

《量子力学教程》习题解答

郑锦阳

2023 年 6 月 24 日

目录

1	波函数与薛定谔方程	2
1.1	波函数的统计诠释	2
1.2	力学量算符	2
1.3	薛定谔方程	3
1.4	一维粒子的	3
2	一维势场中的粒子	9
2.1	一维势场中粒子能量本征态的一般性质	9
2.2	方势	11
2.3	δ 势	14
2.4	一维谐振子	16
3	力学量用算符表达	18
3.1	算符的运算规则	18
3.1.1	线性算符	18
3.1.2	算符之和	18
3.1.3	算符之积	18
3.1.4	角动量的对易式	19
3.1.5	逆算符	20
3.1.6	算符的函数	20
3.1.7	转置算符	21
3.1.8	复共轭算符与 Hermitian 共轭算符	21
3.1.9	转置并取复共轭	22
3.2	Hermitian 算符的本征值与本征函数	23
3.2.1	涨落	23
3.2.2	本征态	23
3.2.3	本征态简并	23
3.3	共同本征函数	25
4	力学量随时间的演化与对称性	27
4.1	守恒量	27

5 中心力场	30
5.1 角动量算符	31
A 常用物理学常量	32
B 常用数学工具	32
B.1 Fourier 变换	32
B.2 δ 函数	33
B.3 Kronecker 函数	33
B.4 Laplace 变换	33
B.5 Hermite 多项式	34
B.6 常用积分公式	34
B.7 求矩阵的逆矩阵	34

1 波函数与薛定谔方程

1.1 波函数的统计诠释

微观粒子具有显著的波粒二象性，其波长和频率分别为：

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad \nu = \frac{E}{h}$$

所以能用平面波函数来描述微观粒子的运动状态¹

$$\psi_{\vec{p}} = A \exp \left[\frac{i}{\hbar} (\vec{p} \cdot \vec{r} - Et) \right]$$

- 一般波函数具有常数因子不定性： $\psi(\vec{r}, t)$ 和 $A\psi(\vec{r}, t)$ 描述的是同一个量子态
- 一般波函数具有位相因子不定性： $\psi(\vec{r})$ 和 $\psi(\vec{r})e^{i\alpha}$ 描述的是同一个量子态

规范波函数必须在全空间满足归一化：

$$\iiint |\psi(\vec{r})|^2 dx dy dz = 1$$

1.2 力学量算符

与经典力学不同，微观粒子显著的波粒二象性使得我们无法其测量力学量的瞬时值，无论是多精密的仪器，其对力学量 Q 的测量，本质上都是测量 Q 在极短时间内的平均值。我们以坐标 x 和动量 p 为例，对这二者的测量结果（也就是平均值）分别可以写成

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

再结合经典力学的知识，所有力学量本质上都是坐标 x 和动量 p 的函数，所以对于任意力学量的测量结果可以写成

$$\langle Q \rangle = f(x, p)$$

在量子理论中，我们把这种测量操作称为“算符”，写成 \hat{Q} 的形式，下面是几种常用力学量的算符形式

¹表达式中各变量的含义在后续内容中会详细介绍，这里只是引出概念

- 动量算符

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla \quad \vee \quad \begin{cases} \hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx} \\ \hat{p}_y = -i\hbar \frac{d}{dy} \\ \hat{p}_z = -i\hbar \frac{d}{dz} \end{cases}$$

- 动能算符

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} (-i\hbar\nabla)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

- Hamilton 算符

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

- 角动量算符

$$\hat{l} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{r} \times (-i\hbar\nabla) = -i\hbar (\mathbf{r} \times \nabla) = -i\hbar \begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$$

1.3 薛定谔方程

薛定谔通过类别和最小作用量原理，推导出了微观粒子的波动方程（即含时薛定谔方程）

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi(r, t)$$

我们在此基础上把波函数改写成分离变量的形式 $\Psi(r, t) = \psi(r)\varphi(t)$

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} \psi(r) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r)\varphi(t)$$

整理方程，使得等号左侧仅与时间 t 有关，等号右侧仅与位置 r 有关，两边完全独立

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)$$

这两个无关式子相等的条件是两侧都等于某个常数 E

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = E\psi(r)$$

这就是定态薛定谔方程（能量本征方程、哈密顿算符本征方程）

1.4 一维粒子的

对于处在定态的一维粒子，其 Hamilton 算符的期望值（本征值）和标准差分别为

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dx = \int \psi^* E \psi dx = E \int \psi^* \psi dx = E$$

$$\langle \hat{H}^2 \rangle = \int \psi^* \hat{H}^2 \psi dx = \int \psi^* \hat{H} (\hat{H} \psi) dx = E \int \psi^* \hat{H} \psi dx = E^2 \int \psi^* \psi dx = E^2$$

$$\hat{\sigma}_H = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2} = \sqrt{E^2 - E^2} = 0$$

例题

证明规范波函数的归一化不随时间变换, 即证明:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 0$$

证明. 先交换微分算符 $\frac{\partial}{\partial t}$ 和积分算符 $\int dx$ 的顺序

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial(\psi\psi^*)}{\partial t} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{\partial\psi}{\partial t} \psi^* + \frac{\partial\psi^*}{\partial t} \psi \right) dx$$

再根据薛定谔方程代换因式 $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ 及其复共轭形式 $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi}{\partial t} &= +\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V\psi \\ \frac{\partial\psi^*}{\partial t} &= -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V\psi^* \end{aligned}$$

量子力学中的势能都是实数 (即 $V^* = V$)

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

最后根据规范波函数的性质 $\psi(-\infty) = 0, \psi(+\infty) = 0$, 说明上式为零

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 0$$

这说对规范波函数的归一化求导不随时间改变

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = \text{Const}$$

□

题目 1

求与下列各粒子相关的 de Broglie 波波长:

- (1) 能量为 100 电子伏特的自由电子;
- (2) 能量为 0.1 电子伏特的自由中子;
- (3) 能量为 0.1 电子伏特、质量为 1 克的自由粒子;
- (4) 温度 $T = 1\text{K}$ 时, 具有动能 $E = \frac{3kT}{2}$ 的氢原子, 其中 k 为玻尔兹曼常数.

解答 根据粒子的动能与动量之间的关系

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad (1)$$

结合德布罗意波长的表达式

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad (2)$$

(1) 题设自由电子的德布罗意波波长为

$$\lambda_e = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_e}} = 1.23 \times 10^{-10} \text{ m}$$

(2) 题设自由中子的德布罗意波波长为

$$\lambda_n = \frac{h}{\sqrt{2m_n E_n}} = 9.04 \times 10^{-11} \text{ m}$$

(3) 题设自由粒子的德布罗意波波长为

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = 1.17 \times 10^{-22} \text{ m}$$

(4) 氦原子包含 2 个中子和 2 个质子，其德布罗意波波长为

$$\lambda_{\text{He}} = \frac{h}{\sqrt{2m_{\text{He}} E_{\text{He}}}} = \frac{h}{\sqrt{2 \cdot m_{\text{He}} \cdot \frac{3}{2} kT}} = \frac{h}{\sqrt{3 \cdot (4m_n) \cdot \frac{3}{2} kT}} = 1.25 \times 10^{-9} \text{ m}$$

题目 2

设一电子被电势差 U 所加速，最后打在靶上。若电子的动能转化为一光子，求当这光子相应的光波波长分别为 5000\AA （可见光）， 1\AA （X 射线）， 0.001\AA （ γ 射线）时，加速电子所需的电势差各是多少？

解答 电子被加速后获得的动能为 $E_k = eU$ ，动能转化形成的光子能量为 $E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$ ，所以加速用的电势差 U 可以表示为

$$U = \frac{hc}{e\lambda} = \frac{hc}{e} \cdot \frac{1}{\lambda} = \frac{1.24 \times 10^{-6}}{\lambda}$$

(1) 当光子对应的光波波长为 5000\AA 时，电势差为

$$U = \frac{1.24 \times 10^{-6}}{\lambda} = \frac{1.24 \times 10^{-6}}{5000 \times 10^{-10}} = 2.48 \text{ V}$$

(2) 当光子对应的光波波长为 1\AA 时，电势差为

$$U = \frac{1.24 \times 10^{-6}}{\lambda} = \frac{1.24 \times 10^{-6}}{10^{-10}} = 1.24 \times 10^4 \text{ V}$$

(3) 当光子对应的光波波长为 0.001\AA 时，电势差为

$$U = \frac{1.24 \times 10^{-6}}{\lambda} = \frac{1.24 \times 10^{-6}}{0.001 \times 10^{-10}} = 1.24 \times 10^7 \text{ V}$$

练习 5

设用球坐标表示，粒子波函数表为 $\psi(\rho, \theta, \varphi)$ ，求：

- (1) 粒子在球壳 $(r, r + dr)$ 中被测到的概率；
- (2) 在 (θ, φ) 方向的立体角元 $d\Omega$ 中找到粒子的概率。

解答 粒子在 $(r \rightarrow r + dr, \theta \rightarrow \theta + d\theta, \varphi \rightarrow \varphi + d\varphi)$ 范围内被探测到的概率为

$$P = |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$$

(1) 粒子在球壳 $(r, r + dr)$ 中被测到的概率为

$$P = \left[\int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 d\varphi \right] r^2 dr$$

(2) 在 (θ, φ) 方向的立体角元内找到粒子的概率为

$$P = \left[\int_0^\infty |\psi|^2 r^2 dr \right] d\Omega = \left[\int_0^\infty |\psi(r, \theta, \varphi)|^2 r^2 dr \right] \sin \theta d\theta d\varphi$$

习题 20

设 $\varphi(x) = Ax(a - x)$, 其中 $0 \leq x \leq a$, 求:

(1) 归一化常数 A

(2) 在何处找到粒子的概率最大?

解答 (1) 让波函数在全空间归一化

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = \int_0^a |\varphi(x)|^2 dx = \int_0^a |Ax(a - x)|^2 dx = |A|^2 \left(\frac{1}{5}x^5 - \frac{1}{2}ax^4 + \frac{1}{3}a^2x^3 \right)_0^a = 1$$

解得

$$A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}$$

(2) 粒子的概率密度为

$$\rho(x) = |Ax(a - x)|^2 = \frac{30}{a^5} x^2 (a - x)^2$$

对概率密度求导, 寻找极值点

$$\rho'(x) = \frac{30}{a^5} [4x^3 - 6ax^2 + 2a^2x] = \frac{60}{a^5} x(2x - a)(x - a)$$

因此, $\rho(x)$ 在 $(0, \frac{a}{2})$ 上单调递增, 在 $(\frac{a}{2}, a)$ 上单调递减, 在极大值点 $x = \frac{a}{2}$ 附近找到粒子的概率最大.

习题 21

若粒子只在一维空间中运动, 它的状态可用波函数

$$\psi(x, t) = \begin{cases} A \sin \frac{\pi x}{a} e^{-\frac{i}{\hbar} Et}, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

来描述, 式中 E 和 a 分别为确定的常数, 而 A 是任意常数, 求:

(1) 归一化的波函数;

(2) 概率密度 $w(x, t)$;

(3) 在何处找到粒子的概率最大?

(4) \bar{x} 和 $\overline{x^2}$ 的值.

解答 (1) 先将波函数归一化

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = \int_0^a \left| A \sin \frac{\pi x}{a} \right|^2 dx = \int_0^a \frac{A^2}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a} \right) dx = \int_0^a \frac{A^2}{2} dx = 1$$

解得

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

所以波函数为

$$\psi(x, t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} e^{-\frac{i}{\hbar} E t}, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

(2) 概率密度 $w(x, t)$ 为

$$w(x, t) = \psi(x, t)^* \psi(x, t) = \begin{cases} \frac{2}{a} \sin^2 \frac{\pi x}{a}, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

(3) 对概率密度函数求导, 寻找极值点

$$\frac{\partial w(x, t)}{\partial x} = \begin{cases} \frac{2\pi}{a^2} \sin \frac{2\pi x}{a}, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

综上, $w(x, t)$ 在 $(0, \frac{a}{2})$ 上单调递增, 在 $(\frac{a}{2}, a)$ 上单调递减, 在极大值点 $x = \frac{a}{2}$ 附近找到粒子的概率最大.

(4) 求物理量 $g(x)$ 均值的通用公式是

$$\overline{g(x)} = \int_{-\infty}^{+\infty} w(x) g(x) dx$$

参考常用积分公式B.6, 分别有

$$\bar{x} = \int_0^a \frac{x}{a} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a} \right) dx = \left(\frac{x^2}{2a} - \frac{a^2}{4\pi^2} \cos \frac{2\pi x}{a} + \frac{ax}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{a} \right) \Big|_0^a = \frac{a}{2}$$

$$\overline{x^2} = \int_0^a \frac{x^2}{a} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a} \right) dx = \left(\frac{x^3}{3a} - \frac{x^2}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{a} - \frac{ax}{2\pi^2} \cos \frac{2\pi x}{a} + \frac{a^3}{4\pi^3} \sin \frac{2\pi x}{a} \right) \Big|_0^a = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2\pi^2}$$

题目 1.3

对于一维自由粒子:

(a) 设波函数为 $\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$, 试用 Hamilton 算符 $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ 对 $\psi_p(x)$ 运算,

验证 $\hat{H}\psi_p(x) = \frac{p^2}{2m}\psi_p(x)$. 说明动量本征态 $\psi_p(x)$ 也是 Hamilton 量 (能量) 本征态, 本征

值为 $E = \frac{p^2}{2m}$.

(b) 设粒子在初始 ($t=0$) 时刻 $\psi(x, 0) = \psi_p(x)$, 求 $\psi(x, t)$.

(c) 设波函数为 $\psi(x) = \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \int e^{ipx/\hbar} dp$, 可以看成是无穷多个平面波 e^{ipx} 的叠加, 即无穷多个动量本征态 e^{ipx} 的叠加. 试问 $\psi(x) = \delta(x)$ 是否是能量本征态?

(d) 设粒子在 $t = 0$ 时刻 $\psi(x, 0) = \delta(x)$, 求 $\psi(x, t)$.

解答 一维自由粒子只有动能 $E_p = \frac{p^2}{2m}$, 没有势能 $V(x)$

(a) 我们将 Hamilton 算符作用于波函数

$$\hat{H}\psi_p(x) = -\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{ip}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} = \frac{p^2}{2m} \psi_p(x)$$

这说明动量本征函数 $\psi_p(x)$ 也是 Hamilton 算符的本征函数, 且本征值为 $E = \frac{p^2}{2m}$

(b) 粒子在初始时刻的波函数为

$$\psi(x, 0) = \psi_p(x) = e^{ip_0x/\hbar}$$

在此基础上再添加时间因子, 就能得到粒子在任意时刻的波函数

$$\psi(x, t) = e^{ip_0x/\hbar} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = e^{i(p_0x/\hbar - E t)}$$

(c) 对于自由粒子而言, 动量本征态和能量本征态是等价的, 但是题目中的 $\psi(x, 0) = \delta(x)$ 是无穷多个动量本征态 e^{ipx} 的叠加 (即所谓叠加态), 所以显然不是能量本征态。

习题 12

由下列两个定态波函数计算几率流密度:

$$(1) \psi_1(r) = \frac{A}{r} e^{ikr}$$

$$(2) \psi_2(r) = \frac{A}{r} e^{-ikr}$$

从所得结果证明 $\psi_1(r)$ 表示向外传播的球面波, $\psi_2(r)$ 表示向内 (即向原点) 传播的平面波。

解答 概率流密度的表达式为²

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \quad (3)$$

本题比较简单, 两个定态波函数仅与 r 有关, 由此分别计算概率流密度

$$\vec{j}_1(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2m} \left\{ \left(\frac{A}{r} e^{-ikr} \cdot \frac{A}{r} e^{ikr} ik \right) - \left[\frac{A}{r} e^{ikr} \cdot \frac{A}{r} e^{-ikr} (-ik) \right] \right\} \vec{e}_r = \frac{\hbar}{m} \frac{A^2 k}{r^2} \vec{e}_r$$

$$\vec{j}_2(\vec{r}) = -\frac{i\hbar}{2m} \left\{ \left[\frac{A}{r} e^{ikr} \cdot \frac{A}{r} e^{-ikr} (-ik) \right] - \left(\frac{A}{r} e^{-ikr} \cdot \frac{A}{r} e^{ikr} ik \right) \right\} \vec{e}_r = -\frac{\hbar}{m} \frac{A^2 k}{r^2} \vec{e}_r$$

综上, $\psi_1(r)$ 表示向外传播的球面波, $\psi_2(r)$ 表示向内 (即向原点) 传播的平面波。

²直角坐标系中的 ∇ 算符为

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \vec{e}_x + \frac{\partial}{\partial y} \vec{e}_y + \frac{\partial}{\partial z} \vec{e}_z$$

球坐标系中的 ∇ 算符为

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial r} \vec{e}_r + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{e}_\varphi$$

2 一维势场中的粒子

2.1 一维势场中粒子能量本征态的一般性质

设质量为 m 的粒子沿 x 方向运动, 势能为 $V(x)$, 波函数为 $\Psi(x, t)$, 其薛定谔方程为

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x, t) \quad (4)$$

分离变数 $\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$, 并考虑仅包含 $\psi(x)$ 的部分

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (5)$$

这也是一维粒子的能量本征方程 (也叫定态薛定谔方程、哈密顿算符本征方程). 在量子力学中, 我们一般默认 $V(x)$ 取实值, 即

$$V^*(x) = V(x) \quad (6)$$

定理 2.1. 设 $\psi(x)$ 是方程 (5) 的一个解, 对应的能量本征值为 E , 则 $\psi^*(x)$ 也是方程的一个解, 对应的能量也是 E .

证明. 对 ψ 的能量本征方程两边取复共轭

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

这就是 $\psi^*(x)$ 的能量本征方程, 且能量本征值为 E . □

定理 2.2. 对于能量的某个本征值 E , 总可以找到方程 (5) 的一组实数解, 凡是属于 E 的任何解, 均可表示为这一组实解的线性叠加.

证明. 根据定理2.1, 只要 $\psi(x)$ 是能量本征值 E 的解, 那 $\psi^*(x)$ 也必定是能量本征值 E 的解, 再利用二者的线性叠加构造出实解³

$$\varphi(x) = \psi(x) + \psi^*(x), \quad \chi(x) = -i[\psi(x) - \psi^*(x)]$$

实际上, 这组实数解和复数解是等效的⁴ 所以能用这组用实数解的线性叠加表示所有解

$$\psi = \frac{1}{2}(\varphi + i\chi), \quad \psi^* = \frac{1}{2}(\varphi - i\chi)$$

□

定理 2.3. 设 $V(x)$ 具有空间反射不变性, $V(-x) = V(x)$. 如 $\psi(x)$ 是方程 (5) 的对应于能量本征值 E 的解, 则 $\psi(-x)$ 也是方程 (5) 的对应于能量 E 的解.

³复数解可以写为三角函数的形式

$$\psi(x) = A \cos kx + iB \sin kx$$

$$\psi^*(x) = A \cos kx - iB \sin kx$$

所以叠加态的实数解可以写为

$$\varphi(x) = \psi(x) + \psi^*(x) = 2A \cos kx$$

$$\chi(x) = -i[\psi(x) - \psi^*(x)] = 2B \sin kx$$

⁴根据态叠加原理, 对叠加态 $\varphi(x)$ 和 $\chi(x)$ 进行能量测量, 二者就会塌缩成能量本征态 $\psi(x)$ 或 $\psi^*(x)$, 相应的测量结果也会是能量本征值 E

证明. 二阶微分运算显然满足空间反射不变性

$$\frac{d^2}{d(-x)^2} \rightarrow \frac{d^2}{dx^2},$$

又已知势能函数具有空间反射不变性 $V(-x) = V(x)$

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

显然量子态 $\psi(-x)$ 也满足能量本征方程, 且能量本征值也是 E . □

定理 2.4. 设 $V(x) = V(-x)$, 则对应于任何一个能量本征值 E , 总可以找到方程组 (5) 的一组解 (每一个解都有确定的宇称), 而属于能量本征值 E 的任何解, 都可用它们来展开.

证明. 已知同属本征值 E 的一组解是 $\psi(x)$ 和 $\psi(-x)$, 我们可以通过线性叠加构造出任意一组解

$$f(x) = \psi(x) + \psi(-x), \quad g(x) = \psi(x) - \psi(-x)$$

而 $f(x)$ 和 $g(x)$ 各自具有确定的宇称, 不妨令

$$f(-x) = f(x), \quad g(-x) = -g(x)$$

由此反解出 $\psi(x)$ 和 $\psi(-x)$ 的线性表示

$$\psi(x) = \frac{1}{2}[f(x) + g(x)], \quad \psi(-x) = \frac{1}{2}[f(x) - g(x)]$$

实际上, 一个实变函数 $\psi(x)$ 总可以分解为偶函数 $f(x)$ 和奇函数 $g(x)$ 的和. □

定理 2.5. 对于阶梯形方势

$$V(x) = \begin{cases} V_1, & x < a \\ V_2, & x > a \end{cases}$$

如果 $(V_2 - V_1)$ 有限, 则能量本征方程 $\psi(x)$ 及其导数 $\psi'(x)$ 必定是连续的.

证明. 对能量本征方程 (定态薛定谔方程) 两边同乘 dx

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

对于 $\forall \varepsilon > 0$, 我们在区间 $[a - \varepsilon, a + \varepsilon]$ 上对 x 积分

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} d \left[\frac{d\psi(x)}{dx} \right] = -\frac{2m}{\hbar} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} [E - V(x)]\psi(x) dx$$

对两边取极限 $\varepsilon \rightarrow 0$, 得到无限窄区间

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} d[\psi'(x)] = -\frac{2m}{\hbar} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} [E - V(x)]\psi(x) dx$$

方程右侧 $[E - V(x)]\psi(x)$ 是有限的, 所以在无限窄区间上的积分只能为零, 进而有

$$\psi'(a + 0^+) - \psi'(a - 0^+) = 0$$

这说明一阶导函数 $\psi'(x)$ 在跳跃点 $x = a$ 处存在, 一阶导函数连续, 所以原函数 $\psi(x)$ 必定连续. □

定理 2.6. 对于一维粒子, 设 $\psi_1(x)$ 与 $\psi_2(x)$ 均为方程 (5) 的属于同一能量 E 的解, 则

$$\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1' = \text{Const}$$

且与 x 无关.

证明. 这两个量子态的能量本征方程分别为

$$\begin{aligned}\psi_1'' &= -\frac{2m}{\hbar}[E - V(x)]\psi_1 \\ \psi_2'' &= -\frac{2m}{\hbar}[E - V(x)]\psi_2\end{aligned}$$

两式相除、整理、凑微分

$$\psi_1\psi_2'' - \psi_2\psi_1'' = (\psi_2'\psi_1 - \psi_2\psi_1')' = 0$$

两边积分得到

$$\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1' = \text{Const}$$

□

定理 2.7. 设粒子在规则势场 $V(x)$ 中运动, 如存在束缚态, 则必定是不简并的.

证明. 设能量本征方程的束缚态解存在简并, 即不同的量子态 ψ_1 和 ψ_2 同时具有能量本征值 E

$$\psi_1\psi_2' = \psi_2\psi_1'$$

分离变量的形式为

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2}$$

两边同时积分得到

$$\psi_1(x) = C\psi_2(x)$$

这说明两个束缚态解实际上描述同一个量子态, 也即能级不简并.

□

2.2 方势

P32 练习: 一维无限深方势阱问题

试取无限深方势阱的中心为坐标原点, 即

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| < \frac{a}{2} \\ \infty, & |x| \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

证明粒子的能量仍为

$$E = E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

但波函数表示为

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{a}{2}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n = 1, 3, 5, \dots, \quad |x| < \frac{a}{2} \\ \sqrt{\frac{a}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n = 2, 4, 6, \dots, \quad |x| < \frac{a}{2} \\ 0, & |x| \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

解答 粒子的定态薛定谔方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

由此得到粒子在方势阱内 ($|x| < \frac{a}{2}, V = 0$) 的能量本征方程

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

这个微分方程的解形如

$$\psi(x) = c_1 \sin kx + c_2 \cos kx, \quad \left(k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \right)$$

在无限深方势阱内部 $\psi(x) \neq 0$, 方势阱外部 $\psi(x) = 0$, 考虑到边界条件 $\psi(\pm \frac{a}{2}) = 0$, 如果是奇宇称, 则 $k = \frac{(2n+1)\pi}{a}$; 如果是偶宇称, 则 $k = \frac{(2n)\pi}{a}$, 但无论如何, 粒子的能量都可以写成

$$E = E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

此外, 能量本征值 E_n 对应的本征波函数还要满足归一化条件

$$\int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} |\psi_n(x)|^2 dx = \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \left| A \sin \frac{2n\pi x}{a} \right|^2 dx = A^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a} \right) dx = 1$$

解得 $A = \frac{a}{2}$, 并且

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{a}{2}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n = 1, 3, 5, \dots, \quad |x| < \frac{a}{2} \\ \sqrt{\frac{a}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), & n = 2, 4, 6, \dots, \quad |x| < \frac{a}{2} \\ 0, & |x| \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

习题 2.1

设粒子限制在矩形匣子中运动, 即

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c \\ \infty, & \text{其它位置} \end{cases}$$

求粒子的能量本征值和本征波函数. 如 $a = b = c$, 讨论能级的简并度.

解答 粒子在矩形匣子中运动时, 满足能量本征方程⁵

$$\nabla^2 \psi(x, y, z) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x, y, z) = 0$$

方程的解可以写成分离变数的形式

$$\psi(x, y, z) = A \sin(k_1 x + \delta_1) \sin(k_2 y + \delta_2) \sin(k_3 z + \delta_3)$$

⁵本质上来说, 就是三维形式的薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

粒子被限制在矩形匣中运动, 根据边界条件 $\psi(0,0,0) = 0$ 确定 $\delta_1 = \delta_2 = \delta_3 = 0$, 再代入 $\psi(a,b,c) = 0$

$$\begin{cases} \sin(k_1 a) = 0 \\ \sin(k_2 b) = 0 \\ \sin(k_3 c) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} k_1 a = n_1 \pi, & n_1 = 1, 2, 3, \dots \\ k_2 b = n_2 \pi, & n_2 = 1, 2, 3, \dots \\ k_3 c = n_3 \pi, & n_3 = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} k_1 = \frac{n_1 \pi}{a}, & n_1 = 1, 2, 3, \dots \\ k_2 = \frac{n_2 \pi}{b}, & n_2 = 1, 2, 3, \dots \\ k_3 = \frac{n_3 \pi}{c}, & n_3 = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

所以粒子的能量本征值为

$$E = E_{n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$

再归一化能量本征函数

$$\iiint_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = A^2 \int_0^a \left| \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \right|^2 dx \int_0^b \left| \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \right|^2 dy \int_0^c \left| \sin \frac{n_3 \pi z}{c} \right|^2 dz = 1$$

得到

$$\psi_{n_1 n_2 n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin \frac{n_1 \pi x}{a} \sin \frac{n_2 \pi y}{b} \sin \frac{n_3 \pi z}{c}$$

如果匣子恰巧是边长为 a 的立方体, 则

$$E\psi(x, y, z) + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) \psi = 0$$

则此时的能级简并条件退化为

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \frac{2ma^2 E}{\hbar^2 \pi^2}$$

习题 2.2

设粒子处于一维无限深方势阱中,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a \\ \infty, & x < 0, x > a \end{cases}$$

证明处于能量本征态 $\psi_n(x)$ 的粒子

1. $\bar{x} = \frac{a}{2}$
2. $\overline{(x - \bar{x})^2} = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right)$
3. 讨论 $n \rightarrow \infty$ 的情况, 并与经典力学计算结果比较.

解答 首先求解粒子的本征函数

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

所以

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \int_0^a x |\psi(x)|^2 dx = \frac{a}{2} \int_0^a \frac{x^2}{2} \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a} \right) dx = \frac{a}{2} \\ \overline{x^2} &= \int_0^a x^2 |\psi(x)|^2 dx = \frac{a}{2} \int_0^a \frac{x^2}{2} \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a} \right) dx = \frac{a^3}{3} - \frac{a^2}{2n^2 \pi^2} \end{aligned}$$

$$\overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \frac{a^2}{12} \left(1 - \frac{6}{n^2 \pi^2} \right)$$

而在经典力学的范畴内, 粒子没有波动性

$$\bar{x} = \int_0^a \frac{x}{a} dx = \frac{a}{2}$$

$$\overline{x^2} = \int_0^a \frac{x^2}{a} dx = \frac{a^2}{3}$$

$$\overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2 = \frac{a^2}{12}$$

可见, 当 $n \rightarrow \infty$ 时, 量子力学结果与经典力学结果一致.

2.3 δ 势

我们假设一个质量为 m 的粒子 (能量 $E > 0$) 从左入射, 碰到 δ 势垒

$$V(x) = \gamma \delta(x)$$

代入不含时薛定谔方程

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = [E - \gamma \delta(x)] \psi(x)$$

注意到 $x = 0$ 是方程的奇点, 波函数在 $x = 0$ 处的一阶导数 ψ' 不连续, 二阶导数 ψ'' 不存在.

证明. 对方程两边同乘 dx

$$d \left[\frac{d\psi(x)}{dx} \right] = -\frac{2m}{\hbar} [E - \gamma \delta(x)] \psi(x) dx$$

对于 $\forall \varepsilon > 0$, 我们在区间 $[0 - \varepsilon, 0 + \varepsilon]$ 上对 x 积分, 结合公式 (31)

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} d \left[\frac{d\psi(x)}{dx} \right] = -\frac{2m}{\hbar} \left[\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} E \psi(x) dx - \gamma \psi(0) \right]$$

两边对 ε 取极限

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} d[\psi'(x)] = -\frac{2m}{\hbar} \left[\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} E \psi(x) dx - \gamma \psi(0) \right]$$

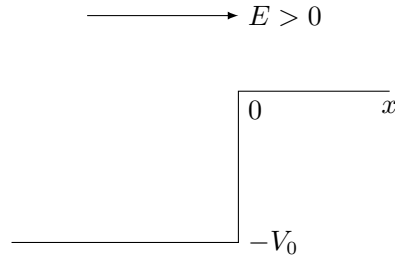
化简得 (此处要结合公式 (31))

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{2m}{\hbar^2} [0 - \gamma \psi(0)] \neq 0 \quad (7)$$

这说明 $\psi'(x)$ 在 $x = 0$ 处一般不连续 (除非 $\psi(0) = 0$), 公式 (7) 也被称为 δ 势中 ψ' 的跃变条件. \square

题目 2.6

设粒子 (能量 $E > 0$) 从左入射, 碰到如图所示的势阱, 求透射系数与反射系数.



解答 透射系数和反射系数为

$$T = \frac{4k/k'}{(1 + k/k')^2}, \quad R = \frac{(1 - k/k')^2}{(1 + k/k')^2}.$$

其中

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}.$$

不难验证

$$R + T = 1.$$

题目 2.9

谐振子处于 ψ_n 态下, 计算

$$(1) \Delta x = \sqrt{(x - \bar{x})^2}$$

$$(2) \Delta p = \sqrt{(p - \bar{p})^2}$$

$$(3) \Delta x \Delta p$$

解答 已知 Hermite 多项式的递推关系

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0$$

结合波函数的递推关系

$$\psi_{n-1}(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^{n-1}(n-1)!}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_{n-1}(\alpha x)$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x)$$

$$\psi_{n+1}(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^{n+1}(n+1)!}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_{n+1}(\alpha x)$$

得到

$$x\psi_n(x) = \frac{1}{\alpha} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \psi_{n-1}(x) + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \psi_{n+1}(x) \right]$$

利用本征函数之间的正交性, 得到

$$\bar{x} = 0$$

另外

$$x^2\psi_n(x) = \frac{1}{2\alpha^2} \left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}(x) + (2n+1)\psi_n(x) + \sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}(x) \right]$$

利用 Hermite 多项式之间的求导递推关系

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$$

得到

$$\frac{d}{dx}\psi_n(x) = \frac{\alpha^2}{2} \left[\sqrt{n(n-1)}\psi_{n-2}(x) - (2n+1)\psi_n(x) + \sqrt{(n+1)(n+2)}\psi_{n+2}(x) \right]$$

于是得到

$$\overline{p^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x) \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \psi_n(x) dx = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2} (2n+1)$$

(1) 对于 Δx

$$\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2} = \sqrt{\frac{1}{2\alpha^2} (2n+1) - 0} = \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{2n+1}{2}}$$

(2) 对于 Δp

$$\Delta p = \sqrt{\overline{p^2} - \bar{p}^2} = \sqrt{\frac{\alpha^2 \hbar^2}{2} (2n+1) - 0} = \alpha \hbar \sqrt{\frac{2n+1}{2}}$$

(3) 对于 $\Delta x \Delta p$

$$\Delta x \Delta p = \frac{2n+1}{2} \hbar$$

2.4 一维谐振子

利用一维谐振子回复力 $F = -kx$ 和固有频率 $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ 的关系, 得到一维谐振子的势能表达式

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

再将 $V(x)$ 代入一维谐振子的定态薛定谔方程

$$\frac{1}{2m} [\hat{p}^2 + (m\omega x)^2] \psi = E\psi$$

我们在此处定义升降阶算符 a_{\pm} 如下⁶

$$a_+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (-ip + m\omega x)$$

$$a_- \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} (+ip + m\omega x)$$

可以证明 $(a_+\psi)$ 是薛定谔方程的解, 其对应能量为 $(E + \hbar\omega)$; 同时 $(a_-\psi)$ 也是薛定谔方程的解, 其对应能量为 $(E - \hbar\omega)$ 。在反复使用降阶算符后, 我们会得到一个最低能量 $a_-\psi_0 = 0$

$$\frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}} \left(\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \psi_0 = 0$$

解得通解

$$\psi_0(x) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

对波函数归一化, 得到

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

⁶跟我们之前定义角动量的升降阶算符 \hat{l}_{\pm} 类似, 这里定义升降阶算符 a_{\pm} 是为了方便求解能量本征值

题目 2.10

电荷 q 的谐振子, 受到外电场 \mathcal{E} 的作用

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - q\mathcal{E}x$$

求能量本征值和本征函数.

解答 首先对势能 $V(x)$ 配方

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2(x - x_0)^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2, \quad x_0 = \frac{q\mathcal{E}}{m\omega^2}$$

能量本征值为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2m\omega^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

本征函数为

$$\varphi_n(x) = \psi_n(x - x_0) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}2^n n!}} e^{-\frac{\alpha^2(x-x_0)^2}{2}} H_n[\alpha(x - x_0)]$$

题目 2.11

设粒子在下列势阱中运动, 求粒子的能级

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, & x > 0 \end{cases}$$

解答 在 $x < 0$ 的部分, 粒子无法穿过 $V(x) = \infty$ 的势垒, 所以

$$\psi(x) = 0$$

在 $x > 0$ 的部分, 粒子运动的薛定谔方程为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

这个变系数微分方程想要得到多项式解, 必须满足

$$\lambda - 1 = 2n \implies \frac{E}{\frac{1}{2}\hbar\omega} - 1 = 2n$$

此时方程的解形如

$$\psi_n(x) = A_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

同时波函数必须连续

$$\psi(0-) = \psi(0+) = 0$$

也即 Hermite 多项式必须为零, 所以 n 只能取奇数 ($n = 1, 3, 5, \dots$) 此时谐振子的能级为

$$E_n = \frac{2n+1}{2} \hbar\omega, \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

3 力学量用算符表达

3.1 算符的运算规则

以下所有的讨论都要建立在「对任意波函数和任意常数都成立」这一前提上.

3.1.1 线性算符

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2 \quad (8)$$

3.1.2 算符之和

$$(\hat{A} + \hat{B})\psi = \hat{A}\psi + \hat{B}\psi \quad (9)$$

3.1.3 算符之积

$$(\hat{A}\hat{B})\psi = \hat{A}(\hat{B}\psi) \quad (10)$$

量子力学的基本对易式 量子力学中最早被发现并证实的对易关系是动量算符和位置算符⁷

$$x_\alpha \hat{p}_\beta - \hat{p}_\beta x_\alpha = i\hbar \delta_{\alpha\beta}, \quad \alpha, \beta = x, y, z$$

为了简洁和方便, 我们可以定义符号 $[\hat{A}, \hat{B}]$ 来表达类似的对易关系

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (11)$$

根据对易式的定义, 可以推出下列对易恒等式:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (12)$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \quad (13)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} \quad (14)$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \quad (15)$$

进一步可以证明 Jacobi 恒等式⁸

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \quad (16)$$

⁷动量算符表示为

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Kronecker 函数的含义是

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$$

⁸题外话: 群论中的李代数是满足 Jacobi 恒等式代数结构的一个主要例子

3.1.4 角动量的对易式

角动量算符定义为

$$\hat{\mathbf{l}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{r} \times (-i\hbar \nabla) = -i\hbar \begin{vmatrix} i & j & k \\ x & y & z \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix}$$

各个分量表示为

$$\begin{aligned}\hat{l}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \\ \hat{l}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ \hat{l}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)\end{aligned}$$

不难证明

$$[\hat{l}_\alpha, x_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar x_\gamma \quad (17)$$

上式中的 $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 称为 Levi-Civita 符号

$$\begin{cases} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = -\varepsilon_{\beta\alpha\gamma} = -\varepsilon_{\alpha\gamma\beta} \\ \varepsilon_{123} = 1 \end{cases} \quad (18)$$

类似地, 还可以证明

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{p}_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar \hat{p}_\gamma \quad (19)$$

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar \hat{l}_\gamma \quad (20)$$

证明题

定义 $\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2$, 试证明:

$$[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_\alpha] = 0, \quad \alpha = x, y, z$$

提示: 利用基本对易关系能在很大程度上简化问题

解答 先证明 $\alpha = x$ 的情形

$$\begin{aligned}LHS &= [\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_x] = [(\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2), \hat{l}_x] \\ &= [\hat{l}_x^2, \hat{l}_x] + [\hat{l}_y^2, \hat{l}_x] + [\hat{l}_z^2, \hat{l}_x] \\ &= 0 + \hat{l}_y [\hat{l}_y, \hat{l}_x] + [\hat{l}_y, \hat{l}_x] \hat{l}_y + \hat{l}_z [\hat{l}_z, \hat{l}_x] + [\hat{l}_z, \hat{l}_x] \hat{l}_z \\ &= -i\hbar \hat{l}_y \hat{l}_z - i\hbar \hat{l}_z \hat{l}_y + i\hbar \hat{l}_z \hat{l}_y + i\hbar \hat{l}_y \hat{l}_z \\ &= 0\end{aligned}$$

以上过程需要利用角动量算符的基本对易关系

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar \hat{l}_\gamma$$

同理也可以证明 $\alpha = y, z$ 的情形

$$[\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_y] = 0 \quad [\hat{\mathbf{l}}^2, \hat{l}_z] = 0$$

这说明角动量的平方算符 \hat{l}^2 与角动量的任意分量算符 \hat{l}_α ($\alpha = x, y, z$) 相互对易。

证明题

定义角动量的升降阶算符 \hat{l}_\pm

$$\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$$

证明:

$$(19) \quad \hat{l}_z \hat{l}_\pm = \hat{l}_\pm (\hat{l}_z \pm \hbar), \text{ 即 } [\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] = \pm i\hbar \hat{l}_\pm$$

$$(20) \quad \hat{l}_\pm \hat{l}_\mp = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 \pm \hbar \hat{l}_z$$

$$(21) \quad [\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hbar \hat{l}_z$$

解答 (19) 根据 \hat{l}_\pm 的定义和量子力学的基本对易式⁹

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_\pm] = [\hat{l}_z, \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y] = [\hat{l}_z, \hat{l}_x] \pm i[\hat{l}_z, \hat{l}_y] = i\hbar \hat{l}_y \pm i(-i\hbar)\hat{l}_x = \pm i\hbar \hat{l}_\pm$$

(20) 根据 \hat{l}_\pm 的定义, 先证明

$$\hat{l}_+ \hat{l}_- = (\hat{l}_x + i\hat{l}_y)(\hat{l}_x - i\hat{l}_y) = \hat{l}_x^2 + i(-\hat{l}_x \hat{l}_y + \hat{l}_y \hat{l}_x) + \hat{l}_y^2 = \hat{l}_x^2 + i[\hat{l}_y, \hat{l}_x] + \hat{l}_y^2 = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 + \hbar \hat{l}_z$$

同理可证

$$\hat{l}_- \hat{l}_+ = (\hat{l}_x - i\hat{l}_y)(\hat{l}_x + i\hat{l}_y) = \hat{l}^2 - \hat{l}_z^2 - \hbar \hat{l}_z$$

(21) 根据 \hat{l}_\pm 的定义

$$\begin{aligned} [\hat{l}_+, \hat{l}_-] &= [\hat{l}_x + i\hat{l}_y, \hat{l}_x - i\hat{l}_y] \\ &= [\hat{l}_x, \hat{l}_x] - i[\hat{l}_x, \hat{l}_y] + i[\hat{l}_y, \hat{l}_x] + [\hat{l}_y, \hat{l}_y] \\ &= 0 - i(i\hbar \hat{l}_z) + i(-i\hbar \hat{l}_z) + 0 \\ &= 2\hbar \hat{l}_z \end{aligned}$$

3.1.5 逆算符

$$\hat{A}\psi = \phi \iff \hat{A}^{-1}\phi = \psi$$

3.1.6 算符的函数

类比泰勒级数展开, 可以得到算符 \hat{A} 的函数

$$F(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{F^{(n)}(0)}{n!} \hat{A}^n \quad (21)$$

进一步, 还能得到位移算符

$$e^{a \frac{d}{dx}} \psi(x) = \psi(x+a)$$

⁹任意两个角动量分量算符 \hat{l}_α 和 \hat{l}_β 的对易关系在前文已经证明过:

$$[\hat{l}_\alpha, \hat{l}_\beta] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar \hat{l}_\gamma$$

3.1.7 转置算符

算符 \hat{A} 的转置算符定义为

$$\int \psi^* \hat{A} \varphi d\tau = \int \varphi \hat{A} \psi^* d\tau$$

表示为

$$(\psi, \hat{A} \varphi) = (\varphi^*, \hat{A} \psi^*) \quad (22)$$

实际上对于算符之积, 有

$$\widehat{\hat{A}\hat{B}} = \hat{\tilde{B}}\hat{\tilde{A}}$$

3.1.8 复共轭算符与 Hermitian 共轭算符

算符 \hat{A} 的复共轭算符定义为

$$\hat{A}^* \psi = (\hat{A} \psi^*)^* \quad (23)$$

算符 \hat{A} 的 Hermitian 共轭算符定义为

$$(\psi, \hat{A}^\dagger \varphi) = (\hat{A} \psi, \varphi) \quad (24)$$

证明题

证明: 动量算符 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ 是 Hermitian 算符。

证明. 一方面, 当 \hat{p} 作用在右矢时¹⁰

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

另一方面

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

由此可见 $\langle \psi | \hat{p} \psi \rangle = \langle \hat{p} \psi | \psi \rangle$, 说明动量算符是 Hermitian 算符 □

扩展问题

微分算符 $\frac{d}{dx}$ 是 Hermitian 算符吗?

提示: 考虑 $\langle \psi | \frac{d}{dx} \psi \rangle$ 与 $\langle \frac{d}{dx} \psi | \psi \rangle$ 是否相等

解答 微分算符的本征方程为

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{d\psi}{dx} dx = \psi^* \psi \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi d\psi^* = - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi d\psi^*$$

类似地, 考虑其转置再取复共轭的形式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\psi^*}{dx} \psi dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi d\psi^*$$

二者的结果相反, 说明微分算符是反 Hermitian 算符。

¹⁰满足归一化条件的规范波函数必须满足 $\psi(+\infty) = \psi(-\infty) = 0$

3.1.9 转置并取复共轭

$$\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle = \overline{\langle \psi | \hat{B} | \varphi \rangle}$$

题目 3.1

设 A 与 B 为 Hermitian 算符, 则 $\frac{1}{2}(AB + BA)$ 和 $\frac{1}{2i}(AB - BA)$ 也是 Hermitian 算符. 由此证明: 任何一个算符 F 均可分解为 $F = F_+ + iF_-$

$$F_+ = \frac{1}{2}(F + F^\dagger), \quad F_- = \frac{1}{2i}(F - F^\dagger)$$

F_+ 与 F_- 均为 Hermitian 算符.

解答 已知 A 与 B 都是 Hermitian 算符 (自伴算符)

$$A^\dagger = A, \quad B^\dagger = B, \quad (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA$$

对于

$$\left[\frac{1}{2}(AB + BA) \right]^\dagger = \frac{1}{2}(B^\dagger A^\dagger + A^\dagger B^\dagger) = \frac{1}{2}(BA + AB) = \frac{1}{2}(AB + BA)$$

$$\left[\frac{1}{2i}(AB - BA) \right]^\dagger = -\frac{1}{2i}(B^\dagger A^\dagger - A^\dagger B^\dagger) = -\frac{1}{2i}(BA - AB) = \frac{1}{2i}(AB - BA)$$

这说明以上两个算符都是 Hermitian 算符, 根据这一结论, 我们再对任意算符 F 进行分解

$$F = \frac{F}{2} + \frac{F}{2} = \frac{1}{2}(F + F^\dagger) + \frac{1}{2}(F - F^\dagger) = F_+ + iF_-$$

这说明 F_+ 和 F_- 都是 Hermitian 算符.¹¹

题目 3.4

定义反对易式

$$[A, B]_\dagger \equiv AB + BA$$

再证明

$$[AB, C] = A[B, C]_\dagger - [A, C]_\dagger B$$

$$[A, BC] = [A, B]_\dagger C - B[A, C]_\dagger$$

解答 (1) 根据反对易式的定义

$$\begin{cases} LHS = A[B, C] + [A, C]B = A(BC - CB) + (AC - CA)B = ABC - CAB \\ RHS = A(BC + CB) - (AC + CA)B = ABC - CAB \end{cases}$$

(2) 类似地

$$\begin{cases} LHS = B[A, C] + [A, B]C = B(AC - CA) + (AB - BA)C = ABC - BCA \\ RHS = (AB + BA)C - B(AC + CA) = ABC - BCA \end{cases}$$

以上两式均有 $LHS = RHS$, 证毕.

¹¹升降阶算符对于我们求解能量本征值是十分有用的, 不过具体的构造方法还是需要李代数的相应知识

3.2 Hermitian 算符的本征值与本征函数

3.2.1 涨落

对于处于量子态 ψ 的体系，力学量 A 的测量结果会围绕平均值涨落，即：

$$\overline{\Delta A^2} = \overline{(\hat{A} - \bar{A})^2} = \int \psi^* (\hat{A} - \bar{A})^2 \psi d\tau$$

因为 \hat{A} 是 Hermitian 算符， \bar{A} 必为实数，因此 $\Delta \hat{A} = (\hat{A} - \bar{A})$ 仍然是 Hermitian 算符

$$\overline{\Delta A^2} = \int |(\hat{A} - \bar{A})\psi|^2 d\tau \geq 0$$

3.2.2 本征态

我们把测量结果永远不变的特殊量子态被称为本征态

$$\overline{\Delta A^2} = 0 \implies (\hat{A} - \bar{A})\psi = 0$$

记常数 \bar{A} 为 A_n ，本征态为 ψ_n ，整理得到算符 \hat{A} 的本征方程

$$\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n$$

其中 A_n 称为算符 \hat{A} 的一个本征值， ψ_n 为相应的本征态。

定理 3.1. *Hermitian 算符的本征值必为实。*

证明. 对于 Hermitian 算符 \hat{A} 其本征方程可以写为

$$\hat{A}\psi = A_n\psi$$

再根据算符的自伴性质，其平均值有以下两种等价的计算方式

$$\langle \psi | \hat{A}\psi \rangle = \int \psi^* (\hat{A}\psi) d\tau = A_n \int \psi^* \psi d\tau = A_n$$

$$\langle \hat{A}\psi | \psi \rangle = \int (\hat{A}\psi)^* \psi d\tau = A_n^* \int \psi^* \psi d\tau = A_n^*$$

所以理应有 $A_n = A_n^*$ ，也即本征值为实数。□

定理 3.2. *Hermitian 算符的属于不同本征值的本征函数，彼此正交。*

证明. 设量子态 ψ 的两个本征值分别为 A_m 和 A_n ，对应的本征函数分别为 ψ_m 和 ψ_n □

3.2.3 本征态简并

设力学量 \hat{A} 的本征方程为

$$\hat{A}\psi_{n\alpha} = A_n\psi_{n\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, f_n$$

即属于本征值 A_n 的本征态有 f_n 个，本征值 A_n 为 f_n 重简并。

虽然在出现简并态时, 简并态的选择并不唯一, 而且往往也不彼此正交, 但只要把它们适当地线性叠加, 我们还是能获得一组彼此正交的简并态

$$\phi_{n\beta} = \sum_a^{f_n} \alpha_{\beta a} \hat{A} \psi_{na}, \quad \beta = 1, 2, \dots, f_n$$

容易证明 $\phi_{n\beta}$ 仍为 \hat{A} 的本征态, 相应的本征值仍为 A_n , 因为

$$\hat{A} \phi_{n\beta} = \sum_a \alpha_{\beta a} \hat{A} \psi_{na} = A_n \sum_a \alpha_{\beta a} \psi_{na} = A_n \phi_{n\beta}$$

问题转化为: 能否找到合适的 $\alpha_{\beta a}$, 使 $\phi_{n\beta}$ 具有正交性? 也即下列方程组是否有解的问题

$$(\phi_{n\beta}, \phi_{n\beta'}) = \delta_{\beta\beta'}$$

实际上, 我们目前有 $\frac{1}{2}f_n(f_n - 1) + f_n = \frac{1}{2}f_n(f_n + 1)$ 个线性方程, 而待解系数 $\alpha_{\beta a}$ 只有 f_n^2 个, 根据

$$f_n^2 \geq \frac{1}{2}f_n(f_n + 1)$$

可以说明线性方程组个数多于系数个数, 方程组显然有解, 也即一定能找到合适的 $\alpha_{\beta a}$ 使正交性条件得到满足。

习题集 Ex.43

求算符 $\hat{F} = -ie^{ix} \frac{d}{dx}$ 的本征函数

解答 设量子本征态为 $\psi_n(x)$, 本征值为 F_n , 本征方程为

$$\hat{F} \psi_n(x) = -ie^{ix} \frac{d\psi_n(x)}{dx} = F_n \psi_n(x)$$

分离变量并两边积分, 得到

$$\psi_n(x) = C \exp(-F_n e^{-ix})$$

还没有归一化……

习题集 Ex.44

对于一维运动, 求算符 $\hat{F} = \hat{p} + x$ 的本征值和本征函数。

解答 设算符 \hat{F} 的本征态为 $\psi(x)$, 对应的本征值为 λ

$$\hat{F} \psi(x) = (\hat{p} + x) \psi(x) = \lambda \psi(x)$$

代入动量算符 $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, 得到

$$-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} + (x - \lambda) \psi(x) = 0$$

整理成分离变量的形式

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = -\frac{i}{\hbar} (x - \lambda) \psi(x)$$

再两边积分得到本征函数

$$\psi(x) = \frac{1}{2} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (x^2 - 2\lambda x) \right] + C$$

对于所有实数 λ , 波函数 $\psi(x)$ 均满足标准条件。

习题集 Ex.48

若算符 \hat{K} 有属于本征值为 λ 的本征函数 ϕ , 且有 $\hat{K} = \hat{A}\hat{B}$ 和 $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 1$, 试证明 $u_1 = \hat{A}\phi$ 和 $u_2 = \hat{B}\phi$ 也是算符 \hat{K} 的本征函数, 且对应的本征值分别为 $\lambda - 1$ 和 $\lambda + 1$.

解答 (1) 对于算符 \hat{K} 和函数 $u_1 = \hat{A}\phi$

$$\hat{K}u_1 = \hat{K}\hat{A}\phi = \hat{A}\hat{B}\hat{A}\phi = \hat{A}(\hat{A}\hat{B} - 1)\phi = \hat{A}(\hat{K} - 1)\phi$$

设本征值为 E_1 , 则本征方程为

$$\hat{A}(\hat{K} - 1)\phi = \hat{A}(\lambda - 1)\phi = E_1\hat{A}\phi$$

两边左乘 \hat{A}^{-1} , 于是

$$E_1 = \lambda - 1$$

(2) 对于算符 \hat{K} 和函数 $u_2 = \hat{B}\phi$

$$\hat{K}u_2 = \hat{A}\hat{B}\hat{B}\phi = (1 + \hat{B}\hat{A})\hat{B}\phi = \hat{B}(1 + \hat{A}\hat{B})\phi = \hat{B}(1 + \hat{K})\phi$$

设本征值为 E_2 , 则本征方程为

$$\hat{B}(1 + \hat{K})\phi = \hat{B}(1 + \lambda)\phi = E_2\hat{B}\phi$$

两边左乘 \hat{B}^{-1} , 于是

$$E_2 = \lambda + 1$$

3.3 共同本征函数

题目 3.14

证明在 \hat{l}_z 的本征态下, $\overline{l_x} = \overline{l_y} = 0$.

提示: 可以利用对易式 $\hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y = i\hbar\hat{l}_x$ 进行代换

解答 角动量 z 分量算符 \hat{l}_z 的本征值是我们熟知的 $m\hbar$, 本征方程为

$$\hat{l}_z\psi = m\hbar\psi$$

再根据角动量的对易关系

$$[\hat{l}_y, \hat{l}_z] = \hat{l}_y\hat{l}_z - \hat{l}_z\hat{l}_y = i\hbar\hat{l}_x$$

建立算符 \hat{l}_x 与算符 \hat{l}_z 的关系, 最后利用 \hat{l}_z 的本征方程求得算符 \hat{l}_x 平均值

$$\begin{aligned}\overline{l_x} &= \int \psi^* \hat{l}_x \psi \, dx = \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* (\hat{l}_y \hat{l}_z - \hat{l}_z \hat{l}_y) \psi \, dx \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[\int \psi^* \hat{l}_y \hat{l}_z \psi \, dx - \int \psi^* \hat{l}_z \hat{l}_y \psi \, dx \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[m\hbar \int \psi^* \hat{l}_y \psi \, dx - \int (\hat{l}_z \psi)^* \hat{l}_y \psi \, dx \right] \\ &= \frac{1}{i\hbar} m\hbar (\overline{l_y} - \overline{l_y}) \\ &= 0\end{aligned}$$

同理, 再利用 $[\hat{l}_z, \hat{l}_x] = i\hbar\hat{l}_y$ 可得

$$\overline{l_y} = \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* (\hat{l}_z \hat{l}_x - \hat{l}_x \hat{l}_z) \psi dy = \frac{1}{i\hbar} \left[\int (\hat{l}_z \psi)^* \hat{l}_x \psi dy - \int \psi^* \hat{l}_x (\hat{l}_z \psi) dy \right] = \frac{1}{i\hbar} m\hbar (\overline{l_x} - \overline{l_x}) = 0$$

题目 3.15

设粒子处于 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 状态下, 求 $\overline{(\Delta l_x)^2}$ 和 $\overline{(\Delta l_y)^2}$.

解答 球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 是 l^2 和 l_z 的共同本征函数, 两个本征方程分别为

$$\hat{l}^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad \hat{l}_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

考虑到球谐函数的对称性, 有

$$\overline{l_x} = \overline{l_y} = 0$$

$$\overline{l_x^2} = \overline{l_y^2} = \frac{1}{2} \overline{(l^2 - l_z^2)} = \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m^2]$$

根据概率统计的相关知识 $D(x) = E(X^2) - E^2(X)$

$$\overline{(\Delta l_x)^2} = \overline{(\Delta l_y)^2} = \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m^2]$$

题目 3.16

设体系处于 $\psi = c_1 Y_{11} + c_2 Y_{20}$ 状态 (已归一化, 即 $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$), 求:

1. l_z 的可能测值及平均值;
2. l^2 的可能测值及相应的概率;
3. l_x 的可能测值及相应的概率.

解答 按照态叠加原理, 体系的任何一个状态 ψ 都可以用 $\{\phi_\alpha\}$ 展开, 并且利用 ψ_α 的正交归一性, 可以求出展开系数 a_α

$$\psi = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \psi_{\alpha}$$

(1) l_z 的可能测值和对应概率为

$$E_{11} = \hbar, \quad P_{11} = |c_1|^2$$

$$E_{20} = 0, \quad P_{20} = |c_2|^2$$

(2) l^2 的可能测值和对应概率为

$$E_{11} = 2\hbar^2, \quad P_{11} = |c_1|^2$$

$$E_{20} = 6\hbar^2, \quad P_{20} = |c_2|^2$$

习题 Ex55

线性谐振子在初始时刻处于下面归一化状态:

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{5}} \psi_0(x) + \sqrt{\frac{1}{2}} \psi_2(x) + c_5 \psi_5(x)$$

式中 $\psi_n(x)$ 表示谐振子第 n 个定态波函数, 求:

1. 系数 c_5 ;
2. t 时刻的波函数;
3. $t = 0$ 时刻谐振子能量的可能取值及其相应几率, 并求其平均值;
4. t 时刻谐振子能量的可能取值及其相应的几率, 并求其平均值.

解答 (1) 利用归一化条件

$$\left(\sqrt{\frac{1}{5}}\right)^2 + \left(\sqrt{\frac{1}{2}}\right)^2 + c_5^2 = 1$$

得到

$$c_5 = \sqrt{\frac{3}{10}}$$

(2) 定态波函数为

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

而 t 时刻的波函数为

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{1}{5}} \psi_0(x) e^{-\frac{i}{2} \omega t} + \sqrt{\frac{1}{2}} \psi_2(x) e^{-\frac{5i}{2} \omega t} + \sqrt{\frac{3}{10}} \psi_5(x) e^{-\frac{11i}{2} \omega t}$$

4 力学量随时间的演化与对称性

4.1 守恒量

力学量 A 的平均值 \bar{A} 表示为¹²

$$\bar{A} = \langle \psi(t) | \hat{A} \psi(t) \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau$$

所以

$$\frac{d}{dt} \bar{A} = \frac{d}{dt} \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau = \int \frac{d}{dt} (\psi^* \hat{A} \psi) d\tau = \int (\dot{\psi}^* \hat{A} \psi + \psi^* \dot{\hat{A}} \psi + \psi^* \hat{A} \dot{\psi}) d\tau$$

利用薛定谔方程做代换 $\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hat{H}}{i\hbar} \psi$

$$\frac{d}{dt} \bar{A} = \int \left(\frac{\hat{H} \psi^*}{-i\hbar} \hat{A} \psi + \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi + \psi^* \hat{A} \frac{\hat{H} \psi}{i\hbar} \right) d\tau$$

如果力学量 A 不显含 t (也即 $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$), 上式还能消去一项

$$\frac{d}{dt} \bar{A} = \frac{1}{i\hbar} \int (-\hat{H} \psi^* \hat{A} \psi + \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi) d\tau = \frac{1}{i\hbar} \int \psi^* (\hat{A} \hat{H} - \hat{H} \hat{A}) \psi d\tau = \frac{1}{i\hbar} \overline{[A, H]} \quad (25)$$

¹²虽然在《量子力学教程》中, 波函数的标积表示为

$$(\psi, \varphi) = \int \psi^* \varphi d\tau$$

但最好还是用 Dirac 符号表示

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int \psi^* \varphi d\tau$$

如果恰好有 $[A, H] = 0$ (即力学量 A 恰好与 H 对易), 则 $\frac{d}{dt}\bar{A} = 0$, 这说明力学量 A 在任何量子态下的平均值都不会随时间改变, 这是体系的一个守恒量.

定理 4.1 (Virial 定理). 当体系处于定态时, 有

$$2\bar{T} = \overline{\mathbf{r} \cdot \nabla V}$$

其中 $T = \frac{p^2}{2m}$ 是粒子动能, $V(\mathbf{r})$ 是势能.

证明. 系统的 Hamilton 算符为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

考虑 $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$ 的平均值随时间演化¹³

$$i\hbar \frac{d}{dt} \overline{\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}} = \overline{[\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, H]} = \frac{1}{2m} \overline{[\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, \hat{p}^2]} + \overline{[\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, V(\mathbf{r})]}$$

对于第一项 因式 $[\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, \hat{p}^2]$ 可以写为

$$[\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{p}^2] = [x\hat{p}_x + y\hat{p}_y + z\hat{p}_z, \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2] = [x\hat{p}_x, \hat{p}_x^2] + [y\hat{p}_y, \hat{p}_y^2] + [z\hat{p}_z, \hat{p}_z^2]$$

这显然具有极佳的轮换对称性, 我们根据对易式的代数恒等式¹⁴ 和量子力学的基本对易式¹⁵处理其中一项

$$\begin{aligned} [x\hat{p}_x, \hat{p}_x^2] &= x [\hat{p}_x, \hat{p}_x^2] + [x, \hat{p}_x^2] \hat{p}_x \\ &= 0 + [x, \hat{p}_x^2] \hat{p}_x \\ &= 0 + [x, \hat{p}_x \hat{p}_x] \hat{p}_x \\ &= 0 + \hat{p}_x [x, \hat{p}_x] \hat{p}_x + [x, \hat{p}_x] \hat{p}_x^2 \\ &= \hat{p}_x (i\hbar) \hat{p}_x + (i\hbar) \hat{p}_x^2 = 2i\hbar \hat{p}_x^2 \end{aligned}$$

类似地, 可以得到

$$[\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \hat{p}^2] = 2i\hbar (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) = 2i\hbar \hat{p}^2$$

对于第二项 也利用相同的对易代数恒等式展开

$$[\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}, V(\mathbf{r})] = \mathbf{r} [\mathbf{p}, V(\mathbf{r})] + [\mathbf{r}, V(\mathbf{r})] \mathbf{p} = \mathbf{r} [\mathbf{p}, V(\mathbf{r})] + 0 = -i\hbar \mathbf{r} \nabla V(\mathbf{r})$$

考虑到定态下 $\frac{d}{dt} \overline{\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}} = 0$, 所以

$$2\bar{T} = \overline{\mathbf{r} \cdot \nabla V(\mathbf{r})}$$

□

¹³不显含 t 的力学量 A , 其平均值随时间演化

$$\frac{d}{dt} \bar{A} = \frac{1}{i\hbar} \overline{[A, H]}$$

如果在此基础上, 力学量 A 又恰好与 H 对易, 则 $\frac{d\bar{A}}{dt} = 0$, 也即 A 是体系的一个守恒量.

¹⁴对易式的代数恒等式:

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A} [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}] \hat{B}$$

¹⁵量子力学的基本对易式:

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

题目 4.2

设体系有两个粒子，每个粒子可处于三个单粒子态 $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ 中的任何一个态。试求体系可能的态数目，分三种情况讨论：两个全同玻色子、两个全同费米子、两个不同粒子。

解答

- 全同玻色子：8 个态
- 全同费米子：6 个态
- 不同粒子：9 个态

题目 4.3

解答 如果不考虑波函数的交换对称性，其可能的态数目为

$$3^2 = 27$$

如果要求波函数是交换反对称的，其可能的态数目为

$$1$$

如果要求波函数是交换对称的，其可能的态数目为

$$1 + 6 + 3 = 10$$

题目 4.4

设力学量 A 不显含 t ， H 为体系的 Hamilton 量，证明：

$$-\hbar^2 \frac{d^2}{dt^2} \bar{A} = \overline{[[A, H], H]}.$$

解答 因为力学量 A 不显含 t

$$\frac{d}{dt} \bar{A} = \frac{1}{i\hbar} \overline{[A, H]}$$

上式两边再对 t 求导，则有

$$\frac{d^2}{dt^2} \bar{A} = \frac{d}{dt} \frac{1}{i\hbar} \overline{[A, H]} = \frac{1}{i\hbar} \overline{\left[\frac{1}{i\hbar} [A, H], H \right]} = -\frac{1}{\hbar^2} \overline{[[A, H], H]}$$

简单整理得到

$$-\hbar^2 \frac{d^2}{dt^2} \bar{A} = \overline{[[A, H], H]}$$

证毕.

题目 4.5(期末考试的证明题)

设力学量 A 不显含 t , 证明在束缚定态下

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = 0$$

解答 定态 ψ 是体系的能量本征态, 且束缚态可以归一化

$$\langle \psi, \psi \rangle = \text{有限值}$$

因为力学量 A 不显含 t

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [A, H]$$

所以

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{(\psi, [A, H]\psi)}{(\psi, \psi)} = \frac{1}{i\hbar} \frac{(\psi, AH\psi) - (\psi, HA\psi)}{(\psi, \psi)}$$

利用能量本征方程和 Hermitian 算符的性质

$$(\psi, AH\psi) = (\psi, AE\psi)$$

$$(\psi, HA\psi) = (H\psi, A\psi)$$

得到

$$\frac{d\bar{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \frac{(\psi, AE\psi) - (H\psi, A\psi)}{(\psi, \psi)} = \frac{E}{i\hbar} \frac{(\bar{A} - A)}{(\psi, \psi)} = 0$$

证毕.

5 中心力场

以氢原子为例, 质量较大的质子 m_1 和质量较小的电子 m_2 构成二体系统, 其势能是库伦势

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

如果我们取巧地选用质心坐标系

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R} = \frac{m_1\vec{r}_1 + m_2\vec{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mu = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2},$$

就能获得一个相对简单的定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{R}, \vec{r}) = E\psi(\vec{R}, \vec{r})$$

再进一步分离变数 $\psi(R, r) = \psi_R(\vec{R})\psi_r(\vec{r})$, 得到分别描述质心运动和二体体系内部结构的两个方程

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \psi_R(\vec{R}) = E_R \psi_R(\vec{R}), \quad -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi_r(\vec{r}) = E_r \psi_r(\vec{r})$$

对于描述二体体系内部结构(中心力场)的方程, 其定态波函数还可以进一步分离变数

$$\psi(r) = R(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

其中关于 $R(r)$ 的部分称为径向方程, 可以写为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 r R(r)}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] r R(r) = r R(r) E$$

以上步骤用到了考察渐进行为、寻找多项式、根据归一化条件截断多项式等技巧, 最终解出玻尔的氢原子能级公式

$$E_n = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

曾谨言的书中写为

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{2a} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

其中 $a = \frac{\hbar^2}{me^2}$ 是玻尔半径。

5.1 角动量算符

只写结论, 角动量算符的平方 \hat{l} 和角动量算符的 z 分量 \hat{l}_z 具有一个共同本征函数 Y_{lm} , 本征方程为:

$$\hat{l}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}, \quad \hat{l}_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}$$

此外, 角动量算符的升降阶算符 \hat{l}_{\pm}

$$\hat{l}_{\pm} Y_{lm} = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} Y_{lm \pm 1}$$

题目 5.1

利用 5.1.3 节中的式 (17) 和式 (18), 证明下列关系式:

1. 相对动量

$$\vec{p} = \mu \dot{\vec{r}} = \frac{1}{M} (m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2)$$

2. 总动量

$$\vec{P} = M \dot{\vec{R}} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$$

3. 总轨道角动量

$$\vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 = \vec{r}_1 \times \vec{p}_1 + \vec{r}_2 \times \vec{p}_2 = \vec{R} \times \vec{P} + \vec{r} \times \vec{p}$$

4. 总动能

$$T = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} = \frac{\vec{P}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu}$$

反之, 有

$$\vec{r}_1 = \vec{R} + \frac{\mu}{m_1} \vec{r}, \quad \vec{r}_2 = \vec{R} - \frac{\mu}{m_2} \vec{r}$$

$$\vec{p}_1 = \frac{\mu}{m_2} \vec{P} + \vec{p}, \quad \vec{p}_2 = \frac{\mu}{m_1} \vec{P} - \vec{p}$$

以上各式中

$$M = m_1 + m_2, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

解答 质心坐标表示为

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2}$$

相对半径表示为

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$$

(1) 相对动量

$$\vec{p} = \mu \dot{\vec{r}} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (\dot{\vec{r}}_1 - \dot{\vec{r}}_2) = \frac{1}{M} [m_2 (m_1 \dot{\vec{r}}_1) - m_1 (m_2 \dot{\vec{r}}_2)] = \frac{1}{M} (m_2 \vec{p}_1 - m_1 \vec{p}_2)$$

(2) 总动量

$$\vec{P} = M \dot{\vec{R}} = M \frac{m_1 \dot{\vec{r}}_1 + m_2 \dot{\vec{r}}_2}{M} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2$$

(3) 总轨道角动量

$$\begin{aligned} \vec{R} \times \vec{P} + \vec{r} \times \vec{p} &= \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \times (\vec{p}_1 + \vec{p}_2) + (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times \frac{1}{M} (m_2 \vec{p}_1 + m_1 \vec{p}_2) \\ &= \frac{1}{M} [(m_1 + m_2) \vec{r}_1 \times \vec{p}_1 + (m_1 + m_2) \vec{r}_2 \times \vec{p}_2] \\ &= \vec{r}_1 \times \vec{p}_1 + \vec{r}_2 \times \vec{p}_2 = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 = \vec{L} \end{aligned}$$

(4) 总动能

$$T = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2}$$

A 常用物理学常量

1. 电子的带电量为 $e = -1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
2. 电子质量 $m_e = 9.109 383 7 \times 10^{-31} \text{ kg}$
3. 中子质量 $m_n = 1.674 928 6 \times 10^{-27} \text{ kg}$
4. 氦原子质量 $m_{\text{He}} = 6.646 473 1 \times 10^{-27} \text{ kg}$
5. 普朗克常量 $h = 6.626 070 15 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$
6. 玻尔兹曼常量 $k = 1.380 649 \times 10^{-23} \text{ m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
7. 电子伏特和焦耳的换算 $1 \text{ eV} = 1.602 176 62 \times 10^{-19} \text{ J}$

B 常用数学工具

B.1 Fourier 变换

1. 实数形式的傅里叶正弦变换

$$\begin{cases} f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} B(\omega) \sin \omega x \, d\omega \\ B(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} f(\xi) \sin \omega \xi \, d\xi \end{cases} \quad (26)$$

2. 实数形式的傅里叶余弦变换

$$\begin{cases} f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} A(\omega) \cos \omega x \, d\omega \\ A(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{+\infty} f(x) \cos \omega x \, dx \end{cases} \quad (27)$$

3. 复数形式的傅里叶变换

$$\begin{cases} F(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) [e^{i\omega x}]^* \, dx \\ f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{i\omega x} \, d\omega \end{cases} \quad (28)$$

B.2 δ 函数

虽然 δ 函数并没有具体解析式, 但有一种十分符合物理直觉的定义

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} \infty, & x = x_0 \\ 0, & x \neq x_0 \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) \, dx = 1$$

1. 原函数

$$H(x) = \int_{-\infty}^x \delta(t) \, dt = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases} \quad (29)$$

2. 奇偶性

$$\begin{aligned} \delta(-x) &= \delta(x) \\ \delta'(-x) &= -\delta'(x) \end{aligned} \quad (30)$$

3. 挑选性

$$\int_a^b \delta(x - x_0) f(x) \, dx = \begin{cases} f(x_0), & x_0 \in (a, b) \\ 0, & x_0 \notin (a, b) \end{cases} \quad (31)$$

B.3 Kronecker 函数

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} \quad (32)$$

B.4 Laplace 变换

$$\begin{cases} \bar{f}(p) = \int_0^{+\infty} f(t) e^{-pt} \, dt \\ f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \bar{f}(p) e^{pt} \, dp \end{cases} \quad (33)$$

B.5 Hermite 多项式

变系数微分方程

$$u'' - 2zu' + (\lambda - 1)u = 0 \quad (34)$$

的系数必须满足

$$\lambda - 1 = 2n, \quad n = 0, 1, 2 \cdots \quad (35)$$

其无穷级数解才会中断为一个多项式，多项式的生成函数为

$$e^{-s^2+2zs} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)}{n!} s^n \quad (36)$$

由此可以证明 Hermite 多项式的正交归一性

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(z) H_n(z) e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi} 2^n \cdot n! \delta_{mn} \quad (37)$$

和递推关系

$$H_{n+1}(z) - 2zH_n(z) + 2nH_{n-1}(z) = 0 \quad (38)$$

$$H'_n(z) = 2nH_{n-1}(z) \quad (39)$$

B.6 常用积分公式

$$\int x \sin ax \, dx = \frac{1}{a^2} \sin ax - \frac{1}{a} x \cos ax + C \quad (40)$$

$$\int x^2 \sin ax \, dx = -\frac{1}{a} x^2 \cos ax + \frac{2}{a^2} x \sin ax + \frac{2}{a^3} \cos ax + C \quad (41)$$

$$\int x \cos ax \, dx = \frac{1}{a^2} \cos ax + \frac{1}{a} x \sin ax + C \quad (42)$$

$$\int x^2 \cos ax \, dx = \frac{1}{a} x^2 \sin ax + \frac{2}{a^2} x \cos ax - \frac{2}{a^3} \sin ax + C \quad (43)$$

B.7 求矩阵的逆矩阵

1. 定义法：寻找一个与 \mathbf{A} 同阶的方阵 \mathbf{B} ，使得

$$\mathbf{AB} = \mathbf{E}, \quad \mathbf{BA} = \mathbf{E}$$

2. 公式法：可利用矩阵行列式和代数余子式构成的伴随矩阵来求逆矩阵¹⁶

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{|\mathbf{A}|} \mathbf{A}^*$$

¹⁶例如矩阵 $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 5 \end{pmatrix}$ 的伴随矩阵为

$$\mathbf{A}^* = \begin{pmatrix} M_{11} & -M_{12} \\ -M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & -2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}$$

于是逆矩阵为

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{|\mathbf{A}|} \mathbf{A}^* = \begin{pmatrix} 5 & -2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}$$

3. 初等变换法:

$$\left(\begin{array}{c|c} \mathbf{A} & \mathbf{E} \end{array} \right) \xrightarrow{\text{初等行变换}} \left(\begin{array}{c|c} \mathbf{E} & \mathbf{A}^{-1} \end{array} \right) \quad \left(\begin{array}{c} \mathbf{A} \\ \cdots \\ \mathbf{E} \end{array} \right) \xrightarrow{\text{初等列变换}} \left(\begin{array}{c} \mathbf{E} \\ \cdots \\ \mathbf{A}^{-1} \end{array} \right)$$

4. 分块矩阵法: 当 \mathbf{A}, \mathbf{B} 均可逆时

$$\left(\begin{array}{cc} \mathbf{A} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{B} \end{array} \right)^{-1} = \left(\begin{array}{cc} \mathbf{A}^{-1} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{B}^{-1} \end{array} \right), \quad \left(\begin{array}{cc} \mathbf{O} & \mathbf{A} \\ \mathbf{B} & \mathbf{O} \end{array} \right)^{-1} = \left(\begin{array}{cc} \mathbf{O} & \mathbf{A}^{-1} \\ \mathbf{B}^{-1} & \mathbf{O} \end{array} \right)$$