

# 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:

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

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:

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

有:

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (1.2)$$

同时, 我们知道, 一维谐振子的 Hamiltonian 算符为:

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

我们将其中  $\omega$  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:

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

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  $\delta$  函数）：

$$\begin{aligned}
 \langle E \rangle &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi | x \rangle \langle x | \hat{H} | \psi \rangle dx \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi(x) dx \\
 &= A^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \left\{ \frac{\pi \hbar^2}{2ma} \left[ \frac{\pi}{a} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \delta\left(x + \frac{a}{2}\right) - \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \right] + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right\} dx \\
 &= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \left\{ \frac{\pi \hbar^2}{2ma} \left[ \frac{\pi}{a} \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \cos\left(-\frac{\pi}{2}\right) \delta\left(x + \frac{a}{2}\right) - \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \right] + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right\} dx \\
 &= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \left[ \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right] dx \\
 &= \frac{2}{a} \int_0^{+\frac{a}{2}} \left( \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \left[ 1 + \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right] dx \\
 &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{m \omega^2 a^2}{24} - \frac{m \omega^2 a^2}{4\pi^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{m \omega^2 a^2}{24\pi^2} (\pi^2 - 6)
 \end{aligned} \tag{1.5}$$

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：

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

令之为零，有唯一满足题给条件的解（记之为  $a_0$ ）：

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

考虑到当  $a \rightarrow +\infty$  和  $a \rightarrow 0$  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：

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

其中  $V$  和  $a$  均为正常数. 利用一阶含时微扰论，求解  $t \rightarrow +\infty$  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  $\omega$  视为已知，那么一阶含时微扰论给出：

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

其中已利用约定：

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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:

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

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:

$$\hat{H}_0 = -\mu B_0 \hat{\sigma}_z \quad (3.1)$$

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

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:

$$E_\uparrow = -\mu B_0 \quad (3.3)$$

$$E_\downarrow = \mu B_0 \quad (3.4)$$

由此：

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

### 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：

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

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

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \\ \hat{\sigma}_y |\uparrow\rangle = i|\downarrow\rangle \end{cases} \quad (3.7)$$

有：

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

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：

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

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：

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

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

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

我们有算符  $\hat{H}$  的矩阵表示：

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

并记  $|\psi(t)\rangle$  的矩阵表示为：

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

那么由3.10可以得到以下表达式:

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

记  $\omega_1 = \frac{\mu B_1}{\hbar}$ , 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):

$$\begin{cases} \frac{\partial c_{\uparrow}}{\partial t} = i\omega_0 c_{\uparrow} + i\omega_1 e^{2i\omega_0 t} c_{\downarrow} \\ \frac{\partial c_{\downarrow}}{\partial t} = i\omega_1 e^{-2i\omega_0 t} c_{\uparrow} - i\omega_0 c_{\downarrow} \end{cases} \quad (3.15)$$

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:

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

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:

$$\begin{cases} e^{i\omega_0 t} \frac{\partial \tilde{c}_{\uparrow}}{\partial t} + i\omega_0 e^{i\omega_0 t} \tilde{c}_{\uparrow} = \frac{\partial c_{\uparrow}}{\partial t} = i\omega_0 e^{i\omega_0 t} \tilde{c}_{\uparrow} + i\omega_1 e^{i\omega_0 t} \tilde{c}_{\downarrow} \\ e^{-i\omega_0 t} \frac{\partial \tilde{c}_{\downarrow}}{\partial t} - i\omega_0 e^{-i\omega_0 t} \tilde{c}_{\downarrow} = \frac{\partial c_{\downarrow}}{\partial t} = i\omega_1 e^{-i\omega_0 t} \tilde{c}_{\uparrow} - i\omega_0 e^{-i\omega_0 t} \tilde{c}_{\downarrow} \end{cases} \quad (3.17)$$

整理得:

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{c}_{\uparrow}}{\partial t} = i\omega_1 \tilde{c}_{\downarrow} \\ \frac{\partial \tilde{c}_{\downarrow}}{\partial t} = i\omega_1 \tilde{c}_{\uparrow} \end{cases} \quad (3.18)$$

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:

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

方程的通解为:

$$\tilde{c}_{\uparrow} = A e^{i\omega_1 t} + B e^{-i\omega_1 t} \quad (3.20)$$

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

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

代回前一式, 再代入3.18, 可以得到  $\tilde{c}$  的表达式:

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

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:

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

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.