1. 一个粒子的波函数为:

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

将该波函数归一化

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

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

详细步骤:

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x,t)|^{2}\,dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x,t)|^{2}\,dx\quad(\text{交换求导与积分})$$

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi|^{2}=\frac{\partial}{\partial t}(\psi^{*}\psi)=\psi^{*}\frac{\partial\psi}{\partial t}+\frac{\partial\psi^{*}}{\partial t}\psi\quad(\text{乘积法则})$$

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

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

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。

详细步骤：

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

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

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

其中

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

以及

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

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

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

同理

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

代入

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

得

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

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

已知：

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

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) $\langle r\rangle$**：**

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

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

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

(2) $\langle V \rangle$**：**

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

(3) $\langle T \rangle$**：**球对称情形

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

先求导:

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

因此

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

动能期望值

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

而

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{4}{a_0^3}\int_0^\infty re^{-2r/a_0}dr = \frac{1}{a_0}.$$

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

角动量算符：

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

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

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

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。

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

（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

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:

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

其中第二步对第二项分部积分，并用边界条件 $\psi(\pm\infty) = 0$。
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:

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

边界项为 0，因此

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

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

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:

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

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:

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

由此可得:

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

由傅里叶变换的微分性质和帕斯瓦尔定理:

$$f^{'}(t) = i\omega F(\omega)$$

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

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

利用柯西-许瓦兹不等式:

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

因此有:

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

注意到:

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

因此有:

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

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

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

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

因此有:

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

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

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：先将 $\psi(x)$ 归一化，由归一化条件

$$\begin{aligned}1 &= \int_0^\infty \left|\psi(x)\right|^2 dx = \int_0^\infty \frac{1}{2\pi\xi^2} exp\left(-\frac{x^2}{2\xi^2}\right)dx \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}\xi\pi}\int_0^\infty exp\left(-\frac{x^2}{2\xi^2}\right)d\left(\frac{x}{\sqrt{2}\xi}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}\xi\pi}\sqrt{\pi} \\ \xi &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\end{aligned}$$

因此，波函数为 $\psi(x) = exp\left(\frac{i}{\hbar}p_0x - \frac{\pi x^2}{2}\right)$

动量的平均值:

$$\begin{aligned}\overline{p} &= \int \psi^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi dx \\ &= -i\hbar\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_0x - \frac{\pi x^2}{2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)exp\left(\frac{i}{\hbar}p_0x - \frac{\pi x^2}{2}\right)dx \\ &= p_0\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}\overline{x} &= \int \psi^* x\psi dx = \int xexp\left(-\pi x^2\right)dx \\ &= 0\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\overline{x^2} &= \int \psi^* x^2 \psi dx = \int x^2 exp\left(-\pi x^2\right) dx \\
&= -\frac{1}{2\pi}\int xd\left(exp\left(-\pi x^2\right)\right) \\
&= \frac{1}{2\pi}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\overline{p^2} &= -\hbar^2 \int \psi^* \frac{d^2}{dx^2}\psi dx \\
&= -\hbar^2 \int exp\left(-\frac{i}{\hbar}p_0 x - \frac{\pi x^2}{2}\right)\frac{d^2}{dx^2}\left(exp\left(\frac{i}{\hbar}p_0 x - \frac{\pi x^2}{2}\right)\right) dx \\
&= \hbar^2\left(\pi + \frac{p_0^2}{\hbar}\right) + i2\pi\hbar p_0 \int xexp\left(-\pi x^2\right) dx - \pi^2\hbar^2 \int x^2 exp\left(-\pi x^2\right) dx \\
&= \hbar^2\left(\pi + \frac{p_0^2}{\hbar}\right) + 0 - \pi^2\hbar^2\frac{1}{2\pi} \\
&= \frac{\pi}{2}\hbar^2 + p_0^2
\end{aligned}
$$

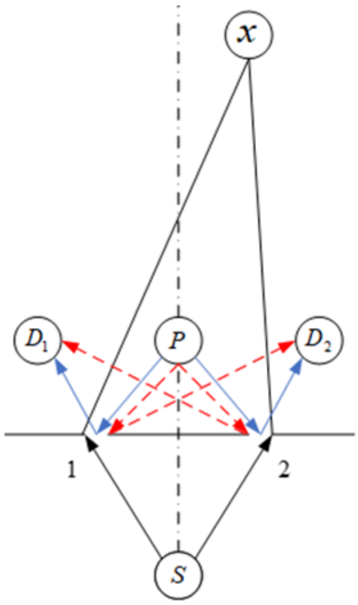
$$
\overline{\Delta x^2} = \overline{x^2} - \overline{x}^2 = \frac{1}{2\pi}
$$

$$
\begin{aligned}
\overline{\Delta p^2} &= \overline{p^2} - \overline{p}^2 \\
&= \frac{\pi}{2}\hbar^2 + p_0^2 - p_0^2 \\
&= \frac{\pi}{2}\hbar^2
\end{aligned}
$$

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:

1. 假定电子从初态 S 出发经过缝 1 和缝 2，最后被记录在屏幕上，末态为 x ，电子通过缝 1 到达末态的概率幅度为:

$$\langle x|\ S\rangle_1 = \langle x|\ 1\rangle \langle 1|\ S\rangle = \alpha_1 = |\alpha_1|\, e^{j\varphi_1}$$

电子通过缝 1 到达末态的概率为

$$I_1(x) = |\langle x|\ 1\rangle \langle 1|\ S\rangle|^2 = |\alpha_1|^2$$

同理只打开缝 2，电子通过缝 2 到达末态的概率幅度和概率为:

$$\langle x|\ S\rangle_2 = \langle x|\ 2\rangle \langle 2|\ S\rangle = \alpha_2 = |\alpha_2|\, e^{j\varphi_2}$$
$$I_2(x) = |\langle x|\ 2\rangle \langle 2|\ S\rangle|^2 = |\alpha_2|^2$$

如果同时打开缝 1 和缝 2，电子到达末态的概率幅度为:

$$\langle x|\ S\rangle = \langle x|\ S\rangle_1 + \langle x|\ S\rangle_2 = \alpha_1 + \alpha_2$$

电子到达末态的概率为:

$$\begin{aligned} I(x) &= |\langle x|\ S\rangle|^2 = |\langle x|\ S\rangle_1 + \langle x|\ S\rangle_2|^2 = |\alpha_1 + \alpha_2|^2 \\ &= |\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + |\alpha_1|\, e^{i\varphi_1}\, |\alpha_2|\, e^{-i\varphi_2} + |\alpha_1|\, e^{-i\varphi_1}\, |\alpha_2|\, e^{i\varphi_2} \\ &= I_1(x) + I_2(x) + 2\sqrt{I_1(x) I_2(x)} cos\left(\varphi_1 - \varphi_2\right) \end{aligned}$$

上式中最后一项是干涉项，φ_1 和 φ_2 在屏上的不同位置 x 处是不同的，因此 $I(x)$ 会有极大极小的变化，因此会产生明暗相间的干涉条纹。

2. 我们再看看如果加入光源后，利用光源观测电子是从哪个狭缝中通过的，此时有两个探测器 D_1 和 D_2 。此时有四个概率幅度，分别是光源发出的光子被狭缝 1，狭缝 2 的电子散射后被探测器 D_1 和 D_2 接收:

$$\langle D_1|\ 1\rangle \langle 1|\ P\rangle = \langle D_2|\ 2\rangle \langle 2|\ P\rangle = \beta_1$$
$$\langle D_2|\ 1\rangle \langle 1|\ P\rangle = \langle D_1|\ 2\rangle \langle 2|\ P\rangle = \beta_2$$

我们可以看出，电子在 x 被记录，同时光子被 D_1 探测，应该包括两个事件，第一个事件是电子从缝 1 到达 x ，同时光子被缝 1 处的电子散射，被 D_1 探测，这个过程的概率幅度为：

$\langle xD_1|\ SP\rangle_1 = \alpha_1\beta_1$，

第二个事件是电子从缝 2 到 x 同时光子被缝 2 的电子散射，被 D_1 探测，这个概率幅度为：

$\langle xD_1|\ SP\rangle_2 = \alpha_2\beta_2$。

因此电子在 x 被记录，同时光子被 D_1 探测的概率幅度为：

$$\langle xD_1|\ SP\rangle = \alpha_1\beta_1 + \alpha_2\beta_2$$

同理电子在 x 被记录，同时光子被 D_2 探测的概率幅度为：

$$\langle xD_2|\ SP\rangle = \alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1$$

因此电子在 x 被记录，不管被哪个探测器被记录的概率为：

$$\begin{aligned}
|\langle x|\ S\rangle|^2 &= |\langle xD_1|\ SP\rangle|^2 + |\langle xD_2|\ SP\rangle|^2 \\
&= (\alpha_1\beta_1 + \alpha_2\beta_2)(\alpha_1\beta_1 + \alpha_2\beta_2)^* + (\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1)(\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1)^* \\
&= |\alpha_1|^2|\beta_1|^2 + |\alpha_2|^2|\beta_2|^2 + \alpha_1\beta_1\alpha_2^*\beta_2^* + \alpha_2\beta_2\alpha_1^*\beta_1^* \\
&\quad + |\alpha_1|^2|\beta_2|^2 + |\alpha_2|^2|\beta_1|^2 + \alpha_1\beta_2\alpha_2^*\beta_1^* + \alpha_1^*\beta_2^*\alpha_2\beta_1
\end{aligned}$$

当我们用光能分辨电子是从哪个狭缝射出时，也就是要求：光源发出的光经过狭缝 1 处的电子散射时只能够被探测器 D_1 接收，不能被探测器 D_2 接收，

光源发射的光子被缝 2 处的电子散射时只能够被 D_2 接收，不能够被 D_1 接收，也就是 $\beta_2 \to 0$。

因此电子在 x 被记录的概率为：

$$|\langle x|\ S\rangle|^2 = |\beta_1|^2\left(|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2\right)$$

此时干涉项消失，不再会有干涉条纹出现

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

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

证明体系的哈密尔顿算符和能量算符满足如下关系：

$$\left\langle \hat{H} \right\rangle = \left\langle \hat{E} \right\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n$$

证明：

$$
\begin{aligned}
\left\langle \hat{H} \right\rangle &= \int \psi^*(x,t)\,\hat{H}\psi(x,t)\,dx \\
&= \int \sum_m c_m^* u_m^*(x) exp\left(i\frac{E_m}{\hbar}t\right)\hat{H}\sum_n c_n u_n(x) exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)dx \\
&= \int \sum_m c_m^* u_m^*(x) exp\left(i\frac{E_m}{\hbar}t\right)\sum_n c_n E_n u_n(x) exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)dx \\
&= \sum_n \sum_m E_n c_n c_m^* u_m^*(x) exp\left(i\frac{E_m-E_n}{\hbar}t\right)\int u_m^*(x) u_n(x) dx \\
&= \sum_n \sum_m E_n c_n c_m^* u_m^*(x) exp\left(i\frac{E_m-E_n}{\hbar}t\right)\delta_{mn} \\
&= \sum_n |c_n|^2 E_n
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left\langle \hat{E} \right\rangle &= \int \psi^*(x,t)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\psi(x,t)\,dx \\
&= \int \sum_m c_m^* u_m^*(x) exp\left(i\frac{E_m}{\hbar}t\right)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)\sum_n c_n u_n(x) exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)dx \\
&= \int \sum_m c_m^* u_m^*(x) exp\left(i\frac{E_m}{\hbar}t\right)E_n\sum_n c_n u_n(x) exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right)dx \\
&= \sum_n |c_n|^2 E_n
\end{aligned}
$$

11. 在一维无限深势阱中，势阱内 $0 \le x \le a$，$V(x)=0$，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 $\psi(x\ t)$。

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：$\psi(x) = Asin(kx) + Bcos(kx)$

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：

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

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

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

$$c_n = \int \psi_n^*(x)\psi(x\ 0)dx$$

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

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:

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

因此:

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

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

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

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:

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

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:

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:

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

当 $m\neq n$ 时

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

动量算符的对角元为:

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

动量算符的非对角元为:

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

14. 在动量表象中，角动量算符 L_x 的矩阵元。

解答:

动量算符的本征函数为:

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

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:

$$
\begin{aligned}
\left(\hat{L_x}\right)_{p_1p} &= \int \psi_{p_1}^{*}\hat{L_x}\psi_p dV \\
&= \int \frac{1}{\left(\sqrt{2\pi\hbar}\right)^3} exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right) \\
&\quad \times\left(-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\right)\frac{1}{\left(\sqrt{2\pi\hbar}\right)^3} exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right) \\
&\quad \times\left(-i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z}exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)-z\frac{\partial}{\partial y}exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)\right)\right)dV \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right) \\
&\quad \times\left(-i\hbar\left(y\left(\frac{i}{\hbar}\right)p_z exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)-z\left(\frac{i}{\hbar}\right)p_y exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)\right)\right)dV \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right)(yp_z-zp_y)\, exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV
\end{aligned}
$$

注意到:

$$
\frac{\partial}{\partial p_y}exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)=\frac{i}{\hbar}yexp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)
$$

$$
\Rightarrow yexp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial p_y}exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)
$$

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

$$
\begin{aligned}
\left(\hat{L_x}\right)_{p_1p} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right)(yp_z-zp_y) \\
&\quad \times exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV \\
&= \frac{(-i\hbar)}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right) \\
&\quad \times\left(\frac{\partial}{\partial p_y}p_z-\frac{\partial}{\partial p_z}p_y\right)exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV \\
&= (-i\hbar)\left(p_z\frac{\partial}{\partial p_y}-p_y\frac{\partial}{\partial p_z}\right) \\
&\quad \times\left(\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right)exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV\right)
\end{aligned}
$$

由正交归一性可以知道：

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\int exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{p_1}\cdot\vec{r}\right)exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)dV$$
$$=\delta\left(\vec{p}-\vec{p_1}\right)$$

因此：

$$\left(\hat{L_x}\right)_{p_1p}=(-i\hbar)\left(p_z\frac{\partial}{\partial p_y}-p_y\frac{\partial}{\partial p_z}\right)\delta\left(\vec{p}-\vec{p_1}\right)$$

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：

力学量 F 在 Q 表象下的平均值可以表示为：$\overline{F}=\psi^H F_Q\psi$，

那么该力学量 F 在其自身表象下，平均值可以表示为 $\overline{F}={\psi_F}^H F_F\psi_F$，

ψ_F 是在 F 表象下的态矢，由于力学量是处于自身的表象中，因此矩阵 F_F 是一个对角阵，对角线上的元素是力学量 F 的本征值。

因此，我们可以将 F_Q 对角化，F_Q 可以表示为：$F_Q=U\Lambda U^H$，

矩阵 U 是由 F_Q 的本征值对应的本征向量张成的矩阵，该矩阵的列向量都是正交归一的。

Λ 是一个对角阵，对角线的元素就是 F_Q 的本征值，也就是力学量 F 在其自身表象中的本征值，因此有：

$$\overline{F}=\psi^H F_Q\psi=\psi^H U\Lambda U^H\psi=\psi^H UF_F U^H\psi={\psi_F}^H F_F\psi_F$$

此时有：$\psi_F=U^H\psi$，

因此，$U^H\psi$ 是一个列向量，此时列向量元素的模平方就是该力学量在自身表象中，处于各个本征态的概率。

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：角动量算符在自身表象下的矩阵表示为:

$$\begin{aligned} &\frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \\ 1/2 & \sqrt{2}/2 & 1/2 \\ -1/2 & \sqrt{2}/2 & -1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/2 & -1/2 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -1/\sqrt{2} & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}/2 & 1 & \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & -1 & \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/2 & -1/2 \\ 0 & \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \\ -1/\sqrt{2} & 1/2 & -1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hbar & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix} \end{aligned}$$

也可以直接根据本征值写出矩阵表达式:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hbar & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix} \quad 或 \quad \begin{pmatrix} -\hbar & 0 & 0 \\ 0 & \hbar & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad 或 \quad \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}$$

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

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

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

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

18. 将下列公式用狄拉克符号表示

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

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

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

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

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

解答

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

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

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

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

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

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

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

$$\langle n|m\rangle=\delta_{nm}$$

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

$$|\psi\rangle=\sum_n a_n|n\rangle=\sum_n|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

或者在位置表象中：

$$\langle x|\psi\rangle=\sum_n\langle x|n\rangle\langle n|\psi\rangle$$

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：

表象变换不改变算符的特征值，因此将 F^a 和 F^b 对角化后，对应的是同一个对角阵：

因此有：

$$\Lambda=A^HF^aA$$

$$\Lambda=B^HF^bB$$

其中 A 和 B 是将 F^a 和 F^b 对角化的酉矩阵，当 F^a 和 F^b 为已知时，A 和 B 可以由 F^a 和 F^b 的特征向量决定。

算符在 A 表象和 B 表象中的矩阵表示有如下关系：

$$F^b=S^HF^aS$$

从上面的描述可知:

$$B^H F^b B = A^H F^a A$$

因此有:

$$F^b = B A^H F^a A B^H$$

故而:

$$S = AB^H$$