

1. 一个粒子的波函数为：

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

将该波函数归一化

相关概念与定义：

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

解答：

$$\begin{aligned} \int |\psi(x, t)|^2 dx &= A^2 \int \exp(-ax^2) dx = A^2 I = 1 \\ I^2 &= \int \exp(-ax^2) dx \int \exp(-ay^2) dy \\ &= \iint \exp(-a(x^2 + y^2)) dx dy \\ &= \iint r \exp(-ar^2) dr d\theta = \frac{\pi}{a} \\ I &= \sqrt{\frac{\pi}{a}} \\ A &= \left(\frac{a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \end{aligned}$$

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

知识点：

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

相关概念与定义：

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

详细步骤：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(x, t)|^2 dx \quad (\text{交换求导与积分}) \\ \frac{\partial}{\partial t} |\psi|^2 &= \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \psi \quad (\text{乘积法则}) \end{aligned}$$

由含时薛定谔方程

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

得

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

对其取共轭可得

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

代回得到

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

因此

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

其中最后一步使用边界条件 $\psi(\pm\infty) = 0$ 。

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

知识点:

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

相关概念与定义:

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

详细步骤:

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

这里

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

对 $\psi = \frac{1}{r} e^{ikr}$ 有

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

其中

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

以及

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

这里用到多元链式法则：若 $g(\vec{r})$ 为标量函数，则

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

代回得

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

同理

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

因此

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

先算

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

代入

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

得

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

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

知识点：

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

相关概念与定义：

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

已知：

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

归一化核对 ($\int |\psi|^2 dV = 1$):

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

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

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

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

(1) $\langle r \rangle$:

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

先做角向积分:

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

因此

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

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

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

(2) $\langle V \rangle$:

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

角向积分给出 4π , 因此

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

(3) $\langle T \rangle$: 球对称情形

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

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

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

于是

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

与下式一致。先求导：

$$\begin{aligned}\frac{d\psi}{dr} &= -\frac{1}{a_0}\psi, \\ r^2 \frac{d\psi}{dr} &= -\frac{r^2}{a_0}\psi, \\ \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) &= -\frac{2r}{a_0}\psi + \frac{r^2}{a_0^2}\psi.\end{aligned}$$

因此

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

动能期望值

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

展开积分为

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

利用归一化 $\int |\psi|^2 dV = 1$, 并记

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

得到

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

而

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

于是

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

5. 写出角动量算符的表达式, 并且计算 L_x 和 L_y 的对易关系

相关概念与定义:

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

角动量算符:

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

分量展开的详细计算: 写成分量

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

叉乘用行列式记忆:

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

按第一行展开：

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

因此得到

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

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

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

代入即可得到 L_x, L_y, L_z 的微分算符形式：

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

在位置表象中 $p_i = -i\hbar \partial_i$, 于是

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

对易关系计算：使用基本对易关系

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

因此有

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

并用到对易子的乘积法则：

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

例如

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

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

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

再代入基本对易关系 $[p_z, z] = -i\hbar$:

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

先展开

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

用线性与 $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ 得

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

逐项计算：

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

因为 $[p_z, z] = -i\hbar$, 其余对易子为 0。

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

(不同分量互对易)。最后

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

合并得到

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

结论: $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ 。

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

相关概念与定义:

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

整体思路:

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

详细推导:

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

对时间求导:

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

对第二项做分部积分:

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

代回得到

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

含时薛定谔方程与其共轭：

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

代入得

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

第一项是全导数并在边界消失，第二项分部积分：

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

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

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

边界项为 0，因此

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

为什么这就是牛顿方程：经典力学中

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

经典力学回顾（1D）：

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

量子力学得到的是“期望值版本”：

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

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

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

于是回到经典牛顿方程形式。

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

相关概念与定义：

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

一个信号的时域和频域表达式可以通过傅里叶变换来表示：

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

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

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

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

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

由此可得：

$$\sigma_t^2 \sigma_\omega^2 = \frac{1}{2\pi} \int t^2 |f(t)|^2 dt \int \omega^2 |F(\omega)|^2 d\omega,$$

由傅里叶变换的微分性质和帕斯瓦尔定理：

$$f'(t) = i\omega F(\omega)$$

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

$$\sigma_t^2 \sigma_\omega^2 = \int t^2 |f(t)|^2 dt \int |f'(t)|^2 dt$$

利用柯西-许瓦兹不等式：

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

因此有：

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

注意到：

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

因此有：

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

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

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

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

因此有:

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

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

8. 粒子处于状态:

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

求粒子的动量平均值, 并且计算测不准关系

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

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

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

动量的平均值:

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

先求导

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

因此

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

积分得

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

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

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

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

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

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

因此

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

动量方差所需的 $\overline{p^2}$ (按二阶导数展开)：

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

先求二阶导数：

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

因此

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

积分得

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

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

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

于是

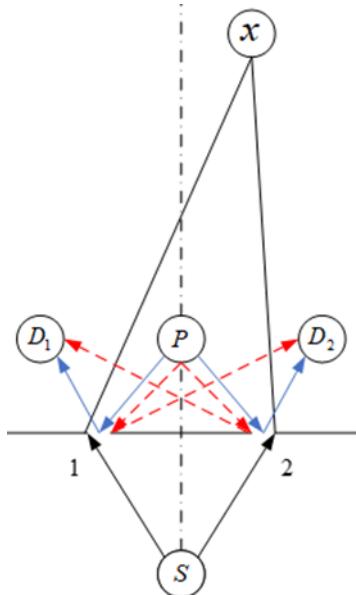
$$\overline{\Delta p^2} = \overline{p^2} - \overline{p^2} = \frac{\pi}{2} \hbar^2.$$

因此

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

9. 运用概率叠加原理解释电子的双缝干涉现象：

1. 电子双缝干涉的解释
2. 为什么加入光源探测电子是从那一条缝通过时，干涉条纹会消失



解答：

简化背诵版：

(1) 电子双缝干涉的解释：双缝对应两条“不可区分”的路径，幅度相加、再取模平方：

$$I(x) = |A_L + A_R|^2 = I_L(x) + I_R(x) + 2 \Re(A_L A_R^*).$$

最后一项是干涉项，随位置变化形成明暗条纹。

(2) 加光源测哪条缝时为什么干涉消失：探测会把“哪条缝”信息写进探测器（与电子纠缠），两条路径变得可区分，于是不能再相干叠加，只剩概率相加：

$$I(x) = I_L(x) + I_R(x), \text{ 干涉项为 } 0.$$

一句话：可区分 \Rightarrow 干涉消失；不可区分 \Rightarrow 干涉存在。

10. 假设体系的势场与时间无关，波函数可以分解为各个本征态的叠加

简化背诵版：

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

证明思路（记三行即可）：

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

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

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

11. 在一维无限深势阱中，势阱内 $0 \leq x \leq a$, $V(x) = 0$, 其余位置势能函数为无穷大，如果已知粒子的波函数在初始时刻 $\psi(x, 0) = Ax(a-x)$, 求

1. 归一化常数 A
2. 任意时刻 t 的波函数 $\psi(x, t)$ 。

知识点与方法：

- 无限深势阱边界条件：势阱外 $V \rightarrow \infty$, 故波函数在边界满足 $\psi(0, t) = \psi(a, t) = 0$, 且阱外 $\psi = 0$ 。
- 定态本征解：阱内 $V = 0$, 定态薛定谔方程 $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dx^2} = Eu$, 本征函数 $u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$, 本征值 $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ 。
- 展开与系数：任意初态可展开为 $\psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x)$, 系数由正交归一给出 $c_n = \int_0^a u_n^*(x) \psi(x, 0) dx$ 。
- 时间演化：势能与时间无关时, $\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$ 。
- 归一化：由 $\int_0^a |\psi(x, 0)|^2 dx = 1$ 决定常数 A 。

解答：

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

由势阱内的一维定态薛定谔方程：

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

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

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

由于波函数是归一化的, 由此可得:

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

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

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

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

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

12. 1) 写出位置算符 x 的本征值和本征函数

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

解答:

由于: $x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0)$

位置算符 x 的本征值是 x_0 处的坐标, 其本征函数是一个冲击函数:

$$\delta(x - x_0)$$

设动量算符的本征函数是 $f(x)$, 根据本征函数的定义为:

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

因此有:

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

两边积分:

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

得到

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

两边取指数：

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

因此：

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

本征函数具有归一化的特点：

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

做变量代换： $x_1 = \frac{x}{\hbar}$ ，因此有

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

因此

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

动量算符的本征值是粒子的动量，本征函数是一个复指数函数：

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

说明：这是一维动量本征函数。三维情形下本征函数为

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

可理解为三个一维平面波的直积，因此归一化因子不同。

13. 一维无限深势阱中坐标算符和动量算符在能量表象中的矩阵元

解答 1：

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

坐标算符的对角元：**由定义：**能量表象矩阵元

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

因此对角元 x_{nn} 就是取 $m = n$ 后的积分。

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

当 $m \neq n$ 时

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

动量算符的对角元为：

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

动量算符的非对角元为：

$$\begin{aligned}
p_{mn} &= \int u_m^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) u_n(x) dx \\
&= -i\hbar \int \frac{2}{a} \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \left(\frac{d}{dx} \right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\
&= -i\hbar \frac{2n\pi}{a^2} \int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\
&= -i\hbar \frac{n\pi}{a^2} \left[\int_0^a \sin\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right) + \sin\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) \right] dx \\
&= i\hbar \frac{n\pi}{a^2} \left[\frac{a}{(m+n)\pi} \cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right) + \frac{a}{(m-n)\pi} \cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right) \right] \Big|_0^a \\
&= i\hbar \frac{n}{a} \left[\frac{1}{(m+n)} + \frac{1}{(m-n)} \right] [(-1)^{m-n} - 1] \\
&= \frac{i2mn\hbar}{a(m^2-n^2)} [(-1)^{m-n} - 1]
\end{aligned}$$

14. 在动量表象中，角动量算符 L_x 的矩阵元。

解答：

前置知识（表象/基底 vs 空间，以本题为例）：

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

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

关键思路：

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

动量算符的本征函数为：

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

其中 $\vec{p}\cdot\vec{r} = p_x x + p_y y + p_z z$

角动量算符 \hat{L}_x 的表达式为 $\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$

因此其矩阵元可以表示为如下的积分：

$$\begin{aligned}
(\hat{L}_x)_{p_1 p} &= \int \psi_{p_1}^* \hat{L}_x \psi_p dV \\
&= \int \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_1 \cdot \vec{r}\right) \\
&\quad \times \left(-i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)\right) \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) dV \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_1 \cdot \vec{r}\right) \\
&\quad \times \left(-i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) - z \frac{\partial}{\partial y} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \right)\right) dV \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_1 \cdot \vec{r}\right) \\
&\quad \times \left(-i\hbar \left(y \left(\frac{i}{\hbar}\right) p_z \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) - z \left(\frac{i}{\hbar}\right) p_y \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \right)\right) dV \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_1 \cdot \vec{r}\right) (yp_z - zp_y) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) dV
\end{aligned}$$

注意到：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial p_y} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) &= \frac{i}{\hbar} y \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) \\
\Rightarrow y \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial p_y} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right)
\end{aligned}$$

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

因此有：

$$\begin{aligned}
(\hat{L}_x)_{p_1 p} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_1 \cdot \vec{r}\right) (yp_z - zp_y) \\
&\quad \times \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) dV \\
&= \frac{(-i\hbar)}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_1 \cdot \vec{r}\right) \\
&\quad \times \left(\frac{\partial}{\partial p_y} p_z - \frac{\partial}{\partial p_z} p_y \right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) dV \\
&= (-i\hbar) \left(p_z \frac{\partial}{\partial p_y} - p_y \frac{\partial}{\partial p_z} \right) \\
&\quad \times \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}_1 \cdot \vec{r}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}\right) dV \right)
\end{aligned}$$

由正交归一性可以知道：

$$\begin{aligned} & \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p}_1 \cdot \vec{r}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p} \cdot \vec{r}\right) dV \\ &= \delta(\vec{p} - \vec{p}_1) \end{aligned}$$

因此：

$$(\hat{L}_x)_{p_1 p} = (-i\hbar) \left(p_z \frac{\partial}{\partial p_y} - p_y \frac{\partial}{\partial p_z} \right) \delta(\vec{p} - \vec{p}_1)$$

等价写法：这就是动量空间中的角动量算符

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

行列式推导：

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

因此

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

从而

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

因此矩阵元也可写成

$$(\hat{L}_x)_{p_1 p} = \hat{L}_x \delta(\vec{p} - \vec{p}_1).$$

解答 2 (不借用位置基, 直接在动量表象计算):

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

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

从而

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

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

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

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

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

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

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

这里 \vec{p} 是自变量， \vec{p}_1 是特征值标签。

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

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

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

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

这里用到 δ 的取值性质:

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

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

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

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

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

解答:

已知: 在 Q 表象中, 态矢列向量 ψ , 算符矩阵 F_Q 。

目标: 在 F 的本征态基底 (自身表象) 中, 各本征态的概率 P_n 。

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

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

最终概率:

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

若本征值退化, 对应多个本征态的概率需相加。

16. 已知角动量算符的矩阵为:

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

求角动量算符在自身表象下的矩阵表示：。

算符的本征值方程为：

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

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

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

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

因此：

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

因此测量 L_x 只有三种结果： $\hbar, 0, -\hbar$ （不是 1，而是 \hbar 的倍数）。对应的归一化本征向量（在给定基 $\{|m=+1\rangle, |m=0\rangle, |m=-1\rangle\}$ 下）可取为：

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

把它们按列排成矩阵

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

则

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

对角元的排列顺序可以互换，只要与对应本征向量的列顺序一致。

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

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

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

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

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

18. 将下列公式用狄拉克符号表示

- 1) $F(x, i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi(x, t) = \Phi(x, t)$
- 2) $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = H(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi(x, t)$
- 3) $H(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) u_n(x) = E_n u_n(x)$
- 4) $\int u_m^*(x) u_n(x) dx = \delta_{mn}$
- 5) $\psi(x, t) = \sum_n a_n(t) u_n(x)$

解答

题意说明（先看这一段再做转换）：

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

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

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

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

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

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

说明：这是含时薛定谔方程， H 为哈密顿算符；右式是不带表象的抽象表达。

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

原始过程：

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

左乘 $\langle x|$ 得

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

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

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

于是

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

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

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

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

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

因此

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

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

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

原始过程：在正交归一基 $\{|n\rangle\}$ 下插入完备关系

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

于是

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

定义系数

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

则

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

取位置表象分量：

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

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

解答：按第 15 题同样思路（矩阵形式结论）：

1. 已知 F^a 与 F^b ，它们表示同一算符在两种表象下的矩阵，满足

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

2. 对角化得到

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

其中 Λ 为同一特征值对角阵， A, B 由各自的本征向量组成。

3. 写出基变换关系并代入：

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

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

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

左乘 B^\dagger 、右乘 B :

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

令

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

则有

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

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

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