第三次作业

截止时间: 2022 年 10 月 8 日 (周六)

姓名：陈 稼 霖
学号：SA21038052
成绩：__________

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

$$H = \begin{bmatrix} 0 & \delta \\ \delta & 0 \end{bmatrix}. \tag{1}$$

利用

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

解得能量本征值为

$$E_1 = \delta, \quad E_2 = -\delta. \tag{3}$$

将这两个能量本征值代入

$$H|E_{1/2}\rangle = E_{1/2}|E_{1/2}\rangle \tag{4}$$

解得其对应的本征态分别为

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

(b) 该哈密顿量对应的时间演化算符为

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

在薛定谔绘景中, $t > 0$ 时的态矢量为

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

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

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

(d) 以磁场中的电子自旋为例. 假设磁场沿 z 轴方向, $\boldsymbol{B}=B\hat{\boldsymbol{z}}$. $|a'\rangle=|s_x,+\rangle$ 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

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

此时找到电子在 $|s_x,-\rangle$ 态的概率为

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

□

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.

(a) 求归一化的能量本征右矢, 相应的能量本征值是什么?

(b) 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 $|\alpha,t_0;t\rangle$.

(c) 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?

(d) 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.

(e) 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

$$H=\begin{bmatrix}0&\Delta\\\Delta&0\end{bmatrix}. \tag{11}$$

利用

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

解得能量本征值为

$$E_1=\Delta,\quad E_2=-\Delta. \tag{13}$$

将这两个能量本征值代入

$$H|E_{1/2}\rangle=E_{1/2}|E_{1/2}\rangle \tag{14}$$

解得其对应的归一的能量本征右矢分别为

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

(b) 该哈密顿量对应的时间演化算符为

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

$t>0$ 时的态矢量为

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

(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

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

观测到粒子在左边的概率为

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

(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

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

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

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

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle R|\alpha,t_0l;t\rangle=\Delta\langle L|\alpha,t_0;t\rangle, \tag{22}$$

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

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

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

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

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

在海森堡绘景中, 位置算符和动量算符的运动方程分别为

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

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

联立这两个耦合的运动方程解得 $t\geq 0$ 时的位置算符为

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

$t\geq 0$ 时的位置期待值为

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

□

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

(a) 利用

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

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

$$\langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{m}\rangle=\langle\boldsymbol{x}\cdot\nabla V\rangle,\quad\text{三维时},\quad\text{或}\quad\langle\frac{p^2}{m}\rangle=\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\rangle\quad\text{一维时},$$

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

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

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

从而

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

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

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

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

(b) 一维时, 对于能量本征态 $|n\rangle$,

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

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

$$\Longrightarrow \langle\frac{p^2}{m}\rangle = \langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\rangle. \tag{43}$$

三维时, 对于能量本征态 $|n_x,n_y,n_z\rangle$,

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

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

$$\Longrightarrow \langle\frac{\boldsymbol{p}^2}{m}\rangle = \langle\boldsymbol{x}\cdot\nabla V\rangle. \tag{46}$$

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

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

在 $x>0$ 处, 薛定谔方程为

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

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

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

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 $=0$:

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

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

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

(b) 该基态的期待值

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

(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

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

在 $0<x<L$ 处, 粒子的薛定谔方程为

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

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

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

对应的能量本征态为

$$E_n=\frac{\hbar^2n^2\pi^2}{2mL^2},\quad n=1,2,3,\cdots \tag{56}$$

故能量的各本征态的波函数为

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

对应的能量本征态为

$$E_n=\frac{\hbar^2n^2\pi^2}{2mL^2},\quad n=1,2,3,\cdots \tag{58}$$

$t=0$ 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

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

在标号为 n 的能量本征态上找到该粒子的概率为

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

(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

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

$t>0$ 时的波函数为

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

□