2022秋易为老师量子力学B
习题八参考解答

宋冰睿　刘丰铨

2022 年 11 月 12 日

1 第一题

一维简谐振子的Hamiltonian为

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

(a)已知在$t=0$时刻谐振子的坐标和动量算符为$\hat{x}\left(0\right)$和$\hat{p}\left(0\right)$，试在Heisenberg绘景下求坐标算符在任意$t\left(t>0\right)$时刻的表达式$\hat{x}^{\mathrm{H}}\left(t\right)$.

(b)若在$t=0$时刻谐振子的量子态为

$$|\psi\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{p}l}{\hbar}}|0\rangle$$

其中l是量纲为长度的实数. 试求在任意$t\left(t>0\right)$时刻$\langle\hat{x}\left(t\right)\rangle$的表达式.

(c)说明b中的谐振子在$t=0$时处于相干态. 在Schrödinger绘景下写出该谐振子在任意时刻$t\left(t>0\right)$所处的态，并说明其是否仍然是相干态.

首先给出符号约定：在Heisenberg绘景下，力学量算符$\hat{A}$在t时刻表示为$\hat{A}^{\mathrm{H}}\left(t\right)=\hat{U}^{\dagger}\left(t\right)\hat{A}\hat{U}\left(t\right)$，其中$\hat{U}\left(t\right)$是时间演化算符.

1.1 1a

由于坐标算符和动量算符自身不含时，因此根据Heisenberg运动方程立即有

$$\begin{cases}\dfrac{\mathrm{d}\hat{x}^{\mathrm{H}}\left(t\right)}{\mathrm{d}t}=\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{x}^{\mathrm{H}},\hat{H}^{\mathrm{H}}\right]=\dfrac{\hat{p}^{\mathrm{H}}}{m}\\ \dfrac{\mathrm{d}\hat{p}^{\mathrm{H}}\left(t\right)}{\mathrm{d}t}=\dfrac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{p}^{\mathrm{H}},\hat{H}^{\mathrm{H}}\right]=-m\omega^2\hat{x}^{\mathrm{H}}\end{cases}\tag{1.1}$$

联立两式可得关于坐标算符的微分方程

$$\frac{\mathrm{d}^2\hat{x}^{\mathrm{H}}}{\mathrm{d}t^2}+\omega^2\hat{x}^{\mathrm{H}}=0\tag{1.2}$$

其形式解是

$$\hat{x}^{\mathrm{H}}\left(t\right)=C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}+C_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\tag{1.3}$$

将初值条件代入，可最终得到

$$\hat{x}^{\mathrm{H}}\left(t\right)=\hat{x}\left(0\right)\cos\omega t+\frac{\hat{p}\left(0\right)}{m\omega}\sin\omega t\tag{1.4}$$

上面选取$(\hat{x},\hat{p})$这一组力学量对系统的动力学性质进行了描述. 事实上，由于$(\hat{a},\hat{a}^\dagger)$与之等价，我们当然也可以考虑降算符的Heisenberg运动方程

$$\frac{\mathrm{d}\hat{a}^{\mathrm{H}}(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{a}^{\mathrm{H}},\hat{H}^{\mathrm{H}}\right]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hbar\omega\hat{a}^{\mathrm{H}}=-\mathrm{i}\omega\hat{a}^{\mathrm{H}} \tag{1.5}$$

从中解得

$$\hat{a}^{\mathrm{H}}(t)=\hat{a}(0)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{1.6}$$

并同时得到$\left(\hat{a}^\dagger\right)^{\mathrm{H}}(t)$，辅以升降算符的初值条件即可求得与上面一样的结果.

另外，还可以直接使用时间演化算符，即

$$\hat{a}^{\mathrm{H}}(t)=\hat{U}^\dagger(t)\,\hat{a}(0)\,\hat{U}(t)=\exp\left[\mathrm{i}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)\omega t\right]\hat{a}\exp\left[-\mathrm{i}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)\omega t\right] \tag{1.7}$$

根据Baker-(Campbell-)Hausdorff公式（证明方法参见习题三参考解答）

$$\mathrm{e}^{\lambda\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{A}}=\hat{B}+\lambda\left[\hat{A},\hat{B}\right]+\frac{\lambda^2}{2!}\left[\hat{A},\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right]+\cdots \tag{1.8}$$

进行化简，也能得到相同结果.

1.2 1b

仍在Heisenberg绘景中考虑问题. 任意t时刻，坐标算符的期望值可表为

$$\langle\hat{x}(t)\rangle=\left\langle\psi\left|\hat{x}^{\mathrm{H}}(t)\right|\psi\right\rangle=\left\langle 0\left|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\hat{p}l}{\hbar}}\left[\hat{x}(0)\cos\omega t+\frac{\hat{p}(0)}{m\omega}\sin\omega t\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{p}l}{\hbar}}\right|0\right\rangle \tag{1.9}$$

利用BCH公式，或直接使用对易关系交换的技巧，式1.9中bracket的中间项可化为

$$\cos\omega t\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\hat{p}l}{\hbar}}\hat{x}(0)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{p}l}{\hbar}}+\frac{\sin\omega t}{m\omega}\cdot\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\hat{p}l}{\hbar}}\hat{p}(0)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hat{p}l}{\hbar}}=\cos\omega t\left[\hat{x}(0)+l\right]+\frac{\sin\omega t}{m\omega}\hat{p}(0) \tag{1.10}$$

最后，根据作业四题7a所证明的谐振子本征态之性质

$$\langle n|\hat{x}(0)|n\rangle=0=\langle n|\hat{p}(0)|n\rangle \tag{1.11}$$

式1.9即最终化为

$$\langle\hat{x}(t)\rangle=l\cos\omega t \tag{1.12}$$

1.3 1c

将$\hat{p}$用升降算符表示为

$$\hat{p}=-\mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}-\hat{a}^\dagger\right) \tag{1.13}$$

欲证明$|\psi\rangle$是相干态，则可尝试将降算符作用于其上，得到

$$\hat{a}|\psi\rangle=\hat{a}\exp\left[-l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{a}-\hat{a}^\dagger\right)\right]|0\rangle \tag{1.14}$$

根据作业三题4b之结论，我们有

$$\left[\hat{a}, \exp\left[-l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{a}-\hat{a}^{\dagger}\right)\right]\right] = l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\exp\left[l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{a}^{\dagger}-\hat{a}\right)\right] \tag{1.15}$$

因此，式1.14可化为

$$\hat{a}|\psi\rangle = \exp\left[l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{a}^{\dagger}-\hat{a}\right)\right]\hat{a}|0\rangle + l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\exp\left[l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{a}^{\dagger}-\hat{a}\right)\right]|0\rangle = l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}|\psi\rangle \tag{1.16}$$

式中第一项为0. 是故1b中谐振子的初态$|\psi\rangle$是相干态，其对应的降算符本征值为$\lambda = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}l$.

下面考虑$|\psi\rangle$的时间演化. 由于一般情况下，其并非Hamiltonian的本征态，故需将其在Fock态构成的正交完备基上展开，其结果为

$$|\psi\rangle = \mathrm{e}^{-|\lambda|^2/2}\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{1.17}$$

Fock态$|n\rangle$对应的能量本征值为$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$，因此在Schrödinger绘景下，任意时刻的量子态可写为

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-|\lambda|^2/2}\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}|n\rangle \tag{1.18}$$

欲检验其是否仍为相干态，我们有如下两种方法.

1.3.1 法一

从式1.18中不难发现，若记$\lambda(t) = \lambda\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}l\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$，则该式可改写为

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\mathrm{e}^{-|\lambda|^2/2}\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\left(\lambda\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right)^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}|\lambda(t)\rangle \tag{1.19}$$

式中，我们发现中间一项即为相干态在Fock态上的展开形式1.17，故利用本征值$\lambda(t)$对其进行了标定.

可以看到，$|\psi(t)\rangle$仅比相干态$|\lambda(t)\rangle$多一个可以忽略的相因子，因此，该谐振子在任意时刻的态均为相干态.

1.3.2 法二

我们也可以效仿证明初态为相干态的思路，直接将降算符作用于其上，得到的是

$$\begin{aligned}\hat{a}|\psi(t)\rangle &= \mathrm{e}^{-|\lambda|^2/2}\sum_{n=1}^{+\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{(n-1)!}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}\sqrt{n}|n-1\rangle \\ &= \lambda\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{-|\lambda|^2/2}\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}|n\rangle \\ &= \lambda(t)|\psi(t)\rangle\end{aligned} \tag{1.20}$$

注意由于是在Schrödinger绘景下考虑问题，故降算符$\hat{a}$不随时变.

因此，$\left|\psi\left(t\right)\right\rangle$是降算符的本征态——相干态.

事实上，$\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\hat{p}l}{\hbar}\right)$是一种相空间平移变换，只改变态的“位置”而不影响其本身性质，因此$\left|\psi\right\rangle$和$\left|0\right\rangle$一样，是相干态.

另外，有相当一部分同学在讨论$\left|\psi\left(t\right)\right\rangle$采取了如下解法. 考虑

$$\hat{a}\left|\psi\left(t\right)\right\rangle=\hat{a}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\left|\psi\right\rangle \tag{1.21}$$

利用作业三题4b之结论求算对易关系

$$\begin{aligned}\left[\hat{a},\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\right]&=-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\left[\hat{a},\hat{H}\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\\ \hat{a}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{a}&=-\mathrm{i}\omega t\hat{a}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\end{aligned} \tag{1.22}$$

从而得到

$$\hat{a}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}=\frac{1}{1+\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{a} \tag{1.23}$$

代入式1.21中，得到

$$\begin{aligned}\hat{a}\left|\psi\left(t\right)\right\rangle&=\frac{1}{1+\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\hat{a}\left|\psi\right\rangle\\&=\frac{1}{1+\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}\lambda\left|\psi\right\rangle\\&=\frac{\lambda}{1+\mathrm{i}\omega t}\left|\psi\left(t\right)\right\rangle\end{aligned} \tag{1.24}$$

从而给出$\lambda\left(t\right)=\dfrac{\lambda}{1+\mathrm{i}\omega t}$.

乍看之下，该解法似乎每一步推导都有理有据. 但是，式1.22的第一步利用的作业三题4b之结论，其成立需要满足

$$\left[\hat{H},\left[\hat{a},\hat{H}\right]\right]?=0 \tag{1.25}$$

然而该式显然不成立.

这提醒我们，在应用一些特定公式或结论前，一定要注意它们的前提条件.

2 第二题

已知一维无限深方势阱

$$V\left(x\right)=\begin{cases}0 & ,0<x<a\\ +\infty & ,x<0\text{或}x>a\end{cases}$$

(a)写出归一化的能量本征波函数与本征能级.

(b)求粒子处于体系基态时出现在$(0,a/2)$区间内的几率.

2.1 2a

直接解Schrödinger方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi(x)=E\psi(x) \tag{2.1}$$

可得形式解

$$\psi(x)=\begin{cases}C_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}+C_2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} & ,0<x<a\\ 0 & ,x<0\text{或}x>a\end{cases} \tag{2.2}$$

其中$k\triangleq\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. 再根据

$$\begin{aligned}&\text{边界条件：}\psi(0)=0=\psi(a)\\ &\text{归一化条件：}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}x\,|\psi(x)|^2=1\end{aligned} \tag{2.3}$$

即可最终得到($n\in\mathbb{N}^+$)

$$\begin{cases}\psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a} & ,0<x<a\\ 0 & ,x<0\text{或}x>a\end{cases}\\ E_n=\dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\end{cases} \tag{2.4}$$

2.2 2b

在$(0,a)$区间内，基态波函数是

$$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{\pi x}{a} \tag{2.5}$$

因此粒子出现在$(0,a/2)$区间内的概率为

$$P(0<x<a/2)=\int_0^{a/2}\mathrm{d}x\,|\psi_1(x)|^2=\frac{1}{2} \tag{2.6}$$

3 第三题

设某粒子在$t=0$时处在上题势阱能量最低的本征态上. 在$t>0$时，势阱的形式突变为

$$V(x)=\begin{cases}0 & ,0<x<2a\\ +\infty & ,x<0\text{或}x>2a\end{cases}$$

假设势场在$t=0$时刻的突变不改变波函数在$t=0$时刻的形式.

(a)求新的势阱中能量本征波函数与本征能级.

(b)写出粒子在$t>0$时的演化形式.

(c)写出在t时刻粒子处在新的势阱中能量最低本征态的几率.

(d)写出在t时刻粒子处在初态的几率.（给出表达式即可）

3.1 3a

在上题结果中作替换$a \to 2a$，即可得到新势阱中能量本征问题的解($n \in \mathbb{N}^+$)：

$$\begin{cases} \tilde{\psi}_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{1}{a}} \sin \dfrac{n\pi x}{2a} & ,0 < x < 2a \\ 0 & ,x < 0 \text{或} x > 2a \end{cases} \\ \tilde{E}_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{8ma^2} \end{cases} \tag{3.1}$$

3.2 3b

下面仅在$(0, 2a)$区间内进行讨论. 粒子的初态依题写为

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}} \sin \dfrac{\pi x}{a} & ,0 < x < a \\ 0 & ,a < x < 2a \end{cases} \tag{3.2}$$

为求时间演化形式，需首先将其在新能量本征波函数构成的正交完备基上展开：

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n(0)\, \tilde{\psi}_n(x) \tag{3.3}$$

展开系数是

$$\begin{aligned} c_n(0) &= \int_0^{2a} \mathrm{d}x \tilde{\psi}_n^*(x)\, \psi(x, 0) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a} \int_0^a \mathrm{d}x \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{n\pi x}{2a} \\ &= \frac{\sqrt{2}}{2a} \int_0^a \mathrm{d}x \left\{ \cos\left[\left(\frac{n}{2} - 1\right)\frac{\pi x}{a}\right] - \cos\left[\left(\frac{n}{2} + 1\right)\frac{\pi x}{a}\right] \right\} \\ &= \begin{cases} \dfrac{\sqrt{2}}{2a}\left[\dfrac{2a}{(n-2)\pi} \sin\left(\dfrac{n}{2} - 1\right)\pi - \dfrac{2a}{(n+2)\pi} \sin\left(\dfrac{n}{2} + 1\right)\pi\right] & ,n \neq 2 \\ \dfrac{\sqrt{2}}{2a} \displaystyle\int_0^a \mathrm{d}x \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a}\right) & ,n = 2 \end{cases} \\ &= \begin{cases} \dfrac{4\sqrt{2}}{(4 - n^2)\pi} \sin \dfrac{n\pi}{2} & ,n \neq 2 \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}} & ,n = 2 \end{cases} \end{aligned} \tag{3.4}$$

因此，$t > 0$时刻粒子所处态的演化形式是

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n(0) \exp\left(-\mathrm{i}\frac{n^2\pi^2\hbar}{8ma^2}t\right) \tilde{\psi}_n(x) \tag{3.5}$$

3.3 3c

粒子在t时刻处于新基态的概率

$$P_1\left(t\right)=\left|c_1\left(0\right)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{8ma^2}t\right)\right|^2=\frac{32}{9\pi^2} \tag{3.6}$$

为一常数.

推广可知，粒子处于任一能量本征态的概率时不变，这是因为每一个本征态均独立演化、互不影响.

3.4 3d

粒子在t时刻仍处于初态的概率为

$$\begin{aligned}
P\left(t\right)&=\left|\int_0^{2a}\mathrm{d}x\psi^*\left(x,0\right)\psi\left(x,t\right)\right|^2\\
&=\left|\int_0^{2a}\mathrm{d}x\left[\sum_{m=1}^{+\infty}c_m^*\left(0\right)\tilde{\psi}_m^*\left(x\right)\right]\left[\sum_{n=1}^{+\infty}c_n\left(0\right)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{n^2\pi^2\hbar}{8ma^2}t\right)\tilde{\psi}_n\left(x\right)\right]\right|^2\\
&=\left|\sum_{n=1}^{+\infty}\left|c_n\left(0\right)\right|^2\exp\left(-\mathrm{i}\frac{n^2\pi^2\hbar}{8ma^2}t\right)\right|^2\\
&=\left|\frac{32}{9\pi^2}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{8ma^2}t\right)+\frac{1}{2}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t\right)+\sum_{n=3}^{+\infty}\frac{32}{\left(n^2-4\right)^2\pi^2}\sin^2\frac{n\pi}{2}\exp\left(-\mathrm{i}\frac{n^2\pi^2\hbar}{8ma^2}t\right)\right|^2
\end{aligned} \tag{3.7}$$

其中利用了新能量本征波函数的正交归一条件

$$\int_0^{2a}\mathrm{d}x\tilde{\psi}_m^*\left(x\right)\tilde{\psi}_n\left(x\right)=\delta_{mn} \tag{3.8}$$

有的同学可能会对“仍处于初态”感到费解，认为既然已经演化至别的态，“处于初态”的概率就应为0. 然而这个概率并非是0，通过$P\left(t\right)=\left|\left\langle\psi\left(0\right)\middle|\psi\left(t\right)\right\rangle\right|^2$可以进行求算.

实际上，若记投影算符$\Pi\left(0\right)=\left|\psi\left(0\right)\right\rangle\left\langle\psi\left(0\right)\right|$，密度矩阵$\psi\left(t\right)=\left|\psi\left(t\right)\right\rangle\left\langle\psi\left(t\right)\right|$，这个概率可以站在更高的视角理解为投影算符在$t$时刻的期望值

$$\begin{aligned}
P\left(t\right)&=\mathrm{Tr}\left(\Pi\left(0\right)\psi\left(t\right)\right)\\
&=\mathrm{Tr}\left(\left|\psi\left(0\right)\right\rangle\left\langle\psi\left(0\right)\middle|\psi\left(t\right)\right\rangle\left\langle\psi\left(t\right)\right|\right)\\
&=\left\langle\psi\left(0\right)\middle|\psi\left(t\right)\right\rangle\left\langle\psi\left(t\right)\middle|\psi\left(0\right)\right\rangle\\
&=\left|\left\langle\psi\left(0\right)\middle|\psi\left(t\right)\right\rangle\right|^2
\end{aligned} \tag{3.9}$$