量子力学考研指导与习题精析

刘自信　王学雷
赖振讲　万陵德　编著

科学出版社
www.sciencep.com

内 容 简 介

本书系统总结了量子力学的重要概念和基本原理，并以解题方法为主线详细深入介绍了量子力学问题的处理方法. 全书精选了187道例题，其中大多数选自历年考研试题，它们涵盖了相关考试的基本内容. 本书的侧重点在于提高读者分析和解决各种具体的量子力学问题的能力.

本书可供报考物理类研究生的读者参考，也可作为高等院校量子力学课程的教学参考书.

图书在版编目(CIP)数据

量子力学考研指导与习题精析/刘自信等编著. —北京：科学出版社，2006

ISBN 7-03-016757-0

Ⅰ.量… Ⅱ.刘… Ⅲ.量子力学-研究生-入学考试-自学参考资料 Ⅳ.O413.1

中国版本图书馆CIP数据核字(2006) 第001089号

责任编辑：昌 盛 贾瑞娜 / 责任校对：张 琪
责任印制：张克忠 / 封面设计：科地亚盟

科学出版社出版
北京东黄城根北街16号
邮政编码：100717
http://www.sciencep.com

铭浩彩色印装有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2006年8月第 一 版 开本：B5(720×1000)
2006年8月第一次印刷 印张：15 1/4
印数：1—4 000 字数：287 000

定价：19.00元

(如有印装质量问题，我社负责调换〈环伟〉)

前　言

本书是根据作者 20 多年来讲授量子力学, 特别是为准备报考物理类研究生的高年级本科生开设的量子力学 II 所写讲稿修改补充而成的. 多年的教学经验表明, 学生要达到很好地理解和掌握量子力学的基本原理并能运用它们有效地解决问题的目的, 仅通过无指导地大量做题和看题解是相当困难的; 而对于准备报考物理类研究生的在校本科生, 尽管他们已学过量子力学, 但要在相当短的时间内做好考研准备, 如果仍采用大量做题或看题解的方法, 不仅时间不允许, 而且效果也很差. 有鉴于此, 我们觉得, 学生迫切需要的是一本既有对量子力学的基本理论进行分析, 又有对灵活运用基本原理解题特别是解题方法加以指导的书, 以此弥补现有教材和题解因各自分工所带来的缺陷, 填补两者之间的空隙. 本书就是我们在这方面所进行的探讨和实践的一个总结, 它不同于通常的教材和学习指导书, 也有别于现有的题解.

在本书中, 我们以解题方法为主线将量子力学基本内容分成 8 个部分. 在每一部分中首先系统总结相关的重要概念、基本原理; 然后讨论解题方法, 通过精选的问题具体说明如何根据这些方法来运用量子力学基本理论. 全书共 187 道例题, 每章还配备了少量的练习题. 例题少而精, 涵盖了量子力学的基本内容并适当有所提高. 对于正在学量子力学的学生而言, 通过方法与例题的有机结合, 可加深对所学内容的理解; 对准备考研的学生而言, 这样能避免由于题型太多重复而浪费时间. 同时由于侧重于解题方法的讨论, 也使得学生容易举一反三, 提高解决各种具体问题的能力. 多年的教学实践表明这种方法是行之有效的.

本书第 1 章介绍了量子力学的数学工具, 即态矢量、算符和表象等, 特别是系统讲解了算符运算的一些重要方法. 第 2 章介绍量子力学的原理和一些基本概念, 对学生学习中常出现的理解错误进行了分析讨论. 第 3 章比较深入地讨论了角动量 (包括自旋) 相关的问题. 第 4 章介绍了量子力学中的可精确求解的问题和相应的求解方法. 第 5 章和第 6 章分别讨论定态微扰论和变分法. 第 7 章和第 8 章分别是量子跃迁和弹性散射. 我们略去了历年考试中很少见的 WKB 近似方法的介绍. 本书大部分例题取自历年的研究生考题, 它们在某种程度上也反映了对量子力学教学的基本要求. 少量例题是配合方法的介绍和分析而自编的. 读者不难发现, 本书中有不少未见诸其他教材或题解的新内容、新方法, 它们是作者多年从事教学研究的成果.

本书可以作为教学辅助材料配合课堂教学使用, 更是考研学生自学复习的必备参考书. 书中标有“*”符号的有关章节可供深入学习或报考理论物理类研究生的读

者参考.

南京大学物理系柯善哲教授和鞠国兴教授对本书提出了许多宝贵意见, 我们对他们的支持和帮助表示真诚的感谢.

由于作者水平有限, 不妥之处敬请读者指正.

作　者

目　录

第 1 章　量子力学的数学工具

1.1　态 矢 量

1.1.1　基本概念

描述物理体系状态的态矢量 (简称态矢或右矢) 构成一个特殊的矢量空间, 称为态空间. 态空间 $\mathcal{E}$ 也是希尔伯特 (Hilbert) 空间, 在其上定义了任意两个矢量 $|\,\psi\rangle$ 与 $|\,\chi\rangle$ 之间的标积 $\langle\chi\,|\,\psi\rangle$, 标积是满足如下关系的复数:

$$\langle\chi\,|\,\psi\rangle = \langle\psi\,|\,\chi\rangle^*$$
$$\langle\chi\,|\,\phi+\psi\rangle = \langle\chi\,|\,\phi\rangle + \langle\chi\,|\,\psi\rangle$$
$$\langle\chi\,|\,\lambda\psi\rangle = \lambda\,\langle\chi\,|\,\psi\rangle$$
$$\langle\psi\,|\,\psi\rangle\text{是非负实数, 当且仅当 }|\,\psi\rangle = 0\text{ 时才为零}$$

其中, λ 是任意复数, $\langle\chi\,|$ 是和右矢 $|\,\chi\rangle$ 厄米 (Hermite) 共轭的左矢: $\langle\chi\,|\equiv(\,|\,\chi\rangle\,)^\dagger$, $|\,\chi\rangle\equiv(\,\langle\chi\,|\,)^\dagger$. $|\,\phi+\psi\rangle\equiv|\,\phi\rangle+|\,\psi\rangle$, $|\,\lambda\psi\rangle\equiv\lambda\,|\,\psi\rangle$.

在进行态矢的一般运算时, 除了矢量空间的基本性质外, 常常利用态矢的标积来把矢量的运算转化为数的运算或把左矢的运算转化为右矢的运算.

1.1.2　例题: 态矢量的性质和运算

例 1.1　仅从矢量空间的角度来看, 态矢应具有哪些基本性质? 求证

$$|\,\lambda_1\phi_1+\lambda_2\phi_2\rangle^\dagger = \lambda_1^*\,\langle\phi_1\,|+\lambda_2^*\,\langle\phi_2\,|$$

解　(1) 作为矢量空间的元素, 态矢应满足如下关系:

1°　$|\,\psi\rangle+|\,\phi\rangle=|\,\phi\rangle+|\,\psi\rangle$;

2°　$|\,\psi\rangle+(\,|\,\phi\rangle+|\,\chi\rangle\,)=(\,|\,\psi\rangle+|\,\phi\rangle\,)+\,|\,\chi\rangle$;

3°　存在唯一的矢量 0, 使得对于任何态矢 $|\,\psi\rangle$, 都有

$$|\,\psi\rangle+0=|\,\psi\rangle$$

4°　若 λ 为任意复数, 则 $\lambda(\,|\,\psi\rangle+|\,\phi\rangle\,)=\lambda\,|\,\psi\rangle+\lambda\,|\,\phi\rangle$;

5°　$(\lambda_1+\lambda_2)\,|\,\psi\rangle=\lambda_1\,|\,\psi\rangle+\lambda_2\,|\,\psi\rangle$;

6°　$\lambda_1(\,\lambda_2\,|\,\psi\rangle)=(\lambda_1\lambda_2)\,|\,\psi\rangle$;

7°　$1\,|\,\psi\rangle=|\,\psi\rangle$;

8°　$0\,|\,\psi\rangle=0$.

(2) 因对任意态矢 $|\psi\rangle$, 我们有

$$
\begin{aligned}
&\langle\lambda_1\phi_1+\lambda_2\phi_2 \mid \psi\rangle = \langle\psi \mid \lambda_1\phi_1+\lambda_2\phi_2\rangle^* \\
&=(\lambda_1\langle\psi \mid \phi_1\rangle+\lambda_2\langle\psi \mid \phi_2\rangle)^*=\lambda_1^*\langle\psi \mid \phi_1\rangle^*+\lambda_2^*\langle\psi \mid \phi_2\rangle^* \\
&=\lambda_1^*\langle\phi_1 \mid \psi\rangle+\lambda_2^*\langle\phi_2 \mid \psi\rangle=(\lambda_1^*\langle\phi_1|+\lambda_2^*\langle\phi_2|)\,|\psi\rangle
\end{aligned}
$$

故

$$\langle\lambda_1\phi_1+\lambda_2\phi_2| \equiv |\lambda_1\phi_1+\lambda_2\phi_2\rangle^\dagger=\lambda_1^*\langle\phi_1|+\lambda_2^*\langle\phi_2|$$

例 1.2　求右矢 $\lambda|u\rangle\langle v|w\rangle$ 及算符 $\lambda\langle u|\hat{A}|v\rangle|w\rangle\langle\psi|$ 的厄米共轭.

解　注意到下述对偶法则是方便的：为了得到一个由常数、右矢、左矢和算符组成的表达式的厄米共轭式, 可用

$$\left.\begin{array}{l}\text{共轭复数}\\ \text{对应的右矢}\\ \text{对应的左矢}\\ \text{对应的厄米共轭算符}\end{array}\right\}\text{去代替原表达式中的}\left\{\begin{array}{l}\text{常数}\\ \text{左矢}\\ \text{右矢}\\ \text{算符}\end{array}\right.$$

并且要反转因子的次序 (只有常数因子的次序才无关紧要).

故本题中, 它们的厄米共轭应分别为

$$\lambda^*\langle w|v\rangle\langle u|$$
$$\lambda^*\ |\psi\rangle\langle w|\ \langle v|\hat{A}^\dagger|u\rangle$$

例 1.3　若 $|\phi_1\rangle$ 和 $|\phi_2\rangle$ 是态空间 $\mathcal{E}$ 中任意二个矢量, 求证 $|\langle\phi_1|\phi_2\rangle|^2\leqslant\langle\phi_1|\phi_1\rangle\langle\phi_2|\phi_2\rangle$, 当且仅当 $|\phi_1\rangle$ 与 $|\phi_2\rangle$ 成比例时, 等号成立.

证明　令 $|\psi\rangle=|\phi_1\rangle+\lambda\,|\phi_2\rangle$, 则

$$0\leqslant\langle\psi|\psi\rangle=\langle\phi_1|\phi_1\rangle+\lambda\langle\phi_1|\phi_2\rangle+\lambda^*\langle\phi_2|\phi_1\rangle+\lambda\lambda^*\langle\phi_2|\phi_2\rangle$$

取 $\lambda=-\langle\phi_2|\phi_1\rangle/\langle\phi_2|\phi_2\rangle$, 代入上式得

$$\langle\phi_1|\phi_1\rangle-\frac{\langle\phi_1|\phi_2\rangle\langle\phi_2|\phi_1\rangle}{\langle\phi_2|\phi_2\rangle}\geqslant 0$$

故

$$|\langle\phi_1|\phi_2\rangle|^2\leqslant\langle\phi_1|\phi_1\rangle\langle\phi_2|\phi_2\rangle$$

由上面知, 当且仅当 $\langle\psi|\psi\rangle=0$ 时, 不等式中的等号成立, 而这充要条件等价于 $|\psi\rangle=0$, 即 $|\phi_1\rangle=-\lambda|\phi_2\rangle$.

1.2 态空间上的算符

1.2.1 基本概念

任何运算符号 $\hat{A}$, 若能将态空间 $\mathcal{E}$ 上的每一个右矢 $|\psi\rangle$ 与该空间中的另一个右矢 $|\phi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$ 联系起来, 则 $\hat{A}$ 称为 $\mathcal{E}$ 上的算符.

$\mathcal{E}$ 上的算符 $\hat{A}$ 称为线性算符, 如果对任意两个右矢 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 以及任意复数 λ_1 和 λ_2 有

$$\hat{A}\left(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle\right) = \lambda_1\hat{A}|\psi_1\rangle + \lambda_2\hat{A}|\psi_2\rangle$$

作用于左矢 $\langle\phi|$ 上的算符定义为

$$\left(\langle\phi|\hat{A}\right)|\psi\rangle = \langle\phi|\left(\hat{A}|\psi\rangle\right) \equiv \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle$$

下面给出线性算符的一些基本运算和定义:

算符的和 $(\hat{A}+\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}|\psi\rangle + \hat{B}|\psi\rangle$

算符的积 $(\hat{A}\hat{B})|\psi\rangle = \hat{A}\,(\hat{B}|\psi\rangle)$

对易子 $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

$\hat{A}$ 的厄米共轭算符 $\hat{A}^\dagger$ $\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^*$

厄米算符 $\hat{A}$ $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$

逆算符 $\hat{A}^{-1}$ (若存在的话) $\hat{A}\hat{A}^{-1} = \hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{1}$

幺正算符 $\hat{U}$ $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{1}$

算符 $\hat{A}$ 的函数 $F(\hat{A})$ 若变数 z 的函数 $F(z)$, 能在一定的定义域中展成 z 的幂级数

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n$$

则可定义 (若有意义的话) $F(\hat{A})$ 为

$$F(\hat{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n \hat{A}^n$$

例 1.4 已知 $\hat{L}_z = \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$, 其中方位角 φ 满足 $-\infty \leqslant \varphi \leqslant \infty$. 显然

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

等号两边在 $\hat{L}_z$ 的归一化本征函数 $\varPhi_m(\varphi) = \sqrt{\dfrac{1}{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$ 中求矩阵元

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\varphi}\left(\varphi\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\varphi}\varphi\right)\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} = \mathrm{i}\hbar\delta_{m'm}$$

等号左边第一项

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\varphi} \varphi \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial\varphi} \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} = m\hbar \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \frac{1}{2\pi} \varphi \mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-m')\varphi}$$

因为 $\hat{L}_z$ 是厄米算符, 满足

$$\int \psi^* \hat{L}_z \chi \mathrm{d}\varphi = \int (\hat{L}_z \psi)^* \chi \mathrm{d}\varphi$$

所以等号左边第二项

$$\begin{aligned} &\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\varphi} \left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right) \frac{\partial}{\partial\varphi} \varphi \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \\ =& -\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \cdot \frac{\partial}{\partial\varphi} \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m'\varphi}\right)^* \varphi \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \\ =& -m'\hbar \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\varphi} \varphi \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \end{aligned}$$

因此等式成为

$$(m-m')\hbar \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m'\varphi} \varphi \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} = \mathrm{i}\hbar\delta_{m'm}$$

如果 $m = m'$, 则导致 $0 = \mathrm{i}\hbar$ 这一荒谬结论. 请对以上运算作出评论.

解　以上运算中, 错误地运用了厄米算符的定义式, 从而使得等号左边第二项中的运算产生了错误的结果. 事实上, 在关系式

$$\int \mathrm{d}\varphi \psi^* \hat{L}_z \chi = \int \mathrm{d}\varphi (\hat{L}_z \psi)^* \chi \tag{1.2.1}$$

中, 波函数 ψ, χ 必须满足恰当的边界条件, 如波函数在无穷远处为零的无穷远边界条件 (以使得波函数平方可积), 或者满足周期性边界条件等, 使得

$$\psi^* \chi \,\Big|_0^{2\pi} = 0$$

才能保证 $\hat{L}_z$ 的厄米性. 然而, 本题中的波函数并不满足恰当边界条件, 从而不能在第二项中运用式 (1.2.1).

1.2.2　算符运算方法

在证明或推导算符关系式时, 除了要掌握各有关算符的意义和性质外, 还应了解一些基本的算符运算方法. 最常用的方法有直接法、作用法、参数微分法、积分

变换法、待定系数法以及表象法. 我们在下面的例题中将分类阐述. 注意许多可观测量都能表达成算符 $\hat{\boldsymbol{r}},\hat{\boldsymbol{p}}$ 的函数, 因而经常使用正则对易关系式

$$\begin{aligned}
&[\hat{r}_i,\hat{r}_j]=0\\
&[\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0 \qquad (i,j=1,2,3)\\
&[\hat{r}_i,\hat{p}_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}
\end{aligned}$$

以及对易子代数中的如下一些重要关系:

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

1.2.3 例题: 直接法

在**直接法**中, 算符无须作用于右矢或波函数上, 而是直接利用算符的定义、性质、已知的对易关系、对易子代数等来进行运算.

例 1.5 求证

$$\hat{L}^2\hat{p}_i-\hat{p}_i\hat{L}^2=\mathrm{i}\hbar\{(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})_i-(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_i\}$$

证明 以下我们采用重复指标自动求和的规约. 并利用符号

$$\varepsilon_{ijk}=\begin{cases}1, & 若\ (ijk)\ 是\ (123)\ 的偶置换\\ -1, & 若\ (ijk)\ 是\ (123)\ 的奇置换\\ 0, & 若有两个指标相同\end{cases}$$

首先有

$$\begin{aligned}
[\hat{L}_\alpha,\hat{p}_\beta]&=[(\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_\alpha,\hat{p}_\beta]\\
&=[\varepsilon_{\alpha\mu\nu}\hat{r}_\mu\hat{p}_\nu,\hat{p}_\beta]=\varepsilon_{\alpha\mu\nu}[\hat{r}_\mu,\hat{p}_\beta]\hat{p}_\nu\\
&=\varepsilon_{\alpha\mu\nu}\mathrm{i}\hbar\delta_{\mu\beta}\hat{p}_\nu=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\nu}\hat{p}_\nu
\end{aligned}$$

利用上式, 知

$$\begin{aligned}
\hat{L}^2\hat{p}_i-\hat{p}_i\hat{L}^2&=[\hat{L}^2,\hat{p}_i]=[\hat{L}_k\hat{L}_k,\hat{p}_i]\\
&=\hat{L}_k[\hat{L}_k,\hat{p}_i]+[\hat{L}_k,\hat{p}_i]\hat{L}_k=\hat{L}_k\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}\hat{p}_j+\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{kij}\hat{p}_j\hat{L}_k\\
&=\mathrm{i}\hbar(-\varepsilon_{ikj}\hat{L}_k\hat{p}_j+\varepsilon_{ijk}\hat{p}_j\hat{L}_k)=\mathrm{i}\hbar\{(\hat{\boldsymbol{p}}\times\hat{\boldsymbol{L}})_i-(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}})_i\}
\end{aligned}$$

例 1.6　用直接法求证

$$e^{-\frac{i}{2}\alpha \boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \cos\frac{\alpha}{2} - i\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\sin\frac{\alpha}{2}$$

其中 $\boldsymbol{u}$ 是和 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 对易的单位矢量, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 是泡利 (Pauli) 算符.

证明　注意到泡利矩阵有如下性质:

$$\sigma_j\sigma_k = i\varepsilon_{jkl}\sigma_l + \delta_{jk}$$

又因为

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{u})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{u}) &= \hat{\sigma}_j u_j\hat{\sigma}_k u_k = u_j u_k(i\varepsilon_{jkl}\hat{\sigma}_l + \delta_{jk})\\ &= i\hat{\sigma}_l(u_j u_k\varepsilon_{jkl}) + u_j u_j = \boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{u} + i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\boldsymbol{u}\times\boldsymbol{u}) = 1\end{aligned}$$

所以有

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{u})^n = \begin{cases}1, & \text{当 } n \text{ 是偶数时}\\ \hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{u}, & \text{当 } n \text{ 是奇数时}\end{cases}$$

故

$$\begin{aligned}e^{-i\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-i\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)^n\\ &= \sum_{\text{偶数}n}\frac{1}{n!}\left(-i\frac{\alpha}{2}\right)^n + \boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\sum_{\text{奇数}n}\frac{1}{n!}\left(-i\frac{\alpha}{2}\right)^n\\ &= \cos\frac{\alpha}{2} - i\sin\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\end{aligned}$$

例 1.7　用数学归纳法证明

$$[\hat{A},\hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]$$

其中 $\hat{B}$ 与 $[\hat{A},\hat{B}]$ 对易.

证明　当 $n=1$ 时, 原式显然成立. 设 $n=k$ 时原式成立, 即有

$$[\hat{A},\hat{B}^k] = k\hat{B}^{k-1}[\hat{A},\hat{B}]$$

则当 $n=k+1$ 时

$$\begin{aligned}[\hat{A},\hat{B}^{k+1}] &= \hat{B}^k[\hat{A},\hat{B}] + [\hat{A},\hat{B}^k]\hat{B}\\ &= \hat{B}^k[\hat{A},\hat{B}] + k\hat{B}^{k-1}[\hat{A},\hat{B}]\hat{B} = (k+1)\hat{B}^k[\hat{A},\hat{B}]\end{aligned}$$

原式也成立. 故原式对任何自然数 n 均成立.

1.2.4 例题：作用法

作用法是将算符或算符函数作用到态矢 (或波函数, 甚至左矢) 上, 用以形成新的态矢或形成矩阵元, 从而把算符运算转换成矢量或数的运算 (注意：算符作用于其上的态矢必须是任意的, 或者至少是任意的基矢).

例 1.8 求证 $(|u\rangle\langle v|)^\dagger = |v\rangle\langle u|$.

证明 取两个任意的态矢 $|\phi\rangle, |\psi\rangle$, 构成如下矩阵元：

$$\begin{aligned}\langle\psi|(|u\rangle\langle v|)^\dagger|\phi\rangle &= \langle\phi|(|u\rangle\langle v|)|\psi\rangle^* \\ &= \langle\phi|u\rangle^*\langle v|\psi\rangle^* = \langle\psi|v\rangle\langle u|\phi\rangle = \langle\psi|(|v\rangle\langle u|)|\phi\rangle\end{aligned}$$

由于 $|\phi\rangle, |\psi\rangle$ 的任意性知

$$(|u\rangle\langle v|)^\dagger = |v\rangle\langle u|$$

例 1.9 设 $\hat{A} = |\phi\rangle\langle\psi|$, 问在什么条件下 $\hat{A}$ 是厄米算符?

解 今用把算符运算转换成矢量运算的方法, 因

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle\langle\psi|\psi\rangle$$

若 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger = |\psi\rangle\langle\phi|$, 则 $\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = |\psi\rangle\langle\phi|\psi\rangle$, 所以

$$|\phi\rangle = \frac{\langle\phi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}|\psi\rangle \equiv c|\psi\rangle$$

把上式代入 $|\phi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\phi|$ 得, $c|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi|c^*$, 故 c 为实数. 这样, 我们得知, 若 $\hat{A} = |\phi\rangle\langle\psi|$, 则只有在 $|\phi\rangle = c|\psi\rangle$, 且

$$c = \frac{\langle\phi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

为实数时, $\hat{A}$ 为厄米算符.

例 1.10 求证

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, x\right] = 1$$

证明 取任意波函数 $\psi(x)$, 则

$$\begin{aligned}\left[\frac{\partial}{\partial x}, x\right]\psi(x) &= \left(\frac{\partial}{\partial x}x - x\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x) \\ &= \frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x)) - x\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} = \psi(x)\end{aligned}$$

由于 $\psi(x)$ 的任意性, 故有

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, x\right] = 1$$

(类似可证明更一般的关系式 $[\nabla, f(\boldsymbol{r})] = \nabla f(\boldsymbol{r})$. 注意, 在该式两边均会出现符号 $\nabla f(\boldsymbol{r})$, 必须正确理解它们各自不同的含义, 在左边它代表两个算符 ∇ 和 $f(\boldsymbol{r})$ 的乘积, 而在右边它代表函数 $f(\boldsymbol{r})$ 的梯度.)

例 1.11 用作用法证明

$$\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha \boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \cos\frac{\alpha}{2} - \mathrm{i}\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\sin\frac{\alpha}{2}$$

证明 因为 $\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 是厄米算符, 且 $(\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 = 1$ (参见例 1.6), 所以 $\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 有两个线性无关的本征矢量, 设为 $|\phi_+\rangle, |\phi_-\rangle$

$$(\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\,|\phi_+\rangle = |\phi_+\rangle, \qquad (\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\,|\phi_-\rangle = -\,|\phi_-\rangle$$

因而有

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}\,|\phi_\pm\rangle &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\alpha}{2}(\pm1)}\,|\phi_\pm\rangle \\ &= \left(\cos\frac{\alpha}{2} \mp \mathrm{i}\sin\frac{\alpha}{2}\right)|\phi_\pm\rangle \\ &= \left(\cos\frac{\alpha}{2} - \mathrm{i}\sin\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\right)|\phi_\pm\rangle\end{aligned}$$

由于 $|\phi_+\rangle, |\phi_-\rangle$ 构成了二维自旋空间的基底, 所以

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}} = \cos\frac{\alpha}{2} - \mathrm{i}\sin\frac{\alpha}{2}\boldsymbol{u}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$$

1.2.5 例题: 参数微分法

参数微分法的要点是在所涉及的算符表达式中引入参数, 例如 t, 通过对 t 求导 (或微分), 可得一系列所需要的关系式, 最后令 $t = 1$, 即可得到原算符表达式所满足的一系列关系式. 也可以通过对引入的同一参数的求导, 去证明原算符等式的两端均满足有相同初值条件的同一微分方程. 这里, 算符 $\hat{A}(t)$ 对参变量 t 的导数被定义为

$$\frac{\mathrm{d}\hat{A}(t)}{\mathrm{d}t} = \lim_{\Delta t\to 0}\frac{\hat{A}(t+\Delta t) - \hat{A}(t)}{\Delta t}$$

且有如下的算符求导法则:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{A}+\hat{B}) = \frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}t}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\hat{A}\hat{B}) = \frac{\mathrm{d}\hat{A}}{\mathrm{d}t}\hat{B} + \hat{A}\frac{\mathrm{d}\hat{B}}{\mathrm{d}t}$$

注意上式中因子的次序不能随意改动 (如对下式两端求导

$$\hat{A}(\lambda)\hat{A}^{-1}(\lambda) = 1$$