

2021 中国科学技术大学

量子力学期终考试试题卷

学号 姓名 成绩

若干提示:

① 全卷共 5 题, 每题 20 分.
 ② 利用极角 θ 和方位角 ϕ , 可以把 (θ, ϕ) 方向的单位矢量 \mathbf{n} 在笛卡尔直角坐标系中

表为:

$$\mathbf{n} = \mathbf{e}_3 \cos \theta + \mathbf{e}_1 \sin \theta \cos \phi + \mathbf{e}_2 \sin \theta \sin \phi$$

所以在泡利表象中,

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

③ 球贝塞尔函数具有近似表达式:

$$j_l(x) \Big|_{x \ll 1} \approx \frac{x^l}{(2l+1)!!}$$

④ 几个可能有用的积分公式:

$$\begin{aligned} \int_0^a \int_0^a dx dy V(x, y) \frac{\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right)}{a^2} &= V_0 \left(\frac{b}{a} - \frac{\pi^2 b^3}{6a^3} + O(b^4) \right) \\ \int_0^a \int_0^a dx dy V(x, y) \frac{\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right)}{a^2} &= V_0 \left(\frac{3b}{4a} - \frac{\pi^2 b^3}{6a^3} + O(b^4) \right) \\ \int_0^a \int_0^a dx dy V(x, y) \frac{\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right)}{a^2} &= V_0 \left(\frac{b}{a} - \frac{2\pi^2 b^3}{3a^3} + O(b^4) \right) \\ \int_0^a \int_0^a dx dy V(x, y) \frac{\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{\pi y}{a}\right)}{a^2} &= V_0 \left(\frac{b}{2a} + O(b^4) \right) \\ \int_0^a \int_0^a dx dy V(x, y) \frac{\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi y}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right)}{a^2} &= V_0 \left(\frac{b}{2a} - \frac{5\pi^2 b^3}{12a^3} + O(b^4) \right) \\ \int_0^a \int_0^a dx dy V(x, y) \frac{\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{2\pi y}{a}\right)}{a^2} &= V_0 \left(\frac{3b}{4a} - \frac{2\pi^2 b^3}{3a^3} + O(b^4) \right) \end{aligned}$$

1. 一个质量为 μ 、能量为 $E = \frac{k^2 \hbar^2}{2\mu}$ 的自由粒子进入到球对称势场

$$V(r) = \frac{\beta \hbar^2}{2\mu a} \delta(r - a), \quad \beta > 0$$

无量纲参数 β 的取值范围是 $0 < \beta \ll 1$ 以致于 $V(r)$ 可以视为微扰。假设 $ka \ll 1$,

请使用分波法计算散射振幅、微分散射截面和总截面。

解：

按照微扰论的零级近似，散射波 l 分波的相移 δ_l 满足：

$$\sin \delta_l \approx -\frac{2\mu k}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) [j_l(kr)]^2 r^2 dr = -\beta ka [j_l(ka)]^2 \approx -\beta \frac{(ka)^{2l+1}}{[(2l+1)!!]^2}$$

因为 $ka \ll 1$ ，只需要考虑 $l = 0$ 的s分波相移对散射振幅的贡献：

$$\delta_0 \approx \sin \delta_0 \approx -\beta ka$$

所以，散射振幅为：

$$f(\theta) \approx \frac{1}{k} \exp(i\delta_0) \sin \delta_0 = -\beta a \exp(-i\beta ka)$$

微分散射截面与总截面分别为：

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 \approx \beta^2 a^2$$

和

$$\sigma_T \approx 4\pi \beta^2 a^2$$

2. 忽略电子自旋，设 $t = 0$ 时刻氢原子处在由波函数

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{5}} \left[\sqrt{3}\psi_{100}(\mathbf{r}) + \psi_{211}(\mathbf{r}) - i\psi_{21,-1}(\mathbf{r}) \right]$$

描写的量子态下，这里 $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ 是氢原子正交归一的能量本征函数。倘若氢原子在无观测者干扰的情形下自发地演化到 t 时刻($t > 0$)，

① 求出氢原子在 t 时刻的波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 。

② 体系能量的平均值是多少？它是否随时间变化？

③ t 时刻电子轨道角动量量子数取值为 $l = m = 1$ 的概率是多少？

④ 倘若观测者在 t 时刻对电子的轨道角动量进行了一次测量，测量值为

$L^2 = 2\hbar^2$, $L_3 = -\hbar$, 请问测量完成后体系的量子态由哪个波函数描写？

解：

① 氢原子的能量本征值方程是

$$H\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = E_n\psi_{nlm}(\mathbf{r}), \quad E_n = \frac{E_1}{n^2}, \quad E_1 = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$$

所以，

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \exp(-iHt/\hbar)\Psi(\mathbf{r}, 0) \\ &= \frac{1}{\sqrt{5}} \exp(-iHt/\hbar) \left[\sqrt{3}\psi_{100}(\mathbf{r}) + \psi_{211}(\mathbf{r}) - i\psi_{21,-1}(\mathbf{r}) \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{5}} \left[\sqrt{3}e^{-iE_1 t/\hbar}\psi_{100}(\mathbf{r}) + e^{-iE_1 t/4\hbar}\psi_{211}(\mathbf{r}) - i e^{-iE_1 t/4\hbar}\psi_{21,-1}(\mathbf{r}) \right] \end{aligned}$$

② $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 态下体系能量的系综平均值为：

$$\langle E \rangle = \frac{1}{5} \left[3E_1 + 2 \times \frac{E_1}{4} \right] = \frac{7E_1}{10} = \frac{7\mu e^4}{20\hbar^2}$$

它不随时间变化。

③ t 时刻体系轨道角动量量子数取值 $l = m = 1$ 的概率为：

$$P_{l=m=1} = \left| \frac{1}{\sqrt{5}} \exp(-iE_1 t/4\hbar) \right|^2 = \frac{1}{5} = 0.2$$

④ 测量完成后，体系所处的量子态为 $\psi_{21,-1}(\mathbf{r})$ 。

3. 某量子力学体系存在着可观测力学量 \hat{A} 与 \hat{B} ，它们均与体系的哈密顿算符 \hat{H}

对易，即有 $[\hat{A}, \hat{H}] = [\hat{B}, \hat{H}] = 0$ 。但 \hat{A} 与 \hat{B} 之间是反对易的，

$$\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$$

且 \hat{A} 和 \hat{B} 均没有零本征值。进一步假设体系的量子态空间是一个有限维的

Hilbert 空间。试证明：

① 系统的能量本征态必定都是简并的。

② 力学量算符 \hat{A} 和 \hat{B} 对应矩阵的迹为零, 即有 $\text{tr}(\hat{A}) = \text{tr}(\hat{B}) = 0$.

解:

① 设 $|n\rangle$ 是哈密顿算符 \hat{H} 与力学量算符 \hat{A} 的某个共同本征态,

$$\hat{H}|n\rangle = \epsilon_n|n\rangle, \quad \hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$$

按题设, $a_n \neq 0$. 因为 $[\hat{B}, \hat{H}] = 0$ 与 $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$, 我们看到:

$$\hat{H}[\hat{B}|n\rangle] = \hat{B}[\hat{H}|n\rangle] = \hat{B}[\epsilon_n|n\rangle] = \epsilon_n[\hat{B}|n\rangle]$$

以及,

$$\hat{A}[\hat{B}|n\rangle] = -\hat{B}[\hat{A}|n\rangle] = -\hat{B}[a_n|n\rangle] = -a_n[\hat{B}|n\rangle]$$

前一个方程表明 $|n\rangle$ 与 $\hat{B}|n\rangle$ 均是哈密顿算符 \hat{H} 属于同一本征值 ϵ_n 的本征矢量,

后一方程表明 $|n\rangle$ 与 $\hat{B}|n\rangle$ 是另一力学量算符 \hat{A} 属于不同本征值 a_n 与 $-a_n$ 的本征矢量. 所以,

$$\hat{B}|n\rangle \neq b_n|n\rangle, \quad \langle n|\hat{B}|n\rangle = 0$$

亦即能量本征值 ϵ_n 是简并的. 鉴于 ϵ_n 选择上的任意性, 我们得知体系的所有能量本征值均是简并的.

② 很明显,

$$\text{tr}(\hat{B}) = \sum_n \langle n|\hat{B}|n\rangle = \sum_n 0 = 0$$

因为 $|n\rangle$ 与 $\hat{B}|n\rangle$ 成对出现, 它们分别是力学量算符 \hat{A} 属于本征值 a_n 与 $-a_n$ 的归一化本征矢量,

$$\langle n|n\rangle = 1, \quad [\langle n|\hat{B}^\dagger][\hat{B}|n\rangle] = \langle n|\hat{B}^2|n\rangle = 1$$

我们有:

$$\begin{aligned}
\text{tr}(\hat{A}) &= \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle = \frac{1}{2} \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle + \frac{1}{2} \sum_n [\langle n | \hat{B}^\dagger] \hat{A} [\hat{B} | n \rangle] \\
&= \frac{1}{2} \sum_n \langle n | (\hat{A} + \hat{B} \hat{A} \hat{B}) | n \rangle \\
&= \frac{1}{2} \sum_n a_n \langle n | (\hat{I} - \hat{B}^2) | n \rangle \\
&= \frac{1}{2} \sum_n a_n (1 - 1) \\
&= 0
\end{aligned}$$

4. 自旋 $\frac{1}{2}$ 的量子力学体系可以处在两种不同的量子态上,

$$|\psi_1\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \frac{1}{2} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle, \quad |\psi_2\rangle = \frac{1}{2} \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$$

式中 $\left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle$ 是泡利矩阵 σ_3 的本征右矢,

$$\sigma_3 \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle = \pm \left| \pm \frac{1}{2} \right\rangle.$$

① 假设对这两种自旋态进行同一方向 n 上的投影测量, 测量算符为 $\sigma \cdot n$. 请问力学量算符 $\sigma \cdot n$ 的本征值和本征态分别是多少? 当 n 为何种方向取值时, 两输入态对应的测量值和塌缩几率完全相同?

② 现对该系统外加一沿方向 n 的匀强磁场, 对应的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \hbar \omega \sigma \cdot n$$

式中 ω 是一具有频率量纲的实参数. 请问是否存在某个方向 n , 使得动力学演化下 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 都可以演化到各自的正交态上, 即系统么正演化满足条件

$$\langle \psi_1 | \hat{U}(t) | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | \hat{U}(t) | \psi_2 \rangle = 0$$

如果存在这样的 n , 试给出具体的演化时长 t .

解:

① 因为 $\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k$, 倘若设 $\sigma \cdot n$ 的本征值方程为 $\sigma \cdot n |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle$, 不难看到:

$$\lambda^2 |\lambda\rangle = (\sigma \cdot n)^2 |\lambda\rangle = \sigma_i \sigma_j n_i n_j |\lambda\rangle = (\delta_{ij} + i \epsilon_{ijk} \sigma_k) n_i n_j |\lambda\rangle = n_i n_i |\lambda\rangle = |\lambda\rangle$$

所以：

$$\lambda^2 = 1, \quad \lambda = \pm 1$$

在泡利表象中， $\sigma \cdot n$ 属于本征值 $\lambda_{\uparrow} = 1$ 的归一化本征矢量可取为：

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) e^{i\phi} \end{bmatrix} = \cos(\theta/2) \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \sin(\theta/2) e^{i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$\sigma \cdot n$ 属于本征值 $\lambda_{\downarrow} = -1$ 的归一化本征矢量可取为：

$$|\downarrow\rangle = \begin{bmatrix} \sin(\theta/2) \\ -\cos(\theta/2) e^{i\phi} \end{bmatrix} = \sin(\theta/2) \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \cos(\theta/2) e^{i\phi} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$$

由此知：

$$\left| \frac{1}{2} \right\rangle = \cos(\theta/2) |\uparrow\rangle + \sin(\theta/2) |\downarrow\rangle, \quad \left| -\frac{1}{2} \right\rangle = \sin(\theta/2) e^{-i\phi} |\uparrow\rangle - \cos(\theta/2) e^{-i\phi} |\downarrow\rangle$$

二输入自旋态可分别表达为：

$$|\psi_1\rangle = \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \cos(\theta/2) - \frac{1}{2} \sin(\theta/2) e^{-i\phi} \right] |\uparrow\rangle + \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\theta/2) + \frac{1}{2} \cos(\theta/2) e^{-i\phi} \right] |\downarrow\rangle$$

和

$$|\psi_2\rangle = \left[\frac{1}{2} \cos(\theta/2) - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\theta/2) e^{-i\phi} \right] |\uparrow\rangle + \left[\frac{1}{2} \sin(\theta/2) + \frac{\sqrt{3}}{2} \cos(\theta/2) e^{-i\phi} \right] |\downarrow\rangle$$

在二输入态下测量 $\sigma \cdot n$ 获得测量值为 $\lambda_{\uparrow} = 1$ 的概率分别为：

$$P_{1\uparrow} = |\langle \uparrow | \psi_1 \rangle|^2 = \frac{3}{4} \cos^2(\theta/2) + \frac{1}{4} \sin^2(\theta/2) - \frac{\sqrt{3}}{4} \sin \theta \cos \phi$$

和

$$P_{2\uparrow} = |\langle \uparrow | \psi_1 \rangle|^2 = \frac{1}{4} \cos^2(\theta/2) + \frac{3}{4} \sin^2(\theta/2) - \frac{\sqrt{3}}{4} \sin \theta \cos \phi$$

$P_{1\uparrow} = P_{2\uparrow}$ 的条件是：

$$\cos(\theta/2) = \pm \sin(\theta/2)$$

注意到极角 θ 的定义域是 $0 \leq \theta \leq \pi$ ，此条件仅在 $\theta = \pi/2$ 情形下才能成立（方位角 ϕ 的取值无限制）。

② 时间演化算符是：

$$\hat{U}(t) = e^{-it\hat{H}/\hbar} = \exp(-i\omega t \sigma \cdot n) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\omega t)^n}{n!} (\sigma \cdot n)^n$$

注意到 $(\sigma \cdot n)^2 = I$ ，上式可简化为：

$$\hat{U}(t) = \cos(\omega t) - i \sin(\omega t) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})$$

任意的自旋态 $|\psi\rangle$ 要演化到其正交态，必然要保证条件：

$$0 = \langle \psi | \hat{U}(t) | \psi \rangle = \cos(\omega t) - i \sin(\omega t) \langle \psi | (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) | \psi \rangle$$

厄米算符（例如 $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ ）在任意量子态下的平均值均为实数。计及这一要素，上面的条件可重新表为：

$$\cos(\omega t) = 0, \quad \rightarrow t = \left(\frac{2n+1}{2\omega} \right) \pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

以及

$$\langle \psi | (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) | \psi \rangle = 0$$

对于给定的两个初始自旋态而言，我们有：

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) |\psi_1\rangle = \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \cos(\theta/2) - \frac{1}{2} \sin(\theta/2) e^{-i\phi} \right] |\uparrow\rangle - \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\theta/2) + \frac{1}{2} \cos(\theta/2) e^{-i\phi} \right] |\downarrow\rangle$$

与

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) |\psi_2\rangle = \left[\frac{1}{2} \cos(\theta/2) - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin(\theta/2) e^{-i\phi} \right] |\uparrow\rangle - \left[\frac{1}{2} \sin(\theta/2) + \frac{\sqrt{3}}{2} \cos(\theta/2) e^{-i\phi} \right] |\downarrow\rangle$$

由此知：

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) | \psi_1 \rangle &= \frac{1}{2} \cos \theta - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta \cos \phi \\ \langle \psi_2 | (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) | \psi_2 \rangle &= -\frac{1}{2} \cos \theta - \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta \cos \phi \end{aligned}$$

所以， $\langle \psi_1 | (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) | \psi_2 \rangle = 0$ 的成立要求极角取值 $\theta = \pi/2$ 与方位角取值 $\phi = \pi/2$ 或者 $\phi = 3\pi/2$ 。换言之， $\mathbf{n} = (0, \pm 1, 0)$ 。

5. 两全同粒子被置于一宽度为 a 的无限深势阱中， $0 \leq x_1, x_2 \leq a$ 。粒子质量为 μ 。

两粒子间存在一个很弱的等效短程排斥相互作用，

$$V(x_1, x_2) = \begin{cases} V_0, & |x_1 - x_2| \leq b \\ 0, & |x_1 - x_2| > b \end{cases}$$

此处 $0 < b \ll a$, $V_0 > 0$ 。

① 如果两粒子为自旋为零的玻色子，忽略粒子间的相互作用，求出此体系

基态和第一激发态的归一化波函数与相应的能量本征值.

② 计及粒子间的相互作用, 精确到微扰论的一级修正, 计算上一问中体系基态与第一激发态的能量本征值. 结果保留到参数 b 的非零领头阶.

③ 如果两粒子是一对自旋 $1/2$ 费米子, 且体系的自旋态处于三重态之一的

$$|11\rangle = \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$$

忽略粒子间的相互作用, 求出此体系基态归一化波函数与相应的能量本征值.

④ 计及粒子间的相互作用, 精确到微扰论的一级修正, 计算上一问中二费米子体系基态能量本征值. 结果保留到参数 b 的非零领头阶.

⑤ 比较以上计算中, 费米子与玻色子基态能量一级修正的大小. 然后, 请从基本原理角度论证结果为何如此.

解:

① 对于自旋为零的二玻色子构成的体系, 其基态波函数为:

$$\phi_B^{(0)}(x_1, x_2) = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right), \quad 0 \leq x_1, x_2 \leq a$$

体系的基态能量为:

$$E_B^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{\mu a^2}$$

体系第一激发态的波函数为:

$$\phi_B^{(1)}(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{a} \left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right) \right], \quad 0 \leq x_1, x_2 \leq a$$

体系第一激发态能量为:

$$E_B^{(1)} = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2}$$

② 计及粒子之间微弱的相互作用之后, 二全同玻色子体系基态能量的修正为:

$$\Delta E_B^{(0)} = \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 V(x_1, x_2) |\psi_B^{(0)}(x_1, x_2)|^2 \approx 3V_0 \frac{b}{a}$$

而第一激发态能量的修正为:

$$\Delta E_B^{(1)} = \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 V(x_1, x_2) |\psi_B^{(1)}(x_1, x_2)|^2 \approx 4V_0 \frac{b}{a}$$

③ 对于由两个旋量粒子构成的全同费米子体系，其基态波函数的空间因子应关于二粒子交换反对称：

$$\phi_F^{(0)}(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{a} \left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) - \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right) \right], \quad 0 \leq x_1, x_2 \leq a$$

体系的基态能量为：

$$E_F^{(0)} = \frac{5\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2}$$

④ 计及二粒子之间的相互作用后，二全同费米子体系基态能量的修正为：

$$\Delta E_F^{(0)} = \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 V(x_1, x_2) |\psi_F^{(0)}(x_1, x_2)|^2 \approx V_0 \frac{5\pi^2 b^3}{3a^3}$$

⑤ 因为 $0 < \frac{b}{a} \ll 1$ ，我们看到：

$$\Delta E_F^{(0)} \ll \Delta E_B^{(0)}$$

这是因为存在泡利不相容原理，二全同费米子不能占据空间同一位置。所以，二费米子之间的短程相互作用对能级的修正并不重要。