量子力学手写笔记（整理与校对版）

Contents

1 常用积分与体积元 2
- 1.1 高斯积分与指数积分 . . . 2
- 1.2 分部积分 . . . 2
- 1.3 球坐标体积元与径向拉普拉斯 . . . 2
- 1.4 常见边界与归一化 . . . 2

2 δ 函数与向量分析 3
- 2.1 δ 函数的换元公式 . . . 3
- 2.2 梯度、散度、旋度与叉乘 . . . 3

3 对易关系与表象 3
- 3.1 基本对易关系 . . . 3
- 3.2 对易子的性质 . . . 3
- 3.3 位置与动量表象 . . . 3
- 3.4 矩阵元（常见例子） . . . 3
- 3.5 概率密度与概率流 . . . 4

4 薛定谔方程与定态解 4
- 4.1 四大算符 . . . 4
- 4.2 薛定谔方程 . . . 4
- 4.3 一维无限深势阱（$0 < x < a$） . . . 5

5 氢原子基态 5
- 5.1 库仑势与基态波函数 . . . 5
- 5.2 基态期望值 . . . 5

6 期望值随时间的演化（Ehrenfest） 5

7 本征值与本征函数 5
- 7.1 位置算符 . . . 5
- 7.2 动量算符 . . . 6

8 不确定关系 6

1 常用积分与体积元

1.1 高斯积分与指数积分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad a>0,$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-ax^2}\,dx = 0, \quad a>0,$$
$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2e^{-ax^2}\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{4a^3}}, \quad a>0.$$

指数型积分（Gamma 函数特例）:

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax}\,dx = \frac{n!}{a^{n+1}}, \quad a>0,\ n=0,1,2,\dots$$

1.2 分部积分

$$\int u\,dv = uv - \int v\,du.$$

常见写法:

$$\int_a^b g(x)\,df(x) = [g(x)f(x)]_a^b - \int_a^b f(x)\,dg(x).$$

这是“把导数项借位”的常用记号：若 f, g 可微，

$$\int_a^b g(x)\,f'(x)\,dx = [g(x)f(x)]_a^b - \int_a^b f(x)\,g'(x)\,dx.$$

在多变量情形中，可对某一变量分部积分，例如

$$\int_a^b g(x,\dots)\,\frac{\partial f}{\partial x}\,dx = [gf]_a^b - \int_a^b f(x,\dots)\,\frac{\partial g}{\partial x}\,dx,$$

其余变量视为常数。

1.3 球坐标体积元与径向拉普拉斯

$$dV = r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi.$$

径向函数 $f(r)$ 的拉普拉斯:

$$\nabla^2 f(r) = f''(r) + \frac{2}{r}f'(r) = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{df}{dr}\right).$$

1.4 常见边界与归一化

束缚态（无限域）常取

$$\psi(+\infty) = \psi(-\infty) = 0, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2\,dx = 1.$$

无限深势阱 $0<x<a$ 中常取

$$\psi(0) = \psi(a) = 0, \qquad \int_0^a |\psi|^2\,dx = 1.$$

2 δ 函数与向量分析

2.1 δ 函数的换元公式

若 $g(x_i)=0$ 且 $g'(x_i)\neq 0$，则

$$\delta\big(g(x)\big)=\sum_i \frac{\delta(x-x_i)}{|g'(x_i)|}.$$

2.2 梯度、散度、旋度与叉乘

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

$$\nabla\cdot\vec{A},\qquad \nabla\times\vec{A}.$$

$$\vec{a}\times\vec{b}=\begin{vmatrix}\hat{e}_x & \hat{e}_y & \hat{e}_z\\ a_x & a_y & a_z\\ b_x & b_y & b_z\end{vmatrix}.$$

3 对易关系与表象

3.1 基本对易关系

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

角动量:

$$\begin{aligned}
[L_x,L_y]&=i\hbar L_z, &\quad [L_y,L_x]&=-i\hbar L_z,\\
[L_y,L_z]&=i\hbar L_x, &\quad [L_z,L_y]&=-i\hbar L_x,\\
[L_z,L_x]&=i\hbar L_y, &\quad [L_x,L_z]&=-i\hbar L_y.
\end{aligned}$$

3.2 对易子的性质

$$[A,B]=AB-BA,\quad [A,B+C]=[A,B]+[A,C],\quad [AB,C]=A[B,C]+[A,C]B.$$

3.3 位置与动量表象

位置表象:

$$\hat{x}\to x,\qquad \hat{p}\to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

动量表象:

$$\hat{p}\to p,\qquad \hat{x}\to i\hbar\frac{\partial}{\partial p}.$$

3.4 矩阵元（常见例子）

一维无限深势阱（能量表象）： $u_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$。

$$x_{mn}=\langle m|\hat{x}|n\rangle=\int_0^a u_m^*(x)\,x\,u_n(x)\,dx=\begin{cases}\dfrac{a}{2}, & m=n,\\[2ex] \dfrac{4nma}{\big[(m^2-n^2)\pi\big]^2}\left[(-1)^{m-n}-1\right], & m\neq n.\end{cases}$$

$$p_{mn} = \langle m|\hat{p}|n\rangle = \int_0^a u_m^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)u_n(x)\,dx = \begin{cases} 0, & m = n, \\ \dfrac{2nm\hbar i}{(m^2-n^2)a}\left[(-1)^{m-n}-1\right], & m \neq n. \end{cases}$$

动量表象角动量矩阵元：动量表象下

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

$$\langle \vec{p}_1|\hat{L}_x|\vec{p}_2\rangle = \hat{L}_x^{(p_1)}\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2) = i\hbar\left(p_{1z}\frac{\partial}{\partial p_{1y}} - p_{1y}\frac{\partial}{\partial p_{1z}}\right)\delta(\vec{p}_1-\vec{p}_2).$$

3.5 概率密度与概率流

$$\rho = \psi^*\psi = |\psi|^2, \qquad \vec{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right).$$

连续性方程:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{j} = 0.$$

4 薛定谔方程与定态解

4.1 四大算符

动能算符:

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2.$$

势能算符:

$$\hat{V} = V(\vec{r},t).$$

哈密顿算符:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r},t).$$

能量算符:

$$\hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}.$$

4.2 薛定谔方程

$$\hat{E}\,\psi = \hat{H}\psi.$$

若 $V(\vec{r})$ 与时间无关，存在定态解

$$\hat{H}u_n = E_n u_n, \qquad \psi(\vec{r},t) = \sum_n C_n u_n(\vec{r})\,e^{-iE_n t/\hbar}.$$

能量期望值:

$$\langle H\rangle = \langle E\rangle = \sum_n |C_n|^2 E_n.$$

4.3 一维无限深势阱（$0 < x < a$）

$$V(x) = 0 \quad (0 < x < a), \qquad \psi(0) = \psi(a) = 0.$$

定态解:

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2, \quad n = 1, 2, \ldots$$

展开系数:

$$C_n = \int_0^a u_n^*(x)\, \psi(x, 0)\, dx.$$

初始波函数 $\psi(x,0)$ 常写成分段形式，需满足边界条件与归一化。

5 氢原子基态

5.1 库仑势与基态波函数

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}.$$

基态波函数（$1s$）:

$$\psi_{100}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}\, e^{-r/a_0}.$$

5.2 基态期望值

$$\langle r \rangle = \frac{3}{2} a_0, \qquad \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{a_0}.$$

$$\langle V \rangle = -e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = -\frac{e^2}{a_0}, \qquad \langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}.$$

6 期望值随时间的演化（Ehrenfest）

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle, \qquad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi.$$

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, A] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle.$$

常见结果:

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{\langle p \rangle}{m}, \qquad \frac{d}{dt}\langle p \rangle = -\langle \nabla V \rangle.$$

7 本征值与本征函数

7.1 位置算符

位置算符本征方程:

$$\hat{x}\, \delta(x - x_0) = x_0\, \delta(x - x_0).$$

因此 $\delta(x - x_0)$ 是 $\hat{x}$ 的本征函数，对应本征值 x_0。

7.2 动量算符

$$\hat{p}\, f_p(x) = p\, f_p(x), \qquad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

解为

$$f_p(x) = C\, e^{ipx/\hbar}, \qquad C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

8 不确定关系

$$\Delta A\, \Delta B \geq \frac{1}{2}\big|\langle [A, B] \rangle\big|.$$

位置与动量:

$$\Delta x\, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

方差定义:

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2, \qquad \Delta x = \sqrt{(\Delta x)^2}.$$

时间与频率（能量）:

$$\Delta t\, \Delta\omega \geq \frac{1}{2} \quad \Longleftrightarrow \quad \Delta t\, \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}.$$

当满足等号时为最小不确定态，例如高斯波包。