\vec{p}_2\rangle = \hat{L}_x^{(\vec{p}_1)}\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2) = -i\hbar\left(p_{1y}\frac{\partial}{\partial p_{1z}} - p_{1z}\frac{\partial}{\partial p_{1y}}\right)\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2)\,.$$

补充说明： 若从“角动量是旋转生成元”出发，对动量表象波函数有 $(U_R\phi)(\vec{p}) = \phi(R^{-1}\vec{p})$。对小旋转作一阶展开同样得到 $\hat{\vec{L}} = -i\hbar(\vec{p}\times\nabla_p)$，与上式一致。

15. 已知在 Q 表象中，态矢为 ψ，一个力学量 F 在 Q 表象中矩阵为 F_Q，求该力学量 F 在自身表象中，处于各个本征态的概率。

解答：

已知： 在 Q 表象中，态矢列向量 ψ，算符矩阵 F_Q。

目标： 在 F 的本征态基底（自身表象）中，各本征态的概率 P_n。

前置知识点： 同一算符在不同基下的矩阵表示相互之间是酉相似变换，因此**特征值（谱）与表象无关**。

1. 已知 ψ_Q 与 F_Q。先求 F_Q 的特征值 λ_n；这些就是算符 F 的特征值。
2. 用这些特征值组成对角矩阵 $F_F = \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots)$。
3. 基变换矩阵 U 把 F_Q 变为 F_F：$F_F = U^\dagger F_Q U$。因此 U 就是把 F_Q 对角化的矩阵（本征向量按列组成）。
4. 用同一个基变换矩阵把态矢变到 F 表象：$\psi_F = U^\dagger\psi_Q$。
5. ψ_F 是 $|\psi\rangle$ 在 F 的本征态基底下的系数列向量，因此第 n 个分量的模平方就是概率：$P_n = |(\psi_F)_n|^2$。

最终概率：

$$P_n = |(\psi_F)_n|^2 = |(U^\dagger\psi)_n|^2.$$

若本征值退化，对应多个本征态的概率需相加。

16. 已知角动量算符的矩阵为：

$$L_x = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

求角动量算符在自身表象下的矩阵表示:。

算符的本征值方程为:

$$\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\psi=\lambda\psi$$

$$\lambda=\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\lambda_1$$

$$\begin{vmatrix}-\lambda_1 & 1 & 0\\ 1 & -\lambda_1 & 1\\ 0 & 1 & -\lambda_1\end{vmatrix}=(-\lambda_1)^3+2\lambda_1=0$$

$$\lambda_{1,1}=0\ \lambda_{1,2}=\sqrt{2}\ \lambda_{1,3}=-\sqrt{2}$$

因此:

$$\lambda=0,\quad \lambda=\hbar,\quad \lambda=-\hbar$$

因此测量 L_x 只有**三种**结果：$\hbar$, 0, $-\hbar$（不是 1，而是 $\hbar$ 的倍数）。对应的**归一化本征向量**（在给定基 $\{|m=+1\rangle,|m=0\rangle,|m=-1\rangle\}$ 下）可取为:

$$|+\rangle_x=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ \sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix},\quad |0\rangle_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 0\\ -1\end{pmatrix},\quad |-\rangle_x=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ -\sqrt{2}\\ 1\end{pmatrix}.$$

把它们按列排成矩阵

$$U=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2}\\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2}\\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{2}\end{pmatrix},$$

则

$$U^\dagger L_x U=\mathrm{diag}(\hbar,\,0,\,-\hbar).$$

对角元的排列顺序可以互换，只要与对应本征向量的列顺序一致。

17. 已知态矢 $|\psi\rangle=\sum\limits_n exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$，求投影算符 $|k\rangle\langle k|$ 的平均值，其中 α 是复数。

$$\langle k\,|\psi\rangle=\sum_n exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\langle k\,|n\rangle$$

说明： $|n\rangle$ 与 $|k\rangle$ 属于**同一组**正交归一基底；n 是遍历指标，k 是选定的某一个基矢编号（来自投影算符 $|k\rangle\langle k|$）。因此它们是同一基底上的不同基向量。

$$=\sum_n exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\delta_{kn}=exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}}$$

$$\begin{aligned}\langle\psi\,|k\rangle\langle k|\,\psi\rangle&=exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\frac{(\alpha^*)^k}{\sqrt{k!}}exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha|^2\right)\frac{\alpha^k}{\sqrt{k!}}\\ &=exp\left(-|\alpha|^2\right)\frac{|\alpha|^{2k}}{k!}\end{aligned}$$

18. 将下列公式用狄拉克符号表示

1） $F\left(x, i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\left(x,t\right)=\Phi\left(x,t\right)$

2） $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(x,t\right)=H\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\left(x,t\right)$

3） $H\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_n(x)=E_nu_n(x)$

4） $\int u_m^*(x)u_n(x)dx=\delta_{mn}$

5） $\psi\left(x,t\right)=\sum_n a_n(t)u_n(x)$

解答

题意说明（先看这一段再做转换）：

- **狄拉克符号**就是 bra-ket 记号：态用 $|\psi\rangle$，对偶用 $\langle\phi|$，内积为 $\langle\phi|\psi\rangle$，算符作用为 $A|\psi\rangle$。
- **位置表象**与**抽象态**的关系：$\psi(x,t)=\langle x|\psi(t)\rangle$，同理 $\Phi(x,t)=\langle x|\Phi(t)\rangle$。
- **"用狄拉克符号表示"**就是把"在位置表象写成函数方程"的式子，翻译成"抽象态/算符"的表达式，必要时可写成 $\langle x|A|\psi\rangle$ 的形式（这等价于在位置表象取分量）。
- **为什么只写 x：**原题公式都在位置表象，因此自然用 $|x\rangle$；若换到动量表象，则写成 $\langle p|A|\psi\rangle$ 并用 p 的表示。
- **$\langle x|A|\psi\rangle$ 与"乘法"的关系：**它表示"先让 A 作用在 $|\psi\rangle$，再取 x 表象分量"，即 $\langle x|A|\psi\rangle=(A\psi)(x)$。当 $A=A(x)$ 时，这是乘法：$\langle x|A|\psi\rangle=A(x)\psi(x)$；当 $A=\hat{p}$ 时，这是微分：$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle=-i\hbar\,\partial_x\psi(x)$。

（1） $F\left(x, i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\left(x,t\right)=\Phi\left(x,t\right)$

$$\langle x|F|\psi\rangle=\langle x|\Phi\rangle \quad 或 \quad F|\psi\rangle=|\Phi\rangle$$

说明：F 是算符，Φ 是算符作用后的新态；写成 $\langle x|F|\psi\rangle$ 表示"在位置表象取分量"。

（2） $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(x,t\right)=H\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi\left(x,t\right)$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x|\psi\rangle=\langle x|H|\psi\rangle \quad 或 \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle=H|\psi\rangle$$

说明：这是含时薛定谔方程，H 为哈密顿算符；右式是不带表象的抽象表达。

（3） $H\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_n(x)=E_nu_n(x)$

原始过程：

$$H|n\rangle=E_n|n\rangle$$

左乘 $\langle x|$ 得

$$\langle x|H|n\rangle=E_n\langle x|n\rangle.$$

定义 $u_n(x)\equiv\langle x|n\rangle$，并在位置表象中写出算符作用：

$$\langle x|H|n\rangle=\big(H(x,-i\hbar\partial_x)u_n\big)(x),$$

于是

$$H\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_n(x)=E_nu_n(x).$$

说明：这是能量本征方程；$|n\rangle$ 为能量本征态，E_n 为本征值。

（4）$\int u_m^*(x)u_n(x)dx=\delta_{mn}$

原始过程： 设 $|u_n\rangle$ 表示这组正交归一基（也常写作 $|n\rangle$），其位置表象分量为 $u_n(x)=\langle x|u_n\rangle$，则

$$\int u_m^*(x)u_n(x)\,dx=\int\langle u_m|x\rangle\langle x|u_n\rangle\,dx=\langle u_m|\left(\int|x\rangle\langle x|\,dx\right)|u_n\rangle=\langle u_m|u_n\rangle.$$

因此

$$\langle u_m|u_n\rangle=\delta_{mn}.$$

说明： 正交归一在抽象态中就是 $\langle u_m|u_n\rangle=\delta_{mn}$（或写作 $\langle m|n\rangle=\delta_{mn}$），取位置表象就变成上面的积分形式。

（5）$\psi(x,t)=\sum\limits_n a_n(t)u_n(x)$

原始过程： 在正交归一基 $\{|n\rangle\}$ 下插入完备关系

$$\sum_n|n\rangle\langle n|=I,$$

于是

$$|\psi\rangle=\left(\sum_n|n\rangle\langle n|\right)|\psi\rangle=\sum_n|n\rangle\langle n|\psi\rangle.$$

定义系数

$$a_n(t)\equiv\langle n|\psi(t)\rangle,$$

则

$$|\psi(t)\rangle=\sum_n a_n(t)|n\rangle.$$

取位置表象分量:

$$\psi(x,t)=\langle x|\psi(t)\rangle=\sum_n\langle x|n\rangle\,\langle n|\psi(t)\rangle=\sum_n a_n(t)\,u_n(x).$$

19. 已知一个算符 $\hat{F}$ 在 A 表象中的矩阵表示为 F^a，在 B 表象中的矩阵表示为 F^b，求 A 表象和 B 表象的转换矩阵 S。

解答: **按第 15 题同样思路（矩阵形式结论）:**

1. 已知 F^a 与 F^b，它们表示同一算符在两种表象下的矩阵，满足

$$F^b=S^\dagger F^aS.$$

2. 对角化得到

$$F^a=A\Lambda A^\dagger,\qquad F^b=B\Lambda B^\dagger,$$

其中 Λ 为同一特征值对角阵，A,B 由各自的本征向量组成。

3. 写出基变换关系并代入:

$$F^b=S^\dagger F^aS.$$

将 $F^a=A\Lambda A^\dagger$ 和 $F^b=B\Lambda B^\dagger$ 代入得

$$B\Lambda B^\dagger=S^\dagger A\Lambda A^\dagger S.$$

左乘 $B^\dagger$、右乘 B：

$$\Lambda = (B^\dagger S^\dagger A)\,\Lambda\,(A^\dagger S B).$$

令

$$X \equiv A^\dagger S B,$$

则有

$$\Lambda = X^\dagger \Lambda X.$$

由于 Λ 为对角阵，最简单的满足方式是取 $X = I$（更一般地，若有简并，X 可在简并子空间内取任意酉矩阵）。因此

$$A^\dagger S B = I \quad \Rightarrow \quad S = A B^\dagger.$$