研究生入学考试物理试题精选详解

（下）

量子力学
电动力学
固体物理
热力学与统计
物　理
金属物理与晶体
X射线学

吉林科学技术出版社

目　　录

第六部分　量子力学

一、算符与力学量

1．试述线性厄米算符本征值与本征函数所具有的性质。为什么可观测量要用线性厄米算符描写？　　（北京大学　1979年）

答：厄米算符$\hat{A}$的定义是：

$$\int d^3x\varphi^*(x)\ \hat{A}\psi(x)=\int d^3x(\hat{A}\varphi)^*\psi(x) \tag{1}$$

其中$\varphi(x)$、$\psi(x)$是所有变量x的任意（平方可积）波函数。由于算符厄米性是用线性运算的积分算符来定义的，所以厄米算符一定是线性的。

厄米算符的本征值与本征函数有如下性质。

（1）厄米算符的本征值是实数。证明如下：

设厄米算符$\hat{A}$的本征方程为：

$$\hat{A}\varphi_n=a_n\varphi_n \tag{2}$$

取其复数共轭，有

$$\hat{A}^*\varphi_n^*=a_n^*\varphi_n^* \tag{3}$$

假定本征函数φ_n已归一化，即$\int d^3x\varphi_n^*\varphi_n=1$。用$\int d^3x\varphi_n^*$作用（2）式两边，得：$\int d^3x\varphi_n^*\hat{A}\varphi_n=a_n$；用$\int d^3x\varphi_n$作用（3）式两边得：$\int d^3x\varphi_n\hat{A}^*\varphi_n^*=a_n^*$。由$\hat{A}$的厄米性可知：$\int d^3x\varphi_n^*\hat{A}\varphi_n^*=\int d^3x\varphi_n\ \hat{A}^*\varphi_n$，所以$a_n=a_n^*$。

实际上，厄米算符$\hat{A}$在任意态$\varphi(x)$上的平均值也是实数。因为：

$$\overline{A}=\int d^3x\varphi^*(x)\ \hat{A}\varphi(x)=\int d^3x\varphi(x)\ (\hat{A}\varphi)^*$$

$$=\left\{\int d^3x\varphi^*(x)\ \hat{A}\varphi(x)\right\}^*=\overline{A}^*$$

所以厄米算符$\hat{A}$在其本征态$\varphi_n(x)$上的平均值$\overline{A}=a_n$。因此，厄米算符的“本征态”就是厄米算符取确定值——实本征值的态。

（2）厄米算符相应不同本征值的本征函数彼此正交。因为：$\int d^3x\varphi_m^*\hat{A}\varphi_n=a_n\int d^3x\varphi_m^*\varphi_n$，$\int d^3x\varphi_n(\hat{A}\varphi_m)^*=a_m\int d^3x\varphi_m^*\varphi_n$，所以$(a_n-a_m)\int d^3x\varphi_m^*\varphi_n=0$。当$a_n\neq$

a_m时，$\int d^3x\varphi_m^*\varphi_n = 0$，$\varphi_m$与$\varphi_n$正交。

量子力学中，通常都对所有本征函数实施“正交、归一化”手续，使其成为态空间的基底。一般而言，还假定厄米算符的本征函数集合是完备的，即假定对任意波函数均有如下唯一的展式：

$$\psi(x) = \sum_n c_n\varphi_n(x), \qquad c_n = \int d^3x\varphi_n^*(x)\,\psi(x)$$

还可用“封闭关系”表示其本征矢$|\varphi_n\rangle$的完备性：

$$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1$$

由于厄米算符的平均值和本征值都是实数，所以它可用来描述只取实数的可观测量。因此，量子力学中假设：力学量的一个可观测值对应着相应厄米算符的一个本征值；力学量的所有可能取值就是相应厄米算符的本征值谱。

2．证明：

（1）若线性厄米算符$\hat{A}$没有负的本征值，则对任意波函数ψ，$\overline{A} \equiv \int dx\psi^*\hat{A}\psi \geqslant 0$，反之亦然。

（2）若$\hat{A}$和$\hat{B}$均为线性厄米算符，则$\hat{A}^2 + \hat{B}^2$也是线性厄米算符且无负的本征值。

（吉林大学　1981年）

证明　（1）设$\hat{A}$的本征函数集合$\{\varphi_n\}$是正交、归一的，

$$\hat{A}\varphi_n = a_n\varphi_n, \qquad \int dx\varphi_m^*\varphi_n = \delta_{mn}$$

其完备性假设指出有唯一的展式：

$$\psi = \sum_n c_n\varphi_n$$

即有唯一的一组系数$\{c_n\}$。

$$\overline{A} = \sum_{n,m} c_m^*\,c_n\int dx\varphi_m^*\,\hat{A}\varphi_n$$

$$= \sum_{m,n} a_n c_m^* c_n\delta_{nm} = \sum_n a_n|c_n|^2$$

因为$|c_n|^2$对一切n都是非负的，且a_n按假定也是非负的，所以

$$\overline{A} = \int dx\psi^*\,\hat{A}\psi \geqslant 0$$

反之，如果对于任意ψ，即对任意c_n

$$\overline{A} = \sum_n a_n|c_n|^2 \geqslant 0$$

因为任意$|c_n|^2$对一切n是非负的，所以a_n对一切n也是非负的。否则，如果$a_k < 0$，对特定的$\{c_n\}$，$\overline{A} < 0$，与题设矛盾。

由此可见，如果厄米算符在任意态上的平均值都是非负的，则其本征值也是非负的。

按线性算符$\hat{A}$的厄米性定义：

$$\int d^3x\varphi^* \hat{A}\psi = \int d^3x\,\psi\,\hat{A}^*\varphi^*$$

$$= \int d^3x\varphi^* \tilde{\hat{A}}^*\psi \qquad (\tilde{\hat{A}}\text{表示}\hat{A}\text{的转置})$$

$$= \int d^3x\varphi^* \hat{A}^+\psi$$

即$\hat{A}=\hat{A}^+$，所以厄米算符又称自共轭算符。

共轭运算规则有：

$$(\hat{G}+\hat{F})^+ = \hat{G}^+ + \hat{F}^+ \tag{1}$$

$$(\hat{G}\hat{F})^+ = \hat{F}^+\hat{G}^+ \tag{2}$$

$$(c\hat{F})^+ = c^*\hat{F}^+ \qquad (c\text{为常数}) \tag{3}$$

由（2）式可知，厄米算符的任意次幂仍然是厄米算符，因为，例如：

$$(\hat{A}^2)^+ = (\hat{A}\hat{A})^+ = \hat{A}^+\hat{A}^+ = \hat{A}^2$$

所以$\hat{A}^2$与$\hat{B}^2$均为厄米算符。再由（1）可知（$\hat{A}^2+\hat{B}^2$）也是厄米的。

现设（$\hat{A}^2+\hat{B}^2$）相应本征值d_n的本征函数为ψ_n，即有：

$$(\hat{A}^2+\hat{B}^2)\psi_n = d_n\psi_n$$

因为 $(\hat{A}^2+\hat{B}^2)\psi_n = \hat{A}^2\psi_n + \hat{B}^2\psi_n = a_n^2\psi_n + b_n^2\psi_n = (a_n^2+b_n^2)\psi_n$

所以 $d_n = a_n^2 + b_n^2 \geqslant 0$ （因为a_n、b_n均为实数）

其中ψ_n只要是$\hat{A}$相应本征值a_n的本征函数φ_n^a与$\hat{B}$相应本征值b_n的本征函数φ_n^b之积即可。

3．证明：任意算符$\hat{F}$总可以写作$\hat{F}=\hat{A}+i\hat{B}$。式中$\hat{A}$与$\hat{B}$是厄米算符。若算符$\hat{G}$是厄米算符，问在什么条件下$\hat{G}^2$是厄米算符？ （天津大学 1985年）

证明：对任意线性算符$\hat{F}$，总有恒等式：

$$\hat{F} = \frac{1}{2}(\hat{F}+\hat{F}^+) + \frac{1}{2}(\hat{F}-\hat{F}^+)$$

成立；若假定$\hat{F}=\hat{A}+i\hat{B}$，则有：

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

而 $\hat{A}^+ = \frac{1}{2}(\hat{F}^+ + \hat{F}) = \hat{A}$ $\qquad \hat{B}^+ = \frac{-1}{2i}(\hat{F}^+ - \hat{F}) = \frac{1}{2i}(\hat{F} - \hat{F}^+) = \hat{B}$

即 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 均是厄米的。

由上述命题可知，对任意线性非厄米算符 $\hat{G}$ 总可分解为：$\hat{G} = \hat{A} + i\hat{B}$，其中 $\hat{A} = \frac{1}{2}(\hat{G} + \hat{G}^+)$ 和 $\hat{B} = \frac{1}{2i}(\hat{G} - \hat{G}^+)$ 都是厄米算符。而

$$\hat{G}^2 = \hat{A}^2 - \hat{B}^2 + i(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$$

因为 $(\hat{A}^2 - \hat{B}^2)^+ = \hat{A}^2 - \hat{B}^2$ $\qquad (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})^+ = (\hat{B}^+\hat{A}^+ + \hat{A}^+\hat{B}^+) = (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$

但 $i(\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})$ 不是厄米算符，因此只有在 $\hat{G} = \hat{A} + i\hat{B}$ 中的 $\hat{A}$ 与 $\hat{B}$ 反交换，即 $\hat{A}\hat{B} = -\hat{B}\hat{A}$ 时 $\hat{G}^2$ 才是厄米算符。这里要明确 $\hat{G}$ 首先应是线性算符，否则谈不上怎样才能成为厄米算符。

4. 求 $\hat{P}_x + \alpha\hat{x}$ 的本征函数。其中 α 为有量纲的常数，$\hat{P}_x$ 和 $\hat{x}$ 分别是一维（x）空间的动量和位置算符。 （北京大学　1984年）

解： 这是个求厄米算符本征函数的问题。

在坐标表示下，厄米算符（$\hat{P}_x + \alpha\hat{x}$）的本征方程为：

$$\left(-i\hbar \frac{d}{dx} + \alpha x\right)\varphi_\lambda(x) = \lambda\varphi_\lambda(x)$$

即
$$\frac{d\varphi_\lambda}{dx} = \frac{-i\alpha}{\hbar}\left(x - \frac{\lambda}{\alpha}\right)\varphi_\lambda(x)$$

积分上式得：

$$\varphi_\lambda(x) = A_\lambda e^{-\frac{i\alpha}{\hbar}\left(\frac{x^2}{2} - \frac{\lambda}{\alpha}x\right)}$$

其中 A_λ 是与 x 无关的常数。因为本征值 λ 不受限制，可连续取值，从而 $\varphi_\lambda(x)$ 是不能"归一"的，但可"规格化"为 δ – 函数。

$$\delta(\lambda - \lambda') = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_\lambda^*(x)\varphi_{\lambda'}(x) = A_\lambda^* A_{\lambda'} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{i(\lambda' - \lambda)\frac{x}{\hbar}}$$
$$= A_\lambda^* A_{\lambda'}(2\pi\hbar)\delta(\lambda' - \lambda) = |A_\lambda|^2(2\pi\hbar)\delta(\lambda' - \lambda)$$

即
$$A_\lambda = 1/\sqrt{2\pi\hbar}, \quad \varphi_\lambda(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i\alpha}{\hbar}\left(\frac{x^2}{2} - \frac{\lambda}{\alpha}x\right)}$$

5. 求下列算符的本征值和本征函数：

（1）$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}$；　　（2）$-\frac{d^2}{dx^2}$，已知 $x = 0, l$ 时 $\varphi(x) = 0$。（辽宁大学　1985年）

解： 由于量子力学的数学基础是线性矢量空间理论，算符是定义在一定的线性空间中

的，所以厄米算符在给定空间中表现为一个（方）矩阵。因此，量子力学中的本征值问题就有算符和矩阵两种形式，它们构成了量子力学中最基本的问题。为把矩阵形式的本征值问题说透，我们将补充一个例子（见题6）。

先回答（2）。厄米算符 $-\frac{d^2}{dx^2}=\left(i\frac{d}{dx}\right)\left(i\frac{d}{dx}\right)$，是厄米算符$\left(-i\frac{d}{dx}\right)$的平方，其本征值$E$是非负的（见题2），其本征方程为：

$$-\frac{d^2}{dx^2}\varphi_E(x)=E\varphi_E(x)$$

令　　　　$E=k^2$,

则有　　　　　　$\varphi_E''+k^2\varphi_E=0$

其基本解为$e^{\pm ikx}$或$\sin kx$与$\cos kx$。

一般解可写为：

$$\psi_E(x)=A\sin(kx+\delta)$$

当$x=0$时，$\psi_E(0)=A\sin\delta=0$，选$\delta=0$，则

$$\psi_E(x)=A\sin kx$$

当$x=l$时，$\psi_E(l)=A\sin kl=0$，所以

$$kl=n\pi,\qquad n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

（n不取0，因为$n=0$时$\psi_E(x)\equiv 0$，不是波函数；n不取负整数，因为取负整数时给出的波函数与n取正整数时的波函数线性相关，描述同一状态。）从而算符$-\frac{d^2}{dx^2}$在条件：$x=0$，l时$\varphi(x)=0$之下的本征值和本征函数分别是：

$$E_n=k_n^2=\left(\frac{\pi}{l}\right)^2n^2\qquad n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{l}}\sin\left(\frac{n\pi}{l}x\right)\qquad 0\leqslant x\leqslant l$$

实际上，本题与宽为l的无限深势阱中粒子能量本征值问题相当（如令$\frac{\hbar^2}{2m}=1$）。

现在回答（1）。

由于矩阵$\begin{pmatrix}3&2\\2&0\end{pmatrix}$是实对称的，是厄米矩阵，相当于厄米算符在二维空间中的具体表示。矩阵形式的本征方程为：

$$\begin{pmatrix}3&2\\2&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}\tag{1}$$

其本征值由相应久期方程（即齐次代数方程组有非零解的条件——系数行列式为零）：

$$\begin{vmatrix} 3-\lambda & 2 \\ 2 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \tag{2}$$

决定。解（2）得：$\lambda=-1$，4。

由（1）式给出：

$$3a+2b=\lambda a, \qquad 2a=\lambda b$$

两者是相容的，可任取其一：$b=\frac{2}{\lambda}a$。

当 $\lambda=-1$ 时，$b=-2a$，经归一化得：

$$\Psi_1=\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

当 $\lambda=4$ 时，$\frac{b}{a}=\frac{1}{2}$，归一化得：

$$\Psi_2=\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

由 $$\Psi_1^+\Psi_2=\frac{1}{\sqrt{5}}(1,\ -2)\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}=\frac{1}{5}(2-2)=0$$

可见厄米矩阵与厄米算符一样，不同本征值的本征函数一定正交。

下面我们补充一个有简并本征值的厄米矩阵本征值问题。

6. 若厄米算符 $\hat{\Omega}$ 在正交归一基矢 $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$ 张成的三维空间中取如下矩阵形式：

$$(\hat{\Omega})=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

求其本征值和本征矢。

解： 由于 $\hat{\Omega}$ 的矩阵为厄米矩阵，它有实数本征值 ω，矩阵形式的本征方程为：

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}=\omega\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \tag{1}$$

相应的久期方程为：

$$\begin{vmatrix} 1-\omega & 0 & 1 \\ 0 & 2-\omega & 0 \\ 1 & 0 & 1-\omega \end{vmatrix} = 0 \tag{2}$$

由本征方程（1）得系数关系：

$$\left.\begin{aligned} a+c&=\omega a \\ 2b&=\omega b \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

解（2）式得本征值$\omega_1=0$，$\omega_2=\omega_3=2$。

先求无简并本征值$\omega_1=0$相应的本征矢。由（3）式得：$c=-a$，$b=0$，归一化本征函数为：

$$\Psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\-1\end{pmatrix}$$

在给定的空间$\{|u_1\rangle,\ |u_2\rangle,\ |u_3\rangle\}$中，$\Psi_1$相应的本征矢为：

$$|\omega_1=0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|u_1\rangle-|u_3\rangle) \qquad (4)$$

其次求两度简并的本征值$\omega_2=\omega_3=2$相应的本征矢。在$\omega_2=2$时，（3）式中$c_2=a_2$，而b_2可取任意值，不确定，所以简并本征值的本征矢不能“唯一”确定下来。可任选b_2，例如令$b_2=0$，则因$c_2=a_2$可得：

$$\Psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}$$

相当于 $|\omega_2=2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|u\rangle+|u_3\rangle)$。（5）

为给出简并本征值2的另一本征函数Ψ_3，可要求简并本征值的不同本征函数彼此正交，即要求（因为（3）式 当$\omega_3=2$时，$a_3=c_3$）

$$\Psi_2^+\Psi_3=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,0,1)\begin{pmatrix}a_3\\b_3\\a_3\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(a_3+a_3)=0$$

所以$a_3=c_3=0$，故有：

$$\Psi_3=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},\qquad |\omega_3=2\rangle=|u_2\rangle \qquad (6)$$

这样给出的三个本征矢一定两两正交，但不是唯一的，可有许多种选法。例如，选$b_2=1$时，有：

$$\Psi_2'=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$$

再按正交要求可由Ψ_2'确定出：$b_3'=-2a_3'$，$\Psi_3'=\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix}1\\-2\\1\end{pmatrix}$。这三个本征函数$\Psi_1$、$\Psi_2'$和$\Psi_3'$也一定两两正交。

事实上，对简并本征值的本征矢集合有无限多种选法。因为在与无简并本征值$\omega_1=0$的本征矢$|\omega_1=0\rangle$相垂直的平面上彼此正交的矢量有无限多组，它们都与$|\omega_1=0\rangle$相垂直（正交）。因此，对于简并本征值，先选定一个本征矢，然后再按正交要求确定另外的本征

矢，它们同属于简并本征值子空间中的两个正交矢量。

7. 在由正交归一基矢 $\{|u_1>, |u_2>, |u_3>\}$ 所张的三维态矢空间中考虑一物理体系，算符 $\hat{H}$ 和 $\hat{B}$ 的定义如下：

$$H = \hbar\omega_0\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \qquad B = b\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

式中 ω_0 和 b 为常数。（1）$\hat{H}$ 和 $\hat{B}$ 是否是厄米算符；（2）证明 H 和 B 可对易；（3）求 H 和 B 的共同本征矢。（北京工业大学 1982年）

解：这是两个厄米矩阵同时对角化的问题。

（1）因为矩阵 H 和 B 是实对称的，所以它们是厄米矩阵，相应的算符为厄米算符。

（2）由于

$$HB = BH = \hbar\omega_0 b\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

所以 H 与 B 对易，从而存在共同本征矢集合。

（3）我们知道，若两个厄米算符彼此对易，且一个算符的所有本征值均无简并，则该算符的本征矢集合就一定是它们的共同本征矢集合；如果其中一个算符的某一本征值有简并，则相应的本征矢有任意性（如题6），任选的本征矢未必是另一算符的本征矢。因此，求两厄米矩阵共同本征矢的"同时对角化过程"要分两步作。

第一步，先求一个矩阵的本征值和本征矢，在自身表象中该矩阵已对角化，对角元为本征值；

第二步，在一个矩阵对角化的表象中，另一个与该矩阵对易的矩阵一定表现为"块状"对角化，所以这步只要"分块"对角化这另一矩阵即可。

本题中，H 在 $\{|u_1>, |u_2>, |u_3>\}$ 中已对角化，可知其无简并本征值 $E_1 = \hbar\omega_0$ 相应的本征矢为：

$$|E_1 = \hbar\omega_0> = |u_1>$$

而简并本征值 $E_2 = E_3 = -\hbar\omega_0$ 相应的本征矢，与 $|u_2>$ 和 $|u_3>$ 有关，可以是它们的任意线性组合，不确定。在该三维空间中，B 确实是块状对角的：

$$B = b\begin{pmatrix} \boxed{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

由于 $|u_1>$ 是 H 无简并本征值 E_1 的本征矢，所以它一定是 B 相应本征值 $\lambda_1 = b$ 的本征矢。因此，余下的问题是在 H 本征值为 $E_2 = -\hbar\omega_0$ 的简并子空间 $\{|u_2>, |u_3>\}$ 中对角化

$$B_r = b\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

即可。解其久期方程，得本征值$\lambda_2=b$，$\lambda_3=-b$，相应的本征矢分别为：

$$|\lambda_2=b> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2>+|u_3>)$$

$$|\lambda_3=-b> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|u_2>-|u_3>)$$

由于｛$|u_2>$，$|u_3>$｝是H的不变子空间，所以$|\lambda_2>$和$|\lambda_3>$也一定是H相应本征值（$-\hbar\omega_0$）的两个本征矢。如果用$|q_1>$、$|q_2>$和$|q_3>$表示H和B的共同本征矢，就有如下关系。

共同本征矢	H的本征值	B的本征值
$\|q_1>=\|u_1>$	$\hbar\omega_0$	b
$\|q_2>=\frac{1}{\sqrt{2}}(\|u_2>+\|u_3>)$	$-\hbar\omega_0$	b
$\|q_3>=\frac{1}{\sqrt{2}}(\|u_2>-\|u_3>)$	$-\hbar\omega_0$	$-b$

由上表可见，在｛$|u_1>$，$|u_2>$，$|u_3>$｝中H和B都有简并本征值，但对H和B的本征值组而言，是无简并的，三组不同的本征值，有三个确定的共同本征矢。因此，H和B构成了该三维空间中的力学量完全集。

8．（1）若算符$\hat{A}$的本征方程为：$\hat{A}|n>=a_n|n>$，试证$\hat{A}$的算符函数$F(\hat{A})$在$\hat{A}$表象中是对角的，即：

$$F(\hat{A})|n>=F(a_n)|n>$$

（2）试证力学量矩阵之迹与表象选择无关，即：

$$\sum_i <u_i|\hat{A}|u_i> = \sum_j <t_j|\hat{A}|t_j>$$ （吉林大学 1982年）

证明：（1）要证明的结果，可称为算符函数定理。算符函数可按函数的泰勒（麦克劳林）展开来定义，算符$\hat{A}$的任意函数$F(\hat{A})$定义为：

$$F(\hat{A})=\sum_{k=0}^{\infty} f_k \hat{A}^k \qquad f_k=\frac{F^{(k)}(0)}{k!}=\frac{1}{k!}\left(\frac{d^k}{d\hat{A}^k}F(\hat{A})\right)\Big|_{\hat{A}=0}$$

按此定义，当$F(\hat{A})$是$\hat{A}$的实函数时，若$\hat{A}$为厄米算符$\hat{A}=\hat{A}^+$，则$F(\hat{A})=F^+(\hat{A})$，即$F(\hat{A})$仍是厄米的。例如，$e^{\hat{A}}=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\hat{A}^k$，当$\hat{A}=\hat{A}^+$时，$e^{\hat{A}}$仍是厄米的。上述定义，只对单个算符有意义，不宜推广到多个算符的算符函数情形，因为在算符彼此不对易时展式中各项因子的次序是至关重要的了。

现在来证明，若$|n>$为$\hat{A}$相应本征值a_n的本征矢，则它也是$\hat{A}$的任意函数$F(\hat{A})$相应本征值$F(a_n)$的本征矢。

因为
$$F(\hat{A})|n> = \left\{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{F^{(k)}(0)}{k!}\hat{A}^k\right\}|n>$$
$$= \left\{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{F^{(k)}(0)}{k!}a_n^k\right\}|n> = F(a_n)|n>$$

此结果的意义在于，如果厄米算符$\hat{A}$的本征值问题解决了，那么$\hat{A}$的任意实函数$F(\hat{A})$的本征值问题也随之知道了。特别是它把算符的函数关系与本征值（与表象选择无关）的函数关系联系起来了——两者满足同样的函数关系。因此，知道其中之一的具体关系，就可给出另一个满足的关系。

例如，在$\hat{\sigma}_z$表象中，$(\hat{\sigma}_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$，$(\sigma_z = \pm 1)$。算符函数$e^{\hat{\sigma}_z}$在该表象中的矩阵为：
$$(e^{\hat{\sigma}_z}) = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & e^{-1} \end{pmatrix}$$

显然，在$\hat{A}$表象中$F(\hat{A})$是对角的：
$$\left(F(\hat{A})\right)_{mn} = F(a_n)\delta_{mn}$$

（2）算符的迹，定义为算符在给定基底中矩阵对角元之和，用符号Tr表示：
$$\mathrm{Tr}\hat{A} = \sum_i < u_i | \hat{A} | u_i >$$

迹与基底选择无关。因为，如有另一基底$\{|t_j>\}$，有封闭关系$\sum_j |t_j><t_j| = 1$，把它“插入”定义式，就有：
$$\sum_i < u_i | \hat{A} | u_i > = \sum_{i,j} < u_i | \hat{A} | t_j >< t_j | u_i > \quad \text{(因为内积}<t_j|u_i>\text{是一个数)}$$
$$= \sum_{i,j} <t_j|u_i><u_i|\hat{A}|t_j> \quad \text{(因为}\sum_j |u_i><u_i| = 1\text{)}$$
$$= \sum_j < t_j | \hat{A} | t_j >$$

利用算符的迹与基底选择无关这一结果，选用$\hat{A}$自身表象时，
$$\mathrm{Tr}\hat{A} = \sum_{n,\alpha} <n,\alpha| \hat{A} |n,\alpha> \quad \text{(假定}\hat{A}|n,\alpha> = a_n|n,\alpha>,\ \alpha = 1,\cdots,f_n\text{)}$$
$$= \sum_n a_n \sum_{\alpha=1}^{f_n} <n,\ \alpha|n,\ \alpha> \quad \text{(当}<n,\ \alpha|n,\ \alpha> = 1\text{时)}$$
$$= \sum_n a_n f_n$$

在$\hat{A}$的本征值无简并时($f_n=1$)，$Tr\hat{A}=\sum\limits_n a_n$，即$\hat{A}$的迹为$\hat{A}$的本征值之和。

算符乘积的迹，在算符顺次轮换下保持迹不变。因为

$$\mathrm{Tr}\,(\hat{A}\,\hat{B})=\sum_i<u_i|\hat{A}\hat{B}|u_i>=\sum_{i,j}<u_i|\hat{A}|t_j><t_j|\hat{B}|u_i>$$

$$=\sum_{i,j}<t_j|\hat{B}|u_i><u_i|\hat{A}|t_j>=\sum_j<t_j|\hat{B}\,\hat{A}|t_j>$$

$$=\mathrm{Tr}\,(\hat{B}\,\hat{A})$$

重复应用上式就有：$Tr(\hat{A}\,\hat{B}\,\hat{C})=Tr(\hat{B}\,\hat{C}\,\hat{A})=Tr(\hat{C}\,\hat{A}\,\hat{B})$

9．试证：$det\ A=e^{Tr\ln A}$，其中A为可对角化矩阵。　　　　（清华大学　1981年）

证明：设$A=e^B$，在B表象中A为对角矩阵，对角元为本征值$a_n=e^{b_n}$。如果简并度为f_n，则

$$\det A=\prod_n a_n{}^{f_n}=\prod_n e^{f_n b_n}=e^{\sum\limits_n f_n b_n}=e^{TrB},$$

所以　　$\det A=e^{Tr\ln A}$

上述证明中是在A已对化的情况下进行的，但可以证明A的行列式值在A对角化过程中保持不变，因为A的对角化过程即实行一么正变换$S^{-1}=S^+$.

$$\det(S^+AS)=\det(S^+)\det(AS)$$

$$=\det(AS)\det(S^+)=\det(ASS^+)$$

$$=\det(A)$$

所以上述证明是普遍有效的。

10．已知：

$$\ln A=\begin{pmatrix} 2 & 7 & i\sqrt{3} \\ 7 & 0 & -5 \\ -i\sqrt{3} & -5 & -1 \end{pmatrix}$$　求A的行列式$\det A=?$

（华中师范学院　1981年）

解：矩阵$\ln A$是厄米的，可令：$\ln A=B$，$A=e^B$。由于迹与基底选择无关，可知$TrB=1$，按上题

$$\det A=e^{TrB}=e$$

11．求　$(1+\hat{\sigma}_x)^{1/2}$，$\hat{\sigma}_x$为泡利矩阵的x分量。　　　　（北京师范大学　1983年）

解：这是个未加定义过的分数次幂的算符问题。为了求得本题的解答，我们先来证明如下关系式：

$$(\hat{A}-a_1)\,(\hat{A}-a_2)\cdots(\hat{A}-a_n)\ =0 \tag{1}$$

其中a_n为$\hat{A}$的本征值（暂且假定其为有限个），相应的本征方程为：

$$(\hat{A}-a_n)\,|u_n>=0 \tag{2}$$

同时按量子力学的一般假设认为$\hat{A}$的本征矢集合$\{|u_n>\}$是完备的，任意态矢$|\psi>$有唯一的展式：$|\psi> = \sum_n c_n|u_n>$，所以

$$
\begin{aligned}
&(\hat{A}-a_1)(\hat{A}-a_2)\cdots(\hat{A}-a_n)|\psi> \\
&= c_1(\hat{A}-a_2)(\hat{A}-a_3)\cdots(\hat{A}-a_n)(A-a_1)|u_1> \\
&\quad + c_2(\hat{A}-a_1)(\hat{A}-a_3)\cdots(\hat{A}-a_n)(\hat{A}-a_2)|u_2> \\
&\quad + \cdots + c_n(\hat{A}-a_1)(\hat{A}-a_2)\cdots(\hat{A}-a_n)|u_n> \\
&= 0
\end{aligned}
$$

考虑到$|\psi>$的任意性，就有（1）式成立，且可推广到a有无限多个的情况。

设：$\hat{P} = (1+\hat{\sigma}_x)^{1/2}$

因为　$\sigma_x = \pm 1$，　所以　$P = 0, \sqrt{2}$，　因此　$\hat{P}(\hat{P}-\sqrt{2}) = 0$，

即　$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{P}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\hat{\sigma}_x),$$

故得：$$(1+\hat{\sigma}_x)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+\hat{\sigma}_x)$$

由此可见，利用（1）式，在算符本征值已知的情况下，可直接给出算符关系。

12. （1）证明对易关系$[x, f(\hat{p}_x)] = i\hbar\dfrac{\partial f}{\partial \hat{p}_x}$，其中$f$为可微函数；（2）证明：$e^{i\hat{p}_x a/\hbar}xe^{-i\hat{p}_x a/\hbar} = x+a$　　（天津大学　1985年）

证明：（1）这是个证明含算符函数的对易关系，可把算符函数展成泰勒级数，利用$[x, \hat{p}_x] = i\hbar$来证明。现按同样步骤证明更一般的含算符函数的对易关系。如果$\hat{A}$与$\hat{B}$不对易，但$\hat{A}$和$\hat{B}$都与它们的对易子$[\hat{A}, \hat{B}]$对易，即$[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$，则有：

$$[\hat{A}, F(\hat{B})] = [\hat{A}, \hat{B}]\frac{\partial F}{\partial \hat{B}} \tag{1}$$

因为　$$[\hat{A}, F(\hat{B})] = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{F^{(k)}(0)}{k!}[\hat{A}, \hat{B}^k]$$

由　$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}$$

用数学归纳法可以证明：

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = \sum_{k=0}^{n-1}\hat{B}^k[\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^{n-k-1} \tag{2}$$

在$\hat{B}$与$[\hat{A}, \hat{B}]$对易的条件下，（2）式变为：

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

所以
$$[\hat{A}, F(\hat{B})] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{F^{(k)}(0)}{k!} k[\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^{k-1}$$

$$= [\hat{A}, \hat{B}]\frac{\partial F}{\partial \hat{B}}$$

（1）式得证。

因为$[x, \hat{P}_x] = i\hbar$，作为（1）式的特例，可直接写出要证的关系：

$$[x, f(\hat{P}_x)] = i\hbar\frac{\partial f}{\partial \hat{P}_x} \tag{3}$$

实际上，利用（1）式还能给出如下对易关系：

$$[x, \hat{P}_x^n] = ni\hbar\hat{P}_x^{n-1}, \qquad [\hat{P}_x, f(x)] = -i\hbar\frac{\partial f}{\partial x}$$

$$[x, e^{a\hat{P}_x}] = i\hbar a e^{a\hat{P}_x}$$

（2）利用（1）式或（3）式，有：

$$[x, e^{-i\hat{P}_x a/\hbar}] = a e^{-i\hat{P}_x a/\hbar}$$

即
$$x e^{-i\hat{P}_x a/\hbar} = e^{-i\hat{P}_x a/\hbar}(x+a)$$

所以
$$e^{i\hat{P}_x a/\hbar} x e^{-i\hat{P}_x a/\hbar} = e^{i\hat{P}_x a/\hbar} e^{-i\hat{P}_x a/\hbar}(x+a) = (x+a)$$

实际上，$e^{-i\hat{P}_x a/\hbar}$是空间平移算符。因为对任意波函数$\varphi(x)$，可定义空间平移算符$\hat{T}_a$使：

$$\hat{T}_a\varphi(x) = \varphi(x-a)$$

按$\varphi(x-a)$在x点的展开式：

$$\varphi(x-a) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-a)^k}{k!}\varphi^{(k)}(x) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left(-a\frac{d}{dx}\right)^k\varphi(x)$$

$$= e^{-a\frac{d}{dx}}\varphi(x) = e^{-i\hat{P}_x a/\hbar}\varphi(x)$$

由$\varphi(x)$的任意性得：$\hat{T}_a = e^{-i\hat{P}_x a/\hbar}$

它与算符函数$f(\hat{x})$有如下交换关系：

$$e^{-i\hat{P}_x a/\hbar} f(\hat{x}) = f(\hat{x}-a) e^{-i\hat{P}_x a/\hbar}$$

如果$f(\hat{x}) = f(\hat{x}-a)$，则$f(\hat{x})$与空间平移算符$\hat{T}_a$对易。

13．设$\hat{P}$和$\hat{Q}$是两个不对易的算符，满足$[\hat{P},[\hat{P},\hat{Q}]] = [\hat{Q},[\hat{P},\hat{Q}]] = 0$，求证：$e^{\hat{P}+\hat{Q}} = e^{\hat{P}}e^{\hat{Q}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{P},\hat{Q}]}$。（中国科学技术大学 1980年，中国科学院物理所 1981年）

证明．要求证的式子可写成：

$$e^{\hat{P}}e^{\hat{Q}} = e^{\hat{P}+\hat{Q}}e^{\frac{1}{2}[\hat{P},\hat{Q}]} \tag{1}$$

要证明（1）式 可用建立含参数λ的算符函数满足的微分方程的方法来证明。

第一步，设含参数λ的算符函数为$f(\lambda)$：

$$f(\lambda) = e^{\lambda\hat{P}}e^{\lambda\hat{Q}} \tag{2}$$

并有：$f(1) = e^{\hat{P}}e^{\hat{Q}}$，$f(0) = 1$。

第二步，建立$f(\lambda)$满足的微分方程。求$f(\lambda)$对参数λ的导数，有．

$$\frac{df}{d\lambda} = \hat{P}f(\lambda) + f(\lambda)\hat{Q} \tag{3}$$

因为$\hat{Q}$不与$f(\lambda)$对易，上式不等于$(\hat{P}+\hat{Q})f(\lambda)$，但是 由题设可知$[\hat{P},\hat{Q}]$与$f(\lambda)$对易。

为了使$f(\lambda)$满足的微分方程可用普通积分方法积分，需把（3）式化为$f(\lambda)$乘以与其对易的乘子相乘的形式。为此要交换$\hat{Q}$与$f(\lambda)$的次序，

因为 $[e^{\lambda\hat{P}},\hat{Q}] = \lambda[\hat{P},\hat{Q}]e^{\lambda\hat{P}}$ （见题12 公式（1））

所以 $e^{\lambda\hat{P}}\hat{Q} = \{\lambda[\hat{P},\hat{Q}] + \hat{Q}\}e^{\lambda\hat{P}}$

$$f(\lambda)\hat{Q} = \{\hat{Q} + \lambda[\hat{P},\hat{Q}]\}f(\lambda)$$

把上式代入（3）式，得：

$$\frac{df(\lambda)}{d\lambda} = \{(\hat{P}+\hat{Q}) + \lambda[\hat{P},\hat{Q}]\}f(\lambda) \tag{4}$$

因为 $[(\hat{P}+\hat{Q}),f(\lambda)] = e^{\lambda\hat{P}}[\hat{P},e^{\lambda\hat{Q}}] + [\hat{Q},e^{\lambda\hat{P}}]e^{\lambda\hat{Q}}$

再次利用题12的公式（1），得：

$$[(\hat{P}+\hat{Q}),f(\lambda)] = \lambda e^{\lambda\hat{P}}[\hat{P},\hat{Q}]e^{\lambda\hat{Q}} + \lambda e^{\lambda\hat{P}}[\hat{Q},\hat{P}]e^{\lambda\hat{Q}} = 0$$

注意到题设$[\hat{P},\hat{Q}]$与$\hat{P}$和$\hat{Q}$均对易．可见$f(\lambda)$与$\{(\hat{P}+\hat{Q}) + \lambda[\hat{P},\hat{Q}]\}$对易。这样它们与普通函数间的“唯一”差别——乘子次序不可交换性消失了，通常积分方法就可畅通无阻地使用了。

第三步，积分微分方程（4）式。由于（4）式中$f(\lambda)$与其前面的因子次序可以交换，可把$f(\lambda)$“除”到左端去，积分得：

$$f(\lambda)=f(0)e^{\lambda(\hat{P}+\hat{Q})+\frac{1}{2}\lambda^2[\hat{P},\hat{Q}]}$$

由于$f(0)=1$和$f(1)=e^{\hat{P}}e^{\hat{Q}}$，所以当$\lambda=1$时有：

$$f(1)=e^{\hat{P}}e^{\hat{Q}}=e^{\{(\hat{P}+\hat{Q})+\frac{1}{2}[\hat{P},\hat{Q}]\}}=e^{(\hat{P}+\hat{Q})}e^{\frac{1}{2}[\hat{P},\hat{Q}]}$$

上式最后一步利用了$\hat{P}$和$\hat{Q}$均与$[\hat{P},\hat{Q}]$对易这一条件。如果$\hat{P}$与$\hat{Q}$对易，则$e^{\hat{P}}e^{\hat{Q}}=e^{(\hat{P}+\hat{Q})}$，否则$e^{\hat{P}}e^{\hat{Q}}\neq e^{(\hat{P}+\hat{Q})}$。

14．试证明：$e^{\frac{\pi}{i\hbar}\hat{s}_2}\hat{s}_1e^{-\frac{\pi}{i\hbar}\hat{s}_2}=-\hat{s}_1$。已知$\hat{s}_i=\dfrac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i$，$\hat{\sigma}_i$（$i=1,2,3$）是泡利矩阵，满足关系：$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j=i\hat{\sigma}_k$（$i$，$j$，$k$是1，2，3顺序轮换）。（北京大学 1984年）

证明：本题可用多种方法证明，为彻底掌握上题所用微分方程法，故此题再次采用该法来证。

设 $f(\lambda)=e^{\frac{\pi}{i\hbar}\lambda\hat{s}_2}\hat{s}_1e^{-\frac{\pi}{i\hbar}\lambda\hat{s}_2}$

有：$f(0)=\hat{s}_1$，$f(1)=e^{\frac{\pi}{i\hbar}\hat{s}_2}\hat{s}_1e^{-\frac{\pi}{i\hbar}\hat{s}_2}$

$$\frac{df}{d\lambda}=e^{\frac{\pi}{i\hbar}\lambda\hat{s}_2}\frac{\pi}{i\hbar}[\hat{s}_2,\hat{s}_1]e^{-\frac{\pi}{i\hbar}\lambda\hat{s}_2}=-\pi e^{\frac{\pi}{i\hbar}\lambda\hat{s}_2}\hat{s}_3e^{-\frac{\pi}{i\hbar}\lambda\hat{s}_2}$$

$$f'(0)=-\pi\hat{s}_3$$

再微分一次，把上式右端化为含$f(\lambda)$的形式：

$$\frac{d^2f}{d\lambda^2}=-\pi e^{\frac{\pi}{i\hbar}\lambda\hat{s}_2}\frac{\pi}{i\hbar}[\hat{s}_2,\hat{s}_3]e^{-\frac{\pi}{i\hbar}\lambda\hat{s}_2}=-\pi^2f(\lambda)$$

即 $f''+\pi^2f=0$

积分得：$f(\lambda)=a\sin\pi\lambda+b\cos\pi\lambda$

因为 $f'(\lambda)=\pi a\cos\pi\lambda-\pi b\sin\pi\lambda$

以及 $f(0)=\hat{s}_1$，$f'(0)=-\pi\hat{s}_3$

所以 $a=-\hat{s}_3$，$b=\hat{s}_1$

$$f(\lambda)=-\hat{s}_3\sin\pi\lambda+\hat{s}_1\cos\pi\lambda$$

取$\lambda=1$，则有：

$$e^{\frac{\pi}{i\hbar}\hat{s}_2}\hat{s}_1e^{-\frac{\pi}{i\hbar}\hat{s}_2}=-\hat{s}_1$$

在空间维数较少时，用证明矩阵关系来代替证明算符关系是方便，两者完全等价。对于本题，已知$\hat{\sigma}_3$表象中：