

量子力学导论

基于量子信息知识的深入学习

Contents

1 前言与学习目标	3
2 零基础预备：狄拉克 δ 函数	3
3 零基础预备：波函数与概率幅	4
4 零基础预备：位置与动量算符	5
5 零基础预备：微积分与向量微分	6
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
6 快速预备知识回顾（从量子信息到量子力学）	9
6.1 连续谱与狄拉克 δ	9
6.2 期望值与方差	10
6.3 表象变换（离散形式回顾）	10
7 数学工具箱（必须熟练）	10
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
8 连续表象与波函数	13
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
9 薛定谔方程与概率守恒	14
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

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

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。
- ∇ 为梯度算符， ∇^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， θ 为极角， φ 为方位角。除非特别说明， ψ 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 δ 函数

狄拉克 δ 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 $\int \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}') d^3 r = 1$ 。

例题

δ 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，严格意义上不可归一化，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 δ 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 $d^2 f / dx^2$ 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 ∇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

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

后续在球坐标中会用到 $d^3 r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$ 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、幺正变换等。下面只强调连续谱的关键补充。

6.1 连续谱与狄拉克 δ

- 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: $\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| dx = \mathbb{I}_0$ 。

- 正交性: $\langle x'|x \rangle = \delta(x - x')$ (δ 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 δ 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 δ 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”, ΔA 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

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

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, θ) 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, θ) 的小矩形 $dr d\theta$ 在 (x, y) 平面上变为面积 $\left| \frac{\partial(x, y)}{\partial(r, \theta)} \right| dr d\theta$ 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

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

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

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

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幺正的，从而概率守恒 (Parseval 定理)。例如，对高斯波包 $\psi(x) = (\frac{1}{\pi a^2})^{1/4} e^{-x^2/(2a^2)}$ ，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

$$\begin{aligned}x &= r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta \\ d^3r &= r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi\end{aligned}$$

$r \geq 0$, $\theta \in [0, \pi]$ (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 $\nabla^2 f(r) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{df}{dr})$ ，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 $\psi = A e^{ikx - i\omega t}$ 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： $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-iE_1 t/\hbar} |1\rangle + e^{-iE_2 t/\hbar} |2\rangle)$ ，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，氢原子基态的最可能半径由最大化 $P(r) = 4\pi r^2 |\psi|^2 \propto r^2 e^{-2r/a_0}$ 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 $\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} (r^2 \frac{d\psi}{dr})$ 。

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。 ω 是角频率（单位 rad/s）， Δt 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 α_1, α_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 λ 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 ± 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 ψ , 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 δ_{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。