作业一

截止日期：22.09.20

姓名: 董　建　宇
学号: 2019511017
成绩: ________

第 1 题 (最大-最小原理 (maximum-minimum principle)) 得分: ________. 令 H 为一有下界的 Hermitian 算符，其本征值为 $E_0 \le E_1 \le E_2 \le \cdots$，对应的本征态为 $|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \cdots$。

i) 令 $|b\rangle$ 为一任意态矢量，$F(b)$ 为

$$\frac{\langle\ |H|\ \rangle}{\langle\ |\ \rangle}$$

满足条件 $\langle b|\ \rangle = 0$ 的最小值。改变 $|b\rangle$ 证明 $F(b)$ 的最大值为 E_1。
提示：$F(b)$ 可以通过下列态矢量 $|\ \rangle = \langle b|1\rangle|0\rangle - \langle b|0\rangle|1\rangle$ 得到。

ii) 令 $|b_1\rangle, |b_2\rangle, \cdots |b_n\rangle$ 为任意态矢量，$F(b_1, b_2, \cdots, b_n)$ 为

$$\frac{\langle\ |H|\ \rangle}{\langle\ |\ \rangle}$$

满足条件 $\langle b_1|\ \rangle = \langle b_2|\ \rangle = \cdots = \langle b_n|\ \rangle = 0$ 的最小值。证明 $F(b_1, b_2, \cdots, b_n)$ 的最大值为 E_n。

解: i) 对于态矢量 $|\ \rangle$，总可以写成

$$|\ \rangle = \sum_{i=0}^{\infty} c_i |i\rangle.$$

可以计算 $F(b)$ 为

$$F(b) = \frac{\sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2 E_i}{\sum_{i=0}^{\infty} |c_i|^2}.$$

要使得 $F(b)$ 最小，则需要使 $|\ \rangle$ 处在由尽可能少且能量尽可能低的本征态张成的子空间中。此时，可以注意到，当 $F(b)$ 最小时，$|\ \rangle = |0\rangle$。但是由于 $|b\rangle$ 是任意的，可以选取 $|b\rangle = |0\rangle$ 使得 $\langle b|\ \rangle = 0$ 的条件不成立。所以 $|\ \rangle$ 不能在仅由 $|0\rangle$ 张成的子空间中。其次，考虑 $|\ \rangle$ 处在 $|0\rangle$ 与 $|1\rangle$ 张成的子空间中，可以选取

$$|\ \rangle = \langle b|1\rangle|0\rangle - \langle b|0\rangle|1\rangle$$

满足 $\langle b|\ \rangle = 0$。则此时可以计算 $F(b)$ 为:

$$F(b) = \frac{E_0\|\langle b|1\rangle\|^2 + E_1\|\langle b|0\rangle\|^2}{\|\langle b|1\rangle\|^2 + \|\langle b|0\rangle\|^2} \le \frac{E_1\left(\|\langle b|1\rangle\|^2 + \|\langle b|0\rangle\|^2\right)}{\|\langle b|1\rangle\|^2 + \|\langle b|0\rangle\|^2} = E_1.$$

ii) 由于存在 n 个约束条件 $\langle b_1|\ \rangle = \langle b_2|\ \rangle = \cdots = \langle b_n|\ \rangle = 0$，结合第一问分析可知，要使得 $F(b)$ 最小，$|\ \rangle$ 应处于 $|0\rangle, |1\rangle, \cdots, |n\rangle$ 张成的子空间中。则 $|\ \rangle$ 可以写成

$$|\ \rangle = \sum_{i=0}^{n} c_i |i\rangle$$

其中 $c_i = \langle i|\ \rangle$。则可以计算 $F(b)$ 如下:

$$F(b) = \frac{\sum_{i=0}^{n} |c_i|^2 E_i}{\sum_{i=0}^{n} |c_i|^2} \le \frac{E_n \sum_{i=0}^{n} |c_i|^2}{\sum_{i=0}^{n} |c_i|^2} = E_n.$$

□

第 2 题得分: ________. 接上题

(i) 如上题，假设一约束条件 C 施加于所有的态矢量。所有的本征值和本征态相应的改变，即 $E_n \to E_n', |n\rangle \to |n'\rangle$。利用最大-最小原理，证明：$E_0 \le E_0', E_1 \le E_1', \cdots, E_n \le E_n', \cdots$。

(ii) 考虑一个具有固定边界 B 薄膜的运动。其特征频率由满足边界条件 $\varphi = 0$ 的方程 $-\nabla^2\varphi = \omega_n^2\varphi$ 确定。令 $0 < \omega_0 \le \omega_1 \le \omega_2 \le \cdots$。如果施加以约束条件使得振幅 φ 在一闭曲线 C 内为零，则特征频率 ω_n 变为 ω_n'。证明 $\omega_n \le \omega_n'$。

解: (i) 首先考虑 $\hat{H}$ 本征态空间为有限维，本征值分别为 $E_0, E_1, \cdots, E_{l-1}$。由最大最小原理可知：对于任意态矢量 $|b\rangle$，$F(b)$ 为 $\frac{\langle\ \ |\hat{H}|\ \ \rangle}{\langle\ \ |\ \ \rangle}$ 满足 $\langle b|\ \ \rangle = 0$ 的最大值，则 $F(b)$ 的最小值为 E_{l-2}。

不妨令约束条件表示为 $\langle b|\ \ \rangle = 0$，则有 $E'_{l-1} \geq E_{l-2}$，新的本征态计作 $|\phi'_{l-1}\rangle$

约束条件变为 $\langle b|\ \ \rangle = \langle \phi'_{l-1}|\ \ \rangle = 0$，则有 $E'_{l-1} \geq E_{l-3}$ 新的本征态计作 $|\phi'_{l-2}\rangle$。以此类推，由于约束条件的添加，本征态空间从 l 维变成 l-1 维。对本征值变标号则有：

$$E'_0 \geq E_0, E'_1 \geq E_1, \cdots, E'_{l-2} \geq E_{l-2}.$$

推广至无穷维则有：

$$E'_0 \geq E_0, E'_1 \geq E_1, \cdots, E'_{l-2} \geq E_{l-2}, \cdots$$

(ii) 若要求在一闭曲线内为 0，即施加了一约束条件 C，由 (i) 问可知，新本征值 ω'_n 满足 $\omega'_n \geq \omega_n$。

□