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

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 $\vec{p}$。
- $\vec{r}$ 表示位置**矢量**，$r=|\vec{r}|$ 表示其**模长**；因而 $\psi(\vec{r})$ 与 $\psi(r,\theta,\varphi)$ 是同一波函数在不同坐标下的写法。
- 记号约定：$\psi(\vec{r})\equiv\psi(x,y,z)$，并且 $dV\equiv dx\,dy\,dz$ （在球坐标中 $dV=r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\varphi$）。

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/length。三维形式为

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

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

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

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

2.1 分布积分的使用规则（δ 函数）

分布积分的关键是：**它只在积分号下有意义**，必须与“测试函数”配对。在量子力学里，测试函数通常就是物理波函数或连续可微函数 $f(x)$。

1. 抽样（最核心）

$$\int f(x)\delta(x-x_0)\,dx = f(x_0).$$

2. 变量缩放

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x) \quad (a \neq 0),$$

因此

$$\int f(x)\delta(ax)\,dx = \frac{1}{|a|}f(0).$$

3. 一般换元（零点求和公式）若 $g(x)$ 在 x_i 处有简单零点（$g(x_i)=0$，$g'(x_i)\neq 0$），则

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

所以

$$\int f(x)\delta(g(x))\,dx = \sum_i \frac{f(x_i)}{|g'(x_i)|}.$$

4. 分部积分（δ'）

$$\int f(x)\delta'(x-x_0)\,dx = -f'(x_0).$$

直观理解：δ' 通过分部积分把导数“移”到测试函数上。

5. 三维情形

$$\int f(\vec{r})\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}_0)\,dV = f(\vec{r}_0),$$

其中 $dV = dx\,dy\,dz$ 或球坐标体积元。这与一维抽样性质完全一致。

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

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

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

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

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 $h \approx 6.626 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$，$\hbar \approx 1.055 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\cdot s}$。
- $\partial/\partial x$ 表示对 x 的偏导数，i 为虚数单位（$i^2 = -1$）。

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

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。

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

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：

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

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

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

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。

4.1 对易子的定义、性质与典型计算

定义： 对易子

$$[A,B] \equiv AB - BA.$$

基本性质（计算规则）：

- **反对称性：** $[A,B] = -[B,A]$。
- **线性：** $[A,B+C] = [A,B] + [A,C]$，$[A,\lambda B] = \lambda[A,B]$。
- **乘积法则：**

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

常用推论（更“好用”的运算规律）：

- **与常数：** $[A,c] = 0$，因此 $[A,B+c] = [A,B]$（c 为数）。
- **与幂：**

$$[A,B^n] = \sum_{k=0}^{n-1} B^k [A,B] B^{n-1-k}.$$

  特别地，若 $[A,B]$ 与 B 对易，则 $[A,B^n] = nB^{n-1}[A,B]$。
- **与函数：** 若 $[A,B]$ 与 B 对易，则

$$[A,f(B)] = [A,B]\, f'(B),$$

  可把 f 展开为幂级数理解；这是“导数法则”的算符版本。
- **Jacobi 恒等式：**

$$[A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C,[A,B]] = 0.$$

- **同一算符的函数可对易：** 若 f,g 仅为 A 的函数，则 $[f(A),g(A)] = 0$。

典型推导 1： $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ 在位置表象中 $\hat{x}\to x$，$\hat{p}\to -i\hbar\,\partial_x$。对任意波函数 $\psi(x)$：

$$[\hat{x},\hat{p}]\psi = x(-i\hbar\partial_x\psi) - \big(-i\hbar\partial_x(x\psi)\big) = -i\hbar x\psi' + i\hbar(\psi + x\psi') = i\hbar\psi.$$

由于对任意 ψ 都成立，因此

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

典型推导 2： $[\hat{x},\hat{p}^2]$ 用乘积法则：

$$[\hat{x},\hat{p}^2] = [\hat{x},\hat{p}]\hat{p} + \hat{p}[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar\hat{p} + i\hbar\hat{p} = 2i\hbar\,\hat{p}.$$

一般化提示： 若 $[x,p] = i\hbar$，则在合适条件下

$$[x,f(p)] = i\hbar\, f'(p),$$

可视为“导数法则”的算符版本。

物理含义： 若 $[A,B] = 0$，则 A,B 共享一组本征态，可同时精确测量；若 $[A,B] \neq 0$，则存在不确定关系，不能同时让两者分布都无限窄。

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：

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

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

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

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 $f(x, y) = x^2 y + y^2$，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

$$\vec{a}\times\vec{b}=\begin{pmatrix}a_yb_z-a_zb_y\\a_zb_x-a_xb_z\\a_xb_y-a_yb_x\end{pmatrix}$$

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），

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

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。

梯度的常用计算性质（尤其是复合函数）：

- **线性：** $\nabla(af+bg)=a\nabla f+b\nabla g$。
- **乘积：** $\nabla(fg)=f\nabla g+g\nabla f$。
- **链式：** 若 $f(\vec{r})=F(g(\vec{r}))$，则 $\nabla f=F'(g)\,\nabla g$。
- **径向函数：** 若 $r=|\vec{r}|=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$，则 $\nabla r=\hat{r}=\frac{\vec{r}}{r}=\left(\frac{x}{r},\frac{y}{r},\frac{z}{r}\right)$，因此对只依赖 r 的函数 $f(r)$ 有 $\nabla f=f'(r)\,\hat{r}$。

例如（k 为常数）：

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

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 $\nabla^2 f=d^2f/dx^2$。

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

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

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

例题

归一化与概率：设

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

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

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

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

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

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 $S_{ij} = \langle a_i|b_j\rangle$：

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

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

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

7.2 常用积分速记（考试用）

高斯与矩：

- $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\,dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a>0)$
- $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} x\,e^{-ax^2}\,dx = 0$
- $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2}\,dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}a^{-3/2}$
- 若 $|\psi(x)|^2 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}e^{-\alpha x^2}$（已归一化），则

$$\int|\psi|^2dx = 1, \quad \int x|\psi|^2dx = 0, \quad \int x^2|\psi|^2dx = \frac{1}{2\alpha}.$$

- 若 $|\psi(x)|^2 = e^{-\pi x^2}$（归一化高斯），则

$$\int e^{-\pi x^2}dx = 1, \quad \int xe^{-\pi x^2}dx = 0, \quad \int x^2e^{-\pi x^2}dx = \frac{1}{2\pi}.$$

指数与径向：

- $\displaystyle\int_0^\infty x^n e^{-ax}\,dx = \frac{n!}{a^{n+1}} \quad (a>0)$
- $\displaystyle\int_0^\infty r^2 e^{-\alpha r} dr = \frac{2}{\alpha^3}, \quad \int_0^\infty r^3 e^{-\alpha r} dr = \frac{6}{\alpha^4}$
- 球坐标角向: $\displaystyle\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin\theta\, d\theta d\varphi = 4\pi$

氢原子基态常用期望:

- $|\psi|^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0}$
- $\langle r\rangle = \frac{3}{2}a_0, \quad \left\langle \frac{1}{r}\right\rangle = \frac{1}{a_0}$
- $\langle V\rangle = -\frac{e^2}{a_0}, \quad \langle T\rangle = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}$

δ 函数抽样:

- $\displaystyle\int f(x)\delta(x-x_0)\,dx = f(x_0)$
- $\displaystyle\int \delta(x-x_0)\,dx = 1$
- $\displaystyle\int f(x)\delta(ax)\,dx = \frac{1}{|a|}f(0)$
- $\displaystyle\int f(x)\delta(g(x))\,dx = \sum_i \frac{f(x_i)}{|g'(x_i)|}$
- $\displaystyle\int f(x)\delta'(x-x_0)\,dx = -f'(x_0)$
- $\displaystyle\int f(\vec{r})\delta^{(3)}(\vec{r}-\vec{r}_0)\,dV = f(\vec{r}_0)$

常用归一化高斯积分（量子力学中常见）:

- 若 $|\psi(x)|^2 = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}e^{-\alpha x^2}$（已归一化），则

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x|\psi|^2 dx = 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2|\psi|^2 dx = \frac{1}{2\alpha}.$$

- 若 $|\psi(x)|^2 = e^{-\pi x^2}$（归一化高斯），则

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi x^2} dx = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\pi x^2} dx = \frac{1}{2\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\pi x^2} dx = 0.$$

- 分部积分常用形式:

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = -\frac{1}{2a}\int_{-\infty}^{\infty} x\, d\left(e^{-ax^2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}a^{-3/2}.$$

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

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

令 $u = ar^2$，则 $du = 2ar\,dr$，因此

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

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

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

边界项为 0（$u^n e^{-u}\to 0$），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

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

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。

7.3 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。

7.4 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幺正的，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 $\Delta x\, \Delta p = \hbar/2$。

7.5 球坐标

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

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

$r \geq 0$，$\theta \in [0, \pi]$（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。

7.6 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。

更直观的径向公式：若 $f = f(r)$，则梯度沿径向，

$$\nabla f = \frac{df}{dr}\,\hat{r},$$

而对径向场 $F(r)\hat{r}$ 有

$$\nabla \cdot (F\hat{r}) = \frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2 F).$$

因此

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

不套公式的展开推导（从笛卡尔坐标出发）：若 $\psi = \psi(r)$，则

$$\nabla^2 \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}.$$

先用链式法则：

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \psi'(r)\frac{\partial r}{\partial x} = \psi'(r)\frac{x}{r},$$

再对 x 求导：

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \psi''(r)\left(\frac{x}{r}\right)^2 \psi'(r)\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{x}{r}\right) = \psi''(r)\frac{x^2}{r^2} + \psi'(r)\frac{y^2+z^2}{r^3}.$$

同理

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=\psi''(r)\frac{y^2}{r^2}+\psi'(r)\frac{x^2+z^2}{r^3},\quad \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}=\psi''(r)\frac{z^2}{r^2}+\psi'(r)\frac{x^2+y^2}{r^3}.$$

三项相加得

$$\nabla^2\psi=\psi''(r)\frac{x^2+y^2+z^2}{r^2}\psi'(r)\frac{2(x^2+y^2+z^2)}{r^3}=\psi''(r)+\frac{2}{r}\psi'(r).$$

最后把它改写为

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

与上面的径向公式一致。等价的“快公式”是

$$\nabla^2 f=\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rf),$$

在球对称态上计算更省力。

8 连续表象与波函数

8.1 从 Dirac 记号到“函数表示”的切换教程

这一小节专门解释：为什么 $\langle x|\psi\rangle$ 可以直接写成波函数 $\psi(x)$，以及为什么算符在位置表象中会变成“直接乘法或微分算符”。

1. 位置表象的定义（核心起点）

$$\psi(x)\equiv\langle x|\psi\rangle,\qquad \psi^*(x)=\langle\psi|x\rangle.$$

这不是推导，而是**定义**：在位置基底下，态的“坐标分量”就是波函数。

2. 完备性与“插入单位算符”位置本征态满足完备性:

$$\int_{-\infty}^{\infty}|x\rangle\langle x|\,dx=\mathbb{I}.$$

因此

$$|\psi\rangle=\int|x\rangle\langle x|\psi\rangle\,dx=\int|x\rangle\,\psi(x)\,dx,$$

这说明**波函数就是在位置基底下的展开系数**。这一步等价于“在 $|\psi\rangle$ 前插入单位算符”: $|\psi\rangle=\mathbb{I}|\psi\rangle$，连续基把离散情形的求和 $\sum_n|n\rangle\langle n|=\mathbb{I}$ 换成积分。

3. 算符如何“翻译”为函数/微分形式对任意算符 $\hat{A}$，**定义**它在位置表象中的作用为

$$(A\psi)(x)\equiv\langle x|\hat{A}|\psi\rangle.$$

这里的记号需要注意：$(A\psi)$ 表示“先让算符 $\hat{A}$ 作用在态 $|\psi\rangle$ 上，得到一个新态”，而后面的 (x) 表示“取这个新态在位置表象中的函数值”。等价写法有

$$(A\psi)(x)\equiv[A\psi](x)\equiv\big(\hat{A}\psi\big)(x),$$

它们都表示“函数在 x 处的取值”，不是乘法括号。只要记住这一定义，就能把 Dirac 记号系统地翻成“函数写法”。

4. 为什么出现“直接乘法”若 $\hat{A}=f(\hat{x})$ 只依赖位置算符，则

$$\langle x|f(\hat{x})|\psi\rangle=f(x)\langle x|\psi\rangle=f(x)\psi(x),$$

因此在位置表象中

$$f(\hat{x}) \quad\longrightarrow\quad f(x)\,(\text{直接乘法})\ .$$

这就是“$\hat{x}$ 变成 x”的根源。

5. 为什么动量变成微分算符动量本征态满足

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

对任意态

$$\psi(x) = \int \langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle\,dp$$

可知 $\hat{p}$ 在位置表象中必须产生平移的导数作用，从而

$$\hat{p} \;\longrightarrow\; -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

这与基本对易关系 $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ 完全一致。

6. 典型例子：期望值公式的“翻译”

$$\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int \psi^*(x)\,(A\psi)(x)\,dx.$$

若 $\hat{A} = A(\hat{x},\hat{p})$，则

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

因此

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

这就是“Dirac 记号 $\leftrightarrow$ 直接乘法/微分算符”之间的标准切换。

8.2 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。

8.3 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。

8.4 算符在位置/动量表象中的表示

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

这里有四个“箭头”，分别对应常见计算场景：

- $\hat{x} \to x$（位置表象）：直接做**位置相关**的量，比如 $\langle x\rangle = \int x|\psi(x)|^2dx$，或势能 $V(x)$ 的乘法作用。
- $\hat{p} \to -i\hbar\partial_x$（位置表象）：求**动量/动能相关**量，如 $\langle p\rangle = \int \psi^*(-i\hbar\partial_x)\psi\,dx$，以及薛定谔方程中的动能项 $-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi$。
- $\hat{p} \to p$（动量表象）：直接做**动量分布**或动能计算，如 $\langle p\rangle = \int p|\phi(p)|^2dp$，动能就是 $p^2/2m$ 的乘法。
- $\hat{x} \to i\hbar\partial_p$（动量表象）：需要**位置相关**信息时用，如 $\langle x\rangle = \int \phi^*(i\hbar\partial_p)\phi\,dp$，或把 x 依赖的势能写进动量表象中的作用。

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 从四大算符出发的知识串联

在量子力学中，几乎所有计算都可以从四类算符出发：**哈密顿算符**（总能量）、**动能算符**、**势能算符**与 **能量算符**（时间导数算符）。本节把它们作为“主线”，把导论中的关键知识点串起来。

9.1 四大算符的定义与表象

经典到量子： 从经典能量 $H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r},t)$ 出发，做量子替换 $\hat{p} \to -i\hbar\nabla$，得到

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

能量算符： $\hat{E} \equiv i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$，与 $\hat{H}$ 在含时薛定谔方程中相对应：$\hat{E}\psi = \hat{H}\psi$。**位置表象：** $\hat{T}$ 体现为二阶微分算符，$\hat{V}$ 只是“乘以势能函数”。因此总哈密顿量在位置表象中就是 $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r},t)$。

动量表象： $\hat{T}$ 变成简单的乘法 $p^2/2m$，而 $\hat{V}$ 一般变成积分核或微分形式（体现为“非对角”作用）。这提醒我们：**势能的形状决定了问题的难度**。

9.2 哈密顿量与时间演化

哈密顿算符不仅“定义能量”，更是**时间演化的生成元**：

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

若 V 与时间无关，则可分离变量 $\psi(\vec{r},t) = u(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$，得到定态方程 $\hat{H}u = Eu$。这直接引出**能量本征态展开** $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle$，是作业中能量期望值与演化相位的核心来源。

9.3 期望值、守恒与对易

哈密顿量控制可观测量的时间变化：

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

推导：

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle, \quad \frac{d}{dt}\langle A\rangle = \langle\dot{\psi}|A|\psi\rangle + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \langle\psi|A|\dot{\psi}\rangle.$$

由含时薛定谔方程 $i\hbar|\dot{\psi}\rangle = \hat{H}|\psi\rangle$ 及其共轭 $-i\hbar\langle\dot{\psi}| = \langle\psi|\hat{H}$，得

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

守恒量判据： 若 $[A,\hat{H}] = 0$ 且 A 不显含时，则 $\langle A\rangle$ 守恒。这把“对称性 $\leftrightarrow$ 守恒量”的思想拉到导论层面：平移对称性 $\rightarrow$ 动量守恒，旋转对称性 $\rightarrow$ 角动量守恒。

9.4 与经典力学的桥：Ehrenfest

由 $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ 可推出

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

当波包足够窄、势能变化缓慢时，$\langle\nabla V\rangle \approx \nabla V(\langle x\rangle)$，于是得到经典的牛顿方程。这正是作业中“势能与力”“动量期望值演化”的统一视角。

9.5 势能决定谱结构与边界条件

不同势能形状对应不同的本征值与本征函数：

- $V = 0$：自由粒子，能量连续，平面波动量本征态。
- 无限深势阱：$V = 0$（阱内），$V = \infty$（阱外），边界条件 $u(0) = u(a) = 0$，能级离散、波形为正弦。
- 库仑势：$V(r) = -e^2/r$，给出氢原子能级与球对称解。

因此，“选定势能 $\rightarrow$ 写出 $\hat{H}$ $\rightarrow$ 解定态方程”是最通用的解题路径。

9.6 知识路线图（导论内的对应位置）

算符表示与对易 $\rightarrow$ 本讲义“表象与算符表示”；**哈密顿量与时间演化** $\rightarrow$ “薛定谔方程与概率守恒”；**定态与能量展开** $\rightarrow$ “定态理论与能量展开”；**势能与边界条件** $\rightarrow$ “一维无限深势阱”与“氢原子基态”。理解这条主线，后续所有具体模型都只是“换一个势能”。

10 薛定谔方程与概率守恒

10.1 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。

10.2 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。

10.3 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

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

其中

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

以及由链式法则

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

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

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

代入

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

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

11 定态理论与能量展开

11.1 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。

11.2 能量本征态展开

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

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

期望值:

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

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。

12 测量公设与 Born 规则

12.1 投影测量的基本公式

可观测量由厄米算符 $\hat{A}$ 表示，设其本征分解为

$$\hat{A}=\sum_n a_n|a_n\rangle\langle a_n|\quad(\text{离散谱}).$$

测量结果：测量 $\hat{A}$ 时，结果只能是某个本征值 a_n。**Born 规则：**得到 a_n 的概率

$$p_n = \langle\psi|\,|a_n\rangle\langle a_n|\,|\psi\rangle = |\langle a_n|\psi\rangle|^2.$$

测后态：测量得到 a_n 后，态塌缩为

$$|\psi_n\rangle = \frac{|a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle}{\sqrt{p_n}}.$$

12.2 简并与连续谱

若本征值有简并，投影算符改为该本征子空间的投影：

$$P_\alpha = \sum_{n\in\alpha} |a_n\rangle\langle a_n|, \quad p_\alpha = \langle\psi|P_\alpha|\psi\rangle.$$

连续谱（如位置）下，结果以概率密度形式给出：

$$p(x)\,dx = |\psi(x)|^2\,dx, \quad \psi(x) = \langle x|\psi\rangle.$$

12.3 期望值与统计意义

重复测量得到的平均结果为

$$\langle A\rangle = \sum_n a_n p_n$$

（连续谱时求和改为积分）。这与“展开系数模平方加权平均”的结论一致。

13 一维无限深势阱

13.1 定态解

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

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

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。$n = 1, 2, 3, \ldots$ 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”）。

13.2 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:

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

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。

14 球坐标与氢原子基态

14.1 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 $P(r)=4\pi r^2|\psi|^2\propto r^2e^{-2r/a_0}$ 得出，令 $\frac{d}{dr}(r^2e^{-2r/a_0})=0$ 可得 $r=a_0$。

14.2 期望值计算要点

1. $\langle r\rangle=\int r|\psi|^2dV$，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 $E=-\frac{e^2}{2a_0}=-13.6\,\mathrm{eV}$。

15 角动量算符与对易关系

15.1 定义与分量

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

位置表象的行列式形式:

$$\vec{L}=-i\hbar\begin{vmatrix}\hat{e}_x & \hat{e}_y & \hat{e}_z\\ x & y & z\\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z}\end{vmatrix}$$

展开得到

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

动量表象的行列式形式: 用 $\vec{r}\to i\hbar\nabla_p$,

$$\vec{L}=(i\hbar\nabla_p)\times\vec{p}=-i\hbar(\vec{p}\times\nabla_p)=-i\hbar\begin{vmatrix}\hat{e}_x & \hat{e}_y & \hat{e}_z\\ p_x & p_y & p_z\\ \frac{\partial}{\partial p_x} & \frac{\partial}{\partial p_y} & \frac{\partial}{\partial p_z}\end{vmatrix}$$

因此

$$L_x = -i\hbar \left(p_y \frac{\partial}{\partial p_z} - p_z \frac{\partial}{\partial p_y} \right),$$

其余分量由循环置换得到。**说明：**仍然是 $\vec{r} \times \vec{p}$ 的定义，只是用 $\vec{r} \to i\hbar\nabla_p$ 写成动量表象。将 $(i\hbar\nabla_p) \times \vec{p}$ 写为 $-i\hbar(\vec{p} \times \nabla_p)$ 只是叉乘反交换，不是改成 $\vec{p} \times \vec{r}$。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。

15.2 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 $\hbar$。

16 Ehrenfest 定理（量子-经典对应）

16.1 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。

16.2 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。

17 不确定关系

17.1 一般不确定关系（Robertson）

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

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。

17.2 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

含相位因子的高斯波包（作业题型）： 给定

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

思路与原理： 先用期望值公式

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

求出 $\langle x\rangle,\langle x^2\rangle$，并用 $\Delta x^2=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2$。再用动量算符 $\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ 计算动量平均值与方差。相位因子 $e^{ip_0x/\hbar}$ 只会**平移动量分布的中心**，不改变宽度。
计算：

$$|\psi|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\xi}\exp\left(-\frac{x^2}{2\xi^2}\right)\Rightarrow\langle x\rangle=\int x|\psi|^2dx=0,$$

（被积函数为奇函数），并且

$$\langle x^2\rangle=\int x^2|\psi|^2dx=\xi^2,\quad \Delta x^2=\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2=\xi^2,\quad \Delta x=\sqrt{\Delta x^2}=\xi.$$

$$\hat{p}\,\psi=(-i\hbar\partial_x)\psi=\left(p_0+\frac{i\hbar x}{2\xi^2}\right)\psi\Rightarrow\langle p\rangle=p_0.$$

由于 $\hat{p}$ 为厄米算符,

$$\langle p^2\rangle=\langle p\psi|p\psi\rangle=\int|\hat{p}\psi|^2dx=p_0^2+\frac{\hbar^2}{4\xi^2},\quad \Delta p^2=\frac{\hbar^2}{4\xi^2}.$$

因此

$$\Delta x^2\,\Delta p^2=\xi^2\cdot\frac{\hbar^2}{4\xi^2}=\frac{\hbar^2}{4},$$

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 $\Delta x\,\Delta p=0.5\,\hbar=\hbar/2$。

17.3 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。

18 双缝干涉与相干性

18.1 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）。

18.2 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 $\beta_2 \to 0$），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。

19 表象理论与矩阵元

19.1 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）。

19.2 一维势阱中的矩阵元（坐标与动量）

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

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

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。

19.3 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"。

20 线性代数速记：对角化与本征表象

20.1 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. $A_{\text{diag}}=U^\dagger AU$。
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 $\frac{1}{\sqrt{2}}(1,\pm1)^T$。这对应把 A 变成对角矩阵 $\mathrm{diag}(1,-1)$。

20.2 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。

21 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）。

22 Dirac 符号翻译清单

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

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 $\delta(x-x')$。

23 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

24 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。