

5.29 考虑由两个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子组成的复合系统。在 $t < 0$ 时，哈密顿量不依赖于自旋，并能通过恰当地调整能标使其为零。在 $t > 0$ 时，哈密顿量由

$$H = \left(\frac{4\Delta}{\hbar^2} \right) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$$

给出。假定在 $t < 0$ 时，系统处于 $|+-\rangle$ 态。作为时间的函数，找出它处于如下几个态： $|++\rangle$ ， $|+-\rangle$ ， $| - + \rangle$ 和 $|--\rangle$ 中的每一个态的概率。

(a) 通过精确地求解这个问题。

(b) 通过下面的条件下求解这个问题：假设一级时间相关微扰论是有效的，而 H 作为微扰在 $t = 0$ 时加入。在什么条件下 (b) 给出正确的结果？

解： (a) $|+-\rangle$ 不是算符 $\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ 的本征态，因此在 $H \propto \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ 的时间演化中 $|+-\rangle$ 会演化至其他的几个态。由于

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = \frac{1}{2} (\mathbf{S}^2 - \mathbf{S}_1^2 - \mathbf{S}_2^2) \quad (1)$$

因此在耦合表象下考虑这个问题。在耦合表象下有

$$|+-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |10\rangle) \quad (2a)$$

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = -\frac{3\hbar^2}{4} |00\rangle \langle 00| + \frac{\hbar^2}{4} (|11\rangle \langle 11| + |10\rangle \langle 10| + |1, -1\rangle \langle 1, -1|) \quad (2b)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t, t_0) &= \exp\left(\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right) \\ &= e^{-i3\Delta t/\hbar} |00\rangle \langle 00| + e^{i\Delta t/\hbar} (|11\rangle \langle 11| + |10\rangle \langle 10| + |1, -1\rangle \langle 1, -1|) \end{aligned} \quad (2c)$$

因此态矢 $|+-\rangle$ 随时间的演化为

$$\begin{aligned} |\psi, t\rangle &= \mathcal{U}(t, 0) |+-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i3\Delta t/\hbar} |00\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\Delta t/\hbar} |10\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i3\Delta t/\hbar} + e^{i\Delta t/\hbar}) |+-\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{-i3\Delta t/\hbar} - e^{i\Delta t/\hbar}) | - + \rangle \end{aligned} \quad (3)$$

故处于各态的概率将为

$$\begin{aligned} P_{++} &= P_{--} = 0 \\ P_{+-} &= |\langle + - | \psi, t \rangle|^2 = 2 \cos^2 \frac{2\Delta t}{\hbar} \\ P_{-+} &= |\langle - + | \psi, t \rangle|^2 = 2 \sin^2 \frac{2\Delta t}{\hbar} \end{aligned}$$

(b) 将

$$H = \frac{4\Delta}{\hbar^2} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (4)$$

作为微扰时，无微扰哈密顿量

$$H_0 = 0 \quad (5)$$

故

$$V_I = H = \frac{4\Delta}{\hbar^2} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 \quad (6)$$

由一级含时微扰可知

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \langle n|H|+- \rangle \quad (7)$$

由式(2b)可知在非耦合表象下

$$H = \Delta (|++\rangle \langle ++| + |--\rangle \langle --|) - \Delta (|+-\rangle \langle +-| + |-+\rangle \langle -+|) + 2\Delta (|+-\rangle \langle -+| + |-+\rangle \langle +-|) \quad (8)$$

也就是说

$$c_{++}^{(1)}(t) = c_{--}^{(1)}(t) = 0 \quad (9a)$$

$$c_{-+}^{(1)}(t) = -\frac{2i\Delta t}{\hbar} \quad (9b)$$

因此在每个态上的概率为

$$P_{++} = P_{--} = 0 \quad (10a)$$

$$P_{-+} = |c_{-+}^{(1)}(t)|^2 = \frac{4\Delta^2 t^2}{\hbar^2} \quad (10b)$$

$$P_{+-} = 1 - P_{++} - P_{--} - P_{-+} = 1 - \frac{4\Delta^2 t^2}{\hbar^2} \quad (10c)$$

式(10)只有在 H 可以视为微扰时才成立，也就是说只有在时间尺度

$$t \ll \frac{\hbar}{\Delta}$$

下才成立。

5.30 考虑一个 $E_1 < E_2$ 的双能级系统，存在一个时间相关的势，它以如下方式联系着这两个能级：

$$V_{11} = V_{22} = 0, \quad V_{12} = \gamma e^{i\omega t}, \quad V_{21} = \gamma e^{-i\omega t} \quad (\gamma \text{ 为实数})$$

已知在 $t = 0$ 时，只有较低的能级被占据，即 $c_1(0) = 1$, $c_2(0) = 0$ 。

(a) 通过精确求解耦合微分方程

$$i\hbar \dot{c}_k = \sum_{n=1}^2 V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} c_n, \quad (k = 1, 2)$$

求 $t > 0$ 时的 $|c_1(t)|^2$ 和 $|c_2(t)|^2$ 。

(b) 使用时间相关的微扰论到最低的非零级求解同样的问题。比较小 γ 值时的两种近似的解。分别处理下列两种情况：(i) ω 与 ω_{21} 的差别非常大；(ii) ω 接近 ω_{21}

解：(a) 耦合方程给出

$$i\hbar \dot{c}_1 = \gamma e^{i\omega t} e^{-i\omega_{21}t} c_2 \quad (11a)$$

$$i\hbar \dot{c}_2 = \gamma e^{-i\omega t} e^{i\omega_{21}t} c_1 \quad (11b)$$

其中 $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$ 。在(11b)式两边求导得到

$$\ddot{c}_2 = -\frac{\gamma^2}{\hbar^2} c_2 - i(\omega - \omega_{21}) \dot{c}_2 \quad (12)$$

式(12)是一个二阶常系数齐次线性方程，可以写出通解

$$c_2 = A \exp \left(-i \frac{\omega - \omega_{21} + \sqrt{(\omega - \omega_{21})^2 + 4\gamma^2/\hbar^2}}{2} \right) + B \exp \left(-i \frac{\omega - \omega_{21} - \sqrt{(\omega - \omega_{21})^2 + 4\gamma^2/\hbar^2}}{2} \right) \quad (13)$$

通解(13)应当满足边界条件

$$c_2(0) = 0 \quad (14a)$$

$$\dot{c}_2(0) = -\frac{i\gamma}{\hbar} c_1(0) = -\frac{i\gamma}{\hbar} \quad (14b)$$

解出 A 与 B 的关系可以得到

$$c_2(t) = \frac{i\gamma}{\hbar} \frac{2}{\sqrt{(\omega - \omega_{21})^2 + 4\gamma^2/\hbar^2}} e^{i(\omega - \omega_{21})t} \sin \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} t \quad (15)$$

因此

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2 \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} t \quad (16a)$$

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2 \quad (16b)$$

(b) 在一级含时微扰下

$$\begin{aligned} c_2^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \langle 2|V_I|1 \rangle \\ &= \frac{\gamma}{\hbar} \cdot \frac{e^{-i(\omega - \omega_{21})t} - 1}{\omega - \omega_{21}} |c_2^{(1)}(t)|^2 = \frac{\gamma^2}{\hbar^2} \frac{2 - 2 \cos(\omega - \omega_{21})t}{(\omega - \omega_{21})^2} \end{aligned} \quad (17a)$$

$$= \frac{\gamma^2/\hbar^2}{(\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2 \frac{\omega - \omega_{21}}{2} t \quad (17b)$$

在

(i) ω 与 ω_{21} 的区别非常大时，由精确解(16)给出

$$\begin{aligned} |c_2(t)|^2 &= \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2 \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4}} t \\ &\approx \frac{\gamma^2/\hbar^2}{(\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2 \frac{\omega - \omega_{21}}{2} t \end{aligned} \quad (16')$$

近似式(16')与微扰论得到的结果(17b)保持一致。

(ii) ω 接近 ω_{21} 时，由(17b)式可以知道

$$|c_2(t)|^2 \approx \frac{\gamma^2}{\hbar^2} t^2 \quad (18)$$

可见系统跃迁到能级 E_2 的概率随时间平方增加。

5.35 考虑由一个电子与一个单电荷 ($Z = 1$) 氚核 (${}^3\text{H}$) 组成的原子。开始系统处于基态 ($n = 1, l = 0$)。假如系统经受 β 衰变, 原子核的电荷突然增加了一个单位 (实际上发射出一个电子和一个反中微子), 这意味着氚原子核 (称为氚核) 转变成一个质量为 $3({}^3\text{He})$ 的氦 ($Z = 2$) 原子核。

(a) 求系统处于产生的氦离子基态的概率。氦的波函数由

$$\psi_{n=1,l=0}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

给出

(b) 氚 β 衰变中可用的能量约为 18 keV 。且 ${}^3\text{He}$ 原子的尺度约为 1 \AA 。检查跃迁的时间标度 T 满足瞬变近似合理性的判据。

解: (a) 原子核电荷突然增加, 系统仍处于氢原子基态。系统态矢与氦原子基态的内积因而为

$$\begin{aligned} \langle 0_{\text{H}} | 0_{\text{He}} \rangle &= \int d^3\mathbf{r} \frac{1}{\pi} \cdot \frac{2^{3/2}}{a_0^3} e^{-\frac{3r}{a_0}} \\ &= \frac{8\sqrt{2}}{a_0^3} \int_0^{+\infty} dr r^2 e^{-3r/a_0} \\ &= \frac{16\sqrt{2}}{27} \end{aligned} \quad (19)$$

因此系统处于氦离子基态的概率为

$$P = |\langle 0_{\text{H}} | 0_{\text{He}} \rangle|^2 \approx 0.702 \quad (20)$$

(b) 氦离子的基态能量为

$$E_{\text{He}} = \frac{4}{E_{\text{H}}} = -54.4 \text{ eV} \quad (21)$$

因此这一跃迁具有能量差

$$\Delta E = 40.8 \text{ eV} \quad (22)$$

这一跃迁的时间标度为

$$T = \frac{\hbar}{\Delta E} \sim 10^{-15} \text{ s} \quad (23)$$

同时, β 衰变中释放的电子大约具有速度 $0.2c$, 电子溢出 He 原子大约需要

$$\Delta t = \frac{10^{-10}}{0.2 \times 3 \times 10^8} \text{ s} \sim 10^{-18} \text{ s} \quad (24)$$

可以看到系统态矢发生变化的时间 $\Delta t \ll T$, 因此瞬变近似可以合理使用。

5.38 一个氢原子的基态 ($n = 1, l = 0$) 受到一个如下的一个时间相关势

$$V(\mathbf{x}, t) = V_0 \cos(kz - \omega t)$$

的作用。使用时间相关微扰论, 求动量 \mathbf{p} 的电子被发射出来的跃迁速率的表达式。特别要证明如何计算放射出电子的角分布 (借助相对于 z 轴定义的 θ 和 φ 角)。简要地讨论这个问题与 (更实际一些) 光电效应的相似性和不同处。(注意: 初始波函数可参见习题 5.35。如果有归一化问题, 最终的波函数可以取为

$$\psi_f(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{L^{3/2}} \right) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar}$$

L 非常大, 但应能够证明可观测的效应是不依赖于 L 的。)

解: 题设微扰可以写为

$$V(\mathbf{x}, t) = \frac{V_0}{2} (e^{i(kz - \omega t)} + e^{-i(kz + \omega t)}) \quad (25)$$

可以看出(25)是一个谐波微扰。电子由初态 $|i\rangle$ 跃迁到由 \mathbf{p} 标记的末态 $|\mathbf{p}\rangle$ 的跃迁振幅由

$$c_{\mathbf{p}}(t) = \langle \mathbf{p} | U_I(t) | i \rangle \quad (26)$$

决定, 将 V 视为微扰, 可以写出一级近似

$$c_{\mathbf{p}}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \langle \mathbf{p} | \int_0^t d\tau V_I(\tau) | i \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau (\mathcal{V}_{\mathbf{p},i} e^{i\omega\tau} + \mathcal{V}_{\mathbf{p},i}^\dagger e^{-i\omega\tau}) e^{i\omega_{\mathbf{p}i}\tau} \quad (27)$$

其中

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\mathbf{p},i} &= \langle \mathbf{p} | \frac{V_0}{2} e^{-ikz} | i \rangle \\ \omega_{\mathbf{p},i} &= \frac{E_{\mathbf{p}} - E_i}{\hbar} \end{aligned}$$

最终可以得到跃迁速率

$$w_{i \rightarrow \mathbf{p}} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{V}_{\mathbf{p},i}|^2 \delta(E_{\mathbf{p}} - E_i \pm \hbar\omega) \quad (28)$$

接下来计算矩阵元 $\mathcal{V}_{\mathbf{p},i}$

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{\mathbf{p},i} &\propto \int d^3x e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} / \hbar} e^{-ikz} e^{-r/a_0} \\ &= \int d^3x e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}} e^{-r/a_0} \end{aligned} \quad (29)$$

其中 $\mathbf{q} = -k\hat{z} + \mathbf{p}/\hbar$ 。式(29)具有 Fourier 变换 $\mathcal{F}\{e^{-r/a_0}\}$ 的形式, 因此可以得到

$$\mathcal{V}_{\mathbf{p},i} \propto \frac{1}{(1 + a_0^2 q^2)^2} = \frac{1}{\left(1 + a_0^2 \left(\frac{p^2}{\hbar^2} + k^2 - 2\frac{pk}{\hbar} \cos \theta\right)\right)^2} \quad (30)$$

故角分布

$$f(\Omega) \propto \frac{1}{(\hbar^2 + a_0^2 p^2 + \hbar^2 k^2 - 2p\hbar k \cos \theta)^4} \quad (31)$$

5.39 约束在一维运动的一个质量为 m 的粒子, 被一个无限深势阱

$$\begin{cases} V = \infty & \text{对 } x < 0, x > L \\ V = 0 & \text{对 } 0 \leq x \leq L \end{cases}$$

禁闭在 $0 < x < L$ 的范围中。求在高能情况下, 作为 E 的函数的态密度表达式 (即单位能量间隔中的态的数目)。(检查你的量纲!)

解: 一维无限深势阱的本征解为

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L}, \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (32)$$

处在能量间隔 $E \sim E + dE$ 范围内的能级 n 满足

$$E < E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} < E + dE \quad (33)$$

即

$$\frac{a\sqrt{2mE}}{\pi\hbar} < n < \frac{a\sqrt{2mE}}{\pi\hbar} \sqrt{1 + \frac{dE}{E}} \approx \frac{a\sqrt{2mE}}{\pi\hbar} \left(1 + \frac{dE}{2E}\right) \quad (33')$$

因此处于能量间隔 $E \sim E + dE$ 内的能级共有

$$g(E) dE = \frac{a\sqrt{2mE}}{\pi\hbar} \cdot \frac{dE}{2E} \quad (34)$$

个，即态密度

$$g(E) = \frac{a\sqrt{m}}{2\pi\hbar} \cdot \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (35)$$

(35)式右侧涉及到各量的量纲为

$$\begin{aligned} [a] &= L \quad [m] = M \\ [\hbar] &= L^2 M T^{-1} \\ [E] &= L^2 M T^{-2} \end{aligned}$$

因此，结合起来可以得到态密度 (35) 的量纲为

$$[g(E)] = L^{-2} M^{-1} T^2 = [E]^{-1} \quad (36)$$

恰好是 E 的量纲的倒数，符合对态密度的定义。