2022秋易为老师量子力学B
习题四参考解答

宋冰睿　刘丰铨

2022 年 10 月 18 日

1 第一题

已知Hermitian算符$\hat{A}$的正交归一非简并的本征态为$\{|\psi_n\rangle\}(n = 1, 2, 3)$，其对应的本征值为$A_1 = 1, A_2 = 2, A_3 = 3$. 对如下未归一化的量子态$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + 2|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle$：

a 如在此量子态上对$\hat{A}$所对应的力学量进行测量，单次测量的可能测值有哪些？

b 单次测量$\hat{A}$所对应的力学量得到2和2.5的几率分别是多少？

c 计算$\hat{A}$在该量子态下的期望值$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$. 实验上如何测得该期望值？

d 计算$\hat{A}$在该量子态下的涨落$\Delta A = \sqrt{\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^2}$.

1.1 1a

由于测量某一力学量可能得到的结果是对应算符的本征值，因此单次测量的可能测值有1、2、3.

1.2 1b

首先将题给量子态归一化为

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_1\rangle + \frac{2}{\sqrt{6}}|\psi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_3\rangle \tag{1.1}$$

因此，单次测量得到结果2的概率为

$$p_2 = |\langle\psi_2|\psi\rangle|^2 = \frac{2}{3} \tag{1.2}$$

得到结果2.5的概率为0.

1.3 1c

期望值

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{6}}\langle\psi_1| + \frac{2}{\sqrt{6}}\langle\psi_2| + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle\psi_3|\right)\hat{A}\left(\frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_1\rangle + \frac{2}{\sqrt{6}}|\psi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_3\rangle\right) \\
&= \frac{1}{6}A_1 + \frac{4}{6}A_2 + \frac{1}{6}A_3 \\
&= \frac{1}{6}\cdot 1 + \frac{4}{6}\cdot 2 + \frac{1}{6}\cdot 3 = 2
\end{aligned}
\tag{1.3}
$$

实验上若要测得该期望值，需首先**制备态**$|\psi\rangle$**的系综**（大量相同量子态的集合），在其中大量的量子态上分别对$\hat{A}$对应的力学量进行测量，再将所有测量结果取均值. 随着总测量次数的增加，得到的平均值将越来越趋近于2.

1.4 1d

首先计算

$$
\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{6}}\langle\psi_1| + \frac{2}{\sqrt{6}}\langle\psi_2| + \frac{1}{\sqrt{6}}\langle\psi_3|\right)\hat{A}^2\left(\frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_1\rangle + \frac{2}{\sqrt{6}}|\psi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_3\rangle\right) \\
&= \frac{1}{6}A_1^2 + \frac{4}{6}A_2^2 + \frac{1}{6}A_3^2 \\
&= \frac{1}{6}\cdot 1 + \frac{4}{6}\cdot 4 + \frac{1}{6}\cdot 9 = \frac{13}{3}
\end{aligned}
\tag{1.4}
$$

因而涨落

$$
\Delta A = \sqrt{\frac{13}{3} - 2^2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \tag{1.5}
$$

2 第二题

假设力学量算符$\hat{A}$的本征值集合为$\{A_n\}$，其中某本征值A_m对应的本征态有s重简并. 请分别写出A_m对应的简并子空间中任意量子态及与此简并子空间正交的量子态的一般形式.

不妨设$\hat{A}$的本征值$A_p\,(p=1,2,\cdots,n)$对应简并子空间$\mathscr{H}_p$的正交归一化基为$\{|\alpha_{pi}\rangle\}\,(i=1,2,\cdots,r_p)$，其中$r_p$是第$p$个子空间$\mathscr{H}_p$的简并度. 特别地，就$A_m$而言，其对应的$r_m = s$.

根据子空间的性质，有如下正交归一条件：

$$
\langle\alpha_{pi}|\alpha_{qj}\rangle = \delta_{pq}\delta_{ij} \tag{2.1}
$$

不难发现，

- $\mathscr{H}_m$中的任意量子态可由该子空间的基线性组合而成：

$$
|\varphi_m\rangle = \sum_{i=1}^{s} c_{mi}|\alpha_{mi}\rangle \tag{2.2}
$$

- 与$\mathscr{H}_m$正交的任意量子态可由其余子空间的基线性组合而成：

$$|\phi_{m\perp}\rangle = \sum_{p\neq m}\sum_{i=1}^{r_p} d_{pi}|\alpha_{pi}\rangle \tag{2.3}$$

其中展开系数

$$\begin{cases} c_{mi} = \langle\alpha_{mi}|\varphi_m\rangle \\ d_{pi} = \langle\alpha_{pi}|\phi_{m\perp}\rangle \end{cases} \tag{2.4}$$

这里分别用到了子空间$\mathscr{H}_m$中和全空间中的完备性条件

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{s}|\alpha_{mi}\rangle\langle\alpha_{mi}| = \mathbb{1}_m \\ \sum_p\sum_{i=1}^{r_p}|\alpha_{pi}\rangle\langle\alpha_{pi}| = \mathbb{1} \end{cases} \tag{2.5}$$

对式2.3而言，根据上面的完备性条件，按理应存在$\mathscr{H}_m$中的展开系数. 不过由于正交的要求，我们有$d_{mi} = \langle\alpha_{mi}|\phi_{m\perp}\rangle = 0\,(i=1,2,\cdots,s)$，因此，式2.3中可直接标记$p\neq m$.

Tips: 本题的一大易错点在于本征值$A_n\,(n\neq m)$也可能存在简并. 因此，其余子空间的简并度问题也应得到充分考虑.

3 第三题

对于Hermitian算符$\hat{A}$及其本征态$|\psi_n\rangle$，请证明如下关系：

a

$$\sum_n \psi_n^*(x)\,\psi_n(x') = \delta(x-x')\,,\ \text{where}\ \psi_n(x) = \langle x|\psi_n\rangle$$

b

$$\hat{A} = \sum_n A_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

c

$$\mathrm{e}^{\hat{A}} = \sum_n \mathrm{e}^{A_n}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$$

以下推导利用了完备性条件

$$\sum_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \mathbb{1} \tag{3.1}$$

3.1 3a

$$
\begin{aligned}
\text{LHS} &= \sum_n \langle \psi_n | x \rangle \langle x' | \psi_n \rangle \\
&= \sum_n \langle x' | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x \rangle \\
&= \langle x' | \left(\sum_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \right) | x \rangle \\
&= \langle x' | x \rangle = \delta \left(x - x' \right)
\end{aligned} \tag{3.2}
$$

这里涉及到对该式物理意义的理解. 当$x = x'$时，乍看之下左端是有限值，但实际上其应跟随右端的δ函数发散. 这是因为在氢原子或谐振子等实际量子力学体系中，主量子数n的取值**一般有无穷多个**.

3.2 3b

$$
\hat{A} = \sum_n \hat{A} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | = \sum_n A_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \tag{3.3}
$$

3.3 3c

$$
\mathrm{e}^{\hat{A}} = \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{\hat{A}^m}{m!} = \sum_n \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{\hat{A}^m}{m!} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | = \sum_n \left(\sum_{m=0}^{+\infty} \frac{A_n^m}{m!} \right) | \psi_n \rangle \langle \psi_n | = \sum_n \mathrm{e}^{A_n} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \tag{3.4}
$$

4 第四题

求投影算符$\hat{P} = |\psi\rangle\langle\psi|$的本征值与本征态，其中$|\psi\rangle$为某给定的归一化量子态.

4.1 法一

不难发现

$$
\hat{P}^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = \hat{P} \tag{4.1}
$$

因此，$\hat{P}^2$与$\hat{P}$有相同的本征态，不妨设为$|\phi\rangle$，对应$\hat{P}$的本征值设为λ. 于是可考虑如下推导

$$
\begin{aligned}
\hat{P}^2 |\phi\rangle &= \hat{P} |\phi\rangle \\
\lambda^2 |\phi\rangle &= \lambda |\phi\rangle \\
\left(\lambda^2 - \lambda \right) |\phi\rangle &= 0
\end{aligned} \tag{4.2}
$$

由于本征态不能为空态($|\phi\rangle \neq 0$)，因此只能有$\lambda^2 - \lambda = 0$，可得$\lambda_1 = 1,\ \lambda_2 = 0$.

下面对两个本征值分别进行讨论.

4.1.1 $\lambda_1 = 1$

此时

$$|\phi_1\rangle = \hat{P}|\phi_1\rangle = \langle\psi|\phi_1\rangle|\psi\rangle \tag{4.3}$$

只能有

$$|\phi_1\rangle = |\psi\rangle \tag{4.4}$$

4.1.2 $\lambda_2 = 0$

此时

$$0 = \hat{P}|\phi_2\rangle = \langle\psi|\phi_2\rangle|\psi\rangle \tag{4.5}$$

因此

$$\langle\psi|\phi_2\rangle = 0 \tag{4.6}$$

即$|\phi_2\rangle$与$|\psi\rangle$正交，不妨记$|\phi_2\rangle = |\psi^\perp\rangle$. 需要注意的是$|\psi^\perp\rangle$可能不止一个.

4.2 法二

尝试直接将投影算符$\hat{P}$作用于任意归一化量子态$|\varphi\rangle$上，我们得到

$$\hat{P}|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle|\psi\rangle \tag{4.7}$$

4.2.1 $\langle\psi|\varphi\rangle \neq 0$时

上式右端经归一化后即为$|\psi\rangle$. 因此，若要满足本征方程，可取$|\varphi\rangle = |\psi\rangle$，式4.7即化为

$$\hat{P}|\psi\rangle = |\psi\rangle \tag{4.8}$$

因此，$|\psi\rangle$是$\hat{P}$的本征态，其对应的本征值为1.

4.2.2 $\langle\psi|\varphi\rangle = 0$时

$|\varphi\rangle$与$|\psi\rangle$正交，仍可记为$|\psi^\perp\rangle$. 即有

$$\hat{P}|\psi^\perp\rangle = 0 \tag{4.9}$$

因此，$|\psi^\perp\rangle$也是$\hat{P}$的本征态，其对应的本征值为0.

Tips: 本题中，不少同学仅考虑了本征值1，而没有注意到0的情况，这是不严谨的. 分类讨论的思想永不过时.

5 第五题

利用产生/湮灭算符和坐标/动量算符的关系，证明一维简谐振子的Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

可以表示为

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

不妨引入参数$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$. 作无量纲化，记$\hat{x}' = \beta\hat{x}$, $\hat{p}' = \frac{1}{\hbar\beta}\hat{p}$，则Hamiltonian可重新写为

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega\left[(\hat{x}')^2 + (\hat{p}')^2\right] \tag{5.1}$$

产生/湮灭算符可重新写为

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x}' + \mathrm{i}\hat{p}'\right),\ \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x}' - \mathrm{i}\hat{p}'\right) \tag{5.2}$$

并且，有对易关系：

$$[\hat{x}', \hat{p}'] = \mathrm{i},\ \left[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\right] = \mathbb{1} \tag{5.3}$$

从上式可反解出

$$\hat{x}' = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{a} + \hat{a}^\dagger\right),\ \hat{p}' = \frac{1}{\sqrt{2}\mathrm{i}}\left(\hat{a} - \hat{a}^\dagger\right) \tag{5.4}$$

回代入式5.1中，就得到

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2}\hbar\omega\left[\frac{1}{2}\left(\hat{a}^2 + \left(\hat{a}^\dagger\right)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right) - \frac{1}{2}\left(\hat{a}^2 + \left(\hat{a}^\dagger\right)^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\right]\\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\\ &= \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\end{aligned} \tag{5.5}$$

其中利用了对易关系5.3.

6 第六题

请利用产生/湮灭算符的对易关系，证明Fock态的正交归一性，即

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm},\ \text{where } |n\rangle = \frac{\left(\hat{a}^\dagger\right)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

首先规定已知基态归一化条件

$$\langle 0|0\rangle = 1 \tag{6.1}$$

6.1 法一

引入粒子数算符$\hat{N}=\hat{a}^\dagger\hat{a}$，根据其Hermitian性，可考虑如下推导：

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{N}|m\rangle &= \langle n|\hat{N}^\dagger|m\rangle\\ \langle n|\left(\hat{N}|m\rangle\right) &= \left(\hat{N}|n\rangle\right)^\dagger|m\rangle\\ m\langle n|m\rangle &= n\langle n|m\rangle\end{aligned}\tag{6.2}$$

则当

$n\neq m$**时** 必有$\langle n|m\rangle=0.$

$n=m$**时** 式6.2化为

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{N}|n\rangle &= \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle\\ n\langle n|n\rangle &= \left(\hat{a}|n\rangle\right)^\dagger\hat{a}|n\rangle\end{aligned}\tag{6.3}$$

再考虑递推关系

$$\begin{cases}\hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle\\ \hat{a}^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle\end{cases}\tag{6.4}$$

式6.3就可进一步化为

$$n\langle n|n\rangle=n\langle n-1|n-1\rangle\tag{6.5}$$

由于n是任意正整数，故重复上述操作可得

$$\langle n|n\rangle=\langle 0|0\rangle=1\tag{6.6}$$

综合两种情况，即证得

$$\langle n|m\rangle=\delta_{nm}\tag{6.7}$$

6.2 法二

利用递推关系6.4，直接考虑

$$\begin{aligned}\langle n|m\rangle &= \left(\frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n}}|n-1\rangle\right)^\dagger\frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{m}}|m-1\rangle\\ &= \frac{1}{\sqrt{mn}}\langle n-1|\hat{a}\hat{a}^\dagger|m-1\rangle\\ &= \frac{1}{\sqrt{mn}}\langle n-1|\hat{N}+\mathbb{1}|m-1\rangle\\ &= \sqrt{\frac{m}{n}}\langle n-1|m-1\rangle\end{aligned}\tag{6.8}$$

其中第三个等号利用了对易关系5.3. 不妨假设$n\geq m$（$n\leq m$时同理），则由上述递推式可进一步得到

$$\langle n|m\rangle=\sqrt{\frac{m\,(m-1)}{n\,(n-1)}}\langle n-2|m-2\rangle=\cdots=\sqrt{\frac{m!}{n!/\,(n-m)!}}\langle n-m|0\rangle\tag{6.9}$$

则当

$n > m$时

$$\langle n|m\rangle \sim \langle n-m|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-m)!}}\langle 0|\hat{a}^{n-m}|0\rangle = 0 \tag{6.10}$$

$n = m$时

$$\langle n|n\rangle = \langle 0|0\rangle = 1 \tag{6.11}$$

得证.

6.3 法三

仍不妨假设$n \geq m$. 与法二相同，直接考虑

$$\langle n|m\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}}\langle 0|\hat{a}^{n}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m}|0\rangle \tag{6.12}$$

利用对易关系

$$\begin{cases} \left[\hat{N},\hat{a}\right] = -\hat{a} \\ \left[\hat{N},\hat{a}^{\dagger}\right] = \hat{a}^{\dagger} \end{cases} \tag{6.13}$$

和作业三题2a之结论，可导出

$$\left[\hat{N},\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n}\right] = n\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{n} \tag{6.14}$$

因此，式6.12中的

$$\begin{aligned} \hat{a}^{n}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m} &= \hat{a}^{n-1}\left(\hat{a}\hat{a}^{\dagger}\right)\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m-1} = \hat{a}^{n-1}\left(\hat{N}+\mathbb{1}\right)\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m-1} \\ &= \hat{a}^{n-1}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m-1} + \hat{a}^{n-1}\hat{N}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m-1} \\ &= \hat{a}^{n-1}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m-1} + \hat{a}^{n-1}\left[(m-1)\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m-1} + \left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m-1}\hat{N}\right] \\ &= m\hat{a}^{n-1}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m-1} + \hat{a}^{n-1}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m-1}\hat{N} \end{aligned} \tag{6.15}$$

回代入式6.12，就有

$$\begin{aligned} \langle n|m\rangle &= \frac{m}{\sqrt{n!m!}}\langle 0|\hat{a}^{n-1}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m-1}|0\rangle \\ &= \frac{m\,(m-1)}{\sqrt{n!m!}}\langle 0|\hat{a}^{n-2}\left(\hat{a}^{\dagger}\right)^{m-2}|0\rangle \\ &= \cdots \\ &= \frac{m!}{\sqrt{n!m!}}\langle 0|\hat{a}^{n-m}|0\rangle \\ &= \begin{cases} 0 & ,n > m \\ \langle 0|0\rangle = 1 & ,n = m \end{cases} \end{aligned} \tag{6.16}$$

得证.

Tips: 上面所列的三种解法中，以法一最简洁、法二最直接. 大家使用最多的法三，与法二没有本质上的差异，虽相对较繁琐，但不失为一种练习对易子计算技巧的不错方式.

另外，少数同学利用递推关系化简时，在最后一步出现了$\langle n-m|0\rangle=0$. 严格来说这是不严谨的，相当于已经利用$\langle n-m|0\rangle=\delta_{n-m,0}$的欲证结论.

7 第七题

请验证Fock态下的如下关系：

a

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle=0,\ \langle n|\hat{p}|n\rangle=0$$

b

$$\langle n|\hat{x}^2|n\rangle=\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right),\ \langle n|\hat{p}^2|n\rangle=m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

c

$$\Delta x\Delta p=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar$$

7.1 7a

根据第五题引入的记号，有

$$\langle\hat{x}\rangle_n=\langle n|\hat{x}|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}\beta}\langle n|\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}\beta}\sqrt{n}\left(\langle n|n-1\rangle+\langle n-1|n\rangle\right)=0 \tag{7.1}$$

$\langle\hat{p}\rangle_n=\langle n|\hat{p}|n\rangle=0$同理可证.

7.2 7b

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}^2\rangle_n=\langle n|\hat{x}^2|n\rangle&=\frac{1}{2\beta^2}\langle n|\left(\hat{a}+\hat{a}^\dagger\right)^2|n\rangle\\&=\frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|\left(\hat{a}^2+\hat{a}^{\dagger 2}+\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)|n\rangle\\&=\frac{\hbar}{2m\omega}\left[\left(\hat{a}^\dagger|n\rangle\right)^\dagger\hat{a}^\dagger|n\rangle+\left(\hat{a}|n\rangle\right)^\dagger\hat{a}|n\rangle\right]\\&=\frac{\hbar}{2m\omega}\left(n+1+n\right)\\&=\frac{\hbar}{m\omega}\left(n+\frac{1}{2}\right)\end{aligned} \tag{7.2}$$

式中第四个等号利用了递推关系6.4. 同理有

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{p}^2 \rangle_n = \langle n|\hat{p}^2|n\rangle &= -\frac{\hbar^2\beta^2}{2}\langle n|\left(\hat{a}-\hat{a}^\dagger\right)^2|n\rangle \\
&= -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle n|\left(\hat{a}^2+\hat{a}^{\dagger 2}-\hat{a}\hat{a}^\dagger-\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)|n\rangle \\
&= \frac{m\hbar\omega}{2}\left[\left(\hat{a}^\dagger|n\rangle\right)^\dagger\hat{a}^\dagger|n\rangle+\left(\hat{a}|n\rangle\right)^\dagger\hat{a}|n\rangle\right] \\
&= \frac{m\hbar\omega}{2}\left(n+1+n\right) \\
&= m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)
\end{aligned}
\tag{7.3}
$$

7.3 7c

在Fock态$|n\rangle$下，

$$
\begin{aligned}
\left(\Delta x\Delta p\right)_n &= \sqrt{\langle\hat{x}^2\rangle_n-\langle\hat{x}\rangle_n^2}\cdot\sqrt{\langle\hat{p}^2\rangle_n-\langle\hat{p}\rangle_n^2} \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}\cdot m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)^2} \\
&= \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar
\end{aligned}
\tag{7.4}
$$