第四章：力学量用算符表示

- **设 $f(\vec{r})$ 是只赖于空间的力学算符，证明：**

$$[f(\vec{r}),[\nabla^2, f(\vec{r})]] = -2(\nabla f)^2 \qquad (1)$$

设 ψ 是依赖于座标的波函数 $\psi=\psi(\vec{r})$，先作以下计算

$$[\nabla^2, f(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = \nabla^2(f\psi) - f\nabla^2\psi$$

$$= \sum_{i=1,2,3}\{\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}(f\psi) - f\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}\psi\}$$

$$= \sum\{\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}\psi + 2\frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial \psi}{\partial x_i} + f\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2} - f\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2}\}$$

$$= \sum\{\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} + 2\frac{\partial f}{\partial x_i}\cdot\frac{\partial}{\partial x_i}\}$$

$$= \nabla^2 f + 2\nabla f\cdot\nabla \qquad (2)$$

代入题给式（1），并运算于 $\psi(\vec{r})$：

$$[f(\vec{r}),[\nabla^2, f(\vec{r})]]\psi = \{\sum_i f(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} + 2\frac{\partial f}{\partial x_i}\cdot\frac{\partial}{\partial x_i}) - (\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2} + 2\frac{\partial f}{\partial x_i}\cdot\frac{\partial}{\partial x_i})f\}\psi$$

$$= \sum_i\{f\frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}\psi + 2f\frac{\partial f}{\partial x_i}\cdot\frac{\partial \psi}{\partial x_i} - \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}f\psi - 2\frac{\partial f}{\partial x_i}\cdot\frac{\partial}{\partial x_i}(f\psi)\}$$

消去第一，第三项得到：

$$= \sum_i\{2f\frac{\partial f}{\partial x_i}\cdot\frac{\partial \psi}{\partial x_i} - 2\frac{\partial f}{\partial x_i}\cdot\frac{\partial f}{\partial x_i}\psi - 2\frac{\partial f}{\partial x_i}\cdot f\frac{\partial \psi}{\partial x_i}\} = -2\sum(\frac{\partial f}{\partial x_i})^2\psi$$

首末两式相减为 0，　移去函数 ψ，得到求证公式（1）

4.21　利用不确定度关系估计谐振子的基态能量

[解]写下一维谐振子能量算符：

$$\hat{E} = \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{m\omega^2 x^2}{2} = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \qquad (1)$$

取能量的平均值：

$$\overline{E} = \frac{1}{2m}\overline{p^2} + \frac{m\omega^2}{2}\overline{x^2}$$

在一维谐振子的情形，坐标的平均值 $\overline{x} = 0$，动量平均值 $\overline{p} = 0$ 计算座标和动量的“不确定度”（即均方根偏差） $\delta x, \delta p$。

按一般公式

$$(\delta x)^2 = \overline{(x-\overline{x})^2} = \overline{x^2} - (\overline{x})^2 = \overline{x^2}$$

$$(\delta p)^2 = \overline{(p-\overline{p})^2} = \overline{p^2} - (\overline{p})^2 = \overline{p^2} \qquad （2）$$

因此能量平均值公式（1）可改用“不确定度”表示

$$\overline{E} = \frac{1}{2m}(\delta p)^2 + \frac{m\omega^2}{2}(\delta x)^2 \qquad （3）$$

但根据测不准关系式：

$$\delta p \cdot \delta x \geq \frac{\hbar}{2}$$

作为估计，可以直接取其下限，即认为

$$\delta p \cdot \delta x \cong \frac{\hbar}{2} \qquad \delta p \cong \frac{\hbar/2}{\delta x}$$

将此结果代入式（3），并且计算 $\overline{E}$ 的极小值，就是所求的基态能量：

$$\overline{E}(\delta x)=\frac{m\omega^2}{2}(\delta x)^2+\frac{\hbar}{8m(\delta x)^2}$$

$$=\frac{m\omega^2}{2}\{\delta x-\frac{\hbar}{2m\omega}\frac{1}{\delta x}\}^2+\frac{\hbar\omega}{2}$$

用此取括号内值为零的条件，得

$$\overline{E}_{\min}=\frac{\hbar\omega}{2}$$

这时 $\delta x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$

4.28 求证力学量 x **与** $F(p_x)$ **的不确定度关系：**

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta F)^2}}\geq\frac{\hbar}{2}\frac{\partial F}{\partial p_x}$$

（证明）根据（课本）不确定度的普遍公式，若 $\hat{A},\hat{B}$ 为任两个力学算符，$\Delta A,\Delta B$ 为它们的偏差，$\delta A,\delta B$ 为不确定度，则：

$$\overline{(\Delta A)^2}\cdot\overline{(\Delta B)^2}\geq\frac{1}{4}\left|\overline{[\hat{A},\hat{B}]}\right|^2$$

或 $\delta A\bullet\delta B\geq\frac{1}{2}\left|\overline{[\hat{A},\hat{B}]}\right|$ （1）

本题中 $\hat{A}=x,\hat{B}=F(P_x)$ 因此，有关的测不准关系写成：

$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}\cdot\overline{(\Delta F)^2}}\geq\frac{1}{2}\left|\overline{[x,F(P_x)]}\right|$ （2）

在本章第 4.6 题的第二个公式已指出

$$[x,F(p_x)]=\hbar i\frac{\partial F}{\partial p_x}$$

代入（2），就得到待证的公式。

4.29　求证在 l_z 的本征态下 $\overline{l_x}=\overline{l_y}=0$

（证明）角动量分量算符满足对易关系：

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

两边取平均值，设 Y_{lm} 是 l_z 本征态波函数，用标乘积运算符号：

$$(Y_{lm},[\hat{l}_y\hat{l}_z-\hat{l}_z\hat{l}_y]Y_{lm})=\hbar i(Y_{lm},\hat{l}_xY_{lm})$$

$$(Y_{lm},\hat{l}_y[\hat{l}_zY_{lm}]-\hat{l}_z\hat{l}_yY_{lm})$$

$$=(Y_{lm},m\hbar\hat{l}_yY_{lm}-\hat{l}_z\hat{l}_yY_{lm})$$

$$=m\hbar(Y_{lm},\hat{l}_yY_{lm})-(Y_{lm},\hat{l}_z\hat{l}_yY_{lm})$$

$$=m\hbar(Y_{lm},\hat{l}_yY_{lm})-(\hat{l}_zY_{lm},\hat{l}_yY_{lm})$$

$$=m\hbar(Y_{lm},\hat{l}_yY_{lm})-m\hbar(Y_{lm},\hat{l}_yY_{lm})$$

前面的连等式中利用了标乘积分配律以及算符 $\hat{l}_z$ 的厄密性，这样证明 $\overline{l_x}=0$

利用对易关系：$\hat{l}_z\hat{l}_x-\hat{l}_x\hat{l}_z=\hbar i\hat{l}_y$

可以类似的证明 $\overline{l_y}=0$。

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

（解） $Y_{lm}(\theta,\phi)$ 是算符 $\hat{l}^2,\hat{l}_z$ 的共同本征状态，在此态中，算符 $\hat{l}_x$，$\hat{l}_y$ 具有对称性，因而可知：$\overline{\Delta l_x^2}=\overline{\Delta l_y^2}$，又已知 $\overline{l_x}=\overline{l_y}=0$

利用算符恒等式：$\hat{l}^2=\hat{l}_x^2+\hat{l}_y^2+\hat{l}_z^2$

计算这个式子的各量在态 Y_{im} 中的平均值，用标积符号：

$$(Y_{lm},\hat{l}^2Y_{lm})=(Y_{lm},(\hat{l}_x^2+\hat{l}_y^2+\hat{l}_z^2)Y_{lm})$$

$$=(Y_{lm},(2\hat{l}_x^2+\hat{l}_z^2)Y_{lm})$$

因 Y_{im} 满足本征方程式 $\hat{l}^2Y_{lm}=l(l+1)\hbar^2Y_{lm}$，　$\hat{l}_zY_{lm}=m\hbar Y_{lm}$

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

移项整理：$\overline{l_x^2}=(Y_{lm},l_x^2Y_{lm})=\dfrac{1}{2}[l(l+1)-m^2]\hbar^2$

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

4.31　设体系处于 $\psi=c_1Y_{11}+c_2Y_{20}$ 态，求

（1）$\hat{l}_z$ 的可能测值及其平均值。

（2）$\hat{l}^2$ 的可能测值及相应的几率。

（3）$\hat{l}_x,\hat{l}_y$ 的可能测值。

（解）（1）按照习惯的表示法 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ 表示角量子数为 l，磁量子数 m 的，$(\hat{l}^2,\hat{l}_x)$ 的共同本征函数，题材给的状态是一种 $\hat{l}^2,\hat{l}_x$ 的非本征态，在此态中去测量 $\hat{l}^2,\hat{l}_x$ 都只有不确定，下面假定 $|c_1|^2+|c_2|^2=1$

从 $\psi(\theta,\varphi)=c_1Y_{11}+c_2Y_{20}$

看出，当体系处在 Y_{11} 态时，l_z 的测值 $\hbar$，处在 Y_{20} 态时，l_z 的测值为零。

$\hat{l}_z$ 在 ψ 态中的平均值

$$\overline{l_z}=|c_1|^2\hbar$$

（2）又从波函数 ψ 看出，l 也可以有两种值，体系处 Y_{11} 态中时 $\hat{l}^2$ 测值为

$$l(l+1)\hbar^2=1(1+1)\hbar^2=2\hbar^2$$

当体系处在 Y_{20} 态时 l^2 的测值为

$$2(2+1)\hbar^2=6\hbar^2$$

相应的几率即表示该态的展开式项系数的复平方：$|c_1|^2$，$|c_2|^2$

l^2 的并态 ψ 中的平均值

$$\overline{l^2}=\{2|c_1|^2+6|c_2|^2\}\hbar^2$$

$$\begin{cases} L_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\ L_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\ L_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) \end{cases}$$

(3)关于在ψ态中$\hat{l}_x$，$\hat{l}_y$的可能测值可以从对称性考虑来确定，当使用直角坐标表示算符时，$\hat{l}_x$，$\hat{l}_y$，$\hat{l}_x$有轮换对称性，由于在ψ态中l^2可有二种量子数$l=1,2$所以将l_z轮换l_x的结果，知道l_x的可能测值只能是

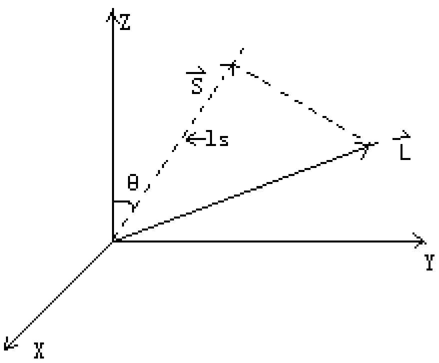
$$l_x = 2\hbar,\ \hbar,\ 0,\ -\hbar,\ -2\hbar$$

同理，l_y的可能测值也是这此值

$$l_y = 2\hbar,\ \hbar,\ 0,\ -\hbar,\ -2\hbar$$

但如要计算l_x（或l_y）得到某个测值的几率，则需要较多计算。

4.32　求证在$\hat{l}_x$的本征态下，角动量沿着与 z 轴成θ_0的角度的方向上的分量的平均值是：$m\hbar\cos\theta_0$。



（解）角动量$\hat{\vec{l}}$沿着与 z 成θ解的方向（此方向用单位矢$\vec{S}$表示，它不是唯一的，因由方位角ϕ_0给定），有一投影$\hat{l}_z$，它的解析式是：

$$\vec{s} = \vec{i}\sin\theta_0\cos\phi_0 + \vec{j}\sin\theta_0\sin\phi_0 + \vec{k}\cos\theta_0$$

注意：这里的 θ_0 **，** ϕ_0 **不是变量，是数。**

$$\hat{l}_z = \vec{l}\cdot\vec{s} = (\vec{i}\hat{l}_x + \vec{j}\hat{l}_y + \vec{k}\hat{l}_z)\cdot(\vec{i}\sin\theta_0\cos\phi_0 + \vec{j}\sin\theta_0\sin\phi_0 + \vec{k}\cos\theta_0)$$

$$= \sin\theta_0\cos\phi_0\hat{l}_x + \sin\theta_0\sin\phi_0\hat{l}_y + \cos\theta_0\hat{l}_z$$

（1）

计算在 $\hat{l}_z$ 的本征态 Y_{im} 中角动量投影 $\hat{l}_z$ 的平均值：

$$\overline{l_z} = \iint_\Omega Y_{lm}{}^*(\sin\theta_0\cos\phi_0\hat{l}_x)Y_{lm}d\Omega + \iint Y_{lm}{}^*(\sin\theta_0\sin\phi_0\cdot\hat{l}_y)Y_{lm}d\Omega$$

$$+\iint Y_{lm}{}^*(\sin\theta_0\cdot\hat{l}_z)Y_{lm}d\Omega$$

（2）

式中 $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ 根据（16）题的结论，$\hat{l}_z$ 本征态下 $\overline{l_x} = 0$，$\overline{l_y} = 0$

故前一式

第一，二两个积分无贡献，由于：$\hat{l}_z Y_{im} = m\hbar Y_{im}$，因而 $\overline{l_z} = m\hbar\cos\theta_0$ （3）

4.26 证明对任何两个波函数 ψ，φ，满足下述施瓦茨的不等式：

$$|(\psi,\varphi)| \le \sqrt{(\psi,\psi)(\varphi,\varphi)}$$

（证明）本题有一定的证明法，它和海森伯的测不准关系式的普遍证法相类似，首先，寻找一个含有 ψ，φ 的复平方式子，令这个式子大于零，经过试探性计算，知道采取下式有效：

$$I = |\psi - \lambda\varphi|^2 = \iiint(\psi^* - \lambda^*\varphi^*)(\psi - \lambda\varphi)d\tau \ge 0$$

此式中的 λ 尚待选择，将前式展开写成标识和形式：

$$I = (\psi,\psi) - \lambda(\psi,\varphi) - \lambda^*(\varphi,\psi) + \lambda^*\lambda(\varphi,\varphi) \qquad (1)$$

前式中第一，四二项恒为正，二，三两项符号不定，我们这样来选取 λ，使它能使 I 的二个异号项抵消，由于 λ 未定，这种选择是可能的：

$$I = (\psi,\psi) - \lambda(\psi,\phi) - \lambda^*[(\phi,\psi) - \lambda(\phi,\phi)] \ge 0 \qquad (2)$$

选取方括号内项为零，得 $\lambda = \dfrac{(\varphi,\psi)}{(\varphi,\varphi)}$，于是：$\lambda^* = \dfrac{(\varphi,\psi)^*}{(\varphi,\varphi)^*} = \dfrac{(\psi,\varphi)}{(\varphi,\varphi)}$

代入（2）得：$I=(\psi,\psi)-\dfrac{(\varphi,\psi)}{(\varphi,\varphi)}(\psi,\varphi)\ge 0$　　　　（3）

此式即待证的一个不等式。

4.27　设 $\hat{H}$ 为正定的厄密算符，u,v 为任意二波函数，证明：

$$(u,\hat{H}v)^2 \le (u,\hat{H}u)(v,\hat{H}v)$$

（证明）因为 $\hat{H}$ 是正定的，按定义它的平均值是正数，即不论在何态中有：

$$(\psi,\hat{H}\psi)=\iiint \psi^*\hat{H}\psi d\tau \ge 0$$

经过试算知道，仿照测不准关系的普遍证法，选取 ψ 使 u,v 有关，令 $\psi=u+\lambda v$

又设　$I\equiv(u+\lambda v,\hat{H}(u+\lambda v))\ge 0$　　　（1）

$$I=(u,\hat{H}u)+\lambda(u,\hat{H}v)+\lambda^*(v,\hat{H}u)+\lambda^*\lambda(v,\hat{H}v)]\ge 0 \qquad (2)$$

$$I=(u,\hat{H}u)+\lambda(u,\hat{H}v)+\lambda^*[(v,\hat{H}u)+\lambda(v,\hat{H}v)]\ge 0$$

选取方括号内式子为零，解出 lambda。

$$\lambda=-\frac{(v,\hat{H}u)}{(v,\hat{H}v)} \qquad (3)$$

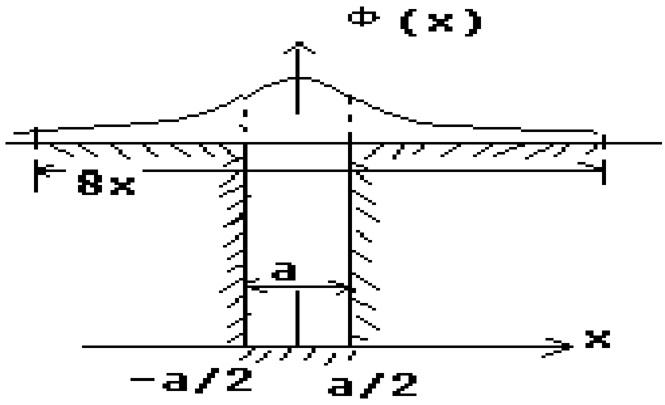
将（3）代入（2）：

$$I=(u,\hat{H}u)-\frac{(v,\hat{H}u)}{(v,\hat{H}v)}(u,\hat{H}v)\ge 0 \qquad (4)$$

整理后就得待证一式。

- **在一维对称势阱中，粒子至少存在一种束缚态（见 3.1 节）在给定势阱深度 V_0 情况下，减少势阱宽度 a，使 $a^2 << \dfrac{\hbar}{mV_0}$，粒子动量不确定度 $\delta p=\sqrt{mV_0}$，位置不确定度 $\delta x=a$，因而下列关系似乎存在 $\delta p\cdot\delta x=\sqrt{mV_0}a<<\hbar$，这与测不准确关系矛盾，错误何在？**

（解）在一维有限深（V_0）势阱的问题中，以势阱中点作为原点时，至少有一个偶宇



称的束缚定态。但坐标不确定度 δx 不能简单的用势阱宽度 a 来估计，估计值只需正确到数量级，势阱两边的波函数是

$$\psi(x^-) = Ce^{k'x} \quad (x < \frac{a}{2})$$

$$\psi(x^+) = Ce^{-k'x} \quad (x > \frac{a}{2})$$

可设波宽度扩展到振幅 $\frac{1}{e}$ 处，即 $Ce^{-k'\cdot(\frac{\delta x}{2})} \le Ce^{-1}$，得

$$\delta x \ge \frac{2}{k'} = \sqrt{\frac{2}{m(V_0 - E)}}\hbar \approx \sqrt{\frac{2}{mV_0}}\hbar, \qquad a \text{ 小时} \quad V_0 - E \approx V_0$$

因此 $\quad \delta x \delta p \ge \sqrt{\frac{2}{mV_0}}\hbar \cdot \sqrt{mV_0} = \sqrt{2}\hbar \ge \frac{\hbar}{2}$

这与测不准不相矛盾，题给论点的错误，在于随意地估计 x 的不确定范围。

注：其能量 E 决定于条件：$\sqrt{E}\lg\frac{\sqrt{2mEa}}{2\hbar} = \sqrt{V_0 - E}$，因此这个基态能级 E 与 a 有关， a 很小时，E 也甚小。

4.25　证明在不连续的能量本征态下，动量平均值是零。

（证明）以一维为例，可推广到三维，**先证普通公式**

$$[H,x]=(\frac{mi}{\hbar})^{-1}\hat{p}\text{，}\quad H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)$$

对任意波函数Ψ：

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

$$=-\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial x}=\frac{\hbar}{mi}\frac{\partial}{\partial x}\Psi\cdot\frac{\hbar}{i}=\frac{\hbar}{mi}\hat{p}\Psi$$

因而 $$\left[\hat{H},x\right]=\frac{\hbar}{mi}\hat{p}$$

现在取该式二边在能量本征态Ψ（分立）下的平均值，并注意$\hat{H}\Psi=E\Psi$：

$$\int\Psi^*(\hat{H}x\Psi-x\hat{H}\Psi)dx$$

$$=\int[(\hat{H}\Psi)^*(x\Psi)-\Psi^*x(\hat{H}\Psi)]dx$$

$$=E^*\int\Psi^*x\Psi dx-E\int\Psi^*x\Psi dx$$

此式因$E=E^*$而等于零，从而$\overline{p}=0$。

4.33 设属于某能级E的三个简并态$(\Psi_1\Psi_2\Psi_3)$彼此线性无关但不正交，试找出三个正交归一化的波函数，它们是否仍为简并？

（解）用Schmidt法，选 $\varphi_1=\Psi_1/\sqrt{\int_\tau\Psi_1^*\Psi_1d\tau}$ （1）

则Ψ_1被归一化了。

选 $$\varphi_2'=\Psi_2-(\int_\tau\Psi_2\varphi_1^*d\tau)\varphi_1$$

（2）

则

$$\int_\tau\varphi_1^*\varphi_2'd\tau=\int\varphi_1^*\Psi_2d\tau-(\int\varphi_1^*\Psi_2d\tau)(\int\varphi_1^*\varphi_1d\tau)=0$$

故$\phi_2^{'},\phi_1$正交。

选φ_2使$\varphi_2=\varphi_2^{'}\Big/\sqrt{\int\varphi_2^{'}*\varphi_2^{'}d\tau}$则$\varphi_2,\varphi_1$为正交归一组。

再设 $$\varphi_3^{'}=\Psi_3-(\int\Psi_3\varphi_1*d\tau)\varphi_1-(\int\Psi_3\varphi_2*d\tau)\varphi_2$$

（3）

则

$$\int\varphi_3^{'}\varphi_1*d\tau=\int\Psi_3\varphi_1*d\tau-(\int\Psi_3\varphi_1*d\tau)(\int\varphi_1*\varphi_1 d\tau)$$

$$-(\int\Psi_3\Psi_2*d\tau)(\int\varphi_2\varphi_1*d\tau)=0$$

$$\int\varphi_3^{'}\varphi_2*d\tau=\int\Psi_3\varphi_2*d\tau-(\int\Psi_3\varphi_1*d\tau)(\int\varphi_1\varphi_2*d\tau)$$

$$-(\int\Psi_3\varphi_2*d\tau)(\int\varphi_2\varphi_2*d\tau)=0$$

故$\varphi_3^{'}$与φ_1,φ_2都能正交。

选 $$\varphi_3=\varphi_3^{'}\Big/\sqrt{\int\varphi_3^{'}*\varphi_3^{'}d\tau}$$

这样选的$(\Psi_1\Psi_2\Psi_3)$是正交归一化组。将$\hat{H}$算符作用于（1）式：

$$\hat{H}\varphi_1=\hat{H}\Psi_1/\sqrt{\int_\tau\Psi_1*\Psi_1 d\tau}=E\varphi_1$$

同理$\hat{H}$作用于（2）式：

$$\hat{H}\varphi_2^{'}=\hat{H}\Psi_2-(\int\Psi_2\varphi_1*d\tau)\hat{H}\varphi_1$$

$$=E\{\Psi_2-(\int\Psi_2\varphi_1*d\tau)\varphi_1\}=E\varphi_2^{'},$$

$$\hat{H}\varphi_2=E\varphi_2$$

同理有 $\hat{H}\varphi_3 = E\varphi_3$，因而 $(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$ 仍有共同的能量本征值，简并不消失。