中国科学院——中国科学技术大学

2003年招收攻读硕士学位研究生入学考试试题

考试科目：量子力学（3小时，闭卷，每大题30分）

一．1．如果厄密算符 A 对任何矢量 $|u\rangle$，有 $\langle u|A|u\rangle \geq 0$，则称 A 为正定算符，求证：算符 $A=|a\rangle\langle a|$ 是厄密正定算符．

2．如果 A 是任一线性算符，求证 $A^{+}A$ 是正定的厄密算符，它的迹等于 A 在任意表象中的矩阵元的模平方之和．试推导，当且仅当 $A=0$ 时，$Tr(A^{+}A)=0$ 才成立．

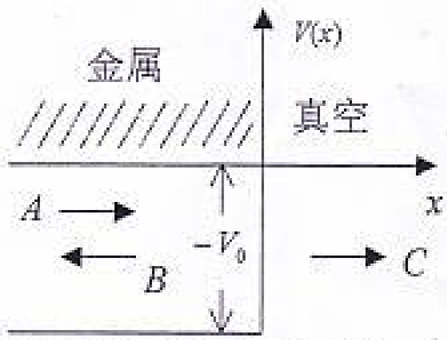
3．求证：如果 $[[A,B],A]=[[A,B],B]=0$，则 $e^{A}e^{B}=e^{A+B}e^{\frac{1}{2}[A,B]}$．

4．求证：任一可观测量的平均值对时间的导数由下式给出：

$$i\hbar\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\langle[A,H]\rangle+i\hbar\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle$$

二．把传导电子限制在金属内部的是金属内势的一种平均势，对于下列一维模型（如图）：

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



试就 (1) $E>0$，(2) $-V_0<E<0$ 两种情况计算接近金属表面的传导电子的反射和透射几率．

三．对于一维谐振子，求消灭算符 a 的本征态，将其表示成各能量本征态 $|n\rangle$ 的线性叠加．

四．给定 (θ,φ) 方向单位矢量

$$\vec{n}=(n_x,n_y,n_z)=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$$

求 $\sigma_n=\vec{\sigma}\cdot\vec{n}$ 的本征值和本征函数．（取 σ_z 表象）．

五．有一个定域电子（不计及其轨道运动）受到均匀磁场作用，磁场 B 指向正 x 方向．磁作用势为：

$$H=\frac{eB}{\mu c}\cdot S_x=\frac{e\hbar B}{2\mu c}\sigma_x$$

设 $t=0$ 时电子的自旋“向上”，即 $S_z=\hbar/2$，求 $t>0$ 时 $\vec{S}$ 的平均值．

2003年硕士学位研究生招生考试《量子力学》考题答案

一. 1. $\langle u|A|v\rangle=\langle u|a\rangle\langle a|v\rangle=\langle v|a\rangle^*\langle a|u\rangle^*=\langle v|A|u\rangle^*$ 厄密

$\langle u|A|u\rangle=\langle u|a\rangle\langle a|u\rangle=|\langle u|a\rangle|^2\geq 0$ 正定

2. 利用 A^+ 的性质，可得：

$\langle u|A^+A|v\rangle=\langle v|A^+A|u\rangle^*$ 即 A^+A 是厄密算符.

现在取 $|u\rangle=|v\rangle$，并写出 $|\omega\rangle=A|u\rangle$，则有：

$\langle u|A^+A|u\rangle=\langle\omega|\omega\rangle\geq 0$ 因此，A^+A 是正定的.

设 $\{|n\rangle\}$ 是正交完备态集，于是有：

$Tr(A^+A)=\sum_n\langle n|A^+A|n\rangle$， 利用 $\sum_n|n\rangle\langle n|=I$，可以得：

$$Tr(A^+A)=\sum_n\langle n|A^+\sum_m|m\rangle\langle m|A|n\rangle$$

$$=\sum_{m,n}\langle n|A^+|m\rangle\langle m|A|n\rangle$$

$$=\sum_{m,n}|\langle n|A|m\rangle|^2\geq 0$$

仅当所有元素 $\langle n|A|m\rangle=0$ 时等号才成立，这等价于算符关系式 $A=0$

3. 令 $f(x)=e^{Ax}e^{Bx}$，并对 x 求微分：

$$\frac{df}{dx}=\left(A+e^{Ax}Be^{-Ax}\right)f(x) \quad 利用公式 e^{xA}Be^{-xA}=B+x[A,B]$$

$$\frac{df}{dx}=\{(A+B)+x[A,B]\}f(x)$$

显然 $f(0)=1$ 则有

$$f(x)=e^{(A+B)x+\frac{x^2}{2}[A,B]}=e^{(A+B)x}e^{\frac{x^2}{2}[A,B]}$$

令 $x=1$，则证毕.

4. 设 $|\psi\rangle$ 已归一化. $\langle A\rangle=\langle\psi,A\psi\rangle$

$$\therefore \quad \frac{d\langle A\rangle}{dt}=\left\langle\frac{\partial\psi}{\partial t},A\psi\right\rangle+\left\langle\psi,A\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\rangle+\left\langle\psi,\frac{\partial A}{\partial t}\psi\right\rangle$$

代入薛定谔方程则有：$i\hbar\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\langle[A,H]\rangle+i\hbar\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle$

二．把$\psi(x,t)=\psi(x)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$代入薛定谔方程，

对于$x<0$ 得 $\frac{d^2\psi_1}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar}(E+V_0)\psi_1=0$

对于$x>0$ 得 $\frac{d^2\psi_2}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar}E\psi_2=0$

方程的通解为：

$\psi_1=Ae^{\frac{i}{\hbar}qx}+Be^{-\frac{i}{\hbar}qx}$， $q=[2m(E+V_0)]^{1/2}$， $x<0$

$\psi_2=Ce^{\frac{i}{\hbar}px}+De^{-\frac{i}{\hbar}px}$， $p=\sqrt{2mE}$， $x>0$

(1) 对于$E>0$，电子波函数为

$$\psi(x,t)=\begin{cases}\psi_1=Ae^{\frac{i}{\hbar}(qx-Et)}+Be^{-\frac{i}{\hbar}(qx+Et)}, & x<0\\ \psi_2=Ce^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}+De^{-\frac{i}{\hbar}(px+Et)}, & x>0\end{cases}$$

显然$D=0$，由$x=0$处连续性得：

$A+B=C$， $q(A-B)=pC$

$\therefore$ $B=\frac{q-p}{q+p}A$， $C=\frac{2q}{q+p}A$.

$|j_A|=|A|^2\frac{q}{m}$， $|j_B|=|B|^2\frac{q}{m}$， $|j_C|=|C|^2\frac{p}{m}$

$$T=\frac{|j_C|}{|j_A|}=\frac{4\sqrt{E(E+V_0)}}{\left(\sqrt{E+V_0}+\sqrt{E}\right)^2},$$

$$R=\frac{|j_B|}{|j_A|}=\frac{V_0^2}{\left(\sqrt{E+V_0}+\sqrt{E}\right)^2}.$$

$T+R=1$

若$E>0$，$R\neq0$；若$E>>V_0$，$R\approx\frac{V_0^2}{16E^2}$

若$0<E<<V_0$，$R\approx1-4\sqrt{\frac{E}{V_0}}$

(2) 在$-V_0<E<0$场合，则：

$q=[2m(V_0-|E|)]^{1/2}$， $p=i(2m|E|)^{1/2}$

在$x>0$区中有界的解是

$$\psi_2 = Ce^{-(x/2d)}, \qquad d = \hbar(8m|E|)^{-1/2}$$

$x=0$处的连续性给出：

$$A+B=C, \qquad \frac{i}{\hbar}q(A-B) = -\frac{1}{2d}C$$

由此得到：$\frac{B}{A} = -\frac{1+\frac{2i}{\hbar}qd}{1-\frac{2i}{\hbar}qd}$，　$\frac{C}{A} = -2\frac{\frac{2i}{\hbar}qd}{1-\frac{2i}{\hbar}qd}$.

在$x>0$，$|\psi_2(x)|^2 = 4|A|^2\frac{V_0-|E|}{V_0}e^{-x/d}$.

三．利用$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$，设$|\alpha\rangle$为$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n|n\rangle$$

$$\alpha|\alpha\rangle = \alpha\sum_{n=0}^{\infty} C_n|n\rangle = a\sum_{n=0}^{\infty} C_n|n\rangle = \sum_n C_n\sqrt{n}|n-1\rangle$$

用$\langle n-1|$左乘，则得：$C_n = \frac{\alpha}{\sqrt{n}}C_{n-1}$

依次递推，得：$C_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}C_0$

利用$\langle\alpha|\alpha\rangle = \sum_n |C_n|^2 = |C_0|^2\sum\frac{|\alpha^2|^n}{n!} = 1$

$\because \quad \sum_{n=0}^{\infty}\frac{|\alpha^2|^n}{n!} = e^{|\alpha|^2}$　　$C_0 = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}e^{i\delta}$，$\delta$为实数，取$\delta=0$

$\therefore \quad |\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$

四．$\sigma_n = \vec{\sigma}\cdot\vec{n} = \sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z = \begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta\end{bmatrix}$

设σ_n的本征函数为$|\phi\rangle = \begin{bmatrix}c_1 \\ c_2\end{bmatrix}$，本征值为$\lambda$，则本征值方程为

$(\sigma_n - \lambda)|\phi\rangle = 0$，求出$\lambda = \pm 1$.

对于$\lambda=1$，可求出$\frac{c_1}{c_2}=\frac{\cos\theta/2}{\sin\theta/2}e^{-i\varphi}$

$$\therefore\ \left|\phi_1(\theta,\phi)\right\rangle=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}\ \text{或}\ \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}$$

对于$\lambda=-1$

$$\left|\phi_{-1}(\theta,\phi)\right\rangle=\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}\\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi}\end{pmatrix}\text{或}\begin{pmatrix}\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}\\ -\cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}\end{pmatrix}$$

五．在S_z表象中，哈密顿算符表示为

$$H=\frac{e\hbar B}{2\mu c}\sigma_x=\hbar\omega\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix},\quad \omega=\frac{eB}{2\mu c}$$

令$\chi(t)=a(t)\chi_{\frac{1}{2}}+b(t)\chi_{-\frac{1}{2}}=\begin{bmatrix}a(t)\\b(t)\end{bmatrix}$

满足 $i\hbar\frac{d\chi(t)}{dt}=H\chi(t)$

初始条件：$\chi(0)=\chi_{\frac{1}{2}}=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，即$a(0)=1,b(0)=0$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}=\hbar\omega\begin{pmatrix}b\\a\end{pmatrix}$$

解为： $\chi(t)=\begin{pmatrix}\cos\omega t\\ -i\sin\omega t\end{pmatrix}$

$\vec{S}$ 的平均值为：

$$\langle S_x\rangle=\frac{\hbar}{2}\chi^+\sigma_x\chi=0$$

$$\langle S_y\rangle=-\frac{\hbar}{2}\sin 2\omega t$$

$$\langle S_z\rangle=\frac{\hbar}{2}\cos 2\omega t$$

也可以用海森堡运动方程求解.