一

(1)

推导两算符不确定度满足的关系，并说明什么样的两个算符可以同时测准。

解:

schwarz 不等式:

$$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geqslant |\langle\alpha|\beta\rangle|^2$$

令 $|\alpha\rangle = (A-\bar{A})|\psi\rangle, |\beta\rangle = (B-\bar{B})|\psi\rangle$，其中，$A, B$ 都是厄米算符，则:

$$\langle\alpha| = \langle\psi|(A-\bar{A})^\dagger = \langle\psi|(A-\bar{A}),\ \ \langle\beta| = \langle\psi|(B-\bar{B})^\dagger = \langle\psi|(B-\bar{B})$$

代入 schwarz 不等式:

$$\langle\psi|(A-\bar{A})^2|\psi\rangle\langle\psi|(B-\bar{B})^2|\psi\rangle \geqslant |\langle\psi|(A-\bar{A})(B-\bar{B})|\psi\rangle|^2$$

即:

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2(\Delta B)^2 &\geqslant |\langle\psi|(AB-\bar{A}B-\bar{B}A+\bar{A}\bar{B})|\psi\rangle|^2 \\ &= |\langle\psi|AB|\psi\rangle - \bar{A}\bar{B}|^2\end{aligned}$$

注意到，对于任意复数 $z = a + \mathrm{i}b$，有:

$$\begin{aligned}|z|^2 &= |a|^2 + |b|^2 \\ &\geqslant |b|^2 \\ &= \left|\frac{z-z^*}{2\mathrm{i}}\right|^2\end{aligned}$$

于是:

$$
\begin{aligned}
(\Delta A)^2(\Delta B)^2 &\geqslant |\langle\psi|AB|\psi\rangle-\bar{A}\bar{B}|^2\\
&\geqslant\left|\frac{(\langle\psi|AB|\psi\rangle-\bar{A}\bar{B})-(\langle\psi|AB|\psi\rangle-\bar{A}\bar{B})^*}{2\mathrm{i}}\right|^2\\
&=\left|\frac{\langle\psi|AB|\psi\rangle-\langle\psi|AB|\psi\rangle^*}{2\mathrm{i}}\right|^2\\
&=\left|\frac{\langle\psi|AB|\psi\rangle-\langle A^\dagger\psi|B\psi\rangle^*}{2\mathrm{i}}\right|^2\\
&=\left|\frac{\langle\psi|AB|\psi\rangle-\langle B\psi|A^\dagger\psi\rangle}{2\mathrm{i}}\right|^2\\
&=\left|\frac{\langle\psi|AB|\psi\rangle-\langle\psi|B^\dagger\cdot A^\dagger|\psi\rangle}{2\mathrm{i}}\right|^2\\
&=\left|\frac{\langle\psi|AB|\psi\rangle-\langle\psi|BA|\psi\rangle}{2\mathrm{i}}\right|^2\\
&=\left|\frac{\langle\psi|[A,B]|\psi\rangle}{2\mathrm{i}}\right|^2\\
&=\frac{\overline{[A,B]}^2}{4}
\end{aligned}
$$

即:

$$
\Delta A\Delta B\geqslant\frac{\overline{[A,B]}}{2}
$$

(2)

若两个算符对易，则有什么性质？本征态满足什么性质？

两个对易的算符可以同时测准，本征态具有正交、归一、完备性。

四

1

质量为 m 的离子在势场 $V(x)=kx^4,(k>0)$ 中运动，用变分法求基态能级近似值，试探波函数（未归一化）取为：

1）$\psi(\lambda,x)=\mathrm{e}^{-\lambda|x|}$

2）$\psi(\lambda,x)=\mathrm{e}^{-\lambda x^2/2}$

3）解释为什么（1）项结果较差

(1)

$$
\bar{H}=\frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}=\frac{\langle\psi|T+V|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\lambda|x|}\cdot \mathrm{e}^{-\lambda|x|}\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\lambda}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|T|\psi\rangle &= \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\lambda|x|}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\mathrm{e}^{-\lambda|x|}\mathrm{d}x \\
&= \frac{\hbar^2\lambda}{2m}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|V|\psi\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} kx^4\mathrm{e}^{-2\lambda|x|}\mathrm{d}x \\
&= \frac{3k}{2\lambda^5}
\end{aligned}
$$

于是：

$$
\bar{H} = \frac{\hbar^2\lambda^2}{2m} + \frac{3k}{2\lambda^4}
$$

$$
\bar{H} = \frac{\hbar^2\lambda^2}{4m} + \frac{\hbar^2\lambda^2}{4m} + \frac{3k}{2\lambda^4} \geqslant 3\sqrt[3]{\frac{\hbar^2\lambda^2}{4m}\cdot\frac{\hbar^2\lambda^2}{4m}\cdot\frac{3k}{2\lambda^4}} = \frac{3}{2}3^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}k^{1/3}
$$

(2)

(3)

2

对于一个二维各向同性谐振子

1）给出本征能量及对应的本征态

2）给系统加一个微扰 $H' = \lambda xy$，试求系统基态的能量修正（准确到二阶）

解：

（1）

（2）

五

某二能级系统哈密顿量在自身表象下的矩阵形式为

$$
H_0 \doteq \begin{bmatrix} \varepsilon_a & 0 \\ 0 & \varepsilon_b \end{bmatrix}
$$

设有扰动

$$H' \doteq \begin{bmatrix} 0 & V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ V\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & 0 \end{bmatrix}$$

将加上扰动后体系的哈密顿量记为 H

1）求加上扰动后体系的本征能量与本征态

2）求H_0 表象过渡到 H 表象的变换矩阵

3）设初态粒子能量为 ε_a，求能量转变至 ε_b 的概率

解：

（1）

$$H = H_0 + H' = \begin{bmatrix} \varepsilon_a & V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ V\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & \varepsilon_b \end{bmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_a - E & V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \\ V\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & \varepsilon_b - E \end{vmatrix} = 0$$

解得加上扰动后的本征能量：

$$E_+ = \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2} + \frac{\sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 4V^2}}{2}$$

$$E_- = \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2} - \frac{\sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 4V^2}}{2}$$

为快速求本征矢，将哈密顿量改写为：

$$\begin{aligned} H &\doteq \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2} I + V\cos\varphi\sigma_x + V\sin\varphi\sigma_y + \frac{\varepsilon_a - \varepsilon_b}{2}\sigma_z \\ &= \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2} I + \frac{\sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 4V^2}}{2}\left[\frac{2V\cos\varphi}{\sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 4V^2}}\sigma_x + \frac{2V\sin\varphi}{\sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 4V^2}}\sigma_y + \frac{\varepsilon_a - \varepsilon_b}{\sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 4V^2}}\sigma_z\right] \\ &\equiv \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{2} I + \frac{\sqrt{(\varepsilon_a - \varepsilon_b)^2 + 4V^2}}{2}\vec{\sigma}\cdot\vec{n} \end{aligned}$$

其中，$\vec{n} = \sin\theta\cos\phi\vec{e}_x + \sin\theta\cos\phi\vec{e}_z + \cos\theta\vec{e}_z$

对比可得：

$$\tan\theta = \frac{2V}{\varepsilon_a - \varepsilon_b}, \quad \phi = \frac{\pi}{2} - \varphi$$

注意利用以下几个结论：

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x} \Longrightarrow (cA)\vec{x} = (c\lambda)\vec{x}$$

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x} \Longrightarrow (A + I)\vec{x} = (\lambda + 1)\vec{x}$$

当 $\vec{n}(\theta,\phi) = \sin\theta\cos\phi\vec{e}_x + \sin\theta\sin\phi\vec{e}_y + \cos\theta\vec{e}_z$ 时，$\vec{\sigma}\cdot\vec{n}$ 的本征解为：

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})\,|\vec{n},+\rangle = 1\cdot|\vec{n},+\rangle\,, \quad |\vec{n},+\rangle \overset{\sigma_z}{=} \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \end{bmatrix}$$

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{n})\,|\vec{n},-\rangle=-1\cdot|\vec{n},-\rangle\,,\quad |\vec{n},-\rangle\overset{\sigma_z}{=}\begin{bmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\\ \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\end{bmatrix}$$

利用上面几个结论，可以得到 H 的本征解：

$$|\psi_+\rangle=\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\end{bmatrix}$$

$$|\psi_-\rangle=\begin{bmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\\ \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\end{bmatrix}$$

其中，

$$\tan\theta=\frac{2V}{\varepsilon_a-\varepsilon_b},\ \ \phi=\frac{\pi}{2}-\varphi$$

（2）

从 H_0 表象变换到 H 表象的变换矩阵元：

$$S_{11}=\langle\psi_+|\psi_a\rangle\overset{H_0}{=}\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}$$

$$S_{12}=\langle\psi_+|\psi_b\rangle\overset{H_0}{=}\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}$$

$$S_{21}=\langle\psi_-|\psi_a\rangle\overset{H_0}{=}\begin{bmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}=-\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}$$

$$S_{22}=\langle\psi_-|\psi_b\rangle\overset{H_0}{=}\begin{bmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}=\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}$$

综上，从 H_0 表象到 H 表象的变换矩阵为：

$$S_{H_0\to H}=\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\\ -\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\end{bmatrix}$$

其中，

$$\tan\theta=\frac{2V}{\varepsilon_a-\varepsilon_b},\ \ \phi=\frac{\pi}{2}-\varphi$$

（3）

初态为 $|\psi(t=0)\rangle=|\psi_a\rangle$，利用变换矩阵，将其变换到 H 表象：

$$
\begin{aligned}
|\psi(t=0)\rangle &\overset{H_0}{=} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\
&\overset{H}{=} S_{H_0\to H} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\
&\overset{H}{=} \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \\ -\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\
&\overset{H}{=} \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \\ -\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

t 时刻波函数:

$$
|\psi(t)\rangle = \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\frac{\phi}{2}-E_+t/\hbar)} \\ -\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\frac{\phi}{2}-E_-t/\hbar)} \end{bmatrix}
$$

t 时刻观测到粒子处于 $|\psi_b\rangle$ 态的概率:

$$
P_{a\to b} = |\langle\psi_b|\psi(t)\rangle|^2
$$

$$
\begin{aligned}
|\psi_b\rangle &\overset{H_0}{=} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\
&\overset{H}{=} S_{H_0\to H} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\
&\overset{H}{=} \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \\ -\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\
&\overset{H}{=} \begin{bmatrix} \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \\ \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

于是:

$$
\begin{aligned}
P_{a\to b} &= |\langle\psi_b|\psi(t)\rangle|^2 \\
&= \left| \begin{bmatrix} \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\frac{\phi}{2}-E_+t/\hbar)} \\ -\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\frac{\phi}{2}-E_-t/\hbar)} \end{bmatrix} \right|^2 \\
&= \frac{\sin^2\theta}{4}\left(2 - 2\cos\frac{E_+ - E_-}{\hbar}t\right) \\
&= \frac{4V^2}{(\varepsilon_a-\varepsilon_b)^2+4V^2}\sin^2\left(\frac{\sqrt{(\varepsilon_a-\varepsilon_b)^2+4V^2}}{2\hbar}t\right)
\end{aligned}
$$