第四章　量子力学中的力学量及表象变换

§4.1　力学量用算符表示

在量子力学中力学量有完全不同于经典力学的表示方法，是用算符来表示。

一、算符的定义

算符是一种操作、数学上称作一个映射或运算

$$\hat{F}:\ \psi(\vec{r}) \xrightarrow{\hat{F}} \varphi(\vec{r})\ ,$$

就是可以作用于一个波函数上变成另一个函数的运算，通常一个力学量 F 用算符表示，记作 $\hat{F}$，则 $\hat{F}\psi=\varphi$。

[例] 若 $\hat{F}=e^{-a\frac{d}{dx}}$，则有 $\hat{F}\psi(x)=e^{-a\frac{d}{dx}}\psi(x)=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(-a)^m}{m!}\frac{d^m}{dx^m}\psi(x)=\psi(x-a)$

由于 $\psi(x)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n x^n \Rightarrow \frac{d^m}{dx^m}\psi(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{n!}{(n-m)!}c_n x^{n-m}$ ，

另外

$$\psi(x-a)=\sum_{n=0}^{\infty}c_n(x-a)^n=\sum_{n=0}^{\infty}c_n\sum_{m=0}^{n}\begin{pmatrix}m\\n\end{pmatrix}x^{n-m}(-a)^m=\sum_{m=0}^{n}(-a)^m\sum_{n=0}^{\infty}c_n\frac{n!}{m!(n-m)!}x^{n-m}$$
$$=\sum_{m=0}^{n}\frac{(-a)^m}{m!}\frac{d^m\psi(x)}{dx^m}$$

于是，$\psi(x-a)=\sum_{m=0}^{\infty}(-a)^m\frac{d^m\psi(x)}{dx^m}$

二、算符的运算

1、线性算符：

对于 $\forall\,\psi_1$ 和 ψ_2、$\forall c_1,c_2\in\mathbb{C}$，若算符 $\hat{F}$ 满足 $\hat{F}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1\hat{F}\psi_1+c_2\hat{F}\psi_2$，则 $\hat{F}$ 是线性算符。

[例 1] 若 ψ_1 和 ψ_2 是薛定谔方程 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$ 的解，则叠加态 $c_1\psi_1+c_2\psi_2$ 是该体系的可能解。

[证] 事实上，$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1 i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1+c_2 i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2=c_1\hat{H}\psi_1+c_2\hat{H}\psi_2$ ，

当且仅当 $\hat{H}$ 是线性算符时，有 $\hat{H}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1\hat{H}\psi_1+c_2\hat{H}\psi_2$；

所以 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=\hat{H}\left(c_1\psi_1+c_2\psi_2\right)$。

[例 2] 对于定态薛定谔方程 $\hat{H}\psi=E\psi$，若 $\hat{H}\psi_1=E\psi_1$ 及 $\hat{H}\psi_2=E\psi_2$，则 $c_1\psi_1+c_2\psi_2$ 也是解。

[证] 由于 $E(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1E\psi_1+c_2E\psi_2=c_1\hat{H}\psi_1+c_2\hat{H}\psi_2$，

当且仅当 $\hat{H}$ 是线性算符时，有 $c_1\hat{H}\psi_1+c_2\hat{H}\psi_2=\hat{H}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)$ 成立，

所以，$E(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=\hat{H}\left(c_1\psi_1+c_2\psi_2\right)$。

因此，由态叠加原理知： 量子力学中的力学量算符必须是线性算符。

此外，量子力学不仅要求力学量算符是线性算符，而且方程是线性齐次。

方程 $\hat{F}\psi=A$ 就不行。因 $\hat{F}\psi_1=A$，$\hat{F}\psi_2=A$。但

$$\hat{F}(c_1\psi_1+c_2\psi_2)=c_1\hat{F}\psi_1+c_2\hat{F}\psi_2=A(c_1+c_2)。$$

而 $c_1+c_2\neq 1$。所以，方程形式只能为 $f(\hat{F})\psi=0$，且 $f(\hat{F})$ 必须是线性算符。当然，可观察的力学量算符不仅应是线性的，而且应是线性厄密算符。

注意：在本书中如未特殊声明，以后文中出现的算符均指线性算符。

2、算符之和

①算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 之和，记作 $\hat{A}+\hat{B}$； 定义：对于 $\forall\psi$ 都有 $(\hat{A}+\hat{B})\psi=\hat{A}\psi+\hat{B}\psi$，即整体作用于波函数等于单独作用于波函数的和。

② 性质：

交换律：$\hat{A}+\hat{B}=\hat{B}+\hat{A}$

结合律：$\hat{A}+\hat{B}+\hat{C}=\hat{A}+\left(\hat{B}+\hat{C}\right)=\left(\hat{A}+\hat{B}\right)+\hat{C}$。

3、算符之积

(1)、算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 之积，记作 $\hat{A}\hat{B}$； 定义：对 $\forall\psi$，都有 $\left(\hat{A}\hat{B}\right)\psi=\hat{A}\left(\hat{B}\psi\right)$，即算符之积对任何波函数

的作用等于乘积算符依次作用于波函数。

(2)、性质

①、$\hat{A}\hat{B}\hat{C}=\hat{A}\left(\hat{B}\hat{C}\right)=\left(\hat{A}\hat{B}\right)\hat{C}$ 满足结合律。

②、$\hat{A}\hat{B}\neq\hat{B}\hat{A}$ 不满足交换律，即对波函数的作用一般与作用顺序有关。

[例] 如 $\hat{p}_x x\neq x\hat{p}_x$，因为

$$\left(\hat{p}_x\hat{x}\right)\psi(x)=-i\hbar\frac{d}{dx}\left(\hat{x}\psi(x)\right)=-i\hbar\frac{d}{dx}\left(x\psi(x)\right)=-i\hbar\left(1+\frac{d}{dx}\psi(x)\right)$$

$$\left(x\hat{p}_x\right)\psi(x)=\hat{x}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)\right)=-i\hbar x\frac{d}{dx}\psi(x)$$

用算符之积可以定义算符的幂运算：$\hat{A}^n=\hat{A}\hat{A}\cdots\hat{A}$ 及 $\hat{A}^m\hat{A}^n=\hat{A}^{m+n}$。

4、算符相等

对于 $\forall\psi$，若两个算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 满足 $\hat{A}\psi=\hat{B}\psi$，则 $\hat{A}=\hat{B}$。

5、单位算符

单位算符记作 $\hat{I}$， 定义：对于 $\forall\psi$，有 $\hat{I}\psi=\psi$，即保持波函数不变的运算。

[例] 任意算符与单位算符乘积可交换，即 $\hat{A}\hat{I}=\hat{I}\hat{A}$。

[证] 对于 $\forall\psi$，有

$$\left.\begin{aligned}\hat{A}\hat{I}\psi&=\hat{A}(\hat{I}\psi)=\hat{A}\psi\\ \hat{I}\hat{A}\psi&=\hat{I}(\hat{A}\psi)=\hat{A}\psi\end{aligned}\right\}\Rightarrow\hat{A}\hat{I}\psi=\hat{I}\hat{A}\psi\Rightarrow\hat{A}\hat{I}=\hat{I}\hat{A}$$

6、逆算符

(1)、若由 $\hat{A}\psi=\phi$ 能唯一地解出 ψ，则可定义 $\hat{A}$ 的逆算符 $\hat{A}^{-1}$ 为 $\psi=\hat{A}^{-1}\varphi$。

(2)、性质

①、$\left(\hat{A}^{-1}\right)^{-1}=\hat{A}$，②、$\hat{A}\hat{A}^{-1}=\hat{A}^{-1}\hat{A}=\hat{I}$；

③、$\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\right)^{-1}=\hat{C}^{-1}\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}$，即算符积的逆等于各算符逆的反顺序之积。

因为

$$\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\right)^{-1}\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\right)=\hat{I}$$

$$\hat{C}^{-1}\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}\hat{A}\hat{B}\hat{C}=\hat{C}^{-1}\hat{B}^{-1}\hat{I}\hat{B}\hat{C}=\hat{C}^{-1}\hat{B}^{-1}\hat{B}\hat{C}=\hat{C}^{-1}\hat{I}\hat{C}=\hat{C}^{-1}\hat{C}=\hat{I}$$

7、算符的函数

设 $f(x)$ 在 $x=0$ 处各级导数 $f^{n}(0)=\left.\frac{d^{n}f}{dx}\right|_{x=0}$ 存在，幂级数展开收敛 $f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{n}(0)}{n!}x^{n}$ ，则

定义算符 $\hat{A}$ 的函数 $f(\hat{A})$ 为 $f(\hat{A})=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{n}(0)}{n!}\hat{A}^{n}$ 。

[例] 对于 $f(x)=e^{x}$ ，其各级导数 $f^{n}(0)=1$。由 $e^{x}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}x^{n}$ 得 $e^{\hat{A}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\hat{A}^{n}$ 。

如果函数不能以幂级数表示，则还有算符函数的自然展开。我们将在后面给出。

下面引入波函数空间的内积：

内积(标积)定义： 对于 $\forall\psi$ 和 φ ，内积定义如下：$\left(\psi,\varphi\right)\equiv\int\psi^{*}\varphi d\tau$ ，其中 $\int d\tau$ 指对体系的全部空间坐标进行积分， 坐标空间体积元 $d\tau=\begin{cases}dx & \text{一维}\\ dxdy & \text{二维}\\ dxdydz & \text{三维}\end{cases}$ 。

对于 $\forall\psi,\varphi,\varphi_{1},\varphi_{2}$ 及 $\forall c_{1},c_{2}\in\mathbb{C}$ ，内积有下列性质：

$$\begin{cases}\left(\psi,\psi\right)\geq 0\\ \left(\psi,\varphi\right)^{*}=\left(\varphi,\psi\right)\\ \left(\psi,c_{1}\varphi_{1}+c_{2}\varphi_{2}\right)=c_{1}\left(\psi,\varphi_{1}\right)+c_{2}\left(\psi,\varphi_{2}\right)\\ \left(c_{1}\varphi_{1}+c_{2}\varphi_{2},\psi\right)=c_{1}^{*}\left(\varphi_{1},\psi\right)+c_{2}^{*}\left(\varphi_{2},\psi\right)\end{cases}$$

8、转置算符

(1)、对于算符 $\hat{A}$ ，其转置算符记作 $\tilde{\hat{A}}$ 或 $\hat{A}^{T}$ 。

定义： 对于 $\forall\psi$ 和 φ ，有 $(\psi,\tilde{\hat{A}}\varphi)=(\varphi^{*},\hat{A}\psi^{*})$ 或 $\int\psi^{*}\tilde{\hat{A}}\varphi d\tau=\int\varphi\hat{A}\psi^{*}d\tau$ 。

[例] $\widetilde{\partial/\partial x}=-\partial/\partial x$ ，因为对于 $\forall\psi$ 和 φ 有 $\int_{-\infty}^{\infty}\varphi\frac{\partial}{\partial x}\psi^{*}dx=\varphi\psi^{*}\Big|_{-\infty}^{\infty}-\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\frac{\partial}{\partial x}\varphi dx$ ，

利用$\psi\big|_{x\to\pm\infty}=0$得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi\frac{\partial}{\partial x}\psi^{*}dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\left(-\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\widetilde{\frac{\partial}{\partial x}}\varphi dx\Rightarrow\int_{-\infty}^{\infty}\psi^{*}\left(\widetilde{\frac{\partial}{\partial x}}+\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi dx=0\text{。}$$

由于波函数ψ和φ的任意性，得到$\widetilde{\frac{\partial}{\partial x}}=-\frac{\partial}{\partial x}$。所以，在坐标表象中，$\tilde{\hat{\vec{p}}}=-\hat{\vec{p}}$。

(2)、性质

①、$\tilde{\tilde{\hat{A}}}=\hat{A}$，②、$\widetilde{\hat{A}+\hat{B}}=\tilde{\hat{A}}+\tilde{\hat{B}}$，即算符和的转置算符等于各算符的转置算符之和；

③、$\widetilde{\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\hat{E}}=\tilde{\hat{E}}\tilde{\hat{D}}\tilde{\hat{C}}\tilde{\hat{B}}\tilde{\hat{A}}$，即算符积的转置算符等于各算符的转置算符的反顺序乘积。

9、复共轭算符

(1)、算符$\hat{A}$的复共轭算符，记作$\hat{A}^{*}$； 定义： 对于$\forall\psi$，有$\hat{A}^{*}\psi=\left(\hat{A}\psi^{*}\right)^{*}$。

[例] 在坐标表象中，$\hat{\vec{p}}=-i\hbar\nabla\Rightarrow\hat{\vec{p}}^{*}=i\hbar\nabla=-\hat{\vec{p}}$。

(2)、性质

①、$\left(\hat{A}^{*}\right)^{*}=\hat{A}$，②、$\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^{*}=\hat{A}^{*}+\hat{B}^{*}$；

③、$\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{*}=\hat{A}^{*}\hat{B}^{*}$，即算符积的复共轭算符等于各算符的复共轭算符之积。

10、厄米共轭算符

(1)、算符$\hat{A}$的厄米共轭算符，记作$\hat{A}^{\dagger}$；

定义：对于$\forall\psi$和φ，有$(\psi,\hat{A}^{\dagger}\varphi)=(\hat{A}\psi,\varphi)$或$\int\psi^{*}\hat{A}^{+}\varphi d\tau=\int(\hat{A}\psi)^{*}\varphi d\tau$。

$$\int\psi^{*}\hat{A}^{+}\varphi d\tau=\int(\hat{A}\psi)^{*}\varphi d\tau=\int\varphi\hat{A}^{*}\psi^{*}d\tau=\int\psi^{*}\widetilde{\hat{A}^{*}}\varphi d\tau\Rightarrow\hat{A}^{\dagger}=\widetilde{\hat{A}^{*}}$$

[例题] $\hat{\vec{p}}^{\dagger}=\widetilde{\hat{\vec{p}}^{*}}=-\tilde{\hat{\vec{p}}}=\hat{\vec{p}}$、$\hat{\vec{r}}^{\dagger}=\hat{\vec{r}}$

(2)、性质

①、$\left(\hat{A}^{\dagger}\right)^{\dagger}=\hat{A}$，②、$\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^{\dagger}=\hat{A}^{\dagger}+\hat{B}^{\dagger}$；

③、$\left(\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\hat{E}\right)^{\dagger}=\hat{E}^{\dagger}\hat{D}^{\dagger}\hat{C}^{\dagger}\hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger}$，即算符积的厄米算符等于各算符的厄米算符的反顺序乘积。

[例题]

11、厄米算符

若 $\hat{A}^{\dagger}=\hat{A}$ ，则称算符 $\hat{A}$ 为厄米算符。也就是说，对于 $\forall\psi$ ，都有 $(\psi,\hat{A}\varphi)=(\hat{A}\psi,\varphi)\equiv(\psi,\hat{A}^{\dagger}\varphi)$ 或

$\int\psi^*(x)\hat{A}\varphi(x)dx=\int[\hat{A}\psi(x)]^*\varphi(x)dx$ 成立，则称算符 $\hat{A}$ 为厄米算符。

例如，算符 $\hat{x},\hat{p}_x,\hat{\vec{L}},\hat{H}$ 和空间反射 $\hat{P}$ 等都是厄米算符。

下面证明动量 $\hat{p}_x$ 是厄米算符。

设 $\psi(x)$ 和 $\varphi(x)$ 是两个任意的平方可积波函数

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\hat{p}_x\psi(x)\right]^*\varphi(x)dx=i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(x)d\psi^*(x)=i\hbar\left[\psi^*(x)\varphi(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)d\varphi(x)\right]$$

因波函数平方可积，则上式括号中第一项为零

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\hat{p}_x\psi(x)\right]^*\varphi(x)dx=-i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)d\varphi(x)=-i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\frac{d\varphi(x)}{dx}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\hat{p}_x\varphi(x)dx$$

因此，动量 $\hat{p}_x$ 是厄米算符。

【思考】在上面的证明中，如果 $\psi(x)$ 和 $\varphi(x)$ 是不平方可积的平面波，怎么办？

【思考】两个厄米算符的和是厄米算符吗？两个厄米算符的积是厄米算符吗？

[例] 证明：动能在任意量子态上的平均值大于零。

[证] 对于 $\forall\psi$ ，有 $\overline{E}_k=\left(\psi,\dfrac{\hat{p}_x^2}{2m}\psi\right)=\dfrac{1}{2m}(\psi,\hat{p}_x\hat{p}_x\psi)=\dfrac{1}{2m}(\hat{p}_x\psi,\hat{p}_x\psi)\geq 0$。式中第二步用到了厄米算符的性质，而最后一步则用到了内积的性质。

另外，由厄米算符的定义可知

$$\overline{A}=(\psi,\hat{A}\psi)=(\hat{A}\psi,\psi)=(\psi,\hat{A}\psi)^*=\overline{A}^*$$

[定理] 在任意状态上厄米算符的平均值均为实数。

因此厄米算符可以用来表达力学量。

12、幺正算符（unitary operator）

若 $\hat{A}^{\dagger}=\hat{A}^{-1}$，则称算符 $\hat{A}$ 为幺正算符。

若 $\hat{A}$ 为幺正算符，则有 $\hat{A}\hat{A}^{\dagger}=\hat{A}^{\dagger}\hat{A}=\hat{I}$ 。

[例题] 证明空间反射算符 $\hat{P}$ 既是厄米算符，也是幺正算符。

[证明] (1)、 $\hat{P}$ 是厄米算符:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\hat{P}\varphi(x)dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\varphi(-x)dx=\int_{+\infty}^{-\infty}\psi^*(-x)\varphi(x)d(-x)=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\hat{P}\psi(x)\right]^*\varphi(x)dx$$

$$\Rightarrow \hat{P}^{\dagger}=\hat{P}$$

因此 $\hat{P}$ 是厄米算符，它表达体系的宇称这一力学量。

(2)、 $\hat{P}$ 是幺正算符:　　$\hat{P}\hat{P}\psi(x)=\hat{P}\psi(-x)=\psi(x)$

$$\hat{P}\hat{P}=\hat{I}\quad,\ \hat{P}=\hat{P}^{-1}\ ,\ \hat{P}^{\dagger}=\hat{P}=\hat{P}^{-1}$$

因此 $\hat{P}$ 是幺正算符，它代表对体系的空间反射变换。

三、量子力学的基本对易关系式

1、算符的对易关系

(1)、算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的对易式定义：$\left[\hat{A}\ ,\hat{B}\right]\equiv\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$。

若 $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$ ，即 $\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$ ，则称 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 对易（交换）。

2、对易关系的计算

如果对于任意态 ψ ，有 $[\hat{A},\hat{B}]\psi=\hat{C}\psi$ ，则 $[\hat{A},\hat{B}]=\hat{C}$ 。

[例题] 计算 $[x,\hat{p}_x]=i\hbar$ 、$\left[\hat{p}_{\alpha},r^n\right]=-i\hbar\dfrac{x_{\alpha}}{r}\quad(n\in\mathbb{Z})$。

$$[x,\hat{p}_x]\psi(x)=-i\hbar\left(x\frac{d}{dx}-\frac{d}{dx}x\right)\psi(x)=i\hbar\psi(x)\Rightarrow[x,\hat{p}_x]=i\hbar\text{。}$$

$$\left[\hat{p}_{\alpha},r^n\right]\psi=-i\hbar\left(\frac{d}{dx_{\alpha}}r^n-r^n\frac{d}{dx_{\alpha}}\right)\psi=-i\hbar\frac{d}{dx_{\alpha}}\left(r^n\psi\right)+i\hbar r^n\frac{d}{dx_{\alpha}}\psi=-i\hbar\frac{dr^n}{dx_{\alpha}}\psi=-i\hbar nr^{n-2}x_{\alpha}\psi$$

$\Rightarrow \left[\hat{p}_\alpha, r^n\right] = -i\hbar n r^{n-2} x_\alpha$

当 $n=1$ 时，$\left[\hat{p}_\alpha, r\right] = -i\hbar \dfrac{x_\alpha}{r}$ ； 当 $n=-1$ 时，$\left[\hat{p}_\alpha, \dfrac{1}{r}\right] = i\hbar \dfrac{x_\alpha}{r^3}$。

3、最基本对易关系式

$$\left[\hat{x}_\alpha, \hat{x}_\beta\right]=0、\left[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta\right]=0、\left[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\beta\right]=i\hbar\delta_{\alpha\beta} \quad (\alpha,\beta=1,2,3)$$

4、对易式的运算规则

$$\begin{aligned}
&[\hat{A},\hat{B}]=-[\hat{B},\hat{A}]\\
&[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}]=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}]\\
&[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}\\
&[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}\\
&[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]=0
\end{aligned}$$

[例 1] $\left[\hat{x}, \dfrac{\hat{p}_x^2}{2m}\right] = \dfrac{1}{2m}[\hat{x}, \hat{p}_x\hat{p}_x] = \dfrac{1}{2m}\left(\hat{p}_x[\hat{x},\hat{p}_x]+[\hat{x},\hat{p}_x]\hat{p}_x\right)$

代入基本对易式 $[x,\hat{p}_x]=i\hbar$ 得 $\left[x, \dfrac{\hat{p}_x^2}{2m}\right] = \dfrac{1}{2m}(i\hbar\hat{p}_x + i\hbar\hat{p}_x) = \dfrac{i\hbar}{m}\hat{p}_x$

[例 2] 设 $F(x,p)$ 是 x 和 p 的整函数，即可展开成 $F(x,p)=\sum\limits_{m,n=0}^{\infty} C_{mn}x^m p^n$ 。证明下列关系式：

(1)、$\left[\hat{p},\hat{F}\right] = -i\hbar\dfrac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{x}}$ ，(2)、$\left[\hat{x},\hat{F}\right] = i\hbar\dfrac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{p}}$。

[证] (1)、$[\hat{p},\hat{F}] = \sum\limits_{m,n=0}^{\infty} C_{mn}[\hat{p},\hat{x}^m\hat{p}^n] = \sum\limits_{m,n=0}^{\infty} C_{mn}[\hat{p},\hat{x}^m]\hat{p}^n = \sum\limits_{m,n=0}^{\infty} C_{mn}\left(-i\hbar m\hat{x}^{m-1}\right)\hat{p}^n$

$$= -i\hbar\sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn}\frac{\partial}{\partial\hat{x}}\left(\hat{x}^m\right)\hat{p}^n = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{x}}\sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn}\hat{x}^m\hat{p}^n = -i\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{x}}$$

(2)、$[\hat{x},\hat{F}] = \sum\limits_{m,n=0}^{\infty} C_{mn}[\hat{x},\hat{x}^m\hat{p}^n] = \sum\limits_{m,n=0}^{\infty} C_{mn}\hat{x}^m[\hat{x},\hat{p}^n] = \sum\limits_{m,n=0}^{\infty} C_{mn}\hat{x}^m\left(i\hbar n\hat{p}^{n-1}\right)$

$$= i\hbar\sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn}\hat{x}^m\frac{\partial}{\partial\hat{p}}\left(\hat{p}^n\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial\hat{p}}\sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn}\hat{x}^m\hat{p}^n = i\hbar\frac{\partial\hat{F}}{\partial\hat{p}}$$

5、角动量的对易式

(1)、轨道角动量的定义：$\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}}$。

①、在直角坐标系中，$\hat{\vec{L}} = \hat{L}_1\vec{e}_1 + \hat{L}_2\vec{e}_2 + \hat{L}_3\vec{e}_3$，写成行列式形式：

$$\hat{\vec{L}} = \begin{vmatrix} \vec{e}_1 & \vec{e}_2 & \vec{e}_3 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ \hat{p}_1 & \hat{p}_2 & \hat{p}_3 \end{vmatrix} = -i\hbar \begin{vmatrix} \vec{e}_1 & \vec{e}_2 & \vec{e}_3 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ \partial/\partial x_1 & \partial/\partial x_2 & \partial/\partial x_3 \end{vmatrix};$$

它的三个分量具体写为
$$\begin{cases} \hat{L}_1 = x_2\hat{p}_3 - x_3\hat{p}_2 = -i\hbar\left(x_2\dfrac{\partial}{\partial x_3} - x_3\dfrac{\partial}{\partial x_2}\right) \\ \hat{L}_2 = x_3\hat{p}_1 - x_1\hat{p}_3 = -i\hbar\left(x_3\dfrac{\partial}{\partial x_1} - x_1\dfrac{\partial}{\partial x_3}\right) \\ \hat{L}_3 = x_1\hat{p}_2 - x_2\hat{p}_1 = -i\hbar\left(x_1\dfrac{\partial}{\partial x_2} - x_2\dfrac{\partial}{\partial x_1}\right) \end{cases},$$

②、可统一记作$\hat{L}_\alpha = (\vec{r} \times \hat{\vec{p}})_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\beta\hat{p}_\gamma$， 式中$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$称作 Levi-Civita 符号，是一个三阶全反对称张量。

Levi-Civita 符号$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$的定义如下：

(i)、当指标都不相同时$\varepsilon_{123} = 1$，对任意两个指标对换，要改变符号；

(ii)、当至少有两个指标相同时为零。

此外，经过计算可得$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$拥有下列性质
$$\begin{cases} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = 3! \\ \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\lambda} = 2!\delta_{\gamma\lambda} \\ \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\rho\lambda} = \delta_{\beta\rho}\delta_{\gamma\lambda} - \delta_{\beta\lambda}\delta_{\gamma\rho} \end{cases}。$$

注意：在本书中引入爱因斯坦符号约定，相重复的下标表示对该下标求和。

很容易证明：轨道角动量和坐标、动量之间的对易关系：

$$\left[\hat{L}_\alpha, \hat{x}_\beta\right] = \left[\hat{x}_\alpha \hat{L}_\beta,\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\gamma$$

$$\left[\hat{L}_\alpha, \hat{p}_\beta\right] = \left[\hat{p}_\alpha, \hat{L}_\beta\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{p}_\gamma。$$

[证] 利用基本对易关系式得

$$\left[\hat{L}_\alpha, \hat{x}_\beta\right] = \varepsilon_{\alpha\gamma\sigma}\left[\hat{x}_\gamma\hat{p}_\sigma, \hat{x}_\beta\right] = \varepsilon_{\alpha\gamma\sigma}\hat{x}_\gamma\left[\hat{p}_\sigma, \hat{x}_\beta\right] = -i\hbar\varepsilon_{\alpha\gamma\sigma}\delta_{\beta\sigma}\hat{x}_\gamma = -i\hbar\varepsilon_{\alpha\gamma\beta}\hat{x}_\gamma = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\gamma$$

$\left[\hat{L}_\alpha, \hat{p}_\beta\right] = \varepsilon_{\alpha\sigma\gamma}\left[x_\sigma \hat{p}_\gamma, \hat{p}_\beta\right] = \varepsilon_{\alpha\sigma\gamma}\left[x_\sigma, \hat{p}_\beta\right]\hat{p}_\gamma = i\hbar\varepsilon_{\alpha\sigma\gamma}\delta_{\beta\sigma}\hat{p}_\gamma = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{p}_\gamma$。

另外，由这些对易关系式还可得到下列等价的关系式：

(1)、$\vec{L}\times\hat{\vec{r}} + \hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{L}} = 2i\hbar\hat{\vec{r}}$ ，(2)、$\hat{\vec{L}}\times\hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{L}} = 2i\hbar\hat{\vec{p}}$ 。

推导如下：

$$\left[\hat{L}_\alpha, \hat{x}_\beta\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\gamma \Rightarrow \varepsilon_{\alpha\beta\rho}\left[\hat{L}_\alpha, \hat{x}_\beta\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\rho}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\gamma \Rightarrow \varepsilon_{\alpha\beta\rho}\left(\hat{L}_\alpha\hat{x}_\beta - \hat{x}_\beta\hat{L}_\alpha\right) = 2i\hbar\delta_{\rho\gamma}\hat{x}_\gamma$$

$$\Rightarrow \varepsilon_{\alpha\beta\rho}\hat{L}_\alpha\hat{x}_\beta + \varepsilon_{\beta\alpha\rho}\hat{x}_\beta\hat{L}_\alpha = 2i\hbar\hat{x}_\rho \Rightarrow \left(\vec{L}\times\hat{\vec{r}} + \hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{L}}\right)_\rho = 2i\hbar\hat{x}_\rho$$

$$\Rightarrow \vec{L}\times\hat{\vec{r}} + \hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{L}} = 2i\hbar\hat{\vec{r}}$$

$$\left[\hat{L}_\alpha, \hat{p}_\beta\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{p}_\gamma \Rightarrow \varepsilon_{\alpha\beta\rho}\left[\hat{L}_\alpha, \hat{p}_\beta\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\rho}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{p}_\gamma \Rightarrow \varepsilon_{\alpha\beta\rho}\left(\hat{L}_\alpha\hat{p}_\beta - \hat{p}_\beta\hat{L}_\alpha\right) = 2i\hbar\delta_{\rho\gamma}\hat{p}_\gamma$$

$$\Rightarrow \varepsilon_{\alpha\beta\rho}\hat{L}_\alpha\hat{p}_\beta + \varepsilon_{\beta\alpha\rho}\hat{p}_\beta\hat{L}_\alpha = 2i\hbar\hat{p}_\rho \Rightarrow \left(\hat{\vec{L}}\times\hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{L}}\right)_\rho = 2i\hbar\hat{p}_\rho$$

$$\Rightarrow \hat{\vec{L}}\times\hat{\vec{p}} + \hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{L}} = 2i\hbar\hat{\vec{p}}$$

(2)、角动量的对易式：$\left[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\gamma$ ，式中$\alpha,\beta,\gamma = 1,2,3$。

[证明] 利用基本对易式

$$\begin{aligned}
\left[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta\right] &= \varepsilon_{\alpha\lambda\mu}\varepsilon_{\beta\rho\sigma}\left[x_\lambda\hat{p}_\mu, x_\rho\hat{p}_\sigma\right] = \varepsilon_{\alpha\lambda\mu}\varepsilon_{\beta\rho\sigma}\left(x_\lambda\left[\hat{p}_\mu, x_\rho\hat{p}_\sigma\right] + \left[x_\lambda, x_\rho\hat{p}_\sigma\right]\hat{p}_\mu\right) \\
&= \varepsilon_{\alpha\lambda\mu}\varepsilon_{\beta\rho\sigma}\left(x_\lambda x_\rho\left[\hat{p}_\mu, \hat{p}_\sigma\right] + x_\lambda\left[\hat{p}_\mu, x_\rho\right]\hat{p}_\sigma + \left[x_\lambda, x_\rho\right]\hat{p}_\sigma\hat{p}_\mu + x_\rho\left[x_\lambda, \hat{p}_\sigma\right]\hat{p}_\mu\right) \\
&= \varepsilon_{\alpha\lambda\mu}\varepsilon_{\beta\rho\sigma}\left(-i\hbar\delta_{\mu\rho}x_\lambda\hat{p}_\sigma + i\hbar\delta_{\lambda\sigma}x_\rho\hat{p}_\mu\right) = i\hbar\left(\varepsilon_{\alpha\lambda\mu}\varepsilon_{\beta\rho\sigma}\delta_{\lambda\sigma}x_\rho\hat{p}_\mu - \varepsilon_{\alpha\lambda\mu}\varepsilon_{\beta\rho\sigma}\delta_{\mu\rho}x_\lambda\hat{p}_\sigma\right) \\
&= i\hbar\left(\varepsilon_{\alpha\sigma\mu}\varepsilon_{\beta\rho\sigma}x_\rho\hat{p}_\mu - \varepsilon_{\alpha\lambda\rho}\varepsilon_{\beta\rho\sigma}x_\lambda\hat{p}_\sigma\right) \\
&= i\hbar\left\{\left(\delta_{\alpha\rho}\delta_{\beta\mu} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\mu\rho}\right)x_\rho\hat{p}_\mu - \left(\delta_{\alpha\sigma}\delta_{\beta\lambda} - \delta_{\alpha\beta}\delta_{\sigma\lambda}\right)x_\lambda\hat{p}_\sigma\right\} \\
&= i\hbar\left(x_\alpha\hat{p}_\beta - x_\beta\hat{p}_\alpha\right) = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\gamma\rho\sigma}x_\rho\hat{p}_\sigma = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\gamma
\end{aligned}$$

另外，还可得到等价的关系式：$\hat{\vec{L}}\times\hat{\vec{L}} = i\hbar\hat{\vec{L}}$。 推导如下：

$$\left[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\gamma \Rightarrow \varepsilon_{\alpha\beta\rho}\left[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta\right] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\rho}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{L}_\gamma \Rightarrow \varepsilon_{\alpha\beta\rho}\hat{L}_\alpha\hat{L}_\beta + \varepsilon_{\beta\alpha\rho}\hat{L}_\beta\hat{L}_\alpha = 2i\hbar\delta_{\gamma\rho}\hat{L}_\gamma$$

$$\Rightarrow 2\left(\hat{\vec{L}}\times\hat{\vec{L}}\right)_\rho = 2i\hbar\hat{L}_\rho \Rightarrow \hat{\vec{L}}\times\hat{\vec{L}} = i\hbar\hat{\vec{L}}$$

定义：角动量的平方为$\hat{L}^2 = \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2 \equiv \hat{L}_\alpha\hat{L}_\alpha$ ，

可证明：角动量算符的三个分量都和角动量的平方对易，即$\left[\hat{L}^2,\hat{L}_\alpha\right]=0$。

[证] 利用角动量对易式得

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}^2,\hat{L}_\alpha\right]&=\left[\hat{L}_\beta\hat{L}_\beta,\hat{L}_\alpha\right]=\left[\hat{L}_\beta,\hat{L}_\alpha\right]\hat{L}_\beta+\hat{L}_\beta\left[\hat{L}_\beta,\hat{L}_\alpha\right]\\&=i\hbar\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}\hat{L}_\gamma\hat{L}_\beta+i\hbar\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}\hat{L}_\beta\hat{L}_\gamma\\&=i\hbar\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}\hat{L}_\gamma\hat{L}_\beta+i\hbar\varepsilon_{\gamma\alpha\beta}\hat{L}_\gamma\hat{L}_\beta\\&=i\hbar\left(\varepsilon_{\beta\alpha\gamma}+\varepsilon_{\gamma\alpha\beta}\right)\hat{L}_\gamma\hat{L}_\beta=0\end{aligned}$$

因此，角动量包括 4 个算符$\left\{\hat{L}_1,\hat{L}_2,\hat{L}_3,\hat{L}^2\right\}$，但其中互相对易的只有 2 个，一般选为$\left\{\hat{L}^2,\hat{L}_z\right\}$。

(3)、角动量算符和动能算符在球坐标中的表达式

在球坐标下， 直角坐标表示为$\begin{cases}x_1=r\sin\theta\cos\varphi\\x_2=r\sin\theta\sin\varphi\\x_3=r\cos\theta\end{cases}$，可求出动量算符在球坐标系下的表达式如下

$$\begin{cases}r=\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}\\\cos\theta=x_3/r\\\tan\varphi=x_2/x_1\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\dfrac{\partial r}{\partial x_\alpha}=\dfrac{x_\alpha}{r}\\\dfrac{\partial\theta}{\partial x_\alpha}=\dfrac{1}{r\sin\theta}\left(\dfrac{x_3x_\alpha}{r^2}-\delta_{3\alpha}\right)\\\dfrac{\partial\varphi}{\partial x_\alpha}=\dfrac{\cos^2\varphi}{x_1}\left(\delta_{2\alpha}-\dfrac{x_2}{x_1}\delta_{1\alpha}\right)=\dfrac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\left(\delta_{2\alpha}-\delta_{1\alpha}\tan\varphi\right)\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\dfrac{\partial r}{\partial x_1}=\sin\theta\cos\varphi\\\dfrac{\partial r}{\partial x_2}=\sin\theta\sin\varphi\\\dfrac{\partial r}{\partial x_3}=\cos\theta\end{cases}、\begin{cases}\dfrac{\partial\theta}{\partial x_1}=\dfrac{\cos\theta\cos\varphi}{r}\\\dfrac{\partial\theta}{\partial x_2}=\dfrac{\cos\theta\sin\varphi}{r}\\\dfrac{\partial\theta}{\partial x_3}=-\dfrac{\sin\theta}{r}\end{cases}\text{和}\begin{cases}\dfrac{\partial\varphi}{\partial x_1}=-\dfrac{\sin\varphi}{r\sin\theta}\\\dfrac{\partial\varphi}{\partial x_2}=\dfrac{\cos\varphi}{r\sin\theta}\\\dfrac{\partial\varphi}{\partial x_3}=0\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}\dfrac{\partial}{\partial x_1}=\dfrac{\partial r}{\partial x_1}\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{\partial\theta}{\partial x_1}\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\dfrac{\partial\varphi}{\partial x_1}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}=\sin\theta\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{1}{r}\left(\cos\theta\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}-\dfrac{\sin\varphi}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\\dfrac{\partial}{\partial x_2}=\dfrac{\partial r}{\partial x_2}\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{\partial\theta}{\partial x_2}\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\dfrac{\partial\varphi}{\partial x_2}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}=\sin\theta\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{1}{r}\left(\cos\theta\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\dfrac{\cos\varphi}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\\dfrac{\partial}{\partial x_3}=\dfrac{\partial r}{\partial x_3}\dfrac{\partial}{\partial r}+\dfrac{\partial\theta}{\partial x_3}\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\dfrac{\partial\varphi}{\partial x_3}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}=\cos\theta\dfrac{\partial}{\partial r}-\dfrac{1}{r}\sin\theta\dfrac{\partial}{\partial\theta}\end{cases}$$

①、动量算符各分量在球坐标系中的表达式为

$$\Rightarrow\begin{cases}\hat{p}_1=-i\hbar\left[\sin\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\left(\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]\\ \hat{p}_2=-i\hbar\left[\sin\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\left(\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]\\ \hat{p}_3=-i\hbar\left(\cos\theta\frac{\partial}{\partial r}-\frac{1}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)\end{cases}$$

②、角动量算符各分量在球坐标系中的表达式

由于

$$\begin{cases}x_1\frac{\partial}{\partial x_1}=\frac{x_1^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{x_1}{r}\left(\cos\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{\sin\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)=\frac{x_1^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\left(\sin\theta\cos\theta\cos^2\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cos\varphi\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ x_2\frac{\partial}{\partial x_2}=\frac{x_2^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{x_2}{r}\left(\cos\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\cos\varphi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)=\frac{x_2^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\left(\sin\theta\cos\theta\sin^2\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\sin\varphi\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ x_3\frac{\partial}{\partial x_3}=\frac{x_3^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{x_3}{r}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}=\frac{x_3^2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\cos\theta\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\end{cases}$$

得$\vec{r}\cdot\nabla=x_1\frac{\partial}{\partial x_1}+x_2\frac{\partial}{\partial x_2}+x_3\frac{\partial}{\partial x_3}=r\frac{\partial}{\partial r}\Rightarrow\frac{\vec{r}}{r}\cdot\nabla=\frac{\partial}{\partial r}\Rightarrow\frac{\vec{r}}{r}\cdot\hat{\vec{p}}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}$

代入$\hat{L}_\alpha=-i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}x_\beta\frac{\partial}{\partial x_\gamma}$得角动量算符在球坐标系中的表达式为

$$\begin{cases}\hat{L}_1=i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ \hat{L}_2=i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ \hat{L}_3=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\end{cases},$$

以及角动量算符平方的表达式：

$\hat{L}^2=-\hbar^2\nabla_{\theta\varphi}^2=-\frac{\hbar^2}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\hat{L}_z^2$ ，式中$\nabla_{\theta\varphi}^2=\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$。

③、动能算符在球坐标系中的表达式

为了便于表示球坐标系中的动能算符， 引入径向动量算符。其定义为 $\hat{p}_r=\frac{1}{2}\left(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\hat{\vec{p}}+\hat{\vec{p}}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)$。具体表达式推导如下：

利用公式 $\frac{\vec{r}}{r}\cdot\nabla=\frac{\partial}{\partial r}$ 知 $\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}}=-i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}$ ，故有

$$\begin{aligned}\hat{p}_r&=\frac{1}{2}\left(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\hat{\vec{p}}+\hat{\vec{p}}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)=\frac{\vec{r}}{r}\cdot\hat{\vec{p}}+\frac{1}{2}\left(\hat{\vec{p}}\cdot\frac{\vec{r}}{r}-\frac{\vec{r}}{r}\cdot\hat{\vec{p}}\right)=\frac{\vec{r}}{r}\cdot\hat{\vec{p}}+\frac{1}{2}\left[\hat{p}_\alpha,\frac{x_\alpha}{r}\right]\\&=\frac{\vec{r}}{r}\cdot\hat{\vec{p}}+\frac{1}{2}\left[\hat{p}_\alpha,\frac{1}{r}\right]x_\alpha+\frac{1}{2r}\left[\hat{p}_\alpha,\hat{x}_\alpha\right]=-i\hbar\frac{\vec{r}}{r}\cdot\nabla-\frac{i\hbar}{2}\frac{\partial r^{-1}}{\partial x_\alpha}x_\alpha-\frac{3i\hbar}{2r}\\&=-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}+\frac{i\hbar x_\alpha x_\alpha}{2r^3}-\frac{3i\hbar}{2r}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}+\frac{i\hbar}{2r}-\frac{3i\hbar}{2r}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}-\frac{i\hbar}{r}\\&=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\end{aligned}$$

即 $\hat{p}_r=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$， 这就是径向动量算符的表达式。

此外，由于 $\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}}=-i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}$ 和 $(\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}})^2=-\hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}+r\frac{\partial}{\partial r}\right)=-\hbar^2 r^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$ ，所以有

$$\begin{aligned}\hat{p}_r^2&=-\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r}+\frac{1}{r^2}\right)\\&=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\left[\frac{\partial}{\partial r},\frac{1}{r}\right]+\frac{1}{r^2}\right)=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial r^{-1}}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\right)\\&=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)=\frac{1}{r^2}\left[(\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}})^2-i\hbar\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}}\right]\end{aligned}$$

即 $\hat{p}_r^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)=\frac{1}{r^2}\left[(\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}})^2-i\hbar\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}}\right]\Rightarrow r^2\hat{p}_r^2=(\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}})^2-i\hbar\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}}$。

又由于

$$
\begin{aligned}
\hat{L}^2 &= (\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}})^2 = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{x}_\beta\hat{p}_\gamma(\hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}})_\alpha = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\rho\sigma}\hat{x}_\beta\hat{p}_\gamma\hat{x}_\rho\hat{p}_\sigma = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\rho\sigma}\hat{x}_\beta\left([\hat{p}_\gamma\hat{x}_\rho]+\hat{x}_\rho\hat{p}_\gamma\right)\hat{p}_\sigma \\
&= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\rho\sigma}\hat{x}_\beta\left(\hat{x}_\rho\hat{p}_\gamma - i\hbar\delta_{\rho\gamma}\right)\hat{p}_\sigma = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\rho\sigma}\hat{x}_\beta\hat{x}_\rho\hat{p}_\gamma\hat{p}_\sigma - i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\rho\sigma}\delta_{\rho\gamma}\hat{x}_\beta\hat{p}_\sigma \\
&= \left(\delta_{\beta\rho}\delta_{\gamma\sigma}-\delta_{\beta\sigma}\delta_{\gamma\rho}\right)\hat{x}_\beta\hat{x}_\rho\hat{p}_\gamma\hat{p}_\sigma - i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\gamma\sigma}\hat{x}_\beta\hat{p}_\sigma = \hat{x}_\beta\hat{x}_\beta\hat{p}_\gamma\hat{p}_\gamma - \hat{x}_\beta\hat{x}_\gamma\hat{p}_\gamma\hat{p}_\beta + 2i\hbar\delta_{\beta\sigma}\hat{x}_\beta\hat{p}_\sigma \\
&= r^2\hat{p}^2 - \hat{x}_\gamma\left([\hat{x}_\beta,\hat{p}_\gamma]+\hat{p}_\gamma\hat{x}_\beta\right)\hat{p}_\beta + 2i\hbar\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}} = r^2\hat{p}^2 - \hat{x}_\gamma\left(i\hbar\delta_{\beta\gamma}+\hat{p}_\gamma\hat{x}_\beta\right)\hat{p}_\beta + 2i\hbar\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}} \\
&= r^2\hat{p}^2 - (\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}})^2 + i\hbar\hat{\vec{r}}\cdot\hat{\vec{p}} = r^2\hat{p}^2 - r^2\hat{p}_r^2 \\
&= r^2\left(\hat{p}^2-\hat{p}_r^2\right)
\end{aligned}
$$

于是，得到 $\hat{p}^2 = \dfrac{\hat{L}^2}{r^2}+\hat{p}_r^2$。由此可将动能算符 $\hat{T}=\dfrac{\hat{p}^2}{2\mu}$ 重新表示如下：

$$
\hat{T} = \frac{\hat{p}_r^2}{2\mu}+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} ,
$$

这就是动能算符在球坐标系中的表达式。

(4)、一般的角动量定义

推广角动量算符的定义如下：

对于一个矢量算符 $\hat{\vec{A}}$，若它的三个分量满足对易关系 $\left[\hat{A}_\alpha,\hat{A}_\beta\right]=i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{A}_\gamma$，式中 $\alpha,\beta,\gamma=1,2,3$；则这个矢量算符 $\hat{\vec{A}}$ 就称作角动量算符。

§4.2 厄米算符的本征值与本征函数

一、厄米本征函数的性质

1、函数的正交性

若任意两个函数ψ和φ满足$\left(\psi,\varphi\right)\equiv\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^{*}\varphi d\tau=0$，则称它们是正交的。

2、厄米算符的本征方程

设$\hat{A}$为厄米算符，本征方程为$\hat{A}\psi=A\psi$，A称为本征值，ψ称为本征函数。

厄米算符的本征值取值可以是分立谱、连续谱和混合谱。

(i)、分立谱：$\hat{A}\psi_n=\lambda_n\psi_n$，$n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots$

[例] 一维无限深方势阱中运动的粒子，其哈密顿量为厄米算符。能量本征方程$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n$的解为

$$\psi_n(x)=\sqrt{2/a}\sin\frac{n\pi x}{a}$$
$$E_n=\frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2ma^2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

本征函数满足政交归一性：$\int_0^a\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx=\delta_{mn}$。

(ii)、连续谱：$\hat{A}\psi_\lambda=\lambda\psi_\lambda$

[例] 一维自由粒子的运动，

3、厄米算符本征函数的性质

[定理] 厄米算符的本征值为实数。

[证] 以连续谱为例，$\hat{A}\psi_\lambda=\lambda\psi_\lambda$

因$\hat{A}$为厄米算符，则$(\psi_\lambda,\hat{A}\psi_\lambda)=(\hat{A}\psi_\lambda,\psi_\lambda)\Rightarrow\lambda(\psi_\lambda,\psi_\lambda)=\lambda^*(\psi_\lambda,\psi_\lambda)\Rightarrow\lambda^*=\lambda$，因此$\lambda$为实数。

[正交性定理] 厄米算符的属于不同本征值的本征函数，彼此正交。

[证] 以分立谱为例，设$\hat{A}\psi_m=\lambda_m\psi_m$和$\hat{A}\psi_n=\lambda_n\psi_n$

$$\int \psi_m^* \hat{A}\psi_n d\tau = \lambda_n \int \psi_m^* \psi_n d\tau$$

$$\int \psi_m^* \hat{A}\psi_n d\tau = \int \left(\hat{A}\psi_m\right)^* \psi_n d\tau = \lambda_m^* \int \psi_m^* \psi_n d\tau = \lambda_m \int \psi_m^* \psi_n d\tau$$

$$\Rightarrow \lambda_n \int \psi_m^* \psi_n d\tau = \lambda_m \int \psi_m^* \psi_n d\tau \Rightarrow \left(\lambda_n - \lambda_m\right) \int \psi_m^* \psi_n d\tau = 0$$

由于$\lambda_m \neq \lambda_n$，必须有$\int \psi_m^* \psi_n d\tau = 0$。

说明:

(1)、若厄米算符$\hat{A}$的本征谱是非简并分立谱，即本征值为$\{\lambda_1, \lambda_2, \cdots\}$，对应本征函数为$\{\psi_1, \psi_2, \cdots\}$，则本征波函数是平方可积的，因而可归一化。 故有

$$\int \psi_m^* \psi_n d\tau = \delta_{mn}, \quad (m,\ n = 1,\ 2,\ \cdots)\text{；其中}\ \delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n; \\ 1, & m = n. \end{cases}\text{。}$$

[例 1] 角动量z分量$\hat{L}_z = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial \varphi}$的本征值和本征函数。

[解] 本征方程为$\hat{L}_z \Phi = l_z \Phi$，即$-i\hbar \dfrac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = l_z \Phi$，其中$l_z$为本征值。

其解为：$\Phi(\varphi) = Ce^{il_z\varphi/\hbar}$， 其中$C$——归一化常数。

由于$\varphi \to \varphi + 2\pi$波函数$\Phi(\varphi)$在空间绕轴旋转一周回到原处，根据波函数的单值性、连续性要求满足周期性边界条件：$\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$，所以有

$$e^{il_z\varphi/\hbar} = e^{il_z(\varphi+2\pi)/\hbar} \Rightarrow e^{i2\pi l_z/\hbar} = 1 \Rightarrow 2\pi l_z/\hbar = 2m\pi \Rightarrow l_z = m\hbar \quad (m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \cdots)$$

即$\hat{L}_z$的本征值$l_z = m\hbar\ (m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \cdots)$是分立的（量子化的），对应的本征函数表示为：

$$\Phi_m(\varphi) = Ce^{im\varphi} \quad (m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \cdots)$$

另外，波函数的周期性条件也保证了$\hat{L}_z$的厄米性。即对于$\forall\, \psi_1, \psi_2$，由厄米算符的定义得：

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} \psi_1^* \hat{L}_z \psi_2 d\varphi &= -i\hbar \int_0^{2\pi} \psi_1^* \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_2 d\varphi = -i\hbar \left(\psi_1^* \psi_2\right)\Big|_0^{2\pi} + i\hbar \int_0^{2\pi} \frac{\partial \psi_1^*}{\partial \varphi} \psi_2 d\varphi \\ &= -i\hbar \left(\psi_1^* \psi_2\right)\Big|_0^{2\pi} + \int_0^{2\pi} \left(-i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial \varphi}\right)^* \psi_2 d\varphi \\ &= -i\hbar \left(\psi_1^* \psi_2\right)\Big|_0^{2\pi} + \int_0^{2\pi} \left(\hat{L}_z \psi_1\right)^* \psi_2 d\varphi\end{aligned}$$

为了保证 $\hat{L}_z$ 的厄米性 $\int_0^{2\pi}\psi_1^*\hat{L}_z\psi_2 d\varphi=\int_0^{2\pi}\left(\hat{L}_z\psi_1\right)^*\psi_2 d\varphi$ ，必须要求 $\left(\psi_1^*\psi_2\right)\Big|_0^{2\pi}=0$ ，即

$$\psi_1^*(2\pi)\psi_2(2\pi)-\psi_1^*(0)\psi_2(0)=0\Rightarrow\left(\frac{\psi_1(2\pi)}{\psi_1(0)}\right)^*=\frac{\psi_2(2\pi)}{\psi_2(0)}=\text{常数}。$$

当 ψ_1,ψ_2 是 $\hat{L}_z$ 的本征函数时，则有 $\begin{cases}\psi_1(\varphi)=\Phi_{m_1}(\varphi)\\ \psi_2(\varphi)=\Phi_{m_2}(\varphi)\end{cases}\Rightarrow\left(\frac{\psi_1(2\pi)}{\psi_1(0)}\right)^*=\frac{\psi_2(2\pi)}{\psi_2(0)}=1$

由归一化得：$\int_0^{2\pi}\left|\Phi_m(\varphi)\right|^2 d\varphi=1\Rightarrow\left|C\right|^2=1/2\pi\Rightarrow C=1/\sqrt{2\pi}$ 。

因此，得到归一化的本征函数为 $\Phi_m(\varphi)=\dfrac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\quad\left(m=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots\right)$。

可验证：满足正交归一性：$\left(\Phi_m,\Phi_n\right)=\dfrac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}e^{i(n-m)\varphi}d\varphi=\delta_{mn}$ 。

(2)、若 $\hat{A}$ 的本征值谱是非简并的连续谱，则本征函数按 δ -函数归一化，即

$$\int\psi_{\lambda'}^*(\vec{r})\psi_\lambda(\vec{r})d\tau=\delta(\lambda-\lambda')。$$

[例 2] 动量的 x 分量 $\hat{p}_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$ 的本征态。

[解] 由于动量 $\hat{p}_x$ 是厄米算符，本征方程为

$$\hat{p}_x\psi(x)=p_x\psi(x) ,$$

即 $-i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial x}=p_x\psi$ ，其解为：$\psi_{p_x}(x)=\dfrac{\mathrm{e}^{ip_x x/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ ，而 $\hat{p}_x$ 的本征值 p_x 的取值：$-\infty<p_x<+\infty$ ，即一切实的连续值。其正交归一性：$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{p_x'}^*(x)\psi_{p_x}(x)dx=\delta(p_x-p_x')$。

[例 3] 求绕 z 轴旋转的平面转子的能量本征值和本征态。

[解] 哈密顿量为：$\hat{H}=\dfrac{\hat{L}_z^2}{2I}=-\dfrac{\hbar^2}{2I}\dfrac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$ ，而 I 为转动惯量。能量本征方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}=E\psi$$ ，式中 E 为能量本征值。

又 $\hat{L}_z$ 的本征函数 $\psi(\varphi)=\dfrac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\left(m=0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots\right)$ 也是 $\hat{H}$ 的本征函数， 相应的本征值为：

$E_m = m^2\hbar^2/2I \geq 0$。

当 $m \neq 0$ 时，对于一个能量本征值 E_m 有两个本征态 $\psi_{\pm|m|}(\varphi) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i|m|\varphi}$，即能级是二重简并的。

[例 4] 求一维自由粒子的能量本征态。

[解] 一维自由粒子的哈密顿量为 $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}$，其能量本征方程为：$-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = E\psi$

令 $k = \dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$，则能量本征方程变为 $\psi'' + k^2\psi = 0$，其解为 $\psi_E(x) \sim e^{\pm ikx} = e^{\pm ip_x x/\hbar}$，相应的能量为 $E = \hbar^2 k^2/2m$，可取一切非负实数。即动量算符 $\hat{p}_x$ 的本征态，本征动量值为 $p_x = \pm\hbar k$。p_x 的取值为 $-\infty < p_x < +\infty$。当 $p_x \neq 0$ 时，能级是二重简并的。

二、厄米算符的本征值简并问题

设厄米算符 $\hat{A}$ 的本征方程为

$$\hat{A}\Psi_{n\alpha} = a_n \Psi_{n\alpha} \qquad (\alpha = 1, 2, \cdots, f_n)$$

即对于同一个本征值 λ_n 的本征波函数 $\psi_{n\alpha}$ 有 f_n 个，则称本征值 a_n 是 f 重简并的。

若本征态出现简并（即一个本征值有若干个线性独立的本征函数）的情形，则正交性定理不能保证同一本征值的不同本征函数是彼此正交的。简并态选择不是唯一的，其线性叠加态仍是本征态，即

$$\Phi_{n\beta} = \sum_{\alpha=1}^{f_n} C_{\beta\alpha}\Psi_{n\alpha} \qquad (\beta = 1, 2, \cdots, f_n) \quad ,$$

$$\hat{A}\Phi_{n\beta} = \sum_{\alpha=1}^{f_n} C_{\beta\alpha}\hat{A}\Psi_{n\alpha} = a_n \sum_{\alpha=1}^{f_n} C_{\beta\alpha}\Psi_{n\alpha} = a_n \Phi_{n\beta}$$

当选择适当的叠加系数 $C_{\beta\alpha}$（$C_{\beta\alpha}$ 的数目是 f_n^2），能够使叠加态 $\Phi_{n\beta}$ 具有正交性，即

$$\left(\Phi_{n\beta}, \Phi_{n\gamma}\right) = \delta_{\beta\gamma}\text{。}$$

这相当规定了 $\dfrac{1}{2} f_n(f_n+1)$ 个限制条件。在线性代数中，通常采用 Schmidt 正交化方法进行正交化。

[例] 设属于能级 E 有三个简并态 ψ_1、ψ_2 和 ψ_3，彼此线形独立但不正交。试利用它们构成一组彼此正交归一的波函数。

[解] 用 Schmidt 正交化方法得

先构造一组正交的波函数$\{\varphi_1',\varphi_2',\varphi_3'\}$得

$$\begin{cases}\varphi_1'=\psi_1\\ \varphi_2'=\psi_2+b\varphi_1'\\ \varphi_3'=\psi_3+c\varphi_2'+d\varphi_1'\end{cases}\quad \text{由正交性}\left(\varphi_i',\varphi_j'\right)=0\quad (i<j)\text{得}\begin{cases}(\psi_1,\psi_2)+b(\psi_1,\psi_1)=0\\ (\psi_1,\psi_3)+d(\psi_1,\psi_1)=0\\ (\varphi_2',\psi_3)+c(\varphi_2',\varphi_2')=0\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{cases}b=-\dfrac{(\psi_1,\psi_2)}{(\psi_1,\psi_1)}\\ c=-\dfrac{(\varphi_2',\psi_3)}{(\varphi_2',\varphi_2')}\\ d=-\dfrac{(\psi_1,\psi_3)}{(\psi_1,\psi_1)}\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\varphi_1'=\psi_1\\ \varphi_2'=\psi_2-\dfrac{(\psi_1,\psi_2)}{(\psi_1,\psi_1)}\psi_1\\ \varphi_3'=\psi_3-\dfrac{(\varphi_2',\psi_3)}{(\varphi_2',\varphi_2')}\varphi_2'-\dfrac{(\psi_1,\psi_3)}{(\psi_1,\psi_1)}\psi_1\end{cases}$$

将$\{\varphi_1',\varphi_2',\varphi_3'\}$归一化

$$(\varphi_1',\varphi_1')=(\psi_1,\psi_1)\Rightarrow\varphi_1=\frac{1}{\sqrt{(\psi_1,\psi_1)}}\psi_1;$$

$$(\varphi_2',\varphi_2')=(\psi_2,\psi_2)-\frac{\left|(\psi_1,\psi_2)\right|^2}{(\psi_1,\psi_1)}\Rightarrow\varphi_2=\frac{1}{\sqrt{(\varphi_2',\varphi_2')}}\varphi_2'\ ,$$

$$\varphi_3=\frac{1}{\sqrt{(\varphi_3',\varphi_3')}}\varphi_3'。$$

因此，得到正交归一化的波函数$\{\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3\}$，但仍然是简并的（可验证：它们仍对应于同一能级）。

实际上，当出现简并时，为把$\hat{A}$的简并态确定下来，通常用除$\hat{A}$以外的其它力学量的本征值来对简并态进行分类，此时正交问题自动解决。这将涉及两个或多个力学量的共同本征态的问题。

[附录]　介绍 Schmidt 正交化方法

在线性代数中， Schmidt 正交化方法是构造标准正交向量组的常用方法。Schmidt 正交化方法是将空间$\mathbb{R}^n$中一组线性无关的向量$\vec{\alpha}_1,\vec{\alpha}_2,\cdots,\vec{\alpha}_n$作一种特定的线性运算， 构造出一组标准正交向量组的方法。

具体步骤如下：

(1)、先由 $\mathbb{R}^n$ 中一组线性无关的向量 $\vec{\alpha}_1,\vec{\alpha}_2,\cdots,\vec{\alpha}_n$ 构造出一组正交的向量组 $\vec{\beta}_1,\vec{\beta}_2,\cdots,\vec{\beta}_n$。

取 $\vec{\beta}_1=\vec{\alpha}_1$

$$\vec{\beta}_2=\vec{\alpha}_2+k_{12}\beta_1$$

$\cdots\quad\cdots$

$$\vec{\beta}_j=\vec{\alpha}_j+\sum_{i=1}^{j-1}k_{ij}\beta_i\qquad j=1,2,\cdots,n$$

由于向量组 $\vec{\beta}_1,\vec{\beta}_2,\cdots,\vec{\beta}_n$ 的正交性知，$\vec{\beta}_i\cdot\vec{\beta}_j=0\quad(i\neq j)\Rightarrow k_{ij}=\dfrac{\vec{\beta}_i\cdot\vec{\alpha}_j}{\vec{\beta}_i\cdot\beta_i}\quad(i=1,2,\cdots,j-1)$

即 $\vec{\beta}_j=\vec{\alpha}_j+\sum\limits_{i=1}^{j-1}\dfrac{\vec{\beta}_i\cdot\vec{\alpha}_j}{\vec{\beta}_i\cdot\beta_i}\beta_i\quad(j=1,2,\cdots,n)$，这样就得到两两相互正交的非零向量组 $\vec{\beta}_1,\vec{\beta}_2,\cdots,\vec{\beta}_n$。

(2)、把正交向量组 $\vec{\beta}_1,\vec{\beta}_2,\cdots,\vec{\beta}_n$ 单位化（归一化）为标准正交向量组 $\vec{\eta}_1,\vec{\eta}_2,\cdots,\vec{\eta}_n$，即 $\vec{\eta}_i=\dfrac{\vec{\beta}_i}{\sqrt{\vec{\beta}_i\cdot\vec{\beta}_i}}$。

这样就构造出一组标准正交向量组 $\vec{\eta}_1,\vec{\eta}_2,\cdots,\vec{\eta}_n$。

§4.3 同时本征函数

一、共同本征函数

设厄米算符 $\hat{A}$ 的本征方程：$\hat{A}\Phi_{n\alpha}=\lambda_n\Phi_{n\alpha}\ \left(\alpha=1,2,\cdots,f_n\right)$，即

对于同一个本征值 λ_n 有 f_n 个本征波函数 $\left\{\Phi_{n\alpha}\middle|\alpha=1,2,\cdots,f_n\right\}$，则称本征值 λ_n 是 f 重简并的。

如果本征态出现简并（即一个本征值有若干个线性独立的本征函数）的情形，则正交性定理不能保证同一本征值的不同本征函数是彼此正交的。解决的办法是考虑共同本征函数。

定义：若 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 是两个厄米算符， 则 $[\hat{F},\hat{G}]\equiv\hat{F}\hat{G}-\hat{G}\hat{F}$ 称为 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的对易括号或对易子。

在 $[\hat{F},\hat{G}]=0$ 时，称 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 对易，否则称为不对易。

定理：若 $[\hat{F},\hat{G}]=0$，则 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 可以有共同本征函数，即 $\exists\phi$ 使得 $\begin{cases}\hat{F}\phi=\lambda\phi\\ \hat{G}\phi=\mu\phi\end{cases}$（$\lambda$ 和 μ 是常数）同时成立。

该定理也很容易推广到多个算符的情形。

共同本征函数描写的就是几个力学量同时有确定值的状态。

这样，若算符 $\hat{F}$ 的本征值 λ 有简并，我们就再引进另一个算符 $\hat{G}$，满足 $[\hat{F},\hat{G}]=0$，并求出 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的共同本征函数。若对于 $\hat{F}$ 简并的（共同）本征函数对于 $\hat{G}$ 是非简并的，那么正交性定理就保证了它们是正交的。但也可能 $\hat{F}$ 和 $\hat{G}$ 的共同本征函数仍然有简并，我们就再引进第三个算符，如此等等，直到所有的简并完全去除为止。这时，一组量子数 $(\lambda,\mu,\cdots)$ 就完全确定了一个量子态。

这种情形多半出现在多自由度体系中。对这种体系，一组两两对易的、最大数目的（即是说，完全去除简并的）算符集称为它的完备算符集。完备算符集中算符的数目就是体系的自由度数。

[例 1] 动量算符的各个分量是彼此对易的，即 $\left[\hat{p}_x,\hat{p}_y\right]=\left[\hat{p}_y,\hat{p}_z\right]=\left[\hat{p}_z,\hat{p}_x\right]=0$。

而平面波函数 $\psi_{\vec{p}}(x,y,z)=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}e^{ip_x x/\hbar}e^{ip_y y/\hbar}e^{ip_z z/\hbar}=\dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$，正是它们的共同本征函数，其对应本征值为 $\vec{p}=\left(p_x,p_y,p_z\right)$。 我们知道，它们是按 δ 函数正交归一的，并且任何波函数都可以用它们来展开（函数的 Fourier 变换）。

二、测不准关系(Uncertainty Relation)

若$[\hat{F},\hat{G}]\neq 0$，则$\hat{F}$和$\hat{G}$不能同时有确定值。例如: $\hat{p}_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\ \hat{x}=x \quad \Rightarrow \quad [\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar$这是量子力学的基本对易括号。它在本质上是波粒二象性的反映。例如在粒子的单缝衍射实验中，Δx越小，Δp_x就越大，$\Delta x\cdot\Delta p_x\approx\hbar$，二者不能同时有确定值。所以，运动轨道的概念对微观粒子是不适用的。

对这种不确定性的量的描写如下。

一、不确定度（统计偏差）

在态ψ上测量力学量$\hat{A}$，测量值与平均值的偏差$\Delta A=\sqrt{\overline{(\hat{A}-\overline{A})^2}}=\sqrt{\overline{\hat{A}^2}-\overline{A}^2}$，称为力学量$\hat{A}$在态$\psi$上的取值不确定度，或涨落。

定义涨落算符：$\Delta\hat{A}=\hat{A}-\overline{A}$，则不确定度可表示为：$\Delta A=\sqrt{\overline{(\Delta\hat{A})^2}}$，这个量描写了力学量$\hat{A}$的测量值的偏差程度。

如果$\hat{A}$在态ψ上的不确定度$\Delta A=0$，即每次测得的值都是某一确定的值，则称态ψ为$\hat{A}$取确定值的态。

力学量$\hat{A}$的本征态一定是$\hat{A}$取确定值的态。例如，定态是能量取确定值的态。

[例题] 设$\psi=\frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_1+\frac{1}{\sqrt{2}}\varphi_2$，其中$\varphi_n$是$\hat{A}$的归一化的本征态，即$\hat{A}\varphi_n=\lambda_n\varphi_n$。计算$\hat{A}$在态$\psi$上的不确定度。

[解] 由本征方程$\hat{A}\varphi_n=\lambda_n\varphi_n\Rightarrow\hat{A}^2\varphi_n=\lambda_n^2\varphi_n$，则有

$$\overline{A}=\int\psi^*\hat{A}\psi d\tau=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2\lambda_1+\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2\lambda_2=\frac{1}{2}(\lambda_1+\lambda_2)$$

$$\overline{\hat{A}^2}=\int\psi^*\hat{A}^2\psi d\tau=\frac{1}{2}(\lambda_1^2+\lambda_2^2)$$

$$\Rightarrow\Delta A=\sqrt{\overline{\hat{A}^2}-\overline{A}^2}=\frac{1}{2}|\lambda_1-\lambda_2|\neq 0$$

$\because\Delta A\neq 0$，故态ψ不是$\hat{A}$取确定值的量子态。因此，在态ψ上测量$\hat{A}$的测值可能是λ_1也可能是λ_2，概率各为$1/2$。

二、海森堡测不准关系(Heisenberg Uncertainty Principle)

如果$[\hat{F},\hat{G}]=i\hat{C}\neq 0$，那么$\overline{(\Delta\hat{F})^2}$和$\overline{(\Delta\hat{G})^2}$有什么关系呢？ 具体计算的方法如下：

引入 Schwarz 积分不等式： 对于任意两个力学量$\hat{F}$和$\hat{G}$，都有下列不等式成立：

$$I(\xi)=\int\left|(\xi\Delta\hat{F}-i\Delta\hat{G})\psi\right|^2 d\tau\geq 0$$，式中ψ是体系的任意波函数，ξ是任意参数。

而另一方面，

$$\begin{aligned}
I(\xi)&=\int[\xi(\Delta\hat{F}\psi)^*+i(\Delta\hat{G}\psi)^*]\cdot[\xi(\Delta\hat{F}\psi)-i(\Delta\hat{G}\psi)]d\tau\\
&=\xi^2\int(\Delta\hat{F}\psi)^*(\Delta\hat{F}\psi)d\tau-i\xi\int[(\Delta\hat{F}\psi)^*(\Delta\hat{G}\psi)-(\Delta\hat{G}\psi)^*(\Delta\hat{F}\psi)]d\tau+\int(\Delta\hat{G}\psi)^*(\Delta\hat{G}\psi)d\tau\\
&=\xi^2\int\psi^*(\Delta\hat{F})^2\psi d\tau-i\xi\int\psi^*(\Delta\hat{F}\Delta\hat{G}-\Delta\hat{G}\Delta\hat{F})\psi d\tau+\int\psi^*(\Delta\hat{G})^2\psi d\tau\\
&=\overline{(\Delta\hat{F})^2}\xi^2-i\overline{(\Delta\hat{F}\Delta\hat{G}-\Delta\hat{G}\Delta\hat{F})}\xi+\overline{(\Delta\hat{G})^2}\\
&=\overline{(\Delta\hat{F})^2}\xi^2-i\overline{[\hat{F},\hat{G}]}\ \xi+\overline{(\Delta\hat{G})^2}
\end{aligned}$$

其中注意：$[\Delta\hat{F},\Delta\hat{G}]=[\hat{F}-\overline{F},\hat{G}-\overline{G}]=[\hat{F},\hat{G}]=i\hat{C}$

根据二次三项式的判别式的性质，在$I(\xi)\geq 0$时，

$$\overline{(\Delta\hat{F})^2}\cdot\overline{(\Delta\hat{G})^2}\geq\frac{1}{4}\overline{(-i[\hat{F},\hat{G}])}^2=\frac{1}{4}\overline{\hat{C}}^2,$$

这就是著名的海森堡（Heisenberg）测不准关系。

也有时记$\Delta F\equiv\sqrt{\overline{(\Delta\hat{F})^2}}=\sqrt{\overline{(\hat{A}-\overline{A})^2}}=\sqrt{\overline{\hat{F}^2}-\overline{F}^2}$、$\Delta G\equiv\sqrt{\overline{(\Delta\hat{G})^2}}=\sqrt{\overline{\hat{G}^2}-\overline{\hat{G}}^2}$，则海森堡测不准关系变形为：

$$\Delta F\cdot\Delta G\geq\frac{1}{2}\left|\overline{[\hat{F},\hat{G}]}\right|=\frac{1}{2}\left|\overline{\hat{C}}\right|。$$

[特例] 当$\hat{F}=x$、$\hat{G}=\hat{p}_x$时，利用$[\hat{x},\hat{p}_x]=i\hbar$，有$\hat{C}=\hbar$，所以$\Delta x\cdot\Delta p_x\geq\frac{\hbar}{2}$。

[例] 利用测不准关系估算一维谐振子的零点能。

[解] 谐振子的基态能量本征函数为$\psi_0(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-\alpha^2x^2/2}$，

在ψ_0态下，坐标$\hat{x}$和动量$\hat{p}$平均值如下：

$$\overline{x}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*(x)\hat{x}\psi_0(x)dx=0\ ,\qquad \overline{p}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_0^*(x)\hat{p}\psi_0(x)dx=0$$

因而$\overline{\left(\Delta\hat{x}\right)^2}=\overline{\left(\hat{x}-\overline{\hat{x}}\right)^2}=\overline{\hat{x}^2}-\overline{\hat{x}}^2=\overline{\hat{x}^2}$及$\overline{\left(\Delta\hat{p}\right)^2}=\overline{\left(\hat{p}-\overline{\hat{p}}\right)^2}=\overline{\hat{p}^2}-\overline{\hat{p}}^2=\overline{\hat{p}^2}$。

由于哈密顿量为$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，所以在能量本征态$\psi_n$下有

$$E=\overline{\hat{H}}=\frac{\overline{\hat{p}^2}}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2}=\frac{1}{2m}\overline{\left(\Delta\hat{p}\right)^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\overline{\left(\Delta\hat{x}\right)^2}$$

由于$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$得到测不准关系为：$\overline{\left(\Delta\hat{x}\right)^2}\cdot\overline{\left(\Delta\hat{p}\right)^2}\geq\frac{\hbar^2}{4}$代入上式得

$$\begin{aligned}E=\overline{\hat{H}}&=\frac{\overline{\hat{p}^2}}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\overline{x^2}=\frac{1}{2m}\overline{\left(\Delta\hat{p}\right)^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\overline{\left(\Delta\hat{x}\right)^2}\\&=\left(\sqrt{\frac{1}{2m}\overline{\left(\Delta\hat{p}\right)^2}}-\sqrt{\frac{1}{2}m\omega^2\overline{\left(\Delta\hat{x}\right)^2}}\right)^2+2\sqrt{\frac{1}{2m}\overline{\left(\Delta\hat{p}\right)^2}}\cdot\sqrt{\frac{1}{2}m\omega^2\overline{\left(\Delta\hat{x}\right)^2}}\\&=\left(\sqrt{\frac{1}{2m}\overline{\left(\Delta\hat{p}\right)^2}}-\sqrt{\frac{1}{2}m\omega^2\overline{\left(\Delta\hat{x}\right)^2}}\right)^2+\omega\sqrt{\overline{\left(\Delta\hat{p}\right)^2}\cdot\overline{\left(\Delta\hat{x}\right)^2}}\\&\geq\omega\sqrt{\overline{\left(\Delta\hat{p}\right)^2}\cdot\overline{\left(\Delta\hat{x}\right)^2}}\geq\frac{1}{2}\hbar\omega\end{aligned}$$

$\Rightarrow E_{\min}=\frac{1}{2}\hbar\omega$，这就是谐振子的基态能量（零点能），“零点能”是不确定关系的结果。

三、角动量算符的本征函数

为了方便起见，在球坐标(r,θ,φ)系下，求解$\left(\hat{L}^2,\hat{L}_z\right)$的共同本征函数：

$$\begin{cases}x=r\sin\theta\cos\varphi\\y=r\sin\theta\sin\varphi\\z=r\cos\theta\end{cases}，\quad 其中0\leq r<\infty、\theta\in[0,\pi]、\varphi\in[0,2\pi]；$$

$\left(\hat{L}^2,\hat{L}_z\right)$在球坐标下表达式为

$$\begin{aligned}\hat{L}_z&=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\\\hat{L}^2&=-\hbar^2\left(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\end{aligned}，它们与r无关。$$

先求$\hat{L}_z$的本征函数，它是φ的函数。记本征值为$m\hbar$，本征函数为$\psi_m(\varphi)$，则本征方程是：

$$\hat{L}_z\psi_m(\varphi)=m\hbar\psi_m(\varphi)\Rightarrow\frac{d\psi_m}{d\varphi}=im\psi_m\Rightarrow\psi_m(\varphi)=Ce^{im\varphi}$$

由波函数的单值性，必须有$\psi_m(\varphi)=\psi_m(\varphi+2\pi)$，所以$m=0,\pm1,\pm2,\cdots$

归一化是：$\int_0^{2\pi}|\psi_m|^2\,d\varphi=1\Rightarrow C=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$。

求$\hat{L}^2$的本征问题

$\hat{L}^2$的本征函数是(θ,φ)的函数，记为$Y(\theta,\varphi)$，对应的本征值记为$\lambda\hbar^2$，则本征方程是：

$$\hat{L}^2Y(\theta,\varphi)=\lambda\hbar^2Y(\theta,\varphi)$$

即 $\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2Y}{\partial\varphi^2}=-\lambda Y$

我们要求$Y(\theta,\varphi)$同时是$\hat{L}_z$的本征函数，所以设$Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)e^{im\varphi}$，因而$\Theta(\theta)$满足：

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta(\theta)=-\lambda\Theta(\theta)$$

通常引入$\xi=\cos\theta,\quad \xi\in[-1,+1]$，则方程成为：

$$\frac{d}{d\xi}\left[\left(1-\xi^2\right)\frac{d\Theta}{d\xi}\right]+\left(\lambda-\frac{m^2}{1-\xi^2}\right)\Theta(\xi)=0$$

注意$\xi=\pm1$是这个方程的奇异点， 这意思是说，除非λ取某些特定值，否则方程的解将在$w=\pm1$处变成无穷大。由附录可知：λ的这些允许值是：$\lambda=l(l+1)$，$l=|m|,|m|+1,\cdots$

此时，对应的解记为$\Theta(w)\equiv P_l^m(w)$，而$P_l^m(w)$满足方程

$$\frac{d}{dw}\left[\left(1-w^2\right)\frac{dP_l^m}{dw}\right]+\left(l(l+1)-\frac{m^2}{1-w^2}\right)P_l^m(w)=0。$$

特别地，当$m=0$时，$P_l(w)$满足：

$$\frac{d}{dw}\left[\left(1-w^2\right)\frac{dP_l}{dw}\right]+l(l+1)P_l(w)=0\ ,$$

式中 $P_l(w)$ 是 w 的 l 阶多项式，称为 Legendre 多项式； 定义为：$P_l(w)=\dfrac{1}{2^l l!}\dfrac{d^l}{dw^l}\left(w^2-1\right)^l$。

而 $P_l^m(w)$ 称为缔合 Legendre 函数，它的定义是：$P_l^m(w)=\dfrac{1}{2^l l!}\left(1-w^2\right)^{m/2}\dfrac{d^{l+m}}{dw^{l+m}}\left(w^2-1\right)^l$。

因此，本征函数最后写成为：$Y_{lm}(\theta,\varphi)=N_{lm}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$，其中本征值 l 和 m 的取值范围是：

$$
\begin{aligned}
&l=0,1,2,\cdots && \text{(非负整数)}\\
&m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l && (2l+1)\text{个分立值}
\end{aligned}
$$

N_{lm} 是归一化常数，使 $\int Y_{lm}^*(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega=1$，其中 $d\Omega=\sin\theta d\theta d\varphi$。

结果是：$N_{lm}=(-1)^m\sqrt{\dfrac{(2l+1)}{4\pi}\cdot\dfrac{(l-m)!}{(l+m)!}}$。

$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 称为球谐函数，l 称为角量子数，m 称为磁量子数。

采用原子物理的术语，$l=0,1,2,3,4,\cdots$ 的状态分别称为 $s,p,d,f,\cdots$ 态。对于固定的 l，有 $2l+1$ 个不同的 m 值，这就是 $\hat{L}^2$ 的本征值 $l(l+1)\hbar^2$ 的简并度。

头两阶球谐函数 $(l=0,1)$ 是：

$$
Y_{00}=\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\text{、}\quad
\begin{cases}
Y_{10}=\sqrt{\dfrac{3}{4\pi}}\cos\theta\\
Y_{1\pm1}=\mp\sqrt{\dfrac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\varphi}
\end{cases}\text{、}\quad
\begin{cases}
Y_{20}=\sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}\left(3\cos^2\theta-1\right)\\
Y_{2\pm1}=\mp\sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\varphi}\\
Y_{2\pm2}=\sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm2i\varphi}
\end{cases}\text{。}
$$

四、球谐函数的基本性质

(1)、$\begin{cases}\hat{L}^2Y_{lm}=l(l+1)\hbar^2Y_{lm} & l=0,1,2,\cdots\\ \hat{L}_zY_{lm}=m\hbar Y_{lm} & m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l\end{cases}$

(2)、正交归一性：$\int Y_{l'm'}^*(\theta,\varphi)Y_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega=\delta_{ll'}\delta_{mm'}$ ；

(3)、完备性：$\sum\limits_{lm}Y_{lm}^*(\theta',\varphi')Y_{lm}(\theta,\varphi)=\dfrac{1}{\sin\theta}\delta(\theta'-\theta)\delta(\varphi'-\varphi)$ ；

(4)、 $Y_{lm}^{*}(\theta,\varphi)=(-1)^{m}Y_{l-m}(\theta,\varphi)$ ；

(5)、宇称：对于原点反射 $\vec{r}\rightarrow-\vec{r}$ 即 $\begin{cases}\theta\rightarrow\pi-\theta\\ \varphi\rightarrow\varphi+\pi\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}P_{l}^{m}(\cos\theta)\xrightarrow{\text{贡献}}(-1)^{l-m}\\ e^{im\varphi}\xrightarrow{\text{贡献}}(-1)^{m}\end{cases}$ ，

所以，$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 的宇称为 $(-1)^{l}$ 。

五、升降算符对球谐函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 的作用

在上面我们知道：$Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 是 $\hat{L}^{2},\hat{L}_{z}$ 的共同本征态，本征方程为

$$\begin{aligned}&\hat{L}^{2}Y_{lm}(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^{2}Y_{lm}(\theta,\varphi)\\&\hat{L}_{z}Y_{lm}(\theta,\varphi)=m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi)\end{aligned}$$

当给定 l 的值时，$\hat{L}^{2}$ 的本征值是简并的，本征函数族 $\left\{Y_{lm}(\theta,\varphi)\big||m|\le l\right\}$ 有 $2l+1$。当在该本征函数族只给定一个本征函数时，如何求这族所有的本征函数呢？

为了上面的目的， 定义升降算符：$\hat{L}_{\pm}=\hat{L}_{x}\pm iL_{y}$ ，则角动量各分量间的对易关系变为：

$$[\hat{L}_{z},\hat{L}_{\pm}]=\pm\hbar\hat{L}_{\pm}\ ，[\hat{L}_{+},\hat{L}_{-}]=2\hbar\hat{L}_{z}\ 。$$

由于 $[\hat{L}^{2},\hat{L}_{\alpha}]=0\Rightarrow[\hat{L}^{2},\hat{L}_{\pm}]=0$ ，用 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 作用于上式得

$$\hat{L}^{2}\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)=\hat{L}_{\pm}\hat{L}^{2}Y_{lm}(\theta,\varphi)=l(l+1)\hbar^{2}\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

这说明 $\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 也是算符 $\hat{L}^{2}$ 的本征函数，对应同一个本征值 $l(l+1)\hbar^{2}$ 。

由于 $\hat{L}^{2}$ 的本征函数是简并的， 所以取 $\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)=\sum\limits_{m'=-l}^{l}C_{m'}^{\pm}Y_{lm'}(\theta,\varphi)$

另外，再考虑 $[\hat{L}_{z},\hat{L}_{\pm}]=\pm\hbar\hat{L}_{\pm}\Rightarrow\hat{L}_{z}\hat{L}_{\pm}=\hat{L}_{\pm}(\hat{L}_{z}\pm\hbar)$ （ k 为任意非负的整数）

用 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 作用于上式得 $\hat{L}_{z}\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)=\hat{L}_{\pm}(\hat{L}_{z}\pm1\hbar)Y_{lm}(\theta,\varphi)=(m\pm1)\hbar\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ，

即 $\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 是算符 $\hat{L}_{z}$ 的本征态，但其对应的本征值分别为 $(m\pm1)\hbar$ 。

当把 $\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)=\sum\limits_{m'=-l}^{l}C_{m'}^{\pm}Y_{lm'}(\theta,\varphi)$ 代入 $\hat{L}_{z}\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)=(m\pm1)\hbar\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 得到 $m'=m\pm1$。

经过上面的一系列分析，我们得到下列结论：

$\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)=C^{\pm}_{m\pm1}Y_{lm\pm1}(\theta,\varphi)$。

接下来我们确定系数$C^{\pm}_{m\pm1}$的具体表达形式：

由 $[\hat{L}_+,\hat{L}_-]=2\hbar\hat{L}_z$ 得 $\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi)[\hat{L}_+,\hat{L}_-]Y_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega=2\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi)\hat{L}_z[,\hat{L}_-]Y_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega$

$\Rightarrow C^-_{m-1}C^+_m-C^+_{m+1}C^-_m=2m$

由$\hat{L}^2=\frac{1}{2}\left(\hat{L}_+\hat{L}_-+\hat{L}_-\hat{L}_+\right)+\hat{L}_z^2$得

$$\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi)\hat{L}^2Y_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega=\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi)\left\{\frac{1}{2}\left(\hat{L}_+\hat{L}_-+\hat{L}_-\hat{L}_+\right)+\hat{L}_z\hat{L}_z\right\}\hat{L}_zY_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega$$

$$\Rightarrow l(l+1)=\frac{1}{2}\left(C^-_{m-1}C^+_m+C^-_mC^+_{m+1}\right)+m^2$$

$$\Rightarrow\begin{cases}C^-_{m-1}C^+_m=l(l+1)-m(m-1)\\ C^-_mC^+_{m+1}=l(l+1)-m(m+1)\end{cases}$$

利用$\hat{L}_x$和$\hat{L}_y$的厄米性知

$$\begin{aligned}\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi)\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp Y_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega&=\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi)\left(\hat{L}_x\pm i\hat{L}_y\right)\left(\hat{L}_\mp Y_{lm}(\theta,\varphi)\right)d\Omega\\&=\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi)\hat{L}_x\left(\hat{L}_\mp Y_{lm}(\theta,\varphi)\right)d\Omega\pm i\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi)\hat{L}_y\left(\hat{L}_\mp Y_{lm}(\theta,\varphi)\right)d\Omega\\&=\int\left(\hat{L}_xY_{lm}(\theta,\varphi)\right)^*\left(\hat{L}_\mp Y_{lm}(\theta,\varphi)\right)d\Omega\pm i\int\left(\hat{L}_yY_{lm}(\theta,\varphi)\right)^*\left(\hat{L}_\mp Y_{lm}(\theta,\varphi)\right)d\Omega\\&=\int\left\{\left(\hat{L}_x\mp i\hat{L}_y\right)Y_{lm}(\theta,\varphi)\right\}^*\left(\hat{L}_\mp Y_{lm}(\theta,\varphi)\right)d\Omega\\&=\int\left(\hat{L}_\mp Y_{lm}(\theta,\varphi)\right)^*\left(\hat{L}_\mp Y_{lm}(\theta,\varphi)\right)d\Omega=\left|C^\mp_{m\mp1}\right|^2\int Y^*_{lm\mp1}(\theta,\varphi)Y_{lm\mp1}(\theta,\varphi)d\Omega\\&=\left|C^\mp_{m\mp1}\right|^2\end{aligned}$$

我们直接计算得$\int Y^*_{lm}(\theta,\varphi)\hat{L}_\pm\hat{L}_\mp Y_{lm}(\theta,\varphi)d\Omega=C^\mp_{m\mp1}C^\pm_m$，所以得到

$$C^\mp_{m\mp1}C^\pm_m=\left|C^\mp_{m\mp1}\right|^2\Rightarrow C^\pm_m=\left(C^\mp_{m\mp1}\right)^*$$

于是我们组成一个方程组$\begin{cases}C^-_{m-1}C^+_m=l(l+1)-m(m-1)\\ C^-_mC^+_{m+1}=l(l+1)-m(m+1)\Rightarrow\left|C^\pm_{m\pm1}\right|^2=l(l+1)-m(m\pm1)\\ C^\pm_m=\left(C^\mp_{m\mp1}\right)^*\end{cases}$

采取康恩-肖特莱约定取实数值为：$C^\pm_{m\pm1}=\sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}=\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}$。

因此，我们得到最后结果：

$$\hat{L}_{\pm}Y_{lm}(\theta,\varphi)=\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}Y_{lm\pm1}(\theta,\varphi)$$

分析结果：

(1)、 $\hat{L}_{\pm}Y_{l\pm l}(\theta,\varphi)=0$ ，$Y_{l\pm l}(\theta,\varphi)$ 称作最高（低）权本征函数。

(2)、当给定 $Y_{ll}(\theta,\varphi)$ 时，用下降算符 $\hat{L}_-$ 逐次作用能够生成 l 族的所有本征函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ ，而当给定 $Y_{l-l}(\theta,\varphi)$ 时，用下降算符 $\hat{L}_+$ 逐次作用能够生成 l 族的所有本征函数 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$。

(3)、利用 $\hat{L}_{\pm}Y_{l\pm l}(\theta,\varphi)=0$ 可以求出 $Y_{l\pm l}(\theta,\varphi)$ 的具体表达式。

$$\begin{cases}\hat{L}_x=i\hbar\left(\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ \hat{L}_y=i\hbar\left(-\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}\right)\end{cases}\Rightarrow\hat{L}_{\pm}=\pm\hbar e^{\pm i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

$$\hat{L}_{\pm}Y_{l\pm l}(\theta,\varphi)=0\Rightarrow e^{\pm i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)Y_{l\pm l}(\theta,\varphi)=0$$

采用分离变量：$Y_{l\pm l}(\theta,\varphi)=A_{l\pm l}(\theta)e^{\pm il\varphi}$ 代入上式得

$$e^{\pm i(l+1)\varphi}\left(\frac{d}{d\theta}-l\cot\theta\right)A_{l\pm l}(\theta)=0$$

而 $\left(\dfrac{d}{d\theta}-l\cot\theta\right)=\sin^l\theta\dfrac{d}{d\theta}\dfrac{1}{\sin^l\theta}$ ，即得 $A_{l\pm l(\theta)}=C\sin^l\theta$

现求归一化系数 $\int\left|A_{l\pm l}(\theta)\right|d\Omega=C^2\int_0^{\pi}\sin^{2l+1}\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi=1$

$$\Rightarrow 2\pi C^2(-1)^{2l}\frac{2^{2l+1}(l!)^2}{(2l+1)!}=1\Rightarrow C=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}$$

所以，归一化的 $A_{l\pm l(\theta)}=(-1)^l\dfrac{1}{2^l l!}\sqrt{\dfrac{(2l+1)!}{4\pi}}\sin^l\theta$

$$\Rightarrow Y_{l\pm l}(\theta,\varphi)=(-1)^l\frac{1}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\sin^l\theta e^{\pm il\varphi}$$

[例 1] 设粒子处于$Y_{lm}(\theta,\varphi)$状态下，求$\overline{\left(\Delta\hat{L}_x\right)^2}$和 $\overline{\left(\Delta\hat{L}_y\right)^2}$。

[解] 由题意得：$\hat{L}_\pm Y_{lm}=\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\hbar Y_{lm\pm1}$

$$\hat{L}_x Y_{lm}=\frac{1}{2}\left(\hat{L}_+ +\hat{L}_-\right)Y_{lm}=\frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{(l-m)(l+m+1)}Y_{lm+1}+\sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{lm-1}\right]$$

$$\hat{L}_y Y_{lm}=\frac{1}{2i}\left(\hat{L}_+ -\hat{L}_-\right)Y_{lm}=\frac{\hbar}{2i}\left[\sqrt{(l-m)(l+m+1)}Y_{lm+1}-\sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{lm-1}\right]$$

$$\overline{\hat{L}_x}=\int Y_{lm}^*\hat{L}_x Y_{lm}d\Omega=\frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\int Y_{lm}^*Y_{lm+1}d\Omega+\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\int Y_{lm}^*Y_{lm-1}d\Omega\right]=0$$

$$\overline{\hat{L}_y}=\int Y_{lm}^*\hat{L}_y Y_{lm}d\Omega=\frac{\hbar}{2i}\left[\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\int Y_{lm}^*Y_{lm+1}d\Omega-\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\int Y_{lm}^*Y_{lm-1}d\Omega\right]=0$$

$$\begin{aligned}\hat{L}_x^2 Y_{lm}&=\frac{1}{4}\left(\hat{L}_+ +\hat{L}_-\right)^2 Y_{lm}=\frac{1}{4}\left(\hat{L}_+^2+\hat{L}_-^2+\hat{L}_+\hat{L}_- +\hat{L}_-\hat{L}_+\right)Y_{lm}\\
&=\frac{\hbar}{4}\Big\{\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hat{L}_+Y_{lm+1}+\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hat{L}_-Y_{lm-1}\\
&\quad+\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hat{L}_+Y_{lm-1}+\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hat{L}_-Y_{lm+1}\Big\}\\
&=\frac{\hbar^2}{4}\Big\{\sqrt{(l-m)(l+m+1)(l-m-1)(l+m+2)}Y_{lm+2}+\sqrt{(l+m)(l-m+1)(l+m-1)(l-m+2)}Y_{lm-2}\\
&\quad+\left[(l+m)(l-m+1)+(l-m)(l+m+1)\right]Y_{lm}\Big\}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\overline{\hat{L}_x^2}&=\int Y_{lm}^*\hat{L}_x^2Y_{lm}d\Omega\\
&=\frac{\hbar^2}{4}\Big\{\sqrt{(l-m)(l+m+1)(l-m-1)(l+m+2)}\int Y_{lm}^*Y_{lm+2}d\Omega\\
&\quad+\sqrt{(l+m)(l-m+1)(l+m-1)(l-m+2)}\int Y_{lm}^*Y_{lm-2}d\Omega\\
&\quad+\left[(l+m)(l-m+1)+(l-m)(l+m+1)\right]\int Y_{lm}^*Y_{lm}d\Omega\Big\}\\
&=\frac{\hbar^2}{4}\left[(l+m)(l-m+1)+(l-m)(l+m+1)\right]=\frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1)-m^2\right]\end{aligned}$$

$$\hat{L}_y^2 Y_{lm} = -\frac{1}{4}\left(\hat{L}_+ - \hat{L}_-\right)^2 Y_{lm} = -\frac{1}{4}\left(\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 - \hat{L}_+\hat{L}_- - \hat{L}_-\hat{L}_+\right) Y_{lm}$$

$$= -\frac{\hbar}{4}\left\{\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hat{L}_+ Y_{lm+1} + \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hat{L}_- Y_{lm-1}\right.$$

$$\left. - \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\hat{L}_+ Y_{lm-1} - \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hat{L}_- Y_{lm+1}\right\}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{4}\left\{\sqrt{(l-m)(l+m+1)(l-m-1)(l+m+2)}Y_{lm+2} + \sqrt{(l+m)(l-m+1)(l+m-1)(l-m+2)}Y_{lm-2}\right.$$

$$\left. - \left[(l+m)(l-m+1) + (l-m)(l+m+1)\right] Y_{lm}\right\}$$

$$\overline{\hat{L}_y^2} = \int Y_{lm}^* \hat{L}_y^2 Y_{lm} d\Omega$$

$$= -\frac{\hbar^2}{4}\left\{\sqrt{(l-m)(l+m+1)(l-m-1)(l+m+2)}\int Y_{lm}^* Y_{lm+2} d\Omega\right.$$

$$+ \sqrt{(l+m)(l-m+1)(l+m-1)(l-m+2)}\int Y_{lm}^* Y_{lm-2} d\Omega$$

$$\left. - \left[(l+m)(l-m+1) + (l-m)(l+m+1)\right]\int Y_{lm}^* Y_{lm} d\Omega\right\}$$

$$= \frac{\hbar^2}{4}\left[(l+m)(l-m+1) + (l-m)(l+m+1)\right] = \frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1) - m^2\right]$$

上面各结果代入$\overline{\left(\Delta\hat{L}_x\right)^2} = \overline{\left(\hat{L}_x - \overline{\hat{L}_x}\right)^2} = \overline{\hat{L}_x^2} - \overline{\hat{L}_x}^2$及$\overline{\left(\Delta\hat{L}_y\right)^2} = \overline{\left(\hat{L}_y - \overline{\hat{L}_y}\right)^2} = \overline{\hat{L}_y^2} - \overline{\hat{L}_y}^2$得到：

$\overline{\left(\Delta\hat{L}_x\right)^2} = \overline{\left(\Delta\hat{L}_y\right)^2} = \frac{\hbar^2}{2}\left[l(l+1) - m^2\right]$。

[例 2] 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的可能测量值及平均值，(2) $\hat{L}^2$的可能测量值及相应的几率；(3) $\hat{L}_x$的可能测量值及相应的几率。

[解] 根据$\begin{cases}\hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm} \\ \hat{L}_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}\end{cases}$，由题意知：$l = 1, 2$及$m = 0, 1$

(1)、 L_z的可能测量值为：0 和$\hbar$，相应的测量几率分别为$|c_2|^2$和$|c_1|^2$，

所以，其平均值为$\overline{L}_z = \hbar|c_1|^2$。

(2)、 $\hat{L}^2$的可能测量值为：$1(1+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$和$2(2+1)\hbar^2 = 6\hbar^2$，相应的测量几率分别为$|c_1|^2$和$|c_2|^2$。

(3)、由$\hat{L}_\pm Y_{lm} = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}\hbar Y_{lm\pm1}$得

$$\hat{L}_x Y_{lm} = \frac{1}{2}\left(\hat{L}_+ + \hat{L}_-\right) Y_{lm} = \frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{(l-m)(l+m+1)}Y_{lm+1} + \sqrt{(l+m)(l-m+1)}Y_{lm-1}\right]$$

当$l=1$时，有$\begin{cases}\hat{L}_xY_{11}=\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}Y_{10}\\ \hat{L}_xY_{10}=\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}\left(Y_{11}+Y_{1-1}\right)\\ \hat{L}_xY_{1-1}=\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}Y_{10}\end{cases}$，因此可设$\hat{L}_x$的归一化的本征态为$\Psi_\lambda=a_1Y_{11}+a_0Y_{10}+a_{-1}Y_{1-1}$，

相应的本征值为$\lambda\hbar$，即本征方程$\hat{L}_x\Psi_\lambda=\lambda\hbar\Psi_\lambda$，得$\begin{cases}\dfrac{a_0}{\sqrt{2}}=a_1\lambda=a_{-1}\lambda\\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(a_{-1}+a_1\right)=a_0\lambda\\ a_1^2+a_0^2+a_{-1}^2=1\end{cases}$该方程组有下列三组解：

(i) $\begin{cases}\lambda=0\\ a_0=0\\ a_1=-a_{-1}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\end{cases}$ (ii) $\begin{cases}\lambda=\pm1\\ a_1=a_{-1}=1/2\\ a_0=\pm\sqrt{2}a_1=\pm\sqrt{2}/2\end{cases}$

这样我们得到$l=1$时$\hat{L}_x$的各本征值对应的归一化本征态：

$$\begin{cases}\Psi_0=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(Y_{11}-Y_{1-1}\right)\\ \Psi_{\pm1}=\dfrac{1}{2}\left(Y_{11}\pm\sqrt{2}Y_{10}+Y_{1-1}\right)\end{cases}$$

当$l=2$时，有$\begin{cases}\hat{L}_xY_{22}=\hbar Y_{21}\\ \hat{L}_xY_{21}=\hbar\left(Y_{22}+\sqrt{3/2}Y_{20}\right)\\ \hat{L}_xY_{20}=\sqrt{3/2}\hbar\left(Y_{21}+Y_{2-1}\right)\\ \hat{L}_xY_{2-1}=\hbar\left(Y_{2-2}+\sqrt{3/2}Y_{20}\right)\\ \hat{L}_xY_{2-2}=\hbar Y_{2-1}\end{cases}$，于是可设$\hat{L}_x$的归一化的本征态为

$\Phi_\lambda=a_2Y_{22}+a_1Y_{21}+a_0Y_{20}+a_{-1}Y_{2-1}+a_{-2}Y_{2-2}$，相应的本征值为$\lambda\hbar$，即本征方程$\hat{L}_x\Phi_\lambda=\lambda\hbar\Phi_\lambda$，得

$$\begin{aligned}\hat{L}_x\Phi_\lambda&=a_1\hbar Y_{22}+\left(a_2+\sqrt{3/2}a_0\right)\hbar Y_{21}+\sqrt{3/2}\hbar\left(a_1+a_{-1}\right)Y_{20}+\hbar\left(a_{-2}+\sqrt{3/2}a_0\right)Y_{2-1}+a_{-1}\hbar Y_{2-2}\\&=a_2\lambda\hbar Y_{22}+a_1\lambda\hbar Y_{21}+a_0\lambda\hbar Y_{20}+a_{-1}\lambda\hbar Y_{2-1}+a_{-2}\lambda\hbar Y_{2-2}=\lambda\hbar\Phi_\lambda\end{aligned}$$

比较两边系数得：$\begin{cases} a_1 = a_2\lambda \\ a_2 + \sqrt{3/2}a_0 = a_1\lambda \\ \sqrt{3/2}\left(a_{-1} + a_1\right) = a_0\lambda \\ a_{-2} + \sqrt{3/2}a_0 = a_{-1}\lambda \\ a_{-1} = a_{-2}\lambda \\ a_2^2 + a_1^2 + a_0^2 + a_{-1}^2 + a_{-2}^2 = 1 \end{cases}$ ，该方程组有下列五组解：

(i) $\begin{cases} \lambda = 0 \\ a_1 = a_{-1} = 0 \\ a_0 = 1/2 \\ a_2 = a_{-2} = -\sqrt{3/2}a_0 = -\sqrt{6}/4 \end{cases}$ (ii) $\begin{cases} \lambda = \pm 2 \\ a_1 = a_{-1} = \pm 1/2 \\ a_2 = a_{-2} = 1/4 \\ a_0 = \sqrt{6}/4 \end{cases}$ (iii) $\begin{cases} \lambda = \pm 1 \\ a_1 = -a_{-1} = \pm 1/2 \\ a_0 = 0 \\ a_2 = -a_{-2} = 1/2 \end{cases}$

这样我们得到$l = 2$时$\hat{L}_x$的各本征值对应的归一化本征态：

$$\begin{cases} \Phi_0 = \dfrac{\sqrt{6}}{4}\left(Y_{22} - \sqrt{\dfrac{2}{3}}Y_{20} + Y_{2-2}\right) \\ \Phi_{\pm 1} = \dfrac{1}{2}\left(Y_{22} \pm Y_{21} \mp Y_{2-1} - Y_{2-2}\right) \\ \Phi_{\pm 2} = \dfrac{1}{4}\left(Y_{22} \pm Y_{21} + \sqrt{6}Y_{20} \pm Y_{2-1} + Y_{2-2}\right) \end{cases}$$

将$\psi = c_1Y_{11} + c_2Y_{20}$用$\hat{L}_x$的本征函数展开如下：

$$\psi = c_1Y_{11} + c_2Y_{20} = \frac{c_1}{2}\left(\Psi_1 + \sqrt{2}\Psi_0 + \Psi_{-1}\right) + c_2\left[\frac{\sqrt{6}}{4}\left(\Phi_2 + \Phi_{-2}\right) - \frac{1}{2}\Phi_0\right]$$

所以在$\psi = c_1Y_{11} + c_2Y_{20}$态下，测得$\hat{L}_x$的可能值为$\pm 2\hbar$、$\pm\hbar$和 0， 它们相应的几率分别为$\frac{3}{8}|c_2|^2$ 、$\frac{1}{4}|c_1|^2$及$\frac{1}{2}|c_1|^2 + \frac{1}{4}|c_2|^2$。

展开假定：

(1)、物理量对应于线性厄米算符。

(2)、任意一个波函数都能用归一化波函数本征函数系展开，即

§4.4 连续谱本征函数“归一化”

前面讨论的是局限于分立谱的情况，也就是波函数是平方可积的，是能够归一化的。显然，并不是所有本征函数都能归一化。

一、连续谱本征函数“归一化”

分立谱和连续谱对照表

	分立谱	连续谱
本征方程	$\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n$	$\hat{A}\varphi_\lambda = \lambda\varphi_\lambda$
本征函数	φ_n	φ_λ
本征值谱	a_n (分立值)	λ (连续值)
正交归一性	$(\varphi_m, \varphi_n) = \delta_{mn}$	$(\varphi_\lambda, \varphi_{\lambda'}) = \delta(\lambda - \lambda')$
任意波函数的展开式	$\psi(x) = \sum_n c_n\varphi_n(x)$	$\psi(x) = \int c(\lambda)\varphi_\lambda(x)d\lambda$
展开系数	$c_n = \int \varphi_n^*(x)\psi(x)dx$	$c(\lambda) = \int \varphi_\lambda^*(x)\psi(x)dx$
归一化	$\sum_n \lvert c_n\rvert^2 = 1$	$\int \lvert c(\lambda)\rvert^2 d\lambda = 1$
力学量平均值	$\bar{A} = \sum_n \lvert c_n\rvert^2 a_n$	$\bar{A} = \int \lvert c(\lambda)\rvert^2 \lambda d\lambda$
测量值概率	$\lvert c_n\rvert^2$	$\lvert c(\lambda)\rvert^2 d\lambda$
封闭关系	$\sum_n \varphi_n^*(x')\varphi_n(x) = \delta(x'-x)$	$\int \varphi_\lambda^*(x')\varphi_\lambda(x)d\lambda = \delta(x'-x)$

(1)、由 $c_n = \int \varphi_n^*(x)\psi(x)dx = \int \varphi_n^*(x)\left[\sum_m c_m\varphi_m(x)\right]dx = \sum_m c_m \int \varphi_n^*(x)\varphi_m(x)dx$ 得到：

$$\int \varphi_n^*(x)\varphi_m(x)dx = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ 1 & n = m \end{cases}$$

(2)、由 $c(\lambda) = \int \varphi_\lambda^*(x)\psi(x)dx = \int \varphi_\lambda^*(x)\left[\int c(\lambda')\varphi_{\lambda'}(x)d\lambda'\right]dx = \int c(\lambda')\left[\int \varphi_\lambda^*(x)\varphi_{\lambda'}(x)dx\right]d\lambda'$ 得：

$\int \varphi_\lambda^*(x)\varphi_{\lambda'}(x)dx$ 是一个“奇异函数”。

因左边仅与λ有关，所以右边当$\lambda' \neq \lambda$时$c(\lambda')$应无贡献， 此时$\int \varphi_{\lambda}^{*}(x)\varphi_{\lambda'}(x)dx = 0$， 而当$\lambda' = \lambda$时，$\int c(\lambda')\left[\int \varphi_{\lambda}^{*}(x)\varphi_{\lambda'}(x)dx\right]d\lambda' = c(\lambda)$。所以有$\int \varphi_{\lambda}^{*}(x)\varphi_{\lambda'}(x)dx = \begin{cases} 0 & \lambda' \neq \lambda \\ \infty & \lambda' = \lambda \end{cases}$。

为满足这一要求，引入一个奇异函数，即$\delta(x)$，其定义

$$\delta(x - x_0) = \begin{cases} 0 & x \neq x_0 \\ \infty & x = x_0 \end{cases},$$

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

因此，若取$\int \varphi_{\lambda}^{*}\varphi_{\lambda'}dx = \delta(\lambda - \lambda')$，则$\int c(\lambda')\left[\int \varphi_{\lambda}^{*}\varphi_{\lambda'}dx\right]d\lambda' = \int c(\lambda')\delta(\lambda - \lambda')d\lambda' = c(\lambda)$，这就保证获得我们所需结果。

于是，连续谱本征函数φ_{λ}应满足$(\varphi_{\lambda}, \varphi_{\lambda'}) = \delta(\lambda - \lambda')$，这就称作连续谱本征函数的“正交归一”。它是分立谱本征函数的正交归一$(\varphi_n, \varphi_m) = \delta_{nm}$的自然推广。

[例题一] 求“正交归一”的动量本征函数。

[解] 本征方程为$-i\hbar \dfrac{d}{dx}\psi_{p_x}(x) = p_x \psi_{p_x}(x) \Rightarrow \psi_{p_x}(x) = C(p_x)e^{ip_x x/\hbar}$

利用公式：$\int e^{i(k'-k)x}dx = 2\pi\delta(k' - k)$及归一化条件$\int \psi_{p_x}^{*}(x)\psi_{p_x'}(x)dx = \delta(p_x - p_x')$得

$$\begin{aligned}\delta(p_x - p_x') &= \int \psi_{p_x}^{*}(x)\psi_{p_x'}(x)dx = \int C^{*}(p_x)C(p_x')e^{i(p_x' - p_x)x/\hbar}dx \\ &= \hbar C^{*}(p_x)C(p_x')\int e^{i(p_x' - p_x)x}dx \\ &= 2\pi\hbar C^{*}(p_x)C(p_x')\delta(p_x - p_x')\end{aligned}$$

$$\Rightarrow 2\pi\hbar\left|C(p_x)\right|^2 = 1 \Rightarrow C(p_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}。$$

所以，“正交归一”的动量本征函数为$\psi_{p_x}(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip_x x/\hbar}$。

[例题二] 求“正交归一”的坐标本征函数

[解] 由本征方程$\hat{x}\varphi_{x'}(x) = x'\varphi_{x'}(x)$得

$$(x-x')\varphi_{x'}(x)=0 \quad \Rightarrow \varphi_{x'}(x)=\begin{cases}0 & x\neq x' \\ \infty & x=x'\end{cases}$$

归一化条件$\int \varphi_{x'}^{*}(x)\varphi_{x''}(x)dx=\delta(x'-x'')$，当且仅当$\varphi_{x'}(x)=\delta(x-x')$时，上面的要求才能满足。

所以，“正交归一”的坐标本征函数为$\varphi_{x'}(x)=\delta(x-x')$。

* 事实上，由于物理波函数在无穷远为 0，

$$\begin{aligned}(u_{k},u_{k'})&=\frac{1}{2\pi}\lim_{\varepsilon\to 0^{+}}\int e^{i(k'-k)x-\varepsilon|x|}dx=\frac{1}{2\pi}\lim_{\varepsilon\to 0^{+}}\left[\int_{0}^{+\infty}e^{i(k'-k)x-\varepsilon x}dx+\int_{-\infty}^{0}e^{i(k'-k)x+\varepsilon x}dx\right]\\&=\frac{1}{2\pi}\lim_{\varepsilon\to 0^{+}}\left[\frac{-1}{i(k'-k)-\varepsilon}+\frac{1}{i(k'-k)+\varepsilon}\right]=\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0^{+}}\left[\frac{\varepsilon}{(k'-k)^{2}+\varepsilon^{2}}\right]\\&=\delta(k'-k)\end{aligned}$$

于是有，$u_{k}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\lim_{\varepsilon\to 0^{+}}e^{ikx-\varepsilon|x|/2}$

显然，$\varphi_{x'}(x)=\delta(x-x')$是完备的。因此，任何一波函数$\psi(x)$可按它展开

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

$$=\int\psi(x')\varphi_{x'}(x)dx'$$

$|\psi(x')|^{2}dx'$为在$\psi(x)$中，观测到粒子在$x'-x'+dx'$范围中的几率。

二、Delta-函数

A. δ函数的定义$\delta(x-x_{0})=\begin{cases}0 & x\neq x_{0}\\ \infty & x=x_{0}\end{cases}$，

$$\int_{x_{0}-\varepsilon}^{x_{0}+\varepsilon}\delta(x-x_{0})dx=\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x_{0})dx=1$$

且$\int_{a}^{b}f(x)\delta(x-x_{0})dx=\begin{cases}f(x_{0}) & (a,b)\in x\\ 0 & (a,b)\notin x\end{cases}$，a<b

现看不定积分$\int_{-\infty}^{x}\delta(\xi)d\xi=\begin{cases}1 & x>0\\ 0 & x<0\end{cases}$。

这是一阶梯函数，设$\theta(x)=\begin{cases}1 & x>0\\ 0 & x<0\end{cases}$，由上述积分知$\delta(x)=d\theta(x)/dx$ 。

写得更为明确一些

$$\delta(x)=\lim_{a\to 0^+}\frac{\theta(x+a)-\theta(x-a)}{(x+a)-(x-a)}=\lim_{a\to 0^+}\frac{\theta(x+a)-\theta(x-a)}{2a}=\lim_{a\to 0^+}F_a(x)$$

所以，当$a\to 0^+$，$F_a(x)\to\infty$（$(-\mathrm{a},\mathrm{a})\in \mathrm{x}$）。但总面积恒为 1，即

$$\int_{-\infty}^{+\infty}F_a(x)dx=1 \quad \text{（对任意 a）}$$

可以证明：$\theta(x)=\dfrac{1}{2\pi i}\displaystyle\int_c\frac{e^{izx}}{z}dz$，所以$\delta(x)=\theta'(x)=\dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int_c e^{izx}dz=\dfrac{1}{2\pi}\int e^{ikx}dk$

下面给出另一些δ表示式（作为函数参量极限）

$$\begin{aligned}\delta(x)&=\frac{1}{\pi}\lim_{L\to+\infty}\frac{1-\cos Lx}{Lx^2}=\frac{1}{\pi}\lim_{\alpha\to 0^+}\frac{\alpha}{x^2+\alpha^2}=\frac{1}{\pi}\lim_{L\to\infty}\frac{\sin Lx}{x}\\&=\lim_{\alpha\to\infty}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi i}}e^{i\alpha x^2}=\lim_{\sigma\to 0}\sqrt{\frac{1}{\pi\sigma}}e^{-x^2/\sigma}=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\lim_{L\to\infty}\sqrt{L}\cos Lx^2\end{aligned}$$

B. $\delta-$函数的性质

下面给出δ函数的性质，是表示当它们在积分中出现时，左边表示可被右边表示代替。

(i) $\delta(x)=\delta(-x)$

(ii) $\delta(ax)=\dfrac{1}{|a|}\delta(x)$ (iii) $x\delta(x)=0$

推论：如有方程 A = B，则$\dfrac{\mathrm{A}}{\mathrm{x}}=\dfrac{\mathrm{B}}{\mathrm{x}}+\mathrm{c}\delta(\mathrm{x})$。

例 $\mathrm{x}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\ln\mathrm{x}=1,$ 所以，$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\ln\mathrm{x}=\dfrac{1}{\mathrm{x}}+\mathrm{c}\delta(\mathrm{x})$。

由于 $\displaystyle\int_a^b\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}\ln\mathrm{x}\,\mathrm{dx}=\ln\mathrm{b}-\ln\mathrm{a}$

$\displaystyle\int_a^b\frac{1}{\mathrm{x}}\mathrm{dx}=\ln|\mathrm{b}|-\ln|\mathrm{a}|$。

对于 a, b 都大于零或都小于零，两式相等；但 a>0, b<0 或 a<0, b>0,

则两式不等，而可定出 $c=-i\pi$ ，即

$$\frac{d}{dx}\ln x=\frac{1}{x}-i\pi\delta(x)\text{。}$$

$$f(x)\delta(x-a)=f(a)\delta(x-a)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(y-x)\delta(x-a)dx=\delta(y-a)$$

$$\delta(g(x))=\sum_n\frac{1}{|g'(x_n)|}\delta(x-x_n)\text{。}$$ （若 $g(x_n)=0$ ，但 $g'(x_n)\neq 0$ ，即不是重根）。

例 $$\delta(x^2-a^2)=\frac{1}{\left|(x^2-a^2)'\right|_{x=a}}\delta(x-a)+\frac{1}{\left|(x^2-a^2)'\right|_{x=-a}}\delta(x+a)$$

$$=\frac{1}{2|a|}\delta(x-a)+\frac{1}{2|a|}\delta(x+a)$$

$$=\frac{1}{2|x|}(\delta(x-a)+\delta(x+a))$$

于是有推论 $|x|\delta(x^2)=\delta(x)$ （有条件 $a^2\to 0^+$ ）。

但是由 $$\int_{-\infty}^{+\infty}|x|\delta(x^2)dx$$

$$=\int_{-\infty}^{0}-x\delta(x^2)dx+\int_{0}^{+\infty}x\delta(x^2)dx$$

$$=-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{0}\delta(x^2)dx^2+\frac{1}{2}\int_{0}^{+\infty}\delta(x^2)dx^2$$

$$=-\frac{1}{2}\int_{+\infty}^{0}\delta(w)dw+\frac{1}{2}\int_{0}^{+\infty}\delta(y)dy$$

$$=-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{0}\delta(-y)d(-y)+\frac{1}{2}\int_{0}^{+\infty}\delta(y)dy$$

$$=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{0}\delta(y)dy+\frac{1}{2}\int_{0}^{+\infty}\delta(y)dy$$

$$=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(y)dy$$

由这给出 $2|x|\delta(x^2)=\delta(x)$。

这一矛盾或错误的来源是因 $|x|\delta(x^2)=\delta(x)$ 是有条件的（ $a^2\to 0^+$ ），而在 $a^2\equiv 0$ 时，是不成立的。

为清楚看到这一点，取

$$\delta(x^2-\varepsilon)=\frac{1}{\pi}\lim_{\alpha\to 0^+}\frac{\alpha}{\alpha^2+(x^2-\varepsilon)^2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|x|\delta(x^2-\varepsilon)dx=2\int_{0}^{+\infty}\frac{x}{\pi}\lim_{\alpha\to 0^+}\frac{\alpha}{\alpha^2+(x^2-\varepsilon)^2}dx$$

$$=\lim_{\alpha\to 0^+}\frac{1}{\pi}\int_{0}^{+\infty}\frac{d(x^2-\varepsilon)/\alpha}{1+(x^2-\varepsilon)^2/\alpha^2}$$

$$=\lim_{\alpha\to 0^+}\frac{1}{\pi}\int_{-\varepsilon/\alpha}^{+\infty}\frac{dy}{1+y^2}$$

$$=\frac{1}{\pi}\lim_{\alpha\to 0^+}\left(\frac{\pi}{2}-\tan^{-1}\frac{-\varepsilon}{\alpha}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|x|\delta(x^2-\varepsilon)dx=\begin{cases}1 & \varepsilon>0\\ \frac{1}{2} & \varepsilon=0\\ 0 & \varepsilon<0\end{cases}$$。

所以，$|x|\delta(x^2-\varepsilon)=\begin{cases}\delta(x) & \varepsilon\to 0^+\\ \frac{1}{2}\delta(x) & \varepsilon=0\\ 0 & \varepsilon\to 0^-\end{cases}$ 。这表明，无条件地由

$\delta(x^2-a^2)=\frac{1}{2|x|}(\delta(x-a)+\delta(x+a))$ 推论得 $|x|\delta(x^2)=\delta(x)$ 是不对的。仅当 $a^2\to 0^+$ 才成立。

C. δ函数的导数

δ函数具有任何级的导数，可以证明

(i)、$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta^{(n)}(x-x_0)f(x)dx=(-1)^n f^{(n)}(x_0)$ （注意：微商是对宗量 x 进行的）

(ii)、$\delta^{(m)}(x)=(-1)^m\delta^{(m)}(-x)$

(iii)、$\int\delta^{(m)}(y-x)\delta^{(n)}(x-a)dx=\delta^{(m+n)}(y-a)$

(iv)、$x\delta^{(n)}(x)=-n\delta^{(n-1)}(x)$

(v)、$x^{m+1}\delta^{(m)}(x)=0$

例：求 $xu(x)=-\delta(x)$ 之解

因 $x\delta'(x)=-\delta(x)$，所以特解是 $\delta'(x)$，而相应齐次方程是 $xu(x)=0$，有解 $\delta(x)$ 。

从而得通解

$$u(x)=\delta'(x)+c\delta(x)。$$

事实上 $xu(x)=-\delta(x)\Rightarrow u(x)=-\dfrac{\delta(x)}{x}+c\delta(x)$，于是得

$$u(x)=\delta'(x)+c\delta(x)。$$

应特别注意 $\dfrac{\partial}{\partial x}\delta(x-x_0)=\dfrac{\partial}{\partial x}\delta(x_0-x)$，但

$$\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x_0)=-\frac{\partial}{\partial x_0}\delta(x-x_0)=-\frac{\partial}{\partial x_0}\delta(x_0-x)。$$

三、本征函数的封闭性

已经讨论过厄密算符的本征函数集有正交归一性和完备性，即

正交归一性：$(\varphi_m,\varphi_n)=\int\varphi_m^*\varphi_n d\tau=\delta_{mn}$

完备性：$\psi=\sum\limits_n c_n\varphi_n$

对于连续谱

$$(\varphi_\lambda,\varphi_{\lambda'})=\delta(\lambda-\lambda')$$

$$\psi(x)=\int c_\lambda\varphi_\lambda d\lambda$$

下面我们来讨论本征函数的封闭性

$$\psi(x)=\sum_n c_n\varphi_n(x)\ ,$$

而由正交归一性得： $c_n=\int\varphi_n^*(x)\psi(x)dx$ φ_n 已归一化。所以

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

$$\Rightarrow\sum_n\varphi_n(x)\varphi_n^*(x')=\delta(x-x')\ 。$$

上述表示式称为本征函数的封闭性，它表明正交归一完备本征函数组可构成一δ函数。

例 1 $\hat{L}_z$ 的本征函数

$$\psi_m=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\qquad m=0,\pm1,\pm2,\pm3\cdots$$

有 $\sum_m\psi_m(x)\psi_m^*(x')=\delta(x-x')$ ，即

$$\frac{1}{2\pi}\sum_m e^{im(\varphi-\varphi')}=\delta(\varphi-\varphi')\ ,$$

人们熟习的形式：$\frac{1}{2l}\sum_m e^{i\frac{\pi}{l}(x-x')m}=\delta(x-x')$

例 2 $\hat{p}_x$ 的本征函数

$$\psi_{p_x}=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ip_xx/\hbar}$$

有 $\int\psi_{p_x}(x)\psi_{p_x}^*(x')dp_x=\delta(x-x')=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{ip_x(x-x')/\hbar}dp_x$

本征函数的封闭性在表象变换理论运算中及一些矩阵元求和中是很有用的。

A. 封闭性是正交、归一的本征函数完备性的充分必要条件。

若 φ_n 是**完备的** $\xrightarrow{\text{必有}}$ **封闭性**（必要条件）， φ_n 有**封闭性** $\xrightarrow{\text{则是}}$ **完备的**（充分条件）

1．必要条件已证过

2．充分条件：有**封闭性:** $\sum_m\varphi_m(x)\varphi_m^*(x')=\delta(x-x')$，则

$$\psi(x)=\int\delta(x-x')\psi(x')dx'=\sum_m\varphi_m(x)\int\varphi_m^*(x)\psi(x')dx'=\sum_m c_m\varphi_m(x)\ ,$$

即任一波函数可按$\{\varphi_m\}$展开，$\{\varphi_m\}$是完备的。

B．本征函数的封闭性也可看作$\delta(x)$函数按本征函数展开，而展开系数恰为本征函数的复共轭。

$$\delta(x-x')=\sum_n c_n^{x'}\varphi_n(x)$$

$c_n^{x'}=\int\varphi_n^*(x)\delta(x-x')dx'=\varphi_n^*(x')$。所以

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

力学量的完全集

量子力学描述与经典描述大不一样，经典力学是知某时刻$(\vec{r},\vec{p})$，那以后任一时刻的运动行为被牛顿方程所确定（初值确定）。

但在量子力学中，是状态波函数的描述，是确定体系所处的状态。如对体系测量力学量的可能值及相应几率。如能充分确定，则认为是完全描述了。但是，如何才能将状态描述得完全确定呢？

设$\hat{A}$和$\hat{B}$是两个相互对易的力学量算符。如$u_a(x)$是$\hat{A}$的本征函数， 即$\hat{A}u_a(x)=au_a(x)$。

由$\hat{A}\hat{B}u_a=\hat{B}\hat{A}u_a=a\hat{B}u_a$，所以$\hat{B}u_a$也是$\hat{A}$的本征函数，对应于同一个本征值$a$。

1、当$\hat{A}$的本征值非简并时，可得到下列结论：

(1)、$\hat{B}u_a=bu_a$， 这说明$u_a(x)$也是$\hat{B}$的本征函数，

(2)、如测量力学量$\hat{A}$，取值a，则体系处于$u_a(x)$态。

2、当$\hat{A}$的本征值是两重简并。那问题就不一样了，

(1)、测量$\hat{A}$取值 a 时，并不知处于那一态，可能为$\alpha_1u_a^{(1)}+\alpha_2u_a^{(2)}$。

因$u_a^{(1)}$是$\hat{A}$的本征态，由于$\hat{B}$与$\hat{A}$对易，所以$\hat{B}u_a^{(1)}$也是$\hat{A}$的本征态，本征值也为 a，但并不一定为$cu_a^{(1)}$。

一般而言，
$$\hat{B}u_a^{(1)}=b_{11}u_a^{(1)}+b_{21}u_a^{(2)}$$
$$\hat{B}u_a^{(2)}=b_{12}u_a^{(1)}+b_{22}u_a^{(2)}。$$

于是有

$$\hat{B}\begin{pmatrix}u_a^{(1)}\\u_a^{(2)}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}b_{11}&b_{21}\\b_{12}&b_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_a^{(1)}\\u_a^{(2)}\end{pmatrix}。$$

由这可得 $\hat{B}v_a^{(b_1)}=b_1v_a^{(b_1)}$

$$\hat{B}v_a^{(b_2)}=b_2v_a^{(b_2)}，$$

而， $v_a^{(b_i)}=a_1^{(i)}u_a^{(1)}+a_2^{(i)}u_a^{(2)}$。

这时，$v_a^{(b_1)}$，$v_a^{(b_2)}$是$\hat{A}$的本征函数，本征值为 a，又是$\hat{B}$的本征函数，本征值为b_1，b_2(若$b_1 \neq b_2$)。

那$\hat{A},\hat{B}$一起就唯一地决定函数$v_a^{(b_i)}$。

当测得值为a, b_1，那体系只能处于$v_a^{(b_1)}$，而不可能处于别的态。

所以，若力学量$\hat{A}$和$\hat{B}$的本征值给定，则唯一地给定了态，即$\hat{A},\hat{B}$的共同本征态没有一个是简并的。

因此，我们可以给出一个如下定义：

力学量完全集：

设力学量$\hat{A},\hat{B},\hat{C}\cdots$彼此对易； 它们的共同本征函数$\psi_{abc\cdots}$是不简并的，也就是说，本征值$a,b,c\cdots$仅对应一个独立的本征函数，则称这一组力学量构成一个完全集（或$\hat{A},\hat{B},\hat{C}\cdots$仅有一个共同的本征完备组）。

根据态叠加原理： 可用一组完全集的力学量的共同本征函数组来描述一个体系可能处的状态。

如$\hat{H}$与t无关，则它是一组特解（对于一个体系，其完全集的力学量的数目一般等于它的自由度数）。所以，以后要描述一个体系所处的态时，我们首先集中注意力去寻找一组独立的完全集，以给出特解，然后得通解。

有了力学量完全集（如包含与 t 无关的$\hat{H}$），则可得$\psi_{abc\cdots}$。而

$$\psi(\vec{r},t)=\sum_{n,a,b,c\cdots} C_{nabc\cdots}\psi_{nabc\cdots}e^{-iE_n t/\hbar}\ ,$$

$$C_{nabc\cdots}=\int \psi^*_{nabc\cdots}(\vec{r})\psi(\vec{r},0)d\vec{r}$$

$\hat{L}^2,\hat{L}_z$完全集相应的本征函数为$Y_{lm}(\theta,\varphi)$。宇称算符$\hat{\pi}$也可以，加上就多余了。

描述一个物理体系可以有几组不同的完全集，如 x,y,z（相应本征函数组

$\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)\delta(z-z_0)$）；

p_x, p_y, p_z（相应本征函数组$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}E^{i\underline{p}\cdot\underline{r}/\hbar}$））；

x, p_y, p_z（相应本征函数组$\delta(x-x_0)\frac{1}{(2\pi\hbar)}E^{i(p_y y+p_z z)/\hbar}$））。

当然，当 $\hat{H}$ 与 t 无关时，选包括 $\hat{H}$ 的力学量完全集，有利于写出与 t 相关的通解。

§4.5 表象变换理论

一、量子力学各量的矩阵表示

	坐标表象	A 表象
基矢量		$\{u_n(x)\}$
归一化条件	$\int\psi^*(x,t)\psi(x,t)dx=1$	$\sum_n a_n^*(t)a_n(t)=1$
算符 $\hat{F}$ 表示	$\hat{F}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)=\varphi(x,t)$	$b_n(t)=\sum_m F_{nm}a_m(t)$，写成矩阵形式： $\begin{pmatrix} b_1(t)\\ \vdots\\ b_n(t)\\ \vdots\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} F_{11} & \cdots & F_{1m} & \cdots\\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ F_{n1} & \cdots & F_{nm} & \vdots\\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t)\\ \vdots\\ a_m(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$
平均值公式	$\bar{F}=\int\psi^*(x,t)\hat{F}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)dx$	$\bar{F}=\sum_{n,m}a_n^*(t)F_{nm}a_m(t)$，写成矩阵形式： $\bar{F}=\begin{pmatrix} a_1^*(t)\\ \vdots\\ a_n^*(t)\\ \vdots\end{pmatrix}^T\begin{pmatrix} F_{11} & \cdots & F_{1m} & \cdots\\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ F_{n1} & \cdots & F_{nm} & \vdots\\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t)\\ \vdots\\ a_m(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$
本征方程	$\hat{F}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)=\lambda\psi(x,t)$	$\sum_m F_{nm}a_m(t)=\lambda a_n(t)$，写成矩阵形式： $\begin{pmatrix} F_{11} & \cdots & F_{1m} & \cdots\\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ F_{n1} & \cdots & F_{nm} & \vdots\\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t)\\ \vdots\\ a_m(t)\\ \vdots\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} a_1(t)\\ \vdots\\ a_n(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$ 简记：$F\Psi=\lambda\Psi$
薛定谔方程	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\hat{H}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)$	$i\hbar\frac{d}{dt}a_n(t)=\sum_n H_{nm}a_m(t)$，写成矩阵式： $i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} a_1(t)\\ \vdots\\ a_n(t)\\ \vdots\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} H_{11} & \cdots & H_{1m} & \cdots\\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ H_{n1} & \cdots & H_{nm} & \vdots\\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t)\\ \vdots\\ a_m(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$

1、算符的矩阵表示

一个算符表示为$\hat{F}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$，是它的坐标表象，这意味着

$$\varphi(x,t)=\hat{F}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)$$

现在把$\psi(x,t)$和$\varphi(x,t)$变换到$\hat{A}$表象中，

$$\psi(x,t)=\sum_m a_m(t)u_m(x)$$

$$\varphi(x,t)=\sum_k b_k(t)u_k(x)$$

代入上面的方程得：$\sum_k b_k(t)u_k(x)=\sum_m a_m(t)\hat{F}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_m(x),$

左乘以$u_n^*(x)$并积分得$\sum_k b_k(t)\int u_n^*(x)u_k(x)dx=\sum_m a_m(t)\int u_n^*(x)\hat{F}u_m(x)dx$

利用$\{u_n(x)\}$的正交归一性，得到：$b_n(t)=\sum_n a_m(t)\int u_n^*(x)\hat{F}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_m(x)dx$

现在记作：$F_{nm}=\int u_n^*(x)\hat{F}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)u_m(x)dx$，则有$b_n(t)=\sum_n F_{nm}a_m(t)$。

它可写成矩阵形式$\begin{pmatrix} b_1(t)\\ b_2(t)\\ \vdots \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots\\ F_{21} & F_{22} & \cdots\\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t)\\ a_2(t)\\ \vdots \end{pmatrix}$，所以，若记$F=\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots\\ F_{21} & F_{22} & \cdots\\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$，则方程就成为

$\varphi(t)=F\psi(t)$。

这告诉我们，在离散表象中算符用(方)矩阵代表。

算符的厄米性在矩阵形式中的表现：

$$F_{mn}^*=\int u_m(x)[\hat{F}u_n(x)]^*dx=\int u_n^*(x)[\hat{F}u_m(x)]dx=F_{nm}$$

即是$F^\dagger=F$，$(F^\dagger)_{mn}=(F_{nm})^*$。

一个算符在其自身的表象中是对角矩阵，各对角元素就是各本征值。

2、本征方程的解法

本征方程

　

$$\begin{pmatrix} F_{11} & \cdots & F_{1m} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ F_{n1} & \cdots & F_{nm} & \vdots \\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ \vdots \\ a_m(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a_1(t) \\ \vdots \\ a_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad 或 \quad \begin{pmatrix} F_{11}-\lambda & \cdots & F_{1m} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ F_{n1} & \cdots & F_{nm}-\lambda & \vdots \\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ \vdots \\ a_m(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = 0$$

简写为$(F-\lambda I)\Psi = 0$，I代表单位矩阵。这是一个齐次线性方程组，它有非零解的充要条件是：

$$\begin{vmatrix} F_{11}-\lambda & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22}-\lambda & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0,$$

或简记为$|F-\lambda I| = 0$。这个方程称为长期（久期）方程。如果$\hat{F}$是$n\times n$矩阵，则它是关于λ的n次代数方程，必有n个根，这些根就是本征值。把这些本征值记为$\{\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n\}$，再代回方程

$$\begin{pmatrix} F_{11}-\lambda_i & F_{12} & \cdots \\ F_{21} & F_{22}-\lambda_i & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0, \qquad (i = 1,2,\cdots,n)$$

就可以对各个本征值求出$\{a_1, a_2, \cdots, a_n\}$，但有一个整体的常数因子未定，再利用归一化条件把它定出，就完全得到了归一化的本征矢量。

二、两个不同表象之间的变换关系图表

	A 表象	B 表象
基矢量	$\{\psi_n(x)\}$ 用行矩阵表示：$(\psi_1(x)\ \cdots\ \psi_n(x)\ \cdots)$	$\{\varphi_\alpha(x)\}$ 用行矩阵表示：$(\varphi_1(x)\ \cdots\ \varphi_\alpha(x)\ \cdots)$
正交归一性	$\int\psi_m^*(x)\psi_n(x)dx=\delta_{mn}$	$(\varphi_\alpha,\varphi_\beta)=\int\varphi_\alpha^*(x)\varphi_\beta(x)dx=\delta_{\alpha\beta}$
封闭关系	$\sum_n\psi_n^*(x)\psi_n(x')=\delta(x-x')$	$\sum_\alpha\varphi_\alpha^*(x)\varphi_\alpha(x')=\delta(x-x')$
波函数 $\psi(x)$ 的展开式	$\psi(x,t)=\sum_n a_n(t)\psi_n(x)$	$\psi(x,t)=\sum_\alpha b_\alpha(t)\varphi_\alpha(x)$
波函数 $\psi(x)$ 在各表象的表示	$\psi^A=\begin{pmatrix}a_1(t)\\ \vdots\\ a_n(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$，$a_n(t)=\int\psi_n^*(x)\psi(x,t)dx$	$\psi^B=\begin{pmatrix}b_1(t)\\ \vdots\\ b_\alpha(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$，$b_\alpha(t)=\int\varphi_\alpha^*(x)\psi(x,t)dx$
力学量 $\hat{F}$ 在各表象中的表示	$F^A=\begin{pmatrix}F_{11}^A & \cdots & F_{1n}^A & \cdots\\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ F_{m1}^A & \cdots & F_{mn}^A & \cdots\\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}$ $F_{mn}^A=\int\psi_m^*(x)\hat{F}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_n(x)dx$	$F^B=\begin{pmatrix}F_{11}^B & \cdots & F_{1\beta}^B & \cdots\\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ F_{\alpha1}^A & \cdots & F_{\alpha\beta}^B & \cdots\\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}$ $F_{\alpha\beta}^B=\int\varphi_\alpha^*(x)\hat{F}\left(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\varphi_\beta(x)dx$
波函数 ψ 从 $A\to B$ 的变换	$b_\alpha(t)=\sum_n S_{\alpha n}a_n(t)$，用矩阵表示为：$\begin{pmatrix}b_1(t)\\ \vdots\\ b_\alpha(t)\\ \vdots\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}S_{11} & \cdots & S_{1n} & \cdots\\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ S_{\alpha1} & \cdots & S_{\alpha n} & \vdots\\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1(t)\\ \vdots\\ a_n(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$ 简记为：$\psi^B=S\psi^A$	
力学量 $\hat{F}$ 从 $A\to B$ 的	$F_{\alpha\beta}^B=\sum_{m,n}S_{\alpha m}F_{mn}^A S_{\beta n}^*$	

变换	$\begin{pmatrix} F_{11}^B & \cdots & F_{1\beta}^B & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ F_{\alpha1}^A & \cdots & F_{\alpha\beta}^B & \cdots \\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & \cdots & S_{1m} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ S_{\alpha1} & \cdots & S_{\alpha m} & \vdots \\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_{11}^A & \cdots & F_{1n}^A & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ F_{m1}^A & \cdots & F_{mn}^A & \cdots \\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11}^* & \cdots & S_{1n}^* & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ S_{\beta1}^* & \cdots & S_{\beta n}^* & \vdots \\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$ 简记为：$F^B = SF^AS^\dagger$
幺正变换 矩阵 S	$S_{\alpha n} = \int \varphi_\alpha^*(x)\psi_n(x)dx$ 矩阵形式：$S = \begin{pmatrix} S_{11} & \cdots & S_{1n} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ S_{\alpha1} & \cdots & S_{\alpha n} & \vdots \\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \int \begin{pmatrix} \varphi_1^*(x) \\ \vdots \\ \varphi_\alpha^*(x) \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(x) & \cdots & \psi_n(x) & \cdots \end{pmatrix} dx$
基之间的变换关系	$\varphi_\alpha(x) = \sum_\alpha S_{\alpha n}^* \psi_n(x)$，写成矩阵形式： $\begin{pmatrix} \varphi_1(x) & \cdots & \varphi_\alpha(x) & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1(x) & \cdots & \psi_n(x) & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11} & \cdots & S_{1\alpha} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ S_{n1} & \cdots & S_{n\alpha} & \vdots \\ \vdots & \cdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}^\dagger$

1、推导 $S_{\alpha n} = \int \varphi_\alpha^*(x')\psi_n(x')dx' \Rightarrow \begin{cases} \psi_n(x) = \sum_\alpha S_{\alpha n}\varphi_\alpha(x) \\ \varphi_\alpha(x) = \sum_\alpha S_{\alpha n}^*\psi_n(x) \end{cases}$

$$\begin{aligned} &S_{\alpha n} = \int \varphi_\alpha^*(x')\psi_n(x')dx' \\ &\Rightarrow \sum_\alpha S_{\alpha n}\varphi_\alpha(x) = \sum_\alpha \varphi_\alpha(x)\int \varphi_\alpha^*(x')\psi_n(x')dx' \\ &\qquad = \int \left[\sum_\alpha \varphi_\alpha(x)\varphi_\alpha^*(x')\right]\psi_n(x')dx' \\ &\qquad = \int \delta(x-x')\psi_n(x')dx' = \psi_n(x) \end{aligned}$$

即 $\psi_n(x) = \sum_\alpha S_{\alpha n}\varphi_\alpha(x)$

$$\begin{aligned} &S_{\alpha n} = \int \varphi_\alpha^*(x')\psi_n(x')dx' \Rightarrow S_{\alpha n}^* = \int \psi_n^*(x')\varphi_\alpha(x')dx' \\ &\Rightarrow \sum_n S_{\alpha n}^*\psi_n(x) = \sum_n \psi_n(x)\int \psi_n^*(x')\varphi_\alpha(x')dx' = \int \left[\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x')\right]\varphi_\alpha(x')dx' \\ &= \int \delta(x-x')\varphi_\alpha(x')dx' = \varphi_\alpha(x) \end{aligned}$$

即 $\varphi_\alpha(x) = \sum_\alpha S_{\alpha n}^*\psi_n(x)$

2、证明：变换矩阵 S 是幺正的。

根据定义 $S_{\alpha n}=\int\varphi_\alpha^*(x')\psi_n(x')dx'$ 得

$$\left(SS^\dagger\right)_{\alpha\beta}=\sum_m S_{\alpha m}S_{\beta m}^*=\sum_m\int\varphi_\alpha^*(x)\psi_m(x)dx\int\psi_m^*(x')\varphi_\beta(x')dx'$$

$$=\int\varphi_\alpha^*(x)\left\{\int\left[\sum_m\psi_m(x)\psi_m^*(x')\right]\varphi_\beta(x')dx'\right\}dx$$

$$=\int\varphi_\alpha^*(x)\left\{\int\delta(x-x')\varphi_\beta(x')dx'\right\}dx=\int\varphi_\alpha^*(x)\varphi_\beta(x)dx=\delta_{\alpha\beta}$$

$\Rightarrow SS^\dagger=I$

$$\left(S^\dagger S\right)_{mn}=\sum_\alpha S_{\alpha m}^*S_{\alpha n}=\sum_\alpha\int\psi_m^*(x')\varphi_\alpha(x')dx'\int\varphi_\alpha^*(x)\psi_n(x)dx$$

$$=\int\psi_m^*(x')\left\{\int\left[\sum_\alpha\varphi_\alpha^*(x)\varphi_\alpha(x')\psi_n(x)\right]dx\right\}dx'$$

$$=\int\psi_m^*(x')\left\{\int\delta(x-x')\psi_n(x)dx\right\}dx'=\int\psi_m^*(x')\psi_n(x')dx'=\delta_{mn}$$

$\Rightarrow S^\dagger S=I$

所以有 $S^\dagger=S^{-1}$ 表示 S 是幺正的。

3、同一态矢量在不同表象中的表示之间是通过一个幺正变换 S 联系起来的。

4、推导：力学量从 $A\to B$ 表象的变换关系是一个相似变换。

$$F_{\alpha\beta}^B=\int\varphi_\alpha^*(x)\hat F\varphi_\beta(x)dx=\int\sum_m S_{\alpha m}\psi_m^*(x)\hat F\sum_n S_{\beta n}^*\psi_n(x)dx$$

$$=\sum_{m,n}S_{\alpha m}\int\psi_m^*(x)\hat F\psi_n(x)dxS_{\beta n}^*=\sum_{m,n}S_{\alpha m}F_{mn}^AS_{\beta n}^*=\left(SF^AS^?\right)_{\alpha\beta}$$

例题、 在 $(\hat L^2,\hat L_z)$ 表象中，取 $l=1$ 子空间。求：

(1)、 $\hat L_x$ 在 $(\hat L^2,\hat L_z)$ 表象中的矩阵,

(2)、 $\hat L_x$ 的本征值，本征矢；

(3)、在 $\hat L_z$ 本征值为 0 的本征态中，测量 $\hat L_x$ 的可能值及相应的几率？

(4)、 $(\hat L^2,\hat L_x)\to(\hat L^2,\hat L_z)$ 的表象变换矩阵。

解：由题意知： $\hat L_\pm Y_{lm}=\sqrt{(l\mp m)(l\pm m+1)}\hbar Y_{lm\pm1}$ ，

(1) 求$\hat{L}_x$在$(\hat{L}^2,\hat{L}_z)$表象中的矩阵

$$\hat{L}_x Y_{lm}=\frac{1}{2}\left(\hat{L}_+ +\hat{L}_-\right)Y_{lm}=\frac{\hbar}{2}\left(\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hbar Y_{lm+1}+\sqrt{(l+m)(1-m+1)}\hbar Y_{lm-1}\right)$$

$$\left(L_x\right)_{m'm}=\int Y_{lm'}^*\hat{L}_x Y_{lm}d\Omega=\frac{\hbar}{2}\left(\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hbar\int Y_{lm'}^*Y_{lm+1}d\Omega+\sqrt{(l+m)(1-m+1)}\hbar\int Y_{lm'}^*Y_{lm-1}d\Omega\right)$$
$$=\frac{\hbar}{2}\left(\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\hbar\delta_{m'm+1}+\sqrt{(l+m)(1-m+1)}\hbar\delta_{m'm-1}\right)$$

当$l=1$时，有$m,m'=1,0,-1$，代入上式得$\hat{L}_x=\dfrac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}$

(2) 由本征方程$\hat{L}_x\psi_\lambda=\lambda\hbar\psi_\lambda$，令$\psi_\lambda=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}$，则本征方程变为$\sum_n\left[(\hat{L}_x)_{mn}-\lambda\hbar\delta_{mn}\right]a_n=0$

$$\begin{vmatrix}-\lambda&1/\sqrt{2}&0\\1/\sqrt{2}&-\lambda&1/\sqrt{2}\\0&1/\sqrt{2}&-\lambda\end{vmatrix}=0\Rightarrow\lambda=1,\quad 0,\quad -1$$

对应的本征态为： $\psi_1=\dfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$ $\quad\psi_0=\dfrac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{2}\\0\\-\sqrt{2}\end{pmatrix}$ $\quad\psi_{-1}=\dfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$

(3) 由于$\hat{L}_z$在自身表象中，表示矩阵为$L_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$，本征值为0的本征态表示为$\Phi_0=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}$

用$\hat{L}_x$的本征态展开：$\Phi_0=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1-\psi_{-1}\right)$ ，于是测得$\hat{L}_x$的可能值为$\pm\hbar$,相应的几率为$\dfrac{1}{2}$。 (4)

$(\hat{L}^2,\hat{L}_z)$表象的基矢为$\Phi_1=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}$ $\quad\Phi_0=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}$ $\quad\Phi_{-1}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$，

而$(\hat{L}^2,\hat{L}_x)$表象的基矢为$\psi_1=\dfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$ $\quad\psi_0=\dfrac{1}{2}\begin{pmatrix}\sqrt{2}\\0\\-\sqrt{2}\end{pmatrix}$ $\quad\psi_{-1}=\dfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$

基矢从$(\hat{L}^2,\hat{L}_x)\to(\hat{L}^2,\hat{L}_z)$的表象变换矩阵$S_{\alpha n}=\Phi_\alpha^*\psi_m$，即

$$S=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2}\\ 1 & -\sqrt{2} & 1\end{pmatrix}=S^\dagger$$

而$\hat{L}_x$从$(\hat{L}^2,\hat{L}_z)\to(\hat{L}^2,\hat{L}_x)$表象变换矩阵为

$$L_x'=SL_xS^+=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2}\\ 1 & -\sqrt{2} & 1\end{pmatrix}\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2}\\ 1 & -\sqrt{2} & 1\end{pmatrix}$$

$$=\frac{\hbar}{4}\begin{pmatrix}1 & \sqrt{2} & 1\\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2}\\ 1 & -\sqrt{2} & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & -1\\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2}\\ 1 & 0 & -1\end{pmatrix}=\hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

§4　Dirac 符号

在量子力学中，体系的一切可能状态构成一个 Hilbert 空间， 该空间的任意一个矢量可用来标记一个量子态。Dirac 把 Hilbert 空间中的矢量表示成“右矢”$|\ \rangle$， 称为态矢量。

Dirac 符号的标记方法：

(1)、若要标记某个特定态，则在右矢内标上某种记号。例如：用波函数$\psi(t)$描述的状态标记为$|\psi(t)\rangle$。

(2)、对于本征态，常用本征值（或对应的量子数）标在右矢内。例如：

谐振子本征态$\varphi_n(x)$表示成$|n\rangle$，坐标和动量的本征态分别表示成$|\vec{r}\rangle$和$|\vec{p}\rangle$。角动量$\left(\hat{L}^2,\hat{L}_z\right)$的共同本征态表示为$|lm\rangle$。

(3)、对应每一个右矢$|\psi\rangle$，Dirac 还定义了一个左矢$\langle\psi|$； 二者互为共轭即：

$$|\psi\rangle=\left(\langle\psi|\right)^\dagger \text{或} \ \langle\psi|=\left(|\psi\rangle\right)^\dagger。$$

例如，右矢$|\psi\rangle=C_1|\psi_1\rangle+C_2|\psi_2\rangle$，对应的左矢为

$$\langle\psi|=\left[C_1|\psi_1\rangle+C_2|\psi_2\rangle\right]^\dagger=\overline{C_1|\psi_1\rangle+C_2|\psi_2\rangle}=C_1^*\langle\psi_1|+C_2^*\langle\psi_2|$$

左矢空间和右矢空间互为对偶空间。

一、态矢量的内积

右矢$|\psi\rangle$和$|\varphi\rangle$的内积表示为$(\varphi,\psi)\equiv\langle\varphi|\psi\rangle$

性质：

(i)、正定性：$\langle\psi|\psi\rangle\geq 0$。

由于$\langle\psi|\psi\rangle\geq 0$，可取$|\varphi\rangle\equiv\dfrac{|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}$表示同一个量子态，则归一化条件：$\langle\varphi|\varphi\rangle=1$。

(ii) 共轭性：$\langle\varphi|\psi\rangle\equiv\langle\psi|\varphi\rangle^*$。

(iii) 正交性：若$\langle\psi|\varphi\rangle=0$，则$|\psi\rangle$和$|\varphi\rangle$正交。

(iv)、双线性性：

$$\langle\psi|C_1\psi_1+C_2\psi_2\rangle=C_1\langle\psi|\psi_1\rangle+C_2\langle\psi|\psi_2\rangle$$
$$\langle C_1\psi_1+C_2\psi_2|\psi\rangle=C_1^*\langle\psi_1|\psi\rangle+C_2^*\langle\psi_2|\psi\rangle$$

二、算符对态矢量的作用

按照 Dirac 的规定

1、算符

对右矢向右作用$\hat{F}|\psi\rangle=|\varphi\rangle$，作用结果仍为右矢； 对左矢向左作用$\langle\psi|\hat{F}=\langle\phi|$，结果仍为左矢。

Schrodinger 方程可写成$i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\hat{H}|\psi(t)\rangle$

力学量$\hat{F}$在态$|\psi\rangle$上的平均值可以表示为$\overline{F}=\dfrac{\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$

2、与右矢$\hat{F}|\psi\rangle=|\varphi\rangle$ 共轭的左矢为 $\langle\psi|\hat{F}^\dagger=\langle\varphi|$，即

$$\overline{\hat{F}|\psi\rangle}\equiv\left(\hat{F}|\psi\rangle\right)^\dagger=\langle\psi|\hat{F}^\dagger\Rightarrow\overline{\langle\varphi|\hat{F}|\psi\rangle}=\langle\psi|\hat{F}^\dagger|\varphi\rangle$$

若$\hat{F}$是厄米算符，则有$\overline{\hat{F}|\psi\rangle}=\langle\psi|\hat{F}$，$\overline{\langle\varphi|\hat{F}|\psi\rangle}\equiv\left(\langle\varphi|\hat{F}|\psi\rangle\right)^\dagger=\langle\psi|\hat{F}|\varphi\rangle$

3、内积$\langle\psi|\hat{F}|\varphi\rangle\equiv\langle\psi|\cdot\left[\hat{F}|\varphi\rangle\right]\equiv\left[\langle\psi|\hat{F}\right]\cdot|\varphi\rangle$

4、由右矢$|\psi\rangle$和左矢$\langle\varphi|$可构成一个外积张量算符$|\psi\rangle\langle\varphi|$。

三、表示基底

1、分立谱

本征方程：$\hat{F}|n\rangle = F_n|n\rangle$

基底：$\{|n\rangle \big| n\text{取所有允许的值}\}$

正交归一化条件：$\langle n|m\rangle = \delta_{mn}$；封闭关系：$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$

2、连续谱

本征方程：$\hat{F}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$

基底：$\{|\lambda\rangle \big| \lambda\text{取所有允许的值}\}$，

正交归一化条件：$\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta(\lambda-\lambda')$

封闭关系：$\int_{-\infty}^{\infty} |\lambda\rangle\langle\lambda| d\lambda = 1$

3、混合谱

本征方程：$\hat{F}|n\rangle = F_n|n\rangle$和$\hat{F}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$

基底：$\{|\lambda\rangle \big| \lambda\text{取所有允许的值}\} \cup \{|n\rangle \big| n\text{取所有允许的值}\}$，

正交归一化条件：$\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta(\lambda-\lambda')$、$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$及$\langle n|\lambda\rangle = 0$

封闭关系：$\sum_n |n\rangle\langle n| + \int_{-\infty}^{\infty} |\lambda\rangle\langle\lambda| d\lambda = 1$

四、下面讨论一维坐标和动量连续谱表象

1、坐标表象

坐标$\hat{x}$的本征方程：$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$

基底：$\{|x\rangle \big| -\infty < x < +\infty\}$，满足正交归一完备性:

正交归一化条件：$\langle x|x'\rangle=\delta(x-x')$，封闭关系：$\int_{-\infty}^{\infty}|x\rangle\langle x|dx=1$。

任意的态可作展开：$|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}|x\rangle\langle x|\psi\rangle dx$，

该态$|\psi\rangle$在坐标表象上的表示为展开系数$\langle x|\psi\rangle$，通常记作：$\langle x|\psi\rangle\equiv\psi(x)$，其共轭为：

$\langle\alpha|x\rangle=\varphi_{\alpha}^{*}(x)$。故有$|\psi\rangle=\int|x\rangle\psi(x)dx$以及$\langle\psi|\varphi\rangle=\int dx\langle\psi|x\rangle\langle x|\varphi\rangle=\int\psi^{*}(x)\varphi(x)dx$。

例如在坐标表象中，坐标算符$\hat{x}$的本征态表示为$\psi_{x'}(x)=\langle x|x'\rangle=\delta(x-x')$。

2、动量表象

动量算符$\hat{\vec{p}}$的本征方程：$\hat{\vec{p}}|\vec{p}'\rangle=\vec{p}'|\vec{p}'\rangle$

基底：$\{|p\rangle|-\infty<p<\infty\}$，满足正交归一完备性：

正交归一化条件：$\langle p|p'\rangle=\delta(p-p')$；封闭关系：$\int_{-\infty}^{\infty}|p\rangle\langle p|dp=1$。

任意的态作展开：$|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}|p\rangle\langle p|\psi\rangle dp$

态$|\psi\rangle$在动量表象中的表示为$\langle p|\psi\rangle\equiv\psi(p)$，记作$\langle p|\psi\rangle\equiv\psi(p)$，则有$|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}|p\rangle\psi(p)dp$。

两个态矢量的内积在动量表象下可表示为：$\langle\psi|\varphi\rangle=\int dp\langle\psi|p\rangle\langle p|\varphi\rangle=\int dx\psi^{*}(p)\varphi(p)$。

例如在动量表象上，动量算符$\hat{p}$的本征态表示为$\psi_{p'}(p)=\langle p|p'\rangle=\delta(p-p')$

在自身表象中，动量的矩阵元$p_{pp'}=\langle p|\hat{p}|p'\rangle=p\delta(p-p')$

任意态矢量$|\alpha\rangle$在动量表象下的表示为$|\alpha\rangle=\int dp|p\rangle\langle p|\alpha\rangle$，其中。

[例题 1]、求动量算符的本征矢在坐标表象中的形式。

解：由动量基矢$|p\rangle$的正交归一化条件$\langle p'|p\rangle=\delta(p-p')$及坐标基矢$|x\rangle$的完备性$\int dx|x\rangle\langle x|=1$得：

$\langle p'|p\rangle=\int dx\langle p'|x\rangle\langle x|p\rangle=\int dx\varphi_{p'}^{*}(x)\varphi_{p}(x)=\delta(p-p')$

另外，由 δ -函数的积分表示为：$\delta(p)=\dfrac{1}{2\pi\hbar}\int dxe^{\frac{i}{\hbar}px}$ 知，

$$\delta(p-p')=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dxe^{\frac{i}{\hbar}(p-p')x}=\int dx\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p'x}\right)^*\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}\right)$$

于是有：$\varphi_p(x)=\langle x\,|\,p\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}\qquad \varphi_p^*(x)=\langle p\,|\,x\rangle\dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}px}$

[例题 2] 求动量算符在坐标表象中的表示。

利用公式：$\delta(x-x')=\dfrac{1}{2\pi\hbar}\int dpe^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')}$ 得

$$p_{xx'}=\langle x\,|\,\hat{p}\,|\,x'\rangle=\int dp\langle x\,|\,\hat{p}\,|\,p\rangle\langle p\,|\,x'\rangle=\int p\langle x|p\rangle\frac{e^{-ipx'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}dp=\int p\frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{e^{-ipx'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}dp$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int pe^{ip(x-x')/\hbar}dp=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\left[-i\hbar\frac{d}{dx}e^{ip(x-x')/\hbar}\right]=-i\hbar\frac{d}{dx}\int dp\left[\frac{e^{ip(x-x')/\hbar}}{2\pi\hbar}\right]=-i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x')$$

$$\langle x\,|\,\hat{x}\,|\,\alpha\rangle=\int dx'\langle x\,|\,\hat{x}\,|\,x'\rangle\langle x'\,|\,\alpha\rangle=\int dx'x\delta\left(x-x'\right)\varphi_\alpha(x')=x\varphi_\alpha(x)$$

$$\langle p\,|\,\hat{p}\,|\,\alpha\rangle=\int dp'\langle p\,|\,\hat{p}\,|\,p'\rangle\langle p'\,|\,\alpha\rangle=\int dp'p\langle p\,|\,p'\rangle\varphi_\alpha(p')=\int dp'p\delta\left(p-p'\right)\varphi_\alpha(p')$$

$$\langle x\,|\,\hat{p}\,|\,\alpha\rangle=\int dp\langle x\,|\,\hat{p}\,|\,p\rangle\langle p\,|\,\alpha\rangle=\int dp\,p\langle x\,|\,p\rangle\varphi_\alpha(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int pe^{ipx/\hbar}\varphi_\alpha(p)dp$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int dp\varphi_\alpha(p)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}e^{\frac{i}{\hbar}px}\right)=-i\hbar\frac{d}{dx}\int dp\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}\right)\varphi_\alpha(p)$$

$$=-i\hbar\frac{d}{dx}\int dp\langle x\,|\,p\rangle\langle p\,|\,\alpha\rangle=-i\hbar\frac{d}{dx}\langle x\,|\,\alpha\rangle$$

[例题 4] 设质量为 m 的粒子在势场 $V(x)$ 中运动，其哈密顿量表示为：$\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}(\hat{x})$，则薛定谔方程为 $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\left|\psi(t)\right\rangle=\hat{H}\left|\psi(t)\right\rangle$。求坐标表象和动量表象中的薛定谔方程的形式。

[解] (1)、坐标表象中的薛定谔方程

在坐标表象中，薛定谔方程表示为 $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}\left\langle x\middle|\psi(t)\right\rangle=\left\langle x\middle|\hat{H}\middle|\psi(t)\right\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\left\langle x\middle|\hat{H}\middle|x'\right\rangle\left\langle x'\middle|\psi(t)\right\rangle dx'$。

　

令$\langle x|\psi(t)\rangle \equiv \psi(x,t)$，则$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|\hat{H}|x'\rangle\psi(x',t)dx'$

$$\begin{aligned}
\langle x|\hat{H}|x'\rangle &= \langle x|\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}(\hat{x})|x'\rangle = \frac{1}{2m}\langle x|\hat{p}^2|x'\rangle + V(x')\delta(x-x') \\
&= \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|\hat{p}^2|p\rangle\langle p|x'\rangle dp + V(x')\delta(x-x') \\
&= \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} p^2\langle x|p\rangle\langle p|x'\rangle dp + V(x')\delta(x-x') \\
&= \frac{1}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} p^2\frac{e^{ip(x-x')/\hbar}}{2\pi\hbar}dp + V(x')\delta(x-x') \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\frac{e^{ip(x-x')/\hbar}}{2\pi\hbar}\right) + V(x')\delta(x-x') \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\int_{-\infty}^{+\infty} dp\left(\frac{e^{ip(x-x')/\hbar}}{2\pi\hbar}\right) + V(x')\delta(x-x') \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\delta(x-x') + V(x')\delta(x-x')
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x|\hat{H}|x'\rangle\psi(x',t)dx' &= \int_{-\infty}^{+\infty}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x')\right]\delta(x-x')\psi(x',t)dx' \\
&= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x,t)
\end{aligned}$$

$\Rightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi(x,t)}$------这就是薛定谔方程在坐标表象中的表达式。

(2)、动量表象中的薛定谔方程的表达式

在动量表象中， 薛定谔方程表示为$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle p|\psi(t)\rangle=\langle p|\hat{H}|\psi(t)\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\langle p|\hat{H}|p'\rangle\langle p'|\psi(t)\rangle dp'$。

令$\langle p|\psi(t)\rangle \equiv \varphi(p,t)$，则$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(p,t)=\int_{-\infty}^{+\infty}\langle p|\hat{H}|p'\rangle\varphi(p',t)dp'$

$$\begin{aligned}
\langle p|\hat{H}|p'\rangle &= \langle p|\frac{\hat{p}^2}{2m}+\hat{V}(\hat{x})|p'\rangle = \frac{1}{2m}\langle p|\hat{p}^2|p'\rangle + \langle p|\hat{V}(\hat{x})|p'\rangle \\
&= \frac{p'^2}{2m}\delta(p-p') + \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle p|x'\rangle\langle x'|V(\hat{x})|x\rangle\langle x|p'\rangle dxdx'
\end{aligned}$$

利用 $i\hbar\frac{\partial}{\partial p}e^{ix(p'-p)/\hbar}=xe^{ix(p'-p)/\hbar}\Rightarrow\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n e^{ix(p'-p)/\hbar}=x^n e^{ix(p'-p)/\hbar}$ 及 $V(x)=\sum_n C_n x^n$ 得

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle p|x'\rangle\langle x'|V(\hat{x})|x\rangle\langle x|p'\rangle dxdx'$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)e^{ixp'/\hbar}dx\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ix'p/\hbar}\delta(x'-x)dx'$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)e^{ix(p'-p)/\hbar}dx=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\sum_{n=0}^{\infty}C_n x^n\right)e^{ix(p'-p)/\hbar}dx$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}C_n\int_{-\infty}^{+\infty}x^n e^{ix(p'-p)/\hbar}dx=\frac{1}{2\pi\hbar}\sum_{n=0}^{\infty}C_n\int_{-\infty}^{+\infty}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n e^{ix(p'-p)/\hbar}dx$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\sum_{n=0}^{\infty}C_n\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)^n\right]e^{ix(p'-p)/\hbar}dx=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)e^{ix(p'-p)/\hbar}dx$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ix(p'-p)/\hbar}dx=V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\delta(p'-p)$$

$$\Rightarrow\langle p|\hat{H}|p'\rangle=\left[\frac{p'^2}{2m}+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\delta(p'-p)$$

$$\Rightarrow\int_{-\infty}^{+\infty}\langle p|\hat{H}|p'\rangle\varphi(p',t)dp'=\int_{-\infty}^{+\infty}\left[\frac{p'^2}{2m}+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\delta(p'-p)\varphi(p',t)dp'$$

$$=\left[\frac{p^2}{2m}+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\varphi(p,t)$$

$\Rightarrow\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(p,t)=\left[\frac{p^2}{2m}+V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\varphi(p,t)}$-----这就使薛定谔方程在动量表象中的表达式。

[例题 5]粒子处于 δ 势阱 $V(x)=-V_0\delta(x)$（ $V_0>0$ ）中。用动量表象中的薛定格方程求解其束缚态的能量本征值及相应的本征函数。

[解] 在动量表象中

$$V_{pp'}=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dxe^{i(p'-p)x/\hbar}V(x)=-\frac{V_0}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}dxe^{i(p'-p)x/\hbar}\delta(x)=-\frac{V_0}{2\pi\hbar}$$

故定态薛定谔方程 $\frac{p^2}{2m}\psi(p)+\int_{-\infty}^{+\infty}V_{pp'}\psi(p')dp'=E\psi(p)$ 变为

$$\left(p^2-2mE\right)\psi(p)=\frac{mV_0}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(p')dp'=C \qquad (1)$$

$\Rightarrow \psi(p)=\dfrac{C}{p^2-2mE}$，这就是动量表象中的能量本征函数，其中$C$为归一化常数。

将波函数$\psi(p)$代入(1)得能量方程：$1=\dfrac{mV_0}{\pi\hbar}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\dfrac{dp}{p^2-2mE}$

对于束缚态$E<0$，令$\beta=\sqrt{-2mE}/\hbar$，则波函数和能量方程分别变为$\psi(p)=\dfrac{C}{p^2+\hbar^2\beta^2}$，以及

$1=\dfrac{mV_0}{\pi\hbar}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\dfrac{dp}{p^2+\beta^2\hbar^2}=\dfrac{mV_0}{\pi\hbar}\times\dfrac{\pi}{\hbar\beta}\Rightarrow\beta=\dfrac{mV_0}{\hbar^2}\Rightarrow E=-\dfrac{mV_0^2}{2\hbar^2}$这就是束缚态能级。

由归一化条件$\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(p)|^2dp=1$得$1=C^2\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\dfrac{dp}{\left(p^2+\hbar^2\beta^2\right)^2}=\dfrac{\pi C^2}{2(\hbar\beta)^3}\Rightarrow C=\sqrt{\dfrac{2}{\pi}(\hbar\beta)^3}=\sqrt{\dfrac{2}{\pi}\left(\dfrac{mV_0}{\hbar}\right)^3}$。

即束缚态能级和归一化的波函数分别为$E=-\dfrac{mV_0^2}{2\hbar^2}$和$\psi(p)=\sqrt{\dfrac{2}{\pi}\left(\dfrac{mV_0}{\hbar}\right)^3}\dfrac{1}{p^2+\left(mV_0/\hbar\right)^2}$。

利用付立叶变换公式，可得在坐标表象中的波函数为

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ipx/\hbar}\varphi(p)dp=\frac{C}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-ipx/\hbar}}{p^2+\beta^2\hbar^2}dp$$

利用复平面上围道积分法可求出$\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty}\dfrac{e^{-ipx/\hbar}}{p^2+\beta^2\hbar^2}dp=\dfrac{\pi}{\hbar\beta}e^{-\beta|x|}$，故$\psi(x)=\sqrt{\beta}e^{-\beta|x|}$。

[例题 6]求在动量表象中线性谐振子能量本征值和本征函数。

[解] 在动量表象中，由于$\hat{x}=i\hbar\dfrac{d}{dp}$，故有哈密顿量为

$\hat{H}=\dfrac{p^2}{2m}-\dfrac{1}{2}m\omega^2\hbar^2\dfrac{d^2}{dp^2}=-\dfrac{\hbar^2}{2M}\dfrac{d^2}{dp^2}+\dfrac{1}{2}M\omega^2p^2$，其中$M=\dfrac{1}{m\omega^2}$

动量表象下的定态薛定谔方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dp^2}+\frac{1}{2}M\omega^2p^2\right)\psi(p)=E\psi(p)$$

因此，能量本征值和本征函数分别为

$$E_n=\hbar\omega(n+1/2)\qquad n=0,1,2,\cdots$$

$\psi_n(p)=N_n e^{-\alpha^2p^2/2}H_n(\alpha p)$，其中$\alpha=\sqrt{M\omega/\hbar}=1/\sqrt{m\omega\hbar}$。

[例题 7]在动量表象下，求在宽度为a的一维无限深方势阱中运动的粒子的能量本征值及本征函数。

[解] 在动量表象下，薛定谔方程为

$$\left(\frac{p^2}{2m}-E\right)\varphi(p)=0\Rightarrow\varphi(p)=A\delta\left(p-\sqrt{2mE}\right)+B\delta\left(p+\sqrt{2mE}\right)$$

$$\Rightarrow\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+}\varphi(p)e^{ipx/\hbar}dp=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(Ae^{i\sqrt{2mE}x/\hbar}+Be^{-i\sqrt{2mE}x/\hbar}\right)$$

第一种情形：非对称方势阱$V(x)=\begin{cases}0, & 0<x<a\\ \infty, & x<0,x>a\end{cases}$

由边界条件$\psi(0)=\psi(a)=0$得$\begin{cases}A+B=0\\ Ae^{ia\sqrt{2mE}/\hbar}+Be^{-ia\sqrt{2mE}/\hbar}=0\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}A=-B\\ \sin\left(a\sqrt{2mE}/\hbar\right)=0\end{cases}$

$$\Rightarrow a\sqrt{2mE}/\hbar=n\pi\Rightarrow E=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\Rightarrow\psi(x)=\frac{2iA}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

由归一化条件确定A：$\int_0^a|\psi(x)|^2dx=1\Rightarrow\frac{|A|^2a}{\pi\hbar}=1\Rightarrow A=-i\sqrt{\frac{\pi\hbar}{a}}$

因此能量本征值和本征方程分别为$\begin{cases}E=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} & n=1,2,3\cdots\\ \psi(x)=\begin{cases}\sqrt{2/a}\sin\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right), & 0<x<a\\ 0, & x>a,x<0\end{cases}\end{cases}$。

第二种情形：对称方势阱$V(x)=\begin{cases}0, & |x|<a/2\\ \infty, & |x|>a/2\end{cases}$

由边界条件$\psi(\pm a/2)=0$得

$$\begin{cases}Ae^{-i\sqrt{2mE}a/2\hbar}+Be^{ai\sqrt{2mE}x/2\hbar}=0\\ Ae^{ia\sqrt{2mE}/2\hbar}+Be^{-ia\sqrt{2mE}/2\hbar}=0\end{cases}\Rightarrow\begin{vmatrix}e^{-i\sqrt{2mE}a/2\hbar} & e^{ai\sqrt{2mE}x/2\hbar}\\ e^{ia\sqrt{2mE}/2\hbar} & e^{-ia\sqrt{2mE}/2\hbar}\end{vmatrix}=0\Rightarrow\sin\left(\sqrt{2mE}a/\hbar\right)=0$$

$$\Rightarrow a\sqrt{2mE}/\hbar = n\pi \Rightarrow E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \Rightarrow \begin{cases} A+(-1)^n B = 0 \\ \psi(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(Ae^{in\pi x/a} + Be^{-in\pi x/a}\right) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \psi(x) = \begin{cases} \dfrac{2B}{\sqrt{2\pi\hbar}}\cos\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right) & n = odd \\ \dfrac{2iA}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right) & n = even \end{cases}$$ 。

由归一化条件确定 A：$\int_0^a |\psi(x)|^2\, dx = 1 \Rightarrow \begin{cases} \dfrac{|B|^2 a}{\pi\hbar} = 1 \\ \dfrac{|A|^2 a}{\pi\hbar} = 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} B = \sqrt{\pi\hbar/a} \\ A = i\sqrt{\pi\hbar/a} \end{cases}$

因此能量本征值和本征方程分别为 $\begin{cases} E = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} & n = 1,2,3\cdots \\ \psi(x) = \begin{cases} \left.\begin{aligned} &\sqrt{2/a}\cos\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right) \quad n = odd \\ &\sqrt{2/a}\sin\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right) \quad n = even \end{aligned}\right\} |x| < a/2 \\ 0 \qquad\qquad |x| < a/2 \end{cases} \end{cases}$ 。

[例题 8]在动量表象下，求解在势场 $V(x) = \begin{cases} A/x, & x > 0 \\ \infty, & x < 0 \end{cases}$ $(A < 0)$ 中运动粒子的能量本征值。

[解] 在动量表象下，薛定谔方程为

$$\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{A}{\hat{x}}\right)\varphi(p) = E\varphi(p) \Rightarrow A\varphi(p) = \hat{x}\left[\left(E - \frac{p^2}{2m}\right)\varphi(p)\right]$$

代 $\hat{x} = i\hbar\dfrac{d}{dp}$ 入上式得 $\left(\dfrac{A}{i\hbar} + \dfrac{p}{m}\right)\varphi(p) = \left(E - \dfrac{p^2}{2m}\right)\dfrac{d\varphi(p)}{dp}$

$$\Rightarrow \frac{d\varphi(p)}{\varphi(p)} = \frac{\dfrac{A}{i\hbar} + \dfrac{p}{m}}{E - p^2/2m}dp = \frac{\dfrac{A}{i\hbar}dp}{E - p^2/2m} + \frac{d\left(p^2/2m - E\right)}{E - p^2/2m}$$

对于束缚态 $E < 0$ ，则上式变为 $\dfrac{d\varphi(p)}{\varphi(p)} + \dfrac{d\left(p^2/2m - E\right)}{p^2/2m - E} = \dfrac{-\dfrac{A}{i\hbar}dp}{p^2/2m - E}$

对该式两边积分得$\ln\left(\frac{\varphi(p)\left(p^2/2m-E\right)}{C}\right)=-\frac{A}{i\hbar}\sqrt{\frac{2m}{-E}}\arctan\left(\frac{p}{\sqrt{-2mE}}\right)$

即$\varphi(p)=\frac{C}{p^2/2m-E}\exp\left[-\frac{A}{i\hbar}\sqrt{\frac{2m}{-E}}\arctan\left(\frac{p}{\sqrt{-2mE}}\right)\right]$

由归一化条件确定C：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(p)|^2 d\left(\frac{p}{\hbar}\right)=1\Rightarrow|C|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{d(p/\hbar)}{\left(p^2/2m-E\right)^2}=1\Rightarrow\frac{|C|^2}{\hbar}\sqrt{\frac{m\pi^2}{-2E^3}}=1$$

因此得到：$\varphi(p)=\frac{\left(-2\hbar^2E^3/m\pi^2\right)^{1/4}}{p^2/2m-E}\exp\left[-\frac{A}{i\hbar}\sqrt{\frac{2m}{-E}}\arctan\left(\frac{p}{\sqrt{-2mE}}\right)\right]$

