量子物理期末总结

阿笠博士

June 9, 2024

1

1.1

当光子的频率为ν时，它的波长为

$$\lambda = \frac{c}{\nu},$$

能量为

$$E = h\nu,$$

动量为

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda},$$

其中$h = 6.626 \times 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s}$是普朗克常数。

光子的静止质量为零。当粒子不是光子时，它的静止质量大于零，此时记粒子的静止质量为m。当粒子的运动速度为$v(v < c)$时，它的能量(动能与mc^2之和)为

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}},$$

动量为

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}.$$

因此

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4.$$

当v远小于c时，粒子的能量近似为

$$E = mc^2 + \frac{1}{2}mv^2 + O\left(v^4\right) \approx mc^2 + \frac{1}{2}mv^2,$$

因此，动能为

$$K = E - mc^2 = \frac{1}{2}mv^2.$$

动量近似为

$$p = mv + O\left(v^3\right) \approx mv,$$

因此，动量与动能之间的关系为

$$p = \sqrt{2mK},$$

$$K = \frac{p^2}{2m}.$$

在宏观情况下，绝对温度(摄氏温度加上273.15)与粒子的平均动能成正比。当绝对温度为T时，粒子的平均动能为

$$\langle K \rangle = \frac{3}{2} k_{\mathrm{B}} T,$$

其中$k = 1.381 \times 10^{-23}\ \mathrm{J} \cdot \mathrm{K}^{-1}$是玻尔兹曼常数。

1.2　光电效应

将光照射到脱出功为W的金属上，如果光子的频率ν比较大，那么电子会离开金属。此时电子的动能为

$$E = h\nu - W.$$

而动能是非负的，因此

$$h\nu - W \geq 0,$$

可得

$$\nu \geq \frac{W}{h},$$

我们将W/h称为截止频率。

1.3　德布罗意波

粒子的动量p与物质波的波长λ之间的关系为

$$p = \frac{h}{\lambda},$$

其中h是普朗克常数。

因此，对于质量为m，速度远小于c的粒子，记它的动能为K，那么物质波的波长为

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{\sqrt{2mK}}.$$

1.4 氢原子

氢原子从能级n跃迁到能级m，会发射光子，其波长λ满足

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right),$$

其中$R = 1.097 \times 10^7\ \mathrm{m}^{-1}$是里德伯常数。

2 波函数

2.1 定义

记$\Psi : \mathbb{R}^3 \times [0, \infty) \to \mathbb{C}$是平方可积函数，即

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2 \, dV < \infty,$$

归一化操作为

$$\tilde{\Psi} = \frac{\Psi}{\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2 \, dV\right)^{1/2}},$$

因此

$$\int_{\mathbb{R}^3} \left|\tilde{\Psi}\right|^2 dV = 1. \tag{2.1}$$

将满足(2.1)的平方可积函数$\tilde{\Psi}$称为波函数。

2.2 物理含义

波函数反映了粒子在空间各处的概率分布。当粒子的波函数为Ψ时，粒子出现在区域$(x, x+dx) \times (y, y+dy) \times (z, z+dz) \subseteq \mathbb{R}^3$的概率为

$$|\Psi(x, y, z, t)|^2 \, dxdydz.$$

给定两个线性相关的平方可积函数Ψ, Φ满足

$$\Phi = c\Psi, c \neq 0,$$

其中c是常数。分别对其进行归一化可得

$$\begin{aligned}
\tilde{\Psi} &= \frac{\Psi}{\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2 \, dV\right)^{1/2}}, \\
\tilde{\Phi} &= \frac{\Phi}{\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\Phi|^2 \, dV\right)^{1/2}} = \frac{c}{|c|} \frac{\Psi}{\left(\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2 \, dV\right)^{1/2}} = \lambda\tilde{\Psi},
\end{aligned}$$

其中$\lambda = c/|c|, |\lambda| = 1$。当粒子A,B的波函数分别为$\tilde{\Psi}, \tilde{\Phi}$时，粒子A,B出现在区域$(x, x+dx) \times (y, y+dy) \times (z, z+dz) \subseteq \mathbb{R}^3$的概率分别为

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Pr_A} &= \left|\tilde{\Psi}(x,y,z,t)\right|^2 dxdydz, \\
\mathrm{Pr_B} &= \left|\tilde{\Phi}(x,y,z,t)\right|^2 dxdydz = |\lambda|^2 \left|\tilde{\Psi}(x,y,z,t)\right|^2 dxdydz = \left|\tilde{\Psi}(x,y,z,t)\right|^2 dxdydz,
\end{aligned}
$$

因此$\mathrm{Pr_A} = \mathrm{Pr_B}$，$\tilde{\Psi}, \tilde{\Phi}$描述的概率分布是一致的。

2.3 平方可积函数的性质

平方可积函数的集合是复数域$\mathbb{C}$上的向量空间，因为对于任意平方可积函数Ψ, Φ与常数$c \in \mathbb{C}$，都具有

$$
\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi + \Phi|^2 dV \leq 4 \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2 dV + \int_{\mathbb{R}^3} |\Phi|^2 dV \right) < \infty,
$$
$$
\int_{\mathbb{R}^3} |c\Psi|^2 dV = |c|^2 \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2 dV < \infty.
$$

根据这一性质，我们可以将平方可积函数进行任意有限的线性叠加，即对于平方可积函数$\Psi_1, ..., \Psi_n$与常数$c_1, ..., c_n \in \mathbb{C}$，线性叠加

$$
\Psi = \sum_{i=1}^{n} c_i \Psi_i
$$

也是平方可积函数，将其称为态叠加原理。

2.4 动量表象

平方可积的函数可以进行傅立叶变换。对于$\mathbf{x} = (x, y, z), \mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$，将$\Psi(\mathbf{x}, t)$进行傅立叶变换可得

$$
\Phi(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \Psi(\mathbf{x}, t) dV = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{-i(p_x x + p_y y + p_z z)/\hbar} \Psi(\mathbf{x}, t) dV.
$$

根据傅立叶变换的性质，可得

$$
\Psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar} \Phi(\mathbf{p}, t) dV_p = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} e^{i(p_x x + p_y y + p_z z)/\hbar} \Phi(\mathbf{p}, t) dV_p.
$$

其中$dV = dxdydz, dV_p = dp_x dp_y dp_z$。可以证明(在这里不做证明)

$$
\int_{\mathbb{R}^3} |\Phi(\mathbf{p}, t)|^2 dV_p = \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi(\mathbf{x}, t)|^2 dV,
$$

因此，对于归一化的$\Psi(\mathbf{x},t)$，可得

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Phi(\mathbf{p},t)|^2 \, dV_p = 1,$$

表明$\Phi(\mathbf{p},t)$同样也是归一化的。此时我们称$\Phi(\mathbf{p},t)$为动量表象的波函数，它反映了粒子动量在动量空间各处的概率分布，粒子动量位于区域$(p_x, p_x+dp_x)\times(p_y, p_y+dp_y)\times(p_z, p_z+dp_z)$的概率为

$$|\Phi(p_x,p_y,p_z,t)|^2 \, dp_x dp_y dp_z.$$

2.5 薛定谔方程

薛定谔方程，是关于函数$\Psi(x,y,z,t)$的偏微分方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,y,z,t)+V(x,y,z)\Psi(x,y,z,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(x,y,z,t). \tag{2.2}$$

令$\Psi(x,y,z,t)=\Psi(x,y,z,0)f(t)$，可得

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\Psi(x,y,z,0)}{\Psi(x,y,z,0)}+V=i\hbar\frac{f'(t)}{f(t)}.$$

而左边是x,y,z的函数，右边是t的函数，因此左边与右边取值恒为常数，记其为E。因此

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,y,z,0)+V\Psi(x,y,z,0)=E\Psi(x,y,z,0),$$

$$f'(t)=-\frac{iE}{\hbar}f(t).$$

可得

$$f=e^{-iEt/\hbar},$$

因此

$$\Psi(x,y,z,t)=\Psi(x,y,z,0)e^{-iEt/\hbar}.$$

我们只需求解

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x,y,z,0)+V\Psi(x,y,z,0)=E\Psi(x,y,z,0)$$

对应的Ψ,E即可。将该方程称为定态薛定谔方程，$\Psi(x,y,z,0)$称为定态波函数，它是初始时刻$t=0$的波函数。为了表示方便，通常情况下，我们可以将定态波函数$\Psi(x,y,z,0)$简记为$\Psi(x,y,z)$。

为了保证Ψ是平方可积函数，并且具有非平凡解$\Psi\neq 0$，必须满足

$$E>\inf V. \tag{2.3}$$

定义平方可积函数的内积

$$\langle \Phi, \Psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\Phi} \Psi dV,$$

它们满足以下性质：

$$\begin{aligned} \langle \Phi, \Psi \rangle &= \overline{\langle \Psi, \Phi \rangle}, \\ \langle \Phi, \alpha\Psi + \beta\Theta \rangle &= \alpha \langle \Phi, \Psi \rangle + \beta \langle \Phi, \Theta \rangle, \\ \langle \alpha\Phi + \beta\Theta, \Psi \rangle &= \overline{\alpha} \langle \Phi, \Psi \rangle + \overline{\beta} \langle \Theta, \Psi \rangle, \\ \langle \Psi, \Psi \rangle &\geq 0. \end{aligned} \tag{2.4}$$

其中第4个表达式取等号当且仅当$\Psi = 0$。根据第4个表达式，可以定义函数的范数

$$\|\Psi\| = \langle \Psi, \Psi \rangle^{1/2}.$$

它们满足以下性质：

$$\begin{aligned} \|\alpha\Psi\| &= |\alpha| \|\Psi\|, \\ |\langle \Phi, \Psi \rangle| &\leq \|\Phi\| \|\Psi\|, \\ \|\Phi + \Psi\| &\leq \|\Phi\| + \|\Psi\|. \end{aligned}$$

因此，归一化的波函数Ψ满足$\|\Psi\| = 1$。

求解薛定谔方程，我们可能会得到一组解$\{\Psi_n, E_n\}, n = 1, 2, 3, ...$满足

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi_n + V\Psi_n = E_n\Psi_n,$$

其中任意Ψ_n均是归一化的，即$\|\Psi_n\| = 1$。将$\{\Psi_n, E_n\}, n = 1, 2, 3, ...$称为能级，可得

$$\langle \Psi_i, \Psi_j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \tag{2.5}$$

对于初始时刻的任意波函数Ψ，它可以表示为

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n, \tag{2.6}$$

其中c_n是常数。根据(2.5)可得

$$c_n = \langle \Psi, \Psi_n \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\Psi} \Psi_n dV. \tag{2.7}$$

任意时刻t的波函数为

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n e^{-iE_n t/\hbar}. \tag{2.8}$$

在该时刻测量能量，可能得到的结果分别为$E_1, E_2, ...$，对应的概率分别为

$$\Pr\left\{E = E_n\right\} = \left|c_n\right|^2. \tag{2.9}$$

能量的平均值为

$$\langle E\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \Pr\left\{E = E_n\right\} = \sum_{n=1}^{\infty} \left|c_n\right|^2 E_n. \tag{2.10}$$

有时候为了简便，我们经常研究一维的定态薛定谔方程，此时

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x).$$

在该情况下，对于波函数的连续性，具有以下结论：

(A) 当$V(x)$处处连续，那么$\Psi(x), \Psi'(x), \Psi''(x)$均处处连续。

(B) 当$V(x)$在$x = x_0$处不连续，但是$V(x)$在$(x_0-\epsilon, x_0+\epsilon)$是有界的，那么$\Psi(x), \Psi'(x)$在$x = x_0$处连续，即

$$\begin{aligned} \lim_{x\nearrow x_0} \Psi(x) &= \lim_{x\searrow x_0} \Psi(x), \\ \lim_{x\nearrow x_0} \Psi'(x) &= \lim_{x\searrow x_0} \Psi'(x). \end{aligned} \tag{2.11}$$

$\Psi''(x)$则不一定。

(C) 当$V(x)$在$x = x_0$处不连续，并且$V(x)$在$(x_0-\epsilon, x_0+\epsilon)$是无界的，那么$\Psi(x)$在$x = x_0$处连续，即

$$\lim_{x\nearrow x_0} \Psi(x) = \lim_{x\searrow x_0} \Psi(x). \tag{2.12}$$

$\Psi'(x), \Psi''(x)$则不一定。

2.6 一维定态薛定谔方程的解

2.6.1 一维无限、有限深方势阱；散射态；谐振子

请参考课本。关于谐振子，仅需记忆$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, n = 0, 1, 2, ...$即可。

2.6.2 概率流

定义概率流为

$$J = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\nabla\overline{\Psi} - \overline{\Psi}\nabla\Psi\right).$$

它的散度为

$$\mathrm{div}\ J=\frac{i\hbar}{2m}\left(\nabla\Psi\cdot\nabla\overline{\Psi}+\Psi\Delta\overline{\Psi}-\nabla\overline{\Psi}\cdot\nabla\Psi-\overline{\Psi}\Delta\Psi\right)=\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\Delta\overline{\Psi}-\overline{\Psi}\Delta\Psi\right),$$

根据(2.2)可得

$$\begin{aligned}\Psi\Delta\overline{\Psi}&=\frac{2mi}{\hbar}\Psi\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial t}+\frac{2mV}{\hbar^2}\left|\Psi\right|^2,\\ \overline{\Psi}\Delta\Psi&=-\frac{2mi}{\hbar}\overline{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{2mV}{\hbar^2}\left|\Psi\right|^2,\end{aligned}$$

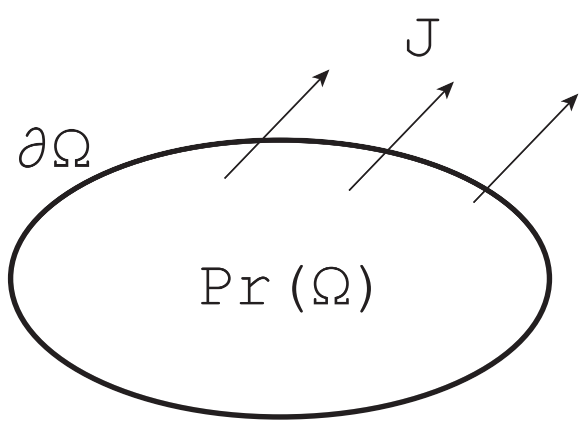
因此

$$\mathrm{div}\ J=-\Psi\frac{\partial\overline{\Psi}}{\partial t}-\overline{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\partial\left|\Psi\right|^2}{\partial t}.$$

根据Stokes定理可得，对于任意$\Omega\subseteq\mathbb{R}^3$，都具有

$$\int_\Omega-\frac{\partial\left|\Psi\right|^2}{\partial t}dV=\int_{\partial\Omega}J\cdot dA,$$

其中$\partial\Omega$是区域Ω的边界。而左边正是粒子处于区域Ω的概率对时间的微分，如图所示。



3 线性算子

3.1 定义

关于叙述的具体证明，请详见资料“三维空间的量子力学”。

定义线性算子A为光滑函数集合的自同态映射$A:C_c^\infty\to C_c^\infty$，即对于任意光滑函数$\Psi,\Phi$与常数$\alpha\in\mathbb{C}$，都具有

$$\begin{aligned}A(\Psi+\Phi)&=A\Psi+A\Phi,\\ A(\alpha\Psi)&=\alpha(A\Psi).\end{aligned}$$

定义单位算子I为

$$I\Psi \equiv \Psi.$$

对于常数$\alpha \in \mathbb{C}$，αA也是线性算子，定义为

$$(\alpha A)\Psi = \alpha(A\Psi).$$

对于线性算子A, B，定义其加法运算与乘法运算为

$$\begin{aligned}(A+B)\Psi &= A\Psi + B\Psi,\\ (AB)\Psi &= A(B\Psi).\end{aligned}$$

很显然$A+B, AB$是线性算子。我们将n个线性算子A的乘积简记为A^n，并且$A^0 = I$。

定义线性算子的李括号为

$$[A, B] = AB - BA,$$

很显然$[A, B]$也是线性算子，并且具有以下关系

$$\begin{aligned}
[A, A] &= 0,\\
[A, B] &= -[B, A],\\
[A, \alpha B + \beta C] &= \alpha [A, B] + \beta [A, C],\\
[\alpha A + \beta B, C] &= \alpha [A, C] + \beta [B, C],\\
[A, BC] &= [A, B] C + B [A, C],\\
[AB, C] &= [A, C] B + A [B, C],\\
0 &= [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]].
\end{aligned}$$

对于厄米算子A，如果对于任意光滑函数Ψ, Φ均满足

$$\langle \Psi, A\Phi \rangle \equiv \langle A\Psi, \Phi \rangle,$$

那么A被称为厄米算子。本课程涉及的线性算子均为厄米算子。

3.2 线性算子的本征态

对于厄米算子A，可能存在一组归一化的光滑函数$\{\Psi_n\}$与一组常数$\lambda_n (n = 1, 2, 3, ...)$使得

$$\begin{aligned}A\Psi_n &= \lambda_n \Psi_n,\\ \|\Psi_n\| &= 1.\end{aligned} \tag{3.1}$$

我们将Ψ_n与λ_n分别称为A的本征态与本征值。它们满足以下关系：

$$\begin{aligned}\lambda_n &\in \mathbb{R},\\ \langle \Psi_i, \Psi_j \rangle &= \delta_{ij}.\end{aligned} \tag{3.2}$$

我们将厄米算子A称为可观测量。假设粒子的波函数$\Psi(\|\Psi\|=1)$可以表示为本征态的展开

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n,$$

根据(2.4)与(3.2)可得

$$c_n = \langle \Psi, \Psi_n \rangle,$$
$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1.$$

测量该可观测量，得到的结果只能为A的特征值$\lambda_n, n=1,2,3,...$，并且测量结果为λ_i的概率为

$$\Pr\{\lambda_i\} = |c_i|^2, \tag{3.3}$$

因此

$$\sum_{i=1}^{\infty} \Pr\{\lambda_i\} = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 = 1.$$

测量的平均值为

$$\sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \Pr\{\lambda_i\} = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i |c_i|^2. \tag{3.4}$$

如果测量结果为λ_i，那么在测量之后的瞬间，波函数将直接变为Ψ_i。

因此，“测量”的本质是向量在标准正交基上的投影。如图所示。

3.3 线性算子的矩阵表示

如果任意光滑函数都能表示为$\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \Psi_i$的形式，那么对于任意线性算子$T$，都满足

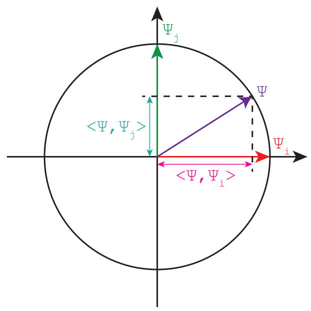
$$T\Psi = \sum_{j=1}^{\infty} c_j (T\Psi_j).$$

而$T\Psi_j$也是光滑函数，因此它可以表示为

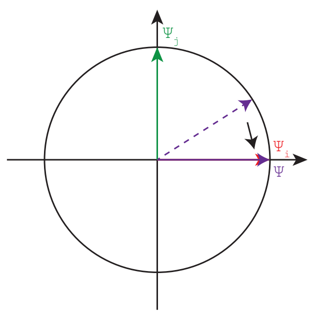
$$T\Psi_j = \sum_{i=1}^{\infty} T_{ij} \Psi_i.$$

其中T_{ij}是常数，根据(3.2)可得

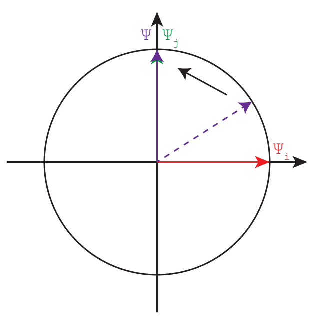
$$T_{ij} = \langle \Psi_i, T\Psi_j \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\Psi_i} (T\Psi_j) dV. \tag{3.5}$$



测量粒子的可观测量A之后，
波函数会以$|<\Psi,\Psi_i>|^2$的概率变为Ψ_i



当波函数变为Ψ_i，对应的测量结果为λ_i



当波函数变为Ψ_j，对应的测量结果为λ_j

因此

$$T\Psi = \sum_{i,j} T_{ij} c_j \Psi_i.$$

因此，在A的本征态Ψ_i下，我们可以将任意线性算子T表示为矩阵

$$\begin{pmatrix} T_{11} & \cdots & T_{1n} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \\ T_{n1} & \cdots & T_{nn} & \cdots \\ \vdots & & \vdots & \end{pmatrix},$$

将任意光滑函数$\Psi=\sum_{i=1}^{\infty} c_i \Psi_i$表示为向量

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

因此，光滑函数$T\Psi$将表示为向量

$$\begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{\infty} T_{1j} c_j \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{\infty} T_{nj} c_j \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & \cdots & T_{1n} & \cdots \\ \vdots & \ddots & \vdots & \\ T_{n1} & \cdots & T_{nn} & \cdots \\ \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

3.4 常用的线性算子

在波函数为Ψ(注意，此时$\langle\Psi,\Psi\rangle=\|\Psi\|^2=1$)的情况下，线性算子$A$的期望值为

$$\langle A\rangle = \langle \Psi, A\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\Psi}(A\Psi)dV.$$

很显然

$$\langle I\rangle = \langle \Psi, I\Psi\rangle = \langle \Psi, \Psi\rangle = 1.$$

在一维情况下，位置算子n次方$X^n(n=1,2,3,...)$的期望值为

$$\langle X^n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi}(X^n\Psi)dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^n \left|\Psi\right|^2 dx.$$

动量算子n次方$P^n(n=1,2,3,...)$的期望值为

$$\langle P^n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi}(P^n\Psi)dx = (-i\hbar)^n \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi}\Psi^{(n)}dx.$$

因此，势能V的期望值为

$$\langle V\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi}(V\Psi)dx = \int_{-\infty}^{\infty} V \left|\Psi\right|^2 dx,$$

动能K的期望值为

$$\langle K\rangle = \frac{\left\langle P^2\right\rangle}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi}\Psi^{(2)}dx = \frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\infty}^{\infty} \left|\Psi'\right|^2 dx.$$

根据傅立叶变换的知识，我们可以更快计算$\langle P^n \rangle$，其表达式为

$$\langle P^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p^n \left| \Phi \right|^2 dp.$$

其中

$$\begin{aligned}\Phi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx, \\ \Psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p) e^{ipx/\hbar} dp.\end{aligned}$$

因此，我们可以更快计算动能的期望值$\langle K \rangle$：

$$\langle K \rangle = \frac{1}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} p^2 \left| \Phi \right|^2 dp.$$

定义A的不确定度为

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}.$$

可以证明测不准原理(关于证明，请详见资料“量子力学-第二部分”)

$$\left(\Delta A\right)^2 \left(\Delta B\right)^2 \geq \frac{1}{4} \left| \langle [A, B] \rangle \right|^2. \tag{3.6}$$

定义位置算子X, Y, Z与动量算子P_x, P_y, P_z为

$$\begin{aligned}X\Psi &= x\Psi, \\ Y\Psi &= y\Psi, \\ Z\Psi &= z\Psi, \\ P_x\Psi &= -i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial x}, \\ P_y\Psi &= -i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial y}, \\ P_z\Psi &= -i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial z}.\end{aligned} \tag{3.7}$$

可以得出，对于任意$i, j \in \{1, 2, 3\}$，都具有

$$\begin{aligned}[X_i, X_j] &= 0, \\ [P_i, P_j] &= 0, \\ [X_i, P_j] &= i\hbar\delta_{ij} I.\end{aligned}$$

其中$X_1=X,X_2=Y,X_3=Z,P_1=P_x,P_2=P_y,P_3=P_z$。因此，根据(3.6)可得

$$\Delta X\Delta P_x \geq \frac{\hbar}{2},$$
$$\Delta Y\Delta P_y \geq \frac{\hbar}{2},$$
$$\Delta Z\Delta P_z \geq \frac{\hbar}{2}.$$

定义角动量算子L_x,L_y,L_z为

$$L_x = YP_z - ZP_y,$$
$$L_y = ZP_x - XP_z,$$
$$L_z = XP_y - YP_x.$$

可得

$$[L_x,L_y] = i\hbar L_z,$$
$$[L_y,L_z] = i\hbar L_x,$$
$$[L_z,L_x] = i\hbar L_y.$$

其中$L_1=L_x,L_2=L_y,L_3=L_z$。定义角动量平方算子L^2为

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2.$$

定义哈密顿算子H为

$$H\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + V\Psi.$$

因此，薛定谔方程又可以写为

$$H\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}.$$

哈密顿算子的本征值E_n即为粒子的能量。

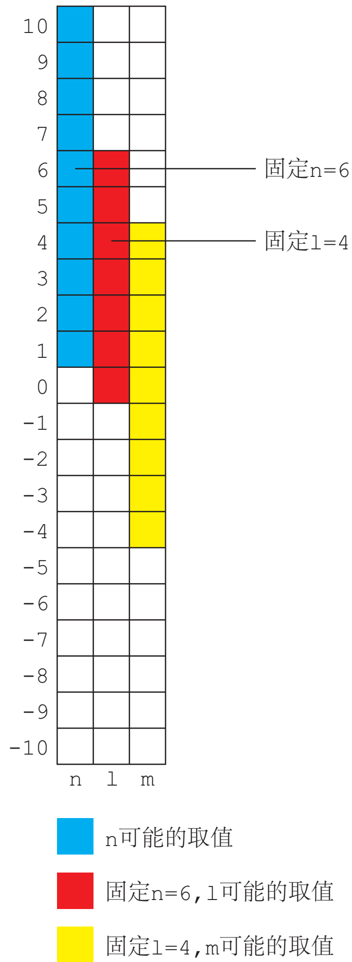
当$V=-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$时，即$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$，通过复杂的计算得出，氢原子波函数$\Psi_{n,l,m}$同时为线性算子$\{H,L^2,L_z\}$的本征态，其本征值分别为

$$H\Psi_{n,l,m} = -\frac{E_0}{n^2}\Psi_{n,l,m},$$
$$L^2\Psi_{n,l,m} = l(l+1)\hbar^2\Psi_{n,l,m},$$
$$L_z\Psi_{n,l,m} = m\hbar\Psi_{n,l,m}.$$

其中$E_0=-\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\approx 13.6$ eV(注意，此处m是电子质量)。n,l,m均为整数，其取值满足

$$n = 1,2,3,...,$$
$$l = 0,1,2,...,n-1,$$
$$m = -l,-l+1,...,l-1,l.$$

如图所示。因此，$\Psi_{n,l,m}$对应的能量为$-E_0/n^2$，角动量平方为$l(l+1)\hbar^2$，角动量z轴分量为$m\hbar$。



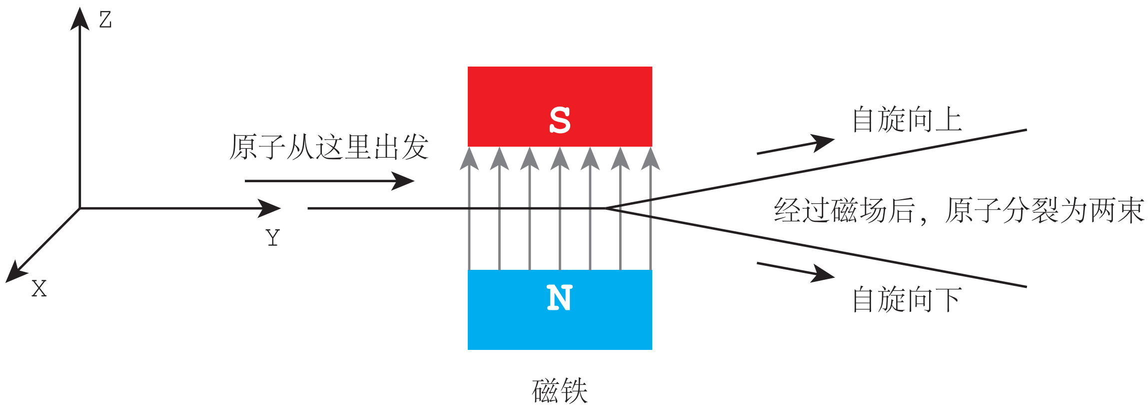
氢原子波函数是归一化的，并满足

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi_{n,l,m}|^2 \, dV = 1,$$
$$\left\langle \Psi_{n,l,m}, \Psi_{\tilde{n},\tilde{l},\tilde{m}} \right\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\Psi_{n,l,m}} \Psi_{\tilde{n},\tilde{l},\tilde{m}} dV = \delta_{n\tilde{n}} \delta_{l\tilde{l}} \delta_{m\tilde{m}}.$$

4 自旋

4.1 定义

如图所示，Stern-Gerlach让银原子经过强磁场，发现银原子刚好分成两束，他们根据这个实验提出了自旋这一概念。 定义自旋算子S_x, S_y, S_z，它们之间的李括号为



$$
\begin{aligned}
[S_x, S_y] &= i\hbar S_z, \\
[S_y, S_z] &= i\hbar S_x, \\
[S_z, S_x] &= i\hbar S_y.
\end{aligned}
$$

其中S_z的本征态只有2个，分别记为χ_0, χ_1，它们是标准正交的，满足

$$\langle \chi_i, \chi_j \rangle = \delta_{ij}.$$

其本征值为

$$
\begin{aligned}
S_z \chi_0 &= \frac{\hbar}{2} \chi_0, \\
S_z \chi_1 &= -\frac{\hbar}{2} \chi_1.
\end{aligned}
$$

因此，根据(3.5)可得，在S_z的本征态χ_0, χ_1下，S_z的矩阵表示为

$$
\begin{aligned}
(S_z)_{ij} &= \langle \chi_i, S_z \chi_j \rangle \\
&= \langle \chi_i, \lambda_j \chi_j \rangle \\
&= \lambda_j \langle \chi_i, \chi_j \rangle \\
&= \lambda_j \delta_{ij}.
\end{aligned}
$$

其中$\lambda_0=\hbar/2,\lambda_1=-\hbar/2$。因此

$$S_z \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}.$$

同样，可以得出S_x,S_y的矩阵表示为(在这里不做展开)

$$S_x \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},$$
$$S_y \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}.$$

我们记

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},$$
$$\sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},$$
$$\sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}.$$

因此$S_x\leftrightarrow\frac{\hbar}{2}\sigma_x,S_y\leftrightarrow\frac{\hbar}{2}\sigma_y,S_z\leftrightarrow\frac{\hbar}{2}\sigma_z$。我们将以上3个矩阵称为泡利矩阵。

自旋波函数是χ_0,χ_1的任意非零线性组合$\Psi=c_0\chi_0+c_1\chi_1$，我们可以将它表示为向量

$$\Psi \longleftrightarrow \begin{pmatrix}c_0\\ c_1\end{pmatrix}. \tag{4.1}$$

而波函数是归一化的，因此

$$|c_0|^2+|c_1|^2=1. \tag{4.2}$$

因此，如果已知线性算子A的矩阵表示

$$\begin{pmatrix}A_{00} & A_{01}\\ A_{10} & A_{11}\end{pmatrix}, \tag{4.3}$$

其中$A_{ij}=\langle\chi_i,A\chi_j\rangle$。记它的本征态为$\Psi=c_0\chi_0+c_1\chi_1$，对应的本征值为$\lambda$，那么

$$\begin{pmatrix}A_{00} & A_{01}\\ A_{10} & A_{11}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_0\\ c_1\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}c_0\\ c_1\end{pmatrix}. \tag{4.4}$$

因此，在自旋体系下，我们可以很容易地求出任意线性算子A的本征态与对应的本征值！

我们以S_x为例，那么

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_0\\ c_1\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}c_0\\ c_1\end{pmatrix},$$

该方程具有2个解，分别为

$$\begin{aligned}
c_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & c_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & \lambda &= \frac{\hbar}{2}, \\
c_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & c_1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}, & \lambda &= -\frac{\hbar}{2}.
\end{aligned}$$

因此，S_x具有2个本征态，分别为$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_0+\chi_1)$与$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_0-\chi_1)$，对应的本征值分别为$\hbar/2, -\hbar/2$。

以S_y为例，那么

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix},$$

该方程同样具有2个解，分别为

$$\begin{aligned}
c_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & c_1 &= \frac{i}{\sqrt{2}}, & \lambda &= \frac{\hbar}{2}, \\
c_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & c_1 &= -\frac{i}{\sqrt{2}}, & \lambda &= -\frac{\hbar}{2}.
\end{aligned}$$

因此，S_y同样具有2个本征态，分别为$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_0+i\chi_1)$与$\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_0-i\chi_1)$，对应的本征值分别为$\hbar/2, -\hbar/2$。

我们将S_x, S_y, S_z的本征态分别记为$\chi_0^x, \chi_1^x; \chi_0^y, \chi_1^y; \chi_0^z, \chi_1^z$。根据(4.1)，通过向量表示，可得

$$\begin{aligned}
\chi_0^x &\longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \\
\chi_1^x &\longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \\
\chi_0^y &\longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \\
\chi_1^y &\longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \\
\chi_0^z &\longleftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\
\chi_1^z &\longleftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.5}$$

容易得出，对于任意$u \in \{x, y, z\}$与$i, j \in \{0, 1\}$，都具有

$$\langle \chi_i^u, \chi_j^u \rangle = \delta_{ij}.$$

4.2 自旋动力学

在矩阵表示下，薛定谔方程为

$$H\begin{pmatrix}c_0(t)\\c_1(t)\end{pmatrix}=i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c_0}(t)\\\dot{c_1}(t)\end{pmatrix}.$$

记初始时刻的波函数向量表示为

$$\begin{pmatrix}c_0(0)\\c_1(0)\end{pmatrix},$$

因此

$$\begin{pmatrix}c_0(t)\\c_1(t)\end{pmatrix}=\exp\left(-\frac{iH}{\hbar}t\right)\begin{pmatrix}c_0(0)\\c_1(0)\end{pmatrix},\tag{4.6}$$

其中

$$\exp:\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C})\to\mathrm{GL}(n,\mathbb{C}),A\mapsto\sum_{k=0}^{\infty}\frac{A^k}{k!}.$$

$\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C})$是所有$n$阶矩阵的集合，它是实数域$\mathbb{R}$上的$2n^2$维向量空间；$\mathrm{GL}(n,\mathbb{C})$是所有$n$阶可逆矩阵的集合，它是一个群。根据Weierstrass M判别法可得，该级数在任意闭集$\Omega\subseteq\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C})$上都是一致收敛的。

该映射满足以下关系：

$$\begin{aligned}
\left.\frac{d}{dt}\right|_{t=0}\exp At&=A, &&A\in\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C}),t\in\mathbb{R},\\
\exp A(s+t)&=\exp As\exp At, &&A\in\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C}),s,t\in\mathbb{R},\\
(\exp A)^{-1}&=\exp(-A), &&A\in\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C}),\\
(\exp A)^{n}&=\exp(nA) &&A\in\mathfrak{gl}(n,\mathbb{C}),n\in\mathbb{Z}.
\end{aligned}$$

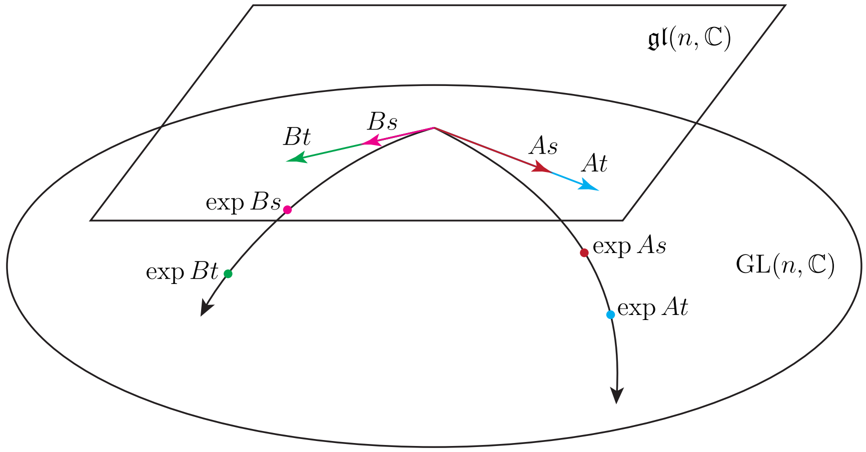
如图所示。

假设A的本征值互不相等，那么它的本征态形成向量空间$\mathbb{C}^n$的一组基，在欧几里得内积下，我们可以利用Gram-Schmidt算法将它的本征态变换为标准正交基。记A的本征值为$\lambda_1,...,\lambda_n$，本征态为$v_1=(v_1^1,...,v_1^n)^T,...,v_n=(v_n^1,...,v_n^n)^T$，并且满足$v_i\cdot v_j=\sum_{k=1}^n\overline{v_i^k}v_j^k=\delta_{ij}$(注意，复空间上的内积是$v_i^\dagger v_j$，而不是$v_i^Tv_j$)。因此，它可以被对角化为

$$A=V\Lambda V^{-1},$$

其中

$$\Lambda=\begin{pmatrix}\lambda_1&0&\cdots&0\\0&\lambda_2&\cdots&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\0&0&\cdots&\lambda_n\end{pmatrix},\qquad V=\begin{pmatrix}v_1^1&v_2^1&\cdots&v_n^1\\v_1^2&v_2^2&\cdots&v_n^2\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\v_1^n&v_2^n&\cdots&v_n^n\end{pmatrix}.$$



很显然V是酉矩阵，因此$V^{-1}=V^\dagger$。那么

$$\begin{aligned}
\exp A &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{A^k}{k!}\\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{V\Lambda^k V^{-1}}{k!}\\
&= V\begin{pmatrix} e^{\lambda_1} & 0 & \cdots & 0\\ 0 & e^{\lambda_2} & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & e^{\lambda_n}\end{pmatrix}V^{-1}\\
&= V\begin{pmatrix} e^{\lambda_1} & 0 & \cdots & 0\\ 0 & e^{\lambda_2} & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & e^{\lambda_n}\end{pmatrix}V^{\dagger}\\
&= \begin{pmatrix} v_1^1 & v_2^1 & \cdots & v_n^1\\ v_1^2 & v_2^2 & \cdots & v_n^2\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ v_1^n & v_2^n & \cdots & v_n^n\end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{\lambda_1} & 0 & \cdots & 0\\ 0 & e^{\lambda_2} & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & e^{\lambda_n}\end{pmatrix}\begin{pmatrix} \overline{v_1^1} & \overline{v_1^2} & \cdots & \overline{v_1^n}\\ \overline{v_2^1} & \overline{v_2^2} & \cdots & \overline{v_2^n}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \overline{v_n^1} & \overline{v_n^2} & \cdots & \overline{v_n^n}\end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

回到(4.6)，哈密顿算子的本征值代表粒子的能量，记其本征值为E_0,E_1，本征态为$\Psi_0=(\psi_0^0,\psi_0^1)^T,\Psi_1=(\psi_1^0,\psi_1^1)^T$，并满足$\Psi_i\cdot\Psi_j=\overline{\psi_i^0}\psi_j^0+\overline{\psi_i^1}\psi_j^1=\delta_{ij}$，因此

$$\exp\left(-\frac{iH}{\hbar}t\right)=\begin{pmatrix}\psi_0^0 & \psi_1^0\\ \psi_0^1 & \psi_1^1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e^{-iE_0t/\hbar} & 0\\ 0 & e^{-iE_1t/\hbar}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\overline{\psi_0^0} & \overline{\psi_0^1}\\ \overline{\psi_1^0} & \overline{\psi_1^1}\end{pmatrix}.$$

因此

$$\begin{pmatrix} c_0(t) \\ c_1(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_0^0 & \psi_1^0 \\ \psi_0^1 & \psi_1^1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-iE_0t/\hbar} & 0 \\ 0 & e^{-iE_1t/\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{\psi_0^0} & \overline{\psi_0^1} \\ \overline{\psi_1^0} & \overline{\psi_1^1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0(0) \\ c_1(0) \end{pmatrix}. \tag{4.7}$$

4.3 两个粒子的自旋态

对于两个粒子A,B，记它们的自旋算子分别为$S_x^A, S_y^A, S_z^A; S_x^B, S_y^B, S_z^B$，其矩阵表示分别为

$$S_x^A \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_y^A \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_z^A \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$
$$S_x^B \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_y^B \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad S_z^B \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

以及S_z^A, S_z^B的本征态向量表示分别为

$$|\uparrow\rangle^A \longleftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\downarrow\rangle^A \longleftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$
$$|\uparrow\rangle^B \longleftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\downarrow\rangle^B \longleftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

对应的本征值均为$\pm\frac{\hbar}{2}$。

定义Kronecker product运算$\otimes : \mathrm{M}(m \times n, \mathbb{C}) \times \mathrm{M}(p \times q, \mathbb{C}) \to \mathrm{M}(mp \times nq, \mathbb{C})$为

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & \cdots & A_{mn} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} B_{11} & \cdots & B_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{p1} & \cdots & B_{pq} \end{pmatrix} \\ =& \begin{pmatrix} A_{11}B & \cdots & A_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1}B & \cdots & A_{mn}B \end{pmatrix} \\ =& \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} & \cdots & A_{11}B_{1q} & \cdots & A_{1n}B_{11} & \cdots & A_{1n}B_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{11}B_{p1} & \cdots & A_{11}B_{pq} & \cdots & A_{1n}B_{p1} & \cdots & A_{1n}B_{pq} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{m1}B_{11} & \cdots & A_{m1}B_{1q} & \cdots & A_{mn}B_{11} & \cdots & A_{mn}B_{1q} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1}B_{p1} & \cdots & A_{m1}B_{pq} & \cdots & A_{mn}B_{p1} & \cdots & A_{mn}B_{pq} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

两个粒子组成的自旋波函数可以表示为任意非零线性组合

$$\Psi = c_0\,|\uparrow\uparrow\rangle + c_1\,|\uparrow\downarrow\rangle + c_2\,|\downarrow\uparrow\rangle + c_3\,|\downarrow\downarrow\rangle,$$

其中

$$|\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle^A \otimes |\uparrow\rangle^B \longleftrightarrow \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\0\end{pmatrix},$$

$$|\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle^A \otimes |\downarrow\rangle^B \longleftrightarrow \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\end{pmatrix},$$

$$|\downarrow\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle^A \otimes |\uparrow\rangle^B \longleftrightarrow \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\end{pmatrix},$$

$$|\downarrow\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle^A \otimes |\downarrow\rangle^B \longleftrightarrow \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\0\\0\\1\end{pmatrix}.$$

因此，Ψ可以被表示为向量

$$\Psi \longleftrightarrow \begin{pmatrix}c_0\\c_1\\c_2\\c_3\end{pmatrix},$$

其中$|c_0|^2 + |c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$。

记非耦合算子与耦合算子分别为

$$\begin{aligned} J &= S_z^A \otimes I + I \otimes S_z^B, \\ S &= S_x^A \otimes S_x^B + S_y^A \otimes S_y^B + S_z^A \otimes S_z^B, \end{aligned}$$

其中

$$S_z^A \otimes I \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix},$$

$$I \otimes S_z^B \longleftrightarrow \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} \otimes \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix},$$

$$S_x^A \otimes S_x^B \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \otimes \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix},$$

$$S_y^A \otimes S_y^B \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \otimes \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & -1\\ 0 & 0 & 1 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ -1 & 0 & 0 & 0\end{pmatrix},$$

$$S_z^A \otimes S_z^B \longleftrightarrow \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \otimes \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}.$$

因此

$$J \longleftrightarrow \hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & -1\end{pmatrix},$$

$$S \longleftrightarrow \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 2 & 0\\ 0 & 2 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}.$$

其本征态的向量表示满足

$$\hbar\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_0\\c_1\\c_2\\c_3\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}c_0\\c_1\\c_2\\c_3\end{pmatrix},$$

$$\frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&2&0\\0&2&-1&0\\0&0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}d_0\\d_1\\d_2\\d_3\end{pmatrix}=\mu\begin{pmatrix}d_0\\d_1\\d_2\\d_3\end{pmatrix}.$$

第一个方程具有4个解，分别为

$$\begin{aligned}
&c_0=1, && c_1=0, && c_2=0, && c_3=0, && \lambda=\hbar,\\
&c_0=0, && c_1=1, && c_2=0, && c_3=0, && \lambda=0,\\
&c_0=0, && c_1=0, && c_2=1, && c_3=0, && \lambda=0,\\
&c_0=0, && c_1=0, && c_2=0, && c_3=1, && \lambda=-\hbar.
\end{aligned}$$

第二个方程具有4个解，分别为

$$\begin{aligned}
&d_0=1, && d_1=0, && d_2=0, && d_3=0, && \mu=\frac{\hbar^2}{4},\\
&d_0=0, && d_1=\frac{1}{\sqrt{2}}, && d_2=\frac{1}{\sqrt{2}}, && d_3=0, && \mu=\frac{\hbar^2}{4},\\
&d_0=0, && d_1=0, && d_2=0, && d_3=1, && \mu=\frac{\hbar^2}{4},\\
&d_0=0, && d_1=\frac{1}{\sqrt{2}}, && d_2=-\frac{1}{\sqrt{2}}, && d_3=0, && \mu=-\frac{3\hbar^2}{4}.
\end{aligned}$$

因此，非耦合算子的本征态与本征值分别为

$$\begin{aligned}
&\Psi=\left|\uparrow\uparrow\right\rangle, && \lambda=\hbar,\\
&\Psi=\left|\uparrow\downarrow\right\rangle, && \lambda=0,\\
&\Psi=\left|\downarrow\uparrow\right\rangle, && \lambda=0,\\
&\Psi=\left|\downarrow\downarrow\right\rangle, && \lambda=-\hbar.
\end{aligned}$$

耦合算子的本征态与本征值分别为

$$
\begin{aligned}
&\Phi = \left|\uparrow\uparrow\right\rangle, && \mu = \frac{\hbar^2}{4},\\
&\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle + \left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right), && \mu = \frac{\hbar^2}{4},\\
&\Phi = \left|\downarrow\uparrow\right\rangle, && \mu = \frac{\hbar^2}{4},\\
&\Phi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle - \left|\downarrow\uparrow\right\rangle\right), && \mu = -\frac{3\hbar^2}{4}.
\end{aligned}
$$

对于耦合算子的本征态，由于前三者的本征值均为$\hbar^2/4$，我们将前三者称为三重态。后者的本征值为$-3\hbar^2/4$，与前三者不同，我们将后者称为单重态。

5 例题

5.1

对于一维无限深方势阱

$$
V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a,\\ \infty, & \text{otherwise}, \end{cases}
$$

计算粒子的能级与波函数。

求解：因为

$$
-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x),
$$

所以

$$
\begin{cases} \Psi(x) = 0, & x < 0,\\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = E\Psi(x), & 0 < x < a,\\ \Psi(x) = 0, & x > a, \end{cases}
$$

因此

$$
\Psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0,\\ A\cos kx + B\sin kx, & 0 < x < a,\\ 0, & x > a, \end{cases}
$$

其中$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$。

根据(2.12)可得

$$
\begin{aligned}
\lim_{x\nearrow 0}\Psi(x) &= \lim_{x\searrow 0}\Psi(x),\\
\lim_{x\searrow a}\Psi(x) &= \lim_{x\nearrow a}\Psi(x),
\end{aligned}
$$

因此

$$A = 0,$$
$$\sin ka = 0.$$

可得

$$k = \frac{n\pi}{a}, n = 1,\ 2,\ ...,$$

因此

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a},$$
$$E = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

波函数为

$$\Psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ B\sin\frac{n\pi x}{a}, & 0 < x < a, \\ 0, & x > a, \end{cases}$$

而

$$\langle\Psi, \Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2\, dx = B^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{aB^2}{n\pi} \int_0^{n\pi} \sin^2 u du = \frac{aB^2}{2} = 1,$$

因此

$$B = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

波函数为

$$\Psi(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, & 0 < x < a, \\ 0, & x > a. \end{cases} \tag{5.1}$$

5.2

对于一维无限深方势阱

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ \infty, & \text{otherwise}, \end{cases}$$

已知电子初始时刻的波函数为

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{8}{5a}}\left(1 + \cos\frac{\pi x}{a}\right)\sin\frac{\pi x}{a}, 0 < x < a.$$

(1) 计算在任意时刻t电子的波函数。

(2) 在任意时刻t测量电子的能量，列出所有可能得到的结果，以及对应的概率。

(3) 计算在任意时刻t电子出现在$0 < x < a/2$的概率。

求解：根据(5.1)可得，该势阱的能级为

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

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

而

$$\Psi(x) = \sqrt{\frac{8}{5a}} \sin \frac{\pi x}{a} + \sqrt{\frac{2}{5a}} \sin \frac{2\pi x}{a},$$

根据(2.6)可得

$$c_1 = \frac{2}{\sqrt{5}},$$
$$c_2 = \frac{1}{\sqrt{5}}.$$

根据(2.8)可得，任意时刻t的波函数$\Psi(x,t)$为

$$\Psi(x,t) = c_1\Psi_1 e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\Psi_2 e^{-iE_2t/\hbar} = \frac{2}{\sqrt{5}} \sin \frac{\pi x}{a} e^{-n^2\pi^2\hbar i/2ma^2} + \frac{1}{\sqrt{5}} \sin \frac{2\pi x}{a} e^{-2n^2\pi^2\hbar i/ma^2}.$$

因此，测量电子的能量，所有可能的结果为E_1, E_2，根据(2.9)，可得对应的概率为

$$\Pr\{E = E_1\} = |c_1|^2 = \frac{4}{5},$$
$$\Pr\{E = E_2\} = |c_2|^2 = \frac{1}{5}.$$

电子出现在$0 < x < a/2$的概率为

$$\begin{aligned} \int_0^{a/2} |\Psi(x,t)|^2 \, dx &= \int_0^{a/2} \overline{\Psi}\Psi dx \\ &= \int_0^{a/2} \left(\overline{c_1}\overline{\Psi_1} e^{iE_1t/\hbar} + \overline{c_2}\overline{\Psi_2} e^{iE_2t/\hbar}\right)\left(c_1\Psi_1 e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\Psi_2 e^{-iE_2t/\hbar}\right) dx \\ &= \int_0^{a/2} |c_1|^2 |\Psi_1|^2 + |c_2|^2 |\Psi_2|^2 + \overline{c_1}c_2\overline{\Psi_1}\Psi_2 e^{i(E_1-E_2)t/\hbar} + c_1\overline{c_2}\Psi_1\overline{\Psi_2} e^{-i(E_1-E_2)t/\hbar} dx \\ &= \frac{1}{2} + \frac{16}{15\pi} \cos \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}. \end{aligned}$$

5.3

对于一维势垒

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

其中$V_0 > 0$。当电子从左到右入射到该势垒上，计算它的反射率与透射率。

求解：

CASE A: $E > V_0$.

此时定态薛定谔方程为

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = E\Psi(x), & x < 0, \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = (E - V_0)\Psi(x), & x \geq 0. \end{cases}$$

令$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, l = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$，因此

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx}, & x < 0, \\ te^{ilx}, & x \geq 0. \end{cases}$$

根据(2.11)可得

$$1 + r = t,$$
$$k(1 - r) = lt.$$

因此

$$r = \frac{k - l}{k + l},$$
$$t = \frac{2k}{k + l}.$$

我们将入射波、反射波、透射波分别记为

$$\Psi_i = e^{ikx},$$
$$\Psi_r = re^{-ikx},$$
$$\Psi_t = te^{ilx}.$$

它们的概率流分别为

$$J_i = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi_i\overline{\Psi_i}' - \overline{\Psi_i}\Psi_i'\right) = \frac{\hbar k}{m},$$
$$J_r = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi_r\overline{\Psi_r}' - \overline{\Psi_r}\Psi_r'\right) = \frac{\hbar k}{m}r^2,$$
$$J_t = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi_t\overline{\Psi_t}' - \overline{\Psi_t}\Psi_t'\right) = \frac{\hbar l}{m}t^2.$$

因此，反射率与透射率分别为

$$R = \frac{J_r}{J_i} = r^2 = \frac{\left(\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}\right)^2}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}\right)^2},$$
$$T = \frac{J_t}{J_i} = \frac{l}{k} t^2 = \frac{4\sqrt{E}\sqrt{E - V_0}}{\left(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}\right)^2}.$$

因此

$$R + T = 1.$$

CASE B: $E < V_0$.

此时定态薛定谔方程为

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = E\Psi(x), & x < 0, \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + (V_0 - E)\Psi(x) = 0, & x \geq 0. \end{cases}$$

令$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, l = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$，因此

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx}, & x < 0, \\ te^{-lx}, & x \geq 0. \end{cases}$$

根据(2.11)与(2.12)可得

$$1 + r = t,$$
$$k(1 - r) = ilt.$$

因此

$$r = \frac{k - il}{k + il},$$
$$t = \frac{2k}{k + il}.$$

我们将入射波、反射波、透射波分别记为

$$\Psi_i = e^{ikx},$$
$$\Psi_r = re^{-ikx},$$
$$\Psi_t = te^{-lx}.$$

它们的概率流分别为

$$\begin{aligned}
J_i &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi_i\overline{\Psi_i}' - \overline{\Psi_i}\Psi_i'\right) = \frac{\hbar k}{m}, \\
J_r &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi_r\overline{\Psi_r}' - \overline{\Psi_r}\Psi_r'\right) = \frac{\hbar k}{m}\left|r\right|^2, \\
J_t &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi_t\overline{\Psi_t}' - \overline{\Psi_t}\Psi_t'\right) = 0.
\end{aligned}$$

因此，反射率与透射率分别为

$$\begin{aligned}
R &= \frac{J_r}{J_i} = \left|r\right|^2 = 1, \\
T &= \frac{J_t}{J_i} = 0.
\end{aligned}$$

因此

$$R + T = 1.$$

5.4

一个粒子在势能为$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$的势场中运动，基态波函数为

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2x^2/2},$$

其中$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$。对于区域$\Omega = \left[-\frac{1}{\alpha}, \frac{1}{\alpha}\right]$，计算粒子出现在区域$\Omega$之外的概率。

求解：粒子出现在区域Ω的概率为

$$\begin{aligned}
\Pr(\Omega) &= \int_{-1/\alpha}^{1/\alpha} \left|\Psi_0(x)\right|^2 dx \\
&= \int_{-1/\alpha}^{1/\alpha} \frac{\alpha}{\pi^{1/2}} e^{-\alpha^2x^2} dx \\
&= \int_{-1}^{1} \frac{1}{\pi^{1/2}} e^{-u^2} du \\
&\approx 0.84.
\end{aligned}$$

因此，粒子出现在区域Ω之外的概率为

$$\Pr(\mathbb{R}\backslash\Omega) = 1 - \Pr(\Omega) \approx 0.16.$$

5.5

一个原子在势能为$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$的势场中运动，其初始时刻的波函数为

$$\Psi(x) = \cos\frac{\theta}{2}\Psi_0(x) + \sin\frac{\theta}{2}\Psi_1(x),$$

其中Ψ_0, Ψ_1分别为谐振子的基态与第一激发态。

(1) 计算任意时刻t的波函数$\Psi(x,t)$。

(2) 证明$\Psi(x, t + \frac{2\pi}{\omega}) = -\Psi(x,t)$。

(3) 计算任意时刻t的能量平均值。

求解：Ψ_0, Ψ_1对应的能量分别为

$$E_0 = \left(0 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\omega,$$
$$E_1 = \left(1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\omega.$$

根据(2.8)可得，任意时刻t的波函数$\Psi(x,t)$为

$$\Psi(x,t) = \cos\frac{\theta}{2}\Psi_0(x)e^{-iE_0t/\hbar} + \sin\frac{\theta}{2}\Psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} = \cos\frac{\theta}{2}\Psi_0(x)e^{-i\omega t/2} + \sin\frac{\theta}{2}\Psi_1(x)e^{-3i\omega t/2}.$$

因此

$$\Psi\left(x, t + \frac{2\pi}{\omega}\right) = \cos\frac{\theta}{2}\Psi_0(x)e^{-i\omega t/2}e^{-\pi i} + \sin\frac{\theta}{2}\Psi_1(x)e^{-3i\omega t/2}e^{-3\pi i} = -\Psi(x,t).$$

根据(3.4)可得，能量的平均值为

$$\langle E\rangle = \cos^2\frac{\theta}{2}E_0 + \sin^2\frac{\theta}{2}E_1 = \left(1 - \frac{1}{2}\cos\theta\right)\hbar\omega.$$

5.6

对于一维无限深方势阱，哈密顿算子H的本征态与本征值为

$$\Psi_n = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}, & 0 < x < a, \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases}$$
$$\lambda_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}.$$

计算在哈密顿算子H的本征态下，位置算子X、动量算子P、哈密顿算子H的矩阵表示。

求解：根据(3.5)与(3.7)可得，位置算子X的矩阵表示为

$$\begin{aligned}
X_{mn} &= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi_m} X \Psi_n dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi_m} x \Psi_n dx \\
&= \frac{2}{a} \int_0^a x \sin \frac{m\pi x}{a} \sin \frac{n\pi x}{a} dx \\
&= \begin{cases} \frac{a}{2}, & m = n, \\ \frac{4mna}{\pi(m^2-n^2)} \left((-1)^{m+n} - 1\right), & m \neq n. \end{cases}
\end{aligned}$$

动量算子P的矩阵表示为

$$\begin{aligned}
P_{mn} &= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi_m} P \Psi_n dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi_m} (-i\hbar) \Psi_n' dx \\
&= -\frac{2\pi in\hbar}{a^2} \int_0^a \sin \frac{m\pi x}{a} \cos \frac{n\pi x}{a} dx \\
&= \frac{2imn\hbar}{a(m^2-n^2)} \left((-1)^{m+n} - 1\right).
\end{aligned}$$

哈密顿算子H的矩阵表示为

$$\begin{aligned}
H_{mn} &= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi_m} H \Psi_n dx \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\Psi_m} \lambda_n \Psi_n dx \\
&= \lambda_n \int_0^a \overline{\Psi_m} \Psi_n dx \\
&= \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \delta_{mn}.
\end{aligned}$$

5.7

根据(4.2)，假设粒子的波函数可以表示为向量

$$\Psi \longleftrightarrow \begin{pmatrix} \cos\theta \\ \sin\theta \end{pmatrix}.$$

分别测量粒子自旋在x, y, z方向的分量，会得到什么结果，并且相应的概率是多少？最后，平均值是多少？

求解：

(A) 测量粒子自旋在x方向的分量。根据(4.5)可得，我们可以将粒子的波函数表示为

$$\Psi=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\theta+\sin\theta\right)\chi_0^x+\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\theta-\sin\theta\right)\chi_1^x,$$

因此，根据(3.3)，得到结果为$\hbar/2,-\hbar/2$的概率分别为

$$\Pr\left\{\frac{\hbar}{2}\right\}=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\theta+\sin\theta\right)\right|^2=\frac{1}{2}\left(1+\sin 2\theta\right),$$

$$\Pr\left\{-\frac{\hbar}{2}\right\}=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\cos\theta-\sin\theta\right)\right|^2=\frac{1}{2}\left(1-\sin 2\theta\right).$$

根据(3.4)，平均值为

$$\frac{\hbar}{2}\Pr\left\{\frac{\hbar}{2}\right\}+\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\Pr\left\{-\frac{\hbar}{2}\right\}=\frac{\hbar}{2}\sin 2\theta.$$

(B) 测量粒子自旋在y方向的分量。根据(4.5)可得，我们可以将粒子的波函数表示为

$$\Psi=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\theta}\chi_0^y+\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}\chi_1^y,$$

因此，根据(3.3)，得到结果为$\hbar/2,-\hbar/2$的概率分别为

$$\Pr\left\{\frac{\hbar}{2}\right\}=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\theta}\right|^2=\frac{1}{2},$$

$$\Pr\left\{-\frac{\hbar}{2}\right\}=\left|\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}\right|^2=\frac{1}{2}.$$

根据(3.4)，平均值为

$$\frac{\hbar}{2}\Pr\left\{\frac{\hbar}{2}\right\}+\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\Pr\left\{-\frac{\hbar}{2}\right\}=\frac{\hbar}{2}.$$

(C) 测量粒子自旋在z方向的分量。根据(4.5)可得，我们可以将粒子的波函数表示为

$$\Psi=\cos\theta\chi_0^z+\sin\theta\chi_1^z,$$

因此，根据(3.3)，得到结果为$\hbar/2,-\hbar/2$的概率分别为

$$\Pr\left\{\frac{\hbar}{2}\right\}=\left|\cos\theta\right|^2=\cos^2\theta,$$

$$\Pr\left\{-\frac{\hbar}{2}\right\}=\left|\sin\theta\right|^2=\sin^2\theta.$$

根据(3.4)，平均值为

$$\frac{\hbar}{2}\Pr\left\{\frac{\hbar}{2}\right\}+\left(-\frac{\hbar}{2}\right)\Pr\left\{-\frac{\hbar}{2}\right\}=\frac{\hbar}{2}\cos 2\theta.$$

5.8

根据(4.3)，假设哈密顿算子的矩阵表示为

$$H \longleftrightarrow \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}.$$

其中$E_0, A > 0$是常数。

(1) 计算哈密顿算子的本征值与本征态的向量表示。

(2) 假设粒子的波函数可以表示为向量

$$\Psi \longleftrightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

测量粒子的能量，会得到什么结果，并且相应的概率是多少？最后，平均值是多少？

求解：假设本征态的向量表示为

$$\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix},$$

其中$|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$。根据(4.4)可得，我们需要求解方程

$$\begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}.$$

该方程具有2个解，分别为

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & c_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & \lambda &= E_0 - A, \\ c_0 &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & c_1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}, & \lambda &= E_0 + A. \end{aligned}$$

因此，本征值分别为$E_0 - A, E_0 + A$，对应的本征态向量表示分别为

$$\Psi_0 \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\Psi_1 \longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

而

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_0 + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_1,$$

因此，根据(3.3)，得到结果为$E_0 - A, E_0 + A$的概率分别为

$$\Pr\{E_0 - A\} = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2},$$
$$\Pr\{E_0 + A\} = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}.$$

根据(3.4)，平均值为

$$(E_0 - A)\Pr\{E_0 - A\} + (E_0 + A)\Pr\{E_0 + A\} = E_0.$$

5.9

记

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$
$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$
$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

而2阶矩阵的集合$\mathrm{M}(2,\mathbb{C})$是$\mathbb{C}$上的向量空间，证明$I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$是$\mathrm{M}(2,\mathbb{C})$上的一组基。换句话说，$I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$是线性无关的；并且任意2阶矩阵$A$都能表示为$A = \alpha I + \beta\sigma_x + \gamma\sigma_y + \theta\sigma_z$的形式，其中$\alpha, \beta, \gamma, \theta \in \mathbb{C}$是标量。

求解：假设对于标量$r, s, u, v \in \mathbb{C}$，具有

$$rI + s\sigma_x + u\sigma_y + v\sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

因此

$$\begin{pmatrix} r + v & s - iu \\ s + iu & r - v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

这等价于

$$r + v = 0,$$
$$r - v = 0,$$
$$s - iu = 0,$$
$$s + iu = 0.$$

因此$r=s=u=v=0$，这证明了$I,\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z$是线性无关的。

而任意2阶矩阵A都能表示为

$$A=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

其中$a,b,c,d\in\mathbb{C}$。因此

$$\begin{aligned} A &= a\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}+b\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}+c\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}+d\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= a\left(\frac{I+\sigma_z}{2}\right)+b\left(\frac{\sigma_x+i\sigma_y}{2}\right)+c\left(\frac{\sigma_x-i\sigma_y}{2}\right)+d\left(\frac{I-\sigma_z}{2}\right) \\ &= \frac{a+d}{2}I+\frac{b+c}{2}\sigma_x+\frac{i(b-c)}{2}\sigma_y+\frac{a-d}{2}\sigma_z. \end{aligned}$$

5.10

假设电子在磁感应强度为$\mathbf{B}=(B,0,0)$的磁场中运动，其哈密顿算子为

$$H=\frac{e}{m}\mathbf{B}\cdot\mathbf{S}=\frac{e}{m}BS_x.$$

记电子初始时刻波函数的向量表示为

$$\Psi(0)=\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix},$$

其中$|c_0|^2+|c_1|^2=1$。

(1) 计算电子在任意时刻t波函数的向量表示。

(2) 在任意时刻t测量电子自旋在z方向的分量，会得到什么结果，并且相应的概率是多少？最后，平均值是多少？

求解1：很显然，χ_0^x,χ_1^x是哈密顿算子的本征态(因为它正比于S_x)。因此，我们将电子初始时刻的波函数表示为本征态的线性组合

$$\Psi(0)=\frac{1}{\sqrt{2}}(c_0+c_1)\chi_0^x+\frac{1}{\sqrt{2}}(c_0-c_1)\chi_1^x.$$

而

$$\begin{aligned} H\chi_0^x &= \frac{e}{m}BS_x\chi_0^x=\frac{e\hbar B}{2m}\chi_0^x, \\ H\chi_1^x &= \frac{e}{m}BS_x\chi_1^x=-\frac{e\hbar B}{2m}\chi_1^x. \end{aligned}$$

因此，对应的本征值(能量)分别为

$$E_0 = \frac{e\hbar B}{2m},$$
$$E_1 = -\frac{e\hbar B}{2m}.$$

因此，根据(2.8)可得，任意时刻t的波函数$\Psi(t)$为

$$\begin{aligned}\Psi(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(c_0+c_1)e^{-iE_0t/\hbar}\chi_0^x + \frac{1}{\sqrt{2}}(c_0-c_1)e^{-iE_1t/\hbar}\chi_1^x \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(c_0+c_1)e^{-ieBt/2m}\chi_0^x + \frac{1}{\sqrt{2}}(c_0-c_1)e^{ieBt/2m}\chi_1^x \\ &\leftrightarrow \frac{1}{2}(c_0+c_1)e^{-ieBt/2m}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} + \frac{1}{2}(c_0-c_1)e^{ieBt/2m}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} c_0\cos\frac{eBt}{2m} - ic_1\sin\frac{eBt}{2m} \\ c_1\cos\frac{eBt}{2m} - ic_0\sin\frac{eBt}{2m}\end{pmatrix}.\end{aligned}$$

因此

$$\Psi(t) = \left(c_0\cos\frac{eBt}{2m} - ic_1\sin\frac{eBt}{2m}\right)\chi_0^z + \left(c_1\cos\frac{eBt}{2m} - ic_0\sin\frac{eBt}{2m}\right)\chi_1^z.$$

在任意时刻t测量电子自旋在z方向，得到$\hbar/2, -\hbar/2$的概率分别为

$$\Pr\left\{\frac{\hbar}{2}\right\} = \left|c_0\cos\frac{eBt}{2m} - ic_1\sin\frac{eBt}{2m}\right|^2 = |c_0|^2\cos^2\frac{eBt}{2m} + |c_1|^2\sin^2\frac{eBt}{2m},$$
$$\Pr\left\{-\frac{\hbar}{2}\right\} = \left|c_1\cos\frac{eBt}{2m} - ic_0\sin\frac{eBt}{2m}\right|^2 = |c_0|^2\sin^2\frac{eBt}{2m} + |c_1|^2\cos^2\frac{eBt}{2m}.$$

很显然$\Pr\left\{\frac{\hbar}{2}\right\} + \Pr\left\{-\frac{\hbar}{2}\right\} = 1$。平均值为

$$\frac{\hbar}{2}\Pr\left\{\frac{\hbar}{2}\right\} + \left(-\frac{\hbar}{2}\right)\Pr\left\{\frac{\hbar}{2}\right\} = \frac{\hbar}{2}\cos\frac{eBt}{m}\left(|c_0|^2 - |c_1|^2\right).$$

求解2：根据求解1的步骤可得

$$H\chi_0^x = \frac{e\hbar B}{2m}\chi_0^x,$$
$$H\chi_1^x = -\frac{e\hbar B}{2m}\chi_1^x.$$

根据(4.7)可得

$$\psi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \qquad \psi_0^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \qquad E_0 = \frac{e\hbar B}{2m},$$
$$\psi_1^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \qquad \psi_1^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \qquad E_1 = -\frac{e\hbar B}{2m}.$$

因此

$$\begin{pmatrix} c_0(t) \\ c_1(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} e^{-ieBt/2m} & 0 \\ 0 & e^{ieBt/2m} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_0 \cos\frac{eBt}{2m} - ic_1 \sin\frac{eBt}{2m} \\ c_1 \cos\frac{eBt}{2m} - ic_0 \sin\frac{eBt}{2m} \end{pmatrix}.$$

之后步骤与求解1相同。