

2022秋易为老师量子力学B

习题十参考解答

宋冰睿 刘丰铨

2022 年 12 月 9 日

1 第一题

(a) 证明:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$$

(b) 证明:

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} \mathbb{1} + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k$$

(c) 设 $\sigma_0 = \mathbb{1}$, 则任意 2×2 矩阵 M 均可以写作 $M = \sum_{i=0,x,y,z} M_i \sigma_i$. 证明: 复数

$$M_i = \frac{1}{2} \text{Tr}(M \sigma_i)$$

1.1 1a & 1b

枚举即证得1b, 并可由此计算1a:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \delta_{ij} + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ji} + i\varepsilon_{jik} \sigma_k = 2\delta_{ij} \quad (1.1)$$

1.2 1c

对指标 $i = x, y, z$ 采用Einstein求和约定, 则题干表述可重新写为

$$M = M_0 \mathbb{1} + M_i \sigma_i \quad (1.2)$$

根据1b之结论, 我们考虑欲证式的右端.

• 当 $i = x, y, z$ 时,

$$\begin{aligned} \text{Tr}(M \sigma_i) &= \text{Tr}[(M_0 \mathbb{1} + M_j \sigma_j) \sigma_i] \\ &= \text{Tr}[M_0 \sigma_i + M_j (\delta_{ji} \mathbb{1} + i\varepsilon_{jik} \sigma_k)] \\ &= M_0 \text{Tr}(\sigma_i) + M_i \text{Tr}(\mathbb{1}) + i\varepsilon_{jik} M_j \text{Tr}(\sigma_k) \\ &= 2M_i \end{aligned} \quad (1.3)$$

• 当 $i = 0$ 时,

$$\text{Tr}(M\sigma_0) = \text{Tr}(M_0\mathbb{1} + M_j\sigma_j) = M_0\text{Tr}(\mathbb{1}) + M_j\text{Tr}(\sigma_j) = 2M_0 \quad (1.4)$$

因此得证. 式中, 我们利用了 $\text{Tr}(\sigma_k) = 0$ ($k = x, y, z$), 并尤其需要注意 $\text{Tr}(\mathbb{1}) = 2$.

当然, 也可以采取一种相对笨拙的方法, 即将Pauli矩阵的线性组合形式具体化, 得到

$$M = \begin{pmatrix} M_0 + M_3 & M_1 - iM_2 \\ M_1 + iM_2 & M_0 - M_3 \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

再分别枚举计算 $\text{Tr}(M\sigma_i)$ 即可, 这里不再赘述.

2 第二题

请将 $e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_\alpha e^{-i\lambda\sigma_z}$ ($\alpha = x, y, z$)表示为单位阵和Pauli矩阵的线性组合.

直接对具体的 $\alpha = x, y, z$ 进行计算固然可以解答本题, 但难免有失一般性. 事实上, 根据上题结论我们有

$$\begin{aligned} e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_\alpha e^{-i\lambda\sigma_z} &= (\mathbb{1} \cos \lambda + i\sigma_z \sin \lambda) \sigma_\alpha (\mathbb{1} \cos \lambda - i\sigma_z \sin \lambda) \\ &= \sigma_\alpha \cos^2 \lambda + i \sin \lambda \cos \lambda [\sigma_z, \sigma_\alpha] + \sigma_z \sigma_\alpha \sigma_z \sin^2 \lambda \\ &= \sigma_\alpha \cos^2 \lambda - 2 \sin \lambda \cos \lambda \varepsilon_{z\alpha j} \sigma_j + (\delta_{z\alpha} \mathbb{1} + i\varepsilon_{z\alpha j} \sigma_j) \sigma_z \sin^2 \lambda \\ &= \sigma_\alpha \cos^2 \lambda + \delta_{z\alpha} \sigma_z \sin^2 \lambda - \varepsilon_{z\alpha j} \sigma_j \sin 2\lambda + i\varepsilon_{z\alpha j} (\delta_{jz} \mathbb{1} + i\varepsilon_{jzk} \sigma_k) \sin^2 \lambda \\ &= \sigma_\alpha \cos^2 \lambda + \delta_{z\alpha} \sigma_z \sin^2 \lambda - \varepsilon_{z\alpha j} \sigma_j \sin 2\lambda + i\varepsilon_{z\alpha j} \cdot i\varepsilon_{jzk} \sigma_k \sin^2 \lambda \\ &= \begin{cases} \sigma_\alpha \cos^2 \lambda - \varepsilon_{z\alpha j} \sigma_j \sin 2\lambda - (\delta_{\alpha k} - \delta_{z\alpha} \delta_{zk}) \sigma_k \sin^2 \lambda = \sigma_\alpha \cos 2\lambda - \varepsilon_{z\alpha j} \sigma_j \sin 2\lambda & , \alpha \neq z \\ \sigma_\alpha & , \alpha = z \end{cases} \end{aligned} \quad (2.1)$$

式中我们利用了Pauli矩阵的对易关系

$$[\sigma_i, \sigma_j] = \delta_{ij} \mathbb{1} + i\varepsilon_{ijk} \sigma_k - \delta_{ji} \mathbb{1} - i\varepsilon_{jik} \sigma_k = 2i\varepsilon_{ijk} \sigma_k \quad (2.2)$$

和关于Levi-Civita符号的一个式子

$$\varepsilon_{jz\alpha} \varepsilon_{jzk} = \delta_{zz} \delta_{\alpha k} - \delta_{z\alpha} \delta_{zk} = \delta_{\alpha k} - \delta_{z\alpha} \delta_{zk} \quad (2.3)$$

这里要特别注意结果不是 $2\delta_{\alpha k}$, 因为 α, z 是原式中给定的指标, 化简时我们不应对其求和. 式2.1的第四行中不将 $\delta_{z\alpha} \sigma_z$ 写为 σ_α 也是同理.

因此, 对具体的指标 x, y, z 不难得到

$$\begin{cases} e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_x e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_x \cos 2\lambda - \sigma_y \sin 2\lambda \\ e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_y e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_y \cos 2\lambda + \sigma_x \sin 2\lambda \\ e^{i\lambda\sigma_z}\sigma_z e^{-i\lambda\sigma_z} = \sigma_z \end{cases} \quad (2.4)$$

本题乍看之下可直接套用BCH公式解决，然而我们发现其右端将成为一矩阵的无穷级数，因此还需解决级数求和的问题，不如直接利用Pauli矩阵的e指数公式简便。

另外，若考虑所求式的算符形式，可将其写为

$$\exp\left(i\frac{\hat{S}_z \cdot 2\lambda}{\hbar}\right) \hat{\sigma}_\alpha \exp\left(-i\frac{\hat{S}_z \cdot 2\lambda}{\hbar}\right) \quad (2.5)$$

意味着对力学量 $\hat{\sigma}_\alpha$ 绕 z 方向顺时针旋转 2λ 角度，与最终结果自洽。这是一种广义的"Heisenberg绘景"。

3 第三题

假设某粒子自旋初态为 z 方向自旋的本征态 $|\downarrow\rangle$ 。

- 从0时刻至 $t_0 = \frac{\pi}{4A}$ 时刻，体系的Hamiltonian为 $\hat{H}_I = A\hbar\hat{\sigma}_x$ ；
- 从 t_0 时刻至 $t_0 + \tau$ 时刻，体系的Hamiltonian为 $\hat{H}_{II} = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{\sigma}_z + 1)$ ；
- 从 $t_0 + \tau$ 时刻至 $2t_0 + \tau$ 时刻，体系的Hamiltonian为 $\hat{H}_I = A\hbar\hat{\sigma}_x$ 。

试求在 $2t_0 + \tau$ 时刻测量粒子处在 $|\downarrow\rangle$ 的几率，并在Bloch球上表示上述演化过程。

我们欲以本题的两种不同解法为例，说明在 \mathbb{C}^2 空间的此类问题中Pauli矩阵的重要性及优越性。

3.1 法一（着眼于量子态）

- $0 \sim t_0$ 区间：

Hamiltonian与 $\hat{\sigma}_x$ 对易，因此需将 $\hat{\sigma}_z$ 的本征态表示为 $\hat{\sigma}_x$ 本征态 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 的线性组合：

$$\begin{cases} |\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) \\ |\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) \end{cases} \quad (3.1)$$

其对应的 \hat{H}_I 本征值为 $\{A\hbar, -A\hbar\}$ ，因此粒子在 $t_0 = \frac{\pi}{4A}$ 时刻的自旋态

$$|\psi(t_0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-iAt_0}|+\rangle - e^{iAt_0}|-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\pi/4}|+\rangle - e^{i\pi/4}|-\rangle) = \frac{1-i}{2}|+\rangle - \frac{1+i}{2}|-\rangle \quad (3.2)$$

- $t_0 \sim t_0 + \tau$ 区间：

Hamiltonian与 $\hat{\sigma}_z$ 对易，需再将 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 表示为 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ 的线性组合，即

$$|\psi(t_0)\rangle = \frac{1-i}{2\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) - \frac{1+i}{2\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) = -\frac{i}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\rangle \quad (3.3)$$

又易知 \hat{H}_{II} 本征值是 $\{\hbar\omega, 0\}$ ，因而粒子在 $t_0 + \tau$ 时刻的自旋态

$$|\psi(t_0 + \tau)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \exp \left[-i \left(\omega\tau + \frac{\pi}{2} \right) \right] |\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle \right\} \quad (3.4)$$

• $t_0 + \tau \sim 2t_0 + \tau$ 区间：

Hamiltonian再次与 $\hat{\sigma}_x$ 对易，应在正交完备基 $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 下讨论问题. 有

$$\begin{aligned} |\psi(t_0 + \tau)\rangle &= \frac{1}{2} \left\{ \exp \left[-i \left(\omega\tau + \frac{\pi}{2} \right) \right] (|+\rangle + |-\rangle) + (|+\rangle - |-\rangle) \right\} \\ &= \frac{e^{-i(\omega\tau + \pi/2)} + 1}{2} |+\rangle + \frac{e^{-i(\omega\tau + \pi/2)} - 1}{2} |-\rangle \end{aligned} \quad (3.5)$$

至 $2t_0 + \tau$ 时刻，自旋态演化为

$$\begin{aligned} |\psi(2t_0 + \tau)\rangle &= \frac{e^{-i(\omega\tau + \pi/2)} + 1}{2} e^{-i\pi/4} |+\rangle + \frac{e^{-i(\omega\tau + \pi/2)} - 1}{2} e^{i\pi/4} |-\rangle \\ &= \frac{e^{-i(\omega\tau + \pi/2)} + 1}{2\sqrt{2}} e^{-i\pi/4} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle) + \frac{e^{-i(\omega\tau + \pi/2)} - 1}{2\sqrt{2}} e^{i\pi/4} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle) \\ &= \frac{e^{-i(\omega\tau + \pi/2)}}{2\sqrt{2}} \left(2 \cos \frac{\pi}{4} |\uparrow\rangle - 2i \sin \frac{\pi}{4} |\downarrow\rangle \right) + \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(-2i \sin \frac{\pi}{4} |\uparrow\rangle + 2 \cos \frac{\pi}{4} |\downarrow\rangle \right) \\ &= \frac{e^{-i(\omega\tau + \pi/2)} - i}{2} |\uparrow\rangle - \frac{-ie^{-i(\omega\tau + \pi/2)} + 1}{2} |\downarrow\rangle \\ &= -\frac{i}{2} (e^{-i\omega\tau} + 1) |\uparrow\rangle - \frac{1 - e^{-i\omega\tau}}{2} |\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (3.6)$$

3.2 法二（着眼于时间演化算符）

• $0 \sim t_0$ 区间：

时间演化算符

$$\hat{U}(0, t_0) = \exp \left(-\frac{i\hat{H}_I t_0}{\hbar} \right) = e^{-i\hat{\sigma}_x \pi/4} = \mathbb{1} \cos \frac{\pi}{4} - i\hat{\sigma}_x \sin \frac{\pi}{4} \quad (3.7)$$

故 t_0 时刻的自旋态

$$|\psi(t_0)\rangle = \hat{U}(0, t_0) |\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle - i|\uparrow\rangle) \quad (3.8)$$

其中利用了 $\hat{\sigma}_x$ 对 $\hat{\sigma}_z$ 本征态的“翻转”特性

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_x |\uparrow\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \rightarrow |\downarrow\rangle \\ \hat{\sigma}_x |\downarrow\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow |\uparrow\rangle \end{cases} \quad (3.9)$$

• $t_0 \sim t_0 + \tau$ 区间：

时间演化算符

$$\hat{U}(t_0, t_0 + \tau) = \exp \left(-\frac{i\hat{H}_{II}\tau}{\hbar} \right) = e^{-i\omega\tau(\hat{\sigma}_z + \mathbb{1})/2} = e^{-i\omega\tau/2} \left(\mathbb{1} \cos \frac{\omega\tau}{2} - i\hat{\sigma}_z \sin \frac{\omega\tau}{2} \right) \quad (3.10)$$

故 $t_0 + \tau$ 时刻的自旋态

$$|\psi(t_0 + \tau)\rangle = \hat{U}(t_0, t_0 + \tau) |\psi(t_0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle - ie^{-i\omega\tau} |\uparrow\rangle) \quad (3.11)$$

- $t_0 + \tau \sim 2t_0 + \tau$ 区间:
时间演化算符

$$\hat{U}(t_0 + \tau, 2t_0 + \tau) = \hat{U}(0, t_0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbb{1} - i\hat{\sigma}_x) \quad (3.12)$$

故 $2t_0 + \tau$ 时刻的自旋态

$$|\psi(2t_0 + \tau)\rangle = \hat{U}(t_0 + \tau, 2t_0 + \tau) |\psi(t_0 + \tau)\rangle = -i \frac{1 + e^{-i\omega\tau}}{2} |\uparrow\rangle - \frac{1 - e^{-i\omega\tau}}{2} |\downarrow\rangle \quad (3.13)$$

因此，在 $2t_0 + \tau$ 时刻测量粒子处在 $|\downarrow\rangle$ 的几率

$$P(\downarrow, 2t_0 + \tau) = \left| -\frac{1 - e^{-i\omega\tau}}{2} \right|^2 = \frac{1}{4} |1 - \cos \omega\tau + i \sin \omega\tau|^2 = \frac{1 - \cos \omega\tau}{2} = \sin^2 \frac{\omega\tau}{2} \quad (3.14)$$

是 ω 及 τ 的函数.

下面在Bloch球上表示上述演化过程如图1.

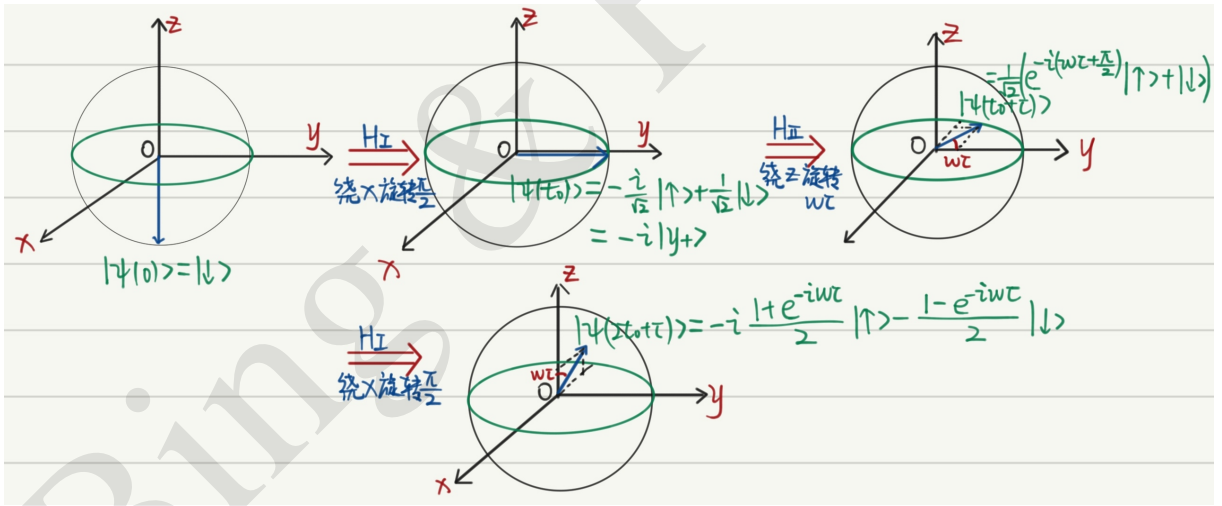


图 1: Bloch球上的演化过程

Tips:

- 注意到最后一张子图中，Bloch向量位于 Oxz 平面且与 z 轴夹角为 $\omega\tau$ ，与式3.14中的 $\frac{\omega\tau}{2}$ 恰好对应，这说明上面的推导是自洽的. 在熟悉Bloch球以后，我们甚至可以根据其旋转情况直接写出终态，而无需进行冗杂的计算.
- 应用了Pauli算符的法二与法一相比，避免了两组基间的变换过程，更为直接、简洁，因而是更加推荐的处理.

- 大家在大三下学期物理学专业基础实验课程中可能进行的量子计算实验，其原理正与本题紧密相关。事实上本题描述的过程是Ramsey干涉，其结果说明通过改变 ω 或 τ 的值，我们可以调控测得概率的大小。

4 第四题

电子磁矩算符可以表示为 $\hat{\mu} = -\frac{e}{2mc}(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}})$ ，其中 m 为电子质量， c 为光速， e 为电子电荷， $\hat{\mathbf{L}}$ 和 $\hat{\mathbf{S}}$ 分别为电子的轨道和自旋角动量。

试求 $\langle l, s, j, m_j | \hat{\mu}_z | l, s, j, m_j \rangle$ 在 $m_j = j$ 时的可能取值。其中 $|l, s, j, m_j\rangle$ 为 $(\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z)$ 的共同本征态， $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ 。

首先我们约定一般情况下两种表象中的态矢量表示：

- 非耦合表象： $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$ 。
- 耦合表象： $|j_1, j_2; j, m\rangle$ 。（ m 即 m_j ）

将发现两者均含有量子数 j_1, j_2 。因此，在不致混淆的情况下（即将我们的讨论限于 j_1, j_2 所确定的子空间内），可以略去此二者。另外，在下面给出的表象变换式中，左端代表耦合表象，右端代表非耦合表象。

具体到电子磁矩涉及的自旋-轨道耦合，我们有 $j_1 = l, j_2 = s = \frac{1}{2}; m_1 = m_l, m_2 = m_s$ 。因此根据课上推导的已知结论

$$|j, m\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{j-m}{2j}} \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{j+m}{2j}} \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & , j = l + \frac{1}{2} \\ \sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}} \left| m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{j-m+1}{2j+2}} \left| m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle & , j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (4.1)$$

可以得到在 $m = j$ 时，

$$|j, m\rangle = \begin{cases} \left| j - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \left| l, \frac{1}{2} \right\rangle & , j = l + \frac{1}{2} \\ \sqrt{\frac{2j+1}{2j+2}} \left| j + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{2j+2}} \left| j - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \left| l, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{2l+1}} \left| l-1, \frac{1}{2} \right\rangle & , j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (4.2)$$

因而在角量子数 l 确定的情况下，我们有

$$\langle j, m | \hat{L}_z | j, m \rangle = \begin{cases} \left\langle l, \frac{1}{2} \right| \hat{L}_z \left| l, \frac{1}{2} \right\rangle = l\hbar & , j = l + \frac{1}{2} \\ \left(\sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \left\langle l, -\frac{1}{2} \right| - \sqrt{\frac{1}{2l+1}} \left\langle l-1, \frac{1}{2} \right| \right) \hat{L}_z \left(\sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \left| l, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{2l+1}} \left| l-1, \frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ = \frac{2l}{2l+1} l\hbar + \frac{1}{2l+1} (l-1)\hbar = \frac{(2l-1)(l+1)}{2l+1} \hbar & , j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (4.3)$$

及

$$\langle j, m | \hat{S}_z | j, m \rangle = \begin{cases} \langle l, \frac{1}{2} | \hat{S}_z | l, \frac{1}{2} \rangle = \frac{\hbar}{2}, & j = l + \frac{1}{2} \\ \left(\sqrt{\frac{2l}{2l+1}} \langle l, -\frac{1}{2} | - \sqrt{\frac{1}{2l+1}} \langle l-1, \frac{1}{2} | \right) \hat{S}_z \left(\sqrt{\frac{2l}{2l+1}} | l, -\frac{1}{2} \rangle - \sqrt{\frac{1}{2l+1}} | l-1, \frac{1}{2} \rangle \right) \\ = \frac{2l}{2l+1} \left(-\frac{\hbar}{2} \right) + \frac{1}{2l+1} \frac{\hbar}{2} = \frac{1-2l}{2(2l+1)} \hbar, & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (4.4)$$

最终我们得到

$$\langle j, m | \hat{\mu}_z | j, m \rangle = \begin{cases} -\frac{e}{2mc} (l+1) \hbar, & j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{e}{2mc} \left[\frac{(2l-1)(l+1)}{2l+1} \hbar + \frac{1-2l}{2l+1} \hbar \right] = -\frac{e}{2mc} \frac{l(2l-1)}{2l+1} \hbar, & j = l - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (4.5)$$

共有两种可能取值.

当然, 也可将 $\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}$ 化为 $\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}$ 进行计算, 且会更加简便.