

第四章 量子力学的表述形式

前面三章，我们分别讨论了量子力学：关于系统状态的假定、关于力学量的假定、关于态的叠加原理的假定、关于运动方程的假定、关于多粒子系统的全同性原理的假定。至此，我们已基本学完了量子力学的基本原理。

在绪论中，我们已指定：量子力学理论在建立过程中，有两套彼此等价的理论（矩阵力学和波动力学）几乎同时被提出来。而我们前面三章，主要是按照薛定谔的波动力学这套大家比较容易接受的理论来阐明量子力学的一些基本的原理。

在有了量子力学的这些基本原理的基础上，我们再来讲量子力学理论更为普遍的表述形式。

在这一章里，我们首先建立起 Hilbert (希尔伯特) 空间 的概念，并讨论由 Hilbert 空间中基底选择不同，使量子力学原理有不同的表象。以及由于对时间演化的处理方法不同，使量子力学有不同的绘景。



§ 4.1 Hilber 空间

一. 坐标表象与动量表象

对于一个自由运动的粒子，当描述它的波函数 $\psi(\vec{r})$ 给定后，如果测量其位置，则粒子出现在 \vec{r} 点的几率密度为 $|\psi(\vec{r})|^2$ 。如果测量其动量，则测得动量为 \vec{p} 的几率密度为 $|\varphi(\vec{p})|^2$ 。 $\varphi(\vec{p})$ 是 $\psi(\vec{r})$ 的 **Fourier** 变换，由 $\psi(\vec{r})$ 完全确定：

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

总之，当 $\psi(\vec{r})$ 给定后，粒子所有的力学量的测量值的几率分布就确定了，所以 $\psi(\vec{r})$ 完全描述粒子的量子态。

同样，如果给定波函数 $\varphi(\vec{p})$ ，则也完全描述粒子的量子态，而此时， $\psi(\vec{r})$ 是 $\varphi(\vec{p})$ 的 Fourier 逆变换，由 $\varphi(\vec{p})$ 完全确定：

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

所以 $\varphi(\vec{p})$ 也可以完全描述粒子的量子态。

从上面分析看出：微观粒子的状态，既可以用 $\psi(\vec{r})$ 描述，也可以用 $\varphi(\vec{p})$ 来描述，它们彼此间有确定的变换关系，彼此完全等价。它们描述的都是同一个量子态，只不过表象不同而已。这就是一个矢量可以采用不同的坐标系来表示一样，因此，我们称 $\psi(\vec{r})$ 是坐标表象的态函数，而称 $\varphi(\vec{p})$ 为动量表象的态函数。



二. Hilbert 空间

为了让大家能充分理解和掌握什么是 Hilbert 空间，我们将与几何中的空间矢量对比

在量子力学中

- ① 将描述微观粒子的波函数 ψ 看成是一个矢量——态矢量。
- ② 选取一个特定的 F 表象 (F 为力学量)

在解析几何中

- ① 空间中的一个矢量 (例如 \vec{A} 矢量)。
- ② 选取一个特定的坐标系 (例如直角坐标系)

③ F 的本征函数 $u_1(x)$,
 $u_2(x) \cdots, u_n(x)$, ... 是这个
表象中的基矢。

④ 波函数 ψ (或态矢量) 在 F
表象中沿各基矢方向的
“分量” 为 $a_1(t)$, $a_2(t) \cdots$,
 $a_n(t)$, ...

$$\text{其中 } a_i(t) = \int \psi(x,t) u_i^*(x) dx$$

③ 坐标系中的单位矢量 (例
如: \bar{i} , \bar{j} , \bar{k})

④ 空间矢量在坐标系各方向
上的分量 (例如: A_x , A_y ,
 A_z)

⑤ F 表象中的基矢（本征函数之间）相互正交：

$$\int u_i^*(x)u_j(x)dx=0$$

⑥ F 表象中的基矢（本征函数）有无限多个，所以态矢量所在的空间是无限维的函数空间。

⑤ 坐标系中的单位矢量正交
(如: $\bar{i} \perp \bar{j} \perp \bar{k}$)

⑥ 直角坐标系中的单位矢量个数为 3 个。

在量子力学中，这种无穷维线性函数空间称为 **Hilbert 空间**。



§ 4.2 态矢量和算符

在这一节里，我们在 **Hilbert 空间** 里给出量子力学原理的表述。

一、态矢量

状态（**波函数**）用 **Hilbert 空间** 的**矢量**描述，称为**态矢量**。

Hilbert 空间的**矢量**，可以用 **Dirac**（狄拉克）所创立的符号表示。采用 **Dirac** 符号的优点：一是**运算简捷**；二是可以**不需要具体表象**来讨论问题。下面我们首先介绍一下 **Dirac** 符号。



1. Dirac 符号

(a) 右矢 (ket)

这种符号是一个尖角指向右边的括号： $| \rangle$ ，并将标志不同状态的参量写在括号内。

例如：状态 **a** 的态矢量记为 $|a\rangle$ 。

$|\psi\rangle$ 表示波函数 ψ 描述的状态。

$|x'\rangle$, $|p'\rangle$, $|E_n\rangle$ 或 $|n\rangle$ 分别表示本征值为 x' 的坐标的本征态、本征值为 p' 的动量的本征态、本征值为 n 的能量的本征态。

注意：以上态的表示，都还是一个抽象矢量，未涉及到具体的表象。


(b) 左矢 (bra)

和每一个右矢对应，都有一个左矢： $\langle \quad |$ 。

左矢 $\langle \quad |$ 表示共轭空间中的一个抽象态矢。

例如： $\langle \psi |$ 是 $|\psi\rangle$ 的共轭态矢：

$$|\psi\rangle^+ = \langle \psi | \quad \text{或} \quad \langle \psi |^+ = |\psi\rangle。$$



2. 态矢量

态矢量满足**叠加原理**。如果 $|a\rangle$, $|b\rangle$ 是两个态矢量, 则:

$$\boxed{|c\rangle = \alpha|a\rangle + \beta|b\rangle} \quad (1)$$

也是一个**态矢量**, 其中 α , β 是两个任意复数。

态矢量的加法满足交换律和结合律:

$$|a\rangle + |b\rangle = |b\rangle + |a\rangle \quad (2)$$

$$|a\rangle + (|b\rangle + |c\rangle) = (|a\rangle + |b\rangle) + |c\rangle \quad (3)$$

数和态矢量的乘法也满足结合律：

$$\alpha(\beta|a\rangle) = (\alpha\beta)|a\rangle \quad (4)$$

如果几个矢量 $|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_n\rangle$ 存在以下关系

$$\alpha_1|a_1\rangle + \alpha_2|a_2\rangle + \dots + \alpha_n|a_n\rangle = 0 \quad (5)$$

其中不全为零 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ ，则称这些矢量线性相关。

如果找不到几个不全为零的数是(5)式成立，则称这几个矢量

线性独立。



二、态矢量的点积（或标积）

态矢量 $|a\rangle$ 与 $|b\rangle$ 的点积定义为：

$$\langle a|b\rangle. \quad (6)$$

点积的特性：

- ① $\langle a|b\rangle$ 是一个复数
- ② 两个矢量点积的共轭，等于它们各自的共轭按相反的方向取点积：

$$\boxed{\langle a|b\rangle^+ = \langle b|^+ \rangle \langle a|^+ \rangle = \langle b|a\rangle} \quad (7)$$

③由于 $\langle a|b\rangle$ 是一个普通的复数，所以它的共轭就是

复共轭，因而

$$\boxed{\langle a|b\rangle^* = \langle b|a\rangle} \quad (8)$$

由于(7)，(8)两式可知：

$$\boxed{\langle a|b\rangle^+ = \langle a|b\rangle^*}$$

三、厄米算符

1. Hilbert 空间中算符的定义

Hilbert 空间中算符 F 是一种对应规则，它将 Hilbert 空间中的任意矢量对应成另一矢量：


$$\boxed{F|a\rangle = |c\rangle} \quad (9)$$

注意：① 由于矢量本身是抽象的矢量，所以算符 F 也不能写成具体形式，只能用对应关系式(9)来定义。为此，我们在算符上面未加八号，以区别具体表象中的算符。

② 如果算符 F 满足以下条件

$$F(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha F|a\rangle + \beta F|b\rangle \quad (10)$$

则称 F 为线性算符。



2. 厄米算符

线性算符 F 的厄米共轭算符定义为:

$$\boxed{(F|a\rangle)^+ = (|a\rangle^+)F^+ = \langle a|F^+} \quad (11)$$

于是:

$$\begin{aligned} \langle a|F|b\rangle^* &= \langle a|F|b\rangle^+ \\ &= (|b\rangle)^+ (F)^+ (\langle a|)^+ = \langle b|F^+|a\rangle \end{aligned} \quad (12)$$

显然有:

$$\boxed{(F^+)^+ = F} \quad (13)$$

如果线性算符 F 等于它自身厄米共轭

$$\boxed{F^{\dagger} = F} \quad (14)$$

则称 F 为厄米自共轭算符，简称厄米算符。

由(12)式可得：（如果 F 是厄米算符）

$$\boxed{\langle a|F|b\rangle^* = \langle b|F|a\rangle} \quad (15)$$

(15)式就是算符厄米性的条件。

前面我们讲了：两个矢量 $|a\rangle$ 与 $|b\rangle$ 的点积 $\langle a|b\rangle$ 是一个复数。

下面，我们将来证明：矢量 $|a\rangle$ 与 $|b\rangle$ 的并矢 $|a\rangle\langle b|$ 是一个算符。

证明： 设 $|c\rangle$ 是任意矢量

则：

$$(|a\rangle\langle b|)|c\rangle = |a\rangle(\langle b|c\rangle) = \alpha|a\rangle$$

其中 $\alpha = \langle b|c\rangle$ 是一个复数

α 乘以矢量 $|a\rangle$ 仍为矢量， 设 $|d\rangle = \alpha|a\rangle$ 于是

$$(|a\rangle\langle b|)|c\rangle = |d\rangle$$

上式表明：**并矢** $|a\rangle\langle b|$ 作用在一个任意矢量 $|c\rangle$ 上后，将 $|c\rangle$ 变成另一个矢量 $|d\rangle$ 。根据**算符的定义**，这样，我们就

证明了并矢 $|a\rangle\langle b|$ 是一个**算符**。

当 $a = b$ 时， $|a\rangle\langle a|$ 称为**投影算符**（即**相同矢量的并矢**，称为**投影算符**）



四、厄米算符的本征值与本征矢

算符 F 的本征方程是：

$$F|i\rangle = f_i|i\rangle \quad (\text{分立谱}) \quad (16)$$

$$F|f\rangle = f|f\rangle \quad (\text{连续谱}) \quad (17)$$

其中 f_i 或 f 为算符 F 的本征值， $|i\rangle$ 或 $|f\rangle$ 为算符 F 的本征矢。

若 F 是厄米算符，则本征值和本征矢有以下性质：



定理一：厄米算符的本征值是实数。

证明：（考虑分立谱情况，连续谱情况下的证明完全类似）

$$\text{设 } F^+ = F$$

$$F|i\rangle = f_i|i\rangle$$

用本征矢 $|i\rangle$ 的左矢 $\langle i|$ 点乘上式：

$$\langle i|F|i\rangle = \langle i|f_i|i\rangle = f_i\langle i|i\rangle \quad (18)$$

利用(8)式： $\langle a|b\rangle^* = \langle b|a\rangle$ ，对上式取复共轭得：

$$\langle i|F|i\rangle^* = f_i^* \langle i|i\rangle^* = f_i^* \langle i|i\rangle$$

利用(15)式 $\langle a|F|b\rangle = \langle b|F|a\rangle^*$ 和上式, 可得:

$$\langle i|F|i\rangle = \langle i|F|i\rangle^* = f_i^* \langle i|i\rangle \quad (19)$$

比较(18)和(19)两式可得:

$$f_i = f_i^*$$

即: f_i 是实数。



定理二：厄米算符不同本征值得本征矢相互正交。

证明：

$$\text{设 } F^+ = F$$

$$F|i\rangle = f_i|i\rangle, \quad F|j\rangle = f_j|j\rangle$$

$$\text{且 } f_j \neq f_i$$

用 $\langle i|$ 和 $\langle j|$ 分别点乘两个本征方程可得：

$$\langle j|F|i\rangle = f_i\langle j|i\rangle \tag{20}$$

$$\langle i|F|j\rangle = f_j \langle i|j\rangle \quad (21)$$

(20)式两边同时取复共轭得：（利用(15)式）

$$\begin{aligned} \langle j|F|i\rangle^* &= \langle i|F|j\rangle = f_i^* \langle j|i\rangle^* \\ &= f_i^* \langle i|j\rangle = f_i \langle i|j\rangle \end{aligned} \quad (22)$$

(22)-(21)式可得：

$$(f_i - f_j) \langle i|j\rangle = 0 \quad (23)$$

由于 $f_j \neq f_i$ ，所以

$$\langle i|j\rangle = 0 \quad (24)$$

即：属于不同本征值的本征矢相互正交。

如果对应于某一个本征值 f_i ，有一个以上的线性独立本征矢 $|ia\rangle$ 、 $|ib\rangle$ 、 \dots ，则称本征值 f_i 有简并。

定理三：如果 $|ia\rangle$ 和 $|ib\rangle$ 是对应于厄米算符 F 的本征值 f_i 的线性独立本征矢，则它们的线性叠加 $\alpha|ia\rangle + \beta|ib\rangle$ 也是对应于同一本征值的本征矢，即

$$\text{若： } F|ia\rangle = f_i|ia\rangle, \quad F|ib\rangle = f_i|ib\rangle$$

$$\text{则： } F(\alpha|ia\rangle + \beta|ib\rangle) = f_i(\alpha|ia\rangle + \beta|ib\rangle)$$

证明：利用线性算符的定义式：

$$F(\alpha|a\rangle + \beta|b\rangle) = \alpha F|a\rangle + \beta F|b\rangle$$

可得：

$$\begin{aligned} F(\alpha|ia\rangle + \beta|ib\rangle) &= \alpha F|ia\rangle + \beta F|ib\rangle \\ &= \alpha f_i|ia\rangle + \beta f_i|ib\rangle \\ &= f_i(\alpha|ia\rangle + \beta|ib\rangle) \end{aligned}$$

得证。

由此可见：如果本征值 f_i 有简并，则和这一本征值对应有无穷多本征矢。这些本征矢形成一个线性向量空间。

总结上述：

① 厄米算符 \mathbf{F} 对应于不同本征值得本征矢相互正交。

② 当本征值有简并时，和它对应得本征矢不一定正交，但是可以按定理三，从这些本征矢所成得线性空间中选出正交矢量。这样做后，就得到了 \mathbf{F} 得一个正交完备矢量组。

用 i 给这一矢量组中的矢量重新编号，如：

$$|i\rangle, \quad i=1,2,\dots \quad (25)$$

这一组矢量满足**正交归一**条件:

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \quad (26)$$

同时, 它们又具有**完备性**, 即: **Hilbert** 空间的任意矢量可以用矢量组(25)式展开:

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i |i\rangle \quad (27)$$

其中 a_i 为展开系数:

$$a_i = \langle i|a\rangle \quad (28)$$

将(28)式代入(27)式得:

$$\begin{aligned} |a\rangle &= \sum_{i=1}^{\infty} a_i |i\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle \langle i| a \rangle \end{aligned} \quad (29)$$

由此可见:

$$\boxed{\sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle \langle i| = 1} \quad (30)$$

是恒等算符 (或单位算符), 其意义是: 该算符作用再任意矢量上仍得到这一矢量本身。

(30)式就是(25)式矢量组的完备性条件。



五、力学量用厄米算符表示

力学量用 **Hilbert** 空间中的算符表示。具体含义如下：

力学量 **F** 所能取的值是它的算符的本征值。

考虑用矢量 $|a\rangle$ 描述的状态，将 $|a\rangle$ 用 **F** 的本征矢量组

$|i\rangle$ ($i=1,2,\dots$) 展开：

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i |i\rangle \quad (31)$$

其中系数

$$a_i = \langle i|a\rangle$$

则在状态 $|a\rangle$ 中，物理量 \mathbf{F} 取值 f_i （本征值）的几率是：

$$w_i = |a_i|^2 = |\langle i|a\rangle|^2 \quad (32)$$



六、运动方程

态矢量随时间的变化由 Hilbert 空间中的一个线性算符

H 决定

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\psi, t\rangle = H |\psi, t\rangle} \quad (33)$$

其中 **H** 为哈密顿算符。公式 (33) 中 $|\psi, t\rangle$ 只有变量，因而对时间的求导是全导数而不是偏导。（注意： $|\psi, t\rangle$ 是以某一力学量的本征矢为基矢（基矢才是坐标的函数）的 Hilbert 空间中的态矢量）。

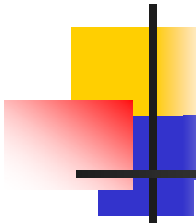
§ 4.3 表象和表象变换

在上一节里，我们用 **Hilbert** 空间中的**抽象矢量**和**抽象算符**表述了《量子力学》的**基本原理**。

在进行**具体计算**时，常常需要选用一定的“**坐标系**”，即**进入一定的表象**。

本节主要内容：

- (1) 讨论**态矢量**、**算符**在某一力学量(如：力学量 **F**)表象的表示形式；
- (2) 讨论**力学量**(如：力学量 **F**)在其自身的表象中的表示形式(即**本征表象**)；
- (3) 讨论**表象变换**(如：从力学量 **F** 表象到力学量 **G** 表象)。



一、态矢量在 F 表象中的分量形式

若 F 是一厄米算符，则

	分立谱情况	连续谱情况
本征方程:	$F i\rangle = f_i i\rangle$	$F f\rangle = f f\rangle$
“坐标”基矢:	$ i\rangle, i=1,2,\dots$	$ f\rangle$
任意态矢量:	$ a\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i i\rangle$	$ a\rangle = \int a_f f\rangle df$
在“坐标”中矢量的分量:	$a_i = \langle i a\rangle,$ $i=1,2,\dots$	$a_f = \langle f a\rangle,$ $(-\infty < f < \infty)$

于是在“坐标”中矢量的分量

$$\boxed{a_i = \langle i | a \rangle} \text{ 或 } \boxed{a_f = \langle f | a \rangle} \quad (1)$$

是一组无穷多个数，它们就是任意态矢量 $|a\rangle$ 在力学量 \mathbf{F} 的表象中的分量形式。

【结论】：任意态矢量 $|a\rangle$ 在力学量 \mathbf{F} 的表象中的分量，
实际上是态矢量 $|a\rangle$ 在以力学量 \mathbf{F} 本征矢为基矢的 Hilbert
空间中的投影。

例如：

如果 **F** 是坐标 x 或 动量 p

$$\left. \begin{aligned} \text{则 } \psi(x,t) &= \langle x | \psi, t \rangle \\ c(p,t) &= \langle p | \psi, t \rangle \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

就是坐标表象和动量表象中的态函数（或波函数）。(2)式中

$|x\rangle$ 、 $|p\rangle$ 分别表示坐标、动量本征值为 x 、 p 的本征矢。



二、算符在 \mathbf{F} 表象中的分量形式

设有一算符 \mathbf{G} ，它将 Hilbert 空间任意矢量 $|a\rangle$ 变成另一矢量 $|c\rangle$ ，即：

$$\mathbf{G}|a\rangle = |c\rangle \quad (3)$$

为了进入物理量 \mathbf{F} 的表象，用 \mathbf{F} 的本征矢量的左矢 $\langle i|$ 点乘(3)式两边：

$$\langle i|\mathbf{G}|a\rangle = \langle i|c\rangle = c_i \quad (4)$$

对上式的左边，采用“插 1 法”，即：利用完备性条件

$$\underline{\sum_{j=1}^{\infty} |j\rangle\langle j| = 1}$$

得

$$\begin{aligned}\langle i|G|a\rangle &= \langle i|G \cdot 1|a\rangle = \sum_j \langle i|G|j\rangle \langle j|a\rangle \\ &= \sum_j \langle i|G|j\rangle a_j\end{aligned}$$

上式代入(4)式得:

$$\sum_j \langle i|G|j\rangle a_j = c_i \quad (5)$$

上式中的 $\langle i|G|j\rangle$ 是有两个指标 **i** 和 **j** 的一组数, 它们可以排成一个矩阵:

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & \cdots \\ G_{21} & G_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \quad (6)$$

其中矩阵元:

$$\boxed{G_{ij} = \langle i | G | j \rangle} \quad (7)$$

就是算符 \mathbf{G} 在力学量 \mathbf{F} 表象中的分量形式。

【结论】: 算符 \mathbf{G} 在 \mathbf{F} 表象中的分量实际上是力学量 \mathbf{F} 的本征矢生成的。

同样地，态矢量的分量 a_j , c_j 排成一列矩阵

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad c = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (7)$$

于是，我们可将(5)式写成

$$\begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & \dots \\ G_{21} & G_{22} & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (8)$$

由于表示力学量的算符是厄米算符，满足算符厄米性的条件，于是

$$\langle j|G|i\rangle^* = \langle i|G|j\rangle \quad \text{或} \quad G_{ij} = G_{ji}^* \quad (9)$$

或写成：

$$G = \tilde{G}^* = G^\dagger \quad (10)$$

“ \sim ”表示转置，“ \dagger ”表示厄米共轭，即转置复共轭，因此，满足(9)，(10)式的矩阵称为厄米自共轭矩阵，简称厄米矩阵。



三、本征值方程与本征表象

在力学量 **F** 表象中，力学量 **G** 的本征值方程是

$$G a^{(\alpha)} = g_{\alpha} a^{(\alpha)} \quad (11)$$

其中 $\alpha=1,2,\dots$ ，是标记不同本征值 g_{α} 的标号。

现在假定：**F** 就是 **G**，即：考虑力学量 **G** 在它自身表象中（本征表象）的矩阵。

在 Hilbert 空间中写出 \mathbf{G} 的本征值方程

$$G|\beta\rangle = g_\beta|\beta\rangle \quad (12)$$

由(6)式有:

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta} &= \langle\alpha|G|\beta\rangle = \langle\alpha|g_\beta|\beta\rangle \\ &= g_\beta\langle\alpha|\beta\rangle = g_\beta\delta_{\alpha\beta} \end{aligned}$$

所以, 力学量 \mathbf{G} 在它自身表象中 (本征表象) 的分量为

$$\boxed{G_{\alpha\beta} = g_\beta\delta_{\alpha\beta}} \quad (13)$$

写成矩阵形式是:

$$G = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & g_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & g_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (14)$$

【结论】： 力学量在其自身表象（即：本征表象）中是对角矩阵，而对角元素为其本征值。



四、表象变换

假设：已知态矢量 $|a\rangle$ 和力学量 Q 在 F 表象中的分量，

求它们在 G 表象中的分量，这称为表象变换。

$$\text{设： } F|i\rangle = f_i|i\rangle, \quad G|\alpha\rangle = g_\alpha|\alpha\rangle$$

$$\text{已知： } a_i = \langle i|a\rangle, \quad Q_{ij} = \langle i|Q|j\rangle$$

$$\text{求： } a_\alpha \text{ 和 } Q_{\alpha\beta}$$

$$\text{由于： } a_\alpha = \langle \alpha|a\rangle \quad (15)$$

$$Q_{\alpha\beta} = \langle \alpha|Q|\beta\rangle \quad (16)$$

利用 \mathbf{F} 的本征矢的完备性条件:

$$\sum_i |i\rangle\langle i| = 1 \quad (17)$$

将(17)式分别插入(15), (16)两式, 可得:

$$\begin{aligned} a_\alpha &= \langle \alpha | a \rangle = \langle \alpha | 1 | a \rangle \\ &= \sum_i \langle \alpha | i \rangle \langle i | a \rangle = \sum_i \langle \alpha | i \rangle a_i \quad (\text{利用已知条件}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Q_{\alpha\beta} &= \langle \alpha | Q | \beta \rangle = \langle \alpha | 1 Q 1 | \beta \rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle \alpha | i \rangle \langle i | Q | j \rangle \langle j | \beta \rangle = \sum_{i,j} \langle \alpha | i \rangle Q_{ij} \langle j | \beta \rangle \end{aligned}$$

所以，态矢量 $|a\rangle$ 和力学量 Q 从力学量 F 表象到力学量 G 表象的变换公式为

$$a_\alpha = \sum_i \langle \alpha | i \rangle a_i \quad (18)$$

$$Q_{\alpha\beta} = \sum_{i,j} \langle \alpha | i \rangle Q_{ij} \langle j | \beta \rangle \quad (19)$$

公式 (18) 和 (19) 就是态矢 $|a\rangle$ 和算符 Q 从 F 表象到 G 表象 ($a_i \rightarrow a_\alpha$, $Q_{ij} \rightarrow Q_{\alpha\beta}$) 的变换分量形式。

我们可以将 $\langle i | \alpha \rangle$ 写成

$$S_{i\alpha} = \langle i | \alpha \rangle \quad (20)$$

上式写成矩阵形式:

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \quad (21)$$

而 $\langle \alpha | i \rangle$ 是 S 的厄米共轭矩阵的矩阵元, 即:

$$S_{i\alpha}^+ = \langle \alpha | i \rangle = \langle i | \alpha \rangle^* = S_{i\alpha}^* \quad (22)$$

于是(18), (19)两式矩阵元可写成:

$$a_{\alpha} = \sum_i S_{\alpha i}^+ a_i \quad (23)$$

$$Q_{\alpha\beta} = \sum_{i,j} S_{\alpha i}^+ Q_{ij} S_{j\beta} \quad (24)$$

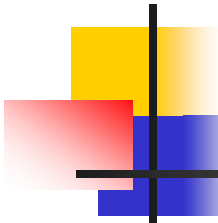
而写成矩阵形式为:

$$\boxed{a^{(G)} = S^+ a^{(F)}} \quad (25)$$

$$\boxed{\underline{Q}^{(G)} = S^+ \underline{Q}^{(F)} S} \quad (26)$$

【结论】: 公式 (25) 和 (26) 就是态矢量 $|a\rangle$ 和力学量

Q 从 F 表象到 G 表象的变换矩阵形式。



注意:

(1)、从 **F** 表象到 **G** 表象的变换矩阵 **S** 实际上是由 **F** 在 **G** 表象中的本征矢所生成。由公式 (20)

$S_{i\alpha} = \langle i | \alpha \rangle$ 可以看出: **S** 矩阵的第 **i** 行的元素, 就是 **G** 的第 α 个本征矢在 **F** 表象中的分量。

(2)、不难证明 **S** 为么正矩阵, 即满足

$$S^+ S = S S^+ = \mathbf{1} \quad (27)$$

这里的 “**1**” 表示单位矩阵。例如, 在 **G** 表象中:

$$(S^+ S)_{\alpha\beta} = \sum_i S_{\alpha i}^+ S_{i\beta} = \sum_i S_{i\alpha}^* S_{i\beta}$$

$$\begin{aligned} &= \sum_i \langle i | \alpha \rangle^* \langle i | \beta \rangle = \sum_i \langle \alpha | i \rangle \langle i | \beta \rangle \\ &= \langle \alpha | \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (28)$$

即： $S^\dagger S = 1$ （单位矩阵）。而单位矩阵在任何表象中均为单位矩阵，这就证明了(27)式。

(3)、我们以上讨论的都是分立谱的情况，对于连续谱的情况，如坐标和动量，以上公式的基本形式不变，只是将求和符号 \sum 改为积分符号。

例如：

在坐标表象和动量表象中的完备性条件分别为

$$\left. \begin{aligned} \int |p\rangle\langle p| dp &= 1 \\ \int |x\rangle\langle x| dx &= 1 \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

例 1: 写出态矢量 $|\psi, t\rangle$ 在坐标表象和动量表象之间的变换公式。

的变换公式。

解: 态矢量 $|\psi, t\rangle$ 在坐标表象和动量表象的分量形式分别是

$$\psi(x, t) = \langle x | \psi, t \rangle \quad \text{和} \quad c(p, t) = \langle p | \psi, t \rangle \quad (30)$$

利用完备性条件

$$\int |x\rangle\langle x| dx = 1 \quad \text{和} \quad \int |p\rangle\langle p| dp = 1$$

分别插入 (30) 式中, 可得

$$\left. \begin{aligned} \psi(x, t) &= \int \langle x | p \rangle \langle p | \psi, t \rangle dp = \int \langle x | p \rangle c(p, t) dp \\ c(p, t) &= \int \langle p | x \rangle \langle x | \psi, t \rangle dx = \int \langle p | x \rangle \psi(x, t) dx \end{aligned} \right\} (31)$$

其中 $\langle x|p\rangle$ 是动量在 x 表象中的本征函数，且已知

$$\langle x|p\rangle = \langle p|x\rangle^* = \left(1/\sqrt{2\pi\hbar}\right)e^{(i/\hbar)px}$$

将上式代入 (31) 式得

$$\left. \begin{aligned} \psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int c(p,t) e^{(i/\hbar)px} dp \\ c(p,t) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x,t) e^{-(i/\hbar)px} dx \end{aligned} \right\} (32)$$

这就是态矢量 $|\psi, t\rangle$ 在坐标表象和动量表象之间的变换

公式。

例 2. 已知算符 A 、 B 满足下列关系： $A^2 = 0$ ， $AA^+ + A^+A = 1$ ， $B = A^+A$ ，试在 B 表象中，求 A 、 B 的矩阵表示。

解：

根据定义 $B = A^+A$ ，有

$$B^2 = A^+AA^+A = A^+A(1 - AA^+) = A^+A - A^+A^2A^+,$$

由于 $A^2 = 0$ ，故有

$$B^2 = B \tag{1}$$

由此可求出 B 的本征值为 0 ， 1 。

在 B 表象中, B 为对角矩阵, 对角矩阵元等于本征值,

即

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

设

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \quad (3)$$

应有:

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

$$AA^+ = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} = 1 - B = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

$$A^2 = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = 0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (6)$$

解矩阵方程 (4) — (6), 可得

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

可取:

$$b = e^{i\alpha}, \quad (\alpha \text{ 为实数}) \quad (8)$$

所以在 B 表象中, A 的矩阵表示为:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\alpha} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix} \quad (9)$$

最简单的一种选择是 $\alpha = 0$:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$



§ 4.4 谐振子的占有数表象

前面三节中，讨论了量子力学理论可以在 Hilbert 空间中以抽象的形式建立起来，同时，也看到在解决实际问题时，需要根据所研究问题的特点，选用适当的表象来求解。

在讨论的大多数问题中，通常用坐标表象。但对于有些问题，若用坐标表象来求解，会造成较繁琐的数学困难。

下面，我们通过一个例子：线性谐振子的例子，我们可以不采用坐标表象也可以很方便地求解。（关于采用坐标表象的求解见下一章）

线性谐振子的经典哈密顿函数为：

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (1)$$

在量子力学中，谐振子的哈密顿算符也具有和(1)式相同的形式，只不过是式中的 x 和 p 变成算符。（下面我们省略了 \wedge 符号）

大家知道，算符 x 和 p 的对易关系是：

$$[x, p] \equiv xp - px = i\hbar \quad (2)$$

注意，由于我们没有采用具体表象， x 和 p 都是 Hilbert 空间的抽象算符。

下面，我们就是要从对易关系(2)式和(1)出发，来求解谐振子的定态问题。

为了便于求解，我们首先定义一个新的算符 a ：

$$\boxed{a = \alpha x + i\beta p} \quad (3)$$

其中 α ， β 是两个待定的实系数。由于上式中包含了一个虚因子 i ，所以算符 a 不是厄米（自共轭）算符。但它的厄米共轭为：

$$\boxed{a^{\dagger} = \alpha x^{\dagger} + i^* \beta p^{\dagger} = \alpha x - i\beta p} \quad (4)$$

上式利用了 $x = x^{\dagger}$ ， $p = p^{\dagger}$

于是，算符 a 和 a^+ 的对易关系是：

$$\begin{aligned} [a, a^+] &= [(\alpha x + i\beta p), (\alpha x - i\beta p)] \\ &= i\beta\alpha [p, x] - i\alpha\beta [x, p] \\ &= 2\alpha\beta\hbar \end{aligned} \tag{5}$$

为了将 a 和 a^+ 的对易关系简单化，即使得

$$\boxed{[a, a^+] = 1} \tag{6}$$

则只需要待定系数满足

$$\boxed{\alpha\beta = \frac{1}{2\hbar}} \tag{7}$$

由(7)式还不能最后确定系数 α 和 β ，还需要另一个条件（见后面）。

现在，我们来求解对易关系式(6)式，具体而言，就是要以这一对易关系为出发点，采用适当的表象，求出 a 和 a^+ 的矩阵形式。下面，我们通过以下步骤来完成。

1. 定义一个新的算符 N

$$N = a^+ a \quad (8)$$

可以证明：算符 N 是厄米算符。

证：
$$N^+ = (a^+ a)^+ = a^+ (a^+)^+ = a^+ a = N$$

2. 由于算符 N 是厄米算符，所以它的本征值是实数。

证：设 N 的本征方程为

$$N|n\rangle = n|n\rangle$$

n 为本征值， $|n\rangle$ 为与 n 对应的本征矢。

用左乘上式，可得：

$$\langle n|a^+ a|n\rangle = \langle n|N|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n \quad (9)$$

假定算符 a 作用在态矢量 $|n\rangle$ 上，得到另一个矢量 $|b\rangle$ ，即：

$$a|n\rangle = |b\rangle \quad (10)$$

(10)取厄米共轭: $\langle n|a^+ = \langle b|$

于是由(9)式得:

$$n = \langle n|a^+ a|n\rangle = \langle b|b\rangle \quad (11)$$

$\langle b|b\rangle$ 表示矢量 $|b\rangle$ 的模的平方, 恒正

$$\therefore n \geq 0$$

3. 由对易关系式(6)式 ($[a, a^+] = 1$), 可以证明: 如果 $N|n\rangle = n|n\rangle$, 而 $a|n\rangle \neq 0$, 则: $a|n\rangle$ 也是算符 N 的本征矢, 对应的本征值为 $n-1$ 。

证: 将算符 N 作用到 $a|n\rangle$ 上, 并利用(6)式:

$$\begin{aligned} N a |n\rangle &= a^+ a a |n\rangle \\ &= (a a^+ - 1) a |n\rangle \\ &= a a^+ a |n\rangle - a |n\rangle \\ &= a N |n\rangle - a |n\rangle \\ &= n a |n\rangle - a |n\rangle \\ &= (n-1) a |n\rangle \end{aligned}$$

即证。

用 $|n-1\rangle$ 表示 N 的本征值为 $n-1$ 的归一化的本征矢,

由于 $a|n\rangle$ 也是本征值为 $n-1$ 的本征矢, 于是:

$$a|n\rangle = c|n-1\rangle$$

$a|n\rangle$ 为一常数。上式取厄米共轭: $\langle n|a^\dagger = \langle n-1|c^*$

于是:

$$n = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n-1|c^* c|n-1\rangle = |c|^2$$

取 c 为实数: $c = \sqrt{n}$

即:

$$\boxed{a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle} \quad (12)$$

4. 由对易关系式(6)式, 还可以证明: $a^+|n\rangle$ 也是算符 N

的本征矢, 对应的本征值为 $n+1$ 。

证:

$$\begin{aligned}Na^+|n\rangle &= a^+aa^+|n\rangle \\ &= a^+(a^+a+1)|n\rangle \\ &= a^+a^+a|n\rangle + a^+|n\rangle \\ &= a^+N|n\rangle + a^+|n\rangle \\ &= na^+|n\rangle + a^+|n\rangle \\ &= (n+1)a^+|n\rangle\end{aligned}$$

即证。

5. 由以上 3、4 两点可知： N 有一系列本征值，每两个相邻本征值之间相差 1，因而 N 的本征值谱可写成：

$$\dots, n+2, n+1, n, n-1, n-2, \dots \quad (13)$$

但是，如果这一序列可以无限地向右方向延伸下去，就会和第 2 条结论“ N 的本征值恒正”相矛盾。因此，序列(13)必须在右方某处，例如：在 $n - n'$ （其中 n' 为一正整数和零）处截断，即要求第 3 点中

$$a|n - n'\rangle = 0 \quad (n' \text{ 为某一正整数或零}) \quad (14)$$

取上式复共轭： $\langle n - n'|a^\dagger = 0$ 再与(14)式相左乘

$$\langle n-n' | a^+ a | n-n' \rangle = 0$$

即： $\langle n-n' | N | n-n' \rangle = (n-n') \langle n-n' | n-n' \rangle$
 $= n-n' = 0$

$$\therefore n = n'$$

$$\boxed{n = 0, 1, 2, \dots}$$

(15)

这就是 N 的本征值谱。



6. 选用 N 表象来求 a 和 a^+ 的矩阵元

用 $\langle n' |$ 左乘(12)式: $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$

得:

$$\langle n'|a|n\rangle = a_{n'n} = \sqrt{n}\langle n'|n-1\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1} \quad (16)$$

这表明: 矩阵 a 的不为零得矩阵元是

$$\boxed{a_{n-1,n} = \sqrt{n}} \quad (17)$$

再取(16)式的厄米共轭, 得

$$\langle n|a^+|n'\rangle = a^+_{n,n'} = \sqrt{n}\delta_{n',n-1}$$

将上式中的符号 n 和 n' 对换, 并注意到: 在 $\delta_{n,n'-1}$ 中,

$n = n' - 1 \Rightarrow n' = n + 1$, 因而 $\delta_{n, n' - 1} = \delta_{n', n + 1}$, 即:

$$\sqrt{n'} \delta_{n, n' - 1} = \sqrt{n + 1} \delta_{n', n + 1}$$

于是:

$$a^+_{n', n} = \sqrt{n + 1} \delta_{n', n + 1} \quad (18)$$

因而, 不为零的矩阵元是:

$$\boxed{a^+_{n + 1, n} = \sqrt{n + 1}} \quad (19)$$

利用(17)和(19)两式, 可将 a 和 a^+ 写成矩阵形式:

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots \\ \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$a^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \ddots \\ \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix}$$

(20)

这样我们就可以求出算符 a ， a^+ 的具体表达式了。

注意：矩阵(20)式的写法，例如算符 a 矩阵元表达式为

$$a_{n'n} = \langle n' | a | n \rangle = \sqrt{n} \langle n' | n-1 \rangle = \sqrt{n} \delta_{n', n-1}$$

其中 n' 表示行， n 表示列：

- (1) n' 和 n 是相互独立取值的 ($n', n = 0, 1, 2, \dots$);
- (2) 只有当 $n' = n - 1$ 时，矩阵元 $a_{n'n}$ 才不为零。

求出 a 和 a^+ 并不是我们的最终目的，我们的目的是利用 a ， a^+ 来求解谐振子的定态问题。

为此，由前面(3)和(4)式

$$\left. \begin{aligned} a &= \alpha x + i\beta p \\ a^+ &= \alpha x - i\beta p \end{aligned} \right\}$$

$$\Rightarrow \left\{ \begin{aligned} x &= \frac{a + a^+}{2\alpha} \\ p &= \frac{a - a^+}{2i\beta} \end{aligned} \right. \quad (21)$$

其中 $\alpha\beta = \frac{1}{i\hbar}$ 。将(21)式代入谐振子的哈密顿算符，得

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \\ &= \left(\frac{m\omega^2}{8\alpha^2} - \frac{1}{8m\beta^2}\right)(a^2 + a^{+2}) \\ &\quad + \left(\frac{m\omega^2}{8\alpha^2} + \frac{1}{8m\beta^2}\right)(aa^+ + a^+a) \quad (22) \end{aligned}$$

注意：在推导上式时， a 和 a^+ 是算符，而不是数。

为了使 \mathbf{H} 在 $N = a^+a$ 的表象中，就必须使 $(a^2 + a^{+2})$ 项的系数为零，即可得到 α 和 β 的另一个关系式：

$$\frac{m\omega^2}{8\alpha^2} - \frac{1}{8m\beta^2} = 0 \quad (23)$$

与 $\alpha\beta = \frac{1}{i\hbar}$ 一起，可求出 α, β

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}, \quad \beta = \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \quad (24)$$

将(23)，(24)代入(22)可得谐振子的 \mathbf{H} 在 N 表象的表示式：

$$\boxed{H = (aa^+ + a^+a) \frac{\hbar\omega}{2}} \quad (25)$$

利用 a 和 a^+ 的对易关系式 $aa^+ - a^+a = 1$ ，(25)式又可写成

$$\begin{aligned} H &= (a^+ a + \frac{1}{2}) \hbar \omega \\ &= (N + \frac{1}{2}) \hbar \omega \end{aligned} \quad (26)$$

而算符 N 的本征值为 n ，于是，谐振子的能量本征值为

$$\boxed{E = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (27)$$

这就是我们要得到的结果。

由(27)式我们可得到以下结论：

① 谐振子的能级是等间距的，相邻能级之间相差 $\hbar\omega$ 。

② 谐振子的基态能量，即零点振动能量是 $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ 。

零点能的存在是微观粒子的波粒二象性的体现，也可以说是测不准关系的后果。

如果以基态能量作为计算能量的起点，则谐振子的定态能量是 $\hbar\omega$ 的整数倍。

如果谐振子和外界交换能量，那么它只能由一个定态跃迁到另一个定态，而所交换的能量只能是 $\hbar\omega$ 的整数倍。这种交换能量时有最小单元 $\hbar\omega$ 的存在，可理解为是存在一种基元粒子，这中基元粒子的能量是 $\boxed{\varepsilon = \hbar\omega}$ 。

于是，谐振子处于第 n 个激发态，能量为 $E - E_0 = n\hbar\omega$ ，可以认为是存在 n 个这样的基元粒子。

(见书中图) 因此， n 被称为占有数或粒子数。以本征矢 $|n\rangle$ 为基矢的表象称为占有数表象。 $N = a^+ a$ 就是占有数算符或粒子数算符。

由前面的结论

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

可看出：经算符 a 作用后，体系的状态由 $|n\rangle$ 变到状态 $|n-1\rangle$ ，即粒子数减少一个，所以，算符 a 称为粒子的湮灭算符。同理，算符 a^+ 称为粒子的产生算符。

最后，让我们写出算符 x 和 p 在占有数表象中的矩阵元。由(21)和(24)可得：

$$\left. \begin{array}{l} x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^+) \\ p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a^+ - a) \end{array} \right\} \quad (28)$$

利用 a 和 a^+ 的矩阵表达式，可写出 x 和 p 在占有数表象中的矩阵。

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \quad (29)$$

$$p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \ddots \end{pmatrix} \quad (30)$$

例题：产生算符 a^+ 和湮灭算符 a 满足 $[a, a^+] = 1$ 的对易关系，试证明

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

式中 λ 为一参数。

证法一：

设

$$f(\lambda) = e^{\lambda a^+ a} a e^{-\lambda a^+ a} \quad (1)$$

其中 λ 为参数。

显然有：

$$f(0) = a \quad (2)$$

将 (1) 式对 λ 求导：

$$\frac{df(\lambda)}{d\lambda} = e^{\lambda a^+ a} (a^+ a^2 - a a^+ a) e^{-\lambda a^+ a} \quad (3)$$

利用对易关系 $[a, a^+] = 1$ ，方程(3)可写成

$$\frac{df(\lambda)}{d\lambda} = -f(\lambda) \quad (4)$$

其解为

$$f(\lambda) = f(0)e^{-\lambda} = ae^{-\lambda} \quad (5)$$

即证。

证法二：欲证 $e^{\lambda a^+} a e^{-\lambda a^+} = e^{-\lambda} a$

只需证 $e^{\lambda(a^+ a + 1)} a e^{-\lambda a^+} = a$

即要证 $e^{\lambda a a^+} a e^{-\lambda a^+} = a$ (1)

考虑 $e^{\lambda x} = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} x^n$ ，于是有

$$e^{\lambda a a^+} = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} (a a^+)^n,$$

因此： $e^{\lambda a a^+} a = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} (a a^+)^n a,$ (2)

利用数学归纳法（或其它方法）容易证明

$$(aa^+)^n a = a(a^+a)^n, \quad (3)$$

将（3）代入（2）式得

$$\begin{aligned} e^{\lambda aa^+} a &= \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} (aa^+)^n a = \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} a (a^+a)^n \\ &= a \sum_n \frac{\lambda^n}{n!} (a^+a)^n = a e^{\lambda a^+ a} \end{aligned} \quad (4)$$

将（4）代入（1）式的左边，有

$$e^{\lambda aa^+} a e^{-\lambda a^+ a} = a e^{\lambda a^+ a} e^{-\lambda a^+ a} = a = \text{右边},$$

即证。