第4章　对易关系 厄密矩阵

Commutator and Hermitian Matrix

【内容提要】

1. 对易式定义：$[A,B] \equiv AB - BA$

2. 对易式满足的基本恒等式：

$$[A, B+C] = [A,B] + [A,C]$$

$$[A, BC] = B[A,C] + [A,B]C$$

$$[AB, C] = A[B,C] + [A,C]B$$

$$[A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C,[A,B]] = 0$$（**Jacobi** 恒等式）

3. 一些重要的对易关系：

$$[x_\alpha, x_\beta] = 0,\quad [p_\alpha, p_\beta] = 0,\quad [x_\alpha, p_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$$

$$\left[L_\alpha ,\ \begin{matrix} x_\beta \\ p_\beta \\ L_\beta \end{matrix} \right] = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} i\hbar \left\{ \begin{matrix} x_\gamma \\ p_\gamma \\ L_\gamma \end{matrix} \right.$$

$$[L^2, L_\alpha] = 0, \quad [s^2, s_\alpha] = 0, \quad [J^2, J_\alpha] = 0$$

4. 若$[F, G] = 0$，则算符F和G有共同的本征函数系，反之亦然。在F和G的共同本征函数系中测量F和G，都有确定值。

若$[F, G] \neq 0$，则有不确定关系

$$\Delta F \Delta G \geq \frac{1}{2}\left|\overline{[F, G]}\right|$$

特例：

$$\Delta x \Delta p_x \geq \hbar/2, \qquad \Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar/2$$

5. **QM** 中，称状态和力学量的具体表示方法为表象。

选定表象后，算符和量子态都用矩阵表示。在矩阵力学中，Q 表象是以 Q 的本征函数系 $\{u_n(x)\}$ 为基底构成的表象，在这个表象中，有

$$Qu_n(x)=Q_n u_n(x)$$

$$\psi=\sum a_n(t)u_n(x)$$

$$\psi=\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \cdots \\ a_n(t) \end{pmatrix},\quad \psi^+=(a_1^*(t),\ a_2^*(t),\ \cdots,\ a_n^*(t))$$

算符 F 对应一个矩阵（方阵），矩阵元是 $F_{nm}=\int u_n^* F u_m \mathrm{d}x$，平均值公式是 $\overline{F}=\psi^+ F\psi$，归一化条件是 $\psi^+\psi=I$，本征值方程是 $F\psi=\lambda\psi$。

6. 在量子力学中，两个表象之间的变换是幺正变换，满足$S^{+}=S^{-}$；态的变换是$b=S^{-}a$；算符的变换是$F'=S^{-}FS$。幺正变换不改变算符的本征值。

在量子力学中，状态随时间的变化可写成$\psi(t)=U(t)\psi(0)$，$U(t)=\mathrm{e}^{-iHt/\hbar}$是个幺正算符。

7. 量子态可用狄拉克符号刃$|A\rangle$或刁$\langle A|$表示。狄拉克符号的最大好处是它可以不依赖于表象。

基矢的完备性：

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = I,\quad \int \mathrm{d}x\,|x\rangle\langle x| = I,\quad \int \mathrm{d}x\,|x\rangle\langle x| = I$$

坐标表象	狄拉克符号
(1) $F\psi(x,t)=\phi(x,t)$	$F\|\psi\rangle=\|\phi\rangle$
(2) $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=H\psi(x,t)$	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\|\psi\rangle=H\|\psi\rangle$
(3) $Hu_n(x)=E_n u_n(x)$	$H\|n\rangle=E_n\|n\rangle$
(4) $\int u_m^*(x)u_n(x)\,dx=\delta_{mn}$	$\langle m\|n\rangle=\delta_{mn}$
(5) $\psi(x)=\sum_n c_n u_n(x)$	$\|\psi\rangle=\sum_n c_n\|n\rangle$
(6) $c_n=\int u_n^*(x)\psi(x)\,dx$	$c_n=\langle n\|\psi\rangle$
(7) $\bar{F}=\int\psi^*(x)F\psi(x)\,dx$	$\bar{F}=\langle\psi\|F\|\psi\rangle$
(8) $\int\psi^*(x)\psi(x)\,dx=1$	$\langle\psi\|\psi\rangle=1$

8. 薛定谔图景相当于一种“固定坐标系”，基底 $u_n(x)$ 不随时间变化，波函数 $\psi(x,t)$ 随时间变化，算符 A_S 不显含 t。

海森堡图景相当于一种“随动坐标系”，基底随体系一起运动，是时间的函数；波函数与时间 t 无关；算符 $A_H(t)=e^{iHt/\hbar}A_S e^{-iHt/\hbar}$ 是 t 的函数，满足运动方程

$$i\hbar\frac{\partial A_H}{\partial t}=[A_H(t),H]$$

【典型习题解答】

4.1 相互不对易的力学量是否一定没有共同的本征态？试举例加以说明。

解：相互不对易的力学量一般没有共同的本征态，但有例外。例如：

L_x, L_y, L_z 相互不对易，但 $\psi(\vec{r}) = R(r)Y_{00}(\theta,\varphi) = \dfrac{1}{\sqrt{4\pi}}R(r)$ 就是它们的共同

4.2 给出如下对易关系：

$$[x, p_y] = ? \qquad [z, p_z] = ? \qquad [L_x, L_z] = ? \qquad [y, L_z] = ?$$

$$[L^2, L_z] = ? \qquad [\sigma_y, \sigma_x] = ? \qquad [L_y, p_z] = ?$$

解：

$$[x, p_y] = 0 \qquad [z, p_z] = i\hbar \qquad [L_x, L_z] = -i\hbar L_y \qquad [y, L_z] = i\hbar x$$

$$[L^2, L_z] = 0 \qquad [\sigma_y, \sigma_x] = -2i\sigma_z \qquad [L_y, p_z] = i\hbar p_x$$

4.3 计算下列对易式：① $\left[x, \dfrac{d}{dx}\right]=?$ ② $\left[\dfrac{d}{dx}, x^2\right]=?$

解：设$\psi(x)$是任意波函数。

① $$\left[x, \frac{d}{dx}\right]\psi(x)=\left(x\frac{d}{dx}-\frac{d}{dx}x\right)\psi(x)$$

因$\psi(x)$任意，所以 $$\left[x, \frac{d}{dx}\right]=-1$$

② $$\left[\frac{d}{dx}, x^2\right]\psi(x)=\frac{d}{dx}x^2\psi(x)-x^2\frac{d}{dx}\psi(x)$$

$$=x^2\frac{d}{dx}\psi(x)+2x\psi(x)-x^2\frac{d}{dx}\psi(x)=2x\psi(x)$$

因$\psi(x)$任意，所以 $$\left[\frac{d}{dx}, x^2\right]=2x$$

4.4 一维运动中，哈密顿量 $H=\dfrac{p^2}{2m}+V(x)$，求

$[x\,,H]=?\quad [p\,,H]=?$

解：

$$[x\,,H]=\frac{1}{2m}\left[x\,,p^2\right]=\frac{1}{2m}\cdot 2i\hbar p=\frac{i\hbar p}{m}=\frac{\hbar^2}{m}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

$$[p\,,H]=[p\,,V(x)]=-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V(x)$$

4.5 计算：$[p_x, f(x)] = ?$ $[p_x^2, f(x)] = ?$

解：设$\psi(x)$为x的任意函数，

$$[p_x, f(x)]\psi(x) = \hat{p}_x f(x)\psi(x) - f(x)p_x\psi(x)$$

$$= (p_x f(x))\psi(x) + f(x)p_x\psi(x) - f(x)p_x\psi(x)$$

$$= (p_x f(x))\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi(x)\text{。}$$

因$\psi(x)$任意，故有

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

$$[p_x^2, f(x)]\psi(x) = p_x[p_x, f(x)]\psi(x) + [p_x, f(x)]p_x\psi(x)$$

$$= p_x\big(p_x f(x)\big)\psi(x) + \big(p_x f(x)\big)p_x\psi(x)$$

$$= \big(p_x^2 f(x)\big)\psi(x) + \big(p_x f(x)\big)p_x\psi(x) + \big(p_x f(x)\big)p_x\psi(x)$$

$$= \left[p_x^2 f(x) + 2\big(p_x f(x)\big)p_x\right]\psi(x) = \left[-\hbar^2\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} - 2i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}p_x\right]\psi(x)$$

因$\psi(x)$任意，故有

$$[p_x^2, f(x)] = p_x^2 f(x) + 2\big(p_x f(x)\big)p_x = -\hbar^2\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} - 2i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}p_x$$

4.6 在直角坐标系中，证明：$[\bar{L},\bar{p}^2]=0$，其中$\bar{L}$为角动量算符，$\bar{p}$为动量算符。

证：
$$[L_x,\bar{p}^2]=[L_x,p_x^2+p_y^2+p_z^2]=[L_x,p_y^2]+[L_x,p_z^2]$$
$$=p_y[L_x,p_y]+[L_x,p_y]p_y+p_z[L_x,p_z]+[L_x,p_z]p_z$$
$$=i\hbar(p_yp_z+p_zp_y)-i\hbar(p_zp_y+p_yp_z)=0\text{；}$$

同理，$[L_y,\bar{p}^2]=0$，$[L_z,\bar{p}^2]=0$

所以 $[\bar{L},\bar{p}^2]=0$

4.7 设力学量 A 不显含时间 t ，证明在束缚定态下，$\dfrac{\mathrm{d}\overline{A}}{\mathrm{d}t}=0$ 。

证：设束缚定态为 $|\psi\rangle$ ，即有

$$H|\psi\rangle=E|\psi\rangle, \qquad \langle\psi|H=E\langle\psi|$$

$$\frac{\mathrm{d}\overline{A}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|[A,H]|\psi\rangle+\overline{\frac{\partial A}{\partial t}}$$

因 A 不显含时间 t，所以 $\overline{\dfrac{\partial A}{\partial t}}=0$，因而

$$\frac{\mathrm{d}\overline{A}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|[A,H]|\psi\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle\psi|(AH-HA)|\psi\rangle$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\left[\langle\psi|(AH)|\psi\rangle-\langle\psi|(HA)|\psi\rangle\right]$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\left[E\langle\psi|A|\psi\rangle-E\langle\psi|A|\psi\rangle\right]=0$$

4.8 已知厄密算符 A、B 互相反对易：$\{A,B\}=AB+BA=0$；$|b\rangle$ 是算符 B 的本征态：$B|b\rangle=b|b\rangle$，本征值 $b\neq 0$。求在态 $|b\rangle$ 中，算符 A 的平均值。

解：因为

$$\{A,B\}=AB+BA=0$$

所以

$$0=\langle b|\{A,B\}|b\rangle=\langle b|AB|b\rangle+\langle b|BA|b\rangle=2b\langle b|A|b\rangle$$

但 $b\neq 0$，从而有

$$\overline{A}=\langle b|A|b\rangle=0$$

即在态 $|b\rangle$ 中，算符 A 的平均值为零。

4.9 设 A 与 B 为厄密算符，则 $\frac{1}{2}(AB+BA)$ 和 $\frac{1}{2i}(AB-BA)$ 也是厄密算符。由此证明，任何一个算符 F 均可分解为 $F=F_{+}+iF_{-}$，F_{+} 与 F_{-} 均为厄密算符，且

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

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

所以 $\frac{1}{2}(AB+BA)$ 为厄密算符。

②

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

所以$\frac{1}{2i}(AB-BA)$也为厄密算符。

③ 令$F=AB$，则$F^{+}=(AB)^{+}=B^{+}A^{+}=BA$；且定义

$$F_{+}=\frac{1}{2}\left(F+F^{+}\right),\qquad F_{-}=\frac{1}{2i}\left(F-F^{+}\right) \tag{1}$$

由 ①、② 得$F_{+}^{+}=F_{+}$，$F_{-}^{+}=F_{-}$，即F_{+}和F_{-}皆为厄密算符。则由式（1），

不难解得

$$F=F_{+}+iF_{-}$$

4.10 设 $F(x,p)$ 是 x,p 的整函数，证明

$$[p,F]=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}F,\qquad [x,F]=i\hbar\frac{\partial}{\partial p}F$$

整函数是指 $F(x,p)$ 可以展开成 $F(x,p)=\sum\limits_{m,n=0}^{\infty}C_{mn}x^m p^n$。

证：先证

$$[p,x^m]=-mi\hbar x^{m-1},\qquad [x,p^n]=ni\hbar p^{n-1}。$$

$$\begin{aligned}
[p,x^m]&=x^{m-1}[p,x]+[p,x^{m-1}]x\\
&=-i\hbar x^{m-1}+x^{m-2}[p,x]x+[p,x^{m-2}]x^2\\
&=-2i\hbar x^{m-1}+x^{m-3}[p,x]x^2+[p,x^{m-3}]x^3\\
&=-3i\hbar x^{m-1}+[p,x^{m-3}]x^3=\cdots\\
&=-(m-1)i\hbar x^{m-1}+[p,x^{m-(m-1)}]x^{m-1}\\
&=-(m-1)i\hbar x^{m-1}-i\hbar x^{m-1}=-mi\hbar x^{m-1}
\end{aligned}$$

同理，

$$\begin{aligned}[x,p^n] &= p^{n-1}[x,p]+[x,p^{n-1}]p \\ &= i\hbar p^{n-1}+p^{n-2}[x,p]p+[x,p^{n-2}]p^2 \\ &= 2i\hbar p^{n-1}+[x,p^{n-2}]p^2=\cdots \\ &= ni\hbar p^{n-1}\end{aligned}$$

现在，

$$[p,F]=\left[p,\sum_{m,n=0}^{\infty}C_{mn}x^m p^n\right]=\sum_{m,n=0}^{\infty}C_{mn}[p,x^m]p^n$$

$$=\sum_{m,n=0}^{\infty}C_{mn}\left(-mi\hbar x^{m-1}\right)p^n$$

而

$$-i\hbar\frac{\partial F}{\partial x}=\sum_{m,n=0}^{\infty}C_{mn}\left(-mi\hbar x^{m-1}\right)p^n$$

所以

$$[p,F]=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}F$$

又

$$[x, F] = \left[x, \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} x^m p^n\right] = \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} x^m [x, p^n]$$

$$= \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} x^m \left(n i\hbar p^{n-1}\right)$$

而

$$i\hbar \frac{\partial F}{\partial p} = \sum_{m,n=0}^{\infty} C_{mn} x^m \left(n i\hbar p^{n-1}\right)$$

所以

$$[x, F] = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} F$$

4.11 设 F 是由 $\vec{r}$ 、 $\vec{p}$ 构成的标量算符，证明

$$\left[\vec{L},F\right]=i\hbar\frac{\partial F}{\partial\vec{p}}\times\vec{p}-i\hbar\vec{r}\times\frac{\partial F}{\partial\vec{r}} \tag{1}$$

证：

$$\left[\vec{L},F\right]=\left[L_x,F\right]\vec{i}+\left[L_y,F\right]\vec{j}+\left[L_z,F\right]\vec{k} \tag{2}$$

$$\left[L_x,F\right]=\left[yp_z-zp_y,F\right]=y\left[p_z,F\right]+\left[y,F\right]p_z-z\left[p_y,F\right]-\left[z,F\right]p_y$$

$$=-i\hbar y\frac{\partial F}{\partial z}+i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_y}p_z+i\hbar z\frac{\partial F}{\partial y}-i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_z}p_y$$ （根据上题）

$$=i\hbar\left(\frac{\partial F}{\partial p_y}p_z-\frac{\partial F}{\partial p_z}p_y\right)-i\hbar\left(y\frac{\partial F}{\partial z}-z\frac{\partial F}{\partial y}\right)$$

$$=i\hbar\left(\frac{\partial F}{\partial\vec{p}}\times\vec{p}\right)_x-i\hbar\left(\vec{r}\times\frac{\partial F}{\partial\vec{r}}\right)_x \tag{3}$$

同理可证，

$$\left[L_y, F\right] = i\hbar\left(\frac{\partial F}{\partial \vec{p}} \times \vec{p}\right)_y - i\hbar\left(\vec{r} \times \frac{\partial F}{\partial \vec{r}}\right)_y \tag{4}$$

$$\left[L_z, F\right] = i\hbar\left(\frac{\partial F}{\partial \vec{p}} \times \vec{p}\right)_z - i\hbar\left(\vec{r} \times \frac{\partial F}{\partial \vec{r}}\right)_z \tag{5}$$

将式（3）、式（4）、式（5）代入式（2），于是式（1）得证。

4.12 定义反对易式$[A,B]_+ = AB+BA$，证明

$$[AB,C]=A[B,C]_+-[A,C]_+B$$
$$[A,BC]=[A,B]_+C-B[A,C]_+$$

证： $[AB,C]=A[B,C]+[A,C]B$

$$=ABC-ACB+ACB-CAB=A(BC+CB)-(AC+CA)B$$

$$=A[B,C]_+-[A,C]_+B$$

$$[A,BC]=[A,B]C+B[A,C]=ABC-BAC+BAC-BCA$$

$$=(AB+BA)C-B(AC+CA)=[A,B]_+C-B[A,C]_+$$

4.13 设 $\vec{A}$、$\vec{B}$、$\vec{C}$ 为矢量算符，$\vec{A}$ 和 $\vec{B}$ 的标积和矢积定义为

$$\vec{A}\cdot\vec{B}=\sum_{\alpha}A_{\alpha}B_{\alpha},\qquad \vec{A}\times\vec{B}=\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_{\alpha}B_{\beta}$$

$\alpha,\beta,\gamma=x,y,z$，$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 为 **Levi-Civita 符号，试验证**

$$\vec{A}\cdot\left(\vec{B}\times\vec{C}\right)=\left(\vec{A}\times\vec{B}\right)\cdot\vec{C}=\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_{\alpha}B_{\beta}C_{\gamma} \tag{1}$$

$$[\vec{A}\times(\vec{B}\times\vec{C})]_{\alpha}=\vec{A}\cdot(B_{\alpha}\vec{C})-(\vec{A}\cdot\vec{B})C_{\alpha} \tag{2}$$

$$[(\vec{A}\times\vec{B})\times\vec{C}]_{\alpha}=\vec{A}\cdot(B_{\alpha}\vec{C})-A_{\alpha}(\vec{B}\cdot\vec{C}) \tag{3}$$

证：① $\vec{A}\cdot\left(\vec{B}\times\vec{C}\right)$

$$=A_x\left(B_yC_z-B_zC_y\right)+A_y\left(B_zC_x-B_xC_z\right)+A_z\left(B_xC_y-B_yC_x\right)$$

$$=\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma$$

$$\left(\vec{A}\times\vec{B}\right)\cdot\vec{C}$$

$$=\left(A_yB_z-A_zB_y\right)C_x+\left(A_zB_x-A_xB_z\right)C_y+\left(A_xB_y-A_yB_x\right)C_z$$

$$=\sum_{\alpha\beta\gamma}\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}A_\alpha B_\beta C_\gamma$$

式（1）得证。

② $[\vec{A}\times(\vec{B}\times\vec{C})]_\alpha$

$$= A_\beta\left(\vec{B}\times\vec{C}\right)_\gamma - A_\gamma\left(\vec{B}\times\vec{C}\right)_\beta \quad (\alpha=1,\beta=2,\gamma=3)$$

$$= A_\beta\left(B_\alpha C_\beta - B_\beta C_\alpha\right) - A_\gamma\left(B_\gamma C_\alpha - B_\alpha C_\gamma\right)$$

$$= A_\beta B_\alpha C_\beta + A_\gamma B_\alpha C_\gamma - \left(A_\beta B_\beta + A_\gamma B_\gamma\right)C_\alpha$$

$$\vec{A}\cdot\left(B_\alpha\vec{C}\right) - \left(\vec{A}\cdot\vec{B}\right)C_\alpha$$

$$= \cancel{A_\alpha B_\alpha C_\alpha} + A_\beta B_\alpha C_\beta + A_\gamma B_\alpha C_\gamma - \cancel{A_\alpha B_\alpha C_\alpha} - A_\beta B_\beta C_\alpha - A_\gamma B_\gamma C_\alpha$$

$$= A_\beta B_\alpha C_\beta + A_\gamma B_\alpha C_\gamma - \left(A_\beta B_\beta + A_\gamma B_\gamma\right)C_\alpha$$

故式（2）成立。

③ 式（3）验证可仿式（2）。

4.14 设 $\vec{A}$ 与 $\vec{B}$ 为矢量算符，F 为标量算符，证明

$$[F,\vec{A}\cdot\vec{B}]=[F,\vec{A}]\cdot\vec{B}+\vec{A}\cdot[F,\vec{B}] \qquad (1)$$

$$[F,\vec{A}\times\vec{B}]=[F,\vec{A}]\times\vec{B}+\vec{A}\times[F,\vec{B}] \qquad (2)$$

证：式（1）右端 $=\left(F\vec{A}-\vec{A}F\right)\cdot\vec{B}+\vec{A}\cdot\left(F\vec{B}-\vec{B}F\right)$

$$=F\vec{A}\cdot\vec{B}-\cancel{\vec{A}F\cdot\vec{B}}+\cancel{\vec{A}\cdot F\vec{B}}-\vec{A}\cdot\vec{B}F$$

$=F\vec{A}\cdot\vec{B}-\vec{A}\cdot\vec{B}F=[F,\vec{A}\cdot\vec{B}]=$ 式（1）左端

式（2）右端 $=\left(F\vec{A}-\vec{A}F\right)\times\vec{B}+\vec{A}\times\left(F\vec{B}-\vec{B}F\right)$

$$=F\vec{A}\times\vec{B}-\cancel{\vec{A}F\times\vec{B}}+\cancel{\vec{A}\times F\vec{B}}-\vec{A}\times\vec{B}F$$

$=F\vec{A}\times\vec{B}-\vec{A}\times\vec{B}F=\left[F,\vec{A}\times\vec{B}\right]=$ 式（2）左端

4.15 证明 $$\vec{p}\times\vec{L}+\vec{L}\times\vec{p}=2i\hbar\vec{p}$$

$$i\hbar\left(\vec{p}\times\vec{L}-\vec{L}\times\vec{p}\right)=\left[L^2,\vec{p}\right]$$

证： $$\left(\vec{p}\times\vec{L}+\vec{L}\times\vec{p}\right)_x=p_yL_z-p_zL_y+L_yp_z-L_zp_y=\left[p_y,L_z\right]+\left[L_y,p_z\right]$$

利用基本对易式

$$\left[L_\alpha,p_\beta\right]=\left[p_\alpha,L_\beta\right]=i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}p_\gamma$$

即得

$$\left(\vec{p}\times\vec{L}+\vec{L}\times\vec{p}\right)_x=2i\hbar p_x$$

因此

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

其次，由于p_x和L_x对易，所以

$$
\begin{aligned}
\left[L^2, p_x\right] &= \left[L_y^{\ 2}, p_x\right] + \left[L_z^{\ 2}, p_x\right] \\
&= \left[L_y, p_x\right]L_y + L_y\left[L_y, p_x\right] + \left[L_z, p_x\right]L_z + L_z\left[L_z, p_x\right] \\
&= i\hbar\left(-p_z L_y - L_y p_z + p_y L_z + L_z p_y\right) \\
&= i\hbar\left[\left(p_y L_z - p_z L_y\right) - \left(L_y p_z - L_z p_y\right)\right] \\
&= i\hbar\left(\vec{p}\times\vec{L} - \vec{L}\times\vec{p}\right)_x
\end{aligned}
$$

因此，

$$i\hbar\left(\vec{p}\times\vec{L} - \vec{L}\times\vec{p}\right) = [L^2, \vec{p}]$$

***4.16　证明：**

① $L^2 = r^2 p^2 - (\vec{r}\cdot\vec{p})^2 + i\hbar\vec{r}\cdot\vec{p}$

② $(\vec{L}\times\vec{p})^2 = (\vec{p}\times\vec{L})^2 = -(\vec{L}\times\vec{p})\cdot(\vec{p}\times\vec{L}) = L^2 p^2$

③ $-(\vec{p}\times\vec{L})\cdot(\vec{L}\times\vec{p}) = L^2 p^2 + 4\hbar^2 p^2$

④ $(\vec{L}\times\vec{p})\times(\vec{L}\times\vec{p}) = -i\hbar\vec{L}p^2$

证：① 利用公式 $\vec{A}\cdot(\vec{B}\times\vec{C}) = (\vec{A}\times\vec{B})\cdot\vec{C}$，有

$$L^2 = -(\vec{p}\times\vec{r})\cdot(\vec{r}\times\vec{p}) = -\underline{\left[(\vec{p}\times\vec{r})\times\vec{r}\right]}\cdot\vec{p}$$

$$= \underline{\left[\vec{p}(\vec{r}\cdot\vec{r}) - (\vec{p}\cdot\vec{r})\vec{r}\right]}\cdot\vec{p} = (\vec{p}r^2)\cdot\vec{p} - (\vec{p}\cdot\vec{r})(\vec{r}\cdot\vec{p})$$

其中

其中

$$\vec{p}r^2 = r^2\vec{p} - i\hbar\left(\nabla r^2\right) = r^2\vec{p} - 2i\hbar\vec{r}$$

$$\vec{p}\cdot\vec{r} = \vec{r}\cdot\vec{p} - i\hbar\left(\nabla\cdot\vec{r}\right) = \vec{r}\cdot\vec{p} - 3i\hbar$$

因此

$$L^2 = r^2p^2 - (\vec{r}\cdot\vec{p})^2 + i\hbar\vec{r}\cdot\vec{p}$$

② 利用公式

$$\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{p} = \vec{L}\cdot\left(\vec{p}\times\vec{p}\right) = 0 \qquad (1)$$

可得

$$\vec{A}\cdot\left(\vec{B}\times\vec{C}\right) = \left(\vec{A}\times\vec{B}\right)\cdot\vec{C}$$

$$-(\vec{L}\times\vec{p})\cdot(\vec{p}\times\vec{L}) = -[(\vec{L}\times\vec{p})\times\vec{p}]\cdot\vec{L}$$

$$= [\vec{L}(\vec{p}\cdot\vec{p}) - (\vec{L}\cdot\vec{p})\vec{p}]\cdot\vec{L} = (\vec{L}p^2 - 0)\cdot\vec{L} = L^2p^2 \qquad (2)$$

$$(\vec{L}\times\vec{p})^2=(\vec{L}\times\vec{p})\cdot(\vec{L}\times\vec{p})=\vec{L}\cdot[\vec{p}\times(\vec{L}\times\vec{p})]$$

$$=\vec{L}\cdot[p^2\vec{L}-(\vec{p}\cdot\vec{L})\vec{p}]=L^2p^2 \qquad (3)$$

$$(\vec{p}\times\vec{L})^2=(\vec{p}\times\vec{L})\cdot(\vec{p}\times\vec{L})=[(\vec{p}\times\vec{L})\times\vec{p}]\cdot\vec{L}$$

$$=[\vec{L}p^2-\vec{p}(\vec{L}\cdot\vec{p})]\cdot\vec{L}=L^2p^2 \qquad (4)$$

由式（2）、式（3）、式（4），则 ② 得证。

③ 根据 **4.15** 题，有

$$-\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)=\vec{p}\times\vec{L}-2i\hbar\vec{p} \tag{5}$$

所以

$$-\left(\vec{p}\times\vec{L}\right)\cdot\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)=\left(\vec{p}\times\vec{L}\right)\cdot\left(\vec{p}\times\vec{L}-2i\hbar\vec{p}\right)$$

$$=\left(\vec{p}\times\vec{L}\right)^2-2i\hbar\left(\vec{p}\times\vec{L}\right)\cdot\vec{p}$$

$$=L^2p^2-2i\hbar\left(2i\hbar\vec{p}-\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{p}$$ （根据②和式（**5**））

$$=L^2p^2+4\hbar^2p^2$$ （根据式（**1**））

④ 就此式的一个分量加以证明，由 **4.13** 题式（**2**），

$$[\vec{A}\times(\vec{B}\times\vec{C})]_\alpha = \vec{A}\cdot(B_\alpha\vec{C})-(\vec{A}\cdot\vec{B})C_\alpha$$

$$[(\vec{L}\times\vec{p})\times(\vec{L}\times\vec{p})]_x = (\vec{L}\times\vec{p})\cdot(L_x\vec{p})-[(\vec{L}\times\vec{p})\cdot\vec{L}]p_x$$

其中
$$L_x\vec{p} = \vec{p}L_x + i\hbar\left(p_z\vec{e}_2 - p_y\vec{e}_3\right)$$

（即 $\left[L_x, p_x\vec{i}+p_y\vec{j}+p_z\vec{k}\right] = 0 + i\hbar p_z\vec{j} - i\hbar p_y\vec{k}$ ）

$$\left[\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\times\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\right]_x = \left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{p}L_x + i\hbar\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\left(p_z\vec{e}_2 - p_y\vec{e}_3\right)$$

$$-\left[\left(\vec{L}\times\vec{p}\right)\cdot\vec{L}\right]p_x$$

$$=\left(-i\hbar\vec{L}p^2\right)_x = -i\hbar L_x p^2$$

$$= i\hbar[(\vec{L}\times\vec{p})\times\vec{p}]_x = i\hbar[(\vec{L}\cdot\vec{p})\vec{p}-\vec{L}(\vec{p}\cdot\vec{p})]_x$$

类似地，可以得到 y 分量和 z 分量的公式，故题 ④ 得证。

4.17 定义径向动量算符 $p_r=\frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\vec{r}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\vec{r}\frac{1}{r}\right)$，证明：

① $p_r^+=p_r$

② $p_r=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$

③ $[r,p_r]=i\hbar$

④ $p_r^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)=-\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}$

⑤ $p^2=\frac{1}{r^2}L^2+p_r^2$

证：① 因为

$$(ABC)^+=C^+B^+A^+$$

所以 $$p_r^+ = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{r}\vec{r}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\vec{r}\frac{1}{r}\right)^+ = \frac{1}{2}\left[\vec{p}^+\cdot\vec{r}^+\left(\frac{1}{r}\right)^+ + \left(\frac{1}{r}\right)^+\vec{r}^+\cdot\vec{p}^+\right]$$

$$=\frac{1}{2}\left(\vec{p}\cdot\vec{r}\frac{1}{r}+\frac{1}{r}\vec{r}\cdot\vec{p}\right)=p_r$$

即 p_r 为厄密算符。

② $$p_r=\frac{1}{2}\left(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}+\vec{p}\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)=\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}\right)+\left(\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}\right)+\left(-i\hbar\nabla\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)\right]$$

$$=\frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{p}-\frac{i\hbar}{2}\left(\nabla\cdot\frac{\vec{r}}{r}\right)=-i\hbar\frac{\vec{r}}{r}\cdot\nabla-\frac{i\hbar}{2}\left[\frac{1}{r}\nabla\cdot\vec{r}+\vec{r}\cdot\nabla\frac{1}{r}\right]$$

$$=-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}-\frac{i\hbar}{2}\left(\frac{3}{r}-\vec{r}\cdot\frac{\vec{r}}{r^3}\right)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}-\frac{i\hbar}{2}\left(\frac{3}{r}-\frac{1}{r}\right)$$

$$=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$$

③ $$[r, p_r] = -i\hbar\left[r, \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right] = -i\hbar\left[r, \frac{\partial}{\partial r}\right] = -i\hbar\left(r\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\partial}{\partial r}r\right)$$

$$= -i\hbar\left(r\frac{\partial}{\partial r} - 1 - r\frac{\partial}{\partial r}\right) = i\hbar$$

④ $$p_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r}\frac{1}{r} + \frac{1}{r^2}\right)$$

$$= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2} + \frac{1}{r^2}\right) = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

$$= -\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}$$

⑤　据 **4.16** 题①，

$$L^2 = r^2 p^2 - \left(\vec{r}\cdot\vec{p}\right)^2 + i\hbar\vec{r}\cdot\vec{p}$$

其中
$$\vec{r}\cdot\vec{p} = -i\hbar\vec{r}\cdot\nabla = -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}$$

因而

$$L^2 = r^2 p^2 + \hbar^2\left(r\frac{\partial}{\partial r} r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}$$

$$= r^2 p^2 + \hbar^2\left(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

以 r^{-2} 左乘上式各项，即得

$$p^2 = \frac{1}{r^2}L^2 - \hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) \overset{④}{=} \frac{1}{r^2}L^2 + p_r^2$$

4.18 设 A、B 不对易，$[A,B]=C$，但 C 与 A、B 皆对易：$[C,A]=0$，$[C,B]=0$，试计算 $[A,B^n]$，$[A,e^B]$，$[A,e^{\lambda B}]$，$[A,f(B)]$。

解：① $$[A,B^n]=[A,B\cdot B^{n-1}]$$

$$=[A,B]B^{n-1}+B[A,B^{n-1}]=CB^{n-1}+B[A,B^{n-1}] \qquad (1)$$

将 n 换成 $(n-1)$，就有

$$[A,B^{n-1}]=CB^{n-2}+B[A,B^{n-2}] \qquad (2)$$

式（2）代入式（1），得

$$[A,B^n]=CB^{n-1}+CB^{n-1}+B^2[A,B^{n-2}]=2CB^{n-1}+B^2[A,B^{n-2}]$$

重复这种递推过程 $(n-1)$ 次，即得

$$[A, B^n] = (n-1)CB^{n-1} + B^{n-1}[A, B^{n-(n-1)}]$$

$$= (n-1)CB^{n-1} + CB^{n-1} = nCB^{n-1} \qquad (3)$$

② $$e^B = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B^n}{n!}$$

所以

$$\left[A, e^B\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left[A, B^n\right] = C\sum_{n=1}^{\infty} \frac{B^{n-1}}{(n-1)!} = C\sum_{m=0}^{\infty} \frac{B^m}{m!} = Ce^B \qquad (4)$$

③ 如令 $B \to \lambda B$，则 $\left[A, B\right] = C \to \left[A, \lambda B\right] = \lambda\left[A, B\right] = \lambda C$，式（4）作此置换，即得

$$[A, e^{\lambda B}] = \lambda C e^{\lambda B} \qquad (5)$$

④ 设 $$f(B)=\sum_n f_n B^n \tag{6}$$

则 $$f'(B)=\frac{\mathrm{d}f(B)}{\mathrm{d}B}=\sum_n n f_n B^{n-1} \tag{7}$$

$$\left[A,f(B)\right]=\left[A,\sum_n f_n B^n\right]$$

$$=\sum_n f_n\left[A,B^n\right]=\sum_n f_n n C B^{n-1}=C f'(B) \tag{8}$$

①、②、③皆为④的特例。

由①的结果式（3），若令 $A=x, B=p_x$，则

$$[x,p_x^n]=n i\hbar\, p_x^{n-1}$$

特别地，$$[x,p_x^2]=2i\hbar\, p_x=2\hbar^2\frac{\partial}{\partial x} \tag{9}$$

4.19 设算符 A、B 不可对易：$[A,B]=C$，但 $[A,C]=0$，$[B,C]=0$，试证明 **Glauber** 公式：

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

证：引入参数 λ，作

$$f(\lambda)=e^{\lambda A}e^{\lambda B} \qquad (1)$$

注意 $f(0)=1,\ f(1)=e^{A}e^{B}$，上式对 λ 求导，得

$$\frac{d}{d\lambda}f(\lambda)=e^{\lambda A}(A+B)e^{\lambda B} \qquad (2)$$

但据题 **4.18** 式（5），

$$[A,e^{\lambda B}]=Ae^{\lambda B}-e^{\lambda B}A=\lambda Ce^{\lambda B}$$

所以

$$A\mathrm{e}^{\lambda B}=\mathrm{e}^{\lambda B}(A+\lambda C) \tag{3}$$

代入式（2），得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda A}\,\mathrm{e}^{\lambda B}(A+B+\lambda C)=f(\lambda)(A+B+\lambda C) \tag{4a}$$

两边乘以$1/f(\lambda)$，得

$$\frac{\mathrm{d}f(\lambda)}{f(\lambda)\mathrm{d}\lambda}=A+B+C\lambda \tag{4b}$$

积分，得

$$\ln f(\lambda)=\ln f(0)+(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^2$$

因此，

$$f(\lambda)=f(0)\mathrm{e}^{(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^2}=\mathrm{e}^{(A+B)\lambda+\frac{1}{2}C\lambda^2} \tag{5}$$

两边乘以 $e^{-\frac{1}{2}C\lambda^2}$，得

$$e^{\lambda(A+B)} = e^{\lambda A} e^{\lambda B} e^{-\frac{1}{2}C\lambda^2} \tag{6a}$$

如令 $A \leftrightarrow B$， 则 $[A,B]=C \to [B,A]=-C$，上式变成

$$e^{\lambda(A+B)} = e^{\lambda B} e^{\lambda A} e^{\frac{1}{2}C\lambda^2} \tag{6b}$$

式（6a）和（6b）中，取 $\lambda=1$，即得

$$e^{A+B} = e^{A} e^{B} e^{-\frac{1}{2}C} = e^{B} e^{A} e^{\frac{1}{2}C} \tag{7}$$

4.20 如果 A 是厄密矩阵，试证 $\det e^{A} = e^{\operatorname{tr} A}$；已知

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

求 $\det e^{A}$ 。

解：① 设 A 是 m 阶方阵，其本征值为 $a_1, a_2, \cdots, a_m$。因为 A 为厄密矩阵，故 A 可以用一个幺正矩阵 U 对角化，即

$$U^{+}AU = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & \cdots\cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots\cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots\cdots & a_m \end{bmatrix}$$

因为

$$\det \mathrm{e}^{A} = \det\left(U^{+}\,\mathrm{e}^{A}\,U\right) = \det\left(U^{+}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{A^{n}}{n!}U\right)$$

$$= \det\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(U^{+}AUU^{+}AU\cdots U^{+}AU\right) = \det\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(U^{+}AU\right)^{n}}{n!}$$

$$= \det\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\begin{pmatrix} a_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_m \end{pmatrix}^{n} = \det\begin{pmatrix} \sum\frac{a_1^{n}}{n!} & & \\ & \sum\frac{a_2^{n}}{n!} & \\ & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$= \det\begin{pmatrix} \mathrm{e}^{a_1} & & \\ & \mathrm{e}^{a_2} & \\ & & \ddots \end{pmatrix} = \mathrm{e}^{a_1}\,\mathrm{e}^{a_2}\cdots\mathrm{e}^{a_m} = \mathrm{e}^{\mathrm{tr}(U^{+}AU)} = \mathrm{e}^{\mathrm{tr}\,A}$$

② 对于

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

有

$$\det \mathrm{e}^{A} = \mathrm{e}^{\mathrm{tr}\,A} = \mathrm{e}^{0} = 1$$

4.21 已知 $\ln A=\begin{pmatrix} 2 & 7 & i\sqrt{3} \\ 7 & 0 & -5 \\ -i\sqrt{3} & -5 & -1 \end{pmatrix}$，求 $\det A$。

解法 1： 令 $B=\ln A$， $A=\mathrm{e}^{B}$。利用上题结果

$$\det A=\det \mathrm{e}^{B}=\mathrm{e}^{\operatorname{tr} B} \tag{1}$$

而
$$\operatorname{tr} B=\operatorname{tr} \ln A=2-1=1$$

代入上式即得
$$\det A=e \tag{2}$$

*解法 2：令 $A=\mathrm{e}^{B}$。矩阵（算符）A 既然为 B 的函数，则 A、B 可以同时对角化，即变到 B 表象中去，这时对角元 $B_{nn}=B_{n}$ 为 B 的本征值。

有

$$\mathrm{tr}\,B = \sum_n B_{nn} = \sum_n B_n \tag{3}$$

A 的本征值为 e^{B_n} ，即

$$A_n = A_{nn} = e^{B_n} \tag{4}$$

所以

$$\det A = \prod_n A_{nn} = \prod_n e^{B_n} = e^{\sum_n B_n} = e^{\mathrm{tr}\,B}$$

此即为（1）式。

矩阵的行列式和迹均与表象的选择无关，故式（1）适用于任何表象。

4.22 给定算符 A、B，令

$$C_0 = B$$
$$C_1 = \left[A, C_0\right] = \left[A, B\right] = AB - BA$$
$$C_2 = \left[A, C_1\right] = \left[A, \left[A, B\right]\right]$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

证明： $$\mathrm{e}^{A} B \mathrm{e}^{-A} = C_0 + C_1 + \frac{1}{2!}C_2 + \frac{1}{3!}C_3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{C_n}{n!}$$

证：引入参变数 λ，作 $$f(\lambda) = \mathrm{e}^{\lambda A} B \mathrm{e}^{-\lambda A} \qquad (1)$$

则 $$f(0) = B = C_0\,, \qquad f(1) = \mathrm{e}^{A} B \mathrm{e}^{-A} \qquad (2)$$

对 λ 求导即得 $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} f(\lambda) = \mathrm{e}^{\lambda A}(AB - BA)\mathrm{e}^{-\lambda A} = \mathrm{e}^{\lambda A} C_1 \mathrm{e}^{-\lambda A}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\right)^2 f(\lambda) = \mathrm{e}^{\lambda A}(AC_1 - C_1 A)\mathrm{e}^{-\lambda A} = \mathrm{e}^{\lambda A} C_2 \mathrm{e}^{-\lambda A}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\right)^n f(\lambda) = \mathrm{e}^{\lambda A} C_n \mathrm{e}^{-\lambda A} \tag{3}$$

根据泰勒公式

$$f(1) = f(0) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!}\left[\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\lambda^n} f(\lambda)\right]_{\lambda=0} \tag{4}$$

而由式（3），令 $\lambda \to 0$，即得

$$\left[\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\lambda^n} f(\lambda)\right]_{\lambda=0} = C_n \tag{5}$$

代入式（4），并注意到式（2），得

$$\mathrm{e}^{A} B \mathrm{e}^{-A} = C_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} C_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} C_n \tag{6}$$

亦即

$$\mathrm{e}^{A} B \mathrm{e}^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \cdots \tag{7}$$

4.23 证明：

① 任一算符 F，总可写作 $F = A + iB$，其中 A、B 是厄密算符；

② 若算符 G 是一个非厄密算符，问在什么条件下，G^{+} 是厄密算符。

解：①

$$F = \frac{1}{2}(F + F^{+}) + \frac{1}{2}(F - F^{+}) = A + iB \qquad (1)$$

$$A = \frac{1}{2}(F + F^{+}) = A^{+} \qquad (2)$$

$$B = \frac{i}{2}(F^{+} - F) = B^{+} \qquad (3)$$

② 若 $G = A + iB$，非厄密，

$$G^2 = (A + iB)^2 = A^2 - B^2 + i(AB + BA) \tag{4}$$

$$(G^2)^+ = [(A + iB)^2]^+ = A^2 - B^2 - i(B^+A^+ + A^+B^+)$$

$$= A^2 - B^2 - i(AB + BA) \tag{5}$$

令 $(G^2)^+ = G^2$，由式（4）和式（5）可知，须

$$AB + BA = 0 \tag{6}$$

即

$$\{A, B\} \equiv AB + BA = 0$$

A 、 B 反对易。

4.24 设U为幺正算符，证明U必可分解成 $U = A + iB$，A、B为厄密算符，并满足$A^2 + B^2 = 1$，$[A, B] = 0$，试找出A、B，进而证明U可表成 $U = e^{iH}$，H为厄密算符。

证：① 如存在厄密算符A、B，使

$$U = A + iB \tag{1}$$

则

$$U^+ = A - iB \tag{2}$$

易解出

$$A = \frac{1}{2}(U + U^+),\quad B = \frac{i}{2}(U^+ - U) \tag{3}$$

显然，这样确定的A、B都是厄密算符。

U作为幺正算符，满足

$$UU^+ = U^+U = 1 \tag{4}$$

式（1）和式（2）代入式（4），得

$$UU^{+}=(A+iB)(A-iB)=A^{2}+B^{2}-i[A,B]=1$$

$$U^{+}U=(A-iB)(A+iB)=A^{2}+B^{2}+i[A,B]=1$$

因此必有 $A^{2}+B^{2}=1$，　$[A,B]=0$　（5）

容易验证由式（3）确定的 A、B 确实满足式（5）。

*② 由于 A、B 是对易的厄密算符，故存在共同本征态 $|n\rangle$，满足本征方程

$$A|n\rangle=A_{n}|n\rangle,\qquad B|n\rangle=B_{n}|n\rangle \tag{6}$$

由于 $A^{2}+B^{2}=1$，易见

$$A_{n}^{2}+B_{n}^{2}=1\ \text{（圆方程）} \tag{7}$$

因此，对每组本征值 (A_{n},B_{n})，在 $(0,2\pi)$ 间必然存在实数 H_{n}，使

$$A_n = \cos H_n\,, \qquad B_n = \sin H_n \tag{8}$$

从而

$$U|n\rangle = (A + iB)|n\rangle = (A_n + iB_n)|n\rangle = e^{iH_n}|n\rangle \tag{9}$$

若在全体$|n\rangle$所张态矢量空间中定义厄密算符H，使

$$H|n\rangle = H_n|n\rangle$$

则有

$$e^{iH}|n\rangle = e^{iH_n}|n\rangle \tag{10}$$

且

$$e^{iH}\left(e^{iH}\right)^{+} = e^{iH}\,e^{-iH} = 1$$

即e^{iH}为幺正算符。由此可见

$$U = e^{iH} \tag{11}$$

4.25 证明投影算符是厄密算符，其平方等于该算符本身。

证：据定义，投影算符

$$P = |n\rangle\langle n|$$

因为

$$P^{+} = \left(|n\rangle\langle n|\right)^{+} = |n\rangle\langle n| = P$$

所以 P 是厄密算符。

又

$$P^{2} = |n\rangle\langle n|n\rangle\langle n| = |n\rangle\langle n| = P$$

证毕。

指出：若一线性算符 P 满足 $P^{+} = P$ 和 $P^{2} = P$，则此线性算符 P 一定是投影算符。

4.26 证明：投影算符 $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ 是一个可观察量，$|\psi\rangle$ 是任一归一化态矢量。

证：
$$P_\psi^+ = \left(|\psi\rangle\langle\psi|\right)^+ = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi \tag{1}$$

$$P_\psi^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi \tag{2}$$

设 λ 为 P_ψ 的本征态，即
$$P_\psi|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \tag{3}$$

则
$$P_\psi^2|\lambda\rangle = \lambda^2|\lambda\rangle = P_\psi|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$$

$$\left(\lambda^2 - \lambda\right)|\lambda\rangle = 0$$

所以
$$\lambda = 0\,,\ 1$$

此即证明了，投影算符 $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ 是一可观察量，其本征值只有两个：0 或 1。

4.27 设 $K=|\varphi\rangle\langle\psi|$，$|\varphi\rangle$和$|\psi\rangle$是两个任意矢量，均已归一化，问

① 在什么条件下，K 是厄密算符？

② 在什么条件下，K 是投影算符？

解：① 先证明K 的厄密共轭为 $K^{+}=|\psi\rangle\langle\varphi|$ 。设$|1\rangle$和$|2\rangle$为两任意态矢量，

$$\langle 1|K^{+}|2\rangle=\langle 2|K|1\rangle^{*}=\left(\langle 2|\varphi\rangle\langle\psi|1\rangle\right)^{*}=\langle\varphi|2\rangle\langle 1|\psi\rangle=\langle 1|\psi\rangle\langle\varphi|2\rangle$$

因$|1\rangle$和$|2\rangle$为任意矢量，所以

$$K^{+}=|\psi\rangle\langle\varphi| \tag{1}$$

再讨论K是厄密算符的条件。若K是厄密算符，须满足$K=K^{+}$，即

$$|\varphi\rangle\langle\psi|=|\psi\rangle\langle\varphi| \tag{2}$$

两边作用到$|\psi\rangle$上，有

$$|\varphi\rangle\langle\psi|\psi\rangle = |\psi\rangle\langle\varphi|\psi\rangle$$

即

$$|\varphi\rangle = C|\psi\rangle,\qquad C = \langle\varphi|\psi\rangle,\qquad \langle\varphi| = C^*\langle\psi| \tag{3}$$

代入式（2），得

$$C|\psi\rangle\langle\psi| = C^*|\psi\rangle\langle\psi|$$

即

$$C = C^* \tag{4}$$

所以C为实数。因此，只有在$|\varphi\rangle = C|\psi\rangle$，且$C = \langle\varphi|\psi\rangle$为实数时，

$K = |\varphi\rangle\langle\psi|$才是厄密算符。

② 投影算符的充要条件是$K^+ = K$，$K^2 = K$。由 ① 中讨论的结论，知$K = C|\psi\rangle\langle\psi|$（$C$为实）已是厄密算符，故只要将它代入$K^2 = K$，定出实常数$C$就能求出$K$是投影算符的条件，即

$$K^2 = C^2|\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = C|\psi\rangle\langle\psi| = K$$

亦即

$$C^2|\psi\rangle\langle\psi| = C|\psi\rangle\langle\psi|$$

亦即

$$C^2 = C$$

从而

$$C = 1 \quad （这里不取 C = 0）$$

所以当$|\varphi\rangle = |\psi\rangle$时，$K = |\varphi\rangle\langle\psi|$才是投影算符。

4.28 若I为宇称算子，计算$\frac{1}{2}(1\pm I)$是否满足投影算子关系式。用$\frac{1}{2}(1\pm I)$作用于任意波函数，其影响如何？

解：① 对宇称算子，$I^2=1$，本征值为±1。

$$\left[\frac{1}{2}(1\pm I)\right]^2=\frac{1}{4}\left(1\pm 2I+I^2\right)=\frac{1}{2}(1\pm I)$$

满足投影算子条件。

② 设$|\ \rangle$为任意态，考虑

$$I\cdot\frac{1}{2}(1\pm I)|\ \rangle=\frac{1}{2}\left(I\pm I^2\right)|\ \rangle=\pm1\cdot\frac{1}{2}(1\pm I)|\ \rangle$$

即$\frac{1}{2}(1\pm I)$作用于任意态$|\ \rangle$，将把该态变成I的本征态（亦即变成具有确定宇称的态）$\frac{1}{2}(1\pm I)|\ \rangle$，本征值为$\pm1$。

4.29 设幺正算符 U 可以写成 $U=1\pm i\varepsilon F$ 的形式，ε 是一个无限小量，证明 F 是厄密算子。

证： $U=1\pm i\varepsilon F$， $U^{+}=1\mp i\varepsilon F^{+}$

因为

$$UU^{+}=U^{+}U=1$$

所以

$$UU^{+}=\left(1\pm i\varepsilon F\right)\left(1\mp i\varepsilon F^{+}\right)=1\pm i\varepsilon\left(F-F^{+}\right)+\varepsilon^{2}FF^{+}=1$$

略去二阶小量，即得

$$F^{+}=F$$

即 F 是厄密算子。

4.30 已知二阶矩阵 A、B 满足下列关系：

$$A^2=0,\ AA^+ + A^+A = 1, B = A^+A。$$

试证明 $B^2=B$ ，并在 B 表象中求出矩阵 A、B。

解： 据题意， $B=A^+A$，有

$$B^2 = A^+AA^+A = A^+A\left(1-AA^+\right) = A^+A - A^+A^2A^+ = A^+A = B$$

由此求出 B 的本征值为 0，1。

在 B 表象中，B 为对角矩阵：

$$B=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} \qquad (1)$$

设

$$A=\begin{pmatrix}a & b\\ c & d\end{pmatrix} \qquad (2)$$

应有

$$A^{+}A=\begin{pmatrix} a^{*} & c^{*} \\ b^{*} & d^{*} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} a^{*}a+c^{*}c & a^{*}b+c^{*}d \\ b^{*}a+d^{*}c & b^{*}b+d^{*}d \end{pmatrix}=B=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$AA^{+}=\begin{pmatrix} a^{*}a+b^{*}b & c^{*}a+d^{*}b \\ a^{*}c+b^{*}d & c^{*}c+d^{*}d \end{pmatrix}=1-B=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

$$A^{2}=\begin{pmatrix} a^{2}+bc & ab+bd \\ ac+dc & d^{2}+bc \end{pmatrix}=0=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

由式（3）得

$$a=0,\qquad c=0,\qquad b^{*}b+d^{*}d=1 \quad (6)$$

由式（4）得

$$c=0,\qquad d=0,\qquad a^{*}a+b^{*}b=1 \quad (7)$$

由式（6）、（式 7）求出

$$a=c=d=0\,,\qquad b^*b=1 \tag{8}$$

现在式（5）已得到满足，因此可取

$$b=\mathrm{e}^{i\alpha}\qquad(\ \alpha\text{为实数}\ ) \tag{9}$$

代入式（2），即得 B 表象中的 A 矩阵表示

$$A=\begin{pmatrix}0 & \mathrm{e}^{i\alpha}\\ 0 & 0\end{pmatrix},\qquad A^{+}=\begin{pmatrix}0 & 0\\ \mathrm{e}^{-i\alpha} & 0\end{pmatrix} \tag{10}$$

由式（1）和式（10）表示的 A、B，已满足所有题设条件，故 α 可取任意实数，最简单的一种选择是

$$\alpha=0\,,\qquad A=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix},\qquad A^{+}=\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix} \tag{11}$$

4.31 满足条件

$$U^+U=UU^+=1,\det U=1$$

的 n 维矩阵 U，称为 SU_n 矩阵。试求 SU_2 的一般表示式。

解：设

$$U=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix},\ U^+=\begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} \tag{1}$$

由 $U^+U=1$，得

$$a^*a+c^*c=b^*b+d^*d=1 \tag{2a}$$

$$a^*b+c^*d=ab^*+cd^*=0 \tag{2b}$$

由 $UU^+=1$，得

$$a^*a+b^*b=c^*c+d^*d=1 \tag{3a}$$

$$ac^*+bd^*=a^*c+b^*d=0 \tag{3b}$$

由 $\det U=1$，得

$$ad-bc=1 \tag{4}$$

由（2a）及（3a），易得

$$b^*b=c^*c,\qquad a^*a=d^*d \tag{5}$$

$$a^*a+b^*b=1 \tag{6}$$

据此可令

$$\begin{aligned} a&=\cos\omega\cdot e^{i\alpha}, & b&=\sin\omega\cdot e^{i\beta} \\ d&=\cos\omega\cdot e^{i\gamma}, & c&=\sin\omega\cdot e^{i\delta} \end{aligned} \tag{7}$$

$\omega, \alpha, \beta, \gamma, \delta$ 为实数。将式（7）代入式（4），得到

$$\cos^2\omega \cdot e^{i(\alpha+\gamma)} - \sin^2\omega \cdot e^{i(\beta+\delta)} = 1$$

为此，须

$$e^{i(\alpha+\gamma)} = 1, \qquad e^{i(\beta+\delta)} = -1 \tag{8a}$$

式（8a）给出

$$\gamma = -\alpha, \qquad e^{i\delta} = -e^{-i\beta} \tag{8b}$$

至此，矩阵 U 已经具体化为

$$U = \begin{pmatrix} \cos\omega \cdot e^{i\alpha} & \sin\omega \cdot e^{i\beta} \\ -\sin\omega \cdot e^{-i\beta} & \cos\omega \cdot e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \tag{9}$$

容易验证，这个矩阵已经满足所有题设条件，所以它就是 SU_2 矩阵的普遍表示式。可以看出，它含有 3 个独立的参量。

4.32 设体系处于 $\psi = C_1 Y_{11} + C_2 Y_{20}$ 状态（已归一化，即 $|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1$），求

① L_z 的可能测值及平均值；

② L^2 的可能测值及相应的几率；

③ L_x 的可能测值及相应的几率。

解： $$L^2 Y_{11} = 2\hbar^2 Y_{11}, \quad L^2 Y_{20} = 6\hbar^2 Y_{20}$$

$$L_z Y_{11} = \hbar Y_{11}, \quad L_z Y_{20} = 0\hbar Y_{20}$$

① 由于 ψ 已归一化，故 L_z 的可能测值为 $\hbar$、0，相应的几率为 $|C_1|^2$、$|C_2|^2$。平均值 $\overline{L_z} = |C_1|^2 \hbar$。

② L^2 的可能测值为 $2\hbar^2$、$6\hbar^2$，相应的几率分别为 $|C_1|^2$、$|C_2|^2$。

③ 若 C_1、C_2 不为 0，则 L_x（及 L_y）的可能测值为：$2\hbar$、$\hbar$、0、$-\hbar$、$-2\hbar$。

1）L_x 在 $l=1$ 的空间、(L^2, L_z) 对角化的表象中的矩阵是

$$\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}。$$

求本征矢并令 $\hbar=1$，则 L_x 的本征方程为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$$

解得

$$b=\sqrt{2}\lambda a\text{，}\quad a+c=\sqrt{2}\lambda b\text{，}\quad b=\sqrt{2}\lambda c\text{。}\quad \lambda=0,\ \pm 1$$

a. 取 $\lambda=0$，得 $b=0,\quad c=-a$，本征矢为 $\begin{pmatrix} a \\ 0 \\ -a \end{pmatrix}$，归一化后可得本征矢为 $\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$。

b. 取 $\lambda=1$，得 $b=\sqrt{2}a=\sqrt{2}c$，本征矢为 $\begin{pmatrix} a \\ \sqrt{2}a \\ a \end{pmatrix}$，归一化后可得本征矢为 $\dfrac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$。

c. 取 $\lambda=-1$，得 $b=-\sqrt{2}a=-\sqrt{2}c$，归一化后可得本征矢为 $\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}$。

在 $C_1Y_{11}=C_1\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}$ 态下， L_x 取 0 的振幅为 $C_1(1\quad 0\quad 0)\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}=C_1/\sqrt{2}$，

L_x 取 0 的几率为 $|C_1|^2/2$； L_x 取 $\hbar$ 的振幅为 $C_1(1\quad 0\quad 0)\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}=C_1/2$，

相应的几率为 $|C_1|^2/4$； L_x 取 $-\hbar$ 的振幅为 $C_1(1\quad 0\quad 0)\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\-\sqrt{2}\\1\end{pmatrix}=C_1/2$，

相应的几率为 $|C_1|^2/4$。总几率为 $|C_1|^2$。

2）L_x在$l=2$的空间、(L^2, L_z)对角化表象中的矩阵

利用

$$\langle j\ m+1|j_x|j\ m\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(j-m)(j+m+1)}$$

$$\langle j\ m-1|j_x|j\ m\rangle = \frac{1}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)}$$

所以

$\langle 2\ 2|j_x|2\ 1\rangle = 1$ ，$\langle 2\ 1|j_x|2\ 0\rangle = \sqrt{3/2}$ ，$\langle 2\ 0|j_x|2\ -1\rangle = \sqrt{3/2}$ ，

$\langle 2\ -1|j_x|2\ -2\rangle = 1$

$$L_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3/2} & 0 & \sqrt{3/2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

本征方程
$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3/2} & 0 & \sqrt{3/2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix}$$

解得

$$b=\lambda a\text{，}\quad a+\sqrt{3/2}\,c=\lambda b\text{，}\quad \sqrt{3/2}(b+d)=\lambda c\text{，}\quad \sqrt{3/2}\,c+e=\lambda d\text{，}\quad d=\lambda e\text{，}$$

$$\lambda=0,\pm 1,\pm 2$$

a. $\lambda=0$，$b=0$，$a=-\sqrt{3/2}\,c$，$d=0$，$e=-\sqrt{3/2}\,c$。归一化本征矢为 $\sqrt{\dfrac{3}{8}}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -\sqrt{2/3} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$。在 $C_2Y_{20}=C_2\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ 态下，测得 $L_x=0$ 的振幅为

$$C_2\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\sqrt{\frac{3}{8}}\begin{pmatrix}1\\0\\-\sqrt{2/3}\\0\\1\end{pmatrix}=-\frac{C_2}{2}$$，几率为$|C_2|^2/4$

b. $\lambda=1$，$b=a$，$c=0$，$d=-b$，$d=e$。归一化本征矢为$\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\0\\-1\\-1\end{pmatrix}$。

在C_2Y_{20}态下，测得$L_x=\hbar$的振幅为$C_2\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\1\\0\\-1\\-1\end{pmatrix}=0$，几率为0。

c. $\lambda=-1$，$b=-a$，$c=0$，$d=-b$，$e=-d$。归一化本征矢为 $\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-1\\-1\\0\\1\\1\end{pmatrix}$。

在 C_2Y_{20} 态下，测得 $L_x=-\hbar$ 几率为0。

d. $\lambda=2$，$b=2a$，$c=\sqrt{6}a$，$d=2e=2a$，$e=\frac{c}{\sqrt{6}}=a$。归一化本征矢为 $\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\2\\\sqrt{6}\\2\\1\end{pmatrix}$。在 C_2Y_{20} 态下，测得 $L_x=2\hbar$ 的振幅为

$$C_2\begin{pmatrix}0 & 0 & 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\2\\\sqrt{6}\\2\\1\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{6}}{4}C_2$$，几率为 $\frac{3}{8}|C_2|^2$。

e. $\lambda=-2$，$b=-2a$，$c=\sqrt{6}a$，$d=-2a$，$e=a$。归一化本征矢为

$$\frac{1}{4}\begin{pmatrix}1\\-2\\\sqrt{6}\\-2\\1\end{pmatrix}$$。在 C_2Y_{20} 态下，测得 $L_x=-2\hbar$ 的几率为 $\frac{3}{8}|C_2|^2$。

所以

$$\left(\frac{3}{8}+\frac{3}{8}+\frac{1}{4}\right)|C_2|^2=|C_2|^2$$

在 $\psi = C_1 Y_{11} + C_2 Y_{20}$ 态中，测 L_x （或 L_y ）的可能值及几率分别为：

$2\hbar$	$\hbar$	0	$-\hbar$	$-2\hbar$
$\frac{3}{8}\lvert C_2\rvert^2$	$\frac{1}{4}\lvert C_1\rvert^2$	$\frac{1}{2}\lvert C_1\rvert^2 + \frac{1}{4}\lvert C_2\rvert^2$	$\frac{1}{4}\lvert C_1\rvert^2$	$\frac{3}{8}\lvert C_2\rvert^2$

*4.33　设有矩阵 A,B,C,S 等，证明

$$\det(AB)=\det(A)\cdot\det(B),\quad \det\left(S^{-1}AS\right)=\det A$$

$$\operatorname{tr}(AB)=\operatorname{tr}(BA),\quad \operatorname{tr}\left(S^{-1}AS\right)=\operatorname{tr}A,\quad \operatorname{tr}(ABC)=\operatorname{tr}(BCA)=\operatorname{tr}(CAB)$$

$\det A$ 表示矩阵 A 相应的行列式的值，$\operatorname{tr}A$ 代表矩阵 A 的对角元素之和。

证：① 由定义 $\det A=\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)a_{1i_1}a_{2i_2}\cdots a_{ni_n}$，

$$P(i_1\cdots i_n)=\begin{cases}1, & 当(i_1\cdots i_n)是(1\cdots n)的偶置换\\ -1, & 当(i_1\cdots i_n)是(1\cdots n)的奇置换\\ 0, & 其它情形\end{cases}$$

故上式可写成

$$\det A=\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)P(j_1\cdots j_n)a_{j_1i_1}a_{j_2i_2}\cdots a_{j_ni_n}$$

其中 $(j_1\cdots j_n)$ 是 $(1\cdots n)$ 的任意一个置换。所以

$$\det C=\det(AB)=\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)C_{1i_1}C_{2i_2}\cdots C_{ni_n}$$

$$=\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)\sum_{j_1\cdots j_n}a_{1j_1}b_{j_1i_1}a_{2j_2}b_{j_2i_2}\cdots a_{nj_n}b_{j_ni_n}$$

$$=\sum_{j_1\cdots j_n}a_{1j_1}a_{2j_2}\cdots a_{nj_n}\left[\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)b_{j_1i_1}b_{j_2i_2}\cdots b_{j_ni_n}\right]$$

$$=\sum_{j_1\cdots j_n}P(j_1\cdots j_n)a_{1j_1}a_{2j_2}\cdots a_{nj_n}\left[\sum_{i_1\cdots i_n}P(i_1\cdots i_n)P(j_1\cdots j_n)b_{j_1i_1}b_{j_2i_2}\cdots b_{j_ni_n}\right]$$

$=\det A\cdot\det B$。

② $\det(S^{-1}AS)=\det S^{-1}\cdot\det A\cdot\det S=\det S^{-1}\cdot\det S\cdot\det A$

$$=\det(S^{-1}S)\cdot\det A=\det A$$

③ $$\mathrm{tr}(AB) = \sum_{ik} a_{ik} b_{ki} = \sum_{ik} b_{ki} a_{ik} = \mathrm{tr}(BA)$$

④ $$\mathrm{tr}(S^{-1}AS) = \mathrm{tr}[S^{-1}(AS)] = \mathrm{tr}[(AS)S^{-1}] = \mathrm{tr}(ASS^{-1}) = \mathrm{tr}\,A$$

⑤ $$\mathrm{tr}(ABC) = \sum_{ijk} a_{ij} b_{jk} c_{ki} = \sum_{ijk} b_{jk} c_{ki} a_{ij}$$
$$= \mathrm{tr}(BCA) = \sum_{ijk} c_{ki} a_{ij} b_{jk} = \mathrm{tr}(CAB)$$

*4.34　证明任何一个厄密矩阵能用一个幺正矩阵对角化。由此证明，两个厄密矩阵能被同一个幺正矩阵对角化的充要条件是它们相互对易。

证：① 设厄密矩阵 A 为任意的 n 阶方阵，对应本征值 $\lambda_i(i=1,2,\cdots,n)$ 的正交归一本征矢可表为

$$\begin{bmatrix} a_{1i} \\ a_{2i} \\ \vdots \\ a_{ni} \end{bmatrix}$$

本征方程

$$A\begin{bmatrix} a_{1i} \\ a_{2i} \\ \vdots \\ a_{ni} \end{bmatrix}=\lambda_i\begin{bmatrix} a_{1i} \\ a_{2i} \\ \vdots \\ a_{ni} \end{bmatrix} \tag{1}$$

首先，构造幺正矩阵U，以本征矢作为列，排成U，取A的第i个本征矢作为U的第i列元素，即

$$U_{ji} = a_{ji}, \quad i、j = 1, 2, \cdots, n \tag{2}$$

所以

$$\left(U^{+}U\right)_{\alpha\beta} = \sum_{i} U_{\alpha i}^{+} U_{i\beta} = \sum_{i} a_{\alpha i}^{+} a_{i\beta} = \delta_{\alpha\beta}$$

同理有

$$\left(UU^{+}\right)_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} \tag{3}$$

所以U为幺正矩阵。由式（2）、式（3）得

$$\left(U^{+}AU\right)_{\alpha\beta} = \sum_{i,j} U_{\alpha i}^{+} A_{ij} U_{j\beta}$$

$$= \sum_{i,j} a_{\alpha i}^{+} A_{ij} a_{j\beta} = \sum_{i} a_{\alpha i}^{+} \lambda_{\beta} a_{i\beta} = \lambda_{\beta} \delta_{\alpha\beta} \tag{4}$$

② 先证充分条件。设 A、B 可对易，且 A 能被幺正矩阵 U 对角化，

即

$$AB = BA, \qquad \left(U^{+}AU\right)_{\alpha\beta} = \lambda_{\beta}\delta_{\alpha\beta} \tag{5}$$

则由

$$U^{+}ABU = U^{+}BAU$$

可改写为

$$\left(U^{+}AU\right)\left(U^{+}BU\right) = \left(U^{+}BU\right)\left(U^{+}AU\right)$$

$$\sum_{\alpha'}\left(U^{+}AU\right)_{\alpha\alpha'}\left(U^{+}BU\right)_{\alpha'\beta} = \sum_{\beta'}\left(U^{+}BU\right)_{\alpha\beta'}\left(U^{+}AU\right)_{\beta'\beta}$$

将式（5）代入上式，得

$$\sum_{\alpha'}\lambda_{\alpha'}\delta_{\alpha\alpha'}\left(U^{+}BU\right)_{\alpha'\beta} = \sum_{\beta'}\left(U^{+}BU\right)_{\alpha\beta'}\lambda_{\beta}\delta_{\beta'\beta}$$

即

$$(\lambda_\alpha - \lambda_\beta)(U^+BU)_{\alpha\beta} = 0$$

要想 $(U^+BU)_{\alpha\beta} \neq 0$，必有 $\lambda_\alpha = \lambda_\beta$， 即 $\alpha = \beta$，亦即矩阵 (U^+BU) 只有对角元素可不为 0，非对角元素全为 0。这就证明了，矩阵 B 也被使 A 对角化的同一个幺正矩阵 U 对角化了。可表为

$$(U^+BU)_{\alpha\beta} = k_\beta \delta_{\alpha\beta}$$

再证必要条件。设 A、B 能被同一 U 对角化，即：

$$(U^+AU)_{\alpha\beta} = \lambda_\beta \delta_{\alpha\beta}, \quad (U^+BU)_{\alpha\beta} = k_\beta \delta_{\alpha\beta} \tag{6}$$

反证，令 $AB - BA = C$，则有

$$\sum_{\beta'} (U^+AU)_{\alpha\beta'} (U^+BU)_{\beta'\beta} - \sum_{\beta'} (U^+BU)_{\alpha\beta'} (U^+AU)_{\beta'\beta} = (U^+CU)_{\alpha\beta}$$

即

$$\sum_{\beta'}\lambda_{\beta''}\delta_{\alpha\beta'}k_{\beta}\delta_{\beta''\beta} - \sum_{\beta'}k_{\beta'}\delta_{\alpha\beta'}\lambda_{\beta}\delta_{\beta'\beta} = \left(U^{+}CU\right)_{\alpha\beta}$$

亦即

$$\lambda_{\beta}k_{\beta}\delta_{\alpha\beta} - k_{\beta}\lambda_{\beta}\delta_{\alpha\beta} = \left(U^{+}CU\right)_{\alpha\beta}$$

得

$$\left(U^{+}CU\right)_{\alpha\beta} = 0$$

α、β任意，故得$C=0$，即A、B对易：$\left[A,B\right]=0$，证毕。

***4.35** 从谐振子升、降算符的基本对易关系

$$\left[a,\ a^{+}\right]=1 \tag{1}$$

出发，证明

$$\mathrm{e}^{\lambda a^{+}a}\, a\, \mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}=\mathrm{e}^{-\lambda}\, a \tag{2}$$

（λ 为参数）。而对于$\lambda>0$，计算

$$T(\lambda)\equiv \mathrm{tr}\, \mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}$$

进而讨论算符$a^{+}a$的本征值谱。

解：① 将式（2）左端记为$f(\lambda)$，显然，

$$f(0)=a \tag{3}$$

视λ 为参变量，将$f(\lambda)$对λ 求导，得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda a^{+}a}\left(a^{+}a^{2}-aa^{+}a\right)\mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}=\mathrm{e}^{\lambda a^{+}a}\left[-\left(aa^{+}-a^{+}a\right)a\right]\mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}$$

$$=-\mathrm{e}^{\lambda a^{+}a}\,a\,\mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}=-f(\lambda)\tag{4}$$

其解为

$$f(\lambda)=f(0)\mathrm{e}^{-\lambda}=a\,\mathrm{e}^{-\lambda}=\mathrm{e}^{-\lambda}a$$

此即式（2）。

② 算符$a^{+}a$在任意态$|\psi\rangle$下的平均值为

$$\langle\psi|a^{+}a|\psi\rangle=\left|a|\psi\rangle\right|^{2}\geq 0$$

因此$a^{+}a$的本征值为非负实数（注意：$a^{+}a$为厄密算符！），记为$k_0, k_1, k_2, \cdots, k_n, \cdots$ 则

$$T(\lambda)=\mathrm{tr}\,\mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}=\sum_{n}\mathrm{e}^{-\lambda k_n}\tag{5}$$

另一方面，视λ为参变量，有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda)=\mathrm{tr}\left(-a^{+}a\,\mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}\right)=-\mathrm{tr}\left(a^{+}\,\mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}\,a\right)\mathrm{e}^{-\lambda}$$

$$=-\mathrm{e}^{-\lambda}\mathrm{tr}\left(aa^{+}\,\mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}\right)=-\mathrm{e}^{-\lambda}\mathrm{tr}\left[\left(1+a^{+}a\right)\mathrm{e}^{-\lambda a^{+}a}\right]$$

$$=\mathrm{e}^{-\lambda}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda)-T(\lambda)\right]$$

即

$$\left(1-\mathrm{e}^{-\lambda}\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}T(\lambda)=-\mathrm{e}^{-\lambda}\,T(\lambda)$$

即

$$\frac{\mathrm{d}T(\lambda)}{T(\lambda)}=-\frac{\mathrm{e}^{-\lambda}}{1-\mathrm{e}^{-\lambda}}\mathrm{d}\lambda=-\frac{\mathrm{d}(1-\mathrm{e}^{-\lambda})}{1-\mathrm{e}^{-\lambda}} \qquad (6)$$

积分，得

$$\ln T(\lambda) = -\ln\left(1 - \mathrm{e}^{-\lambda}\right) + \ln C$$

$$T(\lambda) = \frac{C}{1 - \mathrm{e}^{-\lambda}} \tag{7}$$

③ 式（7）中，令 $\lambda \to \infty$，得 $T(\infty) = C$。和式（5）比较，可知 $a^{+}a$ 的最小本征值 $k_0 = 0$ [否则式（5）给出 $T(\infty) = 0$]。令 $T(\infty) = 1$，则

$$C = 1 \tag{8}$$

代入式（7），得

$$T(\lambda) = \frac{1}{1 - \mathrm{e}^{-\lambda}} = 1 + \mathrm{e}^{-\lambda} + \mathrm{e}^{-2\lambda} + \mathrm{e}^{-3\lambda} + \cdots \tag{9}$$

当$\lambda \to \infty$，$e^{-\lambda} \to 0^+$。将式（5）和（9）从$e^{-\lambda}$的最低次幂开始逐项比较，可知

$$k_n = n \tag{10}$$

亦即a^+a的本征值谱为

$$0,1,2,\cdots,3,\cdots,n,\cdots \tag{11}$$

END