#《量子力学 A》2024 年秋季学期 1 班期中考试（参考答案）

题目在第 3-4 页。下面结果可以直接使用，其中**黑体**符号为三分量的矢量：

- Heisenberg 运动方程：$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle\hat{O}\rangle = \langle\frac{\partial\hat{O}}{\partial t}\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{O}]\rangle$
- 一维谐振子：$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{m\omega^2}{2}x^2$。定义升降算符：$\hat{a}_{\mp} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} \pm \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$，

  则有 $[\hat{a}_-,\hat{a}_+] = 1$，$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\right)$. $\hat{H}$的基态$|\psi_0\rangle$满足$\hat{a}_-|\psi_0\rangle = 0$,波函数为

  $\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$；激发态为$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n|\psi_0\rangle$，能量 $E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$
- 高斯积分：$\int_{-\infty}^{\infty}x^{2n}e^{-x^2/2a}\mathrm{d}x = (2n-1)!!\cdot a^n\cdot\sqrt{2\pi a}$，这里$n$为非负整数，$a>0$.
- 中心势问题：$\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(r)$，这里$\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$为三维动量算符，$r = |\boldsymbol{r}|$为半径。在球坐标$(r,\theta,\phi)$下，

  本征函数一般为$\psi_{E,l,m}(r,\theta,\phi) = \frac{u(r)}{r}\cdot Y_l^m(\theta,\phi)$，这里$Y_l^m(\theta,\phi)$为球谐函数，$u(r)$满足径向方程

  $\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_r^2 + V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}\right]u(r) = E\cdot u(r)$；量子数$l$为非负整数，$m = -l,-l+1,\ldots,l$。
- 角动量：满足对易关系 $[\hat{J}_x,\hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z$，$[\hat{J}_y,\hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x$，$[\hat{J}_z,\hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$。

  定义角动量升降算符 $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$，有 $[\hat{J}_z,\hat{J}_\pm] = \pm\hbar\hat{J}_\pm$，$\hat{\boldsymbol{J}}^2 \equiv \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_\mp\hat{J}_\pm + \hat{J}_z^2 \pm \hbar\hat{J}_z$。

  $\hat{\boldsymbol{J}}^2$和$\hat{J}_z$的正交归一共同本征态$|j,m\rangle$满足 $\hat{\boldsymbol{J}}^2|j,m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j,m\rangle$，$\hat{J}_z|j,m\rangle = \hbar m|j,m\rangle$，和

  $\hat{J}_\pm|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}|j,m\pm 1\rangle$ （需要满足 Condon-Shortley 相位约定）。
  - 轨道角动量 $\hat{\boldsymbol{L}} = \hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$。在球坐标下，$\hat{\boldsymbol{L}}$与半径$r$无关，$\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2mr^2}\partial_r(r^2\partial_r) + \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{2mr^2}$。

    球谐函数$Y_l^m(\theta,\phi)$是$\hat{\boldsymbol{L}}^2$和$\hat{L}_z$的正交归一本征函数，$\int_0^\pi\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\,(Y_l^m)^*Y_{l'}^{m'} = \delta_{l,l'}\delta_{m,m'}$。

    $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$，$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$，$Y_1^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\,e^{\pm i\phi},\ldots$
  - 自旋1/2：常用基矢为 $|\uparrow\rangle \equiv \left|j=\frac{1}{2},j_z=+\frac{1}{2}\right\rangle$，$|\downarrow\rangle \equiv \left|j=\frac{1}{2},j_z=-\frac{1}{2}\right\rangle$，在这组基矢下，

    自旋角动量算符为 $\hat{S}_a = \frac{\hbar}{2}\sigma_a$，其中 Pauli 矩阵$\sigma_a$为$\sigma_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix}$，$\sigma_y = \begin{pmatrix}0 & -i\\i & 0\end{pmatrix}$，$\sigma_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$，

    满足矩阵乘法规则 $\sigma_a\sigma_b = \delta_{a,b}\sigma_0 + i\sum_c\epsilon_{abc}\sigma_c$，这里$\sigma_0$是$2\times2$恒等矩阵；

    在这组基矢下，一般的自旋1/2量子态$\psi_\uparrow|\uparrow\rangle + \psi_\downarrow|\downarrow\rangle$可以表示为 $\begin{pmatrix}\psi_\uparrow\\\psi_\downarrow\end{pmatrix}$

下面 Clebsch-Gordon 系数表可以直接使用：

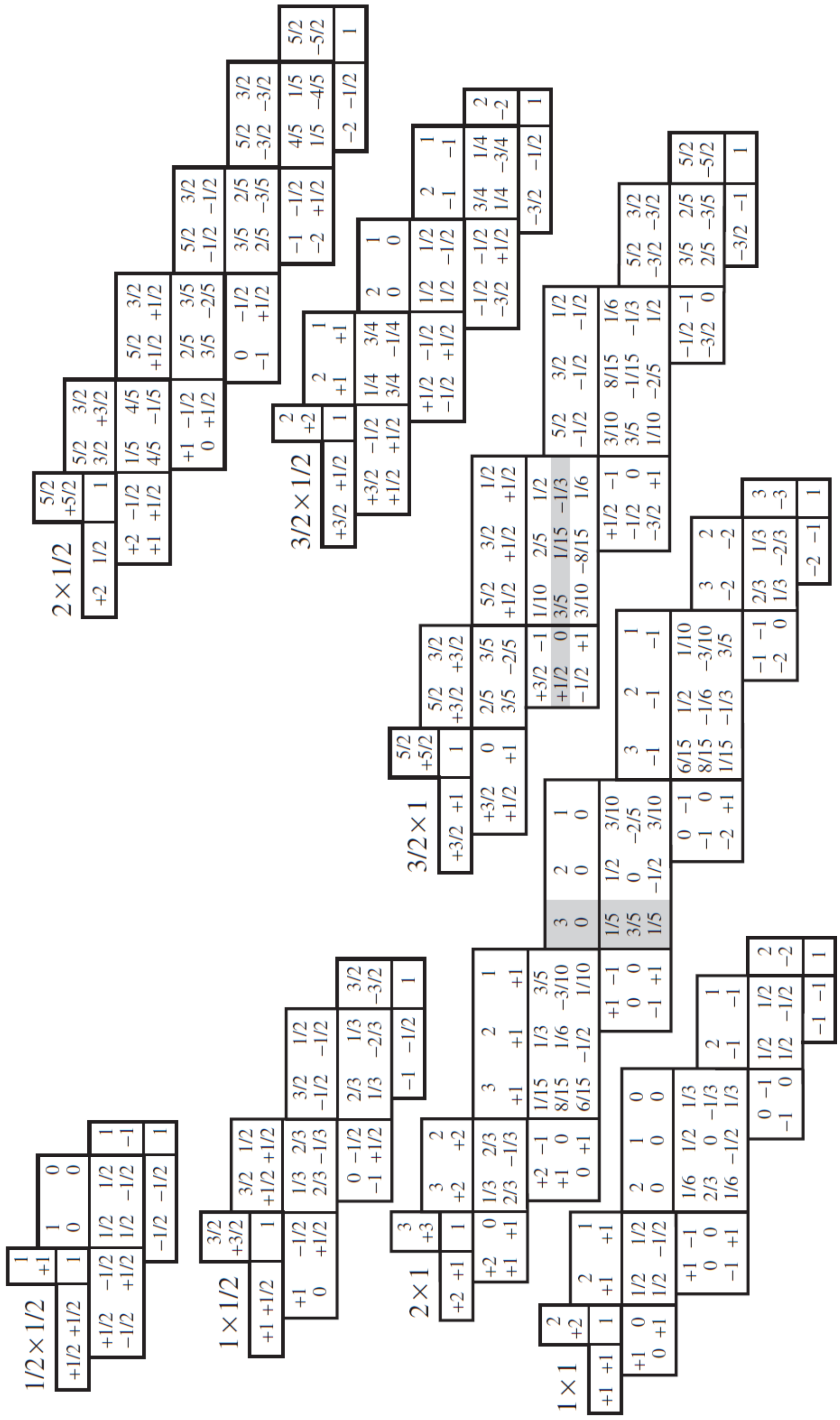


Table 4.8: Clebsch–Gordan coefficients. (A square root sign is understood for every entry; the minus sign, if present, goes outside the radical.)

第 1 题（35 分）：考虑一维谐振子$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$（见第 1 页）。

(a)（5 分）初态波函数为$\psi(x,t=0)=(Ax+Bx^3)\cdot\psi_0(x)$，这里$\psi_0(x)$是基态波函数（见第 1 页）。为使$\psi(x,t=0)$归一化，求复数系数$A,B$需要满足的条件。

(b)（5 分）在(a)中波函数下测量能量（即测量$\hat{H}$），求所有可能的测量结果和相应的概率。

(c)（5 分）波函数按照题干中$\hat{H}$对应的 Schrödinger 方程演化，求出t时刻波函数$\psi(x,t)$的显式表达式。

(d)（20 分*）对(c)中$\psi(x,t)$计算下列期待值：$\langle\hat{x}\rangle$，$\langle\hat{x}^2\rangle$，$\langle\hat{p}\rangle$，$\langle\hat{p}^2\rangle$。验证$\hat{x}$和$\hat{p}$之间的不确定度关系。

解答：

(a) 方法 1：用升降算符将$\psi(x,t=0)$表为本征态的叠加

$$\hat{x}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_-+\hat{a}_+)$$

$$\hat{x}^3=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}(\hat{a}_-+\hat{a}_+)^3=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}(\hat{a}_-+\hat{a}_+)(\hat{a}_-^2+2\hat{a}_+\hat{a}_-+\hat{a}_+^2+1)$$

$$=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}(\hat{a}_-^3+3\hat{a}_+\hat{a}_-^2+3\hat{a}_+^2\hat{a}_-+\hat{a}_+^3+3\hat{a}_-+3\hat{a}_+)$$

因此

$$\psi(x,t=0)=\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}A+3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\right)\psi_1(x)+\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\sqrt{6}\psi_3(x)$$

归一化条件为 $\left|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}A+3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\right|^2+\left|\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\sqrt{6}\right|^2=1$

即

$$\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\left[\left|A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right|^2+6\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2|B|^2\right]=1$$

方法 2：直接计算积分

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x,t=0)|^2\,\mathrm{d}x=|A|^2\langle x^2\rangle_0+(A^*B+B^*A)\langle x^4\rangle_0+|B|^2\langle x^6\rangle_0$$

这里$\langle\ldots\rangle_0$是在$\psi_0(x)$下的期待值，

利用第 1 页的高斯积分公式，$\langle x^2\rangle_0=\frac{\hbar}{2m\omega}$，$\langle x^4\rangle_0=3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2$，$\langle x^6\rangle_0=15\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^3$，

$$\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\left[|A|^2+(A^*B+B^*A)\cdot3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)+|B|^2\cdot15\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2\right]=1$$

(b) 可能结果为（如假设(a)中归一化条件已满足，下面表达式可简化）

$E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$, 概率$P_1=\frac{\left|A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right|^2}{\left|A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right|^2+6\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2|B|^2}$;

$E_3=\frac{7}{2}\hbar\omega$, 概率$P_3=\frac{6\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2|B|^2}{\left|A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right|^2+6\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2|B|^2}$

(c) 由(a)的方法 1 可得，

$\psi_1(x)=\hat{a}_+\psi_0(x)=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\psi_0(x)$ ，（$B=0, A=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}$）；

$\psi_3(x)=\frac{\hat{a}_+^3}{\sqrt{6}}\psi_0(x)=\left[\frac{1}{\sqrt{6}}\left(\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\right)^3-\frac{3}{\sqrt{6}}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\right]\psi_0(x)$，（$B=\frac{1}{\sqrt{6}}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}, A=-\frac{3}{\sqrt{6}}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}$）

$$\psi(x,t)=e^{-i\left(\frac{3\omega t}{2}\right)}\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}A+3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\right)\psi_1(x)+e^{-i\left(\frac{7\omega t}{2}\right)}\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\sqrt{6}\psi_3(x)$$

$$=\left[e^{-3i\omega t/2}\left(A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right)x+e^{-7i\omega t/2}\left(x^3-\frac{3\hbar}{2m\omega}x\right)B\right]\psi_0(x)$$

$$=\left[e^{-3i\omega t/2}\left(A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right)x+e^{-7i\omega t/2}\left(x^3-\frac{3\hbar}{2m\omega}x\right)B\right]\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

(d) $\psi(x,t)$始终为奇函数，因此 $\langle\hat{x}\rangle=0$，$\langle\hat{p}\rangle=0$，

$$\hat{x}^2=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)(\hat{a}_-^2+2\hat{a}_+\hat{a}_-+\hat{a}_+^2+1)$$

$$\hat{p}^2=\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)(-\hat{a}_-^2+2\hat{a}_+\hat{a}_--\hat{a}_+^2+1)$$

因此（设A,B满足(a)中归一化条件）

$$\langle\hat{x}^2\rangle=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)\left\{1+\left|\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}A+3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\right)\right|^2\cdot 2+\left|\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\sqrt{6}\right|^2\cdot 6\right.$$

$$\left.+2\mathrm{Re}\left[\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}A+3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\right)^*\cdot\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\sqrt{6}\cdot e^{-2i\omega t}\cdot\sqrt{6}\right]\right\}$$

$$=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)$$

$$+\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2\left\{\left|\left(A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right)\right|^2\cdot 2+\left|\frac{\sqrt{6}\hbar}{2m\omega}B\right|^2\cdot 6+2\mathrm{Re}\left[\left(A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right)^*\cdot\frac{3\hbar}{m\omega}B\cdot e^{-2i\omega t}\right]\right\}$$

$$\langle\hat{p}^2\rangle=\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)\left\{1+\left|\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}A+3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\right)\right|^2\cdot 2+\left|\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\sqrt{6}\right|^2\cdot 6\right.$$

$$\left.-2\mathrm{Re}\left[\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}A+3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\right)^*\cdot\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\sqrt{6}\cdot e^{-2i\omega t}\cdot\sqrt{6}\right]\right\}$$

$$=\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)$$

$$+\frac{\hbar^2}{4}\left\{\left|\left(A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right)\right|^2\cdot 2+\left|\frac{\sqrt{6}\hbar}{2m\omega}B\right|^2\cdot 6-2\mathrm{Re}\left[\left(A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right)^*\cdot\frac{3\hbar}{m\omega}B\cdot e^{-2i\omega t}\right]\right\}$$

很明显有$\langle\hat{x}^2\rangle\geq\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)$，$\langle\hat{p}^2\rangle\geq\left(\frac{\hbar m\omega}{2}\right)$，满足不确定度关系

$$(\langle\hat{x}^2\rangle-\langle\hat{x}\rangle^2)(\langle\hat{p}^2\rangle-\langle\hat{p}\rangle^2)\geq\frac{\hbar^2}{4}$$

另一种求$\langle\hat{x}^2\rangle$和$\langle\hat{p}^2\rangle$的方法：利用 Heisenberg 运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle\hat{H}\rangle=0$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle\hat{a}_-^2\rangle=\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{a}_-^2]\rangle=-2i\omega\langle\hat{a}_-^2\rangle$$

得

$$\langle\hat{H}\rangle(t)=\langle\hat{H}\rangle(t=0)=\frac{3}{2}\hbar\omega\cdot\left|A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right|^2+\frac{7}{2}\hbar\omega\cdot 6\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2|B|^2$$

$$\langle\hat{a}_-^2\rangle(t)=\langle\hat{a}_-^2\rangle(t=0)\,e^{-2i\omega t}=\sqrt{6}\cdot\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}A+3\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\right)^*\cdot\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}B\sqrt{6}\cdot e^{-2i\omega t}$$

$$=6\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2\left(A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right)^*Be^{-2i\omega t}$$

由 $\hat{H}=\frac{m\omega^2}{2}\left(\hat{x}^2+\frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2}\right)$ 和 $\hat{a}_-^2=\frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{x}^2-\frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2}+\frac{i(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x})}{m\omega}\right)$ 得

$$\langle\hat{x}^2+\frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2}\rangle(t)=\frac{3\hbar}{m\omega}\cdot\left|A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right|^2+\frac{7\hbar}{m\omega}\cdot 6\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^2|B|^2$$

$$\langle\hat{x}^2-\frac{\hat{p}^2}{m^2\omega^2}\rangle(t)=\mathrm{Re}\left[3\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^3\left(A+\frac{3\hbar}{2m\omega}B\right)^*Be^{-2i\omega t}\right]$$

由此可以求出$\langle\hat{x}^2\rangle(t)$和$\langle\hat{p}^2\rangle(t)$。

第 2 题（25 分）：考虑一维非相对论性粒子$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x})$，势能$V(x)$为一个有限深方势阱与 δ 势之和，

$V(x)=\begin{cases}-V_0+V_1a\cdot\delta(x), & |x|<a\\ 0, & |x|>a\end{cases}$，这里$V_0,V_1,a$都是正的常量。

(a)（10 分）假设能量最低的三个本征态为束缚态，定性画出它们的波函数。

(b)（10 分*）设束缚态能量为$E\in(-V_0,0)$，定义势阱内部的波矢$k=\sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$，求k需要满足的方程［注意：最后的方程中不应含有其它未知量］。

(c)（5 分**）根据(b)中方程，求出存在束缚态时V_0,V_1,a需要满足的条件。

解答：

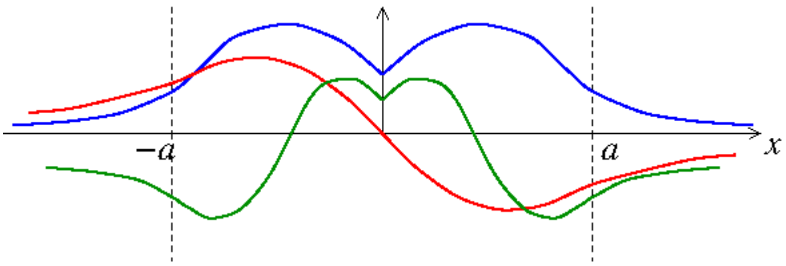
(a) 有下列定性性质，

束缚态在势阱外向$x\to\pm\infty$方向指数衰减；在势阱内为驻波；在$x=\pm a$处光滑；

基态（示意图中蓝色曲线）为偶函数，无节点，在$x=0$处有朝向x轴的 cusp；

第一激发态（红色）为奇函数，在$x=0$处有唯一节点且光滑；

第二激发态（绿色）为偶函数，有两个位置正负对称的节点在势阱范围内，在$x=0$处有朝向x轴的 cusp



(b) 因为势能满足$V(x)=V(-x)$，束缚态本征函数为偶函数或奇函数，

满足“边界条件”[$x=-a$处的边界条件与$x=a$处相同]

在$x=0$处：　　$\psi(+0)=\psi(-0)$，$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x\psi|_{x=-0}^{+0}+V_1a\cdot\psi(0)=0$；

在$x=-a$处：　　$\psi(a+0)=\psi(a-0)$，$\partial_x\psi|_{x=a+0}=\partial_x\psi|_{x=a-0}$

定义$\kappa=\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}=\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}-k^2}$

偶函数解：A,B,ϕ为待定常数，

$$\psi(x)=\begin{cases}A\cos(k|x|-\phi), & |x|<a\\ B\,e^{-\kappa|x|}, & |x|>a\end{cases}$$

$x=0$处的边界条件为[$\psi(+0)=\psi(-0)$自动满足]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\cdot(-2kA\,\sin(-\phi))+V_1a\cdot A\,\cos(-\phi)=0$$

即

$$\tan\phi = \frac{mV_1 a}{\hbar^2 k}$$

$x = a$处的边界条件为[$x = -a$处的边界条件完全相同]

$$A\cos(ka-\phi) = Be^{-\kappa a}$$

$$-kA\ \sin(ka-\phi) = -\kappa Be^{-\kappa a}$$

即

$$k\ \tan(ka-\phi) = \kappa$$

利用 $\tan(x-y) = \frac{\tan x - \tan y}{1+\tan x \tan y}$，消去$\tan\phi$得

$$\frac{k\left(\tan(ka) - \frac{mV_1 a}{\hbar^2 k}\right)}{1 + \tan(ka)\cdot\frac{mV_1 a}{\hbar^2 k}} = \kappa = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}$$

奇函数解：和有限深方势阱相同

$$\psi(x) = \begin{cases} A\sin(kx), & |x| < a \\ \mathrm{sgn}(x)\, B\, e^{-\kappa|x|}, & |x| > a \end{cases}$$

$x = 0$处的边界条件自动满足

$x = a$处的边界条件为[$x = -a$处的边界条件完全相同]

$$A\sin(ka) = Be^{-\kappa a}$$

$$kA\ \cos(ka) = -\kappa Be^{-\kappa a}$$

即

$$-k\cot(ka) = \kappa = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}$$

(c)

偶函数解存在条件为 $ka - \arctan\left(\frac{mV_1 a}{\hbar^2 k}\right) = 0$的第一个$k$的解小于$\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$, 方程左边关于 k 单调，因此这个条件等效于$\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}\ a > \arctan\left(\frac{mV_1 a}{\hbar^2\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}}\right)$;

奇函数解存在条件为 $\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} > \frac{\pi^2}{4}$，此时必有偶函数解，因为 $\arctan(\ldots) < \frac{\pi}{2}$;

因此存在束缚态的条件为$\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}\ a > \arctan\left(\frac{mV_1 a}{\hbar^2\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}}\right)$

注:在$a \to 0$的极限下,偶函数解存在条件简化为$2V_0 > V_1$,势能为一个 δ 势,$V(x) \to (-2V_0 + V_1)a\cdot\delta(x)$

第 3 题（30 分）：考虑三维简谐势中的非相对论粒子，$\hat{H}=\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{\boldsymbol{r}}^2=\left(\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2\right)+\left(\frac{\hat{p}_y^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{y}^2\right)+\left(\frac{\hat{p}_z^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{z}^2\right)$。其基态波函数为$\psi_{0,0,0}(x,y,z)=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_0(z)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2\right)$，这里$\psi_0(r_a)$是一维谐振子基态波函数（见第 1 页）。

(a)（5 分）定义 4 个正交归一的波函数，$\varphi_1(x,y,z)=\psi_{0,0,0}(x,y,z)$，$\varphi_2(x,y,z)=A_2x\cdot\psi_{0,0,0}(x,y,z)$，$\varphi_3(x,y,z)=A_3y\cdot\psi_{0,0,0}(x,y,z)$，$\varphi_4(x,y,z)=A_4z\cdot\psi_{0,0,0}(x,y,z)$。求出归一化因子$A_2,A_3,A_4$［为方便确定后面题目的结果，设它们为正实数］。

(b)（15 分）计算轨道角动量算符$\hat{L}_x,\hat{L}_y,\hat{L}_z$在(a)中基矢下的矩阵形式，即计算$\left(\hat{L}_a\right)_{i,j}\equiv\langle\varphi_i|\hat{L}_a|\varphi_j\rangle$，其中$a=x,y,z$；$i,j=1,2,3,4$。［提示：利用第 1 页的一些信息］

(c)（10 分*）考虑具有自旋$S=1/2$的粒子，设其状态为$\frac{1}{2}[|\varphi_1(\boldsymbol{r})\rangle|\downarrow\rangle+|\varphi_2(\boldsymbol{r})\rangle|\uparrow\rangle+|\varphi_3(\boldsymbol{r})\rangle|\uparrow\rangle+|\varphi_4(\boldsymbol{r})\rangle|\uparrow\rangle]$。定义总角动量$\hat{\boldsymbol{J}}=\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{S}}$。求测量$\hat{\boldsymbol{J}}^2$和$\hat{J}_z$的所有可能结果的组合$(\alpha,\beta)$、相应的概率$P_{\alpha,\beta}$、和坍缩后的状态$|\hat{\boldsymbol{J}}^2=\alpha,\hat{J}_z=\beta\rangle$［用$|\varphi_i(\boldsymbol{r})\rangle|\uparrow\rangle,|\varphi_i(\boldsymbol{r})\rangle|\downarrow\rangle$的线性组合表示］。

解答：

(a) 参考第 1 题，可知

$$\varphi_2(x,y,z)=\psi_{1,0,0}(x,y,z)=\psi_1(x)\psi_0(y)\psi_0(z)=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\cdot\psi_{0,0,0}(x,y,z)$$

$$\varphi_3(x,y,z)=\psi_{0,1,0}(x,y,z)=\psi_0(x)\psi_1(y)\psi_0(z)=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}y\cdot\psi_{0,0,0}(x,y,z)$$

$$\varphi_4(x,y,z)=\psi_{0,0,1}(x,y,z)=\psi_0(x)\psi_0(y)\psi_1(z)=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}z\cdot\psi_{0,0,0}(x,y,z)$$

因此$A_2=A_3=A_4=\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}$

也可以通过$|A_2|^2\langle x^2\rangle_{0,0,0}=|A_3|^2\langle y^2\rangle_{0,0,0}=|A_4|^2\langle z^2\rangle_{0,0,0}=1$求解，这里$\langle\ldots\rangle_{0,0,0}$是在$\psi_{0,0,0}(x,y,z)$下的期待值，可以用高斯积分计算。

(b) 计算所有矩阵元比较高效的方法是计算算符对每个基矢的作用，再将结果用基矢展开，

$$\hat{O}|\varphi_j\rangle = \sum_i |\varphi_i\rangle(\hat{O})_{i,j}$$

方法 1：可以将$\varphi_i(\boldsymbol{r})$用球坐标表示并和球谐函数比较，

$$\varphi_1(\boldsymbol{r}) = Y_0^0(\theta,\phi)\cdot\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\sqrt{4\pi}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2}$$

$$\varphi_2(\boldsymbol{r}) = [Y_1^{-1}(\theta,\phi) - Y_1^{+1}(\theta,\phi)]\cdot\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\sqrt{\frac{2\pi}{3}}re^{-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2}$$

$$\varphi_3(\boldsymbol{r}) = i[Y_1^{-1}(\theta,\phi) + Y_1^{+1}(\theta,\phi)]\cdot\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\sqrt{\frac{2\pi}{3}}re^{-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2}$$

$$\varphi_1(\boldsymbol{r}) = Y_1^0(\theta,\phi)\cdot\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\sqrt{\frac{4\pi}{3}}re^{-\frac{m\omega}{2\hbar}r^2}$$

再利用球谐函数是$\hat{\boldsymbol{L}}^2$和$\hat{L}_z$的正交归一本征函数计算$\hat{L}_a\varphi_i(\boldsymbol{r})$

方法 2：用$\hat{L}_a$的直角坐标形式，$\hat{L}_a = -i\hbar\epsilon_{abc}r_b\partial_{r_c}$，以及$\hat{L}_a$与半径$r$无关的性质，$\hat{L}_a\big(g(x,y,z)f(r)\big) = \hat{L}_a\big(g(x,y,z)\big)\cdot f(r)$，容易求得

$$\hat{L}_a\varphi_1(\boldsymbol{r}) = 0$$

$$\hat{L}_x\varphi_2(\boldsymbol{r}) = 0, \hat{L}_x\varphi_3(\boldsymbol{r}) = +i\hbar\varphi_4(\boldsymbol{r}), \hat{L}_x\varphi_4(\boldsymbol{r}) = -i\hbar\varphi_3(\boldsymbol{r})$$

$$\hat{L}_y\varphi_3(\boldsymbol{r}) = 0, \hat{L}_y\varphi_4(\boldsymbol{r}) = +i\hbar\varphi_2(\boldsymbol{r}), \hat{L}_y\varphi_2(\boldsymbol{r}) = -i\hbar\varphi_4(\boldsymbol{r})$$

$$\hat{L}_z\varphi_4(\boldsymbol{r}) = 0, \hat{L}_z\varphi_2(\boldsymbol{r}) = +i\hbar\varphi_3(\boldsymbol{r}), \hat{L}_z\varphi_3(\boldsymbol{r}) = -i\hbar\varphi_2(\boldsymbol{r})$$

因此

$$(\hat{L}_x)_{i,j} = \hbar\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&-i\\0&0&+i&0\end{pmatrix}, (\hat{L}_y)_{i,j} = \hbar\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&0&+i\\0&0&0&0\\0&-i&0&0\end{pmatrix}, (\hat{L}_z)_{i,j} = \hbar\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&0&-i&0\\0&+i&0&0\\0&0&0&0\end{pmatrix}$$

(c) 与作业题 4.40(b)类似，

轨道波函数的 Hilbert 空间为一个$l=0$和一个$l=1$的直和, 因此总的 Hilbert 空间为，

$$(\mathcal{H}_{l=0}\oplus\mathcal{H}_{l=1})\otimes\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}} = \left(\mathcal{H}_{l=0}\otimes\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}}\right)\oplus\left(\mathcal{H}_{l=1}\otimes\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}}\right) = \mathcal{H}_{j=\frac{1}{2}}\oplus\left(\mathcal{H}_{j=\frac{1}{2}}\oplus\mathcal{H}_{j=\frac{3}{2}}\right)$$

根据与球谐函数的比较，轨道角动量的本征基矢为，$|l=0,m=0\rangle\equiv\varphi_1(\boldsymbol{r})$，$|l=1,m=0\rangle\equiv\varphi_4(\boldsymbol{r})$，$|l=1,m=-1\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_2(\boldsymbol{r})-i\varphi_3(\boldsymbol{r})]$，$|l=1,m=1\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}[-\varphi_2(\boldsymbol{r})-i\varphi_3(\boldsymbol{r})]$

因此该粒子的状态（以下记为$|\psi\rangle$）为

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}[|\varphi_1(\boldsymbol{r})\rangle|\downarrow\rangle + |\varphi_2(\boldsymbol{r})\rangle|\uparrow\rangle + |\varphi_3(\boldsymbol{r})\rangle|\uparrow\rangle + |\varphi_4(\boldsymbol{r})\rangle|\uparrow\rangle]$$

$$= \frac{1}{2}\Big[|l=0,m=0\rangle|\downarrow\rangle + |l=1,m=0\rangle|\uparrow\rangle + \frac{1+i}{\sqrt{2}}|l=1,m=-1\rangle|\uparrow\rangle + \frac{-1+i}{\sqrt{2}}|l=1,m=1\rangle|\uparrow\rangle\Big]$$

相关的总角动量本征态为

$$\left|J=\frac{1}{2},J_z=-\frac{1}{2},l=0\right\rangle = |l=0,m=0\rangle|\downarrow\rangle$$

$$\left|J=\frac{3}{2},J_z=\frac{3}{2},l=1\right\rangle = |l=1,m=1\rangle|\uparrow\rangle$$

$$\left|J=\frac{3}{2},J_z=\frac{1}{2},l=1\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|l=1,m=0\rangle|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|l=1,m=1\rangle|\downarrow\rangle$$

$$\left|J=\frac{3}{2},J_z=-\frac{1}{2},l=1\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|l=1,m=-1\rangle|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|l=1,m=0\rangle|\downarrow\rangle$$

$$\left|J=\frac{1}{2},J_z=\frac{1}{2},l=1\right\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}}|l=1,m=0\rangle|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|l=1,m=1\rangle|\downarrow\rangle$$

$$\left|J=\frac{1}{2},J_z=-\frac{1}{2},l=1\right\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}}|l=1,m=-1\rangle|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|l=1,m=0\rangle|\downarrow\rangle$$

对测量结果 $\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \alpha = \hbar^2 j(j+1), \hat{J}_z = \beta = \hbar j_z$，
概率为 $P_{\alpha,\beta} = \sum_l |\langle J=j, J_z=j_z, l|\psi\rangle|^2$，
坍缩后的状态为 $\frac{1}{\sqrt{P_{\alpha,\beta}}}\sum_l |J=j,J_z=j_z,l\rangle\langle J=j,J_z=j_z,l|\psi\rangle$

结果如下

$(\alpha,\beta) = \left(\frac{15}{4}\hbar^2, \frac{3}{2}\hbar\right)$，$P_{\alpha,\beta} = \frac{1}{4}$，

坍缩后状态 $\left|J=\frac{3}{2},J_z=\frac{3}{2},l=1\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[-\varphi_2(\boldsymbol{r}) - i\varphi_3(\boldsymbol{r})]|\uparrow\rangle$；

$(\alpha,\beta) = \left(\frac{15}{4}\hbar^2, \frac{1}{2}\hbar\right)$，$P_{\alpha,\beta} = \frac{1}{6}$，

坍缩后状态 $\left|J=\frac{3}{2},J_z=\frac{1}{2},l=1\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\varphi_4(\boldsymbol{r})|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{6}}[-\varphi_2(\boldsymbol{r}) - i\varphi_3(\boldsymbol{r})]|\downarrow\rangle$

$(\alpha,\beta) = \left(\frac{15}{4}\hbar^2, -\frac{1}{2}\hbar\right)$，$P_{\alpha,\beta} = \frac{1}{12}$，

坍缩后状态 $\left|J=\frac{3}{2},J_z=-\frac{1}{2},l=1\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\varphi_4(\boldsymbol{r})|\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{6}}[\varphi_2(\boldsymbol{r}) - i\varphi_3(\boldsymbol{r})]|\downarrow\rangle$

$(\alpha,\beta)=\left(\frac{3}{4}\hbar^2,\frac{1}{2}\hbar\right)$，$P_{\alpha,\beta}=\frac{1}{12}$,

坍缩后状态 $\left|J=\frac{1}{2},J_z=\frac{1}{2},l=1\right\rangle=-\sqrt{\frac{1}{3}}\varphi_4(\boldsymbol{r})|\uparrow\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}[-\varphi_2(\boldsymbol{r})-i\varphi_3(\boldsymbol{r})]|\downarrow\rangle$

$(\alpha,\beta)=\left(\frac{3}{4}\hbar^2,-\frac{1}{2}\hbar\right)$，$P_{\alpha,\beta}=\frac{1}{4}+\frac{1}{6}=\frac{5}{12}$,

坍缩后状态$\sqrt{\frac{12}{5}}\left[\left|J=\frac{1}{2},J_z=-\frac{1}{2},l=0\right\rangle\cdot\frac{1}{2}+\left|J=\frac{1}{2},J_z=-\frac{1}{2},l=1\right\rangle\cdot\frac{1}{2}\left(-\frac{1+i}{\sqrt{3}}\right)\right]$

$$=\sqrt{\frac{3}{5}}\varphi_1(\boldsymbol{r})|\downarrow\rangle+\sqrt{\frac{1}{15}}(1+i)[\varphi_2(\boldsymbol{r})-i\varphi_3(\boldsymbol{r})]|\uparrow\rangle-\sqrt{\frac{1}{15}}(1+i)\varphi_4(\boldsymbol{r})|\downarrow\rangle$$

第 4 题（10 分**）：考虑三个$S=1/2$的自旋(用下标 1，2，3 标记)，整个 Hilbert 空间的完备正交基可以取为每个自旋基矢的张量积，$|S_1,S_{1,z};S_2,S_{2,z};S_3,S_{3,z}\rangle$ （简写为$|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle,|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle,\dots|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$）。考虑哈密顿量 $\hat{H}=J\left(\hat{\boldsymbol{S}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{S}}_2+\hat{\boldsymbol{S}}_2\cdot\hat{\boldsymbol{S}}_3+\hat{\boldsymbol{S}}_3\cdot\hat{\boldsymbol{S}}_1\right)=\frac{J}{2}\left(\hat{\boldsymbol{S}}_1+\hat{\boldsymbol{S}}_2+\hat{\boldsymbol{S}}_3\right)^2-\frac{9}{8}J\hbar^2$，这里$J$为正的常量。设初态为$|\psi(t=0)\rangle=|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$,计算期待值$\langle\psi(t)|\hat{S}_{1,z}|\psi(t)\rangle$。

解答：这是作业题 4.67(a, b)的拓展

可以先做$\hat{\boldsymbol{S}}_2$和$\hat{\boldsymbol{S}}_3$的角动量相加，再和$\hat{\boldsymbol{S}}_1$相加
定义$\hat{\boldsymbol{S}}_{2+3}\equiv\hat{\boldsymbol{S}}_2+\hat{\boldsymbol{S}}_3$, 和$\hat{\boldsymbol{S}}_{1+2+3}\equiv\hat{\boldsymbol{S}}_1+\hat{\boldsymbol{S}}_2+\hat{\boldsymbol{S}}_3$，
$\hat{\boldsymbol{S}}^2_{1+2+3}$，$\hat{\boldsymbol{S}}^2_{2+3}$，$\hat{S}_{1+2+3,z}$两两对易，
根据 C-G 定理，其共同本征态非简并，可以作为完备正交基

整个 Hilbert 空间为

$$\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}}\otimes\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}}\otimes\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}}=\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}}\otimes(\mathcal{H}_{s=0}\oplus\mathcal{H}_{s=1})=\left(\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}}\otimes\mathcal{H}_{s=0}\right)\oplus\left(\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}}\otimes\mathcal{H}_{s=1}\right)$$
$$=\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}}\oplus\left(\mathcal{H}_{s=\frac{1}{2}}\oplus\mathcal{H}_{s=\frac{3}{2}}\right)$$

能量只与$\hat{\boldsymbol{S}}^2_{1+2+3}$的本征值有关，

$E_{S=3/2}=\frac{3}{4}J\hbar^2$，对$|\mathrm{S}_{1+2+3}=\frac{3}{2},\mathrm{S}_{1+2}=1,\mathrm{S}_{1+2+3,z}\rangle$，$\mathrm{S}_{1+2+3,z}=-\frac{3}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{3}{2}$;

$E_{S=1/2}=-\frac{3}{4}J\hbar^2$，对$|\mathrm{S}_{1+2+3}=\frac{1}{2},\mathrm{S}_{1+2}=1,\mathrm{S}_{1+2+3,z}\rangle$和$|\mathrm{S}_{1+2+3}=\frac{1}{2},\mathrm{S}_{1+2}=0,\mathrm{S}_{1+2+3,z}\rangle$，$\mathrm{S}_{1+2+3,z}=-\frac{1}{2},\frac{1}{2}$

将初态$|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$分解为上面完备正交基，用到的基矢有（这里用到的 C-G 系数和第 3 题相同）

$$\left|\mathrm{S}_{1+2+3}=\frac{3}{2},\mathrm{S}_{1+2}=1,\mathrm{S}_{1+2+3,z}=\frac{1}{2}\right\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}|\uparrow\rangle|S_{2+3}=1,S_{2+3,z}=0\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}|\downarrow\rangle|S_{2+3}=1,S_{2+3,z}=1\rangle$$
$$=\frac{1}{\sqrt{3}}(|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle+|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle+|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle)$$

$$\left|\mathrm{S}_{1+2+3}=\frac{1}{2},\mathrm{S}_{1+2}=1,\mathrm{S}_{1+2+3,z}=\frac{1}{2}\right\rangle=-\sqrt{\frac{1}{3}}|\uparrow\rangle|S_{2+3}=1,S_{2+3,z}=0\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|\downarrow\rangle|S_{2+3}=1,S_{2+3,z}=1\rangle$$
$$=\frac{1}{\sqrt{6}}(2|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle-|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle-|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle)$$

得

$$|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\mathrm{S}_{1+2+3}=\frac{3}{2},\mathrm{S}_{1+2}=1,\mathrm{S}_{1+2+3,z}=\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\mathrm{S}_{1+2+3}=\frac{1}{2},\mathrm{S}_{1+2}=1,\mathrm{S}_{1+2+3,z}=\frac{1}{2}\right\rangle$$

因此

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\left(\frac{3J\hbar^2}{4\hbar}\right)t}\frac{1}{\sqrt{3}}\left|\mathrm{S}_{1+2+3}=\frac{3}{2},\mathrm{S}_{1+2}=1,\mathrm{S}_{1+2+3,z}=\frac{1}{2}\right\rangle$$
$$+e^{i\left(\frac{3J\hbar^2}{4\hbar}\right)t}\sqrt{\frac{2}{3}}\left|\mathrm{S}_{1+2+3}=\frac{1}{2},\mathrm{S}_{1+2}=1,\mathrm{S}_{1+2+3,z}=\frac{1}{2}\right\rangle$$
$$=|{\downarrow\uparrow\uparrow}\rangle\left(\frac{e^{-i\left(\frac{3J\hbar}{4}\right)t}}{3}+\frac{2e^{i\left(\frac{3J\hbar}{4\hbar}\right)t}}{3}\right)+\left(|{\uparrow\downarrow\uparrow}\rangle+|{\uparrow\uparrow\downarrow}\rangle\right)\left(\frac{e^{-i\left(\frac{3J\hbar}{4\hbar}\right)t}}{3}-\frac{e^{i\left(\frac{3J\hbar}{4\hbar}\right)t}}{3}\right)$$

因此

$$\langle\psi(t)|\hat{S}_{1,z}|\psi(t)\rangle=\frac{\hbar}{2}\left[2\cdot\left|\frac{e^{-i\left(\frac{3J\hbar}{4}\right)t}}{3}-\frac{e^{i\left(\frac{3J\hbar}{4}\right)t}}{3}\right|^2-\left|\frac{e^{-i\left(\frac{3J\hbar}{4}\right)t}}{3}+\frac{2e^{i\left(\frac{3J\hbar}{4}\right)t}}{3}\right|^2\right]=\frac{\hbar}{2}\left(-\frac{1}{9}-\frac{8}{9}\cos\left(\frac{3J\hbar t}{2}\right)\right)$$