

量子物理期末总结

阿笠博士

June 3, 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 $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 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

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

因此，动能为

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

动量近似为

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

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

$$\langle K \rangle = \frac{3}{2}k_B T,$$

其中 $k = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$ 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 $R = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ 是里德伯常数。

2 波函数

2.1 定义

记 $\Psi : \mathbb{R}^3 \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{C}$ 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

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\tilde{\Psi}|^2 dV = 1. \quad (2.1)$$

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

$$|\Psi(x, y, z, t)|^2 dx dy dz.$$

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

$$\begin{aligned}\text{Pr}_A &= \left| \tilde{\Psi}(x, y, z, t) \right|^2 dx dy dz, \\ \text{Pr}_B &= \left| \tilde{\Phi}(x, y, z, t) \right|^2 dx dy dz = |\lambda|^2 \left| \tilde{\Psi}(x, y, z, t) \right|^2 dx dy dz = \left| \tilde{\Psi}(x, y, z, t) \right|^2 dx dy dz,\end{aligned}$$

因此 $\text{Pr}_A = \text{Pr}_B$, $\tilde{\Psi}$, $\tilde{\Phi}$ 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

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

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 Ψ_1, \dots, Ψ_n 与常数 $c_1, \dots, c_n \in \mathbb{C}$, 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 $dV = dx dy dz$, $dV_p = dp_x dp_y dp_z$ 。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：

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

令 $\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z) f(t)$ ，可得

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

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

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V \Psi &= E \Psi, \\ f' &= -\frac{iE}{\hbar} f. \end{aligned}$$

可得

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

因此

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

我们只需求解

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

对应的 Ψ, E 即可。将该方程称为定态薛定谔方程， $\Psi(x, y, z)$ 称为定态波函数，并且它对应 $t = 0$ 时的波函数，即

$$\Psi(x, y, z) = \Psi(x, y, z, 0).$$

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

$$E > \inf V. \quad (2.3)$$

定义平方可积函数的内积

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

它们满足以下性质:

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

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 $\{\Psi_n, E_n\}, n = 1, 2, 3, \dots$ 满足

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

其中 Ψ_n 均是归一化的。将 $\{\Psi_n, E_n\}, n = 1, 2, 3, \dots$ 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

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

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, \dots ，对应的概率分别为

$$\Pr \{E = E_n\} = |c_n|^2. \quad (2.9)$$

能量的平均值为

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \Pr \{E = E_n\} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n. \quad (2.10)$$

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

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

$\Psi''(x)$ 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

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

$\Psi'(x), \Psi''(x)$ 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 $E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega, n = 0, 1, 2, \dots$ 即可。

2.6.2 概率流

定义概率流为

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

它的散度为

$$\operatorname{div} J = \frac{i\hbar}{2m} (\nabla\Psi \cdot \nabla\bar{\Psi} + \Psi\Delta\bar{\Psi} - \nabla\bar{\Psi} \cdot \nabla\Psi - \bar{\Psi}\Delta\Psi) = \frac{i\hbar}{2m} (\Psi\Delta\bar{\Psi} - \bar{\Psi}\Delta\Psi),$$

根据(2.2)可得

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

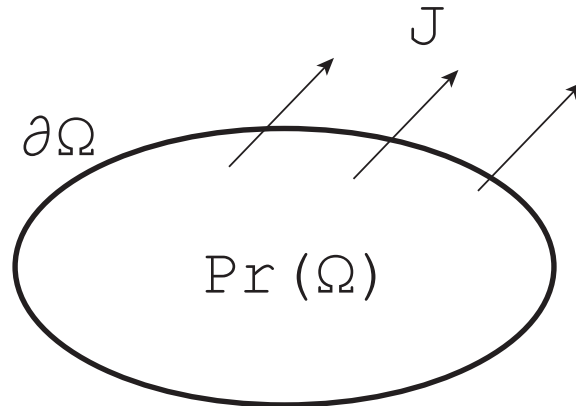
因此

$$\operatorname{div} J = -\Psi\frac{\partial\bar{\Psi}}{\partial t} - \bar{\Psi}\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\partial|\Psi|^2}{\partial t}.$$

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

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

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 $A : C_c^\infty \rightarrow C_c^\infty$, 即对于任意光滑函数 Ψ, Φ 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 $\lambda_n (n = 1, 2, 3, \dots)$ 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 Ψ ($\|\Psi\| = 1$)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 $\lambda_n, n = 1, 2, 3, \dots$ ，并且测量结果为 λ_i 的概率为

$$\Pr \{ \lambda_i \} = |c_i|^2, \quad (3.3)$$

因此

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

测量的平均值为

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

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

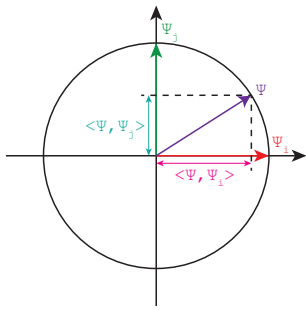
$$T\Psi = \sum_{j=1}^{\infty} c_j (T\Psi_j).$$

而 $T\Psi_j$ 也是光滑函数，因此它可以表示为

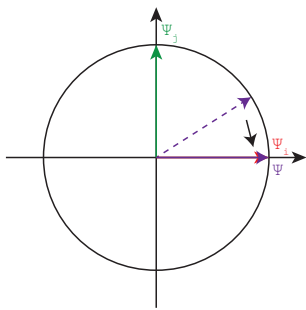
$$T\Psi_j = \sum_{i=1}^{\infty} T_{ij} \Psi_i.$$

其中 T_{ij} 是常数，根据(3.2)可得

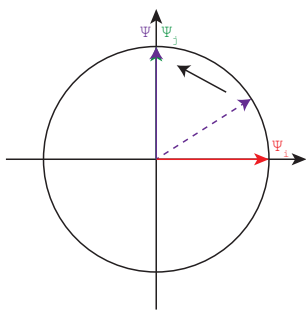
$$T_{ij} = \langle \Psi_i, T\Psi_j \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \overline{\Psi_i} (T\Psi_j) dV. \quad (3.5)$$



测量粒子的可观测量 A 之后，
波函数会以 $|\langle \Psi, \Psi_i \rangle|^2$ 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

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

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 ($n = 1, 2, 3, \dots$) 的期望值为

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

动量算子 n 次方 P^n ($n = 1, 2, 3, \dots$) 的期望值为

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

因此, 势能 V 的期望值为

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

动能 K 的期望值为

$$\langle K \rangle = \frac{\langle P^2 \rangle}{2m} = \frac{(-i\hbar)^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\Psi}\Psi^{(2)} dx.$$

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

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

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 $\langle K \rangle$ ：

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

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”)

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

定义位置算子 X, Y, Z 与动量算子 P_x, P_y, P_z 为

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

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

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

定义角动量算子 L_x, L_y, L_z 为

$$\begin{aligned}L_x &= YP_z - ZP_y, \\ L_y &= ZP_x - XP_z, \\ L_z &= XP_y - YP_x.\end{aligned}$$

可得

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= i\hbar L_z, \\ [L_y, L_z] &= i\hbar L_x, \\ [L_z, L_x] &= i\hbar L_y.\end{aligned}$$

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

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

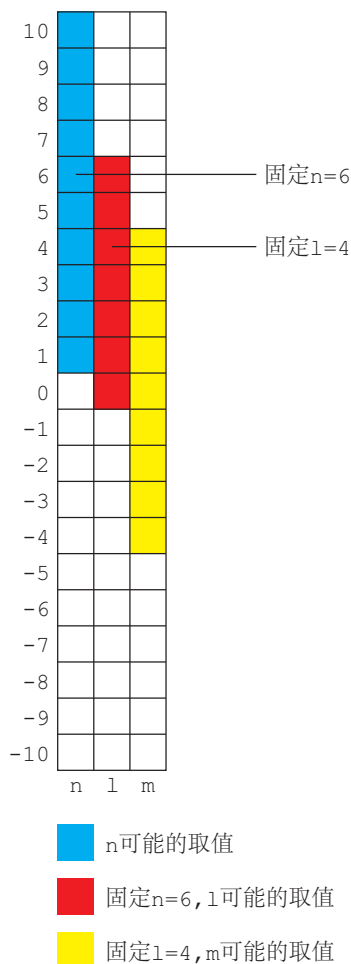
当 $V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ 时, 即 $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$, 通过复杂的计算得出, 氢原子波函数 $\Psi_{n,l,m}$ 同时为线性算子 $\{H, L^2, L_z\}$ 的本征态, 其本征值分别为

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

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

$$\begin{aligned}n &= 1, 2, 3, \dots, \\ l &= 0, 1, 2, \dots, n-1, \\ m &= -l, -l+1, \dots, l-1, l.\end{aligned}$$

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 $m\hbar$ 。



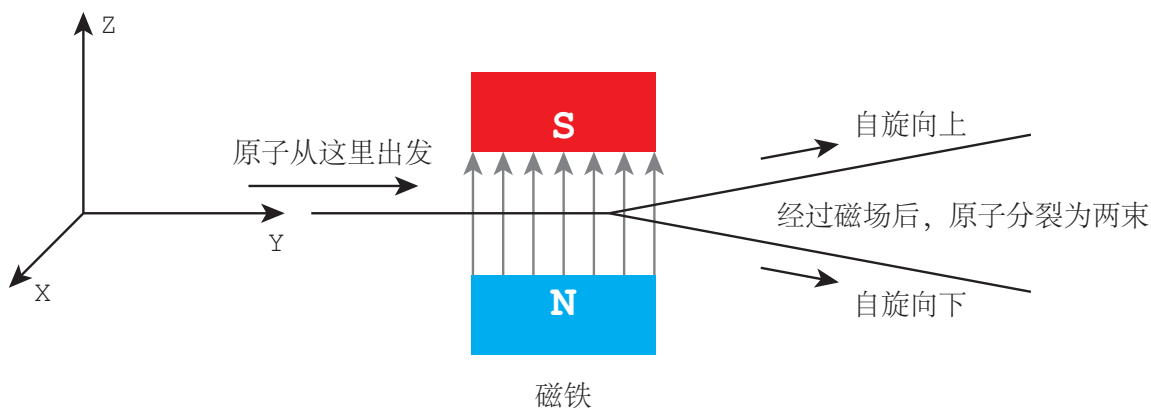
氢原子波函数是归一化的，并满足

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\Psi_{n,l,m}|^2 dV = 1,$$

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

4 自旋

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)

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

我们记

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

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

$$\Psi \longleftrightarrow \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}. \quad (4.1)$$

而波函数是归一化的，因此

$$|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1. \quad (4.2)$$

因此，如果已知线性算子 A 的矩阵表示

$$\begin{pmatrix} A_{00} & A_{01} \\ A_{10} & A_{11} \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

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 λ ，那么

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

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

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

5 例题

5.1

对于一维无限深方势阱

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

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: 根据习题2.3答案可得, 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

$$\Psi(x, t) = c_1 \Psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \Psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} = \frac{2}{\sqrt{5}} \sin \frac{\pi x}{a} e^{-n^2 \pi^2 \hbar i/2ma^2} + \frac{1}{\sqrt{5}} \sin \frac{2\pi x}{a} e^{-2n^2 \pi^2 \hbar i/ma^2}.$$

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

$$\begin{aligned} \int_0^{a/2} |\Psi(x, t)|^2 dx &= \int_0^{a/2} \bar{\Psi} \Psi dx \\ &= \int_0^{a/2} \left(\bar{c}_1 \bar{\Psi}_1 e^{iE_1 t/\hbar} + \bar{c}_2 \bar{\Psi}_2 e^{iE_2 t/\hbar} \right) \left(c_1 \Psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \Psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} \right) dx \\ &= \int_0^{a/2} |c_1|^2 |\Psi_1|^2 + |c_2|^2 |\Psi_2|^2 + \bar{c}_1 c_2 \bar{\Psi}_1 \Psi_2 e^{i(E_1 - E_2)t/\hbar} + c_1 \bar{c}_2 \Psi_1 \bar{\Psi}_2 e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar} dx \\ &= \frac{1}{2} + \frac{16}{15\pi} \cos \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}. \end{aligned}$$

5.2

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)与(2.12)可得

$$\begin{aligned} 1 + r &= t, \\ k(1 - r) &= lt. \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} r &= \frac{k - l}{k + l}, \\ t &= \frac{2k}{k + l}. \end{aligned}$$

我们将入射波、反射波、透射波分别记为

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

它们的概率流分别为

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

因此，反射率与透射率分别为

$$R = \frac{J_r}{J_i} = r^2 = \frac{(\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0})^2}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^2},$$

$$T = \frac{J_t}{J_i} = \frac{l}{k} t^2 = \frac{4\sqrt{E}\sqrt{E - V_0}}{(\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0})^2}.$$

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

$$\begin{aligned} 1 + r &= t, \\ k(1 - r) &= ilt. \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} r &= \frac{k - il}{k + il}, \\ t &= \frac{2k}{k + il}. \end{aligned}$$

我们将入射波、反射波、透射波分别记为

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

它们的概率流分别为

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

因此，反射率与透射率分别为

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

因此

$$R + T = 1.$$

5.3

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

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

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

求解：粒子出现在区域 Ω 的概率为

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

因此，粒子出现在区域 Ω 之外的概率为

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

5.4

一个原子在势能为 $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ 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

$$\Psi(x, t) = \cos \frac{\theta}{2} \Psi_0(x) e^{-iE_0 t/\hbar} + \sin \frac{\theta}{2} \Psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} = \cos \frac{\theta}{2} \Psi_0(x) e^{-i\omega t/2} + \sin \frac{\theta}{2} \Psi_1(x) e^{-3i\omega t/2}.$$

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

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

5.5

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

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

动量算子 P 的矩阵表示为

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

哈密顿算子 H 的矩阵表示为

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

5.6

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

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

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

$$\begin{aligned} \Pr \left\{ \frac{\hbar}{2} \right\} &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos \theta + \sin \theta) \right|^2 = \frac{1}{2} (1 + \sin 2\theta), \\ \Pr \left\{ -\frac{\hbar}{2} \right\} &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos \theta - \sin \theta) \right|^2 = \frac{1}{2} (1 - \sin 2\theta). \end{aligned}$$

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

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

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

$$\begin{aligned} \Pr \left\{ \frac{\hbar}{2} \right\} &= |\cos \theta|^2 = \cos^2 \theta, \\ \Pr \left\{ -\frac{\hbar}{2} \right\} &= |\sin \theta|^2 = \sin^2 \theta. \end{aligned}$$

根据(3.4)，平均值为

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

5.7

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

$$\begin{aligned} \Psi_0 &\longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \Psi_1 &\longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

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

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

5.8

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 $M(2, \mathbb{C})$ 是 \mathbb{C} 上的向量空间, 证明 $I, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 是 $M(2, \mathbb{C})$ 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

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

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

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

5.9

根据(4.3)，假设哈密顿算子的矩阵表示为

$$H \longleftrightarrow 2 \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2}i \\ \sqrt{2}i & 2 \end{pmatrix}.$$

- (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？

- (3) 测量粒子的能量，会得到什么结果，并且相应的概率是多少？

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

$$2 \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{2}i \\ \sqrt{2}i & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}.$$

该方程具有2个解，分别为

$$\begin{aligned} c_0 &= \sqrt{\frac{2}{3}}i, & c_1 &= \sqrt{\frac{1}{3}}, & \lambda &= 0, \\ c_0 &= \sqrt{\frac{1}{3}}, & c_1 &= \sqrt{\frac{2}{3}}i, & \lambda &= 6. \end{aligned}$$

因此，本征值分别为0, 6，对应的本征态向量表示分别为

$$\begin{aligned}\Psi_0 &\longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} \sqrt{2}i \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \Psi_1 &\longleftrightarrow \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2}i \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

而

$$\Psi = \chi_0^z,$$

因此，测量粒子自旋在 z 方向的分量，得到结果为 $\hbar/2, -\hbar/2$ 的概率分别为

$$\begin{aligned}\Pr \left\{ \frac{\hbar}{2} \right\} &= 1, \\ \Pr \left\{ -\frac{\hbar}{2} \right\} &= 0.\end{aligned}$$

此外

$$\Psi = -\sqrt{\frac{2}{3}}i\Psi_0 + \sqrt{\frac{1}{3}}\Psi_1,$$

因此，根据(3.3)，测量粒子的能量，得到结果为0, 6的概率分别为

$$\begin{aligned}\Pr \{0\} &= \left| -\sqrt{\frac{2}{3}}i \right|^2 = \frac{2}{3}, \\ \Pr \{6\} &= \left| \sqrt{\frac{1}{3}} \right|^2 = \frac{1}{3}.\end{aligned}$$

5.10

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

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

以及 S_z^A, S_z^B 的本征态向量表示分别为

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

对应的本征值均为 $\pm \frac{\hbar}{2}$ 。

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

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

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

记总角动量平方算子为

$$S^2 = S_x^A \otimes S_x^B + S_y^A \otimes S_y^B + S_z^A \otimes S_z^B,$$

其中

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

因此

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

其本征态的向量表示满足

$$\frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}.$$

该方程具有4个解，分别为

$$\begin{array}{lllll}
 c_0 = 1, & c_1 = 0, & c_2 = 0, & c_3 = 0, & \lambda = \frac{\hbar^2}{4}, \\
 c_0 = 0, & c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, & c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, & c_3 = 0, & \lambda = \frac{\hbar^2}{4}, \\
 c_0 = 0, & c_1 = 0, & c_2 = 0, & c_3 = 1, & \lambda = \frac{\hbar^2}{4}, \\
 c_0 = 0, & c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, & c_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}}, & c_3 = 0, & \lambda = \frac{3\hbar^2}{4}.
 \end{array}$$

因此，本征态与本征值分别为

$$\begin{array}{ll}
 \Psi = |\uparrow\uparrow\rangle, & \lambda = \frac{\hbar^2}{4}, \\
 \Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), & \lambda = \frac{\hbar^2}{4}, \\
 \Psi = |\downarrow\downarrow\rangle, & \lambda = \frac{\hbar^2}{4}, \\
 \Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), & \lambda = \frac{3\hbar^2}{4}.
 \end{array}$$

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。

5.11

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

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

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：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

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

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

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

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

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

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

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