课后作业

作业一

1. 假设一维空间中运动的粒子可以用如下波函数描述，

$$\psi(x)=\begin{cases}0, & x<0;\\ Ae^{-x}(1-e^{-x}), & x>0.\end{cases}$$

(1)求归一化常数A。
(2) 计算该波函数在动量空间中的形式；
(3)计算位置平均值$\langle\hat{x}\rangle$和动量平均值$\langle\hat{p}\rangle$，
(4)计算粒子最可能出现的位置。

参考答案:

$$\langle\psi(x)|\psi(x)\rangle=1=A^2\int_0^{\infty}e^{-2x}\left(1+e^{-2x}-2e^{-x}\right)dx=\frac{1}{12}A^2\Longrightarrow A=2\sqrt{3}.$$

$$\phi(k)=\frac{A}{\sqrt{2\pi}}\int_0^{\infty}e^{-x}(1-e^{-x})e^{-ikx}dx=\sqrt{\frac{6}{\pi}}\frac{1}{(2-k^2)+3ik}.$$

$$\langle x\rangle=A^2\int_0^{\infty}e^{-2x}(1-e^{-x})^2xdx=\frac{13}{12}.$$

$$\langle p\rangle=A^2\int_0^{\infty}e^{-x}(1-e^{-x})\hat{p}\left[e^{-x}(1-e^{-x})\right]dx=A^2\int_0^{\infty}e^{-x}(1-e^{-x})\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\left[e^{-x}(1-e^{-x})\right]dx=0$$

$$\langle p\rangle=\hbar\left\langle\phi(k)|k|\phi(k)\right\rangle=\hbar\frac{6}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{(2-k^2)-3ik}\frac{1}{(2-k^2)+3ik}kdk=0.$$

$$\begin{aligned}\frac{d\left|\psi(x)\right|^2}{dx}&=-2e^{-2x}\left(e^{-x}-1\right)\left(2e^{-x}-1\right)=0\Longrightarrow x=0\text{ or }x=\ln 2\\ \frac{d^2\left|\psi(x)\right|^2}{dx^2}&=2e^{-2x}\left(8e^{-2x}-9e^{-x}+2\right)<0\Longrightarrow x_m=\ln 2.\end{aligned}$$

Note:

$$\int_{-\infty}^{\infty}dx\exp\left[-\left(\alpha^2x^2+i\beta x+i\gamma x^2\right)\right]=\left(\frac{\pi}{\alpha^2+i\gamma}\right)^{1/2}\exp\left[\frac{-\beta^2\left(\alpha^2-i\gamma\right)}{4\left(\alpha^4+\gamma^2\right)}\right]$$

2. 证明对于描述做一维运动的粒子的波函数$\psi(x)$，有

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx j(x) = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m},$$

其中，$j(x) = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^\star - \psi^\star\nabla\psi)$是几率流密度，$\langle \hat{p} \rangle$是动量的期待值。

参考答案:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx j(x) = \frac{\hbar}{2im}\int_{-\infty}^{+\infty} dx[\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) - \psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)].$$

利用分部积分，有

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t) &= \psi(x,t)\psi^*(x,t)|_{-\infty}^{\infty} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} dx\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) \\ &= -\int_{-\infty}^{+\infty} dx\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t).\end{aligned}$$

因此，

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx j(x) = \frac{1}{m}\int_{-\infty}^{+\infty} dx\psi^*(x,t)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi(x,t) = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}.$$

3. 设一维自由运动粒子（能量的本征态为平面波）的初态（$t=0$）为$\psi(x,0)=\delta(x)$，求$\psi(x,t)$。

【提示：$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \cos(\alpha x^2) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sin(\alpha x^2) = \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}$】

参考答案: 自由粒子的能量本征态为

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ikx},$$

其本征函数随时间演化为

$$\phi_k(x,t) = \phi_k(x)e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}.$$

$$\psi_(k,0) = \int dx\phi_k^\star(x)\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= \int dk\psi(k,0)\phi_k(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int dk e^{ikx - i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \\ &= \frac{1}{2\pi}e^{i\frac{mx^2}{2\hbar t}}\int dk e^{-i\frac{\hbar t}{2m}\left(k-\frac{mx}{\hbar t}\right)^2} = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar t}}e^{i\left(\frac{mx^2}{2\hbar t}-\frac{\pi}{4}\right)}.\end{aligned}$$

Note:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-\left(\alpha^2 x^2 + i\beta x + i\gamma x^2\right)\right] = \left(\frac{\pi}{\alpha^2 + i\gamma}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{-\beta^2\left(\alpha^2 - i\gamma\right)}{4\left(\alpha^4 + \gamma^2\right)}\right]$$

4. 设粒子处于二维无限深势井中，

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le a,\ 0 \le y \le b; \\ \infty, & \text{其它情况}. \end{cases}$$

求粒子的能量本征值和本征函数，并讨论简并性。

参考答案：由于势阱无限深，在势阱外找到粒子的概率应该为零，因此势阱外的波函数为

$$\psi(x,y) = 0.$$

在势井内部，定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(x,y) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x,y) = E\psi(x,y).$$

这里，μ为粒子质量。做变量分离

$$\psi(x,y) = f(x)g(y),$$

我们有

$$\begin{cases} \frac{1}{f(x)}\frac{d^2}{dx^2}f(x) = -c, \\ \frac{1}{g(y)}\frac{d^2}{dy^2}g(y) = -\frac{2\mu E}{\hbar^2} + c, \end{cases}$$

其中，$c > 0$。

求解上面两个方程，我们有

$$\begin{cases} f(x) = \alpha_1 e^{ik_x x} + \alpha_2 e^{-ik_x x}, \\ g(y) = \beta_1 e^{ik_y y} + \beta_2 e^{-ik_y y}, \end{cases}$$

其中，$k_x^2 + k_y^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$。

再利用边界条件

$$\begin{cases} f(0) = f(a) = 0, \\ g(0) = g(b) = 0, \end{cases}$$

(可以验证，若$c < 0$，则无法满足以上边界条件。) 有

$$\begin{cases} k_x = \frac{n\pi}{a}, & n = 1, 2, 3, \cdots, \\ k_y = \frac{m\pi}{b}, & m = 1, 2, 3, \cdots, \end{cases}$$

和

$$\begin{cases} f(x) = A\sin(k_x x), \\ g(y) = B\sin(k_y y). \end{cases}$$

进行归一化后，有

$$\psi_{n,m}(x,y) = \frac{2}{\sqrt{ab}}\sin(\frac{n\pi x}{a})\sin(\frac{m\pi x}{b}).$$

而本征能量为

$$E_{n,m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu}(\frac{n^2}{a^2}+\frac{m^2}{b^2}).$$

当$a=b$时，则本征能量为

$$E_{n,m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}(n^2+m^2).$$

基态能量为$\frac{2\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}(n=1,m=1)$，所以是非简并的；第一激发态的能量为$\frac{5\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2}(n=1,m=2$或者$n=2,m=1)$，所以是二重简并的。

5. 粒子在如下一维无限深势井中运动，

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0\le x\le a; \\ \infty, & x<0,\ x>a. \end{cases}$$

粒子的初始波函数为能量最低的两个定态的叠加

$$\psi(x,t=0) = A[\psi_1(x)+e^{i\phi}\psi_2(x)],$$

其中，ϕ为实常数。

(1)将$\psi(x,0)$归一化；

(2)计算$\psi(x,t)$，$|\psi(x,t)|^2$；

(3)计算$\hat{x}$的期待值$\langle\hat{x}\rangle$随时间的变化。

参考答案： 设粒子的质量为m，则粒子的本征函数和本征能量分别为

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi x}{a}), & 0\le x\le a; \\ 0, & \text{otherwise}. \end{cases}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2 n^2}{2ma^2}.$$

其中，$n=1,2,3,\cdots$。

(1) 因为ψ_1和ψ_2正交，所以

$$\int dx\psi^*(x,0)\psi(x,0) = 2A^2.$$

于是，

$$\psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x)+e^{i\phi}\psi_2(x)].$$

(2)

$$\psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}+e^{i\phi}\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}].$$

$$\begin{aligned}|\psi(x,t)|^2&=\psi^*(x,t)\psi(x,t)\\&=\frac{1}{2}[\psi_1^2(x)+\psi_2^2(x)+2\psi_1(x)\psi_2(x)\cos(\phi+\frac{E_1-E_2}{\hbar}t)].\end{aligned}$$

(3)

$$\langle\hat{x}\rangle=\int dx|\psi(x,t)|^2x$$

利用，

$$\begin{aligned}\int dx\psi_n^2(x)x&=\frac{2}{a}\int_0^a dx\sin^2(\frac{n\pi x}{a})x=\frac{1}{a}\int_0^a x(1-\cos\frac{2n\pi x}{a})dx\\&=\frac{1}{2}a-\frac{1}{a}\int_0^a x\cos\frac{2n\pi x}{a}dx=\frac{1}{2}a\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int dx\psi_n(x)\psi_m(x)x&=\frac{2}{a}\int_0^a dx\psi_n(x)\psi_m(x)x\\&=\frac{1}{a}\int_0^a x[\cos(m-n)\frac{\pi x}{a}-\cos(m+n)\frac{\pi x}{a}]dx\\&=\begin{cases}\frac{8mn}{(m^2-n^2)^2}\frac{a}{\pi^2}, & m,n\text{为一个奇数和一个偶数;}\\0, & m,n\text{同为奇数或偶数.}\end{cases}\end{aligned}$$

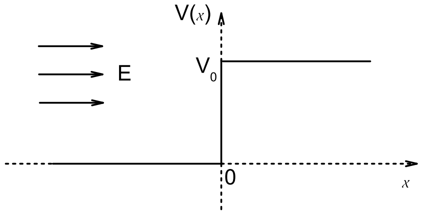
我们有

$$\begin{aligned}\langle\hat{x}\rangle&=\frac{1}{2}[\frac{1}{2}a+\frac{1}{2}a+\frac{32a}{9\pi^2}\cos(\phi+\frac{E_1-E_2}{\hbar}t)]\\&=\frac{1}{2}a+\frac{16a}{9\pi^2}\cos(\phi-\frac{3\hbar\pi^2}{2ma^2}t)\end{aligned}$$

6. 考虑阶跃势

$$V(x)=\begin{cases}V_0, & x\geq 0;\\0, & x<0.\end{cases}$$

能量$E>V_0$的粒子流从$x=-\infty$向右运动，求反射和透射系数。



参考答案：考虑到$E > V_0$，我们定义以下两个量

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \qquad k' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}.$$

于是，我们可以将波函数写为

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0; \\ Ce^{ik'x}, & x \geq 0. \end{cases}$$

我们利用波函数在$x = 0$处的连接条件，有

$$\begin{cases} A + B = C, \\ k(A - B) = k'C. \end{cases}$$

求解这个方程组，有

$$B = \frac{k - k'}{k + k'}A, \qquad C = \frac{2k}{k + k'}A.$$

入射波、反射波和透射波分别为

$$\psi_i(x) = Ae^{ikx}, \qquad \psi_r(x) = Be^{-ikx} \qquad \psi_t(x) = Ce^{ik'x}.$$

于是，反射系数和投射系数分别为

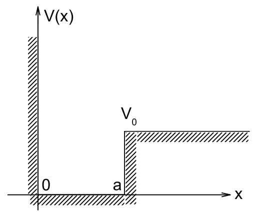
$$\begin{aligned} R &= \left|\frac{j_r}{j_i}\right| = \left|\frac{\psi_r^*(x)\hat{p}\psi_r(x) - \psi_r(x)\hat{p}\psi_r^*(x)}{\psi_i^*(x)\hat{p}\psi_i(x) - \psi_i(x)\hat{p}\psi_i^*(x)}\right| \\ &= \frac{(k - k')^2}{(k + k')^2} = \frac{2E - V_0 - 2\sqrt{E(E - V_0)}}{2E - V_0 + 2\sqrt{E(E - V_0)}}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T &= \left|\frac{j_t}{j_i}\right| = \left|\frac{\psi_t^*(x)\hat{p}\psi_t(x) - \psi_t(x)\hat{p}\psi_t^*(x)}{\psi_i^*(x)\hat{p}\psi_i(x) - \psi_i(x)\hat{p}\psi_i^*(x)}\right| \\ &= \frac{4kk'}{(k + k')^2} = \frac{4\sqrt{E(E - V_0)}}{2E - V_0 + 2\sqrt{E(E - V_0)}}. \end{aligned}$$

7. 质量为m的粒子在如下一维势场中运动，

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ 0, & 0 \leq x \leq a; \\ V_0, & x > a. \end{cases}$$

(1)求决定束缚态能级的方程式；
(2)求存在且只存在一个束缚态的条件。



参考答案：(1) 对于束缚态，我们有$E < V_0$。令

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \qquad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

于是，波函数可以写为

$$\psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & 0 \le x \le a; \\ Ce^{-\kappa x}, & x > a. \end{cases}$$

根据波函数连接条件$\psi(0) = 0$，有$A + B = 0$。再根据波函数在$x = a$处得连接条件，有

$$\begin{cases} A \sin ka = Ce^{-\kappa a}, \\ Ak \cos ka = -C\kappa e^{-\kappa a}, \end{cases}$$

解得$\kappa = -k \cot ka$。因此，决定束缚态能级的方程式为

$$\begin{cases} \kappa = -k \cot ka, \\ k^2 + \kappa^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}. \end{cases}$$

(2) 用作图法讨论存在束缚态的条件，改写能级方程为

$$\begin{cases} \kappa a = -ka \cot(ka), \\ (ka)^2 + (\kappa a)^2 = \frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} = \rho^2, \end{cases}$$

其中，$\rho = \frac{\sqrt{2mV_0}a}{\hbar}$。如图所示，可知存在且只存在一个束缚态的条件是$\frac{\pi}{2} \le \frac{\sqrt{2mV_0}a}{\hbar} < \frac{3\pi}{2}$。

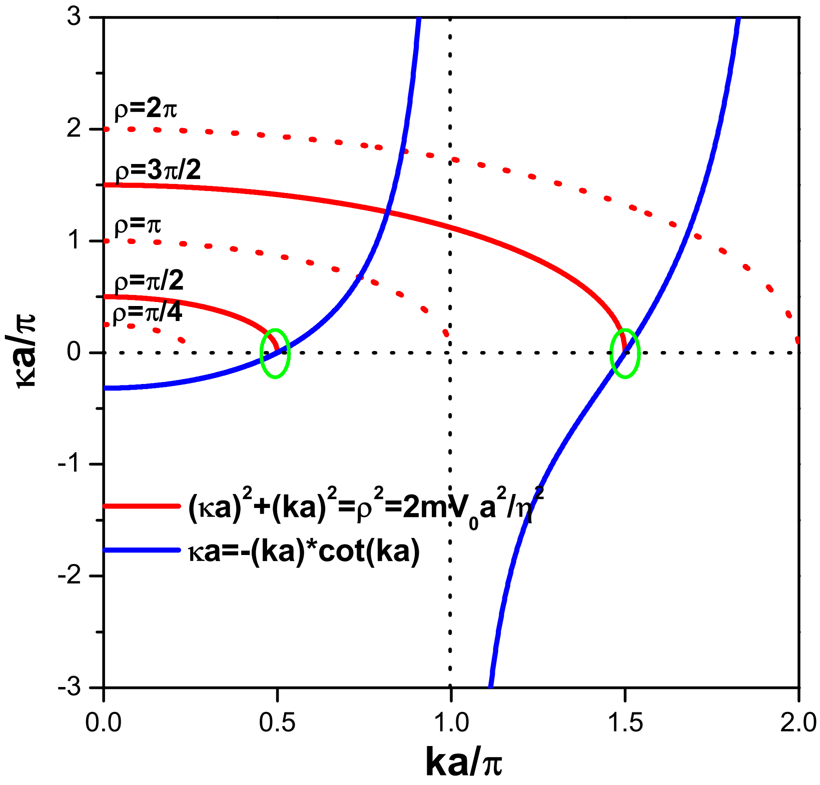


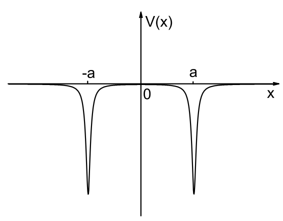
Figure 1: 束缚态能级

作业二

1. 考虑粒子在如下一维势中运动：

$$V(x) = -V_0[\delta(x+a) + \delta(x-a)].$$

分别计算偶宇称和奇宇称状态下的束缚态能级公式以及存在束缚态的条件，并判断基态的宇称。



参考答案：$E < 0$为束缚态，由于$V(-x) = V(x)$，对于束缚态有确定的宇称。令$k = \sqrt{-2mE}/\hbar$，$b = \hbar^2/mV_0$是δ势阱的特征长度，可以认为是 δ 势阱对波函数影响的有效范围。

a) 偶宇称解：$\psi(-x)=\psi(x)$，根据势场情况波函数可以取

$$\psi(x)=\left\{\begin{array}{ll} Ae^{kx} & x<-a \quad \mathrm{I} \\ B(e^{kx}+e^{-kx}) & |x|<a \quad \mathrm{II} \\ Ae^{-kx} & x>a \quad \mathrm{III} \end{array}\right. .$$

边界条件：连续条件(这时只要取某一个边界即可，原因在于对称性)

$$\psi(a^-)=\psi(a^+) \implies Ae^{-ka}=B(e^{ka}+e^{-ka})$$

跃变条件

$$\psi'(a^+)-\psi'(a^-)=-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(a^+)=-\frac{2}{b}\psi(a^+)$$

得到

$$-kAe^{-ka}-kB(e^{ka}-e^{-ka})=-\frac{2}{b}Ae^{-ka}$$

因此有

$$k(e^{ka}-e^{-ka})=(\frac{2}{b}-k)(e^{ka}+e^{-ka})$$

即

$$\frac{2}{bk}-1=\frac{e^{ka}-e^{-ka}}{e^{ka}+e^{-ka}}=\tanh(ka)$$

或者能级方程写成

$$bk=1+e^{-2ka}$$

可见有且仅有一个解，即偶宇称解总是有且只有一个束缚能级。超越方程可以用图解法来得到，参见图 2(a)。有了能级，再由归一化条件可以得到系数A和B。

进一步讨论结果：从能级方程可以看出，$1<bk<2$，即$1/b<k<2/b$，所以E的范围是$-2mV_0^2/\hbar^2<E<-mV_0^2/2\hbar^2$。当$a\gg b$，$k=1/b$，$E=-mV_0^2/2\hbar^2$，这与课上讲的单$\delta$势阱的结果一样，这表明如果两个$\delta$势阱的距离足够远，相互独立。当$a\ll b$，$k=2/b$，$E=-2mV_0^2/\hbar^2$，这当于$V_0\to 2V_0$，两$\delta$势阱足够近时，相当于它们的叠加。

b) 奇宇称解：$\psi(-x)=-\psi(x)$，波函数可以取

$$\psi(x)=\left\{\begin{array}{ll} -Ae^{kx} & x<-a \quad \mathrm{I} \\ B(e^{kx}-e^{-kx}) & |x|<a \quad \mathrm{II} \\ Ae^{-kx} & x>a \quad \mathrm{III} \end{array}\right. .$$

$$\psi(a^-)=\psi(a^+) \implies Ae^{-ka}=B(e^{ka}-e^{-ka})$$

$$\psi'(a^+)-\psi'(a^-)=-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\psi(a^+)=-\frac{2}{b}\psi(a^+)$$

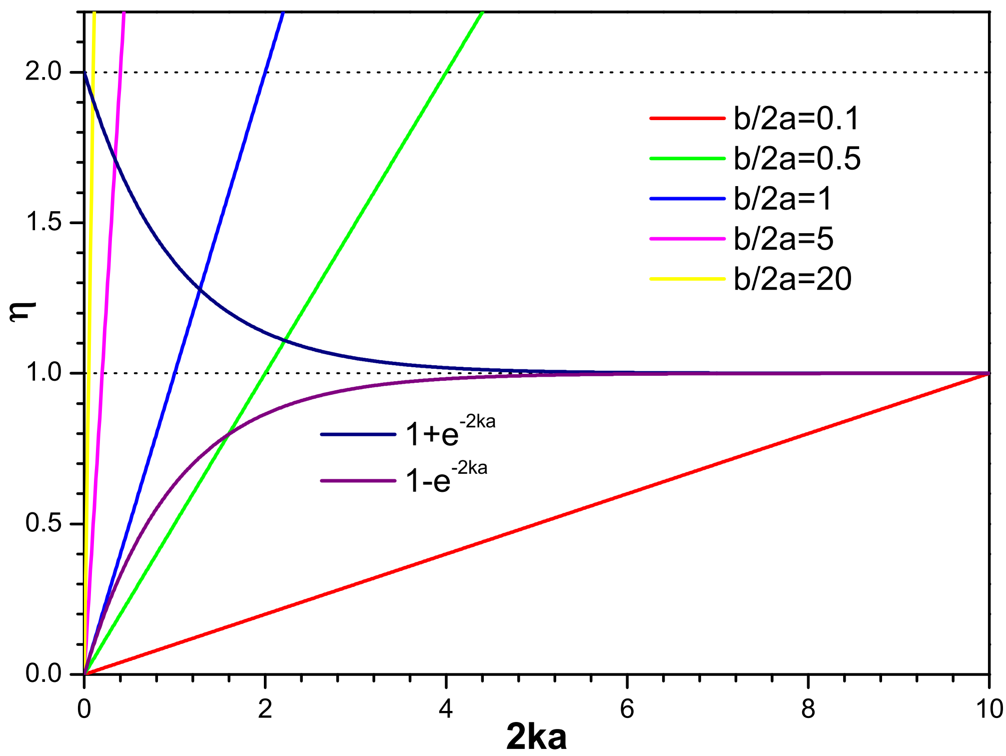


Figure 2: 双势阱的图解法

$$-kAe^{-ka} - kB(e^{ka} + e^{-ka}) = -\frac{2}{b}Ae^{-ka}$$

得到能级方程为

$$bk = 1 - e^{-2ka}$$

因为

$$e^{-2ka} = 1 - 2ka + \frac{(-2ka)^2}{2!} + \frac{(-2ka)^3}{3!} + \ldots$$

可见$bk \leq 2ka$。即有解的条件是$b \leq 2a$，即$2mV_0a/\hbar^2 \geq 1$。此时$0 < k < 1/b$，即$-mV_0^2/2\hbar^2 < E < 0$。当$b \leq 2a$时，奇宇称解有且只有一个束缚态解。当$a \gg b$，$k = 1/b$，$E = -mV_0^2/2\hbar^2$，同样表明如果两个δ势阱的距离足够远，相互独立；当$2a > b$时，无解；当$2a \to b$时，$E \to 0^-$。

可见，偶宇称解的能量总是低于奇宇称解的能量，也就是说，基态波函数是偶宇称的。

2. 轨道角动量算符为$\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{L}_x\boldsymbol{e}_x + \hat{L}_y\boldsymbol{e}_y + \hat{L}_z\boldsymbol{e}_z$，坐标算符为$\hat{\boldsymbol{r}} = x\boldsymbol{e}_x + y\boldsymbol{e}_y + z\boldsymbol{e}_z$。

(1)计算：$[\hat{x}, \hat{L}_x]$，$[\hat{x}, \hat{L}_y]$，$[\hat{x}, \hat{L}_z]$；

(2)证明：$[\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{L}}^2] = -2i\hbar\hat{\boldsymbol{r}} \times \hat{\boldsymbol{L}} - 2\hbar^2\hat{\boldsymbol{r}}$。

参考答案：(1)

$$\left[\hat{x},\hat{L}_x\right]=[\hat{x},\hat{y}\hat{p}_z-\hat{z}\hat{p}_y]=0$$

$$\left[\hat{x},\hat{L}_y\right]=[\hat{x},\hat{z}\hat{p}_x-\hat{x}\hat{p}_z]=[\hat{x},\hat{z}\hat{p}_x]=\hat{z}\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=i\hbar\hat{z}$$

$$\left[\hat{x},\hat{L}_z\right]=[\hat{x},\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x]=-\left[\hat{x},\hat{y}\hat{p}_x\right]=-\hat{y}\left[\hat{x},\hat{p}_x\right]=-i\hbar\hat{y}.$$

(2)

$$\begin{aligned}
\left[x,\mathbf{L}^2\right] &= \left[x,L_x^2+L_y^2+L_z^2\right]=\left[x,L_y^2\right]+\left[x,L_z^2\right]\\
&= L_y\left[x,L_y\right]+\left[x,L_y\right]L_y+L_z\left[x,L_z\right]+\left[x,L_z\right]L_z\\
&= i\hbar\left(L_yz+zL_y-L_zy-yL_z\right)=i\hbar\left(2zL_y-2yL_z\right)+i\hbar\left(-zL_y+L_yz+yL_z-L_zy\right)\\
&= -2i\hbar\left(yL_z-zL_y\right)+i\hbar\left(-\left[z,L_y\right]+\left[y,L_z\right]\right)\\
&= -2i\hbar\left(yL_z-zL_y\right)-2\hbar^2x
\end{aligned}$$

$$\left[\mathbf{r},\mathbf{L}^2\right]=-2i\hbar\mathbf{r}\times\mathbf{L}-2\hbar^2\mathbf{r}$$

3. 已知三个彼此不相等的算符$\hat{A}$、$\hat{B}$和$\hat{C}$都是厄米算符，且所有本征值不简并。它们满足$\hat{A}^2=\hat{B}^2=\hat{C}^2=1$，$\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$，$[\hat{B},\hat{C}]=0$。

(1)求在$\hat{A}$表象中，算符$\hat{A}$和$\hat{B}$的矩阵表示；

(2)求从$\hat{A}$表象到$\hat{B}$表象的变换矩阵。

(3)如果在$\hat{B}$表象中算符$\hat{C}$的表示的矩阵元都是实数，求在$\hat{A}$表象中算符$\hat{C}$的表示。

参考答案：(1) 由于$\hat{A}$和$\hat{B}$的本征值都是±1。在$\hat{A}$表象中，$\hat{A}$的矩阵表示为

$$A=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}.$$

对应的本征值和本征态为

$$\lambda=1:\ |+\rangle_A=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\text{和}\lambda=-1:\ |-\rangle_A=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

设$\hat{B}$的矩阵表示为

$$\hat{B}_A=\begin{pmatrix}b_{11}&b_{12}\\b_{21}&b_{22}\end{pmatrix}.$$

由$\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ -b_{21} & -b_{22} \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} b_{11} & -b_{12} \\ b_{21} & -b_{22} \end{pmatrix}=0$$

得到$b_{11}=b_{22}=0$。

由于

$$\hat{B}^2=\begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} b_{12}b_{21} & 0 \\ 0 & b_{12}b_{21} \end{pmatrix}=1$$

得到$b_{21}=b_{12}^{-1}$。又因为$\hat{B}$是厄米算符，$b_{21}=b_{12}^{*}$。可见，$b_{12}=b_{12}^{*-1}$，即$|b_{12}|^2=1$。令$b_{12}=e^{i\delta}$，则

$$\hat{B}=\begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix}.$$

(2) 根据本征方程$\hat{B}\left|\varphi_B\right\rangle=\lambda\left|\varphi_B\right\rangle$可得到

$$\begin{pmatrix} 0 & e^{i\delta} \\ e^{-i\delta} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix},$$

因此本征值和本征态分别为

$$\lambda=1\text{: } \left|+\right\rangle_B=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\delta/2} \\ e^{-i\delta/2} \end{pmatrix}, \text{和}\lambda=-1\text{: } \left|-\right\rangle_B=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\delta/2} \\ -e^{-i\delta/2} \end{pmatrix}.$$

所以从$\hat{A}$表象到$\hat{B}$表象的变换矩阵为$(\left|B\right\rangle=\sum\left|B\right\rangle\left\langle A\right|\left.A\right\rangle=\sum\left\langle A\right|\left.B\right\rangle\left|A\right\rangle)$

$$\hat{S}=\left|B\right\rangle\left\langle A\right|=\begin{pmatrix} \left|+\right\rangle_B \\ \left|-\right\rangle_B \end{pmatrix}\left({}_A\left\langle+\right| \;\; {}_A\left\langle-\right|\right)=\begin{pmatrix} {}_A\left\langle+|+\right\rangle_B & {}_A\left\langle-|+\right\rangle_B \\ {}_A\left\langle+|-\right\rangle_B & {}_A\left\langle-|-\right\rangle_B \end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} e^{i\delta/2} & e^{-i\delta/2} \\ e^{i\delta/2} & -e^{-i\delta/2} \end{pmatrix}.$$

(3) 假定$\hat{C}$在$\hat{B}$表象中的表示为

$$\hat{C}_B=\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix},$$

由$\left[\hat{B},\hat{C}\right]=0$得到

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}-\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ c_{21} & c_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} \\ -c_{21} & -c_{22} \end{pmatrix}-\begin{pmatrix} c_{11} & -c_{12} \\ c_{21} & -c_{22} \end{pmatrix}=0,$$

即$c_{12}=c_{21}=0$。

又$\hat{C}^2=1$，所以$\hat{C}$的本征值为±1，且$\hat{C}\neq\hat{B}$，则

$$\hat{C}_B=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}.$$

在$\hat{A}$表象中，$\hat{C}$的表示为($\hat{C}_A=\left\langle A|\hat{C}|A\right\rangle=\sum\langle A|B\rangle\left\langle B|\hat{C}|B\right\rangle\langle B|A\rangle=\hat{S}^\dagger\hat{C}_B\hat{S}$)

$$\hat{C}_A=\hat{S}\hat{C}_B\hat{S}^\dagger=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}e^{i\delta/2} & e^{-i\delta/2}\\ e^{i\delta/2} & -e^{-i\delta/2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{-i\delta/2} & e^{-i\delta/2}\\ e^{i\delta/2} & -e^{i\delta/2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & -1\\ -1 & 0\end{pmatrix}.$$

4. 已知算符$\hat{A}$在坐标表象下的表示为$\langle x|\hat{A}|x'\rangle=x^2\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$，求$\hat{A}$的厄米共轭算符$\hat{A}^\dagger$ 分别在坐标空间和动量空间中的表示。

参考答案：根据在坐标表象下$\langle x|\hat{p}|x'\rangle=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta\left(x-x'\right)$，有$\hat{A}=\frac{i}{\hbar}\hat{x}^2\hat{p}$。因此在坐标表象下

$$\begin{aligned}\left\langle x|\hat{A}^\dagger|x'\right\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\left\langle x|\hat{p}\hat{x}^2|x'\right\rangle=-\left\langle x|\frac{\partial}{\partial x}\hat{x}^2|x'\right\rangle=-\frac{\partial}{\partial x}\left\langle x|\hat{x}^2|x'\right\rangle\\ &= -\frac{\partial}{\partial x}\left(x^2\delta\left(x-x'\right)\right)=-x^2\frac{\partial}{\partial x}\delta\left(x-x'\right)-2x\delta\left(x-x'\right).\end{aligned}$$

在动量表象下

$$\left\langle p|\hat{A}^\dagger|p'\right\rangle=-\frac{i}{\hbar}\left\langle p|\hat{p}\hat{x}^2|p'\right\rangle=-\frac{i}{\hbar}p\left\langle p|\hat{x}^2|p'\right\rangle=p\frac{\partial}{\partial p}\left\langle p|\hat{x}|p'\right\rangle=i\hbar p\frac{\partial^2}{\partial p^2}\delta\left(p-p'\right).$$

5. 设$f(z)$是解析函数。

(1)计算$[\hat{p},f(\hat{x})]$在坐标表象中的表达式；

(2)计算$[\hat{x},f(\hat{p})]$在动量表象中的表达式。

参考答案：因为$f(x)$是解析函数，可以展开成级数形式

$$f(x)=\sum_n c_n x^n.$$

(1) 由于

$$\begin{aligned}\left[\hat{p},\hat{x}^n\right] &= \left[\hat{p},\hat{x}\right]\hat{x}^{n-1}+\hat{x}\left[\hat{p},\hat{x}^{n-1}\right]=-i\hbar\hat{x}^{n-1}+\hat{x}\left(\left[\hat{p},\hat{x}\right]\hat{x}^{n-2}+\hat{x}\left[\hat{p},\hat{x}^{n-2}\right]\right)\\ &= -i\hbar\hat{x}^{n-1}-i\hbar\hat{x}^{n-1}+\hat{x}\left[\hat{p},\hat{x}^{n-2}\right]=\cdots\\ &= -i\hbar n\hat{x}^{n-1}.\end{aligned}$$

故

$$[\hat{p}, f(\hat{x})] = -i\hbar \sum_n c_n n \hat{x}^{n-1}.$$

在坐标表象下为

$$[\hat{p}, f(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x} \delta(x - x').$$

(2)

$$\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{p}^n] &= [\hat{x}, \hat{p}]\, \hat{p}^{n-1} + \hat{p}\left[\hat{x}, \hat{p}^{n-1}\right] = -i\hbar \hat{p}^{n-1} + \hat{p}\left([\hat{x}, \hat{p}]\, \hat{p}^{n-2} + \hat{p}\left[\hat{x}, \hat{p}^{n-2}\right]\right) \\
&= -i\hbar \hat{p}^{n-1} - -i\hbar \hat{p}^{n-1} + \hat{p}\left[\hat{p}, \hat{x}^{n-2}\right] = \cdots \\
&= i\hbar n \hat{p}^{n-1}.
\end{aligned}$$

因此

$$[\hat{x}, f(\hat{p})] = i\hbar \sum_n c_n n \hat{p}^{n-1}.$$

在动量表象下有

$$[\hat{x}, f(\hat{p})] = i\hbar \frac{\partial f(p)}{\partial p} \delta(p - p').$$

6. 设系统的哈密顿量为$\hat{H}$，它在$\hat{H}_0$表象下的表示为

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & E_1 \\ E_1 & E_0 \end{pmatrix}.$$

(1)求$\hat{H}$的本征值和本征态；

(2)如果$t=0$时刻，系统处在$|\psi_1\rangle$态，在$\hat{H}_0$表象下的表示为$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$。求$t>0$时刻系统的状态。

(3) 求系统所处状态中$|\psi_1\rangle$态的几率随时间的演化。

参考答案：(1)解本征值方程$H\psi = E\psi$，其中$\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$，即

$$\begin{pmatrix} E_0 & E_1 \\ E_1 & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

得到

$$E_+ = E_0 + E_1,\ |\phi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix};\ E_- = E_0 - E_1,\ |\phi_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

(2) 任意时刻的波函数可以写成

$$|\psi(t)\rangle = c_+ e^{-iE_+t/\hbar}|\phi_+\rangle + c_- e^{-iE_-t/\hbar}|\phi_-\rangle,$$

$t=0$时,

$$|\psi(0)\rangle = c_+|\phi_+\rangle + c_-|\phi_-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

其中系数$c_\pm = \langle\phi_\pm|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$。所以

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-iE_+t/\hbar}|\phi_+\rangle + e^{-iE_-t/\hbar}|\phi_-\rangle\right) = \frac{1}{2}e^{-iE_0t/\hbar}\begin{pmatrix} e^{-iE_1t/\hbar} + e^{iE_1t/\hbar} \\ e^{-iE_1t/\hbar} - e^{iE_1t/\hbar} \end{pmatrix} = e^{-iE_0t/\hbar}\begin{pmatrix} \cos\frac{E_1t}{\hbar} \\ -i\sin\frac{E_1t}{\hbar} \end{pmatrix}$$

(3) $|\psi_1\rangle$态的几率随时间的演化为

$$P_1(t) = |\langle\psi_1|\psi(t)\rangle|^2 = \cos^2\frac{E_1t}{\hbar}.$$

7. 考虑一个量子转子，即一个质量为m的粒子被约束在半径为r的圆周上运动。粒子在圆周上的运动是自由的，势能为零。这个系统的正则坐标为ϕ，相应的正则动量为$p_\phi = I\frac{\partial\phi}{\partial t}$，其中$I = mr^2$为转动惯量。

(1)在粒子运动路径上的$\phi=0$和$\phi=\phi_0$点设置两个路障（$V(0)\to\infty$，$V(\phi_0)\to\infty$），使粒子只能在$0\le\phi\le\phi_0$范围内运动，求粒子的本征能量和本征函数；

(2)假设粒子处于(1)中的基态，如果在时刻$t=t_0$突然撤去两个路障，求对粒子测量得到基态的概率是多少；

(3)仍然假定粒子处于(1)中的基态，如果在时刻$t=t_0$只撤去$\phi=\phi_0$处的路障，求对粒子测量得到基态的概率是多少。

参考答案：(1) 显然，在$\phi_0<\phi<2\pi$(0和2π是同一个点)范围内找到粒子的概率为零，故

$$\psi(\phi) = 0.$$

在$0\le\phi\le\phi_0$之间的定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\psi(\phi) = E\psi(\phi).$$

令

$$k = \frac{\sqrt{2IE}}{\hbar},$$

则，方程的解可以写为

$$\psi(\phi) = Ae^{ik\phi} + Be^{-ik\phi}.$$

利用波函数在$\phi = 0$和$\phi = \phi_0$的连接条件，有

$$\begin{cases} A + B = 0, \\ Ae^{ik\phi_0} + Be^{-ik\phi_0} = 0. \end{cases}$$

存在费零解的条件为

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ e^{ik\phi_0} & e^{-ik\phi_0} \end{vmatrix} = 0$$

解得

$$k = \frac{n\pi}{\phi_0}, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots.$$

于是，本征能量和本征波函数（归一化后）为

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2I\phi_0^2},$$

$$\psi_\phi = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\phi_0}}\sin(\frac{n\pi}{\phi_0}\phi), & 0 \le \phi \le \phi_0; \\ 0, & \text{ohterwise}, \end{cases}$$

其中，$n = 1, 2, 3, \cdots$。

(2) 我们可以将撤去路障后的波函数写为

$$\psi'(\phi) = Ae^{ik\phi} + Be^{-ik\phi}$$

其中，

$$k = \frac{\sqrt{2IE}}{\hbar}.$$

利用条件

$$\begin{cases} \psi'(0) = \psi'(2\pi), \\ \frac{d}{d\phi}\psi'(0) = \frac{d}{d\phi}\psi'(2\pi), \end{cases}$$

我们有

$$k = m, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots.$$

因此，基态为$m = 0$，归一化基态波函数为

$$\psi_0'(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

于是，撤去路障后，粒子处于新基态的概率为

$$P_0 = \left|\int_0^{2\pi} d\phi \psi_0'^*(\phi)\psi(\phi)\right|^2 = \left|\int_0^{\phi_0} d\phi \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sqrt{\frac{2}{\phi_0}}\sin(\frac{\pi}{\phi_0}\phi)\right|^2 = \frac{4\phi_0}{\pi^3}. \tag{1}$$

(3) 我们同样可以将波函数写为

$$\psi'(\phi) = Ae^{ik\phi} + Be^{-ik\phi}$$

其中，

$$k = \frac{\sqrt{2IE}}{\hbar}.$$

利用条件

$$\psi'(0) = \psi'(2\pi) = 0,$$

有

$$A = -B.$$

因此，波函数为

$$\psi' = A\sin(\frac{m\phi}{2}), \qquad m = 1, 2, 3, \cdots.$$

归一化后为

$$\psi' = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin(\frac{m\phi}{2}), \qquad m = 1, 2, 3, \cdots.$$

于是，粒子处于新基态的概率为

$$\begin{aligned} P_0 &= \left|\int_0^{2\pi} d\phi \psi_0'^*(\phi)\psi(\phi)\right|^2 = \left|\int_0^{\phi_0} d\phi \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin\frac{\phi}{2}\sqrt{\frac{2}{\phi_0}}\sin(\frac{\pi}{\phi_0}\phi)\right|^2 \\ &= \frac{32\phi_0\pi}{(4\pi^2 - \phi_0^2)^2}\sin^2\frac{\phi_0}{2}. \end{aligned}$$

作业三

1. 考虑绕z轴转动角度φ的旋转变换，求算符$\hat{p}_+ = \hat{p}_x + i\hat{p}_y$和$\hat{p}_- = \hat{p}_x - i\hat{p}_y$在变换后的结果。

参考答案：公式

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + \left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \frac{1}{2!}\left[\hat{A}, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] + \cdots + \frac{1}{n!}\left[\hat{A}, \cdots, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\right] + ...$$

或者定义

$$\hat{C}_0 = \hat{B},\ \hat{C}_1 = \left[\hat{A}, \hat{C}_0\right],\ \cdots,\ \hat{C}_n = \left[\hat{A}, \hat{C}_{n-1}\right]$$

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \sum_n \frac{1}{n!}\hat{C}_n.$$

绕z方向的旋转角度φ的旋转变换可以写成$\hat{R}_z = e^{i\varphi\hat{L}_z/\hbar}$，

$$\hat{p}'_{\pm} = \hat{R}_z^{\dagger}\hat{p}_{\pm}\hat{R}_z = e^{-i\varphi\hat{L}_z/\hbar}\hat{p}_{\pm}e^{i\varphi\hat{L}_z/\hbar} = \sum_n \frac{1}{n!}\left(-\frac{i\varphi}{\hbar}\right)^n \hat{C}_n,$$

其中

$$\hat{C}_0 = \hat{p}_{\pm},\ \cdots,\ \hat{C}_n = \left[\hat{L}_z, \hat{C}_{n-1}\right].$$

$$\begin{aligned}\hat{C}_1 &= \left[\hat{L}_z, \hat{p}_{\pm}\right] = \left[\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \hat{p}_x \pm i\hat{p}_y\right] = \left[\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \hat{p}_x\right] \pm i\left[\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \hat{p}_y\right] \\ &= \left[\hat{x}, \hat{p}_x\right]\hat{p}_y \mp i\left[\hat{y}, \hat{p}_y\right]\hat{p}_x = \hbar\left(i\hat{p}_y \pm \hat{p}_x\right) = \pm\hbar\hat{p}_{\pm}\end{aligned}$$

利用递推关系可以得到

$$\hat{C}_n = (\pm\hbar)^n\,\hat{p}_{\pm}.$$

所以

$$\hat{p}'_{\pm} = \sum_n \frac{1}{n!}\left(-\frac{i\varphi}{\hbar}\right)(\pm\hbar)^n\,\hat{p}_{\pm} = \left(\sum_n \frac{1}{n!}(\mp i\varphi)^n\right)\hat{p}_{\pm} = e^{\mp i\varphi}\hat{p}_{\pm}.$$

2. 假设系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \alpha\boldsymbol{e}_z\cdot(\hat{\boldsymbol{L}}\times\hat{\boldsymbol{p}}),$$

其中，$\boldsymbol{e}_z$是z方向单位矢量，$\hat{\boldsymbol{L}}$和$\hat{\boldsymbol{p}}$分别是角动量和动量算符，α是常数。请讨论这个系统是否具有空间反演对称性。

参考答案：空间反演操作算符$\hat{\pi}$，利用

$$\hat{\pi}^{\dagger}\hat{\mathbf{p}}\hat{\pi} = -\hat{\mathbf{p}},\quad \hat{\pi}^{\dagger}\hat{\mathbf{L}}\hat{\pi} = \hat{\mathbf{L}}$$

可以知道

$$\hat{\pi}^{\dagger}\hat{H}\hat{\pi} = -\hat{H},$$

即$\hat{H}$不具有空间反演对称性。

3. 证明算符$\hat{A} = e^{ik\hat{x}}$（其中k是实数）在一维谐振子基态下的期待值满足如下关系，

$$\langle 0|\hat{A}|0\rangle = e^{-\frac{k^2}{2}\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle}.$$

参考答案:

$$\left\langle 0|\hat{A}|0\right\rangle = \langle 0|e^{ik\hat{x}}|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(ik)^n}{n!}\langle 0|\hat{x}^n|0\rangle .$$

对于n为奇数，由对称性可知$\langle 0|\hat{x}^n|0\rangle = 0$。由$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}\beta}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)$ ($\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$)得到(注：$\langle 0|\,\hat{a}^\dagger = (\hat{a}\,|0\rangle)^\dagger$)

$$\langle 0|\hat{x}^{2n}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\beta}\langle 0|\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)\hat{x}^{2n-1}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\beta}\langle 0|\hat{a}\hat{x}^{2n-1}|0\rangle .$$

又因为$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta\hat{x} + \frac{i}{\beta\hbar}\hat{p}\right)$，

$$[\hat{a}, \hat{x}^n] = \frac{i}{\sqrt{2}\beta\hbar}[\hat{p}, \hat{x}^n] = \frac{i}{\sqrt{2}\beta\hbar}\left(-i\hbar n\hat{x}^{n-1}\right) = \frac{n}{\sqrt{2}\beta}\hat{x}^{n-1}.$$

因此

$$\langle 0|\hat{x}^{2n}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\beta}\langle 0|\hat{a}\hat{x}^{2n-1}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\beta}\left\langle 0|\left(\frac{2n-1}{\sqrt{2}\beta}\hat{x}^{2n-2} + \hat{x}^{2n-2}\hat{a}\right)|0\right\rangle = \frac{2n-1}{2\beta^2}\langle 0|\hat{x}^{2n-2}|0\rangle .$$

重复做下去有

$$\begin{aligned}\langle 0|\hat{x}^{2n}|0\rangle &= \frac{2n-1}{2\beta^2}\langle 0|\hat{x}^{2n-2}|0\rangle = \frac{(2n-1)(2n-3)}{(2\beta^2)^2}\langle 0|\hat{x}^{2n-4}|0\rangle = \cdots \\ &= \frac{(2n-1)!!}{(2\beta^2)^n}\langle 0|\hat{x}^{2n-2n}|0\rangle = \frac{(2n-1)!!}{(2\beta^2)^n}.\end{aligned}$$

因此

$$\left\langle 0|\hat{A}|0\right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-k^2)^n}{(2n)!}\frac{(2n-1)!!}{(2\beta^2)^n} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{-k^2}{4\beta^2}\right)^n = e^{-\frac{k^2}{4\beta^2}} = e^{-\frac{k^2}{2}\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle}.$$

其中$\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle = \frac{1}{2\beta^2}$。

4. 求一维谐振子梯子算符$\hat{a}$的对应于本征值α的本征右矢$|\alpha\rangle$，即

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle,$$

其中，α是任意复数。用一维谐振子的本征态表示，并归一化。

参考答案: 设谐振子能量本征态为$|n\rangle$，由公式$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$知道，谐振子基态$|0\rangle$是$\hat{a}$本征值为$\alpha = 0$的本征态。$\hat{a}$本征值$\alpha \neq 0$的本征态可以表示为$|n\rangle$的线性叠加

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\,|n\rangle .$$

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\hat{a}\,|n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\sqrt{n}\,|n-1\rangle = \alpha\sum_{n=0}^{\infty} c_n\,|n\rangle ,$$

左乘$\langle m|$，

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_n\sqrt{n}\,\langle m|n-1\rangle = \alpha\sum_{n=0}^{\infty} c_n\,\langle m|n\rangle\,,$$

$$c_{m+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{m+1}}c_m.$$

由上述递推关系知道

$$c_1 = \alpha c_0 = \frac{\alpha}{\sqrt{1!}}c_0,\quad c_2 = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}c_1 = \frac{\alpha^2}{\sqrt{2!}}c_0,\quad \cdots,\quad c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}c_0,$$

即

$$|\alpha\rangle = c_0\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle\,.$$

由归一化条件得到

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}|c_n|^2 = |c_0|^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{|\alpha^n|^2}{n!} = |c_0|^2\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(|\alpha|^2\right)^n}{n!} = |c_0|^2\,e^{|\alpha|^2} = 1,$$

即

$$|c_0|^2 = e^{-|\alpha|^2}.$$

取c_0为正实数，

$$c_0 = e^{-|\alpha|^2/2},$$

因此

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle\,.$$

由于$\hat{a}$不是厄米算符，所以$\hat{a}$的本征值α可以取为任意复数。

又$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$，上式进一步可以表示为

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{n=0}^{\infty}\alpha^n(\hat{a}^\dagger)^n\,|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}e^{\alpha\hat{a}^\dagger}|0\rangle.$$

5. 已知在$(\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z)$表象下，粒子处于如下状态

$$\psi(\theta,\phi) = A[Y_{00}(\theta,\phi) + Y_{10}(\theta,\phi)],$$

其中，$Y_{lm}(\theta,\phi)$是球谐函数，A是常数，$\hat{\boldsymbol{L}}$是轨道角动量。求

(1) $\hat{\boldsymbol{L}}^2$和$\hat{L}_z$的期待值；

(2) $\hat{L}_x$的可能测量值和相应的几率。

参考答案：把波函数归一化

$$\langle\psi(\theta,\phi)|\psi(\theta,\phi)\rangle = 2|A|^2 = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

(1)

$$\left\langle \hat{L}^2 \right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle Y_{00}+Y_{10}|\hat{L}^2|Y_{00}+Y_{10}\right\rangle = \frac{1}{2}2\hbar^2\left\langle Y_{00}+Y_{10}|Y_{10}\right\rangle = \hbar^2.$$

$$\left\langle \hat{L}_z \right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle Y_{00}+Y_{10}|\hat{L}_z|Y_{00}+Y_{10}\right\rangle = \frac{1}{2}2\hbar^2\left\langle Y_{00}+Y_{10}|0\right\rangle = 0.$$

(2) 先计算$\hat{L}_x$的本征值和本征函数，

$$\hat{L}_x|Y_{lm}\rangle = \frac{1}{2}\left(\hat{L}^+ + \hat{L}^-\right)|Y_{lm}\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(\sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\,|Y_{lm+1}\rangle + \sqrt{l(l+1)-m(m-1)}\,|Y_{lm-1}\rangle\right).$$

由于$\hat{L}_x$的作用只改变m，所以可以分不同的l子空间来求本征值和本征函数。

对于$l=0$子空间，$\hat{L}_x|Y_{00}\rangle = 0$；对于$l=1$子空间，$\hat{L}_x$的矩阵表示为(基矢顺序为$|Y_{11}\rangle$，$|Y_{10}\rangle$，$|Y_{1-1}\rangle$)

$$\hat{L}_x = \frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

对角化得到本征值和本征函数

$$l_x = \hbar, |1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix};\ l_x = 0, |2\rangle = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix};\ l_x = -\hbar, |3\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

所以

$$P_{l_x=\hbar} = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\langle 1|\,Y_{10}\rangle\right|^2 = \frac{1}{4},$$

$$P_{l_x=-\hbar} = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\langle 3|\,Y_{10}\rangle\right|^2 = \frac{1}{4},$$

$$P_{l_x=0} = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\langle Y_{00}|\,Y_{00}\rangle\right|^2 + \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\langle 2|\,Y_{10}\rangle\right|^2 = \frac{1}{2}.$$

6. 一个质量为m的粒子被限制在$r=a$和$r=b$的两个不可穿透的同心球面之间运动，不存在其它势。求粒子的基态能量和归一化波函数。

参考答案：波函数可以写为$\psi(\boldsymbol{r}) = R(r)Y(\theta,\phi)$，设$R(r)=\frac{u(r)}{r}$，$u(r)$满足的径向方程为

$$\frac{d^2u(r)}{dr^2} + [\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r)) - \frac{l(l+1)}{r^2}]u(r) = 0.$$

其中，

$$V(r)=\begin{cases}\infty, & r<a, r>b;\\ 0, & a\le r\le b.\end{cases}$$

对于基态，$l=0$，则方程变为

$$\begin{cases}\frac{d^2u(r)}{dr^2}+k^2u(r)=0, & a\le r\le b;\\ u(r)=0, & r<a, r>b.\end{cases}\qquad k=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

在$a\le r\le b$，其通解为

$$u(r)=Ae^{ikr}+Be^{-ikr}.$$

利用边界条件

$$u(a)=u(b)=0,$$

我们有

$$\begin{vmatrix} e^{ika} & e^{-ika}\\ e^{ikb} & e^{-ikb}\end{vmatrix}=0.$$

解得$e^{i2k(b-a)}=1$，因此$k=\frac{n\pi}{b-a}$，其中$n=1,2,3,\cdots$。所以，基态能量为

$$E_g=\frac{\pi^2\hbar^2}{2m(b-a)^2}.$$

对于基态，

$$B=-Ae^{i\frac{2\pi a}{b-a}}.$$

所以，径向基态波函数为

$$u(r)=A\sin[\frac{\pi}{b-a}(r-a)].$$

再利用归一化条件

$$\int_0^\infty R^2(r)r^2dr=\int_0^\infty u^2(r)dr=1,$$

有$A=\sqrt{\frac{2}{b-a}}$。又因为$Y_{00}(\theta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$，所以归一化波函数为

$$\psi_{100}(\boldsymbol{r})=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2\pi(b-a)}}\frac{1}{r}\sin[\frac{\pi}{b-a}(r-a)], & a\le r\le b;\\ 0, & r<a, r>b.\end{cases}$$

7. 氚（^{3}H）是氢的同位素之一，氚核会发生β衰变，放出电子和中微子变成氦-3（^{3}He）核。假设^{3}H 原子在衰变前处于基态，在β衰变放出电子后变成^{3}He$^+$离子，并且假设原子中

电子的状态不受β衰变影响。如果对β衰变后$^3\mathrm{He}^+$ 离子的状态进行测量，分别计算得到$1s$、$2s$和$2p$（有三个）态的几率各是多少。

参考答案：β衰变前后原子核质量的变化可以忽略，设^3H原子的基态波函数为

$$\psi_{100}\left(r,\theta,\phi\right)=\frac{2}{a^{3/2}}e^{-r/a}Y_{00}\left(\theta,\phi\right).$$

衰变前后原子核的电荷从$+e$变成$+2e$，因此^3He离子的$1s$，$2s$和$2p$态的波函数分别为

$$\begin{aligned}
\psi'_{100}\left(r,\theta,\phi\right) &= \frac{2}{\left(a/2\right)^{3/2}}e^{-2r/a}Y_{00}\left(\theta,\phi\right),\\
\psi'_{200}\left(r,\theta,\phi\right) &= \frac{1}{\sqrt{2}\left(a/2\right)^{3/2}}\left(1-r/a\right)e^{-r/a}Y_{00}\left(\theta,\phi\right),\\
\psi'_{21m}\left(r,\theta,\phi\right) &= \frac{1}{2\sqrt{6}\left(a/2\right)^{3/2}}\frac{r}{a}e^{-r/a}Y_{1m}\left(\theta,\phi\right).
\end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned}
P_{1s} &= \left|\int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\left(\psi'_{100}\right)^*\psi_{100}\right|^2=2\left(\frac{16}{27}\right)^2,\\
P_{2s} &= \left|\int_0^\infty r^2dr\int_0^\pi\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}d\phi\left(\psi'_{200}\right)^*\psi_{100}\right|^2=\frac{1}{4}.
\end{aligned}$$

由于Y_{00}与Y_{1m}正交，所以处在三个$2p$态的几率都是0。

作业四

1. 在$(\sigma^2$,$\sigma_z)$表象中求$\vec{\sigma}\cdot\vec{n}$的本征态，其中$\vec{n}$是球坐标系中的单位矢量。

参考答案：不计算应该直接知道本征值为±1。$\vec{n}=(\sin\theta\cos\phi,\sin\theta\sin\phi,\cos\theta)$。在$(\sigma^2,\sigma_z)$表象中

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{\sigma}\cdot\vec{n} &= n_x\sigma_x+n_y\sigma_y+n_z\sigma_z\\
&= \sin\theta\cos\varphi\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}+\sin\theta\sin\varphi\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}+\cos\theta\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\\
&= \begin{pmatrix}\cos\theta&e^{-i\varphi}\sin\theta\\e^{i\varphi}\sin\theta&-\cos\theta\end{pmatrix}
\end{aligned}$$

本征方程

$$\begin{pmatrix}\cos\theta&e^{-i\varphi}\sin\theta\\e^{i\varphi}\sin\theta&-\cos\theta\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

取$\lambda = 1$

$$a\left(\cos\theta - 1\right) + be^{-i\varphi}\sin\theta = 0$$

$$\frac{a}{b} = \frac{\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}}{\sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}}$$

故此时的本征态$\psi_+ = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2} \\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}$

取$\lambda = -1$

$$a\left(\cos\theta + 1\right) + be^{-i\varphi}\sin\theta = 0$$

$$\frac{a}{b} = \frac{-\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}}{\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}}$$

故此时的本征态$\psi_- = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2} \\ \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}$

当然实际上位相并不是完全确定的，这只是其中的一种选择，是一种约定。

2. 考虑自旋$s = \frac{1}{2}\hbar$的系统，采用$\hat{s}_z$表象。

(1) 求算符$\hat{P} = \alpha\hat{s}_x + \beta\hat{s}_y$的本征值和归一化本征态，其中$\alpha$、$\beta$为常数；

(2) 若系统处在$\hat{P}$的某个本征态上，求测量$\hat{s}_y$结果为$+\frac{1}{2}\hbar$的几率。

参考答案：(1)

$$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

所以

$$\hat{P} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \alpha - i\beta \\ \alpha + i\beta & 0 \end{pmatrix}.$$

$\hat{P}$的本征方程为

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & \alpha - i\beta \\ \alpha + i\beta & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}.$$

解得本征值为

$$\lambda_1 = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}, \qquad \lambda_2 = -\frac{\hbar}{2}\sqrt{\alpha^2 + \beta^2},$$

相应的本征矢量为

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{\alpha + i\beta}{\sqrt{2(\alpha^2+\beta^2)}} \end{pmatrix}, \qquad |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{\alpha + i\beta}{\sqrt{2(\alpha^2+\beta^2)}} \end{pmatrix}.$$

(2) 在$\hat{s}_z$表象下，$\hat{s}_y$的本征方程为

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix},$$

本征值为

$$\lambda_1 = \frac{\hbar}{2}, \qquad \lambda_2 = -\frac{\hbar}{2},$$

相应的本征矢量为

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \qquad |\phi_2\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}.$$

因此，处在$|\psi_1\rangle$态时，测量$\hat{s}_y$结果为$+\frac{1}{2}\hbar$的几率为

$$|\langle\phi_1|\psi_1\rangle|^2 = \frac{1}{2} + \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha^2+\beta^2}};$$

处在$|\psi_2\rangle$态时，测量$\hat{s}_y$结果为$+\frac{1}{2}\hbar$的几率为

$$|\langle\phi_1|\psi_2\rangle|^2 = \frac{1}{2} - \frac{\beta}{2\sqrt{\alpha^2+\beta^2}}.$$

3. 两个非全同的自旋$\frac{1}{2}$粒子所组成的系统的哈密顿量为

$$\hat{H} = \frac{\alpha}{\hbar}\hat{\boldsymbol{s}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{s}}_2 + \beta(\hat{s}_{1z} + \hat{s}_{2z}),$$

其中α、β为常数。如果$t=0$时刻，系统处在状态$|\psi\rangle = (|\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$，求任意$t>0$时刻对系统测量仍然得到$|\psi\rangle$态的几率。

参考答案：采用未耦合的表象，基矢取为$|1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$，$|2\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$，$|3\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle$，$|4\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$，则哈密顿量为

$$\hat{H} = \hbar\begin{pmatrix} \frac{\alpha}{4}+\beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\alpha}{4} & \frac{\alpha}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\alpha}{2} & -\frac{\alpha}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\alpha}{4}-\beta \end{pmatrix}.$$

求解本征方程

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

得

$$E_1 = \frac{\alpha}{4}\hbar + \beta\hbar, \quad E_2 = \frac{\alpha}{4}\hbar, \quad E_3 = -\frac{3\alpha}{4}\hbar, \quad E_4 = \frac{\alpha}{4}\hbar - \beta\hbar$$

相应的本征态为

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}, |\psi_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$Hamiltonian$与时间无关，任意时刻的波函数

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^{4} c_n e^{-iE_n t/\hbar}|\psi_i\rangle,$$

其中系数$c_n = \langle\psi_i|\psi(0)\rangle$。$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(1\ 1\ 0\ 0)^T$，因此

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad c_2 = \frac{1}{2}, \quad c_3 = \frac{1}{2}, \quad c_4 = 0,$$

即

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_1 t/\hbar}|\psi_1\rangle + \frac{1}{2}e^{-iE_2 t/\hbar}|\psi_2\rangle + \frac{1}{2}e^{-iE_3 t/\hbar}|\psi_3\rangle.$$

所以任意时刻系统仍然处于$|\psi\rangle$的几率为

$$P = |\langle\psi|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{3}{8} + \frac{1}{4}\left[\cos(\alpha t) + \cos(\beta t) + \cos((\alpha+\beta)t)\right].$$

4. 已知电子的二分量形式的态函数为

$$\psi(\vec{\mathbf{r}}, S_z) = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix} = R(r)\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{3}{5}}Y_{00} + \sqrt{\frac{1}{10}}Y_{11} + \sqrt{\frac{1}{10}}Y_{1-1} \\ \sqrt{\frac{1}{5}}Y_{10} \end{pmatrix},$$

其中$R(r)$已归一化，求

(1) 同时测量L^2为$2\hbar^2$，L_z为$\hbar$的几率；

(2) 电子自旋朝上的几率；

(3) $\hat{L}_z$和$\hat{S}_x$的平均值。

参考答案: (1) 由电子的态函数可以知道同时测量L^2为$2\hbar^2$，L_z为$\hbar$的几率是

$$\left(\sqrt{1/10}\right)^2 = 1/10$$

(2) 电子自旋朝上的几率是

$$\left(\sqrt{3/5}\right)^2 + \left(\sqrt{1/10}\right)^2 + \left(\sqrt{1/10}\right)^2 = 4/5$$

(3)

$$\left\langle\hat{L}_z\right\rangle=\left[\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)^2+\left(\sqrt{\frac{1}{5}}\right)^2\right]\times 0+\left[\left(\sqrt{1/10}\right)^2-\left(\sqrt{1/10}\right)^2\right]\times\hbar=0$$

$$\begin{aligned}\left\langle\hat{S}_x\right\rangle &= \frac{\hbar}{2}\left(\sqrt{\frac{3}{5}}Y_{00}+\sqrt{\frac{1}{10}}Y_{11}+\sqrt{\frac{1}{10}}Y_{1-1},\ \sqrt{\frac{1}{5}}Y_{10}\right)\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{\frac{3}{5}}Y_{00}+\sqrt{\frac{1}{10}}Y_{11}+\sqrt{\frac{1}{10}}Y_{1-1}\\ \sqrt{\frac{1}{5}}Y_{10}\end{pmatrix}\\ &= \frac{\hbar}{2}\left(\sqrt{\frac{1}{5}}Y_{10},\ \sqrt{\frac{3}{5}}Y_{00}+\sqrt{\frac{1}{10}}Y_{11}+\sqrt{\frac{1}{10}}Y_{1-1}\right)\begin{pmatrix}\sqrt{\frac{3}{5}}Y_{00}+\sqrt{\frac{1}{10}}Y_{11}+\sqrt{\frac{1}{10}}Y_{1-1}\\ \sqrt{\frac{1}{5}}Y_{10}\end{pmatrix}\\ &= 0\end{aligned}$$

5. 一质量为m的电子在恒定磁场$\vec{\mathbf{B}}=(B_0\sin\alpha,0,B_0\cos\alpha)$中，$t=0$时刻，电子处在$S_z=\hbar/2$的态上。不考虑电子的轨道运动，求

(1) 任意t时刻电子的波函数$\psi(S_z,t)$；

(2) 任意t时刻电子处于$S_z=-\hbar/2$的几率；

(3) 任意t时刻测量S_x的平均值。

注：电子的自旋磁矩为$\vec{\mu}_s=-\frac{e}{mc}\vec{S}$，其中$e$，$m$，$c$分别是电子的电荷，质量以及光速。电子磁矩在磁场中受到的相互作用为$H=-\vec{\mu}_s\cdot\vec{B}$。取$\omega=\frac{eB_0}{2mc}$。

参考答案：(1) 系统的H为

$$H=-\vec{\mu}_s\cdot\vec{B}=\frac{e}{mc}\vec{S}\cdot\vec{B}=\frac{e\hbar B_0}{2mc}\begin{pmatrix}\cos\alpha&\sin\alpha\\ \sin\alpha&-\cos\alpha\end{pmatrix}$$

由$H\psi=E\psi$得到

$$\begin{aligned}E_1&=\frac{e\hbar B_0}{2mc} \qquad \psi_1=\begin{pmatrix}\cos\frac{\alpha}{2}\\ \sin\frac{\alpha}{2}\end{pmatrix}\\ E_2&=-\frac{e\hbar B_0}{2mc} \qquad \psi_1=\begin{pmatrix}\sin\frac{\alpha}{2}\\ -\cos\frac{\alpha}{2}\end{pmatrix}\end{aligned}$$

令$\omega=\frac{eB_0}{2mc}$

$$\psi\left(S_z,t\right)=c_1e^{-i\omega t}\begin{pmatrix}\cos\frac{\alpha}{2}\\ \sin\frac{\alpha}{2}\end{pmatrix}+c_2e^{i\omega t}\begin{pmatrix}\sin\frac{\alpha}{2}\\ -\cos\frac{\alpha}{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}c_1e^{-i\omega t}\cos\frac{\alpha}{2}+c_2e^{i\omega t}\sin\frac{\alpha}{2}\\ c_1e^{-i\omega t}\sin\frac{\alpha}{2}-c_2e^{i\omega t}\cos\frac{\alpha}{2}\end{pmatrix}$$

$$\psi\left(S_z,0\right)=\begin{pmatrix} c_1\cos\frac{\alpha}{2}+c_2\sin\frac{\alpha}{2} \\ c_1\sin\frac{\alpha}{2}-c_2\cos\frac{\alpha}{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\Longrightarrow\begin{pmatrix}c_1\\c_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\frac{\alpha}{2}\\ \sin\frac{\alpha}{2}\end{pmatrix}$$

即

$$\psi\left(S_z,t\right)=\begin{pmatrix}\cos^2\frac{\alpha}{2}e^{-i\omega t}+\sin^2\frac{\alpha}{2}e^{i\omega t}\\ -i\sin\alpha\sin\left(\omega t\right)\end{pmatrix}$$

(2)

$$P\left(S_z=-\hbar/2,t\right)=\sin^2\alpha\sin^2\left(\omega t\right)$$

(3)

$$\begin{aligned}\langle S_x\rangle &= \langle\psi\left(S_z,t\right)|S_x|\psi\left(S_z,t\right)\rangle\\ &= \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\cos^2\frac{\alpha}{2}e^{i\omega t}+\sin^2\frac{\alpha}{2}e^{-i\omega t}\\ i\sin\alpha\sin\left(\omega t\right)\end{pmatrix}^T\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos^2\frac{\alpha}{2}e^{-i\omega t}+\sin^2\frac{\alpha}{2}e^{i\omega t}\\ -i\sin\alpha\sin\left(\omega t\right)\end{pmatrix}\\ &= \frac{\hbar}{2}\sin\left(2\alpha\right)\sin^2\left(\omega t\right)\end{aligned}$$

作业五

1. 导出存在磁场情况下薛定谔方程的流密度，并证明它的规范不变性。

参考答案：存在磁场时的$Schrödinger$方程为(无电场)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi\left(\mathbf{r},t\right)=\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}}-q\mathbf{A}\right)^2\psi\left(\mathbf{r},t\right)$$

取复共轭

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*\left(\mathbf{r},t\right)=\frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{p}}+q\mathbf{A}\right)^2\psi^*\left(\mathbf{r},t\right)$$

注意到$\hat{\mathbf{p}}$的复共轭是$-\hat{\mathbf{p}}$。具体的推导过程见在课上已经有过详细讨论。

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t)=\frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*\left(\mathbf{r},t\right)\nabla\psi\left(\mathbf{r},t\right)-\psi\left(\mathbf{r},t\right)\nabla\psi^*\left(\mathbf{r},t\right)\right]-\frac{q}{m}\mathbf{A}\psi^*\left(\mathbf{r},t\right)\psi\left(\mathbf{r},t\right).$$

关于规范不变性：有磁场时规范变换为

$$\mathbf{A}'=\mathbf{A}+\nabla\chi\left(\mathbf{r},t\right),\ \ \psi'\left(\mathbf{r},t\right)=e^{\frac{iq\chi(\mathbf{r},t)}{\hbar}}\psi\left(\mathbf{r},t\right).$$

计算可以证明

$$\mathbf{j}'(\mathbf{r},t)=\mathbf{j}(\mathbf{r},t),$$

即流密度是规范不变的。

2. 二维材料（电子只在二维平面内运动）石墨烯中电子的哈密顿量可以写为如下的二分量形式，

$$\hat{H}=v_f\begin{pmatrix}0 & \hat{p}_x-i\hat{p}_y\\ \hat{p}_x+i\hat{p}_y & 0\end{pmatrix},$$

其中v_f是常数。在垂直平面的方向（z方向）加上一个强度为B的均匀磁场，请计算这个系统的朗道能级。

参考答案：注：这里的二分量不是自旋的二分量，是轨道的二分量。

选择规范$\mathbf{A}=(0,Bx,0)$，则$\hat{p}_y\longrightarrow\hat{p}_y+eB\hat{x}$。所以

$$\hat{H}=v_f\begin{pmatrix}0 & \hat{p}_x-i\hat{p}_y-ieB\hat{x}\\ \hat{p}_x+i\hat{p}_y+ieB\hat{x} & 0\end{pmatrix}.$$

定态薛定谔方程可以写为

$$v_f\begin{pmatrix}0 & \hat{p}_x-i\hat{p}_y-ieB\hat{x}\\ \hat{p}_x+i\hat{p}_y+ieB\hat{x} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi(x,y)\\ \phi(x,y)\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}\psi(x,y)\\ \phi(x,y)\end{pmatrix}.$$

即

$$\begin{aligned}v_f\left(\hat{p}_x-i\hat{p}_y-ieB\hat{x}\right)\phi(x,y) &= E\psi(x,y),\\ v_f\left(\hat{p}_x+i\hat{p}_y+ieB\hat{x}\right)\psi(x,y) &= E\phi(x,y).\end{aligned}$$

则

$$v_f^2\left(\hat{p}_x+i\hat{p}_y+ieB\hat{x}\right)\left(\hat{p}_x-i\hat{p}_y-ieB\hat{x}\right)\phi(x,y)=E^2\phi(x,y),$$

$$v_f^2\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+e^2B^2\hat{x}^2+ieB\left(\hat{x}\hat{p}_x-\hat{p}_x\hat{x}-2i\hat{x}\hat{p}_y\right)\right)\phi(x,y)=E^2\phi(x,y),$$

$$v_f^2\left(\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+e^2B^2\hat{x}^2-eB\hbar+2eB\hat{x}\hat{p}_y\right)\phi(x,y)=E^2\phi(x,y).$$

又因为$\hat{H}$不包含$\hat{y}$，所以

$$\phi(x,y)=\mu(x)e^{\frac{i}{\hbar}p_yy}.$$

因此

$$v_f^2\left(\hat{p}_x^2+p_y^2+e^2B^2\hat{x}^2-eB\hbar+2eB\hat{x}p_y\right)\mu(x)=E^2\mu(x),$$

$$\left(v_f^2\hat{p}_x^2+v_f^2e^2B^2\left(\hat{x}+\frac{p_y}{eB}\right)^2\right)\mu(x)=\left(E^2+eB\hbar v_f^2\right)\mu(x).$$

令$m=\frac{1}{2v_f^2}$，$\omega=2v_f^2eB$，则上式变为

$$\left[\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x}+\frac{p_y}{eB}\right)^2\right]\mu(x)=\left(E^2+eB\hbar v_f^2\right)\mu(x),$$

是一维谐振子的能量本征值方程。所以

$$E^2+eB\hbar v_f^2=\left(n+\frac{1}{2}\right)2v_f^2eB\hbar,$$

即

$$E=v_f\sqrt{2eB\hbar}\sqrt{n}\propto\sqrt{n}.$$

如果取的规范是$\mathbf{A}=(-By,0,0)$，同样也可以得到类似的结果。

3. 两个自旋为$\frac{1}{2}$的非全同粒子构成的系统，其中粒子1处于$s_{1z}=\frac{\hbar}{2}$的本征态，粒子2处于$s_{2x}=\frac{\hbar}{2}$的本征态。不考虑空间部分，求系统总自旋的可能测量值以及相应的几率。

参考答案：解：取s_z表象，s_x本征态为

$$\left|\psi\left(s_x=\frac{\hbar}{2}\right)\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad\left|\psi\left(s_x=-\frac{\hbar}{2}\right)\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}.$$

所以两个粒子的态表示为

$$|\psi_1\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad|\psi_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}.$$

在基矢$\{|\uparrow\uparrow\rangle,|\uparrow\downarrow\rangle,|\downarrow\uparrow\rangle,|\downarrow\downarrow\rangle\}$下表示为(表象为未耦合表象$(s_{1z},s_{2z})$)

$$|\psi\rangle=|\psi_1\rangle\otimes|\psi_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\\0\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\uparrow\rangle+|\uparrow\downarrow\rangle\right).$$

对于无相互作用的两个自旋，课上我们已经讲过本征值和本征态了，即

$$\begin{aligned}S&=0,\quad|\psi_{00}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle\right)\\S&=1,\quad|\psi_{10}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle\right),\quad|\psi_{11}\rangle=|\uparrow\uparrow\rangle,\quad|\psi_{1\bar{1}}\rangle=|\downarrow\downarrow\rangle.\end{aligned}$$

则，

$$\begin{aligned}P_{00}&=|\langle\psi_{00}|\psi\rangle|^2=1/4,\\P_{10}&=|\langle\psi_{10}|\psi\rangle|^2=1/4,\\P_{11}&=|\langle\psi_{10}|\psi\rangle|^2=1/2,\\P_{1\bar{1}}&=|\langle\psi_{1\bar{1}}|\psi\rangle|^2=0.\end{aligned}$$

可见，测量总自旋为的测量值和几率分别为：测量S^2的可能测量值为0和$2\hbar^2$，相应几率为1/4和3/4，测量S_z的可能测量值为0 和$\hbar$，几率都是1/2。

作业六

1. 在一维无限深方势阱

$$V(x)=\begin{cases}0, & 0\le x\le a;\\ \infty, & x<0,x>a.\end{cases}$$

中有两个自旋$s=0$的全同粒子，粒子间无相互作用。

(1)写出体系最低两个能级，指出简并度，并给出相应的波函数；

(2)同(1)，但粒子自旋为$s=1/2$;

(3)同(2)，但粒子之间存在同自旋有关的相互作用势$V=A\mathbf{s_1}\cdot\mathbf{s_2}$ $(A>0)$。

参考答案：一维无限深方势阱单粒子态的能量和波函数为

$$E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\qquad \psi_n(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a} & 0<x<a\\ 0 & x>a,x<0\end{cases}\qquad (n=1,2,...)$$

(1) 基态：$\xi_1=2E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}$，非简并，$\Psi_1=\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)$

第一激发态：$\xi_2=E_1+E_2=\frac{5\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$，非简并，$\Psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)+\psi_1(x_2)\psi_2(x_1)\right]$

(2) 基态：$\xi_1=2E_1=\frac{\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}$，非简并，$\Psi_1=\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)|00\rangle$

第一激发态：$\xi_2=E_1+E_2=\frac{5\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$，4重简并，

$$\Psi_2=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)+\psi_1(x_2)\psi_2(x_1)\right]|00\rangle\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)-\psi_1(x_2)\psi_2(x_1)\right]\begin{cases}|11\rangle\\|10\rangle\\|1\bar{1}\rangle\end{cases}\end{cases}$$

(3) $V=A\mathbf{s}_1\cdot\mathbf{s}_2=\frac{A}{2}\left(S^2-\frac{3}{2}\hbar^2\right)$ $\left(\mathbf{s}_1\cdot\mathbf{s}_2=\frac{1}{2}\left(S^2-s_1^2-s_2^2\right)\right)$

基态：$\xi_1=2E_1-\frac{3}{4}A\hbar^2=\frac{\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}-\frac{3}{4}A\hbar^2$，非简并，$\Psi_1=\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)|00\rangle$

第一激发态：$\xi_2=E_1+E_2-\frac{3}{4}A\hbar^2=\frac{5\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}-\frac{3}{4}A\hbar^2$，非简并，

$\Psi_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)+\psi_2(x_2)\psi_1(x_1)\right]|00\rangle$。

其中

$$\begin{aligned}|00\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_+(1)\chi_-(2)-\chi_+(2)\chi_-(1)\right) \qquad |11\rangle=\chi_+(1)\chi_+(2)\\ |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\chi_+(1)\chi_-(2)+\chi_+(2)\chi_-(1)\right) \qquad |1\bar{1}\rangle=\chi_+(1)\chi_+(2)\end{aligned}$$

2.绝对零度时，在三维各向同性谐振子势$V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2$中有20个自旋$s=1/2$ 质量为μ的全同粒子组成的体系。忽略粒子之间的相互作用。已知这20个粒子的平均能量为$3eV$。

(1) 如果同样温度下该势场中有12个这样的粒子组成的体系，其平均能量是什么？

(2) 如果同样温度下该势场中有17个自旋$s=0$质量仍为μ的全同粒子组成的体系，其平均能量是什么？

参考答案：三维各向同性谐振子单粒子态的波函数和能量为

$$\begin{aligned}E_{n_1n_2n_3} &= \left(n_1+n_2+n_3+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega \quad n=0,1,2,... \\ \psi_{n_1n_2n_3}(\mathbf{r},s_z) &= \psi_{n_1}(x)\,\psi_{n_2}(y)\,\psi_{n_3}(z)\,\chi_{m_s}(s_z) \qquad s_z=\pm1/2\end{aligned}$$

全同多粒子系：

基态能量为$\xi_0=\frac{3}{2}\hbar\omega$，相应的$(n_1n_2n_3)=(000)$,$m_s=\pm1/2$，2重简并；

第一激发态能量为$\xi_1=\frac{5}{2}\hbar\omega$，相应的$(n_1n_2n_3)=(001)\,(010)\,(100)$,$m_s=\pm1/2$，6重简并；

第二激发态能量为$\xi_2=\frac{7}{2}\hbar\omega$，相应的$(n_1n_2n_3)=(011)\,(110)\,(101)\,(200)\,(020)\,(002)$,$m_s=\pm1/2$，12重简并；

零温下，按照$Fermi$分布，从低能级逐渐往高能级排，20个全同粒子，2个在基态，6个在第一激发态，12个在第二激发态

$$\langle E\rangle=\frac{1}{20}\left(2\times\frac{3}{2}\hbar\omega+6\times\frac{5}{2}\hbar\omega+12\times\frac{7}{2}\hbar\omega\right)=3\hbar\omega$$

即$\hbar\omega=1eV$。

(1) 如果只有12个全同粒子，2个在基态，6个在第一激发态，4个在第二激发态，

$$\langle E\rangle=\frac{1}{12}\left(2\times\frac{3}{2}\hbar\omega+6\times\frac{5}{2}\hbar\omega+4\times\frac{7}{2}\hbar\omega\right)=\frac{8}{3}\hbar\omega=\frac{8}{3}eV$$

(2) 对于玻色子，没有$Pauli$不相容原理的限制，所有全同粒子都处在基态，所以

$$\langle E\rangle=\frac{3}{2}\hbar\omega=\frac{3}{2}eV$$

3.两个质量为m，自旋为$\frac{1}{2}$的全同粒子被限制在x方向上做一维运动。假定它们之间的相互作用与自旋无关，而只与它们之间的距离有关，具体形式为

$$V(x_1-x_2)=\begin{cases}0, & |x_1-x_2|\le a;\\ \infty, & |x_1-x_2|>a.\end{cases}$$

其中，x_1和x_2分别为两个粒子的坐标。

(1)求系统的基态能量和基态波函数；(2)如果引入一个z方向的磁场，自旋在此磁场下受到的作用为$\hat{H}_m = -\lambda(\sigma_1^z + \sigma_2^z)$，其中$\sigma$是泡利矩阵，$\lambda = \frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2}$。求此时系统的基态能量和基态波函数。

参考答案: (1) 相互作用与自旋无关，轨道和自旋自由度可以分离。自旋部分，两个电子可以有四种状态，即单重态

$$|s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

三重态

$$|t_{+1}\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$$
$$|t_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$
$$|t_{-1}\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle.$$

系统轨道部分的定态薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{d}{dx_1^2} + \frac{d}{dx_2^2})\Phi(x_1, x_2) = E\Phi(x_1, x_2).$$

相互作用只与相对距离有关，可以通过引入如下变量将两体问题化为单体问题。质心坐标和相对坐标：

$$x_c = \frac{mx_1 + mx_2}{m + m} = \frac{1}{2}(x_1 + x_2), \qquad x = x_1 - x_2.$$

总质量和约化质量：

$$m_c = 2m, \qquad \mu = \frac{mm}{m+m} = \frac{1}{2}m.$$

系统的波函数可以写为

$$\Psi(x_c, x) = \phi(x_c)\psi(x).$$

质心运动部分的方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m_c}\frac{d}{dx_c^2}\phi(x_c) = E_c\phi(x_c).$$

相对运动部分的方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d}{dx^2}\psi(x) = [E - E_c]\phi(x) = E_r\phi(x).$$

质心运动部分的解为

$$\phi(x_c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_cx_c}, \qquad k_c = \pm\frac{\sqrt{2mE_c}}{\hbar}.$$

相对运动部分的解为

$$\psi(x)=\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a),\qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{4ma^2},\qquad n=1,2,3,\cdots.$$

系统的轨道波函数为

$$\Psi(x_c,x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_cx_c}\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a),$$

对于基态，应该有$k_c=0$，在考虑自旋部分以及电子系统的波函数要满足反对称关系，我们有

$$|\Psi\rangle=\begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\cos\frac{n\pi x}{2a}|s\rangle, & n=1,3,5,\cdots;\\ \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\sin\frac{n\pi x}{2a}|t\rangle, & n=2,4,6,\cdots.\end{cases}$$

其中，$|s\rangle$代表自旋单重态，$|t\rangle$代表自旋三重态中的一个。

基态为

$$n=1.$$

因此，基态能量为

$$E_g=\frac{\pi^2\hbar^2}{4ma^2},$$

基态波函数为

$$|\Psi_g\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\cos\frac{\pi}{2a}x(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle).$$

(2)引入磁场后，不影响质心运动部分，因此基态仍然对应于$k_c=0$，自旋部分的能量为

$$|s\rangle:0,\quad |t_{+1}\rangle:-\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2},\quad |t_0\rangle:0,\quad |t_{-1}\rangle:\frac{2\pi^2\hbar^2}{ma^2}.$$

因此，基态为

$$n=2.$$

基态能量为

$$E_g=-\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2},$$

基态波函数为

$$|\Psi_g\rangle=\frac{1}{\sqrt{\pi a}}\sin\frac{\pi}{a}x|\uparrow\uparrow\rangle.$$

4. 三个全同粒子在如下的一维势场中运动，

$$V(x)=\begin{cases}0, & 0\le x\le a;\\ \infty, & x<0,x>a.\end{cases}$$

粒子间无相互作用。设$\hat{S}^z=\hat{S}_1^z+\hat{S}_2^z+\hat{S}_3^z$为总自旋的$z$分量，其中$\hat{S}_1^z$、$\hat{S}_2^z$和$\hat{S}_3^z$分别为三个粒子自旋的$z$分量。
(1)如果三个粒子是自旋为1的粒子，求系统的基态能量和简并度，并写出其中$\hat{S}^z$取最大值的态的波函数；
(2)如果三个粒子是电子，求系统的基态能量和简并度，并写出其中$\hat{S}^z$取最大值的态的波函数。

参考答案：单个粒子的本征态(轨道部分)为

$$|n\rangle=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a},\qquad E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

(1) 对于自旋为1的玻色子，三个粒子可以处在同一个单粒子态，因此基态能量为

$$E_g=3E_1=\frac{3\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

能量与自旋状态无关，每个粒子的自旋有三种可能，在$\hat{S}^z$表象下分别记为$|1\rangle$，$|0\rangle$，$|\bar{1}\rangle$，所以总共有$n=3^3=27$种可能。

$S^z/\hbar$	$\|\psi\rangle$	N
3	$\|111\rangle$	1
2	$\|110\rangle, \|101\rangle, \|011\rangle$	3
1	$\|11\bar{1}\rangle, \|1\bar{1}1\rangle, \|\bar{1}11\rangle; \|100\rangle, \|010\rangle, \|001\rangle$	6
0	$\|1\bar{1}0\rangle, \|10\bar{1}\rangle, \|01\bar{1}\rangle; \|\bar{1}10\rangle, \|\bar{1}01\rangle, \|0\bar{1}1\rangle; \|000\rangle$	7
-1	$\|1\bar{1}\bar{1}\rangle, \|\bar{1}1\bar{1}\rangle, \|\bar{1}\bar{1}1\rangle; \|\bar{1}00\rangle, \|0\bar{1}0\rangle, \|00\bar{1}\rangle$	6
-2	$\|\bar{1}\bar{1}0\rangle, \|\bar{1}0\bar{1}\rangle, \|0\bar{1}\bar{1}\rangle$	3
-3	$\|\bar{1}\bar{1}\bar{1}\rangle$	1

此时，自旋和空间坐标可以分离，因为三个粒子的空间部分是同一个单粒子态，所以空间部分只能满足交换对称，因此自旋部分也必须交换对称。自旋的27种可能状态总共可以组合出10种交换对称的状态，其中，总自旋z分量为$3\hbar$的1种，总自旋z分量为$2\hbar$的1种，总自旋z分量为$\hbar$的2种，总自旋z分量为0的2种，总自旋z分量为$-\hbar$的2种，总自旋z分量为$-2\hbar$的1种，总自旋z分量为$-3\hbar$的1种。

$S^z/\hbar$	$\left\|\psi^{(symmetric)}\right\rangle$	N
3	$\|111\rangle$	1
2	$\frac{1}{\sqrt{3}}(\|110\rangle+\|101\rangle+\|011\rangle)$	1
1	$\frac{1}{\sqrt{3}}(\|11\bar{1}\rangle+\|1\bar{1}1\rangle+\|\bar{1}11\rangle)$; $\frac{1}{\sqrt{3}}(\|100\rangle+\|010\rangle+\|001\rangle)$	2
0	$\frac{1}{\sqrt{6}}(\|1\bar{1}0\rangle+\|10\bar{1}\rangle+\|01\bar{1}\rangle+\|\bar{1}10\rangle+\|\bar{1}01\rangle+\|0\bar{1}1\rangle)$; $\|000\rangle$	2
-1	$\frac{1}{\sqrt{3}}(\|1\bar{1}\bar{1}\rangle+\|\bar{1}1\bar{1}\rangle+\|\bar{1}\bar{1}1\rangle)$; $\frac{1}{\sqrt{3}}(\|\bar{1}00\rangle+\|0\bar{1}0\rangle+\|00\bar{1}\rangle)$	2
-2	$\frac{1}{\sqrt{3}}(\|\bar{1}\bar{1}0\rangle+\|\bar{1}0\bar{1}\rangle+\|0\bar{1}\bar{1}\rangle)$	1
-3	$\|\bar{1}\bar{1}\bar{1}\rangle$	1

可见，简并度为10。其中$\hat{S}_z$取最大值的波函数为

$$\psi(x_1,x_2,x_3)=\left(\frac{2}{a}\right)^{3/2}\sin\frac{\pi x_1}{a}\sin\frac{\pi x_2}{a}\sin\frac{\pi x_3}{a}|111\rangle.$$

(2) 电子为费米子，两个电子不可能同时处在同一个单粒子态，因此基态为两个自旋相反的粒子处在$|1\rangle$态，第三个处在$|2\rangle$态。基态能量为

$$E_g=2E_1+E_2=\frac{3\pi^2\hbar^2}{ma^2}.$$

因为在处在$|2\rangle$态的粒子自旋有两种可能，所以基态简并度为2。我们将第i个电子坐标表示为(x_i,θ_i)，其中x_i为实空间坐标，θ_i为自旋分量的坐标。$\hat{S}^z$取最大值状态为处在$|2\rangle$态的粒子自旋向上，于是波函数为

$$\begin{aligned}&\psi(x_1,\theta_1;x_2,\theta_2;x_3,\theta_3)\\&=\frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{2}{a}\right)^{3/2}\begin{vmatrix}(\sin\frac{\pi x_1}{a})\delta_{\theta_1\uparrow} & (\sin\frac{\pi x_2}{a})\delta_{\theta_2\uparrow} & (\sin\frac{\pi x_3}{a})\delta_{\theta_3\uparrow}\\(\sin\frac{\pi x_1}{a})\delta_{\theta_1\downarrow} & (\sin\frac{\pi x_2}{a})\delta_{\theta_2\downarrow} & (\sin\frac{\pi x_3}{a})\delta_{\theta_3\downarrow}\\(\sin\frac{2\pi x_1}{a})\delta_{\theta_1\uparrow} & (\sin\frac{2\pi x_2}{a})\delta_{\theta_2\uparrow} & (\sin\frac{2\pi x_3}{a})\delta_{\theta_3\uparrow}\end{vmatrix}.\end{aligned}$$

5.考虑一个量子单摆：质量为m的粒子在重力作用下在竖直平面内沿半径为l的圆环围绕最低点做小角度摆动。在小角度近似下势能可以写为

$$\hat{V}=\frac{1}{2}mgl\theta^2,$$

其中，θ是摆动角度。

(1)计算小角度近似下系统的本征能量；

(2)利用微扰理论计算考虑小角度近似的不精确性带来的对基态能量的最低阶修正。

参考答案:

(1) 系统的经典$Hamiltonian$为

$$H = \frac{1}{2}ml^2\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2 + \frac{1}{2}mgl\theta^2,$$

令，$x = l\theta)$，$\omega = \sqrt{g/l}$，则上式可以改写为

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

因此量子化的$Hamiltonian$为

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

与一维谐振子的$Hamiltonian$一致，所以能量本征值为

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega, \qquad n = 0, 1, 2, \cdots$$

(2) 微扰$Hamiltonian$为

$$\hat{H}'\left(= mgl(1-\cos\theta) - mgl\theta^2 \approx -\frac{1}{24}mgl\theta^4\right) = -\frac{1}{24}\frac{mg}{l^3}\hat{x}^4.$$

基态能量的最低阶修正为

$$E_0^{(1)} = -\frac{1}{24}\frac{mg}{l^3}\langle 0|\hat{x}^4|0\rangle = -\frac{1}{32}\frac{\hbar^2}{ml^2}.$$

6.考虑一个三维希尔伯特空间的问题。在某表象中的哈密顿量表示为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \lambda & 0 \\ \lambda & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{pmatrix},$$

其中，$\lambda \ll 1$。

(1)利用微扰理论计算本征值至二级近似；

(2)利用严格对角化计算精确的本征值，并与微扰理论的结果进行比较。

参考答案：(1) 能级无简并，一阶修正：

$$E_1^{(1)} = \langle 1|\hat{H}'|1\rangle = 0, \qquad E_2^{(1)} = \langle 2|\hat{H}'|2\rangle = 0, \qquad E_3^{(1)} = \langle 3|\hat{H}'|3\rangle = \lambda.$$

二阶修正：

$$E_1^{(2)} = \frac{|\langle 2|\hat{H}'|1\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} = -\frac{\lambda^2}{2}, \qquad E_2^{(2)} = \frac{|\langle 1|\hat{H}'|2\rangle|^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = \frac{\lambda^2}{2}, \qquad E_3^{(2)} = 0.$$

因此，二级近似下的本征值为

$$E_1^{(1)} = 1 - \frac{\lambda^2}{2}, \qquad E_2^{(1)} = 3 + \frac{\lambda^2}{2}, \qquad E_3^{(1)} = -2 + \lambda.$$

(2) $\hat{H}$的本征值是下面方程的根，

$$\begin{vmatrix} 1-E & \lambda & 0 \\ \lambda & 3-E & 0 \\ 0 & 0 & -2+\lambda-E \end{vmatrix} = 0,$$

解得

$$E_1 = 2 - \sqrt{1+\lambda^2}, \qquad E_2 = 2 + \sqrt{1+\lambda^2}, \qquad E_3 = -2 + \lambda.$$

准确到λ^2，有

$$E_1^{(1)} = 1 - \frac{\lambda^2}{2}, \qquad E_2^{(1)} = 3 + \frac{\lambda^2}{2}, \qquad E_3^{(1)} = -2 + \lambda,$$

与微扰理论计算的结果一致。

7. 我们前面处理氢原子问题时将质子看做点粒子，现在假设质子是半径为R（远小于氢原子的玻尔半径）的薄球壳，其电荷e均匀分布在球壳表面上，其电势可以表示为

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{R}, & r \le R; \\ \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}, & r > R. \end{cases}$$

以电子所受势能偏离质子为点粒子模型时的值为微扰，求氢原子基态能量的一级微扰修正。

参考答案：微扰项为

$$\hat{H}' = \begin{cases} -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}(\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{r}), & r \le R; \\ 0, & r > R. \end{cases}$$

氢原子基态无简并，因此，氢原子基态能量的一级微扰修正为

$$E_1^{(1)} = \langle 100|\hat{H}'|100\rangle = \int \psi_{100}^*(r,\theta,\phi)H'(r)\psi_{100}(r,\theta,\phi)r^2\sin\theta drd\theta d\phi$$

因为$H'(r)$与θ和ϕ无关，所以角度部分的积分为1，只剩下对r的积分，

$$E_1^{(1)} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{4}{a^3}\int_0^R e^{-2r/a}(\frac{e^2}{R}-\frac{e^2}{r})r^2dr.$$

因为$R \ll a$，所以上式积分中$e^{-2r/a} \approx 1$，因此

$$E_1^{(1)} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{4}{a^3}\int_0^R (\frac{e^2}{R}-\frac{e^2}{r})r^2dr = \frac{e^2R^2}{6\pi\varepsilon_0 a^3}.$$

作业七

1. 考虑在如下二维无限深势阱中运动的一个质量为μ粒子，

$$V(x,y) = \begin{cases} 0, & 0 < x, y < a; \\ \infty, & \text{其它情况}. \end{cases}$$

该粒子受到一个微扰$\hat{H}' = \lambda xy$，其中$\lambda > 0$，并且$\lambda \ll \frac{\hbar^2}{ma^2}$。利用微扰理论计算准确至一阶的基态和第一激发态能量。

2. 在某个晶体场中，自旋$S=2$的离子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \alpha\hat{S}_z^2 + \beta\left(3\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2\right),$$

其中，$\beta \ll \alpha$。以包含β的项为微扰，利用微扰理论计算系统的能级至二阶近似（即到β的二阶）。

3. 粒子的$Hamiltonian$可以表示为$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$，其中$\hat{H}_1$和$\hat{H}_2$ 在Q 表象中的矩阵为

$$\hat{H}_1 = E_0\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \hat{H}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2E_0 \\ 0 & 2\varepsilon & 0 \\ 2E_0 & 0 & 2\varepsilon \end{pmatrix},$$

其中，E_0和ε是正实数，并且$\varepsilon \ll E_0$。请用微扰方法计算基态能量和波函数(能量准确到二级近似，波函数准确到一级近似)。

4. 考虑在一维势阱$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$中运动的质量为$m$，带电为$q$的粒子，在很短的$\tau$时间段里加上一个电场$\mathcal{E}$，此时微扰哈密顿量为

$$\hat{H}'(t) = \begin{cases} q\mathcal{E}x, & 0 \le t \le \tau; \\ 0, & \text{其它情况}. \end{cases}$$

(1) 求微扰引起的粒子在各个定态之间跃迁的选择定则；

(2) 假设$t=0$时刻粒子处在基态，利用一阶微扰理论计算经过$t>\tau$时间后粒子所处状态中基态的概率。

5. 两个自旋为零，质量为m的玻色子处在如下一维势井中，

$$V(x)=\begin{cases} 0, & 0<x<a; \\ \infty, & \text{其它情况}. \end{cases}$$

假设两个玻色子之间有如下相互作用，$\hat{H}'=-V_0\delta(x_1-x_2)$, 其中，$V_0$为小量，$x_1$和$x_2$分别为两个玻色子的坐标。利用微扰理论计算系统的基态能量至一级近似。

6. 假设我们在用变分法计算一维简谐振子的基态能量时得到的值为$0.6\hbar\omega$，请给出试探基态$|\tilde{0}\rangle$与真正基态$|0\rangle$的最小重合度，即$|\langle\tilde{0}|0\rangle|^2$的最小值。

7. 一个质量为m，动量为$\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$的粒子被汤川势$V(r)=V_0\frac{ae^{-r/a}}{r}$散射，其中$V_0>0$，$a>0$。利用玻恩近似计算微分散射截面和总散射截面。

8. 考虑一个质量为m的低能粒子对如下硬球势的散射，

$$V(r)=\begin{cases} 0, & r>r_0; \\ \infty, & r<r_0. \end{cases}$$

只考虑s波散射，计算微分散射截面和总散射截面。

9. 考虑两个质量为m，自旋为1/2非极化的全同粒子的散射，它们之间的相互作用为

$$V(r)=\begin{cases} -V_0\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2, & r\le a; \\ 0 & r>a. \end{cases}$$

其中，$\boldsymbol{\sigma}_1$和$\boldsymbol{\sigma}_2$是泡利矩阵，$V_0>0$。在低能近似下，只考虑s分波，计算微分散射截面和总散射截面。

作业七

1. 考虑在如下二维无限深势阱中运动的一个质量为μ粒子，

$$V\left(x,y\right)=\begin{cases}0,\ 0<x,y<a;\\ \infty, \quad \text{其它情况}.\end{cases}$$

该粒子受到一个微扰$\hat{H}'=\lambda xy$，其中$\lambda>0$，并且$\lambda\ll\frac{\hbar^2}{ma^2}$。利用微扰理论计算准确至一阶的基态和第一激发态能量。

参考答案：不考虑微扰时，粒子的能量和波函数为

$$E_{n_1n_2}^{(0)}=\frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\left(n_1^2+n_2^2\right),\quad n_1,n_2=1,2,\cdots.$$

$$\psi_{n_1n_2}^{(0)}\left(x,y\right)=\begin{cases}\frac{2}{a}\sin\frac{n_1\pi x}{a}\sin\frac{n_2\pi x}{a},\ 0<x,y<a;\\ \quad 0, \qquad\qquad\qquad\quad \text{其它情况}.\end{cases}$$

1)基态$(n_1=n_2=1)$是非简并态。
能量的一级修正为

$$E_0^{(1)}=\left\langle\psi_{11}^{(0)}|\hat{H}'|\psi_{11}^{(0)}\right\rangle=\lambda\left(\frac{2}{a}\right)^2\int_0^a x\sin^2\frac{\pi x}{a}dx\int_0^a y\sin^2\frac{\pi y}{a}dy=\lambda\frac{a^2}{4}.$$

2)第一激发态$(n_1=1,n_2=2$或者$n_1=2,n_2=1)$是一个二重简并态。简并态的能量一级修正是在简并子空间内基矢重新组合，使得新的基矢是$\hat{H}'$的本征态(同时也是$\hat{H}_0$的本征态)
取两个基矢分别为$\phi_1^{(0)}=\psi_{12}^{(0)}$ 和$\phi_2^{(0)}=\psi_{21}^{(0)}$，则微扰矩阵元为

$$H'_{11}=\left\langle\phi_1^{(0)}|\hat{H}'|\phi_1^{(0)}\right\rangle=\frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a x\sin^2\frac{\pi x}{a}dx\int_0^a y\sin^2\frac{\pi y}{a}dy=\lambda\frac{a^2}{4}.$$

$$H'_{22}=\left\langle\phi_2^{(0)}|\hat{H}'|\phi_2^{(0)}\right\rangle=\frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a x\sin^2\frac{2\pi x}{a}dx\int_0^a y\sin^2\frac{2\pi y}{a}dy=\lambda\frac{a^2}{4}.$$

$$H'_{12}=\left\langle\phi_1^{(0)}|\hat{H}'|\phi_2^{(0)}\right\rangle=\frac{4\lambda}{a^2}\int_0^a x\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}dx\int_0^a y\sin\frac{\pi y}{a}\sin\frac{2\pi y}{a}dy=\lambda\frac{2^8a^2}{3^4\pi^4}.$$

所以能量的一级修正由下式确定

$$\begin{vmatrix} E_1^{(1)} - H'_{11} & -H'_{12} \\ -H'_{21} & E_1^{(1)} - H'_{22} \end{vmatrix} = 0,$$

解得

$$E_1^{(1)} = \frac{H'_{11} + H'_{22}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{H'_{11} - H'_{22}}{2}\right)^2 + |H'_{12}|^2}.$$

即

$$E_{1+}^{(1)} = H'_{11} + |H'_{12}| = \left(\frac{1}{4} + \frac{2^8}{3^4\pi^4}\right)\lambda a^2, \quad E_{1-}^{(1)} = H'_{11} - |H'_{12}| = \left(\frac{1}{4} - \frac{2^8}{3^4\pi^4}\right)\lambda a^2.$$

2.在某个晶体场中，自旋$S = 2$的离子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \alpha \hat{S}_z^2 + \beta\left(3\hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2\right),$$

其中，$\beta \ll \alpha$。以包含β的项为微扰，利用微扰理论计算系统的能级至二阶近似（即到β的二阶）。

参考答案：微扰项可以改写为

$$\hat{H}' = \beta\left[3\left(\frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2}\right)^2 + \left(\frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2i}\right)^2\right] = \frac{1}{2}\left(\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2\right) + \left(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+\right).$$

利用角动量升降算符递推公式可以得到$(S = 2)$

$$\hat{S}_\pm |m\rangle = \sqrt{S(S+1) - m(m\pm 1)}\hbar\, |m\pm 1\rangle,$$

因此

$$\hat{S}_+^2 |0\rangle = \sqrt{6}\hbar \hat{S}_+ |1\rangle = 2\sqrt{6}\hbar^2 |2\rangle, \quad \hat{S}_+^2 |-2\rangle = 2\hbar \hat{S}_+ |-1\rangle = 2\sqrt{6}\hbar^2 |0\rangle, \quad \hat{S}_+^2 |-1\rangle = \sqrt{6}\hbar \hat{S}_+ |0\rangle = 6\hbar^2 |1\rangle.$$

$$\begin{aligned}\left(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+\right)|2\rangle &= 4\hbar^2 |2\rangle, \quad \left(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+\right)|-2\rangle = 4\hbar^2 |-2\rangle, \quad \left(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+\right)|0\rangle = 12\hbar^2 |0\rangle, \\ \left(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+\right)|1\rangle &= 10\hbar^2 |1\rangle, \quad \left(\hat{S}_+\hat{S}_- + \hat{S}_-\hat{S}_+\right)|-1\rangle = 10\hbar^2 |-1\rangle.\end{aligned}$$

另外我们有

$$\hat{S}_z |m\rangle = m\hbar |m\rangle.$$

在$\hat{S}_z$表象下，取基矢为$|2\rangle, |-2\rangle, |0\rangle, |1\rangle, |-1\rangle$。零级和微扰$Hamiltonian$分别为

$$\hat{H}_0 = \alpha\hbar^2 \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{H}' = \beta\hbar^2 \begin{pmatrix} 4 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ 0 & 4 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ \sqrt{6} & \sqrt{6} & 12 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 10 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 10 \end{pmatrix}.$$

零级近似下的各能级为

$$E_1 = E_2 = 4\alpha\hbar^2, \quad E_3 = 0, \quad E_4 = E_5 = \alpha\hbar^2.$$

现在考虑能量的一级近似，对于第1、2能级，按说是简并态，需要用简并微扰处理。但可以看到在简并子空间内非对角元为0，这意味着在一级近似下不会发生基矢重组，能级不会发生分裂，所以可以直接给出(用简并微扰给出同样的结果)

$$E_1^{(1)} = \left\langle 2|\hat{H}'|2 \right\rangle = 4\beta\hbar^2, \quad E_2^{(1)} = \left\langle -2|\hat{H}'|-2 \right\rangle = 4\beta\hbar^2.$$

对于第3能级，是非简并态，所以

$$E_3^{(1)} = \left\langle 0|\hat{H}'|0 \right\rangle = 12\beta\hbar^2.$$

对于第4、5能级，是简并态，并且子空间内非对角元不为零，需要用简并微扰处理，将矩阵元$\beta\hbar^2 \begin{pmatrix} 10 & 3 \\ 3 & 10 \end{pmatrix}$对角化，得到能量的一级近似

$$E_4^{(1)} = 7\beta\hbar^2, \quad E_4^{(5)} = 13\beta\hbar^2.$$

现在考虑能量的二级近似。对于第1、2能级，简并子空间内非对角元为零，基矢不发生交叠，所以二级近似能量与非简并微扰是完全一致的，即

$$\begin{aligned} E_1^{(2)} &= \frac{|H'_{13}|^2}{E_1^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{3\beta^2\hbar^2}{2\alpha}, \\ E_2^{(2)} &= \frac{|H'_{23}|^2}{E_2^{(0)} - E_3^{(0)}} = \frac{3\beta^2\hbar^2}{2\alpha}. \end{aligned}$$

对于能级3，非简并，

$$E_3^{(2)} = \frac{|H'_{13}|^2}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|H'_{23}|^2}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} = -\frac{3\beta^2\hbar^2}{\alpha}.$$

对于能级4，5，因为简并子空间外的矩阵元都是零，所以实际上已经是严格的结果了，二级修正能量都是0。

3.粒子的$Hamiltonian$可以表示为$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$，其中$\hat{H}_1$和$\hat{H}_2$ 在Q表象中的矩阵为

$$\hat{H}_1 = E_0 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad \hat{H}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2E_0 \\ 0 & 2\varepsilon & 0 \\ 2E_0 & 0 & 2\varepsilon \end{pmatrix},$$

其中，E_0和ε是正实数，并且$\varepsilon \ll E_0$。请用微扰方法计算基态的二级近似能量和一级近似态矢。

参考答案：首先构建零级和微扰$\hat{H}$

$$\hat{H}_0 = 2E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{H}' = 2\varepsilon \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

对应的基矢为

$$\left|\psi_1^{(0)}\right\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}^T, \quad \left|\psi_2^{(0)}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T, \quad \left|\psi_3^{(0)}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T.$$

注意到$\hat{H}_0$并没有对角，所以首先要对$\hat{H}_0$对角化，得到相应的零级近似能量和本征波函数

$$\begin{aligned} E_1^{(0)} &= 0, \ \left|\phi_1^{(0)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}^T; \\ E_2^{(0)} &= 2E_0, \ \left|\phi_2^{(0)}\right\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}^T; \\ E_3^{(0)} &= 4E_0, \ \left|\phi_3^{(0)}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}^T, \end{aligned}$$

可见是一个非简并微扰的问题。在新的基矢$\left\{\left|\phi_1^{(0)}\right\rangle, \left|\phi_2^{(0)}\right\rangle, \left|\phi_3^{(0)}\right\rangle\right\}$下，$\hat{H}'$的矩阵元可以表示为

$$\left(H'_\phi\right)_{mn} = \left\langle \phi_m^{(0)} | \hat{H}'_\psi | \phi_n^{(0)} \right\rangle = \sum_{ij} \left\langle \phi_m^{(0)} | \psi_i^{(0)} \right\rangle \left\langle \psi_i^{(0)} | \hat{H}'_\psi | \psi_j^{(0)} \right\rangle \left\langle \psi_j^{(0)} | \phi_n^{(0)} \right\rangle.$$

即

$$\left(H'_\phi\right)_{11} = \left\langle \phi_1^{(0)} | \hat{H}'_\psi | \phi_1^{(0)} \right\rangle = \varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \varepsilon,$$

$$\left(H'_\phi\right)_{22} = \left\langle \phi_2^{(0)} | \hat{H}'_\psi | \phi_2^{(0)} \right\rangle = 2\varepsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2\varepsilon,$$

$$\left(H'_\phi\right)_{33} = \left\langle \phi_3^{(0)} | \hat{H}'_\psi | \phi_3^{(0)} \right\rangle = \varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \varepsilon,$$

$$\left(H'_\phi\right)_{13} = \left\langle \phi_1^{(0)} | \hat{H}'_\psi | \phi_3^{(0)} \right\rangle = \varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\varepsilon.$$

或者直接用表象变换，定义变换矩阵

$$H'_{mn} = \left\langle \phi_m | \hat{H}' | \phi_n \right\rangle = \sum_{ij} \langle \phi_m | \psi_i \rangle \left\langle \psi_i | \hat{H}' | \psi_j \right\rangle \langle \psi_j | \phi_n \rangle.$$

定义变换矩阵

$$\hat{U}=\begin{pmatrix}\left\langle\psi_1^{(0)}|\phi_1^{(0)}\right\rangle & \left\langle\psi_1^{(0)}|\phi_2^{(0)}\right\rangle & \left\langle\psi_1^{(0)}|\phi_3^{(0)}\right\rangle\\ \left\langle\psi_2^{(0)}|\phi_1^{(0)}\right\rangle & \left\langle\psi_2^{(0)}|\phi_2^{(0)}\right\rangle & \left\langle\psi_2^{(0)}|\phi_3^{(0)}\right\rangle\\ \left\langle\psi_3^{(0)}|\phi_1^{(0)}\right\rangle & \left\langle\psi_3^{(0)}|\phi_2^{(0)}\right\rangle & \left\langle\psi_3^{(0)}|\phi_3^{(0)}\right\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & 1 & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix},$$

则

$$\hat{H}'_{\phi}=\hat{U}^{\dagger}\hat{H}'_{\psi}\hat{U}=2\varepsilon\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & 1 & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ 0 & 1 & 0\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}=\varepsilon\begin{pmatrix}1 & 0 & -1\\ 0 & 2 & 0\\ -1 & 0 & 1\end{pmatrix}.$$

一级近似能量

$$E_1^{(1)}=\left(H'_{\phi}\right)_{11}=\varepsilon,\quad E_2^{(1)}=\left(H'_{\phi}\right)_{22}=2\varepsilon,\quad E_3^{(1)}=\left(H'_{\phi}\right)_{33}=\varepsilon.$$

二级近似能量

$$E_1^{(2)}=\frac{\left|\left(H'_{\phi}\right)_{13}\right|^2}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}}=-\frac{\varepsilon^2}{4E_0},\ E_2^{(2)}=0,\ E_3^{(2)}=\frac{\left|\left(H'_{\phi}\right)_{13}\right|^2}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}=\frac{\varepsilon^2}{4E_0}.$$

一级近似波函数

$$\begin{aligned}\left|\phi_1^{(1)}\right\rangle &= \frac{\left(H'_{\phi}\right)_{31}}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}}\left|\phi_3^{(0)}\right\rangle=\frac{\varepsilon}{4\sqrt{2}E_0}\begin{pmatrix}1 & 0 & 1\end{pmatrix}^T,\\ \left|\phi_1^{(1)}\right\rangle &= 0,\\ \left|\phi_3^{(1)}\right\rangle &= \frac{\left(H'_{\phi}\right)_{13}}{E_3^{(0)}-E_1^{(0)}}\left|\phi_1^{(0)}\right\rangle=-\frac{\varepsilon}{4\sqrt{2}E_0}\begin{pmatrix}1 & 0 & -1\end{pmatrix}^T.\end{aligned}$$

4. 考虑在一维势阱$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$中运动的质量为$m$，带电为$q$的粒子，在很短的$\tau$时间段里加上一个电场$\mathcal{E}$，此时微扰哈密顿量为

$$\hat{H}'(t)=\begin{cases}q\mathcal{E}x,\ 0\le t\le\tau;\\ 0,\quad \text{其它情况}.\end{cases}$$

(1) 求微扰引起的粒子在各个定态之间跃迁的选择定则；

(2) 假设$t=0$时刻粒子处在基态，利用一阶微扰理论计算经过$t>\tau$时间后粒子所处状态中基态的概率。

参考答案：(1) 未微扰系统为一个一维谐振子，定态能量

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega.$$

定态$|i\rangle$，$|j\rangle$之间的跃迁选择定则由矩阵元$\langle i|\hat{H}'(t)|j\rangle$决定。

$$\left\langle i|\hat{H}'(t)|j\right\rangle = q\varepsilon\langle i|\hat{x}|j\rangle = q\varepsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle i|\hat{a}+\hat{a}^{\dagger}|j\rangle,$$

即选择定则为

$$\triangle n = \pm 1.$$

(2) 根据(1)中的选择定则，粒子只能跃迁到第一激发态，跃迁几率为

$$P_{10} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^\tau \left\langle 1|\hat{H}'(t)|0\right\rangle e^{i(E_1-E_0)t/\hbar}dt\right|^2 = \frac{q^2\varepsilon^2}{2m\hbar\omega}\left|\int_0^\tau \langle 1|\hat{a}+\hat{a}^{\dagger}|0\rangle e^{i\omega t}dt\right|^2 = \frac{2q^2\varepsilon^2\sin^2(\omega\tau/2)}{\hbar\omega^3}.$$

因此，保留在基态的概率为

$$P_{00} = 1 - P_{10} = 1 - \frac{2q^2\varepsilon^2\sin^2(\omega\tau/2)}{\hbar\omega^3}.$$

5. 两个自旋为零，质量为m的玻色子处在如下一维势井中，

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a; \\ \infty, & \text{其它情况}. \end{cases}$$

假设两个玻色子之间有如下相互作用，$\hat{H}' = -V_0\delta(x_1 - x_2)$, 其中，$V_0$为小量，$x_1$和$x_2$分别为两个玻色子的坐标。利用微扰理论计算系统的基态能量至一级近似。

参考答案：单粒子态为

$$E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}, \qquad |n\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, & 0 < x < a; \\ 0, & \text{其他情况}. \end{cases}$$

对于玻色子，没有$Pauli$不相容原理的限制，两个粒子可以处于同一个状态，即基态为

$$|\psi_0\rangle = |1\rangle|1\rangle = \frac{2}{a}\sin\frac{n\pi x_1}{a}\sin\frac{n\pi x_2}{a}.$$

能量的一级修正为

$$\begin{aligned} E_g^{(1)} &= \left\langle \psi_0|\hat{H}'|\psi_0\right\rangle = -\frac{2V_0}{a}\int_0^a dx_1\int_0^a dx_2\delta(x_1 - x_2)\sin^2\frac{\pi x_1}{a}\sin^2\frac{\pi x_2}{a} \\ &= -\frac{2V_0}{a}\int_0^a dx_1\sin^4\frac{\pi x_1}{a} = -\frac{3}{4}V_0. \end{aligned}$$

因此一级近似下的基态能量为

$$E_g = 2E_1 + E_g^{(1)} = \frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2} - \frac{3}{4}V_0.$$

6.假设我们在用变分法计算一维简谐振子的基态能量时得到的值为$0.6\hbar\omega$，请给出试探基态$|\tilde{0}\rangle$与真正基态$|0\rangle$的最小重合度，即$|\langle\tilde{0}|0\rangle|^2$的最小值。

参考答案：基态试探波函数可以在一维谐振子完备空间中展开，即

$$\left|\tilde{0}\right\rangle = \sum_n c_n \left|\psi_n\right\rangle.$$

因此在此试探波函数下的能量为

$$\langle E\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n,$$

其中$E_n = (n+1/2)\,\hbar\omega$是一维谐振子的本征能量。可以看出，在给定$\langle E\rangle = 0.6\hbar\omega$的情况下，要使$\left|\langle\tilde{0}|0\rangle\right|^2$最小意味着除了基态分量外就只包含第一激发态，

$$\langle E\rangle = \alpha^2 E_0 + \left(1-\alpha^2\right) E_1 = \left(\frac{3}{2} - \alpha^2\right)\hbar\omega = 0.6\hbar\omega,$$

$$\alpha^2 = 0.9.$$

即

$$\left|\langle\tilde{0}|0\rangle\right|^2_{\min} = 0.9.$$

7. 一个质量为m，动量为$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$的粒子被汤川势$V(r) = V_0\frac{ae^{-r/a}}{r}$散射，其中$V_0 > 0$，$a > 0$。利用玻恩近似计算微分散射截面和总散射截面。

参考答案：根据玻恩近似的微分散射截面公式，我们有

$$\sigma(\theta,\phi) = \frac{4m^2V_0^2a^2}{\hbar^4q^2}\left|\int_0^\infty e^{-r/a}\sin(qr)\,dr\right|^2 = \frac{4m^2V_0^2a^6}{\hbar^4\left(1+4k^2a^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^2}.\quad (q = 2k\sin\frac{\theta}{2})$$

总散射截面为

$$\sigma_t = \int\sigma(\theta,\phi)\,d\Omega = \frac{4m^2V_0^2a^6}{\hbar^4}\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^\pi d\theta\frac{1}{\left(1+4k^2a^2\sin^2\frac{\theta}{2}\right)^2} = \frac{16m^2V_0^2a^6}{\hbar^4\left(1+4k^2a^2\right)}.$$

8. 考虑一个质量为m的低能粒子对如下硬球势的散射，

$$V(r)=\begin{cases}0,\ r>r_0;\\ \infty,\ r<r_0.\end{cases}$$

只考虑s波散射，计算微分散射截面和总散射截面。

参考答案：根据处理中心立场问题的一般方法，在只考虑s分波的情况下，令$u(r)=rR_0(r)$，则$r>r_0$时的径向方程为

$$\frac{d}{dr}u(r)+k^2u(r)=0.$$

对于硬球势，我们有$u(r_0)=0$，因此s波的通解为

$$u(r)=\begin{cases}A\sin\left(k\left(r-r_0\right)\right),\ r>r_0;\\ 0,\qquad\qquad r\le r_0.\end{cases}$$

这里，$k=\sqrt{2mE}/\hbar$。根据相移的定义，我们有相移$\delta_0=-kr_0$。因此，s分波散射振幅为

$$f_0\left(\theta,\phi\right)=-\frac{1}{k}e^{-ikr_0}\sin\left(kr_0\right). \tag{1}$$

因为只考虑s分波，所以微分散射截面为

$$\sigma\left(\theta,\phi\right)=\left|f_0\left(\theta,\phi\right)\right|^2=\frac{\sin^2\left(kr_0\right)}{k^2}.$$

总散射截面为

$$\sigma_t=\frac{4\pi}{k^2}\sin^2\left(kr_0\right).$$

对于低能散射，$kr_0\ll 1$，因此

$$\sigma\left(\theta,\phi\right)\approx r_0^2,\quad \sigma_t=4\pi r_0^2.$$

9. 考虑两个质量为m，自旋为1/2非极化的全同粒子的散射，它们之间的相互作用为

$$V(r)=\begin{cases}-V_0\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2,\quad r\le a;\\ 0\qquad\qquad\quad r>a.\end{cases}$$

其中，$\boldsymbol{\sigma}_1$和$\boldsymbol{\sigma}_2$是泡利矩阵，$V_0>0$。在低能近似下，只考虑s分波，计算微分散射截面和总散射截面。

参考答案：根据相互作用的形式，两粒子波函数自旋和空间部分可以分离。只考虑s分波，则波函数的空间部分是对称的，根据$Pauli$原理，自旋部分必须反对称，所以自旋部分是单重态。根据

$$\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 = \frac{2}{\hbar^2}\left[\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2\right] = 2\left[S\left(S+1\right) - S_1\left(S_1+1\right) - S_2\left(S_2+1\right)\right],$$

其中$S_1 = S_2 = 1/2$，$S = 0$(单重态)，我们可以得到此时的相互作用为

$$V(r) = \begin{cases} 3V_0, & r \leq a; \\ 0, & r > a. \end{cases}$$

对于s分波，径向方程为

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2}u\left(r\right) - \kappa^2 u\left(r\right) &= 0, \quad (r \leq a); \\ \frac{d^2}{dr^2}u\left(r\right) + k^2 u\left(r\right) &= 0, \quad (r > a). \end{aligned}$$

其中$\kappa^2 = 2\mu\left(3V_0 - E\right)/\hbar^2$，$k^2 = 2\mu E/\hbar^2$。这里$\mu = m/2$是约化质量。根据中心力场的要求，$u(r)$满足

$$u(0) = 0,$$

因此，在$r < a$的区域

$$u(r) = A(e^{\kappa r} - e^{-\kappa r}).$$

在$r \geq a$的区域，$u(r)$可以写为

$$u(r) = B\sin\left(kr + \delta_0\right).$$

根据解的形式，我们发δ_0就是相移。利用$r = a$处波函数及其导数连续的条件，有

$$\frac{\tan(ka+\delta_0)}{k} = \frac{\tanh(\kappa a)}{\kappa},$$

解得

$$\delta_0 = \arctan\left(\frac{k}{\kappa}\tanh(\kappa a) - ka\right).$$

低能粒子满足$k \ll 1$，$k \ll \kappa \approx \kappa_0$，其中$\kappa_0^2 = 6\mu V_0/\hbar^2$，因此，

$$\delta_0 \approx ka\left(\frac{\tanh(\kappa_0 a)}{\kappa_0 a} - 1\right).$$

考虑到全同性，散射截面为

$$\sigma\left(\theta, \phi\right) = \left|f(\theta,\phi) + f(\pi-\theta, \pi+\phi)\right|^2 = \frac{4}{k^2}\sin^2\delta_0.$$

对于s波散射，没有三重态的贡献，所以，总散射截面为

$$\sigma_t = \frac{1}{4}\int \sigma\left(\theta, \phi\right) d\Omega = \frac{4\pi}{k^2}\delta_0^2 = 4\pi a^2 \left(\frac{\tanh(\kappa_0 a)}{\kappa_0 a} - 1\right)^2,$$

其中，$\kappa_0 = \sqrt{3mV_0}/\hbar$。