量子力学假设

1) 波函数：完备地描述体系状态 $\psi(x,t=0)$

态叠加原理：体系可以处于不确定的状态

2) 波函数随时间演化行为 —— 动力学

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

不含时 $\hat{H}(x)$：$\psi(x,t)=\sum_n C_n\phi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$

3) 力学量 —— 量子力学算符

O —— $\hat{O}$

实验测量 $=\langle\hat{O}\rangle$

4) 测量假设

量子力学能够告诉我们：

一个被观测体系如何同按照经典规律运行的仪器之间相互作用

量子体系 $\longleftrightarrow$ 经典仪器

物理量和测量

1) 物理量：描述物理系统的特征可观测量

可观测量 ⟹ 可用数字表示

考虑一个单粒子体系，

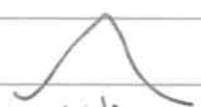
经典物理中：在t时刻测物理量A ⟹ 唯一的数a

量子力学中：

物理体系的波函数随时间演化是完全确定的

$$\begin{cases} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \hat{H}\psi(x,t) \\ \psi(x, t=t_0) \longrightarrow \psi(x,t) \end{cases}$$

• 但测量x和p的结果是完全不确定的



ψ(x)具有空间分布，无法把一个量子归结于空间中某个位置，我们只能谈及空间某处找到电子的几率

• 除x和p之外，我们还想知道其他物理量的信息。

⟹ 我们要通过"测量"来了解未知的物理体系的性质，要回答如下两个问题：

(1) 假设体系的波函数已知，$\psi(x,t)$，我们测量A，得到什么

(2) 完成一次测量之后，体系处于某个特定状态

⟹ 可否得到这个特定状态的全部信息

2) 测量 ——"仪器"

当一个经典仪器作用到被观测的量子体系(例如电子)上时

⇒ 进行一次操作

→ 目的:得到标志该客体的状态的一些物理量的数值

测量:与任何观测者无关的发生于经典仪器和量子系统之间的任一相互作用过程

经典仪器:(并非宏观对象)

在足够精确的范围内服从经典物理

同电子相互作用后,仪器的状态发生变化,此变化可测,可定量描述电子状态

量子测量的特性:

任何测量都不可避免地影响被测量对象——电子

在给定的测量精度范围内,原则上不可能使这种影响任意小

正相反,测量越精确 ——> 影响越大

只有精度极低的实验 ——> 影响才小

如果测量过程对客体的影响可以任意小,

⇒ 被测量的量本身具有与测量无关的定值

存在两种测量：

① 做了第1次测量之后，仪器给出确定的读数
再用同样仪器对同一客体做第2次测量，第3次测量，
仪器给出确定但不同的读数
（绝大多数测量属于这一类型）

② 与第1类测量相反，在做第1次测量之后，仪器给出确定读数
用同样仪器对同一客体做第2次，第3次测量，
仪器百分之百的几率给出同一确定的读数
（⟹ 可预测的测量）
此测量过程给出的读数是标志电子所处状态的一个方
⟹ 仅有第2种测量才是力学量的测量

在本课程中的力学量都是对应于第二种测量

物理学是个实验科学，要求
预测能力 和 可重复验证

我们用目前的测量结果去预言下次测量结果

~~我们通过测量来了解未知的物理体系的性质~~

~~(1) 假设体系的波函数已知，$\psi(x,t)$，我们对体系测量物理量A，得到什么结果？~~

~~(2) 完成一次测量后，体系处于某个特定状态.~~

~~$\Longrightarrow$ 可否得到这个特定状态的全部信息.~~

1. 测量过程

类似位置测量，对体系测量物理量A，

大部分情况下会得到一系列可能的结果 $\{a_i\}$

$\{a_i\}$ ： 离散 或 连续

（氢原子能级） （位置或动量 自由粒子）

几率密度 $\{P_i\}$ $\rho(a)$

N次测量后得到平均值或期待值

$$\langle a \rangle = \sum_i a_i P_i \quad 或 \quad \int a P(a)\, da$$

量子力学假设 $\psi(x,t)$ 包含体系所有的物理信息，所以我们可以用标符（测量）从 $\psi(x,t)$ 中提取 $\{a_i ; P_i\}$

2 实验现象

(2.1) 测量结果和几率

实验结果：$\{a_i\}$ 并不依赖于系统的波函数 $\Psi(x,t)$

测量值

完全由系统的性质决定

例如，测氢原子中电子束缚能级

$$\left\{-\frac{E_1}{n^2},\quad n=1,2,3\ldots\right\}$$

$E_1 \simeq 13.6\,eV$ ✓

我们始终只能得到一系列离散能级，

或许有某些能级测得几率近乎和或等于0，

但不会测得其他的能级，不管电子波函数 $\psi(x,t)$

为何种形式

⇒ 量子体系的性质

（粒子质量和势函数）

决定了所有可能的测量值 $\{a_i\}$，

体系的波函数决定了测量值出现的概率 $\{P_i\}$.

测量：提取 $\{a_i \mid P_i\}$

2.2 重复测量

一个体系处于 $\psi(x,t)$ 态,

在 t_1 时刻, 测 A $\Longrightarrow a_i$

在 $t_2 \to t_1+\varepsilon$ 时刻, 测 A $\Longrightarrow a_i$

(ε 小量)

在 $t_3 \to t_2+\varepsilon$ 时刻, 测 A $\Longrightarrow a_i$

说明:

在完成一次测量时, 体系的波函数发生了改变

$\psi(x,t) \longrightarrow \phi_i(x)$ $\hat{A}\phi_i(x) = a_i\phi_i(x)$

$\phi_i(x)$ 是 $\hat{A}$ ~~的与 a_i 相~~ 的本征函数,

对应于本征值 a_i

→ 几率为 1 (完全坍缩)

(仪器是经典的)

结论:

- 存在一个状态 $\phi_i(x)$, ~~在~~当体系处于 $\phi_i(x)$ 时, 测量 A 永远都会得到一个结果 ($P_i = 1$)
- 第一次测量所得的每个可能的值 a_i 都一定存在着一个波函数 $\phi_i(x)$, 使得在 $\phi_i(x)$ 描述的体系中测 A 始终都得到同一个值.

2.3) 测量后可能的结果是:

1) 物理量A对应算符$\hat{A}$的本征函数

$$\hat{A}\phi_\alpha(x) = a_\alpha \phi_\alpha(x)$$

当t时刻波函数是$\hat{A}$本征函数ϕ_α时, 测$\hat{A}$的值始终为a_α

$$\langle \hat{A} \rangle = a_\alpha = \int \phi_\alpha^*(x)\, \hat{A}\, \phi_\alpha(x)\, dx$$

故而, 测量物理量A将会得到$\hat{A}$的本征值a_i

某个

$$\text{测}A \longrightarrow a_i$$
$$\psi(x) \longrightarrow \phi_{a_i}$$

2) 多次测量平均值

相应几率 $(\sum_n P_n = 1)$

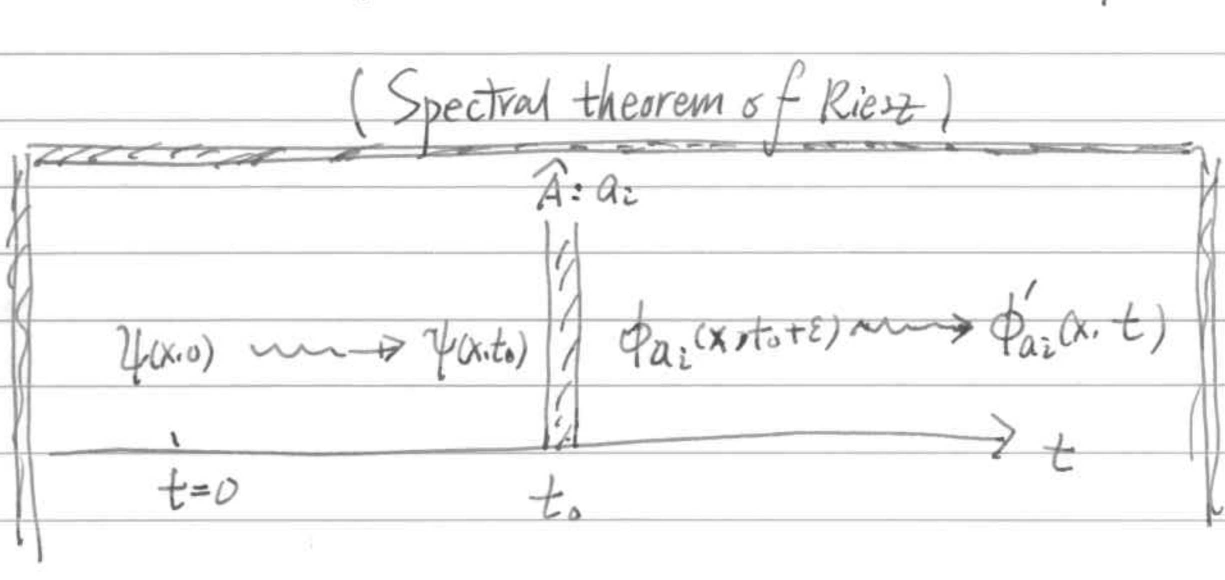
单次测量数值

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

$$P_n = \left| \int \phi_n^*(x)\, \psi(x)\, dx \right|^2$$

假设无简并
已归一化

(Spectral theorem of Riesz)



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

令 $\psi(x,t) = \sum_n C_n \phi_n(x)$ ， $\hat{A}\phi_n(x) = a_n \phi_n(x)$

则 $\langle \hat{A} \rangle = \int \left(\sum_m C_m^* \phi_m^*(x)\right) \hat{A} \left(\sum_n C_n \phi_n(x)\right) dx$

$$= \sum_{n,m} C_m^* C_n \int \phi_m^*(x) \hat{A} \phi_n(x)\, dx$$

$$= \sum_{n,m} C_m^* C_n a_n \underbrace{\int \phi_m^*(x)\, \phi_n(x)\, dx}_{\delta_{mn}}$$

$$= \sum_n a_n |C_n|^2$$

其中，$C_n = \int \phi_n^*(x)\, \psi(x,t)\, dx$

有简并时，$\psi(x,t) = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} C_n^i \phi_n^i(x,t)$ 　　g_n 是 a_n 的简并度

假设!!!

$$\psi(x,t) \xrightarrow{a_n} \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |C_n^i|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} C_n^i \phi_n^i(x,t)$$

测 $\hat{A}$ 得本征值 a_n 的几率

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |C_n^i|^2$$

在 a_n 有简并时，$P(a_n)$ 要与 $\{\phi_n^i\}$ $(i=1,2,\cdots,g_n)$ 中基矢选择无关

2.4 总结：单次测量和多次测量

通常情况下，每次测量都会改变体系的波函数，

（例外：体系波函数是测量操作的本征函数）

☆ 对一个体系，做单次测量并不会对我们了解测量前的体系波函数提供任何信息

⟹ 从测量中仅仅得到一个数 a_α

但这个数为我们提供了测量后体系的状态信息

因为波函数 $\psi(x) \rightarrow \phi_\alpha(x)$

⟹ 此测量可被视作"制备"具有某种物理特征 a_α 的物理体系的一种方法，

或 对所有可能的测量值的一种挑选

（量子测动量）

☆ 为了获得测量前体系的波函数 $\psi(x)$，

我们必须做多次测量；将 $\phi_\alpha(x) \longrightarrow \psi(x)$ 不现实

（不可逆）！！！

对大量处于相同状态 $\psi(x)$ 的独立量子体系（系综）

做相同测量

⟹ 确定所有 a_α 和相应的几率分布 P_α

可以证明：在全同实验的总次数 N 中，得到某一指定结果次数所占的比

在 $N\to\infty$ 时，非常逼近理论上预言该结果出现的几率 P。

设 $\langle A\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int\psi^*\hat{A}\psi\,dx$

简单起见，先考虑离散谱，在 $\psi(x)$ 中测 $\hat{A}$ 得 a_n 次数为 $N(a_n)$

$$\frac{N(a_n)}{N}\xrightarrow[N\to\infty]{} P(a_n),\quad 且\ \sum_n N(a_n)=N$$

此 N 次实验平均值 $\frac{1}{N}\sum_n a_n N(a_n)$

$$\langle A\rangle_\psi = \frac{1}{N}\sum_n a_n N(a_n)\xrightarrow{N\to\infty}\sum_n a_n P(a_n)$$

厄米称符的本征函数

1) 正交性

设 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n \cdots$ 是厄米称符 $\hat{O}$ 的归一化本征函数

相应本征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n, \cdots$

$\Longrightarrow$ 厄米称符本征函数的正交性

$$\int \psi_m^* \psi_n \, dx = \delta_{mn}$$

证明: $\hat{O}\psi_m = \lambda_m \psi_m, \quad \hat{O}\psi_n = \lambda_n \psi_n \quad (m \neq n)$

$$0 = \int \psi_m^* \hat{O} \psi_n \, dx - \int \psi_m^* \hat{O}^+ \psi_n \, dx \quad (\hat{O} = \hat{O}^+)$$

$$= \int \psi_m^* \hat{O} \psi_n \, dx - \int (\hat{O}\psi_m)^* \psi_n \, dx$$

$$= \int \psi_m^* \lambda_n \psi_n \, dx - \int \psi_m^* \lambda_m^* \psi_n \, dx$$

$$= (\lambda_n - \lambda_m) \int \psi_m^* \psi_n \, dx$$

$$\Longrightarrow \int \psi_m^* \psi_n = \begin{cases} 1 & m = n \quad \text{(归一化条} \\ 0 & m \neq n \end{cases}$$

2) 完备性

设任一连续函数 $f(x)$ 都可以按 $\{\psi_n(x)\}$ 展开为

$$f(x) = \sum_n C_n \psi_n(x)$$

其中系数 C_n 如下确定

$$\int \psi_m^*(x) f(x)\,dx = \int \psi_m^*(x)\left[\sum_n C_n \psi_n(x)\right] dx$$

$$= \sum_n C_n \int \psi_m^*(x)\psi_n(x)\,dx$$

假设积分和求和顺序可交换　　正交归一关系

$$= \sum_n C_n \delta_{nm}$$

$$= C_m$$

3) 封闭性 (在表象变换理论中这称为一些本征函数求和中有用)

$$\boxed{\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') = \delta(x-x')}$$

本征函数组可构成一个 δ 函数

封闭性是正交归一的本征函数完备性的充分必要条件

若 $\psi_n(x)$ 是完备的 $\xrightarrow{\text{必有}}$ 封闭性 (必要条件)

若 $\psi_n(x)$ 具有封闭性 $\xrightarrow{\text{则是}}$ 完备的 (充分条件)

证明.

1) 必要条件

$$f(x) = \sum_n C_n \psi_n(x)$$

其中 $C_n = \int \psi_n^*(x') f(x') dx'$

$$\Rightarrow f(x) = \sum_n \left[\int \psi_n^*(x') f(x') dx' \right] \psi_n(x)$$

$$= \int f(x') \left[\sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') \right] dx'$$

因为 $f(x)$ 是任意函数，所以

$$\sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') = \delta(x-x')$$

2) 充分条件：

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

$$= \int \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') f(x') dx'$$

$$= \sum_n \psi_n(x) \underbrace{\int \psi_n^*(x') f(x') dx'}$$

$$= \sum_n C_n \psi_n(x)$$

任一函数 $f(x)$ 都有按 $\{\psi_n(x)\}$ 展开，因而 $\{\psi_n(x)\}$ 是完备的

注意：本征函数的封闭性也可视作为 δ(x) 函数按本征函数展开而展开系数恰为本征函数的复共轭。

$$\delta(x-x') = \sum_n \psi_n(x) \underbrace{\psi_n^*(x')}_{\underline{C_n}}$$

$$C_n^{x'} = \int \psi_n^*(x)\, \delta(x-x')\, dx = \psi_n^*(x')$$

具有连续谱的本征函数

*) 厄米算符的本征谱是连续的，其本征函数无法按照通常方法归一化，但本征函数基本性质依然成立

(本征值的实数性，本征函数正交归一性，完备性和封闭性)

1) 动量本征函数

本征方程 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_p(x) = p\psi_p(x)$

$$\Rightarrow \psi_p(x) = A e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

A → 待定常数

(自由粒子波函数

本征值 p 是连续变化的实数 ~~$\psi_p(x)$~~

本征函数集合 $\{\psi_p(x)\}$ 连续谱

① 概率密度

$$|\psi_p(x)|^2 = |A|^2 |e^{\frac{i}{\hbar}px}|^2 = |A|^2 \sim \text{常数}$$

⇒ 自由粒子在空间所有位置出现几率相等

而且，无法归一化

$$\int |\psi_p(x)|^2 dx = |A|^2 \int dx \longrightarrow \infty$$

类似离散谱的正交性讨论.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{p'}^{*}(x)\, \psi_p(x)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} A^{*} e^{-\frac{i}{\hbar}p'x} A e^{\frac{i}{\hbar}px} dx$$

$$= |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x} dx$$

$$= |A|^2 \left[2\pi\hbar\, \delta(p-p')\right]$$

我们取 $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ 可得

$$\begin{cases} \int \psi_{p'}^{*}(x)\, \psi_p(x)\, dx = \delta(p-p') \\ \psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px} \end{cases}$$

在上述波函数中 p 和 x 地位对称, 则有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_p^{*}(x')\, \psi_p(x)\, dp = \delta(x'-x)$$

$\Rightarrow$ 动量本征函数的封闭性

② 动量本征函数的完备性

定义在 $(-\infty, +\infty)$ 内的任意连续函数 $f(x)$，有

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} C(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px}\, dp$$

展开系数

完备性

$p=\hbar k$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar C(p)\, e^{ikx}\, dk$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\sqrt{2\pi\hbar}\, C(p)}_{\text{是 } f(x) \text{ 的付立叶变换}}\, e^{ikx}\, dk$$

展开系数 $\Rightarrow$

$$C(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}px}\, dx$$

③ 三维情况

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

正交性：$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{\vec{p}'}(\vec{r})\, \psi_{\vec{p}}(\vec{r})\, d\vec{r} = \delta(\vec{p}-\vec{p}')$

封闭性：$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{\vec{p}}(\vec{r})\, \psi_{\vec{p}}(\vec{r}')\, d\vec{p} = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$

2) 坐标本征函数

$$\hat{x}\,\delta(x-x_0)=x_0\,\delta(x-x_0)$$

因为 $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x)dx = f(0)$，（$f(x)$ 是连续函数）

令 $f(x)=x$，则 $\int_{-\infty}^{+\infty} x\delta(x)\,dx=0$

两种情况：$\begin{cases} x\delta(x)=0 \\ \text{奇函数：正负面积相消} \end{cases}$

因为 $x\delta(x)$ 仅在 $x=0$ 处不为 0，故第1种情况 ✓

$$x\delta(x)=0 \xrightarrow{x\to x-x_0} (x-x_0)\delta(x-x_0)=0$$

即 $\hat{x}\,\delta(x-x_0)=x_0\,\delta(x-x_0)$（$\hat{x}$ 本征方程）

因 x_0 是连续、并可取任意实数，

故而 $\delta(x-x_0)$ 对于 x_0 的连续变化构成

本征函数集 $\{\delta(x-x_0)\}$

① $\hat{x}$ 本征函数的正交归一性.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-x_1)\delta(x-x_2)\,dx = \delta(x_1-x_2)$$

归一于δ函数

连续谱的共同特征

② $\hat{x}$ 本征函数的完备性

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x')\delta(x-x')\,dx'$$

展开系数即为函数 $f(x')$ 本身

③ $\hat{x}$ 本征函数的封闭性

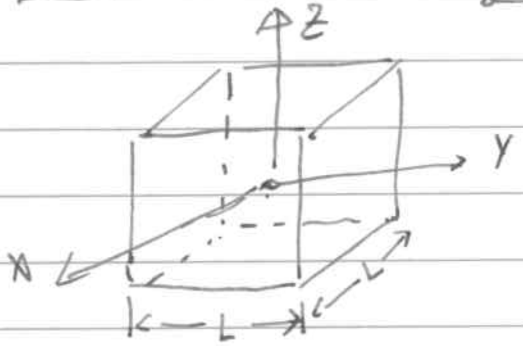
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x'-x_0)\delta(x-x_0)\,dx_0 = \delta(x'-x)$$

箱归一化：(具有分立谱的动量本征函数)

在具体问题中，将动量连续谱变成分立谱进行计算

连续谱 $\longrightarrow$ 离散谱 $\xrightarrow[\text{本征值间距}]{\Delta p\to 0}$ 连续谱

例如：设粒子自由处于边长为 L 的正立方箱子中



取箱中心为原点

x 方向：动量本征函数

$$\psi = A e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

归一化

$$\int_{-L/2}^{L/2} |\psi(x)|^2 dx = |A|^2 \int_{-L/2}^{L/2} dx = |A|^2 L = 1$$

$$\Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{L}}$$

故

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

1) 利用边界条件 → 确定本征值 P_x.

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi^* \hat{P}_x \phi \, dx = -i\hbar (\psi^* \phi) \Big|_{-L/2}^{L/2} + \int_{-L/2}^{L/2} (\hat{P}_x \psi)^* \phi \, dx$$

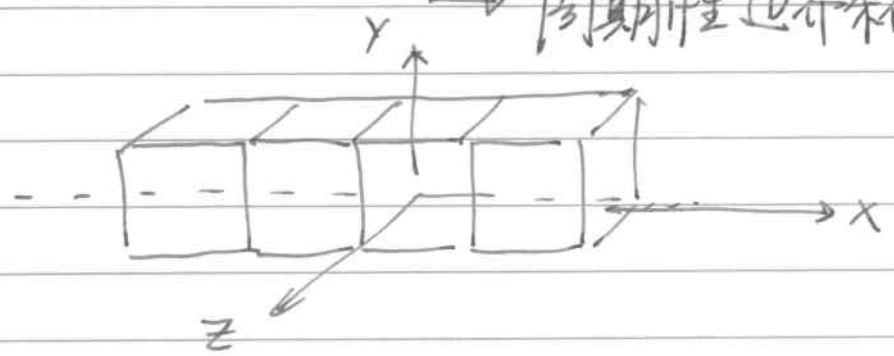
$\hat{P}_x$ 厄米性要求，~~对~~

对任意 ψ 和 ϕ，都有 $(\psi^* \phi) \Big|_{-L/2}^{L/2} = 0$

令 $\phi = \psi$，~~则有 且使其为~~ $\hat{P}_x$ 本征函数

$$\Rightarrow \quad \left|\psi(-\tfrac{L}{2})\right| = \left|\psi(\tfrac{L}{2})\right|$$

→ 周期性边界条件



$$\psi(-\tfrac{L}{2}) = \psi(\tfrac{L}{2})$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{\hbar} p(-\frac{L}{2})} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{\hbar} p(\frac{L}{2})} \Rightarrow e^{\frac{i}{\hbar} pL} = 1$$

$$\Rightarrow \frac{pL}{\hbar} = 2n\pi \quad \Rightarrow P_n = \frac{2\pi\hbar n}{L} = \frac{h}{L} n$$

$n = 0, \pm1, \pm2, \cdots$ $\qquad$ $n = 0, \pm1, \pm2, \cdots$

注意：周期性边界条件 $\Longrightarrow$ P_n 离散化

本征值间隔 $\Delta P_n = \frac{h}{L}$ (与L成反比)

当 $L\to\infty$ 时，$\Delta P_n \to 0$

分立谱 $\to$ 连续谱

☆ 离散的动量本征函数

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{\hbar}P_n x} = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{i\frac{2\pi n}{L}x}$$

正交归一性：

$$\int_{-L/2}^{L/2} \psi_n^*(x)\psi_m(x)\,dx = \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} e^{i\left[\frac{2\pi(n-m)}{L}x\right]}dx = \underline{\underline{\delta_{nm}}}$$

☆ 本征函数的封闭性和完备性

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x')\psi_n(x) = \cancel{\sum_{n=-\infty}^{+\infty}\frac{1}{L}e^{\frac{i}{\hbar}P_n(x-x')}}$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{+\infty}\frac{1}{L}e^{\left(-\frac{i}{\hbar}P_n x'\right)} e^{\frac{i}{\hbar}P_n x}$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{+\infty}\frac{1}{L}e^{\frac{i}{\hbar}P_n(x-x')}$$

$$P_n \to P$$

令 $L\to\infty$，$\Delta P_n = \frac{h}{L} \to dP$，即 $\frac{1}{L} \to \frac{dP}{h}$

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \cdots \Delta P_n \xrightarrow{L\to\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots dP$$

故. $$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x')\psi_n(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar}P_n(x-x')} \left(\frac{\Delta P_n}{h}\right)$$

$$\xrightarrow{L\to\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{h} e^{\frac{i}{\hbar}P(x-x')} dP = \delta(x-x')$$

即 满足封闭性

完备性：

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x')\underbrace{\delta(x'-x)}_{L\to\infty} dx'$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} f(x')\left[\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x')\psi_n(x)\right] dx'$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x') f(x') dx'\right] \psi_n(x)$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n \psi_n(x),$$ 其中 $C_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x') f(x') dx'$

例子: 自由粒子一高斯波包

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) \\ \psi(x,0) = \left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}ax^2} \end{cases}$$

S.E. 离散解.

$$\psi_n(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} = \frac{1}{\sqrt{L}}\, e^{\frac{i}{\hbar}p_n x}\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m}$$

也就 自由粒子波包为

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n \psi_n(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$C_n = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\,\psi(x,0)\,dx$$

$$k_n = \frac{2\pi n}{L},\ n=0,$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{L}}\right)\left(\frac{a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}ax^2 - ik_n x}\,dx$$

$$\cancel{\Rightarrow \psi(x,t) = \left(\frac{4\pi}{a}\right)} = \left(\frac{4\pi}{aL^2}\right)^{1/4} e^{-\frac{k_n^2}{2a}}$$

$$\Rightarrow \psi(x,t) = \left(\frac{4\pi}{a}\right)^{1/4} \sum_n \frac{1}{L}\, e^{-\frac{k_n^2}{2a}}\, e^{\frac{i}{\hbar}p_n x}\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$ (离散谱

$$\xrightarrow{L\to\infty} \left(\frac{1}{4a\pi^3}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{\left(-\frac{k^2}{2a} + ikx - \frac{\hbar t}{2m}k^2\right)}\,dk$$

(连续谱波包)