第3章　力学量和算符

Observabes and Operaters

【内容提要】

1. 在量子力学中，力学量用算符表示。力学量用算符表示后，可以直接计算平均值。在坐标表象中，平均值公式是

$$\overline{f(\vec{p})}=\int\psi^{*}(\vec{r},t)f(-i\hbar\nabla)\psi(\vec{r},t)\,\mathrm{d}\vec{r}\,,\quad\int|\psi|^{2}\,\mathrm{d}\vec{r}=1$$

在动量表象中，平均值公式是

$$\overline{f(\vec{r})}=\int C^{*}(\vec{p},t)f(i\hbar\nabla_{p})C(\vec{p},t)\,\mathrm{d}\vec{p}\,,\quad\int|C_{p}|^{2}\,\mathrm{d}\vec{p}=1$$

2. 量子力学中的力学量，用线性厄密算符表示。厄密算符 A 满足

$A^{+}=A$，即

$$(\phi,A\psi)=(A\phi,\psi)$$

或

$$\int\phi^{*}A\psi\,\mathrm{d}\vec{r}=\int(A\phi)^{*}\psi\,\mathrm{d}\vec{r}$$

厄密算符的平均值是实数，本征值是实数。厄密算符的本征函数系满足正交、归一、完备、封闭等条件。可以用它作为希尔伯特空间的一组基矢，构成一个表象。

厄密算符的属于不同本征值的本征函数，彼此正交。

3. 在力学量 F 的本征态中测量 F，有确定值，即它的本征值；在非 F 的本征态 ϕ 中测量 F，有可能值及平均值，可能值是 F 的本征值。

将 $\phi(x)$ 用算符 F 的正交归一的本征函数展开：

$$\phi(x)=\sum_n c_n\psi_n(x)+\int c_\lambda\psi_\lambda(x)\,\mathrm{d}x$$

则在 $\phi(x)$ 态中测量力学量 F 得到结果为 λ_n 的几率为 $|c_n|^2$，得到结果在 $\lambda-\lambda+\mathrm{d}\lambda$ 范围内的几率为 $|c_\lambda|^2\mathrm{d}\lambda$。

$$c_n = \int \psi_n^*(x)\phi(x)\,\mathrm{d}x\,, \qquad c_\lambda = \int \psi_\lambda^*(x)\phi(x)\,\mathrm{d}x$$

$$\overline{F} = \int \phi^*(x) F \phi(x)\,\mathrm{d}x \quad \text{或} \quad \overline{F} = \sum_n \lambda_n |c_n|^2 + \int \lambda |c_\lambda|^2\,\mathrm{d}\lambda$$

4. 连续谱的本征函数可以归一化为 δ 函数，或采用箱归一化。

5. 动量算符 $\vec{p}$ 的本征函数(即自由粒子波函数)

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

正交归一性

$$\int \psi_{\vec{p}'}^*(\vec{r})\psi_{\vec{p}}(\vec{r})\,\mathrm{d}\tau = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

其箱归一化波函数

$$\psi_{\vec{p}} = \frac{1}{\sqrt{L^3}}\mathrm{e}^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}$$

动量本征值

$$p_x=\frac{2\pi\hbar n_x}{L},\quad p_y=\frac{2\pi\hbar n_y}{L},\quad p_z=\frac{2\pi\hbar n_z}{L}$$

自由粒子的哈密顿量

$$H=\frac{p_x^2}{2\mu}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$$

能量本征值

$$E(n_x,n_x,n_x)=\frac{2\pi^2\hbar^2}{\mu L^2}\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right),$$

$$n_x,n_y,n_z=0,\pm1,\pm2,\cdots$$

6. 角动量 z 分量 $$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

本征函数 $$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

L_z 的本征值 $$L_z' = m\hbar$$

7. 平面转子（设绕 z 轴旋转）

哈密顿量 $$H = \frac{L_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

能量本征态 $$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

能量本征值 $$E_m = \frac{m^2\hbar^2}{2I}$$

8. $\left(L^2, L_z\right)$有共同的本征函数——球谐函数$Y_{lm}\left(\theta, \varphi\right)$：

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^m N_{lm} P_l^{|m|}(\cos\theta)\,\mathrm{e}^{im\varphi}$$

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{(l-|m|)!(2l+1)}{4\pi(l+|m|)!}},$$

$$(l = 0, 1, 2, \cdots; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots, \pm l)$$

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$L^2 Y_{lm}\left(\theta, \varphi\right) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}\left(\theta, \varphi\right)$$

$$L_z Y_{lm}\left(\theta, \varphi\right) = m\hbar Y_{lm}\left(\theta, \varphi\right)$$

9. 力学量 F 的平均值随时间的变化满足

$$\frac{\mathrm{d}\bar{F}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}\overline{[F,H]}+\overline{\frac{\partial F}{\partial t}}$$

若 $\frac{\mathrm{d}\bar{F}}{\mathrm{d}t}=0$（即力学量 F 的平均值不随时间变化），则称 F 为守恒量。因而力学量 F 为守恒量的条件为:

$$\frac{\partial F}{\partial t}=0\ , \qquad 且 \qquad [F,H]=0$$

量子系统的运动状态是用波函数完全描写的。但物理学了解状态靠的是系统在该状态下的性质。怎样从状态得到物理性质呢？这涉及到量子理论里如何描写物理性质或物理量。**QM** 假定：力学量（也称观测量）用线性厄密算符代表。这样在 **QM** 里就引入了算符运算。利用算符可以较好地反映整体特征，利用它我们可以从状态（波函数）里提取力学性质，从而把理论计算与实验结合起来。数学上，状态可看作是无限维复线性空间（希尔伯特空间）里的一个矢量。那么力学量（算符）反映的是此空间中的变换。在具体计算上，算符运算都可以通过矩阵来实现。

3.1. （L^2 ,L_z） 的共同本征函数是什么？相应的本征值又分别是什么？

解：$\left(L^2, L_z\right)$的共同本征函数是球谐函数$Y_{lm}(\theta,\varphi)$。

$$L^2 Y_{lm}(\theta,\varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\theta,\varphi)\,, \qquad L_z Y_{lm}(\theta,\varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

即L^2的本征值是$l(l+1)\hbar^2$， L_z的本征值是$m\hbar$ 。

3.2 量子力学中，体系的任意态$\psi(x)$可用一组力学量完全集的共同本征态$\psi_n(x)$展开：

$$\psi(x) = \sum_n c_n \psi_n(x)$$

写出展开式系数c_n的表达式。

解：
$$c_n = \left(\psi_n(x), \psi(x)\right) = \int \psi_n^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x$$

3.3 证明在L_z的本征态下，$\overline{L_x}=\overline{L_y}=0$。

提示：利用$L_yL_z-L_zL_y=i\hbar L_x$，求平均。

证：设$|\psi\rangle$是L_z的本征态，本征值为$m\hbar$，即$L_z|\psi\rangle=m\hbar|\psi\rangle$

因为
$$[L_y,L_z]=L_yL_z-L_zL_y=i\hbar L_x$$

$$[L_z,L_x]=L_zL_x-L_xL_z=i\hbar L_y$$

所以
$$\overline{L_x}=\frac{1}{i\hbar}\left(\langle\psi|(L_yL_z-L_zL_y)|\psi\rangle\right)$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\left(\langle\psi|L_yL_z|\psi\rangle-\langle\psi|L_zL_y|\psi\rangle\right)$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\left(m\hbar\langle\psi|L_y|\psi\rangle-m\hbar\langle\psi|L_y|\psi\rangle\right)=0$$

同理有
$$\overline{L_y}=0$$

3.4 设粒子处于 $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 状态下，求 $\overline{(\Delta L_x)^2}$ 和 $\overline{(\Delta L_y)^2}$

解：记本征态 Y_{lm} 为 $|lm\rangle$，满足本征方程

$$L^2|lm\rangle = l(l+1)\hbar^2|lm\rangle,\quad L_z|lm\rangle = m\hbar|lm\rangle,\quad \langle lm|L_z = m\hbar\langle lm|$$

利用基本对易式

$$\vec{L}\times\vec{L} = i\hbar\vec{L}$$

可得算符关系

$$i\hbar L_x^2 = i\hbar L_x L_x = (L_yL_z - L_zL_y)L_x = L_y(L_zL_x) - L_zL_yL_x$$

$$= L_y(L_xL_z + i\hbar L_y) - L_zL_yL_x = i\hbar L_y^2 + L_yL_xL_z - L_zL_yL_x$$

将上式在 $|lm\rangle$ 态下求平均，因 L_z 作用于 $|lm\rangle$ 或 $\langle lm|$ 后均变成本征值 $m\hbar$，使得后两项对平均值的贡献互相抵消，因此

$$\overline{L_x^2} = \overline{L_y^2}$$

又

$$\overline{L_x^2 + L_y^2} = \overline{\vec{L}^2 - L_z^2} = \left[l(l+1) - m^2\right]\hbar^2$$

所以

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

上题已证

$$\overline{L_x} = \overline{L_y} = 0$$

所以

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

同理

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

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

解：
$$\varphi_1 = a\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{(\psi_1,\psi_1)}}\psi_1$$

$$\varphi_2' = \psi_2 - (\varphi_1,\psi_2)\varphi_1，\quad \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{(\varphi_2',\varphi_2')}}\varphi_2'$$

$$\varphi_3' = \psi_3 - (\varphi_1,\psi_3)\varphi_1 - (\varphi_2,\psi_3)\varphi_2，\quad \varphi_3 = \frac{1}{\sqrt{(\varphi_3',\varphi_3')}}\varphi_3'$$

$\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3$是归一化的。

$$(\varphi_1,\varphi_2)=\frac{1}{\sqrt{(\varphi_2',\varphi_2')}}[(\varphi_1,\psi_2)-(\varphi_1,\psi_2)(\varphi_1,\varphi_1)]=0$$

$$(\varphi_1,\varphi_3)=\frac{1}{\sqrt{(\varphi_3',\varphi_3')}}[(\varphi_1,\psi_3)-(\varphi_1,\psi_3)(\varphi_1,\varphi_1)-(\varphi_2,\psi_3)(\varphi_1,\varphi_2)]=0$$

$$(\varphi_2,\varphi_3)=\frac{1}{\sqrt{(\varphi_3',\varphi_3')}}[(\varphi_2,\psi_3)-(\varphi_1,\psi_3)(\varphi_2,\varphi_1)-(\varphi_2,\psi_3)(\varphi_2,\varphi_2)]=0$$

所以它们是正交归一的，但仍然是简并的（可验证：它们仍对应于同一能级）。

3.6 设粒子在一维无限深方势阱

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

中运动，处于基态 $(n=1), E_1=\pi^2\hbar^2/2ma^2$ 。$t=0$ 时刻阱宽突然变为 $2a$，粒子波函数来不及改变，即

$$\psi(x,0)=\psi_1(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{\pi x}{a}, & 0<x<a\\ 0, & x<0, x>a\end{cases}$$

试问：对于加宽了的无限深方势阱

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

测得粒子处于能量仍保持为 E_1 的新的本征态下的概率为多大？

解：在阱宽变为$2a$的无限深方势阱中，其能量本征值和能量本征态分别为

$$\varepsilon_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2}, \quad \varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{n\pi x}{2a}, & 0 < x < 2a \\ 0, & x < 0, x > 2a \end{cases}$$

势阱突然变宽，粒子波函数和能量来不及改变，其能量仍保持为$E_1 = \pi^2\hbar^2/2ma^2 = \varepsilon_2$，将$\psi(x,0)$按照新势阱中的能量本征态$\varphi_n(x)$展开：

$$\psi(x,0) = \sum_n C_n\varphi_n(x)$$

$$C_n = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_n^*(x)\psi(x,0)\,\mathrm{d}x = \int_0^a\varphi_n^*(x)\psi(x,0)\,\mathrm{d}x + \int_a^{2a}\varphi_n^*(x)\psi(x,0)\,\mathrm{d}x$$

$$= \int_0^a\varphi_n^*(x)\psi(x,0)\,\mathrm{d}x$$

$$C_2 = \int_0^a \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\frac{\pi x}{a} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\frac{\pi x}{a} \mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

所以粒子处于φ_2、能量仍为$E_1 = \varepsilon_2$的概率为$|C_2|^2 = 1/2$。

根据定义解题

人们在解题时，总想找到最简便的方法，但这并非总能做到。所以一个基本的方法是直接从定义来思考。

3.7 设质量为 μ 的粒子在半谐振子位势

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

中运动，处于基态，求粒子的平均位置和均方差。

解：半谐振子的波函数可以从谐振子波函数得出，只需取其中以原点为节点的那些就可以了。但由于粒子在半无限空间运动，要注意归一化。

半谐振子基态波函数与谐振子的第一激发态波函数相似，归一化后的波函数为

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0\\ \dfrac{2\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\alpha\, x\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}, & x>0\end{cases}$$

$$\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

$$\bar{x}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)x\psi(x)\,\mathrm{d}x=\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\, x\psi^2(x)=\frac{2}{\alpha\sqrt{\pi}}=2\sqrt{\frac{\hbar}{\pi\mu\omega}}$$

均方差

$$\overline{(\Delta x)^2}=\overline{x^2}-\bar{x}^2=\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\, x^2\psi^2(x)-4\hbar/\pi\mu\omega=\left(\frac{3}{2}-\frac{4}{\pi}\right)\frac{\hbar}{\mu\omega}$$

3.8 证明：厄密算符的属于不同本征值的本征函数，彼此正交。

证：设ψ_m、ψ_n是厄密算符F的二本征函数，本征值分别为F_m、F_n，且$F_n \neq F_m$，有

$$(\psi_m, F\psi_n) - (\psi_m, F\psi_n) = F_n(\psi_m, \psi_n) - (F\psi_m, \psi_n)$$

$$= F_n(\psi_m, \psi_n) - F_m(\psi_m, \psi_n) = (F_n - F_m)(\psi_m, \psi_n) = 0$$

因为

$$F_n \neq F_m$$

所以必有

$$(\psi_m, \psi_n) = 0$$

即厄密算符的属于不同本征值的本征函数，彼此正交。

3.9 一质量为 m 的粒子在一维势箱 $0<x<a$ 中运动，其量子态为

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\left(0.5\sin\frac{\pi x}{a}+0.866\sin\frac{3\pi x}{a}\right)$$

① 该量子态是否为能量算符 H 的本征态?

② 对该系统进行能量测量，其可能的结果及其所对应的概率为何?

③ 处于该量子态粒子能量的平均值为多少?

解：① 在此一维势箱中运动的粒子，其波函数和能量表达式为

$$\psi_n=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}, & 0<x<a\\ 0, & x\le 0 \text{ 或 } x\ge a\end{cases}$$

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2},\quad n=1,2,3,\cdots$$

对波函数的分析可知

$$\psi(x)=0.5\psi_1(x)+0.866\psi_3(x)$$

即粒子处在$\psi_1(x)$和$\psi_3(x)$的叠加态，该量子态不是能量算符H的本征态。

② 由于$\psi(x)$是能量本征态$\psi_1(x)$和$\psi_3(x)$的线性组合，而且是归一化的，因此能量测量的可能值为

$$E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2},\quad E_3=\frac{9\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$$

其出现的概率分别为

$$(0.5)^2=0.25,\quad (0.866)^2=0.75$$

③ 能量测量的平均值为

$$\overline{E}=0.25E_1+0.75E_3=(0.25+0.75\times 9)\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}=\frac{7\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$$

3.10 氢原子的波函数（$t=0$时刻）为

$$\psi(\vec{r},0)=\frac{1}{2}\psi_{100}(\vec{r})+\frac{1}{3}\psi_{210}(\vec{r})+\frac{\sqrt{3}}{3}\psi_{211}(\vec{r})$$

求t时刻的平均能量，其中$\psi_{nlm}(\vec{r})$为定态空间波函数。

解：t时刻波函数为

$$\psi(\vec{r},t)=\frac{1}{2}\psi_{100}(\vec{r})e^{-iE_1t/\hbar}+\frac{1}{3}\psi_{210}(\vec{r})e^{-iE_2t/\hbar}+\frac{\sqrt{3}}{3}\psi_{211}(\vec{r})e^{-iE_2t/\hbar}$$

其中$E_n=-e^2/2an^2$ ($a=\hbar^2/\mu e^2$，为 **Bohr** 半径，$n=1,2$)，为ψ_{nlm}态对应的能量。于是我们计算t时刻的能量平均值

$$\overline{E}=\frac{\langle\psi(\vec{r},t)|H|\psi(\vec{r},t)\rangle}{\langle\psi(\vec{r},t)|\psi(\vec{r},t)\rangle}=\frac{\left(\frac{1}{2}\right)^2E_1+\left(\frac{1}{3}\right)^2E_2+\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2E_2}{\left(\frac{1}{2}\right)^2+\left(\frac{1}{3}\right)^2+\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2}=\frac{13E_1}{25}=-7.07(\text{eV})$$

3.11 氢原子波函数同上例，求t时刻氢原子具有能量E_2的几率，以及氢原子相应角动量在Z方向投影为零的几率。

解：在$\psi(\bar{r},t)$中，有三个能量本征态，其中ψ_{210}和ψ_{211}对应于能量E_2，故由几率定义，t时刻氢原子处于能量为E_2状态中的几率为

$$P(E_2)=\frac{\left(\frac{1}{3}\right)^2+\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2}{\left(\frac{1}{2}\right)^2+\left(\frac{1}{3}\right)^2+\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2}=\frac{16}{25}=64\%$$

从轨道角动量的Z方向投影L_z看，$\psi(\bar{r},t)$也是由它的三个本征态组合而成的，其中ψ_{110}和ψ_{210}对应于L_z本征值为零的态，因此t时刻角动量Z方向投影为零的几率为

$$P(L_z=0)=\frac{\left(\frac{1}{2}\right)^2+\left(\frac{1}{3}\right)^2}{\left(\frac{1}{2}\right)^2+\left(\frac{1}{3}\right)^2+\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2}=52\%$$

利用波函数的性质解题

量子状态由波函数完全描写。给定一具体波函数，可仔细观察其特性，例如实数性，对称性，零点等，这些特性有助于我们迅速解决问题。

3.12 一个三维运动的粒子处于束缚态，其定态波函数的空间部分是实函数，求此态中的动量平均值。

解：定态波函数的一般形式为

$$\psi(\vec{r},t)=\psi(\vec{r})\,\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}$$

E 为能量。由题可知 $\psi^*(\vec{r})=\psi(\vec{r})$。由于是束缚态，必定有 $\psi(\vec{r})\to 0$（当 $|\vec{r}|\to\infty$）。于是可计算动量平均值，如

$$\overline{p_x}=\int \mathrm{d}\tau\,\psi^*(\vec{r},t)\,\hat{p}_x\psi(\vec{r},t)\;=\int \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\,\psi^*(\vec{r})\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r})$$

$$=-i\hbar\int \mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\int \mathrm{d}x\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\psi^2(\vec{r})=-\frac{1}{2}i\hbar\int \mathrm{d}y\,\mathrm{d}z\left[\psi^2(\vec{r})\Big|_{x=-\infty}^{x=\infty}\right]=0$$

对 $\overline{p}_y$、$\overline{p}_z$ 也有同样结果。

① 这一结果也可从下面的观点看出：力学量的平均值必定是个实数，而对实波函数而言，由于算符 $\hat{p}_x$ 中含有一个纯虚数单位 i，故 $\hat{p}_x$ 形式上是个纯虚数。为统一起见，此数只有为零。

② 在一维束缚态中，定态的空间波函数总可选为实函数。因此一维束缚定态中动量平均值总为零。

3.13 三维空间中运动的粒子，其波函数的方位角（φ）部分 $\Phi(\varphi)=\cos^3\varphi$，求 $\hat{L}_z$ 的平均值。

解：由于在球坐标中 $\hat{L}_z$ 取下列形式： $L_z=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$，该式除微分算符外，包含有纯虚数单位 i，而此处 $\Phi(\varphi)$ 是个实函数，同上例一样，有 $\overline{L}_z=0$。

3.14 粒子作一维运动，其空间波函数为

$$\psi(x) = A(\alpha^4 x^4 - \alpha^2 x^2 + 1)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}, \quad -\infty < x < \infty$$

求其平均位置。

解：$\psi(x)$ 为 x 的偶函数，即 $\psi(-x) = \psi(x)$。于是我们计算 x 的平均值，有

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x) x \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}(-x) \psi^*(-x)(-x)\psi(-x)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y \psi^*(y) y \psi(y) = \bar{y} = -\bar{x} = 0$$

这是因为 x 是奇函数，故积分消失。

显然，如果 $\psi(x)$ 是奇函数，也有同样的结果。

▲ 归纳起来，凡是具有确定空间宇称的态，其平均位置一定为零。

这一结论也可用来验证前面题 **3.12** 的结果，因为如果空间波函数是实的，即 $\psi^*(\vec{r})=\psi(\vec{r})$ ，则它在动量空间的形式

$$\phi(\vec{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3r\,\mathrm{e}^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\,\psi(\vec{r})$$

必定是复共轭对称的：

$$\phi(-\vec{p})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3r\,\mathrm{e}^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\,\psi(\vec{r})$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3r\,\mathrm{e}^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\,\psi^*(\vec{r})$$

$$=\left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{d}^3r\,\mathrm{e}^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\,\psi(\vec{r})\right]^* =\phi^*(\vec{p})$$

于是动量平均值为

$$\overline{\vec{p}}=\int \mathrm{d}^3 p\, \phi^*(\vec{p})\hat{\vec{p}}\phi(\vec{p})=\int \mathrm{d}^3 p\, \vec{p}\phi(-\vec{p})\phi(\vec{p})=0$$

积分为零是因为 $\phi(-\vec{p})\phi(\vec{p})$ 是偶函数而 $\vec{p}$ 为奇函数：

$$\phi(-\vec{p})\phi(\vec{p})=\phi[-(-\vec{p})]\phi(-\vec{p})=\phi(\vec{p})\phi(-\vec{p})$$

3.15 粒子在 t 时刻有波函数

$$\Psi(\vec{r},t)=\phi(\vec{r})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}+\psi(\vec{r})\mathrm{e}^{iEt/\hbar}$$

其中 $\phi(\vec{r})$ 和 $\psi(\vec{r})$ 为定态波函数的空间部分，且已归一化，E 不为零。求此态中的能量平均值。

解：无论波函数取何种形式，它满足一般的 S. eq

$$i\hbar\,\partial_t\Psi = H\Psi$$

于是我们计算此态中的能量平均值

$$\overline{E}=\overline{H}=\langle\Psi|H|\Psi\rangle/\langle\Psi|\Psi\rangle$$

$$=\int\mathrm{d}\tau\,(\phi^*(\vec{r})\mathrm{e}^{iEt/\hbar}+\psi^*(\vec{r})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar})(E\phi(\vec{r})\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}-E\psi(\vec{r})\mathrm{e}^{iEt/\hbar})/\langle\Psi|\Psi\rangle$$

$$=E\left[\int\mathrm{d}\tau\,\phi^*\phi-\int\mathrm{d}\tau\,\psi^*\psi-\mathrm{e}^{2iEt/\hbar}\int\mathrm{d}\tau\,\phi^*\psi+\mathrm{e}^{-2iEt/\hbar}\int\mathrm{d}\tau\,\psi^*\phi\right]\Big/\langle\Psi|\Psi\rangle$$

$$=0$$

这里用了归一化条件$\int \mathrm{d}\tau \phi^* \phi = \int \mathrm{d}\tau \psi^* \psi = 1$，且还用了 $\int \mathrm{d}\tau \phi^* \psi = \int \mathrm{d}\tau \psi^* \phi = 0$ 即二态正交。这是因为当 $E \neq 0$ 时，E 和 $-E$ 是 $\hat{H}$ 的两个不同的本征值，其对应态必定正交。当然，若 $E=0$，上面等式也是成立的。

●此例说明，虽然 Ψ 对于时间 t 形式上不象个实函数，但由于前面的空间几率振幅提供的两部分几率相同，而求能量平均值时要对空间自由度积分（只需要几率），故实质上 Ψ 中的时间正负频部分系数是一样的。这样，Ψ 相当于时间的实函数，而能量算符在此态中等同于 $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$，故得零期望值，或者说，此波函数存在着实际的时间宇称，故计算作为时间演化算符代表的哈密顿量的平均值，只会给出零结果。

以上各例利用波函数的实数性，对称性，零点等性质，得到了许多有用的结论。而波函数的这些性质，又不必经过繁复的计算即可看出，因此学会这种方法是很有用处的。

对易关系法

3.16 系统运动的哈密顿算符 $H=\bar{p}^2/2\mu+V(\bar{r})$, 已知它处于束缚定态中，证明其动量平均值为零。

证：设定态波函数的空间部分为 $|\psi\rangle$, 则当 $H|\psi\rangle=E|\psi\rangle$ 时（E 为相应能量），为求 $\bar{p}$ 的平均值，我们注意到坐标算符 x_i 与 $\hat{H}$ 的对易关系

$$[x_i, H]=\left[x_i, \sum_j p_j p_j/2\mu+V(\bar{r})\right]=\frac{1}{\mu}i\hbar p_i$$

这里已用了最基本的对易关系 $[x_i, p_j]=i\hbar\delta_{ij}$ 。由此可见，计算动量平均值可转化为计算一个对易子的平均值：

$$\bar{p}_i = \langle\psi|p_i|\psi\rangle = \frac{\mu}{i\hbar}\langle\psi|[x_i, H]|\psi\rangle$$

$$= \frac{\mu}{i\hbar}\left(\langle\psi|x_i H|\psi\rangle - \langle\psi|H x_i|\psi\rangle\right)$$

$$= \frac{\mu}{i\hbar}\left(\langle\psi|x_i E|\psi\rangle - \langle\psi|E x_i|\psi\rangle\right) = 0$$

这里用到了 $\hat{H}$ 的厄密性。

这一结果可以作一般性推广：如果厄密算符 $\hat{C}$ 可以表示为两个厄密算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的对易子 $\hat{C} = i\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$，则在 $\hat{A}$ 或 $\hat{B}$ 的本征态中，$\hat{C}$ 的平均值必为零。

这一定理可以用来解决许多问题。

比如：在角动量 $\vec{J}$ 的任何一个直角坐标分量（比如 J_z）的本征态下，$\vec{J}$ 的另外两个分量（J_x，J_y）的平均值均为零。

3.17 $|m\rangle$和$|n\rangle$ 两态为L_z的本征态，本征值分别为$m\hbar$和$n\hbar$，求由力学量L_x引起的跃迁矩阵元与由L_y引起的跃迁矩阵元之间的关系。

解：由题意，$L_z|m\rangle = m\hbar|m\rangle$，$L_z|n\rangle = n\hbar|n\rangle$，要求$\langle m|L_x|n\rangle$与$\langle m|L_y|n\rangle$之关系。由于$L_x$、$L_y$、$L_z$三者构成封闭的对易关系，故容易计算。

$$\langle m|L_y|n\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle m|[L_z, L_x]|n\rangle = -i(m-n)\langle m|L_x|n\rangle$$

——二者关系

如果再利用一次$L_x = \frac{1}{i\hbar}[L_y, L_z]$，则可得

$$\langle m|L_y|n\rangle = -i(m-n)\cdot\frac{1}{i\hbar}\langle m|[L_y, L_z]|n\rangle = -(m-n)(n-m)\langle m|L_y|n\rangle$$

$$= (m-n)^2\langle m|L_y|n\rangle$$

从而有

$$\langle m|L_y|n\rangle\left[(m-n)^2-1\right]=0$$

这表明，除非 $m=n\pm1$，否则矩阵元$\langle m|L_y|n\rangle=0$

作为特例，当$m=n$时，

$$\langle m|L_x|n\rangle=\langle m|L_y|n\rangle=0$$

即

$$\langle n|L_x|n\rangle=\langle n|L_y|n\rangle=0$$

亦即验证了，在L_z的任一本征态$|n\rangle$下，$\overline{L_x}=\overline{L_y}=0$。

3.18 粒子在位势$V(r)$的有心力场中作定态运动，证明在任何一具有一定轨道角动量的定态里，粒子的平均位置在原点。

解：有心力场中，由于总哈密顿算符$H=\bar{p}^2/2\mu+V(r)$具有空间反射不变性，因此宇称是好量子数。对于具有一定轨道角动量的状态$|\psi\rangle$，具有确定的宇称$I|\psi\rangle=a|\psi\rangle$，$a=\pm1$。这里 I 为空间反演算符：

$If(\bar{r})=f(-\bar{r})$ 。算符 I 与坐标算符$\bar{r}$是反对易的：

$$I\bar{r}=-\bar{r}I$$

即

$$\{I,\bar{r}\}\equiv I\bar{r}+\bar{r}I=0$$

或

$$I\,\vec{r}\,I=-\vec{r}$$

这样我们计算$\vec{r}$的平均值，有（设$|\psi\rangle$已归一：$\langle\psi|\psi\rangle=1$）

$$0=\langle\psi|\{I,\vec{r}\}|\psi\rangle=2a\langle\psi|\vec{r}|\psi\rangle=2a\langle\vec{r}\rangle$$

$a\neq 0$， 故$\langle\vec{r}\rangle=0$。命题得证。

同样，由于空间反演算符I与动量算符$\vec{p}$也是反对易的：$\{I,\vec{p}\}=0$，

故在具有确定空间宇称的束缚态 $|\psi\rangle$ 中， $\langle\vec{p}\rangle=0$。

可以把上面的结果归纳成一般的定理：

▲ 如果两个厄密算符$\hat{A}$，$\hat{B}$互相反对易：$\{A,\ B\}\equiv AB+BA=0$，则在一个算符的本征态中，另一个算符的平均值必为零。

3.19 设 $F(\bar{r},\bar{p})$ 为厄密算符，证明在能量表象中下式成立：

$$\sum_n (E_n - E_k)|F_{nk}|^2 = \frac{1}{2}\langle k|[F,[H,F]]|k\rangle \qquad (1)$$

证：式（1）左端为

$$\sum_n (E_n - E_k)|F_{nk}|^2 = \sum_n (E_n - E_k)\langle k|F|n\rangle\langle n|F|k\rangle \qquad (*)$$

$$= \sum_n \langle k|F|n\rangle\langle n|(HF - FH)|k\rangle = \langle k|F[H,F]|k\rangle \qquad (2)$$

计算中利用了公式 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ （3）

由于 H，F 是厄密算符，有下列算符关系：

$$[H,F]^{+} = [F,H] = -[H,F] \qquad (4)$$

式（2）取共轭，得到：

$$\sum_n (E_n - E_k)|F_{nk}|^2 = -\langle k|\,[H,F]F\,|k\rangle \qquad (5)$$

式（2）+式（5），即得式（1）。

▲ 也可按如下方法求解：接式（3）之后，由式（*）将$(E_n - E_k)$插到式（*）的前面矩阵元$\langle k|F|n\rangle$之中，同样可得式（5）：

$$\sum_n (E_n - E_k)|F_{nk}|^2 = \sum_n (E_n - E_k)\langle k|F|n\rangle\langle n|F|k\rangle$$

$$= \sum_n \langle k|(FH - HF)|n\rangle\langle n|\,F\,|k\rangle = \langle k|\,[F,H]F\,|k\rangle$$

$$= -\langle k|\,[H,F]F\,|k\rangle$$

3.20 对于任意算符 $F(\bar{r},\bar{p})$ 及其共轭 F^+，有下列矩阵元关系：

$$(F_{kn})^* = \left(\langle k|F|n\rangle\right)^* = \langle n|F^+|k\rangle = F^+_{nk}$$

试证明在能量表象中有下列求和规则：

$$\sum_n (E_n - E_k)\left(|F_{nk}|^2 + |F_{kn}|^2\right) = \langle k|\left[F^+,[H,F]\right]|k\rangle \qquad (1)$$

证：

$$\left[F^+,[H,F]\right] = F^+HF + FHF^+ - HFF^+ - F^+FH \qquad (2)$$

在能量本征态 $|k\rangle$ 下逐项计算平均值，并利用公式 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$，即得

$$\langle k|F^+HF|k\rangle = \sum_n \langle k|F^+H|n\rangle\langle n|F|k\rangle = \sum_n E_n F^+_{kn} F_{nk} = \sum_n E_n |F_{nk}|^2 \qquad (3)$$

$$\langle k|FHF^+|k\rangle = \sum_n \langle k|FH|n\rangle\langle n|F^+|k\rangle = \sum_n E_n F_{kn} F^+_{nk} = \sum_n E_n |F_{kn}|^2$$

(4)

$$\langle k|HFF^{+}|k\rangle = E_k\sum_n\langle k|F|n\rangle\langle n|F^{+}|k\rangle = E_k\sum_n F_{kn}F^{+}_{nk} = E_k\sum_n|F_{kn}|^2$$

（5）

$$\langle k|F^{+}FH|k\rangle = E_k\sum_n\langle k|F^{+}|n\rangle\langle n|F|k\rangle = E_k\sum_n F^{+}_{kn}F_{nk} = E_k\sum_n|F_{nk}|^2$$

（6）

式（3）+式（4）-式（5）-式（6），即得式（1）。

注意，如果 $F\neq F^{+}$，则 F_{nk} 和 F_{kn} 并无简单关系。

如果 F 为厄密，即 $F=F^{+}$，则 $F_{nk}=F^{*}_{kn}$，这时 $|F_{nk}|=|F_{kn}|$，式（1）就变成 3.19 的式（1）。

3.21 系统哈密顿算符为 $H = p^2/2\mu + V(x)$，求和式

$$\sum_n (E_n - E_i)|x_{in}|^2$$

的值，其中 $x_{in} \equiv \langle i|x|n\rangle$ 为矩阵元，$|n\rangle$ 是能量为 E_n 的本征态，已归一，求和对一切态进行。

解：
$$\sum_n (E_n - E_i)|x_{in}|^2 = \sum_n (E_n - E_i)\langle i|x|n\rangle\langle n|x|i\rangle$$

$$= \sum_n \left(\langle i|xE_n|n\rangle - \langle i|E_i x|n\rangle\right)\langle n|x|i\rangle$$

$$= \sum_n \left(\langle i|xH|n\rangle - \langle i|Hx|n\rangle\right)\langle n|x|i\rangle$$

$$= \sum_n \left(\langle i|[x,H]|n\rangle\right)\langle n|x|i\rangle = \langle i|[x,H]x|i\rangle \qquad (1)$$

这里已用了态 $|n\rangle$ 的完备性条件：$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$。

同样，把E_n-E_i放到后面的矩阵元之中，得

$$\sum_n (E_n-E_i)|x_{in}|^2=\langle i|x[H,x]|i\rangle=-\langle i|x[x,H]|i\rangle \tag{2}$$

式（1）+式（2），得

$$\sum_n (E_n-E_i)|x_{in}|^2$$

$$=\frac{1}{2}\{\langle i|[x,H]x|i\rangle-\langle i|x[x,H]|i\rangle\}=\frac{1}{2}\langle i|[[x,H],x]|i\rangle$$

具体把对易关系计算出来

$$[[x,H],x]=[i\hbar p/\mu, x]=\hbar^2/\mu \tag{3}$$

于是最终得

$$\sum_n (E_n-E_i)|x_{in}|^2=\hbar^2/2\mu \tag{4}$$

3.22 系统的角动量为 1（$\hbar$），处于角动量在 z 方向的投影 L_z 的某本征态。已知测量角动量在 y 方向的投影 L_y 得值 0 的几率为 1/2，求测量 L_y 得值 1 的几率。

解：由于 L_y 可以表示为 L_z 和 L_x 的对易子：

$$L_y = \frac{1}{i\hbar}\left[L_z, L_x\right]$$

故知 L_y 在 L_z 的本征态中平均值为 0：$\overline{L_y} = 0$。但总角动量为 1，即 L_y 在此态中的可能取值为 ± 1， 0。由平均值定义：

$$\overline{L_y} = a_1 \cdot 1 + a_0 \cdot 0 + a_{-1} \cdot (-1) = a_1 - a_{-1} = 0$$

故 $$a_1 = a_{-1} \tag{1}$$

这里a_1、a_0、a_{-1}分别为测量L_y得值1，0，-1的几率。但另一方面，几率归一：

$$a_1+a_0+a_{-1}=1 \tag{2}$$

又题设 $$a_0=\frac{1}{2} \tag{3}$$

由式（1）、式（2）和式（3），解得

$$a_1=\frac{1}{4}$$

即在L_z的该本征态下，测L_y得值1的几率是$\frac{1}{4}$。

∗3.23 限于一维运动，设

$$H=\frac{p^2}{2\mu}+V(x)=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x) \tag{1}$$

设 $F=F(x)$ 为 x 的任意函数，证明求和规则

$$\sum_n (E_n-E_k)\,|F_{nk}|^2=\frac{\hbar^2}{2\mu}\langle k|\,|F'|^2\,|k\rangle \tag{2}$$

其中

$$F'=\mathrm{d}F/\mathrm{d}x$$

证：利用基本对易式

$$\left[p,F(x)\right]=-i\hbar\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x}=-i\hbar F' \tag{3}$$

易得
$$[H,F]=\frac{1}{2\mu}[p^2,F]=-\frac{i\hbar}{2\mu}(pF'+F'p) \tag{4}$$

$$[F^+,[H,F]]=-\frac{i\hbar}{2\mu}([F^+,p]F'+F'[F^+,p])$$

$$=-\frac{i\hbar}{2\mu}\left(i\hbar\frac{\mathrm{d}F^+}{\mathrm{d}x}F'+i\hbar F'\frac{\mathrm{d}F^+}{\mathrm{d}x}\right)=\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\mathrm{d}F^+}{\mathrm{d}x}F'+F'\frac{\mathrm{d}F^+}{\mathrm{d}x}\right)=\frac{\hbar^2}{\mu}|F'|^2 \tag{5}$$

利用 3.20 题式（1），即得
$$\sum_n(E_n-E_k)(|F_{nk}|^2+|F_{kn}|^2)=\frac{\hbar^2}{\mu}\langle k||F'|^2|k\rangle \tag{6}$$

由于一维束缚定态波函数是实函数，所以
$$F_{kn}=\int\psi_k(x)F(x)\psi_n(x)\,\mathrm{d}x=\int\psi(x)_nF(x)\psi_k(x)\,\mathrm{d}x=F_{nk} \tag{7}$$

代入式（6），即得式（2）。

① 如取 $F(x)=x$，则 $F'=1$ ，式（2）成为

$$\sum_n (E_n - E_k)\,|\,x_{nk}\,|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \tag{8}$$

正是 **3.21** 题证明的结果 。

② 若要证明

$$\sum_n (E_n - E_k)\left|\left\langle n\left| e^{iqx} \right|k\right\rangle\right|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \tag{9}$$

则相当于

$$F(x) = e^{iqx},\quad F' = i\,q\,e^{iqx},\quad |\,F'\,|^2 = q^2 \tag{10}$$

将式（10）代入式（2），即得式（9）。

***3.24** 证明在一维束缚态问题中，基态中的位置均方差满足不等式

$$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle_0 \le \frac{1}{E_1 - E_0} \cdot \frac{\hbar^2}{2\mu}$$

其中 E_1 和 E_0 分别为第一激发态和基态的能量。

解：对于哈密顿算符为 $H = \dfrac{p^2}{2\mu} + V(x)$ 的系统，算符 $\Delta x = x - \langle x \rangle_0$ 与它有下列对易关系：

$$[\Delta x, [\Delta x, H]] = -\hbar^2/\mu \tag{1}$$

也即与 x 算符一样。这是显然的，因为 $\langle x \rangle_0$ 只是一个数，于是和前面的例子相同，有关系

$$\sum_n (E_n - E_i) \left| \langle n | \Delta x | i \rangle \right|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \tag{2}$$

取 $E_i = E_0$ 为基态能量，上式给出

$$\sum_n (E_n - E_0)\left|\langle n|\Delta x|0\rangle\right|^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} \qquad (3)$$

对一维束缚态而言，能级无简并，当 $m > n$ 时，$E_m > E_n$。

$$\begin{aligned}\sum_n (E_n - E_0)\left|\langle n|\Delta x|0\rangle\right|^2 &\ge \sum_n (E_1 - E_0)\left|\langle n|\Delta x|0\rangle\right|^2 \\ &= (E_1 - E_0)\sum_n \left|\langle n|\Delta x|0\rangle\right|^2 \\ &= (E_1 - E_0)\sum_n \langle 0|\Delta x|n\rangle\langle n|\Delta x|0\rangle \\ &= (E_1 - E_0)\langle 0|(\Delta x)^2|0\rangle = (E_1 - E_0)\langle(\Delta x)^2\rangle_0 \qquad (4)\end{aligned}$$

于是由式（3）、式（4）可得

$$\langle(\Delta x)^2\rangle_0 \le \frac{1}{E_1 - E_0}\frac{\hbar^2}{2\mu}$$

END