2.4 设一维自由粒子的初态

$$\psi(x,0)=(2\pi\alpha^2)^{-1/4}\exp\left[ik_0(x-x_0)-\left(\frac{x-x_0}{2\alpha}\right)^2\right]\quad(\alpha>0)$$

求 $t>0$ 时 $\psi(x,t)$ 及波包运动特征。

解： 利用题 2.3 的结果。题给初态记为

$$\psi(x,0)=e^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\tag{2.13}$$

其中

$$\psi_0(x,0)=\frac{1}{(2\pi\alpha^2)^{1/4}}\exp\left[-\frac{(x)^2}{4\alpha^2}\right]\tag{2.14}$$

利用时间演化算符，$t>0$ 时

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=e^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\psi(x,0)=e^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}e^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}\psi_0(x,0)\\&=e^{-\mathrm{i}x_0\hat{p}/\hbar}e^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0\hat{x}}e^{\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}e^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\psi_0(x,0)\end{aligned}\tag{2.15}$$

对于一维自由粒子，Hamilton 量为 $H=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}$，这样有

$$e^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}xe^{\mathrm{i}Ht/\hbar}=x+\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}[x,H]+0=x+\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\frac{\mathrm{i}\hbar p}{m}=x-\frac{tp}{m}$$

因而

$$e^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0x}e^{\mathrm{i}Ht/\hbar}=\exp\left[\mathrm{i}k_0\left(x-\frac{tp}{m}\right)\right]=e^{\mathrm{i}k_0tp/m}e^{\mathrm{i}k_0x}e^{\mathrm{i}\hbar k_0{}^2t/2m}$$

上式带入(2.15)得

$$\begin{aligned}\psi(x,t)&=e^{-\mathrm{i}(x_0+k_0t/m)p/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0x}e^{\mathrm{i}\hbar k_0{}^2t/m}e^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}\psi_0(x,0)\\&=e^{\mathrm{i}\hbar k_0{}^2t/m}e^{-\mathrm{i}(x_0+\hbar k_0t/m)p/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,t)\\&=e^{\mathrm{i}\hbar k_0{}^2t/m}e^{-\mathrm{i}(x_0+\hbar k_0t/m)p/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,t)\end{aligned}\tag{2.16}$$

其中 $e^{-\mathrm{i}(x_0+\hbar k_0t/m)p/\hbar}$ 为平移算符，而 $\psi_0(x,t)$ 由题 2.3 的式(2.12)给出。这样我们得到

$$\psi(x,t)=\left(\frac{\alpha^2}{2\pi}\right)^{1/4}\frac{e^{\mathrm{i}\hbar k_0{}^2 t/2m}}{\left(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m\right)^{1/2}}\exp\left[\mathrm{i}k_0\left(x-x_0-k_0t/m\right)-\frac{\left(x-x_0-k_0t/m\right)^2}{4\left(\alpha^2+\mathrm{i}\hbar t/2m\right)}\right] \quad (2.17)$$

由此给出

$$\left|\psi(x,t)\right|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\alpha(t)}\exp\left[\frac{\left(x-x_0-k_0t/m\right)^2}{2\alpha(t)^2}\right],\ \ \alpha(t)=\left(\alpha^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\alpha^2}\right)^{1/2} \quad (2.18)$$

从计算得到的$\psi(x,t)$，$\left|\psi(x,t)\right|^2$知，粒子态为一运动的波包，波包中心（概率最大点处）的位置为

$$x_c(t)=x_0+\hbar k_0t/m=x_0+vt \quad (2.19)$$

其中$v=\hbar k_0/m$。可见波包从中心x_0开始，以匀速$v=\hbar k_0/m$运动。$v=\hbar k_0/m$正是波包的群速度。

为进一步讨论波包的运动特征，我们来计算一些特征量。易知波函数已归一化，由式(2.18)得到位置期望值

$$\begin{aligned}\overline{x}(t)&=\int_{-\infty}^{+\infty}x\left|\psi(x,t)\right|^2dx=\int_{-\infty}^{+\infty}x\frac{1}{\sqrt{2\pi}\alpha(t)}\exp\left[\frac{\left(x-x_c(t)\right)^2}{2\alpha(t)^2}\right]dx\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left(x'+x_c(t)\right)\frac{1}{\sqrt{2\pi}\alpha(t)}\exp\left[-\frac{x'^2}{2\alpha(t)^2}\right]dx'=x_c(t)\end{aligned} \quad (2.20)$$

可见对于本题的状态$\psi(x,t)$，粒子的位置期望值等于波包中心位置$\overline{x}(t)=x_c(t)$。而位置均方差为

$$\begin{aligned}\left(\Delta x\right)^2&=\int_{-\infty}^{+\infty}\left|x-\overline{x}(t)\right|^2\left|\psi\left(x,t\right)\right|^2\frac{1}{\sqrt{2\pi}\alpha(t)}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\left|x-x_c(t)\right|^2}{\sqrt{2\pi}\alpha(t)}\exp\left[\frac{\left(x-x_c(t)\right)^2}{2\alpha(t)^2}\right]dx\\&=\int_{-\infty}^{+\infty}x'^2\frac{1}{\sqrt{2\pi}\alpha(t)}\exp\left[-\frac{x'^2}{2\alpha(t)^2}\right]dx'=\alpha(t)^2\end{aligned}$$

(2.21)

位置涨落为

$$\Delta x(t)=\alpha(t)=\left(\alpha^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\alpha^2}\right)^{1/2} \quad (2.22)$$

对于自由粒子，动量是守恒量，动量期望值、涨落不随时间改变，计算时，可选初态进行，可直接代题给初态【式(2.13)，该态已经归一化】计算，动量期望值为

$$\overline{p}=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x,0)^{*}p\psi(x,0)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[e^{-\mathrm{i}x_0p/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,0)\right]^{*}pe^{-\mathrm{i}x_0p/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,0)dx$$
$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[e^{\mathrm{i}x_0p/\hbar}e^{-\mathrm{i}x_0p/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,0)\right]^{*}pe^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,0)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[e^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,0)\right]^{*}pe^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,0)dx$$
$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0{}^{*}(x,0)\left(p+\hbar k_0\right)\psi_0(x,0)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0{}^{*}(x,0)p\psi_0(x,0)dx+\hbar k_0$$
$$=\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi_0(x)dx+\hbar k_0=\hbar k_0 \tag{2.23}$$

上面利用的$\psi_0(x)$的实数性，以及$\overline{p}$的实数条件。动量均方差为

$$\left(\Delta p\right)^2=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[e^{-\mathrm{i}x_0p/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,0)\right]^{*}\left(p-\overline{p}\right)^2e^{-\mathrm{i}x_0p/\hbar}e^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,0)dx$$
$$=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[e^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,0)\right]^{*}\left(p-\overline{p}\right)^2e^{\mathrm{i}k_0x}\psi_0(x,0)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0{}^{*}(x,0)p^2\psi_0(x,0)dx$$
$$=-\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_0(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_0(x)dx=\hbar^2\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{\partial}{\partial x}\psi_0(x)\right]\left[\frac{\partial}{\partial x}\psi_0(x)\right]dx$$

最后一步用了分部积分。再代入式(2.14)所给$\psi_0(x)$进一步计算得动量均方差为

$$\left(\Delta p\right)^2=\frac{\hbar^2}{4\alpha^2} \tag{2.24}$$

而动量涨落为

$$\Delta p=\frac{\hbar}{2\alpha} \tag{2.25}$$

从式(2.19)、(2.20)和式(2.22)可知，随时间增加，波包在以v速度运动的同时逐渐扩散。这主要表现在两个方面，波包宽度Δx增大，波包中心强度减弱。

$$\Delta x=\sqrt{\left(\frac{\hbar}{2\Delta p}\right)^2+\left(\frac{\Delta p}{m}\right)^2t^2}$$

4.9 设力学量算符A满足最简单的代数方程为

$$f(A)=A^n+C_1A^{n-1}+C_2A^{n-2}+\ldots+C_n=0 \tag{4.7}$$

C_1，C_2，…，C_n是常系数。证明A有n个本征值，它们都是$f(x)=0$的根。

证明：将式(4.7)作用于体系任意状态的波函数ψ上，均应有

$$f(A)\psi=0 \tag{4.8}$$

现取ψ为A的本征函数ψ_a，本征值为a，即有$A\psi_a = a\psi_a$，带入式(4.8)，

$f(A)\psi_a = f(a)\psi_a$，也就是

$$f(a)\psi_a = \left(a^n + C_1 a^{n-1} + C_2 a^{n-2} + \ldots + C_n\right)\psi_a = 0 \tag{4.9}$$

$f(a)$是一个数，ψ_a非零态，因此上式给出

$$f(a) = a^n + C_1 a^{n-1} + C_2 a^{n-2} + \ldots + C_n = 0 \tag{4.10}$$

设$\{\psi_{a1}, \psi_{a2}, \ldots, \psi_{am}\}$是$A$的所有本征态，相应的本征值为$a_1, a_2, \ldots, a_m$。根据式(4.10)，这些本征值都是$f(a)=0$的根（实根）。由代数学基本定理，$m \le n$，且

$$f(a) = \prod_{k=1}^{m}\left(a - a_k\right)\cdot g(a)$$

因而

$$f(A) = \prod_{k=1}^{m}\left(A - a_k\right)\cdot g(A) = A^n + C_1 A^{n-1} + C_2 A^{n-2} + \ldots + C_n$$

题给，式(4.7)中的$f(A)$式A满足的最简单的代数方程，上式中只能是$g(A)=1$，由此可知$m=n$。故式(4.10)应有n个根，它们都是A的本征值。

反之，如已知力学量算符A的n个本征值$a_1, a_2, \ldots, a_n$，则A的任何一个本征函数显然满足方程

$$\left(A - a_1\right)\left(A - a_2\right)\ldots\left(A - a_n\right)\psi_a = 0 \tag{4.11}$$

力学量算符A的所有本征态具有完备性，或者说任何波函数都可以表示为A的所有本征态波函数的线性叠加，所有式(4.11)对任何波函数都成立，因此

$$\left(A - a_1\right)\left(A - a_2\right)\ldots\left(A - a_n\right) = 0 \tag{4.12}$$

上式应该和式(4.7)等价。

4.31 设粒子处于$\psi = c_1 Y_{11} + c_2 Y_{20}$的状态（已归一化，即$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$），试求：

（a）L_z的可能测值及平均值；

（b）L^2的可能测值及相应的概率；

（c）L_x的可能测值及相应的概率。

解：Y_{11}，Y_{20}均是L^2，L_z的共同本征态，本证方程如下所示

$$L^2Y_{11}=2\hbar^2Y_{11}，\ L_zY_{11}=1\hbar^2Y_{11}$$

$$L^2Y_{20}=6\hbar^2Y_{20}，\ L_zY_{20}=0$$

Y_{11}，Y_{20}相互正交，且都已归一化。题给$\psi=c_1Y_{11}+c_2Y_{20}$已归一化，则ψ处于Y_{11}与Y_{20}的概率分别为$|c_1|^2$与$|c_2|^2$。这样在态ψ下

(a)测L_z的可能测值为$\hbar$，0，相应的概率分别为$|c_1|^2$，$|c_2|^2$。故平均值为$|c_1|^2\hbar$；

(b)测L^2的可能测值为$2\hbar^2$，$6\hbar^2$，相应的概率分别为$|c_1|^2$，$|c_2|^2$；

(c)要求L_x的可能测值及相应的概率，我们要将ψ按L_x的本征态展开，这里我们暂不用 d 函数或升降算符的矩阵表示，而采用轮换法。已知L^2，L_z的共同本征态，我们可以如下通过轮换$x\to y, y\to z, z\to x$得到L^2与L_x的共同本征态，即由

$$Y_{1,\pm1}=\mp\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8\pi}}\frac{x+\mathrm{i}y}{r}$$
$$Y_{1,0}=\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}}\frac{z}{r}$$
$$Y_{2,\pm2}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x\pm\mathrm{i}y)^2}{r^2}$$
$$Y_{2,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(x\pm\mathrm{i}y)z}{r^2}$$
$$Y_{2,0}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{2z^2-x^2-y^2}{r^2}$$

通过轮换$x\to y, y\to z, z\to x$得到

$$Y^x_{1,\pm1}=\mp\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8\pi}}\frac{y+\mathrm{i}z}{r}=\mp\frac{\mathrm{i}}{2}\left(Y_{1,1}+Y_{1,-1}\right)-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}Y_{1,0}$$
$$Y^x_{1,0}=\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}}\frac{x}{r}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{1,-1}-Y_{1,1}\right)$$
$$Y^x_{2,\pm2}=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(y\pm\mathrm{i}z)^2}{r^2}=-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}Y_{2,0}\mp\frac{1}{2}\left(Y_{2,1}+Y_{2,-1}\right)-\frac{1}{4}\left(Y_{2,-2}+Y_{2,2}\right)$$
$$Y^x_{2,\pm1}=\mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{(y\pm\mathrm{i}z)x}{r^2}=\pm\frac{\mathrm{i}}{2}\left(Y_{2,2}-Y_{2,-2}\right)+\frac{\mathrm{i}}{2}\left(Y_{2,1}-Y_{2,-1}\right)$$
$$Y^x_{2,0}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{2x^2-y^2-z^2}{r^2}=-\frac{1}{2}Y_{2,0}+\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}\left(Y_{2,-2}+Y_{2,2}\right)$$

上式将Y^x表示为Y的叠加，这可通过对分子的多项式分解得到；对$l=2$只需要注意z^2仅

出现在$Y_{2,0}$中，而z得一次项仅出现在$Y_{2,\pm1}$中。由上面的结果

$$\begin{aligned} Y_{1,1} &= Y_{1,1}^x\left(Y_{1,1}^x, Y_{1,1}\right) + Y_{1,0}^x\left(Y_{1,0}^x, Y_{1,1}\right) + Y_{1,-1}^x\left(Y_{1,-1}^x, Y_{1,1}\right) \\ &= Y_{1,1}^x\left(Y_{1,1}, Y_{1,1}^x\right)^* + \ldots\ldots = \frac{\mathrm{i}}{2}Y_{1,1}^x - \frac{1}{\sqrt{2}}Y_{1,0}^x - \frac{\mathrm{i}}{2}Y_{1,-1}^x \end{aligned} \tag{4.58}$$

$$\begin{aligned} Y_{2,0} &= \sum_{m=-2}^{2} Y_{2,m}^x\left(Y_{2,m}^x, Y_{2,0}\right) = \sum_{m=-2}^{2} Y_{2,m}^x\left(Y_{2,0}, Y_{2,m}^x\right)^* \\ &= -\frac{1}{2}Y_{2,0}^x - \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}\left(Y_{2,-2}^x + Y_{2,2}^x\right) \end{aligned} \tag{4.59}$$

上面结果表明在Y_{11}下，l_x的可能测值为$0,\hbar,-\hbar$，因此Y^x以及Y均以归一化，故相应的概率幅分别为$-\frac{1}{\sqrt{2}},\frac{\mathrm{i}}{2},-\frac{\mathrm{i}}{2}$，而相应的概率分别为$\frac{1}{2},\frac{1}{4},\frac{1}{4}$. 在$Y_{20}$下，$l_x$的可能测值为$0,\hbar,-\hbar,2\hbar,-2\hbar$，相应的概率幅分别为$-\frac{1}{2},0,0,\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}},-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2}}$.而相应的概率分别为$\frac{1}{4},0,0,\frac{3}{8},\frac{3}{8}$.

这样在态$\psi = c_1Y_{11} + c_2Y_{20}$下，$l_x$的可能测值为$0,\hbar,-\hbar,2\hbar,-2\hbar$，其概率依次为$\frac{|c_1|^2}{2}+\frac{|c_2|^2}{4},\frac{|c_1|^2}{4},\frac{|c_1|^2}{4},\frac{3|c_2|^2}{8},\frac{3|c_2|^2}{8}$.

4.39 设$\hat{A}$与$\hat{B}$不对易，另$\hat{C}=[\hat{A},\hat{B}]$，设$\hat{C}$与$\hat{A}$和$\hat{B}$都对易，即$[\hat{A},\hat{C}]=0$，$[\hat{B},\hat{C}]=0$。

证明：

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}C} = e^{\hat{B}}e^{\hat{A}}e^{\frac{1}{2}C}$$

更一般形式

$$e^{\lambda\left(\hat{A}+\hat{B}\right)} = e^{\lambda\hat{A}}e^{\lambda\hat{B}}e^{-\frac{\lambda^2}{2}C} = e^{\lambda\hat{B}}e^{\lambda\hat{A}}e^{\frac{\lambda^2}{2}C}$$

证法一： 设$f(\lambda)=e^{\lambda A}e^{\lambda B}$，对$\lambda$求导，得

$$\begin{aligned} f'(\lambda) &= Ae^{\lambda A}e^{\lambda B} + e^{\lambda A}Be^{\lambda B} = [A + e^{\lambda A}Be^{-\lambda A}]e^{\lambda A}e^{\lambda B} \\ &= [A + e^{\lambda A}Be^{-\lambda A}]f(\lambda) = [A + g(\lambda)]f(\lambda) \end{aligned} \tag{4.81}$$

其中令$g(\lambda)=e^{\lambda A}Be^{-\lambda A}$，对对$\lambda$求导，得

$$g'(\lambda)=e^{\lambda A}(AB-BA)e^{-\lambda A}=e^{\lambda A}Ce^{-\lambda A}=C \tag{4.82}$$

由 $\lambda=0$ 初始条件 $g(0)=B$，根据上式解得

$$g(\lambda)=B+C\lambda \tag{4.83}$$

上式代入到(4.81)得， $f'(\lambda)=(A+B+C\lambda)f(\lambda)$。同理可证 $f'(\lambda)=f(\lambda)(A+B+C\lambda)$。也就有

$$f'(\lambda)=(A+B+C\lambda)f(\lambda)=f(\lambda)(A+B+C\lambda)$$

由此可知 $f(\lambda)$ 和 $(A+B+C\lambda)$ 对易。关于 $f(\lambda)$ 的微分方程为

$$\frac{f'(\lambda)}{f(\lambda)}=A+B+C\lambda \tag{4.84}$$

由 $\lambda=0$ 初始条件 $f(0)=B$，根据上式解得

$$f(\lambda)=e^{\lambda A+\lambda B+\frac{1}{2}\lambda^2 C} \tag{4.85}$$

取 $\lambda=1$，即得

$$e^A e^B=e^{A+B+\frac{1}{2}C}=e^{A+B}e^{\frac{1}{2}C}$$

即有

$$e^{\hat{A}+\hat{B}}=e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}C} \tag{4.86}$$

$A\leftrightarrow B$，得

$$e^{A+B}=e^B e^A e^{\frac{1}{2}C} \tag{4.87}$$

此称 Baker-Hausdorff 公式。对于 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易的情况，$\hat{C}=0$，显然 $e^{A+B}=e^A e^B=e^B e^A$。

证法二　设 $f(\lambda)=e^{-\lambda(A+B)}e^{\lambda A}e^{\lambda B}$，对 λ 求导得

$$\begin{aligned}\frac{df(\lambda)}{d\lambda} &= e^{-\lambda(A+B)}(A+B)e^{\lambda A}e^{\lambda B} + e^{-\lambda(A+B)}Ae^{\lambda A}e^{\lambda B} + e^{-\lambda(A+B)}e^{\lambda A}Be^{\lambda B} \\ &= e^{-\lambda(A+B)}\left(e^{\lambda A}B - Be^{\lambda A}\right)e^{\lambda B} = -e^{-\lambda(A+B)}\lambda[B,A]e^{\lambda A}e^{\lambda B} \\ &= \lambda[A,B]e^{-\lambda(A+B)}e^{\lambda A}e^{\lambda B} = \lambda Cf\end{aligned}$$

其中 $C=[A,B]$ 与 A，B 都对易，也就是

$$\frac{df(\lambda)}{d\lambda} = \lambda Cf \tag{4.88}$$

积分得，$f = e^{\frac{1}{2}\lambda^2 C}$，也就是

$$f(\lambda) = e^{-\lambda(A+B)}e^{\lambda A}e^{\lambda B} = e^{\frac{1}{2}\lambda^2 C} \tag{4.89}$$

由上式可直接给出

$$e^{\lambda(A+B)} = e^{\lambda A}e^{\lambda B}e^{-\frac{1}{2}\lambda^2 C} \tag{4.90}$$

取 $\lambda=1$，即得

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}C}$$

与(4.86)类似，再做互换 $A \leftrightarrow B$，即得另一式。