逐光知理 · 考研真题详解

上海大学 2025 年硕士研究生招生考试

812 量子力学 · 参考答案与解析（本站重新编撰）

共 14 题 · 满分 150 分 · 考试时间 180 分钟 · 答案与解析由本站独立编撰

本答案与解析由逐光知理根据重排题干独立编撰，未复制原卷答案；计算题给出关键步骤与结果，选择题给出选项判断依据。

一、判断题（共 24 分）

1. 3 分

答案 ×

解析

束缚态（无限深势阱、氢原子、谐振子）的能量分立，但自由粒子、散射态以及氢原子电离后的态具有连续谱。氢原子主量子数 $n \to \infty$ 时能级间距趋于零，即并入连续谱。故「所有能量都分立」不成立。

2. 3 分

答案 ×

解析

氢原子波函数 $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ 的角向部分一般依赖角度；只有 $l=0$ 的 s 态（$Y_{00}=1/\sqrt{4\pi}$）才是球对称的，p、d 等态均有角向节面。基态 $1s$ 球对称不代表所有波函数都球对称。

3. 3 分

答案 ×

解析

复合粒子的统计性质由其组成费米子数的奇偶决定，不能由总自旋反推。例如两个费米子组成的氘核自旋为 1，却是玻色子；三个夸克组成的质子自旋 $1/2$ 才是费米子。五夸克态由 4 个夸克加 1 个反夸克（共 5 个费米子，奇数）组成，因而表现为费米子，其自旋恰为 $1/2$ 只是巧合。夸克本身是费米子须由夸克模型与泡利原理单独确定。

4. 3 分

> 答案　×

解析

各向同性三维谐振子 $E=(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2})\hbar\omega$，第一激发态对应 $n_x+n_y+n_z=1$，有 $(1,0,0)$、$(0,1,0)$、$(0,0,1)$ 三个态，简并度为 3，是简并的。

---

5. 3 分

> 答案　✓

解析

密度算符 ρ 满足 $\mathrm{tr}\rho=1$、ρ 厄米且半正定。$\mathrm{tr}\rho^2=1$ 时为纯态（$\rho=|\psi\rangle\langle\psi|$），$\mathrm{tr}\rho^2<1$ 时为混态。两者同一形式，只是纯度不同。

---

6. 3 分

> 答案　×

解析

变分法原则上可估算激发态：把试探波函数限制在与已知低能本征态正交的子空间内，或用极小极大原理（对第 k 个本征值依次取极值），即可给出激发态能量的上界。只是激发态的变分计算更复杂、上界较松。

---

7. 3 分

> 答案　×

解析

波函数一般为复函数。整体相位虽不可观测，但不同分量之间的相对相位会影响干涉、动量期望值 $\langle p\rangle=\mathrm{i}\hbar\int\psi\nabla\psi^*\mathrm{d}^3r$ 等可观测量；定态波函数可取实数，但含时态（如 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(kx-\omega t)}$ 平面波）必须为复数。

---

8. 3 分

> 答案　✓

解析

设 $\hat{A}$ 厄米，对任意态 $\langle\hat{A}^2\rangle=\langle\psi|\hat{A}^\dagger\hat{A}|\psi\rangle=\langle\hat{A}\psi|\hat{A}\psi\rangle=\|\hat{A}\psi\|^2\geqslant 0$，即 $\hat{A}^2$ 的期望值非负，其本征值（$\hat{A}$ 本征值的平方）也非负。

二、计算题（共 90 分）

1. 30 分

> 答案　（1）本征态与本征值：

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a},\qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2},\qquad n=1,2,3,\cdots$$

（2）任意 t 时刻

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{1+|b|^2}}\left[\psi_1(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar}+b\,\psi_2(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}\right]$$

（3）能量平均值

$$\langle E\rangle=\frac{E_1+|b|^2E_2}{1+|b|^2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\cdot\frac{1+4|b|^2}{1+|b|^2}$$

解析

（1）势阱内 $0<x<a$ 时 $V=0$，定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=E\psi,$$

记 $k=\sqrt{2mE}/\hbar$，通解 $\psi=A\sin kx+B\cos kx$。阱外 $V=\infty$ 要求 $\psi=0$，边界条件 $\psi(0)=\psi(a)=0$ 给出 $B=0$、$\sin ka=0$，故 $ka=n\pi$，$n=1,2,\cdots$（$n=0$ 给零解舍去）。

于是

$$E_n=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2},\qquad \psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a},$$

系数由 $\int_0^a|\psi_n|^2\mathrm{d}x=1$ 定出。本征函数正交归一：$\int_0^a\psi_m\psi_n\,\mathrm{d}x=\delta_{mn}$。

（2）$t=0$ 波函数已是本征态的线性组合，系数为 $c_1=\dfrac{1}{\sqrt{1+|b|^2}}$、$c_2=\dfrac{b}{\sqrt{1+|b|^2}}$。

归一化检验：$|c_1|^2+|c_2|^2=\dfrac{1+|b|^2}{1+|b|^2}=1$ ✓。

每个分量按 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/\hbar}$ 演化，故

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{1+|b|^2}}\left[\psi_1(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_1t/\hbar}+b\,\psi_2(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}\right]。$$

因 $E_1\neq E_2$，两分量相位差随时间变化，$|\psi(x,t)|^2$ 会呈现「拍」式的往复振荡，不再与 $t=0$ 相同。

（3）能量守恒，平均值不随时间变化：

$$\langle E\rangle=|c_1|^2E_1+|c_2|^2E_2=\frac{E_1+|b|^2E_2}{1+|b|^2}。$$

代入 $E_1=\dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$、$E_2=\dfrac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ 得

$$\langle E\rangle=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\cdot\frac{1+4|b|^2}{1+|b|^2}。$$

（若 $|b|=1$，则 $\langle E\rangle=\dfrac{5}{2}E_1$，即 E_1 与 E_2 各占一半权重；本题未给定 a 的具体值，结果以 E_1 的倍数表示。）

---

2. 30 分

> **答案** 第（1）（2）问：四个耦合态及其非耦合展开（记 $|\uparrow\rangle$、$|\downarrow\rangle$ 为单粒子 S_z 本征态）：
>
> $$|1,1\rangle=|\uparrow\uparrow\rangle,\qquad |1,-1\rangle=|\downarrow\downarrow\rangle$$
>
> $$|1,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle\right),\qquad |0,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle\right)$$
>
> （3）能量本征值
>
> $$E\left(|1,\pm1\rangle\right)=\frac{A\hbar^2}{4},\qquad E_{\pm}=-\frac{A\hbar^2}{4}\pm\hbar\sqrt{\frac{A^2\hbar^2}{4}+B^2}$$
>
> （4）$E\left(|1,\pm1\rangle\right)$ 为二重简并；E_+、E_- 各为单态、非简并。

解析

先把 $\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2$ 用总角动量表示：

$$\vec{S}=\vec{S}_1+\vec{S}_2,\qquad \vec{S}^2=\vec{S}_1^2+\vec{S}_2^2+2\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2\Rightarrow\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2=\frac{1}{2}\left(\vec{S}^2-\vec{S}_1^2-\vec{S}_2^2\right)。$$

对自旋 $1/2$，$\vec{S}_1^2=\vec{S}_2^2=\dfrac{3\hbar^2}{4}$；三重态 $s=1$ 时 $\vec{S}^2=2\hbar^2$，
单态 $s=0$ 时 $\vec{S}^2=0$。故

$$\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2=\begin{cases}\dfrac{\hbar^2}{4}, & s=1\\[2mm] -\dfrac{3\hbar^2}{4}, & s=0\end{cases}$$

耦合态即熟知的单-三重态：$|1,1\rangle=|\uparrow\uparrow\rangle$、$|1,-1\rangle=|\downarrow\downarrow\rangle$、
$|1,0\rangle=(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$、$|0,0\rangle=(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$。

再看 B 项。$S_{1z}-S_{2z}$ 在 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 与 $|\downarrow\downarrow\rangle$ 上给零：
$\frac{\hbar}{2}-\frac{\hbar}{2}=0$、$-\frac{\hbar}{2}-\left(-\frac{\hbar}{2}\right)=0$。故

$$E\left(|1,\pm1\rangle\right)=A\cdot\frac{\hbar^2}{4}+0=\frac{A\hbar^2}{4},$$

与 B 无关——$m_s=\pm1$ 两个态不受 B 项影响。

对 $|1,0\rangle$、$|0,0\rangle$：$\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2$ 的对角元分别为 $\frac{\hbar^2}{4}$ 与 $-\frac{3\hbar^2}{4}$；
而

$$(S_{1z}-S_{2z})\,|1,0\rangle=\hbar\,|0,0\rangle,\qquad (S_{1z}-S_{2z})\,|0,0\rangle=\hbar\,|1,0\rangle,$$

（因为 $S_{1z}-S_{2z}$ 作用在 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 上给 $\hbar$、在 $|\downarrow\uparrow\rangle$ 上给 $-\hbar$）。
于是在 $\{|1,0\rangle,|0,0\rangle\}$ 基下

$$\hat{H}=\begin{pmatrix}\dfrac{A\hbar^2}{4} & B\hbar\\ B\hbar & -\dfrac{3A\hbar^2}{4}\end{pmatrix}。$$

求本征值：迹为 $-\dfrac{A\hbar^2}{2}$，行列式为 $-\dfrac{3A^2\hbar^4}{16}-B^2\hbar^2$，

$$\lambda=\frac{1}{2}\left[-\frac{A\hbar^2}{2}\pm\sqrt{\frac{A^2\hbar^4}{4}+4\left(\frac{3A^2\hbar^4}{16}+B^2\hbar^2\right)}\right]=-\frac{A\hbar^2}{4}\pm\hbar\sqrt{\frac{A^2\hbar^2}{4}+B^2}。$$

于是三个能级：

$$E\left(|1,\pm1\rangle\right)=\frac{A\hbar^2}{4};\qquad E_{\pm}=-\frac{A\hbar^2}{4}\pm\hbar\sqrt{\frac{A^2\hbar^2}{4}+B^2}。$$

第（3）（4）问：$|1,1\rangle$ 与 $|1,-1\rangle$ 能量相同，二重简并，这是旋转对称（绕 z 轴）的残留。
另两个本征态是 $|1,0\rangle$ 与 $|0,0\rangle$ 的线性组合，能量一般不同，非简并。

若 $B=0$，则 $E_{\pm}=-\frac{A\hbar^2}{4}\pm\frac{A\hbar^2}{2}$，即 $E_{+}=\frac{A\hbar^2}{4}$、$E_{-}=-\frac{3A\hbar^2}{4}$，
三重态三条全部简并于 $\frac{A\hbar^2}{4}$（简并度 3），单态单独在 $-\frac{3A\hbar^2}{4}$。
可见 B 项的作用正是破坏旋转对称、部分解除三重态的三重简并：$m_s=\pm1$ 仍简并，$m_s=0$ 与单态混合后分裂。
这是「外场部分解除简并」的典型例子。

---

3. 30 分

答案　（1）$\varepsilon=0$ 时 $\hat{H}=E_0\,\mathrm{diag}(1,1,2)$：$E=E_0$ 为二重简并（本征态 $|1\rangle$、$|2\rangle$），
$E=2E_0$ 非简并（本征态 $|3\rangle$）。
（2）基态能量一级近似

$$E_0^{(\text{基})}=E_0+\varepsilon E_0\,,$$

对应零级态 $\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle-|2\rangle\right)$。
（3）第一激发态能量至二级近似

$$E^{(\text{第一激发})}=E_0+3\varepsilon E_0-18\varepsilon^2E_0\,,$$

对应零级态 $\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle+|2\rangle\right)$。

解析
取 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}'$，

$$\hat{H}_0 = E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \qquad \hat{H}' = E_0\,\varepsilon \begin{pmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \\ 3 & 3 & 2 \end{pmatrix}。$$

（1）$\varepsilon = 0$ 时对角化平凡：$E_1 = E_2 = E_0$（二重简并，态 $|1\rangle = (1,0,0)^{\mathrm{T}}$、$|2\rangle = (0,1,0)^{\mathrm{T}}$），$E_3 = 2E_0$（非简并，态 $|3\rangle = (0,0,1)^{\mathrm{T}}$）。

（2）$\varepsilon \neq 0$ 时，零级基态仍在二重简并子空间 $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ 内，须用简并微扰。
截取 $\hat{H}'$ 在该子空间的 2×2 块：

$$V = E_0\varepsilon \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix},$$

本征值为 $E_0\varepsilon(2 \pm 1)$，即 $3\varepsilon E_0$ 与 εE_0，本征矢 $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, \pm 1)^{\mathrm{T}}$。取较低者：

$$E_0^{(\text{基})} = E_0 + \varepsilon E_0, \qquad |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle - |2\rangle\right),$$

这就是基态能量的一级近似。注意一级修正不来自对角元之和，而来自简并子空间内的对角化。

（3）第一激发态。简并解除后两条能级为 $E_0 + \varepsilon E_0$（基态）与 $E_0 + 3\varepsilon E_0$（第一激发态），后者零级态为 $|a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$。
它与 $|3\rangle$（$2E_0$）之间还有耦合，需要二级修正。$\hat{H}'$ 在 $|a\rangle$ 与 $|3\rangle$ 之间的矩阵元：

$$\langle 3|\hat{H}'|a\rangle = E_0\varepsilon \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}\,(3+3) = 3\sqrt{2}\,\varepsilon E_0。$$

二级修正（分母用零级能量差 $E_0 - 2E_0 = -E_0$）：

$$E^{(2)} = \frac{|\langle 3|\hat{H}'|a\rangle|^2}{E_0 - 2E_0} = \frac{18\varepsilon^2 E_0^2}{-E_0} = -18\varepsilon^2 E_0。$$

故第一激发态能量至二级近似为

$$E^{(\text{第一激发})} = E_0 + 3\varepsilon E_0 - 18\varepsilon^2 E_0。$$

顺带校核基态：$\langle 3|\hat{H}'|b\rangle = E_0\varepsilon\frac{1}{\sqrt{2}}(3-3) = 0$（$|b\rangle$ 为基态零级态），
故基态无二级修正，$E^{(\text{基})} = E_0 + \varepsilon E_0$ 已是二阶精度。
中间能级 $|3\rangle$ 的二级修正为 $-\dfrac{18\varepsilon^2 E_0^2}{2E_0 - E_0} = -18\varepsilon^2 E_0$，
与第一激发态对称——两支相互排斥，符合「能级排斥」的一般规律。

三、证明题（共 36 分）

(1) 12 分

> **答案** 由 $[\hat{x}, \hat{H}] = \dfrac{\mathrm{i}\hbar}{m}\hat{p}$ 在 $\hat{H}$ 本征态之间取矩阵元即得：

$$\langle n|\hat{p}|m\rangle = \frac{m}{\mathrm{i}\hbar}\left(E_m - E_n\right)\langle n|\hat{x}|m\rangle = \frac{\mathrm{i}m}{\hbar}\left(E_n - E_m\right)\langle n|\hat{x}|m\rangle 。$$

解析

设 $\hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$，计算对易子：

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{2m}\left[\hat{x}, \hat{p}^2\right] = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p}\right) = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}\cdot \mathrm{i}\hbar + \mathrm{i}\hbar\hat{p}\right) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\hat{p}。$$

在 $\hat{H}$ 的定态 $|n\rangle$、$|m\rangle$（$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$）之间取矩阵元：

$$\langle n|[\hat{x}, \hat{H}]|m\rangle = \langle n|\hat{x}\hat{H}|m\rangle - \langle n|\hat{H}\hat{x}|m\rangle = \left(E_m - E_n\right)\langle n|\hat{x}|m\rangle ,$$

（用到 $\hat{H}$ 厄米，左作用时 $\langle n|\hat{H} = E_n\langle n|$）。另一方面

$$\langle n|[\hat{x}, \hat{H}]|m\rangle = \frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\langle n|\hat{p}|m\rangle 。$$

两式相等：

$$\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\langle n|\hat{p}|m\rangle = \left(E_m - E_n\right)\langle n|\hat{x}|m\rangle \Longrightarrow \langle n|\hat{p}|m\rangle = \frac{\mathrm{i}m}{\hbar}\left(E_n - E_m\right)\langle n|\hat{x}|m\rangle 。$$

注意 $\dfrac{m}{\mathrm{i}\hbar} = -\dfrac{\mathrm{i}m}{\hbar}$，同时 $E_m - E_n = -(E_n - E_m)$，两个负号相抵，故结果可写成
$+\dfrac{\mathrm{i}m}{\hbar}(E_n - E_m)\langle n|\hat{x}|m\rangle$。

---

(2) 12 分

答案 由（1）得 $\left(E_n - E_m\right)\langle n|\hat{x}|m\rangle = \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}m}\langle n|\hat{p}|m\rangle$，
对 n 求和并用 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$：

$$\sum_n \left(E_n - E_m\right)^2 \left|\langle n|\hat{x}|m\rangle\right|^2 = \frac{\hbar^2}{m^2}\sum_n \left|\langle n|\hat{p}|m\rangle\right|^2 = \frac{\hbar^2}{m^2}\langle m|\hat{p}^2|m\rangle 。$$

解析

从（1）的结果出发，两边同乘 $\left(E_n - E_m\right)$：

$$\left(E_n - E_m\right)^2 \left|\langle n|\hat{x}|m\rangle\right|^2 = \left(E_n - E_m\right)\langle n|\hat{x}|m\rangle \cdot \left[\left(E_m - E_n\right)\langle n|\hat{x}|m\rangle\right]^* 。$$

用 $E_n - E_m$ 实、$\langle m|\hat{x}|n\rangle = \langle n|\hat{x}|m\rangle^*$，后一因子可写成
$\left(E_n - E_m\right)\langle m|\hat{x}|n\rangle$，代入（1）式的共轭形式
$\left(E_n - E_m\right)\langle m|\hat{x}|n\rangle = \dfrac{\hbar}{\mathrm{i}m}\langle m|\hat{p}|n\rangle$：

$$\left(E_n - E_m\right)^2 \left|\langle n|\hat{x}|m\rangle\right|^2 = \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}m}\langle n|\hat{p}|m\rangle\right)\left(\frac{\hbar}{-\mathrm{i}m}\langle m|\hat{p}|n\rangle\right) = \frac{\hbar^2}{m^2}\left|\langle n|\hat{p}|m\rangle\right|^2 。$$

对 n 求和，利用完备性 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$：

$$\sum_n |\langle n|\hat{p}|m\rangle|^2 = \sum_n \langle m|\hat{p}|n\rangle\langle n|\hat{p}|m\rangle = \langle m|\hat{p}\left(\sum_n |n\rangle\langle n|\right)\hat{p}|m\rangle = \langle m|\hat{p}^2|m\rangle。$$

（$\hat{p}$ 厄米，$\langle n|\hat{p}|m\rangle = \langle m|\hat{p}|n\rangle^*$。）于是

$$\sum_n (E_n - E_m)^2 |\langle n|\hat{x}|m\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m^2}\langle m|\hat{p}^2|m\rangle。$$

物理含义：该式是「求和规则」——把偶极矩阵元按能量差加权求和，等于动量平方的平均值，可用于由光谱强度反推动量分布。

---

(3) 12 分

> 答案　用二次对易子 $[\hat{x},[\hat{H},\hat{x}]] = \dfrac{\hbar^2}{m}$ 在 $|m\rangle$ 上取期望值即可：
>
> $$\sum_n (E_n - E_m)|\langle n|\hat{x}|m\rangle|^2 = \frac{1}{2}\langle m|[\hat{x},[\hat{H},\hat{x}]]|m\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}。$$

解析

第一步，求二次对易子。由（1）已知 $[\hat{x},\hat{H}] = \dfrac{\mathrm{i}\hbar}{m}\hat{p}$，故

$$[\hat{H},\hat{x}] = -[\hat{x},\hat{H}] = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\hat{p},$$

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

第二步，把它按定义展开：

$$\left[\hat{x},[\hat{H},\hat{x}]\right] = \hat{x}\left(\hat{H}\hat{x}-\hat{x}\hat{H}\right) - \left(\hat{H}\hat{x}-\hat{x}\hat{H}\right)\hat{x} = 2\hat{x}\hat{H}\hat{x} - \hat{x}^2\hat{H} - \hat{H}\hat{x}^2。$$

在 $|m\rangle$ 上取期望值。用 $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$ 与完备性 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$：

$$\langle m|\hat{x}\hat{H}\hat{x}|m\rangle = \sum_n E_n |\langle n|\hat{x}|m\rangle|^2 ,$$

$$\langle m|\hat{x}^2\hat{H}|m\rangle = \langle m|\hat{H}\hat{x}^2|m\rangle = E_m\sum_n |\langle n|\hat{x}|m\rangle|^2 ,$$

故

$$\langle m|\left[\hat{x},[\hat{H},\hat{x}]\right]|m\rangle = 2\sum_n (E_n - E_m)|\langle n|\hat{x}|m\rangle|^2 。$$

第三步，两式相等即得

$$\sum_{n}\left(E_n-E_m\right)\left|\langle n|\hat{x}|m\rangle\right|^2=\frac{1}{2}\cdot\frac{\hbar^2}{m}=\frac{\hbar^2}{2m}。$$

物理含义：这是振子强度求和规则（Thomas-Reiche-Kuhn 求和规则）——对任一束缚定态，「各跃迁的能量差 × 矩阵元模方」之和为常数 $\hbar^2/(2m)$，与势场形状无关，根源只是 $[\hat{x},\hat{p}]=\mathrm{i}\hbar$。