

第 1 题 (课本习题 2.9) 得分: _____. 设 $|a'\rangle$ 和 $|a''\rangle$ 是厄米算符 A 的本征态, 本征值分别为 a' 和 a'' ($a' \neq a''$), 哈密顿量算符由下式给出

$$H = |a'\rangle\delta\langle a''| + |a''\rangle\delta\langle a'|,$$

其中 δ 只是个实数.

- (a) 显然, $|a'\rangle$ 和 $|a''\rangle$ 不是这个哈密顿量的本征态, 写出该哈密顿量的本征态, 他们的能量本征值是什么?
- (b) 如果已知 $t = 0$ 时刻系统处在 $|a'\rangle$ 态上, 在薛定谔绘景中写出 $t > 0$ 时的态矢量.
- (c) 如果已知 $t = 0$ 时系统处在 $|a'\rangle$ 态上, 在 $t > 0$ 时找到该系统在 $|a''\rangle$ 态的概率是多少?
- (d) 你能想出与这个问题对应的一种物理情况吗?

解: (a) 以 $\{|a'\rangle, |a''\rangle\}$ 为基, 该哈密顿量的矩阵表示为

$$H = \begin{bmatrix} 0 & \delta \\ \delta & 0 \end{bmatrix}. \quad (1)$$

利用

$$|H - EI| = \begin{vmatrix} -E & \delta \\ \delta & -E \end{vmatrix} = E^2 - \delta^2 = 0, \quad (2)$$

解得能量本征值为

$$E_1 = \delta, \quad E_2 = -\delta. \quad (3)$$

将这两个能量本征值代入

$$H|E_{1/2}\rangle = E_{1/2}|E_{1/2}\rangle \quad (4)$$

解得其对应的本征态分别为

$$|E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a'\rangle + |a''\rangle), \quad |E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a'\rangle - |a''\rangle). \quad (5)$$

(b) 该哈密顿量对应的时间演化算符为

$$U(t, 0) = \exp(-iHt/\hbar) = \exp(-i\delta t/\hbar)|E_1\rangle\langle E_1| + \exp(i\delta t/\hbar)|E_2\rangle\langle E_2|. \quad (6)$$

在薛定谔绘景中, $t > 0$ 时的态矢量为

$$\begin{aligned} |a', 0; t\rangle &= U(t, 0)|a'\rangle \\ &= [\exp(-i\delta t/\hbar)|E_1\rangle\langle E_1| + \exp(i\delta t/\hbar)|E_2\rangle\langle E_2|] \frac{1}{\sqrt{2}}(|E_1\rangle + |E_2\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}[\exp(-i\delta t/\hbar)|E_1\rangle + \exp(i\delta t/\hbar)|E_2\rangle] \\ &= \cos(\delta t/\hbar)|a'\rangle - i\sin(\delta t/\hbar)|a''\rangle. \end{aligned} \quad (7)$$

(c) 在 $t > 0$ 时找到该系统在 $|a''\rangle$ 态的概率为

$$P(a'') = |\langle a''|a', 0; t\rangle|^2 = \sin^2(\delta t/\hbar). \quad (8)$$

- (d) 以磁场中的电子自旋为例. 假设磁场沿 z 轴方向, $\mathbf{B} = B\hat{z}$. $|a'\rangle = |s_x, +\rangle$ 和 $|a''\rangle = |s_x, -\rangle$ 为厄米算符 S_x 的本征态. 哈密顿量算符可表为

$$\begin{aligned} H &= -\left(\frac{eB}{mc}\right) S_z \\ &= -\frac{e\hbar B}{2mc} |s_z, +\rangle \langle s_z, +| + \frac{e\hbar B}{2mc} |s_z, -\rangle \langle s_z, -| \\ &= -\frac{e\hbar B}{2mc} \frac{1}{\sqrt{2}} (|s_x, +\rangle + |s_x, -\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle s_x, +| + \langle s_x, -|) + \frac{e\hbar B}{2mc} \frac{1}{\sqrt{2}} (|s_x, +\rangle - |s_x, -\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle s_x, +| - \langle s_x, -|) \\ &= \delta |s_x, +\rangle \langle s_x, -| + \delta |s_x, -\rangle \langle s_x, +|, \end{aligned}$$

其中 $\delta = -\frac{e\hbar B}{2mc}$. 由 (b) 和 (c) 中得到的结论, 如果 $t = 0$ 时刻电子处在 $|s_x, +\rangle$ 态上, 则其在 $t > 0$ 时的状态为

$$|s_x, +, 0; t\rangle = \cos(\delta t/\hbar) |s_x, +\rangle - i \sin(\delta t/\hbar) |s_x, -\rangle. \quad (9)$$

此时找到电子在 $|s_x, -\rangle$ 态的概率为

$$P(s_x = -\hbar/2) = \sin^2(\delta t/\hbar). \quad (10)$$

□

第 2 题 (课本习题 2.10) 得分: _____. 含有一个粒子的一个盒子用一个薄的隔板分成左右两个隔间. 如果已知该粒子确定无疑地处在右 (左) 边, 则状态用 $|R\rangle$ ($|L\rangle$) 表示, 在那里我们忽略了在盒子的每一半中的空间变量, 然后, 最一般的态矢量可以写成

$$|\alpha\rangle = |R\rangle \langle R|\alpha\rangle + |L\rangle \langle L|\alpha\rangle,$$

其中 $\langle R|\alpha\rangle$ 和 $\langle L|\alpha\rangle$ 可以看作 “波函数”, 该粒子可以隧穿过隔板; 这种隧道效应由哈密顿量

$$H = \Delta(|L\rangle \langle R| + |R\rangle \langle L|)$$

表征, 其中的 Δ 是个有能量量纲的实数.

- 求归一化的能量本征右矢, 相应的能量本征值是什么?
- 在薛定谔绘景中基右矢 $|R\rangle$ 和 $|L\rangle$ 是固定不变的, 而态矢量随时间运动. 假定系统就由上面在 $t = 0$ 时给定的 $|\alpha\rangle$ 表示. 通过用适当的时间演化算符作用于 $|\alpha\rangle$, 求 $t > 0$ 时的态矢量 $|\alpha, t_0; t\rangle$.
- 假定 $t = 0$ 时粒子确定无疑地处在右边, 观测到粒子在左边的、作为时间函数的概率是多少?
- 写出波函数 $\langle R|\alpha, t_0; t\rangle$ 和 $\langle L|\alpha, t_0; t\rangle$ 的耦合薛定谔方程, 证明该耦合薛定谔方程的解正是你在 (b) 中所预期的.
- 假定打印机出了个错, 把 H 写成了

$$H = \Delta |L\rangle \langle R|.$$

通过明显地求解具有该哈密顿量的最普遍的时间演化问题, 证明概率守恒被破坏了.

解: (a) 以 $\{|R\rangle, |L\rangle\}$ 为基, 该哈密顿量的矩阵表示为

$$H = \begin{bmatrix} 0 & \Delta \\ \Delta & 0 \end{bmatrix}. \quad (11)$$

利用

$$|H - EI| = \begin{vmatrix} -E & \Delta \\ \Delta & -E \end{vmatrix} = E^2 - \Delta^2 = 0, \quad (12)$$

解得能量本征值为

$$E_1 = \Delta, \quad E_2 = -\Delta. \quad (13)$$

将这两个能量本征值代入

$$H|E_{1/2}\rangle = E_{1/2}|E_{1/2}\rangle \quad (14)$$

解得其对应的归一的能量本征右矢分别为

$$|E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|R\rangle + |L\rangle), \quad |E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|R\rangle - |L\rangle). \quad (15)$$

(b) 该哈密顿量对应的时间演化算符为

$$\begin{aligned} U(t, t_0) &= \exp[-iH(t - t_0)/\hbar] \\ &= \exp[-i\Delta(t - t_0)/\hbar]|E_1\rangle\langle E_1| + \exp[i\Delta(t - t_0)/\hbar]|E_2\rangle\langle E_2| \\ &= \exp[-i\Delta(t - t_0)/\hbar] \frac{1}{\sqrt{2}}(|R\rangle + |L\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle R| + \langle L|) + \exp[i\Delta(t - t_0)/\hbar] \frac{1}{\sqrt{2}}(|R\rangle - |L\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle R| - \langle L|) \\ &= \cos[\Delta(t - t_0)/\hbar](|R\rangle\langle R| + |L\rangle\langle L|) - i \sin[\Delta(t - t_0)/\hbar](|R\rangle\langle L| + |L\rangle\langle R|). \end{aligned} \quad (16)$$

$t > 0$ 时的态矢量为

$$\begin{aligned} |\alpha, t_0 = 0; t\rangle &= U(t, t_0 = 0)|\alpha, t_0 = 0; t\rangle \\ &= [\cos(\Delta t/\hbar)(|R\rangle\langle R| + |L\rangle\langle L|) - i \sin(\Delta t/\hbar)(|R\rangle\langle L| + |L\rangle\langle R|)](|R\rangle\langle R|\alpha\rangle + |L\rangle\langle L|\alpha\rangle) \\ &= [\langle R|\alpha\rangle \cos(\Delta t/\hbar) - i \langle L|\alpha\rangle \sin(\Delta t/\hbar)]|R\rangle + [\langle L|\alpha\rangle \cos(\Delta t/\hbar) - i \langle R|\alpha\rangle \sin(\Delta t/\hbar)]|L\rangle. \end{aligned} \quad (17)$$

(c) 由 (b) 中得到的结论, 若 $|\alpha, t_0 = 0\rangle = |R\rangle$, 则 $t > 0$ 时的态矢量为

$$|\alpha, t_0 = 0; t\rangle = \cos(\Delta t/\hbar)|R\rangle - i \sin(\Delta t/\hbar)|L\rangle. \quad (18)$$

观测到粒子在左边的概率为

$$P(L) = |\langle L|\alpha\rangle|^2 = \sin^2(\Delta t/\hbar). \quad (19)$$

(d) 波函数 $\langle R|\alpha, t_0; t\rangle$ 和 $\langle L|\alpha, t_0; t\rangle$ 的耦合薛定谔方程分别为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle R|\alpha, t_0; t\rangle = \langle R|H|\alpha, t_0; t\rangle, \quad (20)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle L|\alpha, t_0; t\rangle = \langle L|H|\alpha, t_0; t\rangle, \quad (21)$$

代入哈密顿量的具体形式 $H = \Delta(|L\rangle\langle R| + |R\rangle\langle L|)$, 有

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle R|\alpha, t_0; t\rangle = \Delta \langle L|\alpha, t_0; t\rangle, \quad (22)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle L|\alpha, t_0; t\rangle = \Delta \langle R|\alpha, t_0; t\rangle. \quad (23)$$

将 (b) 中得到的 $|\alpha, t_0; t\rangle$ 代入可得

$$\begin{aligned}
 \text{方程左边} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle R|\alpha, t_0; t\rangle \\
 &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\langle R|\alpha\rangle \cos(\Delta t/\hbar) - i\langle L|\alpha\rangle \sin(\Delta t/\hbar)] \\
 &= \Delta [-i\langle R|\alpha\rangle \sin(\Delta t/\hbar) + \langle L|\alpha\rangle \cos(\Delta t/\hbar)] \\
 &= \Delta \langle L|\alpha, t_0; t\rangle = \text{方程右边},
 \end{aligned} \tag{24}$$

$$\begin{aligned}
 \text{方程左边} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle R|\alpha, t_0; t\rangle \\
 &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [\langle L|\alpha\rangle \cos(\Delta t/\hbar) - i\langle R|\alpha\rangle \sin(\Delta t/\hbar)] \\
 &= \Delta [-i\langle L|\alpha\rangle \sin(\Delta t/\hbar) + \langle R|\alpha\rangle \cos(\Delta t/\hbar)] \\
 &= \Delta \langle R|\alpha, t_0; t\rangle = \text{方程右边}.
 \end{aligned} \tag{25}$$

故该耦合薛定谔方程的解正是在 (b) 中所预期的.

(e) 该错误哈密顿量对应的时间演化算符为

$$\begin{aligned}
 U(t, t_0) &= \exp \left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar} \right] \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar} \right]^n \\
 &\quad (\text{利用 } H^2 = \Delta|L\rangle\langle R|L\rangle\langle R|) \\
 &= 1 - \frac{i\Delta(t-t_0)}{\hbar} |L\rangle\langle R|.
 \end{aligned} \tag{26}$$

假设 $t = 0$ 时,

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = |\langle R|\alpha\rangle|^2 + |\langle L|\alpha\rangle|^2 = 1, \tag{27}$$

即在盒子中 (无论哪个隔间) 找到粒子的概率为 1. $t > 0$ 时系统的态矢量为

$$\begin{aligned}
 |\alpha, t_0 = 0; t\rangle &= U(t, 0)|\alpha\rangle \\
 &= \left(1 - \frac{i\Delta t}{\hbar} |L\rangle\langle R| \right) (|R\rangle\langle R|\alpha\rangle + |L\rangle\langle L|\alpha\rangle) \\
 &= |R\rangle\langle R|\alpha\rangle + |L\rangle \left(\langle L|\alpha\rangle - \frac{i\Delta t}{\hbar} \langle R|\alpha\rangle \right).
 \end{aligned} \tag{28}$$

此时

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha, t_0; t|\alpha, t_0; t\rangle &= \left[\langle \alpha|R\rangle\langle R| + \left(\langle \alpha|L\rangle + \frac{i\Delta t}{\hbar} \langle \alpha|R\rangle \right) \langle L| \right] \left[|R\rangle\langle R|\alpha\rangle + |L\rangle \left(\langle L|\alpha\rangle - \frac{i\Delta t}{\hbar} \langle R|\alpha\rangle \right) \right] \\
 &= |\langle R|\alpha\rangle|^2 + |\langle L|\alpha\rangle|^2 + \left(\frac{\Delta t}{\hbar} \right)^2 |\langle R|\alpha\rangle|^2 \\
 &= 1 + \left(\frac{\Delta t}{\hbar} \right)^2 |\langle R|\alpha\rangle|^2 \\
 &\geq 1.
 \end{aligned} \tag{29}$$

这说明概率守恒被破坏了.

□

第 3 题 (课本习题 2.12) 得分: _____. 考虑一个处在一维简谐振子位势中的粒子. 假定在 $t = 0$ 时态矢量为

$$\exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right)|0\rangle,$$

其中 p 是动量算符, 而 a 是某个具有长度量纲的数. $|0\rangle$ 是这样一个态, 它使 $\langle x \rangle = 0 = \langle p \rangle$, 利用海森堡绘景求 $t \geq 0$ 时的期待值 $\langle x \rangle$.

解: 简谐振子的哈密顿量为

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (30)$$

在海森堡绘景中, 位置算符和动量算符的运动方程分别为

$$\frac{\partial x}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[x, H] = \frac{1}{i\hbar}\left[x, \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right] = \frac{1}{2im\hbar}(p[x, p] + [x, p]p) = \frac{p}{m}, \quad (31)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[p, H] = \frac{1}{i\hbar}\left[p, \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\right] = \frac{m\omega^2}{2i\hbar}(x[p, x] + [p, x]x) = -m\omega^2 x, \quad (32)$$

联立这两个耦合的运动方程解得 $t \geq 0$ 时的位置算符为

$$x(t) = x(0) \cos(\omega t) + \frac{p(0)}{m\omega} \sin(\omega t). \quad (33)$$

$t \geq 0$ 时的位置期待值为

$$\begin{aligned} \langle x(t) \rangle &= \langle 0 | \exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right) x(t) \exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right) | 0 \rangle \\ &= \langle 0 | \exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right) x(0) \exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right) | 0 \rangle \cos(\omega t) + \langle 0 | \exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right) p(0) \exp\left(\frac{-ipa}{\hbar}\right) | 0 \rangle \\ &\quad (\text{利用 Baker-Campbell-Hausdorff 公式}) \\ &= \langle 0 | [x(0) + a] | 0 \rangle \cos(\omega t) \\ &= a \cos(\omega t). \end{aligned} \quad (34)$$

□

第 4 题 (课本习题 2.14) 得分: _____. 考虑一个一维简谐振子,

(a) 利用

$$\left. \begin{matrix} a \\ a^\dagger \end{matrix} \right\} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x \pm \frac{ip}{m\omega} \right), \quad \left. \begin{matrix} a|n\rangle \\ a^\dagger|n\rangle \end{matrix} \right\} = \left\{ \begin{matrix} \sqrt{n}|n-1\rangle \\ \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{matrix} \right\},$$

计算 $\langle m|x|n\rangle$, $\langle m|p|n\rangle$, $\langle m|x^2|n\rangle$ 和 $\langle m|p^2|n\rangle$.

(b) 维里定理可表述为

$$\left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right\rangle = \langle \mathbf{x} \cdot \nabla V \rangle, \quad \text{三维时, 或} \quad \left\langle \frac{p^2}{m} \right\rangle = \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle \quad \text{一维时,}$$

检验对于动能和势能在一个能量本征态上的期待值, 维里定理成立. (按勘误表要求, 这里给出了维里定理. —译者注)

解: (a) 利用

$$\left. \begin{matrix} a \\ a^\dagger \end{matrix} \right\} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(x \pm \frac{ip}{m\omega} \right),$$

有

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger), \quad (35)$$

$$p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-a + a^\dagger). \quad (36)$$

从而

$$\langle m|x|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\langle m|a|n\rangle + \langle m|a^\dagger|n\rangle) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}), \quad (37)$$

$$\langle m|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-\langle m|a|n\rangle + \langle m|a^\dagger|n\rangle) = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(-\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}) \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \langle m|x^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle m|(a + a^\dagger)^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}[\langle m|a^2|n\rangle + \langle m|aa^\dagger|n\rangle + \langle m|a^\dagger a|n\rangle + \langle m|(a^\dagger)^2|n\rangle] \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}[\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} + (2n+1)\delta_{m,n} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2}], \end{aligned} \quad (39)$$

$$\begin{aligned} \langle m|p^2|n\rangle &= -\frac{m\hbar\omega}{2}\langle m|(-a + a^\dagger)^2|n\rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2}[\langle m|a^2|n\rangle - \langle m|aa^\dagger|n\rangle - \langle m|a^\dagger a|n\rangle + \langle m|(a^\dagger)^2|n\rangle] \\ &= -\frac{m\hbar\omega}{2}[\sqrt{n(n-1)}\delta_{m,n-2} - (2n+1)\delta_{m,n} + \sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{m,n+2}]. \end{aligned} \quad (40)$$

(b) 一维时, 对于能量本征态 $|n\rangle$,

$$\langle \frac{p^2}{m} \rangle = -\frac{\hbar\omega}{2}\langle n|p^2|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (41)$$

$$\langle x \frac{dV}{dx} \rangle = \langle x \frac{d(m\omega^2 x^2/2)}{dx} \rangle = \langle m\omega^2 x^2 \rangle = m\omega^2 \langle n|x^2|n\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (42)$$

$$\Rightarrow \langle \frac{p^2}{m} \rangle = \langle x \frac{dV}{dx} \rangle. \quad (43)$$

三维时, 对于能量本征态 $|n_x, n_y, n_z\rangle$,

$$\begin{aligned} \langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \rangle &= \frac{1}{m}\langle n_x, n_y, n_z|(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)|n_x, n_y, n_z\rangle = \frac{1}{m}[\langle n_x|p_x^2|n_x\rangle + \langle n_y|p_y^2|n_y\rangle + \langle n_z|p_z^2|n_z\rangle] \\ &= \hbar\omega_x\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y\left(n_y + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_z\left(n_z + \frac{1}{2}\right), \end{aligned} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} \cdot \nabla V \rangle &= \langle x \frac{d(m\omega_x^2 x^2/2)}{dx} + y \frac{d(m\omega_y^2 y^2/2)}{dy} + z \frac{d(m\omega_z^2 z^2/2)}{dz} \rangle \\ &= \langle n_x, n_y, n_z|m\omega_x^2 x^2 + m\omega_y^2 y^2 + m\omega_z^2 z^2|n_x, n_y, n_z\rangle \\ &= m\omega_x^2 \langle n_x|x^2|n_x\rangle + m\omega_y^2 \langle n_y|y^2|n_y\rangle + m\omega_z^2 \langle n_z|z^2|n_z\rangle \\ &= \hbar\omega_x\left(n_x + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_y\left(n_y + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_z\left(n_z + \frac{1}{2}\right), \end{aligned} \quad (45)$$

$$\Rightarrow \langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \rangle = \langle \mathbf{x} \cdot \nabla V \rangle. \quad (46)$$

故对于动能和势能在一个能量本征态上的期待值, 维里定理成立。

□

第 5 题 (课本习题 2.22) 得分: _____. 考虑一个质量为 m 的粒子处于下列形式中的一维势中:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}kx^2, & \text{对于 } x > 0 \\ \infty, & \text{对于 } x < 0. \end{cases}$$

(a) 其基态能量是什么?

(b) 对于该基态的期待值 $\langle x^2 \rangle$ 是什么?

解: (a) 该粒子的哈密顿量为

$$H = \begin{cases} \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2, & \text{对于 } x > 0 \\ \infty, & \text{对于 } x < 0. \end{cases} \quad (47)$$

在 $x > 0$ 处, 薛定谔方程为

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2 \right) \psi = E\psi, \quad \text{for } x > 0, \quad (48)$$

这与谐振子的薛定谔方程相同, 因此该粒子在 $x > 0$ 处的波函数应为谐振子波函数的线性叠加的形式. 而在 $x < 0$ 处, 由于势垒无穷高, 故

$$\psi = 0, \quad \text{for } x < 0. \quad (49)$$

考虑到波函数的连续性, 该粒子的波函数需满足 $\psi(x=0) = 0$.

综合这两点来看, 该粒子的波函数在 $x > 0$ 处应为谐振子的奇对称的波函数的线性叠加, 在 $x < 0$ 处应 $= 0$. 因此, 该粒子的基态波函数在 $x > 0$ 处应为谐振子标号 $n = 1$ 的波函数 (的 2 倍), 而在 $x < 0$ 处应 $= 0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{2}\langle x|1\rangle, & \text{for } x > 0 \\ 0, & \text{for } x < 0, \end{cases} \quad (50)$$

其中 $|1\rangle$ 为谐振子标号 $n = 1$ 的态, $\langle x'|1\rangle$ 为其对应的波函数. 该粒子的基态能量为

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi^*(x') H \psi(x') = \hbar\omega \langle 1 | \left(N + \frac{1}{2} \right) | 1 \rangle = \frac{3}{2} \hbar\omega = \frac{3}{2} \hbar \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (51)$$

(b) 该基态的期待值

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \psi^*(x') x'^2 \psi(x') = \langle 1 | x^2 | 1 \rangle = \frac{3}{2} \frac{\hbar}{m\omega}. \quad (52)$$

(此处利用了课本习题 2.14 (a) 中得到的结论.)

□

第 6 题 (课本习题 2.23) 得分: _____. 一个一维粒子约束在两个刚性壁之间, 即

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{对于 } 0 < x < L \\ \infty, & \text{对于 } 0 < x, x > L. \end{cases}$$

$t = 0$ 时确知该粒子准确地处在 $x = L/2$ 处. 在能量的各种本征态上找到该粒子的相对概率是什么? 写出 $t \geq 0$ 时的波函数. (你无需担心绝对归一化、收敛性和其他的一些数学细节).

解: 在 $x < 0$ 和 $x > L$ 处, 由于势能无穷大, 故

$$\psi(x) = 0, \quad \text{for } x < 0, \text{ or } x > L. \quad (53)$$

在 $0 < x < L$ 处, 粒子的薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = E\psi, \quad \text{for } 0 < x < L, \quad (54)$$

考虑到边界条件 $\psi(0) = \psi(L) = 0$, 解得归一化波函数为

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \text{for } 0 < x < L, \quad (55)$$

对应的能量本征态为

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (56)$$

故能量的各本征态的波函数为

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & \text{for } 0 < x < L, \\ 0, & \text{for } 0 < x, \text{ or } x > L. \end{cases} \quad x = 1, 2, 3, \dots \quad (57)$$

对应的能量本征态为

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (58)$$

$t = 0$ 时确知该粒子准确地处在 $x = L/2$ 处, 此时的粒子状态的波函数为

$$\psi(x) = \sqrt{\delta\left(x - \frac{L}{2}\right)}. \quad (59)$$

在标号为 n 的能量本征态上找到该粒子的概率为

$$\begin{aligned} P_n &= |\langle \psi_n | \psi \rangle|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \psi(x) dx \right|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sqrt{\delta\left(x - \frac{L}{2}\right)} dx \right|^2 = \left| \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \right|^2 \\ &= \begin{cases} \frac{2}{L}, & \text{for odd } n, \\ 0, & \text{for even } n. \end{cases} \end{aligned} \quad (60)$$

(需要注意的是, 由于该哈密顿量有无穷多个本征态, 上述方法得到的概率实际上是不归一的且不具有正确的量纲, 我们只能理解为, 在 n 为奇数的能量本征态上找到粒子的概率相等, 而在 n 为偶数的能量本征态上找到该粒子的概率均为 0. 更加严谨的做法是, 假定本征态的总数 N , 在 n 为奇数的能量本征态上找到粒子的概率各为 $\frac{2}{N}$, 而在 n 为偶数的能量本征态上找到粒子的概率均为 0, 在我们实际求解某些物理量的期望值的过程中, 这个假定的 N 最终将会被消掉.)

$t = 0$ 时粒子的状态可用能量本征态展开为

$$|\psi, 0\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \psi, 0\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) |\psi_n\rangle = \sum_{\text{odd } n} (-1)^{(n-1)/2} \sqrt{\frac{2}{L}} |\psi_n\rangle. \quad (61)$$

$t > 0$ 时的波函数为

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \langle x | \psi, t \rangle = \langle x | U(t, 0) | \psi, 0 \rangle = \langle x | e^{-iHt/\hbar} \sum_{\text{odd } n} (-1)^{(n-1)/2} \sqrt{\frac{2}{L}} |\psi_n\rangle = \sum_{\text{odd } n} (-1)^{(n-1)/2} \sqrt{\frac{2}{L}} e^{-iE_n t/\hbar} \langle x | \psi_n \rangle \\ &= \begin{cases} \sum_{\text{odd } n} (-1)^{(n-1)/2} \frac{2}{L} \exp\left(-i\frac{\hbar n^2 \pi^2}{2mL^2} t\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & \text{for } 0 < x < L, \\ 0, & \text{for } 0 < x, \text{ or } x > L. \end{cases} \end{aligned} \quad (62)$$

□