

# 量子力学导论

## 基于量子信息知识的深入学习

### Contents

<b>1 前言与学习目标</b>	<b>3</b>
<b>2 零基础预备：狄拉克 <math>\delta</math> 函数</b>	<b>3</b>
<b>3 零基础预备：波函数与概率幅</b>	<b>4</b>
<b>4 零基础预备：位置与动量算符</b>	<b>5</b>
<b>5 零基础预备：微积分与向量微分</b>	<b>6</b>
5.1 函数、导数与偏导	6
5.2 乘积法则与复共轭求导	7
5.3 向量、点积与叉积	7
5.4 标量场与向量场	8
5.5 梯度、散度、旋度与拉普拉斯算符	8
5.6 积分与归一化	9
5.7 复数与相位（最少够用）	9
<b>6 快速预备知识回顾（从量子信息到量子力学）</b>	<b>9</b>
6.1 连续谱与狄拉克 $\delta$	9
6.2 期望值与方差	10
6.3 表象变换（离散形式回顾）	10
<b>7 数学工具箱（必须熟练）</b>	<b>10</b>
7.1 高斯积分与常用积分	10
7.2 分部积分与边界条件	12
7.3 傅里叶变换	13
7.4 球坐标	13
7.5 球坐标下拉普拉斯算符	13
<b>8 连续表象与波函数</b>	<b>13</b>
8.1 位置表象	13
8.2 动量表象	14
8.3 算符在位置/动量表象中的表示	14
<b>9 薛定谔方程与概率守恒</b>	<b>14</b>
9.1 含时薛定谔方程	14
9.2 连续性方程与概率流	14
9.3 例：球面波概率流	15

<b>10 定态理论与能量展开</b>	<b>15</b>
10.1 分离变量 . . . . .	15
10.2 能量本征态展开 . . . . .	15
<b>11 一维无限深势阱</b>	<b>16</b>
11.1 定态解 . . . . .	16
11.2 任意初态展开 . . . . .	16
<b>12 球坐标与氢原子基态</b>	<b>16</b>
12.1 基态波函数 . . . . .	16
12.2 期望值计算要点 . . . . .	17
<b>13 角动量算符与对易关系</b>	<b>17</b>
13.1 定义与分量 . . . . .	17
13.2 对易关系 . . . . .	17
<b>14 Ehrenfest 定理 (量子-经典对应)</b>	<b>17</b>
14.1 一般形式 . . . . .	17
14.2 对动量的应用 . . . . .	17
<b>15 不确定关系</b>	<b>18</b>
15.1 一般不确定关系 (Robertson) . . . . .	18
15.2 位置-动量 . . . . .	18
15.3 时间-频率 . . . . .	18
<b>16 双缝干涉与相干性</b>	<b>18</b>
16.1 概率幅叠加 . . . . .	18
16.2 Which-way 信息的影响 . . . . .	18
<b>17 表象理论与矩阵元</b>	<b>19</b>
17.1 表象变换通式 . . . . .	19
17.2 一维势阱中的矩阵元 (坐标与动量) . . . . .	19
17.3 动量表象中的角动量算符 . . . . .	19
<b>18 线性代数速记: 对角化与本征表象</b>	<b>19</b>
18.1 一般步骤 . . . . .	19
18.2 本征表象中的概率 . . . . .	19
<b>19 相干态与投影算符</b>	<b>20</b>
<b>20 Dirac 符号翻译清单</b>	<b>20</b>
<b>21 作业题对应索引 (建议路线)</b>	<b>20</b>
<b>22 总结</b>	<b>20</b>

# 1 前言与学习目标

本讲义以已掌握《量子信息知识点》的读者为理想起点，同时提供零基础预备内容，便于新读者快速上手。我们将用**连续变量体系**的语言把量子信息中的抽象公理落地为波函数、微分方程与可观测量的计算，目标是让你能够**独立完成《量子力学作业》中的全部题目**。

## 核心学习目标：

- 从离散态过渡到连续态，掌握位置表象与动量表象的精确定义。
- 熟练使用薛定谔方程与连续性方程，理解概率守恒与概率流。
- 会处理球坐标与氢原子基态的期望值计算。
- 掌握角动量算符、对易关系与表象变换。
- 能系统推导不确定关系、Ehrenfest 定理与干涉现象。
- 能在能量表象、位置表象、动量表象之间自由切换，并计算矩阵元。

## 符号约定：

- $|\psi\rangle$  表示态矢（向量）， $\langle\phi|$  为对偶向量。
- 几何向量用  $\vec{r}$ 、 $\vec{p}$  等箭头记号。
- $A$  表示算符， $\langle A \rangle$  表示期望值；位置与动量算符仍写作  $\hat{x}$ 、 $\hat{p}$ 。
- $\psi(x, t) = \langle x|\psi(t)\rangle$  为位置表象波函数； $\phi(p, t) = \langle p|\psi(t)\rangle$  为动量表象波函数。
- 归一化： $\int |\psi|^2 dx = 1$ ；连续谱正交： $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$ 。
- $\hbar$  为约化普朗克常数； $m$  为粒子质量； $V(x)$  为势能函数。
- $\nabla$  为梯度算符， $\nabla^2$  为拉普拉斯算符（空间二阶导数的总和）。
- 位置变量用  $x$ （一维）或  $\vec{r}$ （三维），动量变量用  $p$  或  $\vec{p}$ 。

波函数不是“概率”，而是**概率幅**。只有取模平方  $|\psi(x, t)|^2$  才是“在位置  $x$  附近被测到的概率密度”。同理， $|\phi(p, t)|^2$  是测到动量  $p$  的概率密度。算符是“做动作的机器”，期望值就是测量很多次的平均结果。若写成  $\psi(\vec{r}, t)$ ， $\vec{r} = (x, y, z)$ ；若写成  $\psi(r, \theta, \varphi)$ ， $r$  是到原点的距离， $\theta$  为极角， $\varphi$  为方位角。除非特别说明， $\psi$  默认满足可归一化（平方可积）的物理态条件。

# 2 零基础预备：狄拉克 $\delta$ 函数

狄拉克  $\delta$  函数不是普通函数，而是**分布**。它的核心作用是“从积分中抽取某点的值”。最重要的性质是

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x - x_0) dx = f(x_0).$$

因此有归一化

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = 1,$$

并且  $\delta(x - x')$  表示“只有当  $x = x'$  时才有贡献”，这就是写成“差”的原因。

**缩放与换元：**若  $a \neq 0$ ，则

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x).$$

若  $g(x)$  在  $x_i$  处有简单零点 ( $g(x_i) = 0$ ,  $g'(x_i) \neq 0$ )，则

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

**单位与三维形式：** $\delta(x)$  的量纲是  $1/\text{length}$ 。三维形式为

$$\delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') = \delta(x - x')\delta(y - y')\delta(z - z'),$$

并满足  $\int \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') d^3r = 1$ 。

### 例题

$\delta$  的抽样示例：计算  $\int f(x)\delta(2x-1)dx$ 。

解：零点为  $x_0 = 1/2$ ，且  $g'(x) = 2$ ，所以

$$\delta(2x-1) = \frac{1}{2}\delta\left(x - \frac{1}{2}\right), \quad \int f(x)\delta(2x-1)dx = \frac{1}{2}f\left(\frac{1}{2}\right).$$

## 3 零基础预备：波函数与概率幅

量子态在位置表象下用波函数表示：

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle.$$

它是概率幅（可能为复数），概率密度由

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2$$

给出，因此粒子出现在区间  $[a, b]$  的概率为

$$P_{[a,b]} = \int_a^b |\psi(x, t)|^2 dx.$$

归一化条件：

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1.$$

在三维情形， $\psi(\vec{r}, t)$  满足

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1.$$

### 例题

平面波（动量本征态）：一维自由粒子可用

$$\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}$$

表示。它的概率密度为  $|\psi|^2 = |A|^2$ ，在空间中均匀分布。由于全空间均匀，严格意义下不可归一化，只是理想化的动量本征态。

### 例题

高斯波包（可归一化态）：设

$$\psi(x, 0) = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/(2a^2)}.$$

则

$$|\psi(x, 0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}a} e^{-x^2/a^2},$$

满足  $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = 1$ 。这里概率密度集中在  $x = 0$  附近,  $a$  表示波包宽度。计算说明:

$$|\psi|^2 = \psi^* \psi \quad \text{其中} \quad \psi^* = \left( \frac{1}{\pi a^2} \right)^{1/4} e^{-x^2/(2a^2)} \quad (\text{本例指数为实数, 不含 } i, \text{ 故共轭不变}),$$

$$|\psi|^2 = \left( \frac{1}{\pi a^2} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right)^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}a} e^{-x^2/a^2}.$$

### 例题

简易“盒子态”: 在区间  $[-L, L]$  上取常数波函数

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2L}}, & |x| \leq L, \\ 0, & \text{其他.} \end{cases}$$

则  $|\psi(x)|^2 = \frac{1}{2L}$ , 在  $[-L, L]$  内均匀分布, 且归一化成立。

## 4 零基础预备: 位置与动量算符

量子力学中“可观测量”由算符表示。最基本的是位置算符  $\hat{x}$  和动量算符  $\hat{p}$ 。它们的定义可以通过在位置表象中的作用来理解:

- $\psi(x)$  是位置表象波函数, 表示粒子在位置  $x$  的概率幅度。
- $\hbar$  是约化普朗克常数 ( $\hbar = h/2\pi$ ), 是量子力学的基本常数; 其中  $h$  是普朗克常数, 数值约为  $h \approx 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ ,  $\hbar \approx 1.055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 。
- $\partial/\partial x$  表示对  $x$  的偏导数,  $i$  为虚数单位 ( $i^2 = -1$ )。

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

也就是说,  $\hat{x}$  只是把函数乘以  $x$ , 而  $\hat{p}$  通过求导来作用在波函数上。在三维情形,  $\hat{\vec{p}} = -i\hbar \nabla$ 。

### 例题

连续基下的“矩阵元”表示: 在位置基  $\{|x\rangle\}$  下, 注意:  $\delta(x - x')$  是狄拉克  $\delta$  函数, 表示“当  $x = x'$  时取值无穷大、其余为 0, 但积分为 1”的理想化函数。写成  $x - x'$  的形式是为了强调“只有两者相等时才有贡献”, 并保证平移不变性。

$$\langle x|\hat{x}|x'\rangle = x\delta(x - x'), \quad \langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x').$$

这表示  $\hat{x}$  在位置表象中是“对角”的, 而  $\hat{p}$  通过导数作用。在动量基  $\{|p\rangle\}$  下则相反:

$$\langle p|\hat{p}|p'\rangle = p\delta(p - p'), \quad \langle p|\hat{x}|p'\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(p - p').$$

### 例题

**离散化直观 (示意):** 若只取三个位置点  $x_1, x_2, x_3$  作基, 位置算符在该基下近似为对角矩阵

$$\hat{x} \approx \begin{pmatrix} x_1 & 0 & 0 \\ 0 & x_2 & 0 \\ 0 & 0 & x_3 \end{pmatrix}.$$

这说明“在位置基下,  $\hat{x}$  只给出对应位置的数值”。动量算符在离散基下可用有限差分近似, 其矩阵不再对角 (体现“含导数”)。

**本征态与本征值:** 若

$$\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle,$$

则称  $|\psi\rangle$  为算符  $\hat{A}$  的本征态,  $a$  为本征值。例如

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$$

表示  $|x\rangle$  是“位置确定为  $x$ ”的理想态。

**期望值:** 态  $|\psi\rangle$  中位置与动量的平均值为

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

**基本对易关系:**

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar,$$

这表示位置与动量不能同时被无限精确地确定, 是不确定关系的根源。

## 5 零基础预备: 微积分与向量微分

本讲义会频繁出现导数、积分与向量微分算符。下面给出最少但够用的定义与直觉, 方便没有基础的读者直接进入量子力学计算。

### 5.1 函数、导数与偏导

一元函数  $f(x)$  的导数表示变化率:

$$\frac{df}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}.$$

二阶导数  $d^2f/dx^2$  描述“弯曲程度”。

多元函数  $f(x, y, z)$  的偏导定义为

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x, y, z) - f(x, y, z)}{\Delta x},$$

其余变量保持不变。二阶偏导  $\partial^2 f / \partial x^2$  在量子力学里经常出现。

### 例题

**一阶导数数值:** 设  $f(x) = x^2 - 3x + 1$ , 求  $f'(x)$  及  $f'(2)$ 。

**解:**  $f'(x) = 2x - 3$ , 因此  $f'(2) = 1$ 。

### 例题

**偏导数数值：**设  $f(x, y) = x^2y + y^2$ ，求  $\partial f / \partial x$ ，并计算  $\partial f / \partial x|_{(1,2)}$ 。

**解：** $\partial f / \partial x = 2xy$ ，代入  $(1, 2)$  得 4。

## 5.2 乘积法则与复共轭求导

若  $u(t), v(t)$  可导，则

$$\frac{d}{dt}[u(t)v(t)] = \frac{du}{dt}v + u\frac{dv}{dt}.$$

对复函数  $\psi(t)$ ，共轭与求导可交换：

$$\frac{d}{dt}\psi^* = \left(\frac{d\psi}{dt}\right)^*.$$

因此

$$\frac{d}{dt}|\psi|^2 = \frac{d}{dt}(\psi^*\psi) = \psi^*\frac{d\psi}{dt} + \frac{d\psi^*}{dt}\psi.$$

## 5.3 向量、点积与叉积

三维向量写作  $\vec{a} = (a_x, a_y, a_z)$ ，模长  $|\vec{a}| = \sqrt{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2}$ 。点积定义为

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z = |\vec{a}||\vec{b}| \cos \theta,$$

用于衡量方向相似程度。叉积

$$\vec{a} \times \vec{b} = \begin{pmatrix} a_y b_z - a_z b_y \\ a_z b_x - a_x b_z \\ a_x b_y - a_y b_x \end{pmatrix}$$

给出垂直于两向量平面的向量，大小为  $|\vec{a}||\vec{b}| \sin \theta$ ，角动量定义正是基于叉积。方向由右手定则给出：右手四指从  $\vec{a}$  指向  $\vec{b}$  弯曲，拇指方向就是  $\vec{a} \times \vec{b}$ 。公式可理解为对基向量的规则  $\vec{e}_x \times \vec{e}_y = \vec{e}_z$  等做线性展开，也可用行列式记忆

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

更详细的计算过程如下。令

$$\vec{a} = a_x \vec{e}_x + a_y \vec{e}_y + a_z \vec{e}_z, \quad \vec{b} = b_x \vec{e}_x + b_y \vec{e}_y + b_z \vec{e}_z.$$

利用双线性与基向量叉乘规则 ( $\vec{e}_x \times \vec{e}_x = 0$ ,  $\vec{e}_x \times \vec{e}_y = \vec{e}_z$ ,  $\vec{e}_x \times \vec{e}_z = -\vec{e}_y$  等)，

$$\begin{aligned} \vec{a} \times \vec{b} &= (a_x \vec{e}_x + a_y \vec{e}_y + a_z \vec{e}_z) \times (b_x \vec{e}_x + b_y \vec{e}_y + b_z \vec{e}_z) \\ &= a_x \vec{e}_x \times (b_y \vec{e}_y + b_z \vec{e}_z) + a_y \vec{e}_y \times (b_x \vec{e}_x + b_z \vec{e}_z) + a_z \vec{e}_z \times (b_x \vec{e}_x + b_y \vec{e}_y) \\ &= a_x (b_y \vec{e}_z - b_z \vec{e}_y) + a_y (-b_x \vec{e}_z + b_z \vec{e}_x) + a_z (b_x \vec{e}_y - b_y \vec{e}_x) \\ &= (a_y b_z - a_z b_y) \vec{e}_x + (a_z b_x - a_x b_z) \vec{e}_y + (a_x b_y - a_y b_x) \vec{e}_z, \end{aligned}$$

从而得到前面的分量公式。

## 5.4 标量场与向量场

场 (field) 是“空间中每个点都对应一个量”的函数。

- 若每个点对应一个数, 称为**标量场**。
- 若每个点对应一个向量, 称为**向量场**。

典型标量场如温度分布  $T(\vec{r})$ 、势能  $V(\vec{r})$ 、概率密度  $\rho(\vec{r})$ 。典型向量场如速度场  $\vec{v}(\vec{r})$ 、电场  $\vec{E}(\vec{r})$ 、概率流  $\vec{j}(\vec{r})$ 。

在量子力学中, 波函数  $\psi(\vec{r}, t)$  是复**标量场**, 其模平方给出标量场  $\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$ , 而概率流  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  是向量场。

举一个具体数值例子: 令二维位置  $\vec{r} = (x, y)$ 。标量场  $T(x, y) = x^2 + y^2$  在点  $(1, 2)$  处取值为  $T(1, 2) = 1^2 + 2^2 = 5$ 。向量场  $\vec{v}(x, y) = (y, -x)$  在同一点取值为  $\vec{v}(1, 2) = (2, -1)$ , 是一个带方向的量。

## 5.5 梯度、散度、旋度与拉普拉斯算符

定义向量微分算符 (nabla)

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

对标量场  $f(\vec{r})$ , 梯度为

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

方向指向函数增长最快的方向。

对向量场  $\vec{A} = (A_x, A_y, A_z)$ , 散度为

$$\nabla \cdot \vec{A} = \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z},$$

衡量“源/汇”强度; 旋度为其中  $\partial_x A_z$  表示对  $x$  的偏导:  $\partial_x A_z = \frac{\partial A_z}{\partial x}$ , 其余分量同理。

$$\nabla \times \vec{A} = \begin{pmatrix} \partial_y A_z - \partial_z A_y \\ \partial_z A_x - \partial_x A_z \\ \partial_x A_y - \partial_y A_x \end{pmatrix},$$

衡量“旋转”强度。拉普拉斯算符定义为

$$\nabla^2 f = \nabla \cdot (\nabla f) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}.$$

一维情形下  $\nabla^2 f = d^2 f / dx^2$ 。

### 例题

**梯度数值:** 设  $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$ , 求  $\nabla f$ , 并计算在  $(1, -1, 2)$  处的梯度。

**解:**  $\nabla f = (2x, 2y, 2z)$ , 代入得  $\nabla f(1, -1, 2) = (2, -2, 4)$ 。

### 例题

**散度数值:** 设  $\vec{A}(x, y, z) = (xy, y^2, z)$ , 求  $\nabla \cdot \vec{A}$ , 并计算在  $(1, 2, 3)$  处的散度。

**解:**  $\nabla \cdot \vec{A} = y + 2y + 1 = 3y + 1$ , 代入  $(1, 2, 3)$  得 7。



### 例题

**拉普拉斯数值：**设  $f(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$ ，求  $\nabla^2 f$ 。

**解：** $\nabla^2 f = 2 + 2 + 2 = 6$ 。

## 5.6 积分与归一化

定积分  $\int_a^b f(x) dx$  表示在区间上的“累积量”。

在概率论中，概率密度  $\rho(x)$  的含义是“单位长度上的概率”，因此必须非负，并满足归一化

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1.$$

在量子力学里，概率密度由波函数给出：一维情形

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2,$$

三维情形写作

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d^3r = 1, \quad d^3r = dx dy dz.$$

后续在球坐标中会用到  $d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$  的体积元。

### 例题

**归一化与概率：**设

$$\rho(x) = C(1 - x^2), \quad -1 \leq x \leq 1,$$

其余处为 0。求常数  $C$ ，并计算  $x \in [0, 1/2]$  的概率。

**解：**归一化给出  $1 = \int_{-1}^1 C(1 - x^2) dx = C \left[ x - \frac{x^3}{3} \right]_{-1}^1 = C \cdot \frac{4}{3}$ ，故  $C = 3/4$ 。所求概

率为  $\int_0^{1/2} \frac{3}{4}(1 - x^2) dx = \frac{3}{4} \left[ x - \frac{x^3}{3} \right]_0^{1/2} = \frac{11}{32}$ 。

## 5.7 复数与相位（最少够用）

复数写作  $z = a + ib$ ，其中  $i^2 = -1$ ，共轭为  $z^* = a - ib$ ，模长  $|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$ 。欧拉公式

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$$

说明复指数只改变相位，不改变模长 ( $|e^{i\theta}| = 1$ )。波函数是复函数，概率密度由  $|\psi|^2 = \psi^* \psi$  给出。

## 6 快速预备知识回顾（从量子信息到量子力学）

你已掌握：Dirac 符号、完备关系、Hermite 算符、期望与方差、么正变换等。下面只强调连续谱的关键补充。

### 6.1 连续谱与狄拉克 $\delta$

- 位置算符  $\hat{x}$  的本征态： $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$  ( $x$  为本征值/标签)。
- 完备性： $\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| dx = \mathbb{I}$ 。

• 正交性:  $\langle x'|x\rangle = \delta(x-x')$  ( $\delta$  的性质见前置小节)。  
连续谱的本征态是广义函数意义下的态,  $\delta(x-x')$  必须在积分中理解。完备性也可写作

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x|\psi\rangle dx.$$

又如, 换元型  $\delta$  给出  $\int f(x)\delta(2x-1)dx$  的结果: 零点为  $x_0 = \frac{1}{2}$ , 且  $g'(x) = 2$ 。因此

$$\delta(2x-1) = \frac{1}{2}\delta\left(x - \frac{1}{2}\right), \quad \int f(x)\delta(2x-1)dx = \frac{1}{2}f\left(\frac{1}{2}\right).$$

同理,  $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x')\delta(x-x')dx'$ 。由  $\delta$  的抽取性质, 积分结果等于被积函数在  $x' = x$  处的取值, 因此  $\psi(x)$  被“原样取出”。这就是完备性在坐标表象中的具体体现。

## 6.2 期望值与方差

$$\langle A \rangle = \langle \psi|A|\psi \rangle, \quad (\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$$

期望值就是“做很多次实验后的平均读数”。方差衡量分布的“宽度”,  $\Delta A$  越大说明测量结果越分散。在坐标表象中, 若算符  $A$  在位置表象中的作用为  $A(x, -i\hbar\partial_x)$ , 则

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) A(x, -i\hbar\partial_x) \psi(x) dx$$

同理可得  $\langle A^2 \rangle$ 。这一步常用于“把 Dirac 记号翻成积分”。

## 6.3 表象变换 (离散形式回顾)

若两组完备正交基  $\{|a_i\rangle\}$  与  $\{|b_j\rangle\}$ , 则变换矩阵  $S_{ij} = \langle a_i|b_j\rangle$ :

$$A_B = S^\dagger A_A S, \quad |\psi\rangle_B = S^\dagger |\psi\rangle_A$$

同一个物理态在不同“坐标系”(基)下有不同的分量表达。矩阵  $S$  就是把“旧坐标”旋转到“新坐标”的变换。算符在不同表象下的矩阵也会相应改变, 但物理可观测量不变。

# 7 数学工具箱 (必须熟练)

## 7.1 高斯积分与常用积分

- $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a > 0)$
- $\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (a > 0)$
- $\int_0^{\infty} r^2 e^{-\alpha r} dr = \frac{2}{\alpha^3}, \quad \int_0^{\infty} r^3 e^{-\alpha r} dr = \frac{6}{\alpha^4}$

### 例题

高斯积分与归一化的完整推导: 设

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \quad (a > 0).$$

这里是**定义**  $I$ , 不是推导等式。则

$$I^2 = \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx \right) \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ay^2} dy \right) = \iint_{\mathbb{R}^2} e^{-a(x^2+y^2)} dx dy.$$

改用极坐标  $x = r \cos \theta$ ,  $y = r \sin \theta$ , 且

$$dx dy = \left| \frac{\partial(x, y)}{\partial(r, \theta)} \right| dr d\theta = \begin{vmatrix} \cos \theta & -r \sin \theta \\ \sin \theta & r \cos \theta \end{vmatrix} dr d\theta = r dr d\theta,$$

其中

$$\frac{\partial(x, y)}{\partial(r, \theta)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} \end{pmatrix}$$

称为**雅可比矩阵**, 它把  $(r, \theta)$  的微小变化映射到  $(x, y)$  的微小变化。其行列式

$$\left| \frac{\partial(x, y)}{\partial(r, \theta)} \right| = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} \end{pmatrix}$$

称为**雅可比行列式**, 给出面积元的缩放因子。因此  $(r, \theta)$  的小矩形  $dr d\theta$  在  $(x, y)$  平面中变为面积  $\left| \frac{\partial(x, y)}{\partial(r, \theta)} \right| dr d\theta$  的平行四边形。因此得

$$I^2 = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-ar^2} r dr d\theta = \left( \int_0^{2\pi} d\theta \right) \left( \int_0^{\infty} r e^{-ar^2} dr \right).$$

令  $u = ar^2$ , 则  $du = 2ar dr$ , 因此

$$\int_0^{\infty} r e^{-ar^2} dr = \frac{1}{2a} \int_0^{\infty} e^{-u} du = \frac{1}{2a}.$$

所以

$$I^2 = 2\pi \cdot \frac{1}{2a} = \frac{\pi}{a}, \quad \Rightarrow \quad I = \sqrt{\frac{\pi}{a}}.$$

于是对于

$$\psi(x, t) = A e^{-\frac{1}{2}ax^2 - i\omega t},$$

归一化条件给出

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = A^2 \sqrt{\frac{\pi}{a}},$$

从而

$$A = \left( \frac{a}{\pi} \right)^{1/4}.$$

## 例题

**指数积分的一般推导:** 设

$$I_n(a) = \int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx, \quad a > 0.$$

对  $x$  做变量替换  $u = ax$ , 则  $x = u/a$ ,  $dx = du/a$ :

$$I_n(a) = \int_0^\infty \left(\frac{u}{a}\right)^n e^{-u} \frac{du}{a} = \frac{1}{a^{n+1}} \int_0^\infty u^n e^{-u} du.$$

记

$$\Gamma(n+1) = \int_0^\infty u^n e^{-u} du.$$

对整数  $n$ , 做分部积分。取  $u_1 = u^n$ ,  $dv_1 = e^{-u} du$ , 则  $du_1 = nu^{n-1} du$ , 且

$$v_1 = \int e^{-u} du = -e^{-u}.$$

因为  $\frac{d}{du}(e^{-u}) = -e^{-u}$ , 所以原函数是  $-e^{-u}$  (常数略去)。因此

$$\Gamma(n+1) = [-u^n e^{-u}]_0^\infty + n \int_0^\infty u^{n-1} e^{-u} du.$$

边界项为 0 ( $u^n e^{-u} \rightarrow 0$ ), 于是得到递推

$$\Gamma(n+1) = n \Gamma(n).$$

又有

$$\Gamma(1) = \int_0^\infty e^{-u} du = 1,$$

所以

$$\Gamma(n+1) = n(n-1) \cdots 1 = n!.$$

因此

$$I_n(a) = \frac{n!}{a^{n+1}}.$$

## 例题

**常用径向积分:** 由上式取  $n = 2, 3$  并记  $a = \alpha$ , 得

$$\int_0^\infty r^2 e^{-\alpha r} dr = \frac{2}{\alpha^3}, \quad \int_0^\infty r^3 e^{-\alpha r} dr = \frac{6}{\alpha^4}.$$

若要直接分部积分, 可令  $u = r^n$ ,  $dv = e^{-\alpha r} dr$ , 反复应用即可得到同样结果。

## 7.2 分部积分与边界条件

量子力学中常用:

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

典型边界条件:  $\psi(\pm\infty) = 0$  或在势阱壁处  $\psi = 0$ 。分部积分常用于把导数从一个函数“移”到另一个函数上。边界项为零的前提是波函数在无穷远或势垒处足够快地衰减/消失, 这正是“可归一化”的物理要求。因此类似

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{\partial}{\partial x} F(x) dx = F(\infty) - F(-\infty) = 0$$

的结果来自边界条件 ( $F$  在无穷远消失或取相同值), 常用于证明概率守恒。

## 7.3 傅里叶变换

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-ipx/\hbar} \psi(x) dx$$

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{ipx/\hbar} \phi(p) dp$$

Parseval 定理:  $\int |\psi|^2 dx = \int |\phi|^2 dp$ 。位置表象与动量表象互为傅里叶变换。空间里“越窄”的波包, 对应动量空间“越宽”的分布, 这正是测不准关系的数学根源。指数中的  $px/\hbar$  必须无量纲; 因此  $\hbar$  保证单位一致。系数  $1/\sqrt{2\pi\hbar}$  的选择保证傅里叶变换是么正的, 从而概率守恒 (Parseval 定理)。例如, 对高斯波包  $\psi(x) = \left(\frac{1}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/(2a^2)}$ , 则  $\phi(p)$  仍是高斯, 宽度与  $a$  成反比, 并满足  $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ 。

## 7.4 球坐标

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta$$

$$d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$

$r \geq 0$ ,  $\theta \in [0, \pi]$  (从  $+z$  轴往下量),  $\varphi \in [0, 2\pi)$  (在  $x-y$  平面内的方位角)。体积元中的  $r^2 \sin \theta$  是坐标变换的雅可比因子。

## 7.5 球坐标下拉普拉斯算符

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

若函数只依赖  $r$  (球对称), 角度导数项为零, 于是  $\nabla^2 f(r) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{df}{dr} \right)$ , 这在氢原子基态计算中非常常见。

# 8 连续表象与波函数

## 8.1 位置表象

定义:  $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$

归一化:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

$|\psi(x, t)|^2 dx$  是粒子在  $x$  到  $x + dx$  内被测到的概率。如果把波函数看成“热度图”, 归一化就是“总概率为 1”。

### 例题

**位置表象概率:** 当  $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)$  ( $0 < x < a$ ) 时, 粒子落在区间  $(0, a/2)$  的概率为

$$P = \int_0^{a/2} \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx = \frac{1}{2}.$$

这也体现了基态在势阱两侧对称分布。

## 8.2 动量表象

动量本征态满足  $\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ ，并取连续谱归一化

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$$

由平移对称性可得位置表象中的动量本征函数：

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

$|p\rangle$  是“动量确定”的态，在位置表象中是平面波。平面波在全空间均匀分布，因此不能被归一化，它是理想化的“纯动量”极限。动量表象波函数  $\phi(p, t) = \langle p|\psi(t)\rangle$  满足归一化  $\int_{-\infty}^{\infty} |\phi(p, t)|^2 dp = 1$ ，与位置表象的归一化完全等价（由 Parseval 定理保证）。

### 例题

**动量表象概率：**若  $\phi(p)$  在区间  $(p_0 - \Delta, p_0 + \Delta)$  内近似为常数，则测得动量位于该区间的概率约为

$$\int_{p_0 - \Delta}^{p_0 + \Delta} |\phi(p)|^2 dp \approx 2\Delta |\phi(p_0)|^2.$$

这体现了“概率密度  $\times$  区间长度”的含义。

## 8.3 算符在位置/动量表象中的表示

- 位置表象： $\hat{x} \rightarrow x$ ,  $\hat{p} \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
- 动量表象： $\hat{p} \rightarrow p$ ,  $\hat{x} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$

动量是“平移的生成元”。当波函数整体向右平移一点点时，变化率正比于空间导数，因此  $\hat{p}$  在位置表象中变成微分算符。这也是  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$  的根源。用表象表示计算对易子：在位置表象中  $[\hat{x}, \hat{p}]\psi = x(-i\hbar \partial_x \psi) - (-i\hbar \partial_x)(x\psi) = i\hbar \psi$ ，因此  $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ 。

## 9 薛定谔方程与概率守恒

### 9.1 含时薛定谔方程

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

位置表象：

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

薛定谔方程告诉我们“量子态如何随时间演化”。哈密顿量  $H$  就是**总能量算符**（动能 + 势能）。对时间无关势能，能量本征态只会积累相位。 $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$  是动能算符，来源于经典关系  $p^2/2m$  与量子替换  $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ 。 $V(\vec{r}, t)$  表示外加势能，若  $V$  与时间无关，可采用分离变量求定态。

### 9.2 连续性方程与概率流

定义概率密度  $\rho = |\psi|^2$ ，概率流密度定义为

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

并满足连续性方程（概率守恒）

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

这是“概率守恒”的数学表达：概率不会凭空产生或消失，只能在空间中流动。 $\vec{j}$  就是“概率流密度”。 $\vec{j}$  的单位为“概率/时间/面积”， $\nabla \cdot \vec{j}$  描述流出某点附近体积的“净流量”。一维情形下，方程变为  $\partial_t \rho + \partial_x j = 0$ 。一维平面波  $\psi = Ae^{ikx-i\omega t}$  的概率流为  $j = \frac{\hbar k}{m}|A|^2$ ，为常数。这表示粒子以恒定平均速度向右传播。

### 9.3 例：球面波概率流

若  $\psi = \frac{1}{r}e^{ikr}$ ，则

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

径向流随  $r^{-2}$  衰减，与球面积  $4\pi r^2$  相乘给出恒定总流量。计算要点： $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ ，因此

$$\nabla r = \left(\frac{x}{r}, \frac{y}{r}, \frac{z}{r}\right) = \hat{r}.$$

对  $\psi = \frac{1}{r}e^{ikr}$  有

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

同理

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

代入

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

即可得到  $\vec{j} = \frac{\hbar k}{mr^2} \hat{r}$ 。

## 10 定态理论与能量展开

### 10.1 分离变量

若  $V$  与时间无关：

$$\psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$$

代入薛定谔方程得定态方程：

$$Hu = Eu$$

定态的“时间演化”只是一个整体相位。因此  $|\psi|^2$  与所有与时间无关算符的期望值都不随时间变化。

### 10.2 能量本征态展开

本征态完备： $\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{I}$ ,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$$

期望值：

$$\langle H \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n$$

这是作业中“能量期望等于系数模平方加权”的核心来源。系数由投影得到  $c_n = \langle n | \psi(0) \rangle$ 。若能量谱连续，则求和换成积分  $\int c(E) e^{-iEt/\hbar} |E\rangle dE$ 。若初态  $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$ ，则测量能量得到  $E_1$  或  $E_2$  的概率各为  $1/2$ 。随时间演化： $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-iE_1t/\hbar}|1\rangle + e^{-iE_2t/\hbar}|2\rangle)$ ，概率分布保持不变，但相位差会影响可观测量的干涉项。

## 11 一维无限深势阱

### 11.1 定态解

势能： $V(x) = 0$  ( $0 \leq x \leq a$ )，其他位置  $V = \infty$ 。定态方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} = Eu$$

边界条件  $u(0) = u(a) = 0$ ，得

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

无限深势阱把粒子“关”在  $[0, a]$ 。边界处波函数必须为零，像一根固定两端的琴弦，因此能量离散、波形为正弦。 $n = 1, 2, 3, \dots$  为正整数 ( $n = 0$  会使波函数为零)。归一化系数  $\sqrt{2/a}$  来自  $\int_0^a |u_n|^2 dx = 1$ 。能级间隔随  $1/a^2$  变化，阱越窄能级越稀疏（更“高能”）。

### 11.2 任意初态展开

给定  $\psi(x, 0)$ ，展开为

$$\psi(x, 0) = \sum_n c_n u_n(x), \quad c_n = \int_0^a u_n(x) \psi(x, 0) dx$$

时间演化：

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

**提示：**若初态关于  $x = \frac{a}{2}$  对称或反对称，可快速判断奇偶  $n$  的系数为零。若初态满足  $\psi(a/2+x) = \psi(a/2-x)$  (对称)，则只有**奇数**  $n$  的系数非零；若满足  $\psi(a/2+x) = -\psi(a/2-x)$  (反对称)，则只有**偶数**  $n$  非零。这能极大简化系数计算。

## 12 球坐标与氢原子基态

### 12.1 基态波函数

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

球对称的基态只依赖  $r$ ，没有角度信息。真正的“半径分布”不是  $|\psi|^2$ ，而是  $P(r) = 4\pi r^2 |\psi(r)|^2$ ，因为球壳体积随  $r^2$  增大。例如，氢原子基态的最可几半径由最大化  $P(r) = 4\pi r^2 |\psi|^2 \propto r^2 e^{-2r/a_0}$  得出，令  $\frac{d}{dr}(r^2 e^{-2r/a_0}) = 0$  可得  $r = a_0$ 。



## 12.2 期望值计算要点

1.  $\langle r \rangle = \int r |\psi|^2 dV$ , 使用体积元  $dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$ 。
2.  $\langle V \rangle = \left\langle -\frac{e^2}{r} \right\rangle$ , 利用  $r$  积分公式。
3.  $\langle T \rangle = \left\langle -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right\rangle$ , 球对称时  $\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\psi}{dr} \right)$ 。

最终结果:

$$\langle r \rangle = \frac{3a_0}{2}, \quad \langle V \rangle = -\frac{e^2}{a_0}, \quad \langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$$

总能量  $E = -\frac{e^2}{2a_0} = -13.6 \text{ eV}$ 。

## 13 角动量算符与对易关系

### 13.1 定义与分量

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

位置表象中:

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

角动量描述“绕原点旋转”的量。它的分量不能同时精确测量, 但  $L^2$  可以与任意一个分量同时测量。在中心势中, 能量本征态同时是  $L^2, L_z$  的本征态。

### 13.2 对易关系

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

循环置换得到其余两条。结论: 不同分量不能同时测准, 但  $L^2$  与任一分量对易。对易子  $[A, B] = AB - BA$ 。若对易子为零, 表示两可观测量可同时精确测量 (共享本征态)。若  $|l, m\rangle$  是角动量本征态, 则  $L^2|l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l, m\rangle$ ,  $L_z|l, m\rangle = \hbar m|l, m\rangle$ 。因此测量  $L_z$  的可能结果是离散的整数 (或半整数) 倍  $\hbar$ 。

## 14 Ehrenfest 定理 (量子-经典对应)

### 14.1 一般形式

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

Ehrenfest 定理把量子平均值的演化和经典方程联系起来。当波包足够窄、势能变化缓慢时,  $\langle x \rangle$  和  $\langle p \rangle$  几乎满足经典牛顿方程。

### 14.2 对动量的应用

令  $A = \hat{p}$ ,  $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$ , 可得

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

这是量子版本的牛顿第二定律。自由粒子  $V = 0$  时,  $\frac{d\langle p \rangle}{dt} = 0$ , 因此  $\langle p \rangle$  为常数,  $\langle x \rangle$  随时间线性变化。

## 15 不确定关系

### 15.1 一般不确定关系 (Robertson)

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

测不准不是“测量仪器不够好”，而是波函数的**内在涨落**。当两个算符不对易时，不可能同时让它们的分布都很窄。

### 15.2 位置-动量

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

高斯波包满足等号。若  $\psi(x) \propto e^{-x^2/(4\sigma^2)}$ ，则  $\Delta x = \sigma$ ， $\Delta p = \hbar/(2\sigma)$ ，因此  $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ ，达到最小不确定。

#### 例题

**高斯波包数值：**取  $\sigma = 0.5$ ，则  $\Delta x = 0.5$ ， $\Delta p = \hbar/(2\sigma) = \hbar$ ，因此  $\Delta x \Delta p = 0.5 \hbar = \hbar/2$ 。

### 15.3 时间-频率

对归一化信号  $f(t)$  及其傅里叶变换  $F(\omega)$ ：

$$\Delta t \Delta \omega \geq \frac{1}{2}$$

方法：用 Parseval 定理与 Cauchy-Schwarz 不等式，配合分部积分。 $\omega$  是角频率（单位 rad/s）， $\Delta t$  与  $\Delta \omega$  描述信号在时间与频率上的“扩展宽度”。这与量子中的  $\Delta x \Delta p$  属于同一数学结构。

## 16 双缝干涉与相干性

### 16.1 概率幅叠加

若通过缝 1、缝 2 到达屏幕点  $x$  的概率幅为  $\alpha_1, \alpha_2$ ，则

$$P(x) = |\alpha_1 + \alpha_2|^2 = P_1 + P_2 + 2\sqrt{P_1 P_2} \cos(\varphi_1 - \varphi_2)$$

干涉条纹来自相位差。概率**不是**直接相加，而是**概率幅**相加后再取模平方。这就是为什么会出现“亮条纹更亮、暗条纹变暗”的干涉现象。若两缝强度相同， $P_1 = P_2$ ，则当  $\Delta\varphi = 2\pi m$  时出现亮纹（最大值），当  $\Delta\varphi = (2m+1)\pi$  时出现暗纹（最小值）。

### 16.2 Which-way 信息的影响

当路径信息与探测器纠缠，概率幅变为  $\alpha_i \beta_j$ ，若能完全区分路径（如  $\beta_2 \rightarrow 0$ ），干涉项消失。一旦“知道走哪条缝”，两条路径就不再相干，干涉项被探测器“记录”掉。可见性与可区分性此消彼长。

## 17 表象理论与矩阵元

### 17.1 表象变换通式

$$S_{ij} = \langle a_i | b_j \rangle, \quad A_B = S^\dagger A_A S, \quad |\psi\rangle_B = S^\dagger |\psi\rangle_A$$

若  $F$  在  $Q$  表象为  $F_Q$ ，对角化  $F_Q = U \Lambda U^\dagger$ ，则在  $F$  表象下  $|\psi\rangle_F = U^\dagger |\psi\rangle_Q$ ，其分量模平方即测得本征值的概率。把算符“对角化”就是找到它的本征表象。在该表象中，测量结果直接对应向量分量，概率就是分量模平方（Born 规则）。

### 17.2 一维势阱中的矩阵元（坐标与动量）

能量本征态  $u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}$ 。

- $x_{nn} = \frac{a}{2}$ 。
- $x_{mn} = \frac{4mna}{\pi^2(m^2-n^2)^2} [(-1)^{m-n} - 1]$  ( $m-n$  奇数时非零)。
- $p_{nn} = 0$ ,  $p_{mn} = \frac{2imn\hbar}{a(m^2-n^2)} [(-1)^{m-n} - 1]$ 。

由  $x_{mn}$  的表达式可见：当  $m-n$  为偶数时， $x_{mn} = 0$ 。这体现了势阱中“奇偶选择定则”，可快速判断哪些跃迁矩阵元为零。矩阵元  $A_{mn} = \langle m | A | n \rangle$  反映“从  $|n\rangle$  到  $|m\rangle$  的跃迁强度”。对角元  $A_{nn}$  是在能量本征态中的期望值。

### 17.3 动量表象中的角动量算符

利用  $\vec{r} \leftrightarrow i\hbar \nabla_p$ ：

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

在动量表象中，位置算符变成对动量的微分，因此角动量依然表现为“绕动量空间的旋转生成元”。

## 18 线性代数速记：对角化与本征表象

### 18.1 一般步骤

给定矩阵  $A$ ：

1. 解特征方程  $\det(A - \lambda I) = 0$  得特征值。
2. 对每个  $\lambda$  求特征向量并正交归一，组成酉矩阵  $U$ 。
3.  $A_{\text{diag}} = U^\dagger A U$ 。

对角化就是“找到让算符看起来最简单的坐标系”。在本征基下，算符只剩下对角元，测量结果一目了然。 $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$  的本征值为  $\pm 1$ ，本征向量为  $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, \pm 1)^T$ 。这对应把  $A$  变成对角矩阵  $\text{diag}(1, -1)$ 。

### 18.2 本征表象中的概率

若  $|\psi\rangle$  在原表象为列向量  $\psi$ ，则

$$\psi_{\text{eig}} = U^\dagger \psi$$

其分量模平方即测得对应本征值的概率。 $U$  是由本征向量组成的酉矩阵，满足  $U^\dagger U = I$ 。向量分量的模平方之和为 1，体现归一化。

## 19 相干态与投影算符

相干态定义：

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

投影期望：

$$\langle\alpha|k\rangle\langle k|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2k}}{k!}$$

即 Poisson 分布，平均光子数为  $|\alpha|^2$ 。相干态是“最像经典光场”的量子态，既是简谐振子湮灭算符的本征态，也是最小不确定态。当  $|\alpha|^2 = 4$  时，光子数的平均值为 4，方差也为 4 (Poisson 分布的性质)。

## 20 Dirac 符号翻译清单

- $F(x, i\hbar\partial_x)\psi(x) = \Phi(x) \Leftrightarrow F|\psi\rangle = |\Phi\rangle$
- $i\hbar\partial_t\psi = H(x, -i\hbar\partial_x)\psi \Leftrightarrow i\hbar\partial_t|\psi\rangle = H|\psi\rangle$
- $H|n\rangle = E_n|n\rangle$
- $\int u_m^*(x)u_n(x)dx = \delta_{mn} \Leftrightarrow \langle m|n\rangle = \delta_{mn}$
- $\psi(x, t) = \sum_n a_n(t)u_n(x) \Leftrightarrow |\psi\rangle = \sum_n a_n|n\rangle$

把 Dirac 记号翻译成微分方程或积分表达，只是“同一个物理内容的两种语言”。熟练互译能大幅降低做题成本。 $F(x, i\hbar\partial_x)$  表示把算符写成“坐标 + 导数”的形式； $u_n(x) = \langle x|n\rangle$  是能量本征态在位置表象的波函数。离散谱满足  $\delta_{mn}$ ，连续谱对应  $\delta(x - x')$ 。

## 21 作业题对应索引（建议路线）

作业题	对应章节
1	数学工具箱：高斯积分
2-3	薛定谔方程与概率守恒
4	球坐标与氢原子基态
5	角动量算符与对易关系
6	Ehrenfest 定理
7-8	不确定关系
9	双缝干涉与相干性
10	定态理论与能量展开
11	一维无限深势阱
12-13	表象理论与矩阵元
14-15	线性代数速记：对角化与表象变换
16	相干态与投影算符
17-18	Dirac 符号翻译 + 表象变换

## 22 总结

本讲义把量子信息中的抽象公理具体化为连续变量的计算框架，涵盖波函数、薛定谔方程、角动量、定态理论、表象变换与测不准等内容。按照“作业题对应索引”逐章学习与练习，即可独立完成《量子力学作业》中所有题目。