2022 秋易为老师量子力学 B
习题十三参考解答

刘丰铨　　宋冰睿

2022 年 12 月 29 日

1　第 1 题

对于一维谐振子，可取基态变分波函数为：

$$\psi(x)=\begin{cases}A\cos\left(\dfrac{\pi x}{a}\right), & |x|<\dfrac{a}{2}\\ 0, & |x|\geq\dfrac{a}{2}\end{cases}$$

其中 a 为变分参数. 尝试用变分法求解基态能量，并与精确值比较.

解：首先，我们应将题给波函数归一化. 不妨设 A 为正实数，由：

$$\begin{aligned}1=\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x&=A^2\int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}}\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\mathrm{d}x\\&=A^2\int_0^{+\frac{a}{2}}\left[1+\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]\mathrm{d}x\\&=A^2\left(\frac{a}{2}+0\right)=\frac{A^2a}{2}\end{aligned}\tag{1.1}$$

有：

$$A=\sqrt{\frac{2}{a}}\tag{1.2}$$

同时，我们知道，一维谐振子的 Hamiltonian 算符为：

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\tag{1.3}$$

我们将其中 ω 视为已知. 由此，利用第七次作业第 2 题的论述，记题给波函数所描述的态为 $|\psi\rangle$，我们有：

$$\left\langle x\middle|\hat{H}\middle|\psi\right\rangle=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x)\tag{1.4}$$

因而体系处于题给态时的能量期望值可表达为（注意：求导过程中可能得到 δ 函数）：

$$
\begin{aligned}
\langle E\rangle = \left\langle\psi\middle|\hat{H}\middle|\psi\right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty}\langle\psi\,|\,x\rangle\left\langle x\middle|\hat{H}\middle|\psi\right\rangle\mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x)\,\mathrm{d}x \\
&= A^2\int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\left\{\frac{\pi\hbar^2}{2ma}\left[\frac{\pi}{a}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)-\delta\left(x+\frac{a}{2}\right)-\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right\}\mathrm{d}x \\
&= \frac{2}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}}\left\{\frac{\pi\hbar^2}{2ma}\left[\frac{\pi}{a}\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)-\cos\left(-\frac{\pi}{2}\right)\delta\left(x+\frac{a}{2}\right)-\cos\left(\frac{\pi}{2}\right)\delta\left(x-\frac{a}{2}\right)\right]+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right\}\mathrm{d}x \\
&= \frac{2}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}}\left[\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]\mathrm{d}x \\
&= \frac{2}{a}\int_{0}^{+\frac{a}{2}}\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\left[1+\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]\mathrm{d}x \\
&= \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}+\frac{m\omega^2a^2}{24}-\frac{m\omega^2a^2}{4\pi^2}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}+\frac{m\omega^2a^2}{24\pi^2}\left(\pi^2-6\right)
\end{aligned}
\tag{1.5}
$$

其中最后一步使用了分部积分. 因而能量期望值对 a 的导数为：

$$
\frac{\partial\langle E\rangle}{\partial a}=-\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^3}+\frac{m\omega^2a}{12\pi^2}\left(\pi^2-6\right) \tag{1.6}
$$

令之为零，有唯一满足题给条件的解（记之为 a_0）：

$$
a_0=\sqrt[4]{\frac{12\pi^4\hbar^2}{\left(\pi^2-6\right)m^2\omega^2}}=\pi\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt[4]{\frac{12}{\pi^2-6}} \tag{1.7}
$$

考虑到当 $a\to+\infty$ 和 $a\to 0$ 时能量期望值均趋于无穷，有 $a=a_0$ 时能量期望值取得极小值. 将上式代回1.5，有：

$$
\langle E\rangle_{\min}=\frac{\hbar\omega}{2}\sqrt{\frac{\pi^2-6}{12}}+\frac{\hbar\omega}{2}\sqrt{\frac{\pi^2-6}{12}}=\hbar\omega\sqrt{\frac{\pi^2-6}{12}}\approx 0.57\hbar\omega \tag{1.8}
$$

即为所求. 结果大于精确值 $\frac{1}{2}\hbar\omega$，这在我们的意料之中.

2 第 2 题

处于基态的一维谐振子在 $t\geq 0$ 时受到微扰：

$$
\hat{V}(t)=V\mathrm{e}^{-at}\hat{x}
$$

其中 V 和 a 均为正常数. 利用一阶含时微扰论，求解 $t\to+\infty$ 时体系处于第一激发态的概率.

解：记 t 时刻系统处在态 $|\psi(t)\rangle$，并记谐振子体系基态为 $|0\rangle=|\psi(0)\rangle$，第一激发态为 $|1\rangle$，谐振子角频率 ω 视为已知，那么一阶含时微扰论给出：

$$
\langle 1\,|\,\psi(t)\rangle=\langle 1\,|\,0\rangle-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\left\langle 1\middle|\hat{V}(\tau)\middle|0\right\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{10}\tau}\mathrm{d}\tau=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t\left\langle 1\middle|\hat{V}(\tau)\middle|0\right\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\mathrm{d}\tau \tag{2.1}
$$

其中已利用约定：

$$\omega_{mn} = \frac{(E_m - E_n)}{\hbar} = (m-n)\,\omega \tag{2.2}$$

接下来计算微扰算符的矩阵元 $\left\langle 1 \left| \hat{V}(t) \right| 0 \right\rangle$. 注意到：

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}\right) \tag{2.3}$$

并利用升降算符 $\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}$ 的性质，有：

$$\left\langle 1 \left| \hat{V}(t) \right| 0 \right\rangle = V\mathrm{e}^{-at}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\langle 1 \left| \left(\hat{a}^{\dagger} + \hat{a}\right) \right| 0 \right\rangle = V\mathrm{e}^{-at}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle 1 \,|\, 1\rangle = V\mathrm{e}^{-at}\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \tag{2.4}$$

代入2.1并计算其模平方，可以得到 t 时刻体系处于第一激发态的概率：

$$\begin{aligned} P_1(t) = |\langle 1 \,|\, \psi(t)\rangle|^2 &= \left| -\mathrm{i}V\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\int_0^t \mathrm{e}^{-a\tau}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega\tau}\mathrm{d}\tau \right|^2 \\ &= \left| -\frac{\mathrm{i}V}{a-\mathrm{i}\omega}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\left(1-\mathrm{e}^{-at}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right) \right|^2 \end{aligned} \tag{2.5}$$

当 $t \to +\infty$ 时，由于 a 为正数，圆括号内第二项为零，故：

$$P_1(t \to +\infty) = \left| -\frac{\mathrm{i}V}{a-\mathrm{i}\omega}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \right|^2 = \frac{V^2}{2m\hbar\omega\left(a^2+\omega^2\right)} \tag{2.6}$$

即为所求.

3 第 3 题

某自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子在磁场中的 Hamiltonian 为：

$$\hat{H} = -\mu\left[B_0\hat{\sigma}_z + B_1\cos(2\omega_0 t)\,\hat{\sigma}_x - B_1\sin(2\omega_0 t)\,\hat{\sigma}_y\right]$$

其中 $\omega_0 = \frac{\mu B_0}{\hbar}$ 为 Larmor 频率. 设 $t=0$ 时粒子处于算符 $\hat{S}_z$ 本征值为 $\frac{\hbar}{2}$ 的本征态 $|\uparrow\rangle$.

(a) 利用一阶含时微扰论求在时刻 t 粒子处于算符 $\hat{S}_z$ 本征值为 $-\frac{\hbar}{2}$ 的本征态 $|\downarrow\rangle$ 的概率.

(b) 求上一问题的精确解.

解：在接下来的解答中，我们取：

$$\hat{H}_0 = -\mu B_0\hat{\sigma}_z \tag{3.1}$$

$$\hat{V}(t) = -\mu\left[B_1\cos(2\omega_0 t)\,\hat{\sigma}_x - B_1\sin(2\omega_0 t)\,\hat{\sigma}_y\right] \tag{3.2}$$

以便使用含时微扰论程式. 利用 Pauli 算符的基本性质，我们有 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 分别对应的零级本征能量：

$$E_{\uparrow} = -\mu B_0 \tag{3.3}$$

$$E_{\downarrow} = \mu B_0 \tag{3.4}$$

由此：

$$\omega_{\downarrow\uparrow} = \frac{E_\downarrow - E_\uparrow}{\hbar} = \frac{2\mu B_0}{\hbar} = 2\omega_0 \tag{3.5}$$

3.1 3a

记 t 时刻系统处在态 $|\psi(t)\rangle$，则 $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$. 那么一阶含时微扰论给出：

$$\langle\downarrow|\psi(t)\rangle = \langle\downarrow|\uparrow\rangle - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \left\langle\downarrow\middle|\hat{V}(\tau)\middle|\uparrow\right\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\downarrow\uparrow}\tau}\mathrm{d}\tau = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \left\langle\downarrow\middle|\hat{V}(\tau)\middle|\uparrow\right\rangle \mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_0\tau}\mathrm{d}\tau \tag{3.6}$$

接下来计算微扰算符的矩阵元 $\left\langle\downarrow\middle|\hat{V}(t)\middle|\uparrow\right\rangle$. 利用：

$$\begin{cases}\hat{\sigma}_x|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \\ \hat{\sigma}_y|\uparrow\rangle = \mathrm{i}|\downarrow\rangle\end{cases} \tag{3.7}$$

有：

$$\begin{aligned}\left\langle\downarrow\middle|\hat{V}(t)\middle|\uparrow\right\rangle &= \left\langle\downarrow\middle|-\mu\left[B_1\cos(2\omega_0 t)\hat{\sigma}_x - B_1\sin(2\omega_0 t)\hat{\sigma}_y\right]\middle|\uparrow\right\rangle \\ &= -\mu B_1\left[\langle\downarrow|\cos(2\omega_0 t)|\downarrow\rangle - \langle\downarrow|\mathrm{i}\sin(2\omega_0 t)|\downarrow\rangle\right] \\ &= -\mu B_1\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0 t} = -\mu B_1\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_0 t}\end{aligned} \tag{3.8}$$

将上式代入3.6并计算其模平方，可以得到 t 时刻体系处于 $|\downarrow\rangle$ 的概率：

$$P_{\downarrow,estimated} = |\langle\downarrow|\psi(t)\rangle|^2 = \left|\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mu B_1\mathrm{d}\tau\right|^2 = \frac{\mu^2 {B_1}^2 t^2}{\hbar^2} \tag{3.9}$$

即为所求.

3.2 3b

依题意，要求出精确解，我们需要求解粒子随时间的演化. 现在，由于 Hamiltonian 时变且不同时刻的 Hamiltonian 算符不对易，我们已经难以用时间演化算符的形式对粒子的演化进行描述. 因此，我们回归到 Schrödinger 方程，考虑：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{3.10}$$

利用 Pauli 算符在基 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ 下的矩阵表示：

$$\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{3.11}$$

我们有算符 $\hat{H}$ 的矩阵表示：

$$H = -\mu\left[B_0\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} + B_1\cos(2\omega_0 t)\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} - B_1\sin(2\omega_0 t)\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix}\right] = -\mu\begin{pmatrix}B_0 & B_1\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_0 t}\\ B_1\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0 t} & -B_0\end{pmatrix} \tag{3.12}$$

并记 $|\psi(t)\rangle$ 的矩阵表示为：

$$|\psi(t)\rangle \to \begin{pmatrix}c_\uparrow\\ c_\downarrow\end{pmatrix} \tag{3.13}$$

那么由3.10可以得到以下表达式：

$$
\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix} = -\mu\begin{pmatrix} B_0 & B_1\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_0 t} \\ B_1\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0 t} & -B_0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_\uparrow \\ c_\downarrow \end{pmatrix} = -\mu\begin{pmatrix} B_0 c_\uparrow + B_1\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_0 t}c_\downarrow \\ B_1\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0 t}c_\uparrow - B_0 c_\downarrow \end{pmatrix} \tag{3.14}
$$

记 $\omega_1 = \dfrac{\mu B_1}{\hbar}$，则上式可化简为如下二元耦合的一阶偏微分方程（注意：这里对时间的偏导数和全导数没有实质区别）：

$$
\begin{cases} \dfrac{\partial c_\uparrow}{\partial t} = \mathrm{i}\omega_0 c_\uparrow + \mathrm{i}\omega_1\mathrm{e}^{2\mathrm{i}\omega_0 t}c_\downarrow \\ \dfrac{\partial c_\downarrow}{\partial t} = \mathrm{i}\omega_1\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega_0 t}c_\uparrow - \mathrm{i}\omega_0 c_\downarrow \end{cases} \tag{3.15}
$$

方程本身并不容易求解. 虽然我们难以通过变换将方程解耦，但我们知道，倘若能够让第一式和第二式中分别仅含 $c_\downarrow$ 和 $c_\uparrow$，方程也将变得易于求解. 为此，我们考虑做如下处理：

$$
\begin{cases} c_\uparrow = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}\tilde{c}_\uparrow \\ c_\downarrow = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\tilde{c}_\downarrow \end{cases} \tag{3.16}
$$

这实质上相当于在相互作用绘景下考虑问题. 代入前一式中，我们有：

$$
\begin{cases} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}\dfrac{\partial \tilde{c}_\uparrow}{\partial t} + \mathrm{i}\omega_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}\tilde{c}_\uparrow = \dfrac{\partial c_\uparrow}{\partial t} = \mathrm{i}\omega_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}\tilde{c}_\uparrow + \mathrm{i}\omega_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_0 t}\tilde{c}_\downarrow \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\dfrac{\partial \tilde{c}_\downarrow}{\partial t} - \mathrm{i}\omega_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\tilde{c}_\downarrow = \dfrac{\partial c_\downarrow}{\partial t} = \mathrm{i}\omega_1\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\tilde{c}_\uparrow - \mathrm{i}\omega_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_0 t}\tilde{c}_\downarrow \end{cases} \tag{3.17}
$$

整理得：

$$
\begin{cases} \dfrac{\partial \tilde{c}_\uparrow}{\partial t} = \mathrm{i}\omega_1\tilde{c}_\downarrow \\ \dfrac{\partial \tilde{c}_\downarrow}{\partial t} = \mathrm{i}\omega_1\tilde{c}_\uparrow \end{cases} \tag{3.18}
$$

将上示方程组中第一式两端对时间求偏导数，并将第二式代入，得到：

$$
\frac{\partial^2 \tilde{c}_\uparrow}{\partial t^2} = -{\omega_1}^2\tilde{c}_\uparrow \tag{3.19}
$$

方程的通解为：

$$
\tilde{c}_\uparrow = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1 t} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t} \tag{3.20}
$$

利用初值条件 $\tilde{c}_\uparrow(t=0) = 1$ 和 $\dfrac{\partial \tilde{c}_\uparrow}{\partial t}(t=0) = \mathrm{i}\omega_1\tilde{c}_\downarrow(t=0) = 0$，可以得到：

$$
\begin{cases} A + B = 1 \\ \mathrm{i}\omega_1(A - B) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A = \dfrac{1}{2} \\ B = \dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{3.21}
$$

代回前一式，再代入3.18，可以得到 $\tilde{c}$ 的表达式：

$$
\begin{cases} \tilde{c}_\uparrow = \dfrac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1 t} + \dfrac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t} = \cos(\omega_1 t) \\ \tilde{c}_\downarrow = \dfrac{1}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_1 t} - \dfrac{1}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_1 t} = \mathrm{i}\sin(\omega_1 t) \end{cases} \tag{3.22}
$$

根据3.16，我们知道 $|c| = |\tilde{c}|$，因此在时刻 t 粒子处于 $|\downarrow\rangle$ 的概率为：

$$P_{\downarrow,\,precise} = \left|\tilde{c}_{\downarrow}\right|^2 = |\mathrm{i}\sin(\omega_1 t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\mu B_1 t}{\hbar}\right) \tag{3.23}$$

即为所求. 可见，当 B_1 足够小时，精确解与一阶微扰解吻合得相当好，这事实上也是我们将算符 $\hat{V}$ 视作微扰的先决条件. 然而，倘若 B_1 较大，一阶微扰所得解将大大偏离精确解，这也在我们的意料之中.

实际上，本题和第三次习题课讲义的第 3 道补充习题非常相似，习题课讲义上提供了另一种解决的思路，同学们可以考虑查阅.

注：本题所描述的，在一个大直流磁场的垂直方向加入小交流磁场的处理，是核磁共振 (NMR, Nuclear Magnetic Resonance) 的基本实现手段. 相应地，在生物医学工程中，有为人们所熟知的核磁共振成像 (MRI, Magnetic Resonance Imaging) 技术. 它首先利用频率等于 Larmor 频率的射频小交流磁场对生物组织内的粒子（一般的成像对象是氢核，即质子）进行激发，然后撤去交流小磁场. 此后，由于质子磁矩绕 z 轴进动，质子将继续发射 Larmor 频率的电磁场，基于探测得到的电磁场的强度和相位便可重建质子的密度分布，从而实现成像.