兰州大学 2022～2023 学年第 二 学期

期末考试试卷（A 卷）

课程名称：量子基础 II 任课教师：任继荣、贾成龙

学院：物理学院 专业：______ 年级：______

姓名：______ 校园卡号：______

（每题 20 分,部分可能和原题有小幅偏差）

一、（1）试推导量子力学中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？

（2）若两个算符对易，则有什么性质？本征态满足什么性质？

二、1.普通班题目：题目连线题。请将泡利矩阵各种运算的正确结果连线。

1.$\left[\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j\right]$	A. $2i\delta_{ij}$
2.$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z$	B. $2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$
3.$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j$	C. $\hat{A}\cdot\hat{B}+i\hat{\vec{\sigma}}\cdot\left(\hat{A}\times\hat{B}\right)$
4.$\left\{\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j\right\}$	D. $i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k+\delta_{ij}$
5.$\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{A}\right)\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{B}\right)$	E. 3
6.$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_x+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_z$	F. i

2.萃英班题目：两个自旋耦合的系统，定义投射算符 $\hat{P}_1=\frac{3}{4}\hat{I}+\frac{\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2}{\hbar^2}$、$\hat{P}_2=\frac{3}{4}\hat{I}-\frac{\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2}{\hbar^2}$。

（1）试证明：$\hat{P}_i\hat{P}_j=\delta_{ij}\hat{P}_j$

（2）这两个算符能将 $\frac{1}{2}\otimes\frac{1}{2}$ 系统变成 $1\otimes 0$ 系统

三、写出氢原子 Stark 效应、正常塞曼效应、反常塞曼效应的哈密顿量与能级的选择跃迁定则。（可画图）

四、（选择一个作答）1.粒子（质量 m）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）$\psi(\lambda,x)=e^{-\lambda|x|}$

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

（3）解释（1）项结果较差的原因．

2. 对于一个二维各项同性谐振子。

（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（准至二级修正）

五、某二能级系统哈密顿量在自身表象下的矩阵形式为$\hat{H}_0=\begin{pmatrix}\varepsilon_a & 0\\ 0 & \varepsilon_b\end{pmatrix}$，设有某扰动$\hat{H}'=\begin{pmatrix}0 & Ve^{-i\varphi}\\ Ve^{i\varphi} & 0\end{pmatrix}$，将加上扰动的体系哈密顿量记为$\hat{H}$。

（1）求加上扰动的体系的本征能量与本征态；

（2）求将与$\hat{H}_0$表象过渡到$\hat{H}$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。

参考与提示

一、（1）试推导量子力学中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？

（2）若两个算符对易，则有什么性质？本征态满足什么性质？

不确定原理的证明：

如令

$$\psi_1 = (\hat{A} - \overline{A})\psi,$$

$$\psi_2 = (\hat{B} - \overline{B})\psi,$$

其中 $\overline{A} = (\psi, \hat{A}\psi)$, $\overline{B} = (\psi, \hat{B}\psi)$. 则根据 Schwartz 不等式有

$$(\psi_1, \psi_1) \cdot (\psi_2, \psi_2) \geqslant |(\psi_2, \psi_1)|^2. \tag{4.112}$$

因 $\hat{A}$ 是厄米算符，实常数 $\overline{A}$ 也是厄米算符. 所以 $\hat{A} - \overline{A}$ 是厄米算符，于是有

$$(\psi_1, \psi_1) = (\psi, (\hat{A} - \overline{A})^2\psi) = \overline{\Delta\hat{A}^2}, \tag{4.113}$$

同理

$$(\psi_2, \psi_2) = (\psi, (\hat{B} - \overline{B})^2\psi) = \overline{\Delta\hat{B}^2}, \tag{4.114}$$

由方程(4.112)，(4.113)和(4.114)得

$$\overline{\Delta\hat{A}^2} \cdot \overline{\Delta\hat{B}^2} \geqslant |(\psi_2, \psi_1)|^2. \tag{4.115}$$

但我们知，复数模的平方大于等于其虚部模的平方，即

$$\begin{aligned}\left|\int \psi_2^*(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x\right|^2 &\geqslant \frac{1}{4}\left|\int \psi_2^*(x)\psi_1(x)\mathrm{d}x - \int \psi_1^*(x)\psi_2(x)\mathrm{d}x\right|^2 \\ &= \frac{1}{4}\left|\int \psi^*(x)[(\hat{A} - \overline{A})(\hat{B} - \overline{B})]\psi(x)\mathrm{d}x\right. \\ &\quad \left. - \int \psi^*(x)[(\hat{B} - \overline{B})(\hat{A} - \overline{A})]\psi(x)\mathrm{d}x\right|^2 \\ &= \frac{1}{4}\left|\int \psi^*(x)[\hat{A}, \hat{B}]\psi(x)\mathrm{d}x\right|^2,\end{aligned} \tag{4.116}$$

代入方程(4.115)得

$$\overline{\Delta\hat{A}^2} \cdot \overline{\Delta\hat{B}^2} \geqslant \frac{1}{4}\left|\int \psi^*[\hat{A}, \hat{B}]\psi\mathrm{d}x\right|^2, \tag{4.117}$$

$$\Delta A \cdot \Delta B \geqslant \frac{|\overline{\mathrm{i}[\hat{A}, \hat{B}]}|}{2}. \tag{4.118}$$

上式表明，若处于 $\left|\overline{[\hat{A}, \hat{B}]}\right| \neq 0$ 的态，则在该态中，$\hat{A}$, $\hat{B}$ 的“涨落”不可能同时为零.（当一个算符的“涨落”为零，则另一个算符的“涨落”应为∞.）

在原则上，当 $\left|\overline{[\hat{A}, \hat{B}]}\right| \neq 0$，则 $\Delta A \cdot \Delta B > 0$.

两个对易的算符可以同时侧准

（2）具有相同的本征函数，本征函数满足正交、归一、完备的性质。

二、1.普通班题目：题目连线题。请将泡利矩阵各种运算的正确结果连线。

1.$\left[\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j\right]=2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$ A. $2i\delta_{ij}$

2.$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z=i$ B. $2i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$

3.$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j=i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k+\delta_{ij}$ C. $\hat{A}\cdot\hat{B}+i\hat{\vec{\sigma}}\cdot\left(\hat{A}\times\hat{B}\right)$

4.$\left\{\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j\right\}=2i\delta_{ij}$ D. $i\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k+\delta_{ij}$

5.$\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{A}\right)\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{B}\right)=\hat{A}\cdot\hat{B}+i\hat{\vec{\sigma}}\cdot\left(\hat{A}\times\hat{B}\right)$ E. 3

6.$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_x+\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_y+\hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_z=3$ F. i

1.B 2.F 3.D 4.A 5.C 6.E（以选项为准）

2.萃英班题目：对于两个自旋耦合系统，定义算符 $\hat{P}_1=\frac{3}{4}\hat{I}+\frac{\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2}{\hbar^2}$、$\hat{P}_2=\frac{3}{4}\hat{I}-\frac{\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2}{\hbar^2}$。

（1）试证明：$\hat{P}_i\hat{P}_j=\delta_{ij}\hat{P}_j$

（2）这两个算符能将 $\frac{1}{2}\otimes\frac{1}{2}$ 系统变成 $1\otimes 0$ 系统

提示：$\left(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2\right)\left(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2\right)=\left(3-2\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2\right)$，投射算符满足：$\hat{P}_i^2=\hat{P}_i$ 其本征值必为 1,0。

$\hat{P}_i=\frac{3}{4}\hat{I}-(-1)^i\frac{\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2}{\hbar^2}$，因此

$$\begin{aligned}\hat{P}_i\hat{P}_j&=\left[\frac{3}{4}\hat{I}-(-1)^i\frac{\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2}{\hbar^2}\right]\left[\frac{3}{4}\hat{I}-(-1)^j\frac{\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2}{\hbar^2}\right]\\&=\frac{9}{16}\hat{I}-\frac{3}{16}\left[(-1)^i+(-1)^j\right]\left(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2\right)+\frac{1}{16}(-1)^{i+j}\left(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2\right)\left(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2\right)\end{aligned}$$

根据 $\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{A}\right)\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{B}\right)=\hat{A}\cdot\hat{B}+i\hat{\vec{\sigma}}\cdot\left(\hat{A}\times\hat{B}\right)$，$\hat{\vec{\sigma}}\times\hat{\vec{\sigma}}=2i\hat{\vec{\sigma}}$ 有

$$\left(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2\right)\left(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2\right)=\left(3-2\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2\right)$$

因此可得

$$\begin{aligned}\hat{P}_i\hat{P}_j&=\frac{9}{16}\hat{I}-\frac{3}{16}\left[(-1)^i+(-1)^j\right]\left(\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2\right)+\frac{1}{16}(-1)^{i+j}\left(3-2\hat{\sigma}_1\cdot\hat{\sigma}_2\right)\\&=\frac{9+3(-1)^{i+j}}{16}\hat{I}-\frac{3\left[(-1)^i+(-1)^j\right]+2(-1)^{i+j}}{4}\frac{\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2}{\hbar^2}\end{aligned}$$

三、写出氢原子 Stark 效应、正常塞曼效应、反常塞曼效应的哈密顿量与能级的选择跃迁定则。（可画图）

参考：

Stark 效应：

设：转子的角动量为 $\hat{L}$，电偶极矩为 $\boldsymbol{p}$. 当置于均匀外电场（取电场方向为 z），转子的哈密顿量

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 = \frac{\hat{L}^2}{2\mathscr{I}} - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{\hat{L}^2}{2\mathscr{I}} - p\varepsilon\cos\theta. \tag{9.48}$$

于是，置于均匀外电场的转子的能量（准至二级修正）

$$E_{lm} = E_l^{(0)} - \frac{1}{2}\left[-\frac{p^2}{E_l^{(0)}}\frac{l(l+1)-3m^2}{(2l-1)(2l+3)}\right]\varepsilon^2.$$

正常塞曼效应：

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \frac{qB}{2\mu}\hat{L}_z + V(r)\right]u_E(\boldsymbol{r}) = Eu_E(\boldsymbol{r}).$$

$$E_{nlm} = E_{nl} + \frac{eB}{2\mu}m\hbar.$$

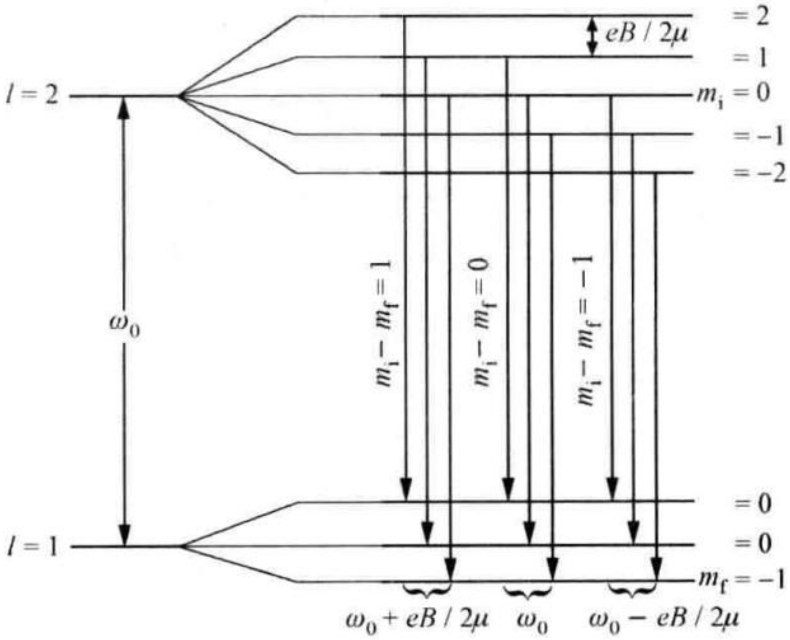
由电偶极矩跃迁选择定则，末态磁量子数（m_f）与初态磁量子数（m_i）之差

$$\Delta m_l = m_f - m_i = \begin{cases} 1, \\ 0, \\ -1. \end{cases} \tag{5.161}$$

$\left(\right.$即使考虑电子自旋，即附加$\frac{-q\hbar}{2\mu}\sigma_z B$ 项，也不影响结论. 因偶极跃迁选择定则之一为 $\Delta m_s=0$.$\left.\right)$所以，在外场下，有 9 种跃迁，但频率仅有 3 个（如图 5.6 所示），

$$\omega = \begin{cases} \omega_0 + \frac{eB}{2\mu}, & \Delta m_l = -1, \\ \omega_0, & \Delta m_l = 0, \\ \omega_0 - \frac{eB}{2\mu}, & \Delta m_l = 1, \end{cases} \tag{5.162}$$

这即为正常塞曼效应.



反常塞曼效应：

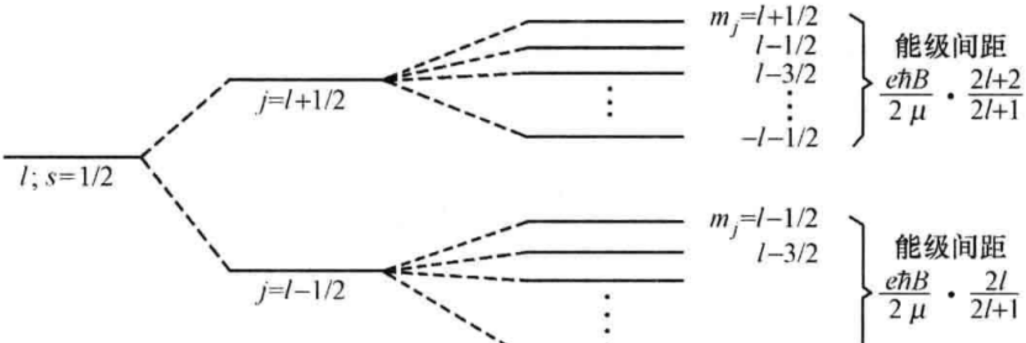
其中，$\xi(r)=\frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}V(r)}{\mathrm{d}r}$.

C. 处于中心场，并置于电磁场中的电子的哈密顿量

$$\hat{H}=\frac{1}{2\mu}(\hat{\boldsymbol{p}}+e\boldsymbol{A})^2-e\varphi+V(r)+\xi(r)\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}+\frac{e\hbar}{2\mu}(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}).$$

当 $Z^2\ll 137^2$ 时，我们近似地可得碱金属原子束缚态的本征值

$$E_{nj}\approx-\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 n^2 a}-\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 n^4 a}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2\left(\frac{n}{j+1/2}-\frac{3}{4}\right).$$



四、1.粒子（质量 m）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）$\psi(\lambda,x)=e^{-\lambda|x|}$

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

（3）解释（1）项结果较差的原因．

1.（1）目标是求

$$\bar{\hat{H}}=\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

的极值，分母的计算为

$$\langle\psi|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-2\lambda|x|}dx=2\int_{0}^{+\infty}e^{-2\lambda x}dx=\frac{1}{\lambda}$$

分子的计算分为动能平均值与势能平均值单独计算后相加。

方法一：

$$\langle\psi|\hat{T}|\psi\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\lambda|x|}\left(\frac{d^2}{dx^2}e^{-\lambda|x|}\right)dx$$

波函数一阶导数易得

$$\frac{d\psi}{dx}=\begin{cases}-\lambda e^{-\lambda x},x>0\\ \lambda e^{\lambda x},x<0\end{cases}$$

则二阶导数因含δ函数，表达式为

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}=\lambda^2e^{-\lambda|x|}-2\lambda\delta(x)$$

故得动能平均表达式

$$\langle\psi|\hat{T}|\psi\rangle=-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\lambda|x|}\left(\lambda^2e^{-\lambda|x|}-2\lambda\delta(x)\right)dx=-\frac{\hbar^2}{2m}(\lambda-2\lambda)=\frac{\hbar^2\lambda}{2m}$$

方法二：利用分部积分后的公式

$$\langle\psi|\hat{T}|\psi\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\frac{d\psi}{dx}\right|^2dx=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\lambda^2e^{-2\lambda|x|}dx=\frac{\hbar^2\lambda}{2m}$$

势能平均值为

$$\langle\psi|\hat{V}|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}kx^4e^{-2\lambda|x|}dx=2k\int_0^{+\infty}x^4e^{-2\lambda x}dx=\frac{2k}{(2\lambda)^5}\int_0^{+\infty}t^4e^{-t}dt=\frac{3k}{2\lambda^5}$$

故

$$\bar{\hat{H}}=\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}=\frac{\frac{\hbar^2\lambda}{2m}+\frac{3k}{2\lambda^5}}{\frac{1}{\lambda}}=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}+\frac{3k}{2\lambda^4}$$

利用不等式

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

此即基态能量的估计值。

（2）同样地，有

$$\langle\psi|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\lambda x^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}$$

因

$$\frac{d\psi}{dx}=-\lambda xe^{-\lambda x^2/2}$$

故

$$\langle\psi|\hat{T}|\psi\rangle=\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\frac{d\psi}{dx}\right|^2dx=\frac{\hbar^2\lambda^2}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-\lambda x^2}dx=\frac{\hbar^2\sqrt{\lambda}}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}t^2e^{-t^2}dt=\frac{\hbar^2\sqrt{\lambda\pi}}{4m}$$

$$\langle\psi|\hat{V}|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}kx^4e^{-\lambda x^2}dx=\frac{k}{\lambda^{5/2}}\int_{-\infty}^{+\infty}t^4e^{-t^2}dt=\frac{3k}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda^5}}$$

故

$$\bar{\hat{H}}=\frac{\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}=\frac{\frac{\hbar^2\sqrt{\lambda\pi}}{4m}+\frac{3k}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda^5}}}{\sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}}=\frac{\hbar^2\lambda}{4m}+\frac{3k}{4\lambda^2}$$

再次利用不等式，即得

$$\bar{\hat{H}}=\frac{\hbar^2\lambda}{4m}+\frac{\hbar^2\lambda}{4m}+\frac{3k}{8\lambda^2}\geq 3\left(\frac{\hbar^2\lambda}{4m}\cdot\frac{\hbar^2\lambda}{4m}\cdot\frac{3k}{8\lambda^2}\right)^{1/3}=\frac{3}{4}3^{1/3}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{2/3}k^{1/3}$$

此为这个波函数估算的基态能量。

（3）与真实数据对应可知，（1）中相差较大，而（2）的估计可以接受。原因是（1）中的波函数选取与实际波函数相差较大，因此估计值有很大偏差，在利用变分法估计基态能量时，必须选取与实际波函数形式相差不大的试探波函数才能得到较好的结果。

2.对于一个两维各项同性谐振子。

（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（准至二级修正）

2.（1）一维谐振子的本征能量为 $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$，其本征函数设为 $u_n(x)$。因为二维各项同性谐振子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2)$$

两个一维谐振子哈密顿量对易，因此设两个量子数 n_1, n_2，可得本征波函数为 $u_{n_1}(x)u_{n_2}(y)$，本征能量为

$$E_{n_1,n_2} = (n_1 + n_2 + 1)\hbar\omega$$

（2）基态的能量为 $E_{00} = \hbar\omega$，无简并，因此可选择非简并微扰，即能量的一级修正为

$$E_0^{(1)} = \langle 00|H'|00\rangle = \iint u_0^*(x)u_0^*(y)\lambda xy u_0(x)u_0(y)dxdy = \lambda\left(\int u_0^*(x)xu_0(x)dx\right)^2$$

根据升降算符

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\hat{p} + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right],\ \ \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[-i\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\hat{p} + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right]$$

则有

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

故

$$\int u_0^*(x)xu_0(x)dx = \int u_0^*(x)\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)u_0(x)dx = 0$$

则

$$E_0^{(1)} = 0$$

继续计算二级修正

$$E_0^{(2)} = \sum_{n_1,n_2} \frac{|\langle n_1, n_2 | H' | 00 \rangle|^2}{E_{00} - E_{n_1,n_2}}$$

因为

$$\langle n_1, n_2 | H' | 00 \rangle = \iint u_{n_1}^*(x) u_{n_2}^*(y) \lambda xy u_0(x) u_0(y) dxdy = \lambda f(n_1) f(n_2)$$

$$f(n) = \int u_n^*(x) x u_0(x) dx = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int u_0^*(x)(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) u_0(x) dx = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int u_0^*(x) u_1(x) dx = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \delta_{n1}$$

因此求和项只有在$n_1 = n_2 = 1$时不为 0，故

$$E_0^{(2)} = \frac{|\langle 11 | H' | 00 \rangle|^2}{E_{00} - E_{n_1,n_2}} = \left(\frac{\lambda\hbar}{2m\omega}\right)^2 \frac{1}{(1-1-1-1)\hbar\omega} = -\frac{\lambda^2\hbar}{8m^2\omega^3}$$

故

$$E_0 = \hbar\omega - \frac{\lambda^2\hbar}{8m^2\omega^3}$$

五、某二能级系统哈密顿量在自身表象下的矩阵形式为 $\hat{H}_0=\begin{pmatrix}\varepsilon_a & 0\\ 0 & \varepsilon_b\end{pmatrix}$，设有某扰动 $\hat{H}'=\begin{pmatrix}0 & Ve^{-i\varphi}\\ Ve^{i\varphi} & 0\end{pmatrix}$，将加上扰动的体系哈密顿量记为 $\hat{H}$ 。

（1）求加上扰动的体系的本征能量与本征态；

（2）求将与 $\hat{H}_0$ 表象过渡到 $\hat{H}$ 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。

五、解：

（1）总的哈密顿量易得

$$\hat{H}=\begin{pmatrix}\varepsilon_a & Ve^{-i\varphi}\\ Ve^{i\varphi} & \varepsilon_b\end{pmatrix}$$

求其特征值即为本征能量

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

化简后得

$$E^2-\left(\varepsilon_a+\varepsilon_b\right)E+\left(\varepsilon_a\varepsilon_b-V^2\right)=0$$

解得

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

如像线性代数操作那样继续计算本征态，计算将很麻烦，这里利用类比自旋算符本征值。因对于某个方向的自选，设其角度为 (θ,φ)（$\vec{n}=\sin\theta\cos\varphi\vec{i}+\sin\theta\sin\varphi\vec{j}+\cos\theta\vec{k}$），有

$$\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{n}}\right)\left|n,+\right\rangle=\left|n,+\right\rangle,\left(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{n}}\right)\left|n,-\right\rangle=-\left|n,-\right\rangle$$

其中 $\left|n,+\right\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix},\left|n,-\right\rangle=\begin{pmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}$（$\sigma_z$ 表象）。利用这个将哈密顿量拆成

$$\hat{H}=\frac{\varepsilon_a+\varepsilon_b}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}+\frac{\varepsilon_a-\varepsilon_b}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}+V\cos\varphi\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}+V\sin\varphi\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$$

再定义$\theta=\arctan\dfrac{2V}{\varepsilon_a-\varepsilon_b}$,则类比得

$$\hat{H}=\frac{\varepsilon_a+\varepsilon_b}{2}\hat{I}+\frac{\sqrt{(\varepsilon_a-\varepsilon_b)^2+4V^2}}{2}\hat{\vec{\sigma}}\cdot\hat{\vec{n}}$$

这样根据前面的公式可得

$$|\psi_+\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix},|\psi_-\rangle=\begin{pmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}$$

这是在本征态在$\hat{H}_0$表象下的表示，本征值与之前的计算一致（$\theta=\arctan\dfrac{2V}{\varepsilon_a-\varepsilon_b}$）。

（2）表象变换的矩阵元为基矢之间的标积，故将$\hat{H}_0$表象过渡到$\hat{H}$表象的变换矩阵元为

$$S_{11}=\langle\psi_+|\psi_a\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}$$

$$S_{12}=\langle\psi_+|\psi_b\rangle=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}$$

$$S_{11}=\langle\psi_-|\psi_a\rangle=\begin{pmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=-\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}$$

$$S_{11}=\langle\psi_+|\psi_a\rangle=\begin{pmatrix}-\sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}$$

因此

$$S_{\hat{H}_0\to\hat{H}}=\begin{pmatrix}\cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ -\sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\end{pmatrix}$$

其中$\theta=\arctan\dfrac{2V}{\varepsilon_a-\varepsilon_b}$。

（3）由于加上微扰后哈密顿量改变，因此本小问应当在$\hat{H}$表象下运算比较方便。将变换矩

阵简记为S，需要注意S为$\hat{H}_0$表象过渡到$\hat{H}$表象的变换矩阵。因初态在$\left|\psi_a\right\rangle$，因此在$\hat{H}$表象下为

$$\left|\psi(t=0)\right\rangle=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ -\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\\ -\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}$$

本题为定态情况，因此在t时刻，波函数应为

$$\left|\psi\right\rangle=\left|\psi_+\right\rangle e^{-iE_+t/\hbar}+\left|\psi_-\right\rangle e^{-iE_-t/\hbar}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\left(\varphi/2-E_+t/\hbar\right)}\\ -\sin\frac{\theta}{2}e^{i\left(\varphi/2-E_-t/\hbar\right)}\end{pmatrix}$$

故在t时刻观测到处于$\left|\psi_b\right\rangle$态的概率为

$$P_{a\to b}=\left|\left\langle\psi_b\middle|\psi\right\rangle\right|^2$$

又因$\left|\psi_b\right\rangle$在$\hat{H}$表象下为

$$\left|\psi_b\right\rangle=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ -\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\end{pmatrix}$$

因此得

$$P_{a\to b}=\left|\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\left(\varphi/2-E_+/\hbar\right)}\\ -\sin\frac{\theta}{2}e^{i\left(\varphi/2-E_-/\hbar\right)}\end{pmatrix}\right|^2=\left|\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}e^{i\left(\varphi-E_+t/\hbar\right)}-\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}e^{i\left(\varphi-E_-t/\hbar\right)}\right|^2$$

$$=\left|\frac{\sin\theta}{2}\left(e^{i\left(\varphi-E_+t/\hbar\right)}-e^{i\left(\varphi-E_-t/\hbar\right)}\right)\right|^2$$

代入计算

$$\frac{e^{i\left(\varphi-E_+t/\hbar\right)}-e^{i\left(\varphi-E_-t/\hbar\right)}}{2}=\frac{e^{i\left(\varphi-\frac{\varepsilon_a+\varepsilon_b}{2\hbar}t-\frac{\sqrt{(\varepsilon_a-\varepsilon_b)^2+4V^2}}{2\hbar}t\right)}-e^{i\left(\varphi-\frac{\varepsilon_a+\varepsilon_b}{2\hbar}t+\frac{\sqrt{(\varepsilon_a-\varepsilon_b)^2+4V^2}}{2\hbar}t\right)}}{2}=-e^{i\left(\varphi-\frac{\varepsilon_a+\varepsilon_b}{2\hbar}t\right)}\sin\frac{\sqrt{(\varepsilon_a-\varepsilon_b)^2+4V^2}}{2\hbar}t$$

因此

$$P_{a\to b}=\left|\sin\theta\sin\left(\frac{\sqrt{(\varepsilon_a-\varepsilon_b)^2+4V^2}}{2\hbar}t\right)e^{i\left(\varphi-\frac{\varepsilon_a+\varepsilon_b}{2\hbar}t\right)}\right|^2=\sin^2\theta\sin^2\frac{\sqrt{(\varepsilon_a-\varepsilon_b)^2+4V^2}}{2\hbar}t$$

再代入$\theta=\arctan\dfrac{2V}{\varepsilon_a-\varepsilon_b}$，可得

$$\sin\theta=\frac{\tan\theta}{\sqrt{1+\tan^2\theta}}=\frac{2V}{\varepsilon_a-\varepsilon_b}\Bigg/\sqrt{1+\left(\frac{2V}{\varepsilon_a-\varepsilon_b}\right)^2}=\frac{2V}{\sqrt{\left(\varepsilon_a-\varepsilon_b\right)^2+4V^2}}$$

故 t 时刻的演化概率为

$$P_{a\to b}=\frac{4V^2}{\left(\varepsilon_a-\varepsilon_b\right)^2+4V^2}\sin^2\left(\frac{\sqrt{(\varepsilon_a-\varepsilon_b)^2+4V^2}}{2\hbar}t\right)$$