第四次作业参考解答

王英洁

2020 年 1 月 4 日

目录

问题一　平移算子

X 和 P_x 分别是粒子在 x 方向上的位置算子和动量算子,

1. 计算对易子
$$\left[X, \exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)\right]$$
2. 利用上面得到的结果证明 $\exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)|x'\rangle$ 是 X 的本征态, 对应的本征值是多少?

1.1　第一问

直接展开计算不算太繁:

$$\begin{aligned}
\left[X, \exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)\right] &= \left[X, \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)^n\right] \\
&= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\mathrm{i}a}{\hbar}\right)^n [X, P_x^n] \\
&= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{\mathrm{i}a}{\hbar}\right)^n n\mathrm{i}\hbar P_x^{n-1} \\
&= -a\sum_{m=0}^{\infty}\frac{1}{m!}\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)^m \\
&= -a\exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right),
\end{aligned}$$

当然也可利用 BCH 公式

$$\begin{aligned}
\exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)X\exp\left(-\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right) &= X + \frac{\mathrm{i}a}{\hbar}[P_x, X] = X + a, \\
\implies \quad \exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)X &= X\exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right) + a\exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right) \\
\implies \quad \left[X, \exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)\right] &= -a\exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right).
\end{aligned}$$

1.2　第二问

$$X\left[\exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)|x'\rangle\right]=\left[\exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)X-a\exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)\right]|x'\rangle$$
$$=(x'-a)\exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)|x'\rangle,$$

故 $\exp\left(\frac{\mathrm{i}aP_x}{\hbar}\right)|x'\rangle$ 是 X 的本征值为 $x'-a$ 的本征态.

问题二　一维定态问题

考虑粒子在一维势 $V(x)$ 中的运动. 哈密顿量的本征函数记作 $\varphi(x)$. 证明: 如果

$$\varphi(x)\xrightarrow{x\to\pm\infty}0,$$

那么, 除了相因子的差异, 哈密顿量的本征值是非简并的, 而且 $\varphi(x)$ 是实函数.

设 φ_1 和 φ_2 均为 H 的本征值为 E 的本征函数, 则

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi_1}{\mathrm{d}x^2}=(V-E)\,\varphi_1,$$
$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi_2}{\mathrm{d}x^2}=(V-E)\,\varphi_2,$$
$$\Longrightarrow\ (V-E)\,\varphi_2\frac{\mathrm{d}^2\varphi_1}{\mathrm{d}x^2}=(V-E)\,\varphi_1\frac{\mathrm{d}^2\varphi_2}{\mathrm{d}x^2},$$

$V(x)-E\neq 0$ 处, 显然 $\varphi_2\varphi_1''=\varphi_1\varphi_2''$; $V(x)=E$ 处, 由定态方程知二阶导为零, 上式依然成立, 故在整个实轴上有

$$\varphi_2\frac{\mathrm{d}^2\varphi_1}{\mathrm{d}x^2}-\varphi_1\frac{\mathrm{d}^2\varphi_2}{\mathrm{d}x^2}=0,$$

则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\mathrm{d}\varphi_1}{\mathrm{d}x}\varphi_2-\frac{\mathrm{d}\varphi_2}{\mathrm{d}x}\varphi_1\right)=\varphi_2\frac{\mathrm{d}^2\varphi_1}{\mathrm{d}x^2}-\varphi_1\frac{\mathrm{d}^2\varphi_2}{\mathrm{d}x^2}=0,$$

知 $\varphi_1'\varphi_2-\varphi_2'\varphi_1$ 在实轴上为常数. 而 $\lim\limits_{x\to\pm\infty}\varphi=0$, 知在实轴上有 $\varphi_1'\varphi_2-\varphi_2'\varphi_1=0$, 故

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{\varphi_1}{\varphi_2}\right)=\frac{\varphi_1'\varphi_2-\varphi_1\varphi_2'}{\varphi_2^2}=0,$$

故 φ_1 与 φ_2 成正比. 考虑到它们都是归一化的, 故仅差一个相因子.

为证明可以选择相因子使 φ 是实的, 不妨先任取 φ 的相位, 考虑到

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V\right)\varphi=E\varphi,$$
$$\Longrightarrow\quad\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V\right)\varphi^*=E\varphi^*,$$

则令 $\psi = \dfrac{\varphi + \varphi^*}{2}$, ψ 即是实解.

问题三　一维无限深方势阱

一维无限深方势阱, 粒子被限定在 $0 < x < a$ 范围. 初始时刻系统的波函数为

$$\psi(x) = A\left[\sin\left(\frac{5\pi x}{2a}\right)\cos\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]$$

其中 A 为归一化常数.

1. 初始时刻用仪器测量系统的能量, 发现系统处于基态的几率是多少?
2. 写出 t 时刻系统的波函数.

3.1　第一问

先定出 A.

$$\begin{aligned}
&\int_0^a \left[\sin\left(\frac{5\pi x}{2a}\right)\cos\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right]^2 \mathrm{d}x \\
=&\int_0^a \frac{1}{8}\left[-2\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) - 8\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + 4\cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + 4\cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right. \\
&\qquad\left. -4\cos\left(\frac{5\pi x}{a}\right) - \cos\left(\frac{6\pi x}{a}\right) + 2\cos\left(\frac{7\pi x}{a}\right) - \cos\left(\frac{8\pi x}{a}\right) + 6\right]\mathrm{d}x \\
=&\frac{3a}{4},
\end{aligned}$$

故 $A = \dfrac{2}{\sqrt{3a}}$ （取相位角为 0）. 于是

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{2}{\sqrt{3a}}\left[\sin\left(\frac{5\pi x}{2a}\right)\cos\left(\frac{3\pi x}{2a}\right) - \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{3a}}\left[2\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right],
\end{aligned}$$

在 $\mathcal{L}^2(0,a)$ 上, 自由粒子哈密顿量 $\hat{H}_0$ 的表示是 $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}$, 哈密顿量本征方程表示为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{d}x^2} = E\phi,$$

这是简谐振动方程, 解为

$$\phi_n(x) \propto \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad n \in \mathbb{N}^+,$$

归一化得

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad n \in \mathbb{N}^+.$$

于是

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(2\phi_1(x) - \phi_3(x) + \phi_4(x)\right)$$

故能量测量值为基态能量 $E_1 = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ 的概率为 $\dfrac{2}{3}$.

3.2 第二问

由 3.1 知

$$|\psi, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(2\,|1\rangle - |3\rangle + |4\rangle\right),$$

于是

$$\begin{aligned}
|\psi, t\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_1}{\hbar}t}\,|1\rangle - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_3}{\mathrm{i}\hbar}t}\,|3\rangle + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_4}{\mathrm{i}\hbar}t}\,|4\rangle\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}} \left(2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t}\,|1\rangle - \mathrm{e}^{-9\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t}\,|3\rangle + \mathrm{e}^{-8\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{ma^2}t}\,|4\rangle\right) \\
&\doteq \frac{1}{\sqrt{3a}} \left[2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \mathrm{e}^{-9\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \mathrm{e}^{-8\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{ma^2}t} \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right],
\end{aligned}$$

即

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{3a}} \left[2\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \mathrm{e}^{-9\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) + \mathrm{e}^{-8\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{ma^2}t} \sin\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right].$$

问题四 又是一维无限深方势阱

质量为 m 的粒子被限制在宽度为 a 的一维无限深方势阱中,$0 < x < a$.

1. 在初始时刻 $t = 0$, 测量粒子的能量, 发现处于基态的几率是 $\frac{1}{2}$, 处于第一激发态的几率也是 $\frac{1}{2}$. 写出 t 时刻系统波函数的一般形式.
2. 在上一个问题中, 如果初始时刻粒子的平均位置 $\bar{x} = \langle X\rangle > a/2$, 且偏离势阱中心最远, 求出此时粒子的波函数.

4.1 第一问

初始时

$$|\psi, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\,|1\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\,|2\rangle\right), \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R},$$

故

$$|\psi,t\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_1}{\hbar}t}|1\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_2}{\mathrm{i}\hbar}t}|2\rangle\right)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t}|1\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{ma^2}t}|2\rangle\right),$$

表示为

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{a}}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{ma^2}t}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right].$$

4.2　第二问

初始时

$$\langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle \doteq \int_0^a x\frac{1}{a}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right)^2 \mathrm{d}x$$
$$= \frac{1}{18}\left(9 - \frac{32\cos(\alpha-\beta)}{\pi^2}\right)a,$$

$\left\langle\hat{X}\right\rangle > \dfrac{a}{2}$ 则应取 $\cos(\alpha-\beta) = -1$, 于是 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} = -\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}$,

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{a}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\frac{\pi^2\hbar}{ma^2}t}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right].$$

问题五　还是一维无限深方势阱

粒子被限制在宽度为 a 的一维无限深势阱中, 粒子的初态 $|\psi(0)\rangle$ 是基态和第一激发态的叠加. 考虑 t 时刻的量子态 $|\psi(t)\rangle$. 如果允许相位上的差异, 在什么时刻粒子的状态回到初始时刻的量子态? 也就是说, 什么时刻有 $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|$?
如果换作一维谐振子呢?

考虑一般情况. 粒子态处在两个一维本征子空间的直和中, 记为 $|\psi,0\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle$, 其中 $\hat{H}|1\rangle = E_1|1\rangle$, $\hat{H}|2\rangle = E_2|2\rangle$. 于是

$$|\psi,t\rangle = a\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_1}{\hbar}t}|1\rangle + b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_2}{\hbar}t}|2\rangle,$$
$$\hat{\rho}(t) = |a|^2|1\rangle\langle 1| + a^*b\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_2-E_1}{\hbar}t}|2\rangle\langle 1| + ab^*\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{E_2-E_1}{\hbar}t}|1\rangle\langle 2| + |b|^2|2\rangle\langle 2|,$$

显然 $\hat{\rho}(t)$ 具有 $T = \dfrac{2\pi\hbar}{E_2-E_1}$ 的周期. 量子态在 $t = kT, k\in\mathbb{N}^+$ 时刻回归初态.

对于宽为 a 的无限深方势阱, 能级为 $E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, n\in\mathbb{N}^+$, 故周期为

$$T = \frac{2\pi\hbar}{E_2-E_1} = \frac{4ma^2}{3\pi\hbar},$$

而对于一维谐振子, 能级为 $E_n = \left(\frac{1}{2}+n\right)\hbar\omega, n \in \mathbb{N}$, 故周期为

$$T = \frac{2\pi\hbar}{E_1 - E_0} = \frac{2\pi}{\omega}.$$

问题六 一维定态束缚态

在一维定态束缚态问题中, 系统的哈密顿量为

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$$

哈密顿量的本征值设为离散的, 记作 E_m, 相应的本征向量记作 $|m\rangle$.

1. 计算 $[X,[X,H]]$.
2. 证明
$$\sum_n (E_n - E_m)\,|\langle m|X|n\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}$$

6.1 第一问

$$\begin{aligned}\left[\hat{X},\left[\hat{X},\hat{H}\right]\right] &= \left[\hat{X},\frac{\mathrm{i}\hbar}{m}\hat{P}\right]\\ &= -\frac{\hbar^2}{m}.\end{aligned}$$

6.2 第二问

$$\begin{aligned}\sum_n (E_n - E_l)\left|\langle l|\hat{X}|n\rangle\right|^2 &= \sum_n (E_n - E_l)\,\langle l|\hat{X}|n\rangle\,\langle n|\hat{X}|l\rangle\\ &= \left\langle l\middle|\hat{X}\left(\hat{H}-E_l\right)\hat{X}\middle|l\right\rangle\\ &= \frac{1}{2}\left[\left\langle l\middle|\hat{X}\left[\hat{H},\hat{X}\right]\middle|l\right\rangle + \left\langle l\middle|\left[\hat{X},\hat{H}\right]\hat{X}\middle|l\right\rangle\right]\\ &= \frac{1}{2}\left\langle l\middle|\left[\hat{X},\left[\hat{H},\hat{X}\right]\right]\middle|l\right\rangle\\ &= \frac{\hbar^2}{2m}.\end{aligned}$$

问题七　一维势问题

质量为 m 的粒子在一维势 $V(x)$ 中运动. 假设其能量为 $E=\frac{\hbar^2\gamma^2}{2m}$, 相应的本征函数是 $\varphi(x)=\left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/4}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\gamma^2x^2}$, 这里 γ 是一个正实数.

1. 计算粒子的平均位置和平均动量.
2. 给出势能函数.
3. 计算粒子动量的几率密度.

7.1　第一问

$$\begin{aligned}\langle X\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x|\varphi(x)|^2\,\mathrm{d}x\\ &= 0,\\ \langle P\rangle &= -\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi(x)\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x\\ &= 0,\end{aligned}$$

其中两个积分等于零都是根据被积函数是奇函数.

7.2　第二问

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi}{\mathrm{d}x^2} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/4}\left(\gamma^2x^2-1\right)\gamma^2\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\gamma^2x^2}\\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\gamma^2x^2-1\right)\gamma^2\varphi(x)\\ &\equiv \left(E-V(x)\right)\varphi(x),\end{aligned}$$

于是

$$V(x)=\frac{\hbar^2\gamma^4}{2m}x^2.$$

7.3　第三问

$$
\begin{aligned}
\tilde{\varphi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{\gamma\hbar}} \mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\hbar^2\gamma^2}}, \\
\Longrightarrow \qquad f(p) &= |\tilde{\varphi}(p)|^2 \\
&= \frac{1}{\hbar\gamma\sqrt{\pi}} \mathrm{e}^{-\frac{p^2}{\hbar^2\gamma^2}}.
\end{aligned}
$$

问题八　径向距离算子

考虑粒子在三维空间中的运动. 位置算子是 $\boldsymbol{R} = (X, Y, Z)$, 定义径向距离算子 R,

$$
R = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2}
$$

$F(R)$ 是 R 的算子函数. 粒子在中心对称势场中的势能 $V(R)$ 就是一个例子.
现在考虑 $F(R)$ 在动量表象中的表示. 动量的基向量为 $|\boldsymbol{p}\rangle$. 计算

$$
\langle \boldsymbol{p}'' | F(R) | \boldsymbol{p}' \rangle
$$

尽量化简.

作谱分解

$$
\hat{f} = \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\boldsymbol{r}\, f(r)\, |\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\,,
$$

于是

$$
\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{p}'' | \hat{f} | \boldsymbol{p}' \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}\boldsymbol{r}\, f(r) \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'')} \\
&= \frac{1}{4\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty r^2\,\mathrm{d}r\, f(r) \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \sin\theta \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} r \|\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}''\| \cos\theta} \\
&= \frac{1}{2\pi^2\hbar^2} \int_0^\infty r^2\,\mathrm{d}r\, f(r) \frac{\sin(r\|\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}''\|/\hbar)}{r\|\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}''\|}.
\end{aligned}
$$

问题九 量子版 Virial 定理

考虑粒子在三维空间中的运动. 哈密顿量是

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(R)$$

计算对易子 $[\boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{P}, H]$, 并进一步证明

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{P}\rangle = \left\langle \frac{P^2}{m} \right\rangle - \langle \boldsymbol{R} \cdot \nabla V\rangle$$

在什么情况下可以得到与经典力学中的维里 (Virial) 定理类比的形式?

$$\begin{aligned}
\left[\hat{\boldsymbol{X}} \cdot \hat{\boldsymbol{P}}, \hat{H}\right] &= \sum_i \left[\hat{X}_i, \hat{H}\right]\hat{P}_i + \hat{X}_i\left[\hat{P}_i, \hat{H}\right] \\
&= \sum_i \mathrm{i}\hbar \frac{1}{m}\hat{P}_i^2 - \mathrm{i}\hbar \hat{X}_i \widehat{\partial_i V} \\
&= \mathrm{i}\hbar \frac{\hat{\boldsymbol{P}}^2}{m} - \mathrm{i}\hbar \hat{\boldsymbol{X}} \cdot \widehat{\nabla V},
\end{aligned}$$

故

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle \hat{\boldsymbol{X}} \cdot \hat{\boldsymbol{P}}\right\rangle = \left\langle \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\boldsymbol{X}} \cdot \hat{\boldsymbol{P}}, \hat{H}\right]\right\rangle = \left\langle \frac{\hat{\boldsymbol{P}}^2}{m}\right\rangle - \left\langle \hat{\boldsymbol{X}} \cdot \widehat{\nabla V}\right\rangle$$

问题十 Feynman-Hellmann Theorem

设量子系统的哈密顿量的本征值和本征态分别是 E 和 $|\varphi_E\rangle$, 即

$$H|\varphi_E\rangle = E|\varphi_E\rangle$$

假设哈密顿量包含某个参数 λ, 即 $H = H(\lambda)$, 因而本征值与 λ 有关, 即 $E = E(\lambda)$. 证明

$$\left\langle \frac{\partial H(\lambda)}{\partial \lambda}\right\rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda}.$$

Note

这里 $\langle\cdot\rangle = \langle\varphi_E|\cdot|\varphi_E\rangle$.

考虑 $H(\lambda)$ 的本征方程

$$H(\lambda)|\varphi_E(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\varphi_E(\lambda)\rangle,$$

求导得

$$\frac{\partial H}{\partial\lambda}\left|\varphi_E\right\rangle + H\left|\frac{\partial\varphi_E}{\partial\lambda}\right\rangle = \frac{\partial E}{\partial\lambda}\left|\varphi_E\right\rangle + E\left|\frac{\partial\varphi_E}{\partial\lambda}\right\rangle,$$

其中为了使式子看起来简洁我们暂时丢掉 (λ) 并记 $\left|\frac{\partial\varphi_E}{\partial\lambda}\right\rangle := \frac{\partial}{\partial\lambda}\left|\varphi_E(\lambda)\right\rangle$. 注意到左边已经有了 $\frac{\partial H}{\partial\lambda}\left|\varphi_E\right\rangle$, 我们只需再两边与 $\left|\varphi_E\right\rangle$ 做内积:

$$\left\langle\varphi_E\middle|\frac{\partial H}{\partial\lambda}\middle|\varphi_E\right\rangle + E\left\langle\varphi_E\middle|\frac{\partial\varphi_E}{\partial\lambda}\right\rangle = \frac{\partial E}{\partial\lambda} + E\left\langle\varphi_E\middle|\frac{\partial\varphi_E}{\partial\lambda}\right\rangle,$$

证毕.

问题十一 quantum Galilean boost

考虑一维自由粒子的运动. 在参考系 R' 中, 用 $\Psi'(x',t')$ 表示粒子的波函数. Schrödinger 方程是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t'}\Psi'(x',t') = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi'(x',t')}{\partial x'^2}$$

显然 $\Psi(x',t')$ 的形式的平面波.

现在要变换到在参考系 R 中. 用 $\Psi(x,t)$ 表示 R 中粒子的波函数. 注意到两个参考系之间微分算子的关系 (3), 将其代入 (4) 式后, 不能保证 Schrödinger 方程形式不变. 这时应该注意到, 在两个不同的参考系中, 几率密度应该满足

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left|\Psi'(x',t')\right|^2$$

这就意味着两个波函数之间可以有相因子的差别, 即 $\Psi(x,t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}\Psi'(x',t')$. 其中 γ 是空间和时间的函数.

确定 γ , 使得在参考系中 Schrödinger 方程形式不变, 然后再尝试解释前面的佯谬.

将 $\psi'(x',t') = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma}\psi(x,t)$ 反代，得

$$\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t} + v\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma}\psi(x,t)\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma}\psi(x,t)\right) + V\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma}\psi(x,t),$$

化简

$$\begin{aligned}&\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma}\mathrm{i}\hbar\left[\frac{\partial\psi}{\partial t} + v\frac{\partial\psi}{\partial x} - \mathrm{i}\left(\frac{\partial\gamma}{\partial t} + v\frac{\partial\gamma}{\partial x}\right)\psi\right]\\ =& -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma}\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - 2\mathrm{i}\frac{\partial\gamma}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \left[\left(\frac{\partial\gamma}{\partial x}\right)^2 + \mathrm{i}\frac{\partial^2\gamma}{\partial x^2}\right]\psi\right\} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma}V\psi,\end{aligned}$$

利用

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi,$$

有

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\left[v\frac{\partial\psi}{\partial x}-\mathrm{i}\left(\frac{\partial\gamma}{\partial t}+v\frac{\partial\gamma}{\partial x}\right)\psi\right] &= \frac{\hbar^2}{2m}\left\{2\mathrm{i}\frac{\partial\gamma}{\partial x}\frac{\partial\psi}{\partial x}+\left[\left(\frac{\partial\gamma}{\partial x}\right)^2+\mathrm{i}\frac{\partial^2\gamma}{\partial x^2}\right]\psi\right\}, \\
\mathrm{i}\left(v-\frac{\hbar}{m}\frac{\partial\gamma}{\partial x}\right)\frac{\partial\psi}{\partial x} &= \left\{\frac{\hbar}{2m}\left[\left(\frac{\partial\gamma}{\partial x}\right)^2+\mathrm{i}\frac{\partial^2\gamma}{\partial x^2}\right]-\left(\frac{\partial\gamma}{\partial t}+v\frac{\partial\gamma}{\partial x}\right)\right\}\psi,
\end{aligned}
$$

必有

$$
\begin{cases}
v-\dfrac{\hbar}{m}\dfrac{\partial\gamma}{\partial x}=0, \\
\dfrac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\dfrac{\partial^2\gamma}{\partial x^2}+\dfrac{\hbar}{2m}\left(\dfrac{\partial\gamma}{\partial x}\right)^2-v\dfrac{\partial\gamma}{\partial x}-\dfrac{\partial\gamma}{\partial t}=0,
\end{cases}
$$

第一式 $\Longrightarrow$ $\dfrac{\partial\gamma}{\partial x}=\dfrac{mv}{\hbar}$，代入第二式，知 $\dfrac{\partial\gamma}{\partial t}=-\dfrac{mv^2}{2\hbar}$，于是

$$
\gamma(t,x)=\frac{mv}{\hbar}x-\frac{mv^2}{2\hbar}t+C,\quad C\in\mathbb{C}.
$$

忽略整体相因子，有

$$
\psi'(x',t')=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(mvx-\frac{1}{2}mv^2t\right)}\psi(x,t).
$$

回到德布罗意关系上, 设

$$
\psi(x,t)=\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\left(\frac{x}{\lambda}-\omega t\right)},
$$

则

$$
\psi'(x',t')=\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\left[\left(\frac{1}{\lambda}-\frac{mv}{h}\right)x-\left(\omega-\frac{mv^2}{2h}\right)t\right]},
$$

可以看到波长是改变的.