

中国科学技术大学

量子力学 B 课程资料

刘丰铨 宋冰睿

2023 年 2 月



前　　言

在 2022 年秋季学期易为老师量子力学 B 课程 (022059.03) 中，两位助教撰写了作业参考解答、习题课讲义及补充习题集等一系列材料。本文档是对上述资料的汇总，衷心希望能对后续学期的量子力学课程教学有所帮助，广大读者能从中得到进益。

易老师的课程曾得到几乎所有同学的好评¹，关注量子力学的基本框架与概念，致力于为同学们建立与经典力学不同的量子世界观。前半学期讲授研究量子力学的基本方法与工具，主要参考书目包括 J. J. Sakurai 及 J. Napolitano 合著的 *Modern Quantum Mechanics*；后半学期则将重心转移至这些工具的应用如微扰论上去，主要参考书目包括 D. J. Griffiths 所著的 *Introduction to Quantum Mechanics*。与这些经典教材的一脉相承保证了课程的可听性及衔接上的连贯性。

本文档按照作业参考解答(×13)、习题课讲义(×4)、补充习题集(×1)的顺序编排。其中，在共计 13 次作业中，前 8 次为期中考前的内容，后 5 次为期中考后的内容；在共计 4 次习题课中，刘丰铨作了第一次与第四次的准备与讲授，其余两次则由宋冰睿²完成。

非常感谢易为老师一学期以来对我们的关心、鼓励与肯定，同时非常感谢班上所有同学对助教工作的大力支持。正是老师、同学、助教三方的通力合作，我们的课程才得以十分顺利、成功地进行下去。

由于笔者水平有限，本资料部分内容难免片面或存在疏漏，笔误亦在所难免，恳请广大读者批评指正。若不吝来信³赐教，我们将感激不尽！

中国科学技术大学少年班学院 2019 级

宋冰睿 / 刘丰铨

2023 年 2 月于湖北武汉 / 广东广州

¹详情请访问 [USTC 评课社区](#)。

²欢迎访问 [个人主页](#)。

³通过邮件联系我们：[宋冰睿](#)、[刘丰铨](#)。

PART I

习题参考解答

2022 秋易为老师量子力学 B

习题一参考解答

刘丰铨 宋冰睿

2022 年 9 月 15 日

1 第 1 题

根据 Bohr 原子模型角动量量子化的条件，假设电子轨道为圆形，推导氢原子能级公式，计算基态到第一激发态的能量差。

解：由 Bohr 给出的角动量量子化条件：

$$L = n\hbar, \quad n \in \mathbb{N}^+ \quad (1.1)$$

令第 n 条轨道半径为 r_n ，其中电子运动速率为 v_n ，则有：

$$m_e v_n r_n = n\hbar \quad (1.2)$$

同时，根据圆周运动的动力学条件，有：

$$\frac{m_e v_n^2}{r_n} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} \quad (1.3)$$

由上式即得：

$$v_n = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e r_n}} \quad (1.4)$$

代入式 1.2，得：

$$r_n = n^2 \hbar^2 \frac{4\pi\epsilon_0}{m_e e^2} \quad (1.5)$$

根据 Virial 定理（或分别计算动能和势能），可知轨道能量的大小是相应轨道上势能大小的 $1/2$ 倍，故：

$$E_n = \frac{1}{2} V_n = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \quad (1.6)$$

因此，基态到第一激发态的能量差为：

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{3}{4} \frac{m_e}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \quad (1.7)$$

其数值为 10.2eV 或 $1.63 \times 10^{-18}\text{J}$ 。

2 第2题

估算能量为 1eV, 1keV 和 1MeV 的电子的 de Broglie 波长. 金属 Ni 的晶格间距约为 0.09nm, 试估算为了用 Ni 晶格观测电子波动性, 电子的能量大概应该在什么量级.

解: 对于能量为 1eV 和 1keV 的系统, 首先不考虑相对论, 分别得到对应电子的运动速度大小:

$$v_1 = \sqrt{\frac{2E_{k1}}{m_e}} = 5.93 \times 10^5 \text{ m/s} \quad (2.1)$$

$$v_2 = \sqrt{\frac{2E_{k2}}{m_e}} = 1.88 \times 10^7 \text{ m/s} \quad (2.2)$$

倘若我们认为运动速度小于光速的 1/10 时即不必考虑相对论效应, 那么以上两种情况都符合该要求. 由此, 我们无需对质量进行修正, 即有对应的 de Broglie 波长:

$$\lambda_1 = \frac{h}{m_e v_1} = 1.23 \times 10^{-9} \text{ m} \quad (2.3)$$

$$\lambda_2 = \frac{h}{m_e v_2} = 3.87 \times 10^{-11} \text{ m} \quad (2.4)$$

然而, 对于能量为 1MeV 的电子, 我们显然必须考虑相对论效应, 否则得到的电子运动速度将超过光速. 根据动能的表达式, 我们有:

$$E_{k3} = \sqrt{(m_e c^2)^2 + (p_3 c)^2} - m_e c^2 \quad (2.5)$$

解得:

$$p_3 = 7.60 \times 10^{-22} \text{ m/s} \quad (2.6)$$

因此有对应的 de Broglie 波长:

$$\lambda_3 = \frac{h}{p_3} = 8.72 \times 10^{-13} \text{ m} \quad (2.7)$$

倘若想要使用 Ni 晶格观测电子波动性, 电子的 de Broglie 波长大致与晶格常数同量级. 结合以上结果, 可知电子的能量大概应该在 100eV 或 1keV 量级.

3 第3题

已知气体分子热运动平均速率对应的物质波长称为热力学 de Broglie 波长, 估算室温下大气分子的热力学 de Broglie 波长. 若气体具有宏观量子效应 (即成为量子简并气体) 的条件为分子间物质波相互交叠产生干涉, 试说明室温下的大气是否为量子简并气体 (设大气分子平均间距约为 10^{-7}m). 估算密度为 10^{-14}cm^{-3} 的稀薄钠原子气体成为量子简并气体的温度.

解: 气体分子热运动平均速率的表达式为:

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} \quad (3.1)$$

取质量为大气分子平均质量 29u , 室温为 293.15K , 计算得:

$$\bar{v} = 4.63 \times 10^2 \text{ m/s} \quad (3.2)$$

对应的 de Broglie 波长为:

$$\lambda = \frac{h}{m\bar{v}} = 2.97 \times 10^{-11} \text{ m} \quad (3.3)$$

远远小于分子平均间距, 此时气体分子呈现粒子性, 不产生干涉, 因此不是量子简并气体.

对于密度为 10^{-14} cm^{-3} 的钠原子气体, 有原子间平均间隔:

$$d = \sqrt[3]{10^{-14} \text{ cm}^{-3}} = 2.15 \times 10^{-7} \text{ m} \quad (3.4)$$

如前所述, 我们要求钠原子气体的 de Broglie 波长与 d 同量级. 作为估算, 不妨取等, 于是有:

$$\bar{v}_{Na} = \frac{h}{m_{Na}\lambda_{Na}} = 8.05 \times 10^{-2} \text{ m/s} \quad (3.5)$$

根据式3.1, 有:

$$T_{Na} = \frac{\bar{v}_{Na}^2 \pi m_{Na}}{8k_B} = 7.04 \times 10^{-6} \text{ K} \quad (3.6)$$

即所求温度大概在 10^{-6}K 量级.

4 第 4 题

J.J. Thomson 在阴极射线管中测电子轨道的时候, 电子的能量约为 10eV , 电子束截面线度约为 10^{-4}m . 试用不确定性原理定性说明这时电子轨道的概念是否适用. 这个实验中电子体现的是粒子性还是波动性?

解: 仿照本次作业第 2 题的方法, 容易得到电子的 de Broglie 波长:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e E_k}} = 3.88 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (4.1)$$

远远小于截面的线度 (后者可视作本实验中的空间分辨率), 因此电子体现粒子性, 轨道概念仍适用 (可以理解为电子保持在电子束内运动).

2022秋易为老师量子力学B

习题二参考解答

宋冰睿 刘丰铨

2022年9月21日

1 第一题

假设某粒子的坐标空间波函数是Gaussian，即（只考虑一维情况）

$$\psi(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right)$$

(a) 请写出粒子在动量空间的波函数；

(b) 利用坐标空间波函数计算

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \psi(x) x$$
$$\bar{x^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \psi(x) x^2$$

(c) 利用动量空间波函数计算

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \psi^*(p) \psi(p) p$$
$$\bar{p^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \psi^*(p) \psi(p) p^2$$

(d) 利用坐标空间波函数计算

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \hat{p} \psi(x)$$
$$\bar{p^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \hat{p}^2 \psi(x)$$
$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

(e) 由上述结果，试验证波函数满足不确定性关系。其中涨落定义为

$$\Delta p \equiv \sqrt{(p - \bar{p})^2}$$
$$\Delta x \equiv \sqrt{(x - \bar{x})^2}$$

1.1 1a

动量空间波函数可由坐标空间波函数经Fourier变换得到：

$$\begin{aligned}\varphi(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \psi(x) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2 - \frac{ipx}{\hbar}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \exp\left[-\frac{\alpha}{2} \left(x - i\frac{p}{\alpha\hbar}\right)^2 - \frac{p^2}{2\alpha\hbar^2}\right] \\ &= \left(\frac{\alpha}{4\pi^3\hbar^2}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2\pi}{\alpha}} \exp\left(-\frac{p^2}{2\alpha\hbar^2}\right) \\ &= \left(\frac{1}{\alpha\pi\hbar^2}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{p^2}{2\alpha\hbar^2}\right)\end{aligned}\tag{1.1}$$

同样为Gaussian.

1.2 1b

由于Gaussian是偶函数，故

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp(-\alpha x^2) x = 0\tag{1.2}$$

另外，

$$\begin{aligned}\bar{x^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp(-\alpha x^2) x^2 \\ &= 2\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_0^{+\infty} dx \cdot x^2 \exp(-\alpha x^2) \\ &= 2\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{1}{2\sqrt{\alpha t}} dt \cdot \frac{t}{\alpha} e^{-t} \\ &= \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \\ &= \frac{1}{2\alpha}\end{aligned}\tag{1.3}$$

其中已令 $t = \alpha x^2$ ，即 $x = \sqrt{\frac{t}{\alpha}}$.

1.3 1c

类似于1b, 有

$$\begin{aligned}
 \bar{p} &= 0 & (1.4) \\
 \bar{p^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp \cdot \sqrt{\frac{1}{\alpha\pi\hbar^2}} \exp\left(-\frac{p^2}{\alpha\hbar^2}\right) p^2 \\
 &= 2\sqrt{\frac{1}{\alpha\pi\hbar^2}} \int_0^{+\infty} dp \cdot p^2 \exp\left(-\frac{p^2}{\alpha\hbar^2}\right) \\
 &= 2\sqrt{\frac{1}{\alpha\pi\hbar^2}} \int_0^{+\infty} \hbar \sqrt{\frac{\alpha}{4t}} dt \cdot \alpha\hbar^2 te^{-t} \\
 &= \alpha\hbar^2 \sqrt{\frac{1}{\pi}} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \\
 &= \frac{1}{2}\alpha\hbar^2
 \end{aligned} \tag{1.5}$$

其中已令 $t = \frac{p^2}{\alpha\hbar^2}$, 即 $p = \hbar\sqrt{\alpha t}$.

1.4 1d

一维情况下 $\frac{\partial}{\partial x}$ 化为 $\frac{d}{dx}$, 可直接计算:

$$\begin{aligned}
 \bar{p} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right) \\
 &= -i\hbar \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \exp(-\alpha x^2) (-\alpha x) \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{1.6}$$

$$\begin{aligned}
 \bar{p^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right) \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^2 \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right) \\
 &= -\hbar^2 \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right) \frac{d}{dx} \left[\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha x^2\right) (-\alpha x) \right] \\
 &= \alpha\hbar^2 \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \exp(-\alpha x^2) [x(-\alpha x) + 1]
 \end{aligned} \tag{1.7}$$

借助公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \exp(-\alpha x^2) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{1.8}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \exp(-\alpha x^2) x^2 = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{1.9}$$

式1.7化简为

$$\bar{p^2} = \alpha\hbar^2 \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}} \left[\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} - \alpha \cdot \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \right] = \frac{1}{2}\alpha\hbar^2 \tag{1.10}$$

1.5 1e

借助上几小问的结果，有

$$\Delta p = \sqrt{\bar{p}^2 - \overline{p^2}} = \sqrt{\frac{\alpha}{2}\hbar} \quad (1.11)$$

$$\Delta x = \sqrt{\bar{x}^2 - \overline{x^2}} = \sqrt{\frac{1}{2\alpha}} \quad (1.12)$$

因此

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1.13)$$

满足不确定性关系.

2 第二题

下列一维波函数能否归一化？如果可以，请写出归一化后的波函数.

(a)

$$\psi(x) = \begin{cases} \sin \frac{\pi x}{a}, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{其它} \end{cases}$$

(b) 平面波

$$\psi(x) = \exp(ikx)$$

(c) Dirac 函数

$$\psi(x) = \delta(x)$$

(d) Gaussian

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

2.1 2a

能. 设归一化系数为 C , 则

$$\begin{aligned} \frac{1}{|C|^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 \\ &= \int_0^a dx \cdot \sin^2 \frac{\pi x}{a} \\ &= \frac{1}{2} \int_0^a dx \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a}\right) \\ &= \frac{a}{2} \end{aligned} \quad (2.1)$$

不失一般性，取复数 C 的辐角为 0，则

$$C = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (2.2)$$

因此归一化后的波函数

$$\psi_{\text{normalized}}(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{其它} \end{cases} \quad (2.3)$$

2.2 2b

否. 因为

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\exp(ikx)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \quad (2.4)$$

发散.

2.3 2c

否. 因为

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta^2(x) dx \quad (2.5)$$

发散. 这是因为其动量空间波函数 $\varphi(p) = 1$, 且

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp |\varphi(p)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \quad (2.6)$$

发散. 再根据Parseval定理就有 $\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2$ 发散.

2.4 2d

能. 类似于2a,

$$\begin{aligned} \frac{1}{|C|^2} &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot \exp(-\alpha^2 x^2) \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{|\alpha|} \end{aligned} \quad (2.7)$$

不失一般性, 取复数 C 的辐角为0, 则

$$C = \sqrt{\frac{|\alpha|}{\sqrt{\pi}}} \quad (2.8)$$

因此归一化后的波函数

$$\psi_{\text{normalized}}(x) = \sqrt{\frac{|\alpha|}{\sqrt{\pi}}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right) \quad (2.9)$$

2022 秋易为老师量子力学 B

习题三参考解答

刘丰铨 宋冰睿

2022 年 10 月 3 日

1 第 1 题

请证明：

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}] = -\hat{A}\hat{C}\{\hat{D}, \hat{B}\} + \hat{A}\{\hat{C}, \hat{B}\}\hat{D} - \hat{C}\{\hat{D}, \hat{A}\}\hat{B} + \{\hat{C}, \hat{A}\}\hat{D}\hat{B}$$

解：直接将等式右端展开即可。为熟悉对易子性质，我们给出另一种方法。首先，我们利用

$$[\hat{P}\hat{Q}, \hat{R}] = \hat{P}[\hat{Q}, \hat{R}] + [\hat{P}, \hat{Q}]\hat{R} \quad (1.1)$$

将欲证等式左端拆解成更易于处理的形式

$$\begin{aligned} [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\hat{D}] &= \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}\hat{D}] + [\hat{A}, \hat{C}\hat{D}]\hat{B} \\ &= \hat{A}\hat{C}[\hat{B}, \hat{D}] + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]\hat{D} + \hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]\hat{B} + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{D}\hat{B} \end{aligned} \quad (1.2)$$

此时利用

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = \{\hat{P}, \hat{Q}\} - 2\hat{Q}\hat{P} \quad (1.3)$$

以及对易子的交换反对称性和反对易子的交换对称性，有：

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{C}[\hat{B}, \hat{D}] + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]\hat{D} + \hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]\hat{B} + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{D}\hat{B} &= (-\hat{A}\hat{C}\{\hat{D}, \hat{B}\} + 2\hat{A}\hat{C}\hat{B}\hat{D}) + (\hat{A}\{\hat{C}, \hat{B}\}\hat{D} - 2\hat{A}\hat{C}\hat{B}\hat{D}) \\ &\quad + (-\hat{C}\{\hat{D}, \hat{A}\}\hat{B} + 2\hat{C}\hat{A}\hat{D}\hat{B}) + (\{\hat{C}, \hat{A}\}\hat{D}\hat{B} - 2\hat{C}\hat{A}\hat{D}\hat{B}) \\ &= -\hat{A}\hat{C}\{\hat{D}, \hat{B}\} + \hat{A}\{\hat{C}, \hat{B}\}\hat{D} - \hat{C}\{\hat{D}, \hat{A}\}\hat{B} + \{\hat{C}, \hat{A}\}\hat{D}\hat{B} \end{aligned} \quad (1.4)$$

即为欲证等式右端。

2 第 2 题

请证明：

(a)

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = n[\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^{n-1}, \quad if [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$$

(b)

$$[\hat{A}^n, \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}], \quad if [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$$

(c)

$$[\hat{C}, \hat{A} \cdot \hat{B}] = [\hat{C}, \hat{A}] \cdot \hat{B} + \hat{A} \cdot [\hat{C}, \hat{B}]$$

(d)

$$[\hat{C}, \hat{A} \times \hat{B}] = [\hat{C}, \hat{A}] \times \hat{B} + \hat{A} \times [\hat{C}, \hat{B}]$$

2.1 2a

解：根据对易子的性质1.1和题干中的对易关系，有：

$$[\hat{A}, \hat{B}^k] = [\hat{A}, \hat{B}^{k-1} \cdot \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}^{k-1}] \hat{B} + \hat{B}^{k-1} [\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, \hat{B}^{k-1}] \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{k-1} \quad (2.1)$$

注意到上式中 $[\hat{A}, \hat{B}^{k-1}]$ 与目标对易子形式上的一致性，利用数学归纳法证明。首先，当 $n=1$ 时，欲证关系显然成立。接下来，我们假设对于 $n=k-1$ ($k > 2, k \in \mathbb{Z}$)，结论成立，亦即

$$[\hat{A}, \hat{B}^{k-1}] = (k-1) [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{k-2} \quad (2.2)$$

将上式代入2.1，简单化简后立即得到：

$$[\hat{A}, \hat{B}^k] = (k-1) [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{k-1} + [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{k-1} = k [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{k-1} \quad (2.3)$$

根据 k 在合法取值范围内的任意性，欲证结论对所有正整数 n 成立。

2.2 2b

解：常规解法与上节完全相同，不再赘述，这里为了帮助同学们熟悉对易子的反对称性质，采用如下证法。

在上节所得结论

$$[\hat{A}, \hat{B}^n] = n [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{n-1} \quad (2.4)$$

中，在等号左端交换 \hat{A} 和 \hat{B}^n 的位置，并在等号右端相应地添上负号，并再次利用对易子的反对称性质，有：

$$[\hat{B}^n, \hat{A}] = -n [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{n-1} = n [\hat{B}, \hat{A}] \hat{B}^{n-1} \quad (2.5)$$

在上式中将 \hat{A} 用 \hat{B} 替代而将 \hat{B} 用 \hat{A} 替代（注意：此处的替代与此前的交换完全不同，其合理性亦不依赖于对易子的性质），得到：

$$[\hat{A}^n, \hat{B}] = n [\hat{A}, \hat{B}] \hat{A}^{n-1} \quad (2.6)$$

此时 2a 中的条件

$$[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0 \quad (2.7)$$

相应地改变为

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{A}]] = 0 \quad (2.8)$$

显然恰好与 2b 题干中的条件等价。在式2.6中利用之，得到：

$$[\hat{A}^n, \hat{B}] = n \hat{A}^{n-1} [\hat{A}, \hat{B}] \quad (2.9)$$

根据 n 在正整数范围内取值的任意性，以上即为欲证结论.

2.3 2c

解：利用 Einstein 求和约定和对易子性质1.1，有：

$$[\hat{C}, \hat{A}_i \hat{B}_i] = [\hat{C}, \hat{A}_i] \hat{B}_i + \hat{A}_i [\hat{C}, \hat{B}_i] = [\hat{C}, \hat{A}]_i \hat{B}_i + \hat{A}_i [\hat{C}, \hat{B}]_i \quad (2.10)$$

即得所证.

2.4 2d

解：利用 Einstein 求和约定和对易子性质1.1，有：

$$[\hat{C}, \varepsilon_{ijk} \hat{A}_j \hat{B}_k] = \varepsilon_{ijk} [\hat{C}, \hat{A}_j] \hat{B}_k + \varepsilon_{ijk} \hat{A}_j [\hat{C}, \hat{B}_k] = \varepsilon_{ijk} [\hat{C}, \hat{A}]_j \hat{B}_k + \varepsilon_{ijk} \hat{A}_j [\hat{C}, \hat{B}]_k \quad (2.11)$$

即得所证.

3 第3题

请根据角动量算符的对易关系，证明：

(a)

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{\mathbf{p}}^2] = 0, \quad \alpha = x, y, z$$

(b)

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar \hat{L}_z, \quad \text{in which } \hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$$

(c)

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\alpha] = 0, \quad \alpha = x, y, z$$

3.1 3a

解：由于

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{p}_\mu] = [\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{r}_\beta \hat{p}_\gamma, \hat{p}_\mu] \quad (3.1)$$

利用基本对易关系

$$[\hat{r}_\alpha, \hat{r}_\beta] = 0 \quad (3.2)$$

$$[\hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta] = 0 \quad (3.3)$$

$$[\hat{r}_\alpha, \hat{p}_\beta] = i\hbar \hat{I} \delta_{\alpha\beta} \quad (3.4)$$

其中 \hat{I} 为单位算符，有：

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{p}_\mu] = i\hbar \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{I} \delta_{\beta\mu} \hat{p}_\gamma = i\hbar \varepsilon_{\alpha\mu\gamma} \hat{p}_\gamma \quad (3.5)$$

因此

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{p}_\mu \hat{p}_\mu] = 2i\hbar \epsilon_{\alpha\mu\gamma} \hat{p}_\mu \hat{p}_\gamma = 0 \quad (3.6)$$

其中已利用对易子的性质1.1. 以上即为欲证结论.

3.2 3b

解: 根据角动量算符的基本对易关系

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] = i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{L}_\gamma \quad (3.7)$$

以及对易子的线性性, 有:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_+, \hat{L}_-] &= [\hat{L}_x, \hat{L}_x] - i[\hat{L}_x, \hat{L}_y] + i[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_y] \\ &= 0 - i(i\hbar \hat{L}_z) + i(-i\hbar \hat{L}_z) + 0 \\ &= 2\hbar \hat{L}_z \end{aligned} \quad (3.8)$$

3.3 3c

解: 根据角动量算符的基本对易关系3.7和对易子的性质, 有:

$$[\hat{L}_\beta \hat{L}_\gamma, \hat{L}_\alpha] = i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{L}_\beta \hat{L}_\gamma + i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{L}_\gamma \hat{L}_\beta = i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \{\hat{L}_\beta, \hat{L}_\gamma\} \quad (3.9)$$

注意到上式中 $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ 关于 β, γ 交换反对称, 而反对易子 $\{\hat{L}_\beta, \hat{L}_\gamma\}$ 关于 β, γ 交换对称, 故而上式等号右边为零 (注: 角动量矢量算符与自身叉乘不为零, 见附录). 因此

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_\alpha] = 0 \quad (3.10)$$

即为欲证结论.

4 第4题

定义:

$$\hat{C} \equiv [\hat{A}, \hat{B}]$$

假设算符均与 λ 无关, 并在本题 (b)、(c) 两小题中假设:

$$[\hat{C}, \hat{A}] = [\hat{C}, \hat{B}] = 0$$

请证明:

(a)

$$\frac{d}{d\lambda} e^{\lambda \hat{A}} = \hat{A} e^{\lambda \hat{A}} = e^{\lambda \hat{A}} \hat{A}$$

(b)

$$[\hat{A}, e^{\lambda \hat{B}}] = \lambda \hat{C} e^{\lambda \hat{B}}$$

(c)

$$e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\lambda \hat{A}} e^{\lambda \hat{B}} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2 \hat{C}}$$

4.1 4a

解：根据算符函数的定义（亦即算符函数 $f(\hat{A})$ 可表达为函数 $f(x)$ 在 $x = 0$ 附近展开后将 x 替换为 \hat{A} 的形式），有：

$$e^{\lambda\hat{A}} = \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \hat{A}^n \quad (4.1)$$

其中 \hat{I} 为单位算符，因而

$$\frac{d}{d\lambda} e^{\lambda\hat{A}} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^{n-1}}{(n-1)!} \hat{A}^n = \hat{A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \hat{A}^n = \hat{A} \left(\hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \hat{A}^n \right) = \hat{A} e^{\lambda\hat{A}} \quad (4.2)$$

显然 \hat{A} 与其自身对易，故有：

$$\hat{A} e^{\lambda\hat{A}} = e^{\lambda\hat{A}} \hat{A} \quad (4.3)$$

综上所述，

$$\frac{d}{d\lambda} e^{\lambda\hat{A}} = \hat{A} e^{\lambda\hat{A}} = e^{\lambda\hat{A}} \hat{A} \quad (4.4)$$

即为欲证结论。

4.2 4b

解：根据以算符为自变量的指数函数定义4.1以及 3c 的结论2.3，有：

$$\begin{aligned} [\hat{A}, e^{\lambda\hat{B}}] &= \left[\hat{A}, \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \hat{B}^n \right] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} n [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{n-1} \\ &= \lambda \hat{C} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \hat{B}^n = \lambda \hat{C} e^{\lambda\hat{B}} \end{aligned} \quad (4.5)$$

其中第三个等号的处理与上题中的过程一致。

4.3 4c

解：注意到分别对各项利用幂级数不易处理本问题，我们转而考虑将等号两端的表达式分别视作一个整体，即令：

$$\hat{f}(\lambda) = e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} \quad (4.6)$$

$$\hat{g}(\lambda) = e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2 \hat{C}} \quad (4.7)$$

并尝试分析两函数各阶导数的性质。首先，我们有：

$$\frac{d\hat{f}(\lambda)}{d\lambda} = e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} (\hat{A} + \hat{B}) \quad (4.8)$$

特别地，在 $\lambda = 0$ 处，

$$\left(\frac{d\hat{f}(\lambda)}{d\lambda} \right)_{\lambda=0} = \hat{A} + \hat{B} \quad (4.9)$$

因为 $(\hat{A} + \hat{B})$ 与 λ 无关，所以容易证明：

$$\left(\frac{d^n \hat{f}(\lambda)}{d\lambda^n} \right)_{\lambda=0} = (\hat{A} + \hat{B})^n \quad (4.10)$$

而利用 4a 和 4b 的结论，有：

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{g}(\lambda)}{d\lambda} &= e^{\lambda\hat{A}} \hat{A} e^{\lambda\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} + e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} \hat{B} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} - \lambda e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} \hat{C} \\ &= e^{\lambda\hat{A}} [\hat{A}, e^{\lambda\hat{B}}] e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} + e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} \hat{A} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} + e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} \hat{B} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} - \lambda e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} \hat{C} \\ &= \lambda e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} \hat{C} + e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} (\hat{A} + \hat{B}) e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} - \lambda e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} \hat{C} \\ &= e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} (\hat{A} + \hat{B}) \end{aligned} \quad (4.11)$$

其中在第二个等号处利用了

$$\hat{A} e^{\lambda\hat{B}} = [\hat{A}, e^{\lambda\hat{B}}] + e^{\lambda\hat{B}} \hat{A} \quad (4.12)$$

这一将不易处理的项换成对应的已知对易子与另一易于处理的项之和或差的处理方法非常重要，并将在今后的学习中经常出现，请同学们务必加以掌握。同理于关于 $\hat{f}(\lambda)$ 的讨论，由 $(\hat{A} + \hat{B})$ 与 λ 无关可以得到：

$$\left(\frac{d^n \hat{g}(\lambda)}{d\lambda^n} \right)_{\lambda=0} = (\hat{A} + \hat{B})^n \quad (4.13)$$

从而我们得知， $\hat{f}(\lambda)$ 和 $\hat{g}(\lambda)$ 关于 λ 的各阶导函数在 $\lambda = 0$ 处形式完全相同，同时显然两函数本身在 $\lambda = 0$ 处也相等。利用两函数在 $\lambda = 0$ 的幂级数展开式，有：

$$\hat{f}(\lambda) = \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\hat{A} + \hat{B})^n}{n!} \lambda^n = \hat{g}(\lambda) \quad (4.14)$$

即

$$e^{\lambda(\hat{A} + \hat{B})} = e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} e^{-\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} \quad (4.15)$$

正是欲证结论。

讨论：

1、用同样的方法可以证明著名的 Baker-Campbell-Hausdorff 公式：

$$e^{\lambda\hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda\hat{A}} = \hat{B} + \lambda [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\lambda^2}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (4.16)$$

2、本题中所证结论又称为 Glauber 公式。另一种可考虑采用的证法为考虑

$$\hat{h}(\lambda) = e^{-\lambda(\hat{A} + \hat{B})} e^{\lambda\hat{A}} e^{\lambda\hat{B}} \quad (4.17)$$

对 λ 求导并处理，得到微分方程，解得：

$$\hat{h}(\lambda) = e^{\frac{1}{2}\lambda^2\hat{C}} \quad (4.18)$$

即可证得结论。

附录：角动量算符叉乘自身的结果说明（对应 3c 题）：

$$\begin{aligned}
 (\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}})_\alpha &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{L}_\beta \hat{L}_\gamma \\
 &= \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} (\varepsilon_{\beta\mu\nu} \hat{r}_\mu \hat{p}_\nu) (\varepsilon_{\gamma\xi\zeta} \hat{r}_\xi \hat{p}_\zeta) \\
 &= (\delta_{\alpha\xi} \delta_{\beta\zeta} - \delta_{\alpha\zeta} \delta_{\beta\xi}) \varepsilon_{\beta\mu\nu} \hat{r}_\mu \hat{p}_\nu \hat{r}_\xi \hat{p}_\zeta \\
 &= \varepsilon_{\beta\mu\nu} \hat{r}_\mu \hat{p}_\nu \hat{r}_\alpha \hat{p}_\beta - \varepsilon_{\beta\mu\nu} \hat{r}_\mu \hat{p}_\nu \hat{r}_\beta \hat{p}_\alpha \\
 &= \varepsilon_{\beta\mu\nu} \hat{r}_\mu \hat{p}_\nu [\hat{r}_\alpha, \hat{p}_\beta] \\
 &= i\hbar \delta_{\alpha\beta} \hat{L}_\beta = i\hbar \hat{L}_\alpha
 \end{aligned}$$

亦即

$$\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{L}} = i\hbar \hat{\mathbf{L}} \neq 0$$

其中已利用 Levi-Civita 符号和 Kronecker 符号的关系

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \varepsilon_{\gamma\xi\zeta} = \varepsilon_{\gamma\alpha\beta} \varepsilon_{\gamma\xi\zeta} = \delta_{\alpha\xi} \delta_{\beta\zeta} - \delta_{\alpha\zeta} \delta_{\beta\xi}$$

请同学们务必关注量子力学中算符运算与经典力学中矢量运算的差别。一般而言，在所讨论的问题涉及彼此不对易的算符时，倘若需要利用经典力学中矢量运算的结论，最好加以验证或证明。

2022秋易为老师量子力学B

习题四参考解答

宋冰睿 刘丰铨

2022年10月18日

1 第一题

已知Hermitian算符 \hat{A} 的正交归一非简并的本征态为 $\{|\psi_n\rangle\}(n=1,2,3)$, 其对应的本征值为 $A_1=1, A_2=2, A_3=3$. 对如下未归一化的量子态 $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + 2|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle$:

- a 如在此量子态上对 \hat{A} 所对应的力学量进行测量, 单次测量的可能测值有哪些?
- b 单次测量 \hat{A} 所对应的力学量得到2和2.5的几率分别是多少?
- c 计算 \hat{A} 在该量子态下的期望值 $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$. 实验上如何测得该期望值?
- d 计算 \hat{A} 在该量子态下的涨落 $\Delta A = \sqrt{\langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle^2}$.

1.1 1a

由于测量某一力学量可能得到的结果是对应算符的本征值, 因此单次测量的可能测值有1、2、3.

1.2 1b

首先将题给量子态归一化为

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_1\rangle + \frac{2}{\sqrt{6}}|\psi_2\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_3\rangle \quad (1.1)$$

因此, 单次测量得到结果2的概率为

$$p_2 = |\langle\psi_2|\psi\rangle|^2 = \frac{2}{3} \quad (1.2)$$

得到结果2.5的概率为0.

1.3 1c

期望值

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \langle \psi_1 | + \frac{2}{\sqrt{6}} \langle \psi_2 | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle \psi_3 | \right) \hat{A} \left(\frac{1}{\sqrt{6}} | \psi_1 \rangle + \frac{2}{\sqrt{6}} | \psi_2 \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | \psi_3 \rangle \right) \\
 &= \frac{1}{6} A_1 + \frac{4}{6} A_2 + \frac{1}{6} A_3 \\
 &= \frac{1}{6} \cdot 1 + \frac{4}{6} \cdot 2 + \frac{1}{6} \cdot 3 = 2
 \end{aligned} \tag{1.3}$$

实验上若要测得该期望值，需首先制备态 $|\psi\rangle$ 的系综（大量相同量子态的集合），在其中大量的量子态上分别对 \hat{A} 对应的力学量进行测量，再将所有测量结果取均值。随着总测量次数的增加，得到的平均值将越来越趋近于2。

1.4 1d

首先计算

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{6}} \langle \psi_1 | + \frac{2}{\sqrt{6}} \langle \psi_2 | + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle \psi_3 | \right) \hat{A}^2 \left(\frac{1}{\sqrt{6}} | \psi_1 \rangle + \frac{2}{\sqrt{6}} | \psi_2 \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} | \psi_3 \rangle \right) \\
 &= \frac{1}{6} A_1^2 + \frac{4}{6} A_2^2 + \frac{1}{6} A_3^2 \\
 &= \frac{1}{6} \cdot 1 + \frac{4}{6} \cdot 4 + \frac{1}{6} \cdot 9 = \frac{13}{3}
 \end{aligned} \tag{1.4}$$

因而涨落

$$\Delta A = \sqrt{\frac{13}{3} - 2^2} = \frac{1}{\sqrt{3}} \tag{1.5}$$

2 第二题

假设力学量算符 \hat{A} 的本征值集合为 $\{A_n\}$ ，其中某本征值 A_m 对应的本征态有 s 重简并。请分别写出 A_m 对应的简并子空间中任意量子态及与此简并子空间正交的量子态的一般形式。

不妨设 \hat{A} 的本征值 A_p ($p = 1, 2, \dots, n$) 对应简并子空间 \mathcal{H}_p 的正交归一化基为 $\{|\alpha_{pi}\rangle\}$ ($i = 1, 2, \dots, r_p$)，其中 r_p 是第 p 个子空间 \mathcal{H}_p 的简并度。特别地，就 A_m 而言，其对应的 $r_m = s$ 。

根据子空间的性质，有如下正交归一条件：

$$\langle \alpha_{pi} | \alpha_{qj} \rangle = \delta_{pq} \delta_{ij} \tag{2.1}$$

不难发现，

- \mathcal{H}_m 中的任意量子态可由该子空间的基线性组合而成：

$$|\varphi_m\rangle = \sum_{i=1}^s c_{mi} |\alpha_{mi}\rangle \tag{2.2}$$

- 与 \mathcal{H}_m 正交的任意量子态可由其余子空间的基线性组合而成:

$$|\phi_{m\perp}\rangle = \sum_{p \neq m} \sum_{i=1}^{r_p} d_{pi} |\alpha_{pi}\rangle \quad (2.3)$$

其中展开系数

$$\begin{cases} c_{mi} = \langle \alpha_{mi} | \varphi_m \rangle \\ d_{pi} = \langle \alpha_{pi} | \phi_{m\perp} \rangle \end{cases} \quad (2.4)$$

这里分别用到了子空间 \mathcal{H}_m 中和全空间中的完备性条件

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^s |\alpha_{mi}\rangle \langle \alpha_{mi}| = \mathbb{1}_m \\ \sum_p \sum_{i=1}^{r_p} |\alpha_{pi}\rangle \langle \alpha_{pi}| = \mathbb{1} \end{cases} \quad (2.5)$$

对式2.3而言, 根据上面的完备性条件, 按理应存在 \mathcal{H}_m 中的展开系数. 不过由于正交的要求, 我们有 $d_{mi} = \langle \alpha_{mi} | \phi_{m\perp} \rangle = 0 (i = 1, 2, \dots, s)$, 因此, 式2.3中可直接标记 $p \neq m$.

Tips: 本题的一大易错点在于本征值 $A_n (n \neq m)$ 也可能存在简并. 因此, 其余子空间的简并度问题也应得到充分考虑.

3 第三题

对于Hermitian算符 \hat{A} 及其本征态 $|\psi_n\rangle$, 请证明如下关系:

a

$$\sum_n \psi_n^*(x) \psi_n(x') = \delta(x - x'), \text{ where } \psi_n(x) = \langle x | \psi_n \rangle$$

b

$$\hat{A} = \sum_n A_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

c

$$e^{\hat{A}} = \sum_n e^{A_n} |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

以下推导利用了完备性条件

$$\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \mathbb{1} \quad (3.1)$$

3.1 3a

$$\begin{aligned}
\text{LHS} &= \sum_n \langle \psi_n | x \rangle \langle x' | \psi_n \rangle \\
&= \sum_n \langle x' | \psi_n \rangle \langle \psi_n | x \rangle \\
&= \langle x' | \left(\sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \right) |x\rangle \\
&= \langle x' | x \rangle = \delta(x - x')
\end{aligned} \tag{3.2}$$

这里涉及到对该式物理意义的理解. 当 $x = x'$ 时, 乍看之下左端是有限值, 但实际上其应跟随右端的 δ 函数发散. 这是因为在氢原子或谐振子等实际量子力学体系中, 主量子数 n 的取值一般有无穷多个.

3.2 3b

$$\hat{A} = \sum_n \hat{A} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \sum_n A_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \tag{3.3}$$

3.3 3c

$$e^{\hat{A}} = \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{\hat{A}^m}{m!} = \sum_n \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{\hat{A}^m}{m!} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \sum_n \left(\sum_{m=0}^{+\infty} \frac{A_n^m}{m!} \right) |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \sum_n e^{A_n} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \tag{3.4}$$

4 第四题

求投影算符 $\hat{P} = |\psi\rangle \langle \psi|$ 的本征值与本征态, 其中 $|\psi\rangle$ 为某给定的归一化量子态.

4.1 法一

不难发现

$$\hat{P}^2 = |\psi\rangle \langle \psi| |\psi\rangle \langle \psi| = |\psi\rangle \langle \psi| = \hat{P} \tag{4.1}$$

因此, \hat{P}^2 与 \hat{P} 有相同的本征态, 不妨设为 $|\phi\rangle$, 对应 \hat{P} 的本征值设为 λ . 于是可考虑如下推导

$$\begin{aligned}
\hat{P}^2 |\phi\rangle &= \hat{P} |\phi\rangle \\
\lambda^2 |\phi\rangle &= \lambda |\phi\rangle \\
(\lambda^2 - \lambda) |\phi\rangle &= 0
\end{aligned} \tag{4.2}$$

由于本征态不能为空态 ($|\phi\rangle \neq 0$), 因此只能有 $\lambda^2 - \lambda = 0$, 可得 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 0$.

下面对两个本征值分别进行讨论.

4.1.1 $\lambda_1 = 1$

此时

$$|\phi_1\rangle = \hat{P}|\phi_1\rangle = \langle\psi|\phi_1\rangle|\psi\rangle \quad (4.3)$$

只能有

$$|\phi_1\rangle = |\psi\rangle \quad (4.4)$$

4.1.2 $\lambda_2 = 0$

此时

$$0 = \hat{P}|\phi_2\rangle = \langle\psi|\phi_2\rangle|\psi\rangle \quad (4.5)$$

因此

$$\langle\psi|\phi_2\rangle = 0 \quad (4.6)$$

即 $|\phi_2\rangle$ 与 $|\psi\rangle$ 正交，不妨记 $|\phi_2\rangle = |\psi^\perp\rangle$. 需要注意的是 $|\psi^\perp\rangle$ 可能不止一个.

4.2 法二

尝试直接将投影算符 \hat{P} 作用于任意归一化量子态 $|\varphi\rangle$ 上，我们得到

$$\hat{P}|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle|\psi\rangle \quad (4.7)$$

4.2.1 $\langle\psi|\varphi\rangle \neq 0$ 时

上式右端经归一化后即为 $|\psi\rangle$. 因此，若要满足本征方程，可取 $|\varphi\rangle = |\psi\rangle$ ，式4.7即化为

$$\hat{P}|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (4.8)$$

因此， $|\psi\rangle$ 是 \hat{P} 的本征态，其对应的本征值为1.

4.2.2 $\langle\psi|\varphi\rangle = 0$ 时

$|\varphi\rangle$ 与 $|\psi\rangle$ 正交，仍可记为 $|\psi^\perp\rangle$. 即有

$$\hat{P}|\psi^\perp\rangle = 0 \quad (4.9)$$

因此， $|\psi^\perp\rangle$ 也是 \hat{P} 的本征态，其对应的本征值为0.

Tips: 本题中，不少同学仅考虑了本征值1，而没有注意到0的情况，这是不严谨的. 分类讨论的思想永不过时.

5 第五题

利用产生/湮灭算符和坐标/动量算符的关系，证明一维简谐振子的Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

可以表示为

$$\hat{H} = \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

不妨引入参数 $\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$. 作无量纲化，记 $\hat{x}' = \beta\hat{x}$, $\hat{p}' = \frac{1}{\hbar\beta}\hat{p}$, 则Hamiltonian可重新写为

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left[(\hat{x}')^2 + (\hat{p}')^2 \right] \quad (5.1)$$

产生/湮灭算符可重新写为

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}' + i\hat{p}'), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}' - i\hat{p}') \quad (5.2)$$

并且，有对易关系：

$$[\hat{x}', \hat{p}'] = i, \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (5.3)$$

从上式可反解出

$$\hat{x}' = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \quad \hat{p}' = \frac{1}{\sqrt{2}i}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (5.4)$$

回代入式5.1中，就得到

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2}\hbar\omega \left[\frac{1}{2} \left(\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \right) - \frac{1}{2} \left(\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} \right) \right] \\ &= \frac{1}{2}\hbar\omega (\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \\ &= \left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \end{aligned} \quad (5.5)$$

其中利用了对易关系5.3.

6 第六题

请利用产生/湮灭算符的对易关系，证明Fock态的正交归一性，即

$$\langle n|m \rangle = \delta_{nm}, \text{ where } |n\rangle = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle$$

首先规定已知基态归一化条件

$$\langle 0|0 \rangle = 1 \quad (6.1)$$

6.1 法一

引入粒子数算符 $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$, 根据其Hermitian性, 可考虑如下推导:

$$\begin{aligned}\langle n | \hat{N} | m \rangle &= \langle n | \hat{N}^\dagger | m \rangle \\ \langle n | (\hat{N} | m \rangle) &= (\hat{N} | n \rangle)^\dagger | m \rangle \\ m \langle n | m \rangle &= n \langle n | m \rangle\end{aligned}\tag{6.2}$$

则当

$n \neq m$ 时 必有 $\langle n | m \rangle = 0$.

$n = m$ 时 式6.2化为

$$\begin{aligned}\langle n | \hat{N} | n \rangle &= \langle n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | n \rangle \\ n \langle n | n \rangle &= (\hat{a} | n \rangle)^\dagger \hat{a} | n \rangle\end{aligned}\tag{6.3}$$

再考虑递推关系

$$\begin{cases} \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} | n - 1 \rangle \\ \hat{a}^\dagger | n \rangle = \sqrt{n + 1} | n + 1 \rangle \end{cases}\tag{6.4}$$

式6.3就可进一步化为

$$n \langle n | n \rangle = n \langle n - 1 | n - 1 \rangle\tag{6.5}$$

由于 n 是任意正整数, 故重复上述操作可得

$$\langle n | n \rangle = \langle 0 | 0 \rangle = 1\tag{6.6}$$

综合两种情况, 即证得

$$\langle n | m \rangle = \delta_{nm}\tag{6.7}$$

6.2 法二

利用递推关系6.4, 直接考虑

$$\begin{aligned}\langle n | m \rangle &= \left(\frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{n}} | n - 1 \rangle \right)^\dagger \frac{\hat{a}^\dagger}{\sqrt{m}} | m - 1 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{mn}} \langle n - 1 | \hat{a} \hat{a}^\dagger | m - 1 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{mn}} \langle n - 1 | \hat{N} + \mathbb{1} | m - 1 \rangle \\ &= \sqrt{\frac{m}{n}} \langle n - 1 | m - 1 \rangle\end{aligned}\tag{6.8}$$

其中第三个等号利用了对易关系5.3. 不妨假设 $n \geq m$ ($n \leq m$ 时同理), 则由上述递推式可进一步得到

$$\langle n | m \rangle = \sqrt{\frac{m(m-1)}{n(n-1)}} \langle n-2 | m-2 \rangle = \cdots = \sqrt{\frac{m!}{n!/(n-m)!}} \langle n-m | 0 \rangle\tag{6.9}$$

则当

$n > m$ 时

$$\langle n|m \rangle \sim \langle n-m|0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-m)!}} \langle 0|\hat{a}^{n-m}|0 \rangle = 0 \quad (6.10)$$

$n = m$ 时

$$\langle n|n \rangle = \langle 0|0 \rangle = 1 \quad (6.11)$$

得证.

6.3 法三

仍不妨假设 $n \geq m$. 与法二相同, 直接考虑

$$\langle n|m \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \langle 0|\hat{a}^n (\hat{a}^\dagger)^m |0 \rangle \quad (6.12)$$

利用对易关系

$$\begin{cases} [\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \\ [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \end{cases} \quad (6.13)$$

和作业三题2a之结论, 可导出

$$[\hat{N}, (\hat{a}^\dagger)^n] = n (\hat{a}^\dagger)^n \quad (6.14)$$

因此, 式6.12中的

$$\begin{aligned} \hat{a}^n (\hat{a}^\dagger)^m &= \hat{a}^{n-1} (\hat{a}\hat{a}^\dagger) (\hat{a}^\dagger)^{m-1} = \hat{a}^{n-1} (\hat{N} + \mathbb{1}) (\hat{a}^\dagger)^{m-1} \\ &= \hat{a}^{n-1} (\hat{a}^\dagger)^{m-1} + \hat{a}^{n-1} \hat{N} (\hat{a}^\dagger)^{m-1} \\ &= \hat{a}^{n-1} (\hat{a}^\dagger)^{m-1} + \hat{a}^{n-1} [(m-1) (\hat{a}^\dagger)^{m-1} + (\hat{a}^\dagger)^{m-1} \hat{N}] \\ &= m \hat{a}^{n-1} (\hat{a}^\dagger)^{m-1} + \hat{a}^{n-1} (\hat{a}^\dagger)^{m-1} \hat{N} \end{aligned} \quad (6.15)$$

回代入式6.12, 就有

$$\begin{aligned} \langle n|m \rangle &= \frac{m}{\sqrt{n!m!}} \langle 0|\hat{a}^{n-1} (\hat{a}^\dagger)^{m-1} |0 \rangle \\ &= \frac{m(m-1)}{\sqrt{n!m!}} \langle 0|\hat{a}^{n-2} (\hat{a}^\dagger)^{m-2} |0 \rangle \\ &= \dots \\ &= \frac{m!}{\sqrt{n!m!}} \langle 0|\hat{a}^{n-m}|0 \rangle \\ &= \begin{cases} 0 & , n > m \\ \langle 0|0 \rangle = 1 & , n = m \end{cases} \end{aligned} \quad (6.16)$$

得证.

Tips: 上面所列的三种解法中, 以法一最简洁、法二最直接. 大家使用最多的法三, 与法二没有本质上的差异, 虽相对较繁琐, 但不失为一种练习对易子计算技巧的不错方式.

另外，少数同学利用递推关系化简时，在最后一步出现了 $\langle n-m|0\rangle=0$. 严格来说这是不严谨的，相当于已经利用 $\langle n-m|0\rangle=\delta_{n-m,0}$ 的欲证结论.

7 第七题

请验证Fock态下的如下关系：

a

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle = 0, \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0$$

b

$$\langle n|\hat{x}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right), \langle n|\hat{p}^2|n\rangle = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

c

$$\Delta x \Delta p = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar$$

7.1 7a

根据第五题引入的记号，有

$$\langle \hat{x} \rangle_n = \langle n|\hat{x}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\beta} \langle n|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\beta} \sqrt{n} (\langle n|n-1\rangle + \langle n-1|n\rangle) = 0 \quad (7.1)$$

$\langle \hat{p} \rangle_n = \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0$ 同理可证.

7.2 7b

$$\begin{aligned} \langle \hat{x}^2 \rangle_n &= \langle n|\hat{x}^2|n\rangle = \frac{1}{2\beta^2} \langle n|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|(\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a})|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \left[(\hat{a}^\dagger|n\rangle)^\dagger \hat{a}^\dagger|n\rangle + (\hat{a}|n\rangle)^\dagger \hat{a}|n\rangle \right] \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (n+1+n) \\ &= \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \quad (7.2)$$

式中第四个等号利用了递推关系6.4. 同理有

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{p}^2 \rangle_n &= \langle n | \hat{p}^2 | n \rangle = -\frac{\hbar^2 \beta^2}{2} \langle n | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 | n \rangle \\
 &= -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle n | (\hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}) | n \rangle \\
 &= \frac{m\hbar\omega}{2} \left[(\hat{a}^\dagger | n \rangle)^\dagger \hat{a}^\dagger | n \rangle + (\hat{a} | n \rangle)^\dagger \hat{a} | n \rangle \right] \\
 &= \frac{m\hbar\omega}{2} (n + 1 + n) \\
 &= m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)
 \end{aligned} \tag{7.3}$$

7.3 7c

在Fock态 $|n\rangle$ 下,

$$\begin{aligned}
 (\Delta x \Delta p)_n &= \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle_n - \langle \hat{x} \rangle_n^2} \cdot \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle_n - \langle \hat{p} \rangle_n^2} \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega} \cdot m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)^2} \\
 &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

2022 秋易为老师量子力学 B

习题五参考解答

刘丰铨 宋冰睿

2022 年 10 月 18 日

1 第 1 题

请证明：

(a)

$$e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\hat{a}e^{-\alpha\hat{a}^\dagger} = \hat{a} - \alpha\hat{I}$$

(b)

$$[\hat{a}, e^{\alpha\hat{a}^\dagger-\alpha^*\hat{a}}] = \alpha e^{\alpha\hat{a}^\dagger-\alpha^*\hat{a}}$$

(c)

$$e^{\lambda\hat{a}}|0\rangle = |0\rangle$$

(d)

$$|\alpha\rangle = e^{\alpha\hat{a}^\dagger-\alpha^*\hat{a}}|0\rangle$$

其中 \hat{a}^\dagger 和 \hat{a} 分别为一维谐振子问题中的升降算符， $|0\rangle$ 为一维谐振子基态， $|\alpha\rangle$ 为相干态（即算符 \hat{a} 的属于本征值 a 的本征态），两态均已归一化。

说明：本题和下题的求解过程中将常常利用对易关系

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

考虑到大家对此已经相当熟悉，我们在应用时将不再加以强调。

1.1 1a

解：我们注意到，倘若能够将欲证等式左端的 \hat{a} 和 $e^{-\alpha\hat{a}^\dagger}$ 交换位置，问题将变得十分易于处理。为此，我们考虑利用对易子，得到：

$$e^{\alpha\hat{a}^\dagger}\hat{a}e^{-\alpha\hat{a}^\dagger} = e^{\alpha\hat{a}^\dagger} [\hat{a}, e^{-\alpha\hat{a}^\dagger}] + e^{\alpha\hat{a}^\dagger} e^{-\alpha\hat{a}^\dagger} \hat{a} = e^{\alpha\hat{a}^\dagger} [\hat{a}, e^{-\alpha\hat{a}^\dagger}] + \hat{a} \quad (1.1)$$

根据第三次作业 4b 题的结论（注意该结论的应用条件为 \hat{a} 和 \hat{a}^\dagger 都同 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]$ 对易，这里显然满足），我们有：

$$[\hat{a}, e^{-\alpha\hat{a}^\dagger}] = -\alpha [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] e^{-\alpha\hat{a}^\dagger} = -\alpha e^{-\alpha\hat{a}^\dagger} \quad (1.2)$$

将上式代入前一式，有：

$$e^{\alpha \hat{a}^\dagger} \hat{a} e^{-\alpha \hat{a}^\dagger} = -\alpha e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\alpha \hat{a}^\dagger} + \hat{a} = \hat{a} - \alpha \hat{I} \quad (1.3)$$

即为欲证等式.

1.2 1b

解：我们发现对易子中第二项不易处理，于是尝试利用第三次作业 4c 题所证明的 Glauber 公式对其进行展开（取 $\lambda = 1$ ），得到：

$$e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}} = e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^* \hat{a}} e^{-\frac{1}{2} [\alpha \hat{a}^\dagger, -\alpha^* \hat{a}]} = e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^* \hat{a}} e^{-\frac{1}{2} |\alpha|^2} \quad (1.4)$$

因此，有：

$$\begin{aligned} [\hat{a}, e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}}] &= [\hat{a}, e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^* \hat{a}} e^{-\frac{1}{2} |\alpha|^2}] \\ &= [\hat{a}, e^{\alpha \hat{a}^\dagger}] e^{-\alpha^* \hat{a}} e^{-\frac{1}{2} |\alpha|^2} \\ &= \alpha e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^* \hat{a}} e^{-\frac{1}{2} |\alpha|^2} = \alpha e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}} \end{aligned} \quad (1.5)$$

其中在第 3 个等号处已利用 1.2 的结果；是为欲证等式.

1.3 1c

解：我们已经知道， $|0\rangle$ 是算符 \hat{a} 的属于本征值 0 的本征态. 根据算符函数的定义，我们有：

$$e^{\lambda \hat{a}} |0\rangle = \left(\hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \hat{a}^n \right) |0\rangle = |0\rangle \quad (1.6)$$

即为欲证等式.

注：请同学们注意，第四次作业 3c 题的结论不能在本题使用，这是因为 \hat{a} 的本征态并不满足一般的完备性条件，而后者是我们推导得到该结论的前提. 另外，我们可以对本题结论做一般性推广：对于任意算符 \hat{A} （我们对其 Hermite 性质没有要求）和它属于本征值 a_i 的本征态 $|a_i\rangle$ ，有：

$$f(\hat{A}) |a_i\rangle = f(a_i) |a_i\rangle \quad (1.7)$$

其中算符函数 $f(\hat{A})$ 只与 \hat{A} 或者同 \hat{A} 对易的算符有关. 一般而言，该结论可以直接使用. 作为练习，同学们不妨自行证明.

1.4 1d

解：为了使问题变得更易于处理，首先将 $|\alpha\rangle$ 在 Fock 态所组成的完备正交基下展开，得：

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n| \alpha \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \left\langle 0 \left| \frac{\hat{a}^n}{\sqrt{n!}} \right| \alpha \right\rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0| \alpha \rangle |n\rangle \end{aligned} \quad (1.8)$$

根据 $|\alpha\rangle$ 归一化的条件，有：

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(|\alpha|^2)^n}{n!} |\langle 0|\alpha\rangle|^2 = e^{|\alpha|^2} |\langle 0|\alpha\rangle|^2 = 1 \quad (1.9)$$

不妨令：

$$\langle 0|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \quad (1.10)$$

则代入1.8，有：

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{n!} (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha\hat{a}^\dagger} |0\rangle \end{aligned} \quad (1.11)$$

而利用 Glauber 公式，我们可以将欲证等式等号右端表达式写作：

$$e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle = e^{\alpha\hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^*\hat{a}} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} |0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} e^{\alpha\hat{a}^\dagger} |0\rangle \quad (1.12)$$

将上式同1.11比较，立即有：

$$|\alpha\rangle = e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle \quad (1.13)$$

即为欲证结论.

注：也可循以下方法.

首先，我们希望证明 $e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle$ 是 \hat{a} 属于本征值 α 的本征态. 为此，以 \hat{a} 左乘等号右端表达式，得到

$$\hat{a}e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle$$

我们自然地希望能够交换 \hat{a} 和 $e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}}$. 因此，利用 1b 的结论，有：

$$\begin{aligned} \hat{a}e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle &= [\hat{a}, e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}}] |0\rangle + e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} \hat{a} |0\rangle \\ &= \alpha e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle \end{aligned} \quad (1.14)$$

由此，我们只能证明 $e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle$ 是 \hat{a} 属于本征值 α 的本征态，而不能证明它已是归一化的. 为了证明归一化的性质，仍要应用 Glauber 公式，得到：

$$\begin{aligned} (e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle)^\dagger e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle &= e^{-|\alpha|^2} \left\langle 0 \middle| e^{-\alpha\hat{a}^\dagger} e^{\alpha^*\hat{a}} e^{\alpha\hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^*\hat{a}} \right| 0 \right\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2} \left\langle 0 \middle| e^{\alpha^*\hat{a}} e^{\alpha\hat{a}^\dagger} \right| 0 \right\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2} \sum_{m,n \geq 0} \left\langle m \middle| \frac{1}{\sqrt{m!}} (\alpha^*)^m \frac{1}{\sqrt{n!}} \alpha^n \right| n \right\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2} \sum_{m,n \geq 0} \delta_{mn} \frac{1}{\sqrt{m!n!}} (\alpha^*)^m \alpha^n \\ &= e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (|\alpha|^2)^n \\ &= e^{-|\alpha|^2} e^{|\alpha|^2} = 1 \end{aligned} \quad (1.15)$$

由此方才证得 $e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle$ 模为 1, 从而

$$|\alpha\rangle = e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}} |0\rangle \quad (1.16)$$

即为欲证结论.

2 第 2 题

已知某体系 Hamiltonian 算符为

$$\hat{H} = \frac{5}{3}\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{2}{3}\left[\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2\right]$$

其中 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. 在此基础上, 可通过变换 (其中 u 和 v 皆为实数):

$$\begin{cases} \hat{b} = u\hat{a} + v\hat{a}^\dagger \\ \hat{b}^\dagger = u\hat{a}^\dagger + v\hat{a} \end{cases}$$

使 Hamiltonian 算符化为谐振子形式:

$$\hat{H} = \lambda\hat{b}^\dagger\hat{b} + E_0\hat{I}$$

并要求 $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$. 请给出系数 λ 、 E_0 以及体系能谱.

解: 首先, 根据要求 $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$, 有:

$$[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = [u\hat{a} + v\hat{a}^\dagger, u\hat{a}^\dagger + v\hat{a}] = u^2 - v^2 = 1 \quad (2.1)$$

其次, 我们可以用 \hat{b} 和 \hat{b}^\dagger 表达 \hat{a} 和 \hat{a}^\dagger , 即

$$\begin{cases} \hat{a} = u\hat{b} - v\hat{b}^\dagger \\ \hat{a}^\dagger = u\hat{b}^\dagger - v\hat{b} \end{cases} \quad (2.2)$$

其中已利用2.1. 将上两式代入 Hamiltonian 算符的表达式, 得到:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{5}{3}(u\hat{b}^\dagger - v\hat{b})(u\hat{b} - v\hat{b}^\dagger) + \frac{2}{3}\left[(u\hat{b} - v\hat{b}^\dagger)^2 + (u\hat{b}^\dagger - v\hat{b})^2\right] \\ &= \frac{5}{3}\left[u^2\hat{b}^\dagger\hat{b} - uv\hat{b}^2 - uv(\hat{b}^\dagger)^2 + v^2\hat{b}\hat{b}^\dagger\right] + \frac{2}{3}\left[(u^2 + v^2)\hat{b}^2 + (u^2 + v^2)(\hat{b}^\dagger)^2 - 2uv\hat{b}\hat{b}^\dagger - 2uv\hat{b}^\dagger\hat{b}\right] \\ &= \left[\frac{2}{3}(u^2 + v^2) - \frac{5}{3}uv\right]\left[\hat{b}^2 + (\hat{b}^\dagger)^2\right] + \left[\frac{5}{3}(u^2 + v^2) - \frac{8}{3}uv\right]\hat{b}^\dagger\hat{b} + \left(\frac{5}{3}v^2 - \frac{4}{3}uv\right)\hat{I} \end{aligned} \quad (2.3)$$

将上式与题给目标表达式做比较, 结合2.1, 我们可以给出 u 和 v 的两个约束条件:

$$\begin{cases} u^2 - v^2 = 1 \Rightarrow (u - v)(u + v) = 1 \\ \frac{2}{3}(u^2 + v^2) - \frac{5}{3}uv = 0 \Rightarrow (u - 2v)(2u - v) = 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

根据以上第二式, 有以下两种情形:

1. 倘若 $u = 2v$, 代入以上第一式解得: $u = \frac{2}{\sqrt{3}}, v = \frac{1}{\sqrt{3}}$.

2. 倘若 $v = 2u$, 代入以上第一式有: $-3u^2 = 1$, 无实数解.

因此，只能取第一种情况的解. 将其代入2.3，得：

$$\hat{H} = \left(\frac{5}{3} \times \frac{5}{3} - \frac{8}{3} \times \frac{2}{3} \right) \hat{b}^\dagger \hat{b} + \left(\frac{5}{3} \times \frac{1}{3} - \frac{4}{3} \times \frac{2}{3} \right) \hat{I} = \hat{b}^\dagger \hat{b} - \frac{1}{3} \hat{I} \quad (2.5)$$

于是 $\lambda = 1$ ，同时 $E_0 = -\frac{1}{3}$ ，能谱为：

$$E_n = n - \frac{1}{3}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (2.6)$$

注：我们这里直接使用了谐振子理论的结果. 事实上，我们在考察谐振子问题时，出发点恰恰是 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ ，本质上所有结论都是由此推导得到的. 因此，对于 Hamiltonian 算符由2.5表达的系统，只要 $[\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = 1$ ，我们就可以把谐振子问题中粒子数算符的定义以及一系列派生结果应用到本系统上.

3 第3题

假设 $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ 构成系统的一组完备正交基，同时系统的 Hamiltonian 算符可以写作：

$$\hat{H} = E(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

试求体系本征能量和对应的本征态.

解：依题意， \hat{H} 在题给基下有如下矩阵表示：

$$H = E \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

如我们曾在习题课上讨论过的，问题即转化为求该矩阵的特征值及特征向量. 解对应的久期方程：

$$\det(\lambda I - H) = (\lambda - E)(\lambda + E) - E^2 = (\lambda - \sqrt{2}E)(\lambda + \sqrt{2}E) = 0 \quad (3.2)$$

得 $\lambda = \pm \sqrt{2}E$ ，因此体系的本征能量为 $\pm \sqrt{2}E$. 进一步地，可解得相应的本征矢量：

$$|\sqrt{2}E\rangle = \frac{1 + \sqrt{2}}{\sqrt{4 + 2\sqrt{2}}} |1\rangle + \frac{1}{\sqrt{4 + 2\sqrt{2}}} |2\rangle = \frac{\sqrt{2 + \sqrt{2}}}{2} |1\rangle + \frac{\sqrt{2 - \sqrt{2}}}{2} |2\rangle \quad (3.3)$$

$$|-\sqrt{2}E\rangle = \frac{1 - \sqrt{2}}{\sqrt{4 - 2\sqrt{2}}} |1\rangle + \frac{1}{\sqrt{4 - 2\sqrt{2}}} |2\rangle = -\frac{\sqrt{2 - \sqrt{2}}}{2} |1\rangle + \frac{\sqrt{2 + \sqrt{2}}}{2} |2\rangle \quad (3.4)$$

注：亦可参照如下思路求解，但稍显繁复：我们不妨设体系的能量本征态为

$$|\psi_E\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle \quad (3.5)$$

而根据 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 的正交归一性，不难得到：

$$\hat{H} |1\rangle = E(|1\rangle + |2\rangle) \quad (3.6)$$

$$\hat{H} |2\rangle = E(|1\rangle - |2\rangle) \quad (3.7)$$

将上两式代入3.5, 有:

$$\hat{H}(c_1|1\rangle + c_2|2\rangle) = E(c_1 + c_2)|1\rangle + E(c_1 - c_2)|2\rangle \quad (3.8)$$

由此得到相应的比例关系, 即可求解.

4 第4题

倘若 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ 且 $[\hat{A}, \hat{C}] = 0$, 而 $[\hat{B}, \hat{C}] \neq 0$, 请证明算符 \hat{A} 的本征态中存在简并.

解: 我们采用反证法. 假设 \hat{A} 的所有本征态皆不简并, 并记:

$$\hat{A}|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle \quad (4.1)$$

不妨认为所有 $|a_i\rangle$ 均已归一化. 由于 $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, 必有:

$$\hat{A}\hat{B}|a_i\rangle = \hat{B}\hat{A}|a_i\rangle = a_i\hat{B}|a_i\rangle \quad (4.2)$$

即 $\hat{B}|a_i\rangle$ 也是 \hat{A} 属于本征值 a_i 的本征向量, 又由于 \hat{A} 的各本征子空间维数均为 1, 不妨记:

$$\hat{B}|a_i\rangle = b_i|a_i\rangle \quad (4.3)$$

同理, 对于算符 \hat{C} , 也可记:

$$\hat{C}|a_i\rangle = c_i|a_i\rangle \quad (4.4)$$

上两式说明:

$$\begin{aligned} \hat{B}\hat{C}|a_i\rangle &= c_i\hat{B}|a_i\rangle = c_i b_i |a_i\rangle \\ &= b_i c_i |a_i\rangle = b_i \hat{C}|a_i\rangle = \hat{C}\hat{B}|a_i\rangle \end{aligned} \quad (4.5)$$

对任意 $|a_i\rangle$ 均成立. 于是, $\forall i, j$, 有:

$$\langle a_j | [\hat{B}, \hat{C}] | a_i \rangle = \langle a_j | (\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) | a_i \rangle = 0 \quad (4.6)$$

亦即 $[\hat{B}, \hat{C}] = 0$, 与题给条件矛盾. 因此, 我们的假设不正确, \hat{A} 必然存在简并的本征态.

2022秋易为老师量子力学B

习题六参考解答

宋冰睿 刘丰铨

2022年10月29日

1 第一题

在三维ket矢空间有一组正交归一的基矢 $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ 及相互对易的算符 \hat{A} 、 \hat{B} . 已知算符 \hat{A} 在这组基矢下的矩阵表示为 $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$, 算符 \hat{B} 的矩阵表示为 $\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & i \\ 0 & -i & 3 \end{pmatrix}$.

试求算符 \hat{A} 与算符 \hat{B} 一组正交归一的共同本征态，并写出这些共同本征态对应于算符 \hat{A} 与算符 \hat{B} 的本征值. 说明如何以这些本征值为量子数标定不同的共同本征态.

不妨设所求共同本征态在所给基矢下可表示为

$$|\psi\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle + c|3\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \quad (1.1)$$

1.1 法一

$$A|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ -b \\ -c \end{pmatrix}, \quad B|\psi\rangle = \begin{pmatrix} 2a \\ b+ic \\ -ib+3c \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

由于 \hat{A} 、 \hat{B} 对易，因此 $A|\psi\rangle$ 、 $B|\psi\rangle$ 表示同一共同本征态，应只相差一个常倍数，即有

$$\frac{2a}{a} = \frac{b+ic}{-b} = \frac{-ib+3c}{-c} \quad (1.3)$$

1.1.1 $a \neq 0$

式1.3化为

$$\frac{b+ic}{-b} = \frac{-ib+3c}{-c} = 2 \quad (1.4)$$

只能有 $b = c = 0$, 且此时 a 可取任意非零值. 若取 $(a_1, b_1, c_1) = (1, 0, 0)$, 可得共同本征态

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

1.1.2 $a = 0$

式1.3化为

$$\frac{b + ic}{-b} = \frac{-ib + 3c}{-c} \quad (1.6)$$

解得

$$b = (-1 \pm \sqrt{2})ic \quad (1.7)$$

再根据归一化条件 $|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1$, 并取 c 的辐角为 0, 可解得

$$\begin{cases} b_2 = \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}i \\ c_2 = \frac{\sqrt{2+\sqrt{2}}}{2} \end{cases} \quad \begin{cases} b_3 = -\frac{\sqrt{2+\sqrt{2}}}{2}i \\ c_3 = \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2} \end{cases} \quad (1.8)$$

即

$$|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}i \\ \frac{\sqrt{2+\sqrt{2}}}{2} \end{pmatrix}, \quad |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\sqrt{2+\sqrt{2}}}{2}i \\ \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2} \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

至此, 我们得到了 \hat{A} 、 \hat{B} 的共同本征态, 于是相应的本征值可求.

算符 \hat{A} 由于 A 已是对角形式, 故本征值易知为 $\{1, -1, -1\}$.

算符 \hat{B} 可简单计算得到

$$\begin{cases} B|\psi_1\rangle = 2|\psi_1\rangle \\ B|\psi_2\rangle = (2 + \sqrt{2})|\psi_2\rangle \\ B|\psi_3\rangle = (2 - \sqrt{2})|\psi_3\rangle \end{cases} \quad (1.10)$$

因此其本征值是 $\{2, (2 + \sqrt{2}), (2 - \sqrt{2})\}$.

最后, 我们将说明如何以这些本征值为量子数标定不同的共同本征态:

\hat{A} 的本征值存在简并, 因此无法仅用其本征值完成标定; 反之, 由于 \hat{B} 的本征值无简并, 我们可仅用其本征值为量子数对不同本征态进行标定:

$$\begin{cases} |\psi_1\rangle = |B_1 = 2\rangle \\ |\psi_2\rangle = |B_2 = 2 + \sqrt{2}\rangle \\ |\psi_3\rangle = |B_3 = 2 - \sqrt{2}\rangle \end{cases} \quad (1.11)$$

实际上，也可同时使用两者的本征值进行标定，即

$$\begin{cases} |\psi_1\rangle = |A_1 = 1, B_1 = 2\rangle \\ |\psi_2\rangle = |A_{2,3} = -1, B_2 = 2 + \sqrt{2}\rangle \\ |\psi_3\rangle = |A_{2,3} = -1, B_3 = 2 - \sqrt{2}\rangle \end{cases} \quad (1.12)$$

1.2 法二

我们尝试直接求出算符 \hat{B} 本征问题的解。由久期方程

$$\begin{aligned} 0 &= \det(\lambda I - B) = \begin{vmatrix} \lambda - 2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda - 1 & -i \\ 0 & i & \lambda - 3 \end{vmatrix} \\ &= (\lambda - 2)[(\lambda - 1)(\lambda - 3) - 1] \\ &= (\lambda - 2)(\lambda^2 - 4\lambda + 2) \end{aligned} \quad (1.13)$$

可解得

$$\begin{cases} \lambda_1 = 2 \\ \lambda_2 = 2 + \sqrt{2} \\ \lambda_3 = 2 - \sqrt{2} \end{cases} \quad (1.14)$$

事实上，也可通过将 B 右下角的二阶方阵进行块对角化的方法得到结果，不过无本质差异。

1.2.1 $\lambda_1 = 2$

有

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -i \\ 0 & i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \end{pmatrix} = 0 \quad (1.15)$$

可取

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

对应于1.1.1节，与式1.5相符。

1.2.2 $\lambda_2 = 2 + \sqrt{2}$

有

$$\begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} + 1 & -i \\ 0 & i & \sqrt{2} - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (1.17)$$

可知必有 $a_2 = 0$ ，且 $b_2 = (\sqrt{2} - 1)ic_2$ ，对应于1.1.2节。

根据归一化条件 $|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1$, 并取c的辐角为0, 可解得

$$\begin{cases} b_2 = \frac{\sqrt{2}-1}{\sqrt{4-2\sqrt{2}}}i = \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}i \\ c_2 = \frac{1}{\sqrt{4-2\sqrt{2}}} = \frac{\sqrt{2+\sqrt{2}}}{2} \end{cases} \quad (1.18)$$

综上,

$$|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}i \\ \frac{\sqrt{2+\sqrt{2}}}{2} \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

1.2.3 $\lambda_3 = 2 - \sqrt{2}$

有

$$\begin{pmatrix} -\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}+1 & -i \\ 0 & i & -\sqrt{2}-1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_3 \\ b_3 \\ c_3 \end{pmatrix} = 0 \quad (1.20)$$

可知必有 $a_3 = 0$, 且 $b_3 = -(\sqrt{2}+1)i c_3$, 对应于1.1.2节.

与上小节类似, 取c的辐角为0, 根据归一化条件可解得

$$\begin{cases} b_3 = -\frac{\sqrt{2+\sqrt{2}}}{2}i \\ c_3 = \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2} \end{cases} \quad (1.21)$$

综上,

$$|\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{\sqrt{2+\sqrt{2}}}{2}i \\ \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2} \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

余下讨论与法一相同.

2 第二题

力学量 \hat{A} 的正交完备基 $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ 定义为表象I. 在此表象下, 力学量 \hat{B} 的矩阵表示为 $\begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}$, 力学量 \hat{A} 的矩阵表示为 $\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$.

- a** 试求力学量 \hat{B} 的本征值, 并写出其本征态在表象I下的表示.
- b** 验证力学量 \hat{B} 的本征态也构成一组正交完备基, 由此可以定义表象II.
- c** 试求力学量 \hat{B} 的本征态在表象II下的表示.
- d** 请写出由表象I到表象II的变换矩阵.

e 请写出力学量 \hat{A} 在表象II下的矩阵表示.

不妨将力学量 \hat{A} 、 \hat{B} 的本征值分别记为 $\{A_1, A_2\}$ 、 $\{B_1, B_2\}$. 二者

- 在表象I下的
 - 矩阵表示分别为 A^I 、 B^I .
 - 本征态分别为 $|\alpha^I\rangle$ 、 $|\beta^I\rangle$.
- 在表象II下的
 - 矩阵表示分别为 A^{II} 、 B^{II} .
 - 本征态分别为 $|\alpha^{II}\rangle$ 、 $|\beta^{II}\rangle$.

事实上, 根据题意我们可分别写出两表象的基:

$$\begin{cases} |\alpha_1^I\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |1\rangle \\ |\alpha_2^I\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |2\rangle \end{cases} \quad \begin{cases} |\beta_1^{II}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |\beta_2^{II}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{cases} \quad (2.1)$$

2.1 对表象变换矩阵的讨论

所谓的表象变换矩阵, 实际上有两种:

对基向量的变换 U ;

对态在基向量下展开系数的变换 S , 也即课堂上老师讲授的变换矩阵.

不难证明, 两种变换矩阵满足 $S = U^\dagger$, 因此实际解题中求出任意一个即可.

在式2.1的符号约定下, 基变换矩阵

$$U = \sum_i |\beta_i\rangle \langle \alpha_i| \quad (2.2)$$

基的变换关系是

$$|\beta_i\rangle = U |\alpha_i\rangle, \quad i = 1, 2 \quad (2.3)$$

设在表象I中, 系统量子态 $|\psi\rangle$ 在两组基下可分别展开为

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i^I |\alpha_i^I\rangle = \sum_i c_i^{II} |\beta_i^I\rangle = \sum_i c_i^{II} U |\alpha_i^I\rangle \quad (2.4)$$

得到系数矩阵 (量子态在表象下的表示) 满足

$$C^{II} = U^\dagger C^I = S C^I \quad (2.5)$$

另外, 表象变换需保证力学量期望值不变, 因此有

$$(C^I)^\dagger A^I C^I = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = (C^{II})^\dagger A^{II} C^{II} = (C^I)^\dagger S^\dagger A^{II} S C^I \quad (2.6)$$

根据所设量子态的任意性，有

$$A^I = S^\dagger A^{II} S \quad (2.7)$$

即

$$A^{II} = S A^I S^\dagger \quad (2.8)$$

是为熟知结论.

2.2 2a

在表象I下解久期方程

$$0 = \det(\lambda I - B^I) = \begin{vmatrix} \lambda & -1/2 \\ -1/2 & \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - \frac{1}{4} \quad (2.9)$$

得

$$\begin{cases} \lambda_1 = \frac{1}{2} \\ \lambda_2 = -\frac{1}{2} \end{cases} \quad (2.10)$$

并可设

$$|\beta^I\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

其中两参数满足归一化条件 $|b_1|^2 + |b_2|^2 = 1$.

2.2.1 $\lambda_1 = \frac{1}{2}$

有

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (2.12)$$

可取

$$|\beta_1^I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

2.2.2 $\lambda_2 = -\frac{1}{2}$

有

$$-\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (2.14)$$

可取

$$|\beta_2^I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

2.3 2b

2.3.1 正交归一性

$$\begin{aligned}\langle \beta_1^I | \beta_2^I \rangle &= \frac{1}{2} (1 - 1) = 0 \\ \langle \beta_1^I | \beta_1^I \rangle &= \frac{1}{2} (1 + 1) = 1 \\ \langle \beta_2^I | \beta_2^I \rangle &= \frac{1}{2} (1 + 1) = 1\end{aligned}\tag{2.16}$$

即得证

$$\langle \beta_i^I | \beta_j^I \rangle = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2)\tag{2.17}$$

2.3.2 完备性

$$|\beta_1^I\rangle \langle \beta_1^I| + |\beta_2^I\rangle \langle \beta_2^I| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1}\tag{2.18}$$

因此, \hat{B} 的本征态也构成一组正交完备基.

2.4 2c

见于解答伊始.

2.5 2d

从表象I到表象II的基变换矩阵 U 应是

$$U = |\beta_1^I\rangle \langle 1| + |\beta_2^I\rangle \langle 2| = (|\beta_1^I\rangle, |\beta_2^I\rangle)\tag{2.19}$$

因此

$$S = U^\dagger = \begin{pmatrix} \langle \beta_1^I | \\ \langle \beta_2^I | \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\tag{2.20}$$

2.6 2e

$$A^{II} = S A^I S^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\tag{2.21}$$

3 第三题

a 已知算符 \hat{A} 在两个表象 F, G 之间的变换关系

$$\hat{A}^{(F)} = S \hat{A}^{(G)} S^\dagger$$

请证明

$$(e^{\hat{A}})^{(F)} = S (e^{\hat{A}})^{(G)} S^\dagger$$

b 如算符 \hat{A} 在某表象里的矩阵表示为 $\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$, 求 $e^{\hat{A}}$ 在该表象里的矩阵表示.

c 如算符 \hat{A} 在某表象里的矩阵表示为 $\begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}$, 求 $e^{\hat{A}}$ 在该表象里的矩阵表示.

3.1 3a

由于变换矩阵 S 是 Unitary 的, 即满足

$$SS^\dagger = \mathbb{1} = S^\dagger S \quad (3.1)$$

因此对 $\forall n \in \mathbb{N}$, 不难证明

$$(\hat{A}^{(F)})^n = S \hat{A}^{(G)} (S^\dagger S) \hat{A}^{(G)} S^\dagger \cdots S \hat{A}^{(G)} S^\dagger = S (\hat{A}^{(G)})^n S^\dagger \quad (3.2)$$

于是

$$(e^{\hat{A}})^{(F)} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(\hat{A}^{(F)})^n}{n!} = S \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(\hat{A}^{(G)})^n}{n!} S^\dagger = S (e^{\hat{A}})^{(G)} S^\dagger \quad (3.3)$$

3.2 3b

题述矩阵表示

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

为对角形式, 因此

$$A_1^n = \begin{pmatrix} (1/2)^n & 0 \\ 0 & (-1/2)^n \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

是故 $e^{\hat{A}}$ 在同一表象下的矩阵表示

$$e^{A_1} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{A_1^n}{n!} = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \begin{pmatrix} (1/2)^n & 0 \\ 0 & (-1/2)^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{1/2} & 0 \\ 0 & e^{-1/2} \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

3.3 3c

遵循上小节思路，首先应将该矩阵表示

$$A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

对角化。

恰巧，我们可以借用2.6节中结果。变换矩阵是

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

对角化后的矩阵表示

$$A'_2 = S A_2 S^\dagger = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = A_1 \quad (3.9)$$

即有

$$A_2 = S^\dagger A_1 S \quad (3.10)$$

参照上两小节的结果，我们最终有

$$\begin{aligned} e^{A_2} &= S^\dagger e^{A_1} S = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{1/2} & 0 \\ 0 & e^{-1/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{1/2} + e^{-1/2} & e^{1/2} - e^{-1/2} \\ e^{1/2} - e^{-1/2} & e^{1/2} + e^{-1/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cosh \frac{1}{2} & \sinh \frac{1}{2} \\ \sinh \frac{1}{2} & \cosh \frac{1}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.11)$$

4 第四题

体系Hamiltonian(\hat{H})在表象I中的矩阵为 $\begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$ ，力学量 \hat{A} 的矩阵表示为 $\begin{pmatrix} -1 & 0 & -3i \\ 0 & 2 & 0 \\ 3i & 0 & -1 \end{pmatrix}$ 。

a 证明 \hat{H} 和 \hat{A} 对易。

b 求 \hat{H} 和 \hat{A} 的共同本征态。如利用共同本征态构建新的表象II，说明如何用本征值标定表象II的基。

c 如力学量 \hat{B} 在表象I中的矩阵表示为 $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$ ，写出其在表象II中的矩阵。

4.1 4a

记二者在表象I下的矩阵表示分别为 H^I 、 A^I , 容易计算得到

$$H^I A^I = \begin{pmatrix} -3 & 0 & -i \\ 0 & 2 & 0 \\ i & 0 & -3 \end{pmatrix} = A^I H^I \quad (4.1)$$

因此 \hat{H} 与 \hat{A} 对易.

4.2 4b

与第一题类似, 首先设所求共同本征态在表象I下可表示为

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

采用1.1节所示的法一, 考虑

$$H^I |\psi\rangle = \begin{pmatrix} ic \\ b \\ -ia \end{pmatrix}, \quad A^I |\psi\rangle = \begin{pmatrix} -a - 3ic \\ 2b \\ 3ia - c \end{pmatrix} \quad (4.3)$$

由于两力学量对易, 因此上两式应只相差一个常倍数, 即有

$$\frac{2b}{b} = \frac{-a - 3ic}{ic} = \frac{3ia - c}{-ia} \quad (4.4)$$

4.2.1 $b \neq 0$

式4.4化为

$$\frac{-a - 3ic}{ic} = \frac{3ia - c}{-ia} = 2 \quad (4.5)$$

只能有 $a = c = 0$, 且此时 b 可取任意非零值. 若取 $(a_1, b_1, c_1) = (0, 1, 0)$, 可得共同本征态

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

4.2.2 $b = 0$

式4.4化为

$$\frac{-a - 3ic}{ic} = \frac{3ia - c}{-ia} \quad (4.7)$$

化简可得

$$a^2 + c^2 = 0 \quad (4.8)$$

再根据归一化条件 $|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1$, 并取 c 的辐角为 0, 将解得

$$\begin{cases} a_2 = \frac{i}{\sqrt{2}} \\ c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{cases} \quad \begin{cases} a_3 = -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ c_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{cases} \quad (4.9)$$

即

$$|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

至此, 我们得到了 \hat{H} 、 \hat{A} 的共同本征态, 于是相应的本征值可求.

Hamiltonian 可简单计算得到

$$\begin{cases} H^I|\psi_1\rangle = |\psi_1\rangle \\ H^I|\psi_2\rangle = |\psi_2\rangle \\ H^I|\psi_3\rangle = -|\psi_3\rangle \end{cases} \quad (4.11)$$

因此其本征值是 $\{1, 1, -1\}$.

算符 \hat{A} 可简单计算得到

$$\begin{cases} A^I|\psi_1\rangle = 2|\psi_1\rangle \\ A^I|\psi_2\rangle = -4|\psi_2\rangle \\ A^I|\psi_3\rangle = 2|\psi_3\rangle \end{cases} \quad (4.12)$$

因此其本征值是 $\{2, -4, 2\}$.

依题, 利用共同本征态 $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle\}$ 构建新表象 II. 由于 \hat{H} 、 \hat{A} 均存在简并, 因此我们将无法单独使用任意一者的本征值进行标定, 而必须同时使用两者的本征值, 即

$$\begin{cases} |\psi_1\rangle = |E_1 = 1, A_1 = 2\rangle \\ |\psi_2\rangle = |E_2 = 1, A_2 = -4\rangle \\ |\psi_3\rangle = |E_3 = -1, A_3 = 2\rangle \end{cases} \quad (4.13)$$

4.3 4c

由上小节可得到从表象 I 至表象 II 的变换矩阵

$$S = \begin{pmatrix} \langle\psi_1| \\ \langle\psi_2| \\ \langle\psi_3| \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

因此力学量 \hat{B} 在表象II中的矩阵为

$$B^{\text{II}} = SB^{\text{I}}S^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\sqrt{2}i \\ 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

注：由于 $\langle \psi_i |$ 标号的选取任意，不同的选取方式将造成排布顺序的差异，因此最终得到的矩阵结果也可能有不同形式。

另外，本题还有一种基于矩阵本身性质的解法。我们可选择 \hat{H} 、 \hat{A} 其中之一，如 \hat{H} ，并首先求解其本征问题。使用 \hat{H} 的本征态作为一组基构建新的表象III，写出 \hat{A} 在该表象下的矩阵，根据 \hat{H} 的本征态选取的不同，将可能发现两种情况：

- A 为块对角的。此时应在 A 未对角化的子空间里作对角化，并将得到的结果作为基构建另一新的表象，即要求的表象II。
- A 为完全对角的。此时直接用本征值标定基即可，表象III就是表象II。

2022 秋易为老师量子力学 B

习题七参考解答

刘丰铨 宋冰睿

2022 年 11 月 2 日

1 第 1 题

考虑一维系统，利用坐标及动量表象中的正交完备关系，

(a) 计算：

$$\langle p' | f(\hat{x}) | p'' \rangle$$

(b) 证明：

$$\langle p' | \hat{x} | \phi \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p' | \phi \rangle$$

(c) 利用以上关系，证明：

$$\langle \psi | \hat{x} | \phi \rangle = \int \psi^*(p) i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) dp$$

其中 $\psi(p) = \langle p | \psi \rangle$ 且 $\phi(p) = \langle p | \phi \rangle$.

1.1 1a

解：依题意，注意到算符 \hat{x} 作用在动量算符的本征态上不易直接处理，因此我们考虑利用

$$\int |x\rangle \langle x| dx = \hat{I} \tag{1.1}$$

并将其插入题给表达式，得到：

$$\begin{aligned} \langle p' | f(\hat{x}) | p'' \rangle &= \int \langle p' | f(\hat{x}) | x \rangle \langle x | p'' \rangle dx \\ &= \int f(x) \langle p' | x \rangle \langle x | p'' \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int f(x) e^{\frac{i(p''-p')x}{\hbar}} dx \end{aligned} \tag{1.2}$$

亦即所求实际上是 $f(x)$ 的 Fourier 变换。进一步地，我们假设 $f(x)$ 在全空间一致收敛于如下幂级数展开：

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \tag{1.3}$$

而我们不难得知：

$$x^n e^{\frac{i(p''-p')x}{\hbar}} = (i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial p'^n} e^{\frac{i(p''-p')x}{\hbar}} \quad (1.4)$$

将上两式代入1.2，并依次交换求和、积分次序以及求导、积分次序，得到：

$$\langle p' | f(\hat{x}) | p'' \rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} c_n (i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial p'^n} \int e^{\frac{i(p''-p')x}{\hbar}} dx = f\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p'}\right) \delta(p' - p'') \quad (1.5)$$

其中已利用

$$\int e^{\frac{i(p''-p')x}{\hbar}} dx = 2\pi\hbar\delta(p' - p'') \quad (1.6)$$

1.2 1b

解：将

$$\int |p\rangle \langle p| dp = \hat{I} \quad (1.7)$$

插入题给表达式等号左端，得到：

$$\langle p' | \hat{x} | \phi \rangle = \int \langle p' | \hat{x} | p \rangle \langle p | \phi \rangle dp \quad (1.8)$$

再利用 1a 结论，并利用分部积分，得：

$$\begin{aligned} \int \langle p' | \hat{x} | p \rangle \langle p | \phi \rangle dp &= \int \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \delta(p' - p) \right] \langle p | \phi \rangle dp \\ &= -i\hbar \int \langle p | \phi \rangle d\delta(p' - p) \\ &= i\hbar \int \delta(p' - p) \frac{\partial}{\partial p} \langle p | \phi \rangle dp \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p' | \phi \rangle \end{aligned} \quad (1.9)$$

其中已利用 $\frac{\partial}{\partial p'} \delta(p' - p) = -\frac{\partial}{\partial p} \delta(p' - p)$ ；以上即为欲证结论.

1.3 1c

解：我们故技重施，将单位算符插入题给表达式等号左端，得：

$$\langle \psi | \hat{x} | \phi \rangle = \int \langle \psi | p \rangle \langle p | \hat{x} | \phi \rangle dp \quad (1.10)$$

利用 1b 结论，立即有：

$$\int \langle \psi | p \rangle \langle p | \hat{x} | \phi \rangle dp = \int \langle \psi | p \rangle i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \langle p | \phi \rangle dp = \int \psi^*(p) i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \phi(p) dp \quad (1.11)$$

即为欲证表达式等号右端.

注：本题中利用力学量算符本征矢量的完备性，在表达式的任意位置插入单位算符并将单位算符改写为1.1和1.7形式的处理方法非常常见，且通常能很好地将棘手的问题变得易于分析和计算，请同学们务必加以掌握. 同样的方法在离散谱问题中也适用.

2 第2题

假设一维体系的 Hamiltonian 算符为：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

请写出动量表象下的 Schrödinger 方程，并分别写出一维谐振子在坐标和动量表象下的 Schrödinger 方程。

解：本题中考虑的所有态矢量皆含时，我们在讨论中不再显式地将时间作为函数的自变量写出。我们知道，Schrödinger 方程写作：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (2.1)$$

利用动量算符的本征矢量不随时间变化的性质（请同学们注意此处的措辞。因为动量算符本身不随时间改变，所以动量算符的本征矢量不随时间改变；然而，倘若粒子零时刻处在动量算符的本征态，那么这个粒子的态仍可能随时间演化。），在上式等号两端同时以 $\langle p|$ 作用，并记 $\psi_P(p) = \langle p|\psi\rangle$ ，得到：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_P(p) = \langle p | \hat{H} | \psi \rangle = \frac{p^2}{2m} \psi_P(p) + \langle p | V(\hat{x}) | \psi \rangle \quad (2.2)$$

仿照 1a 和 1b 的证明过程并多次利用分部积分，不难验证，1b 的结论可以外推得到：

$$\langle p | V(\hat{x}) | \psi \rangle = V \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \langle p | \psi \rangle \quad (2.3)$$

因此，题给 Hamiltonian 算符对应的动量表象下的 Schrödinger 方程写作：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_P(p) = \frac{p^2}{2m} \psi_P(p) + V \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \right) \psi_P(p) \quad (2.4)$$

在谐振子情形中，

$$V(\hat{x}) = \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad (2.5)$$

由是立即可以得到一维谐振子在动量表象下的 Schrödinger 方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_P(p) = \frac{p^2}{2m} \psi_P(p) - \frac{m\omega^2 \hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial p^2} \psi_P(p) \quad (2.6)$$

再记 $\psi_X(x) = \langle x | \psi \rangle$ ，利用与上文完全一致的论证方法可以得到一维谐振子在坐标表象下的 Schrödinger 方程：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_X(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_X(x) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi_X(x) \quad (2.7)$$

这一结论我们已熟知且相应的推导已经在课程中完成，这里不再赘述。

3 第3题

假设体系 Hamiltonian 算符在基矢量 $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ 定义的表象下的矩阵表示为 $\begin{pmatrix} 0 & iE/2 \\ -iE/2 & 0 \end{pmatrix}$ ，其中 E 为非零实数。倘若体系在 $t=0$ 时刻的处于 $|\psi(0)\rangle = |1\rangle$ ，试求在任意时刻 t 体系所处的状态。在此基础上，假设 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 分别为力学量算符 \hat{A} 本征值 A_1 和 A_2 对应的本征态，请写出任意时刻 t 对体系进行力学量 A 的测量时测量值为 A_1 的概率。

说明：由于 \hat{H} 在题给基矢量下的矩阵表示不对角，我们应当先找出 \hat{H} 的本征矢量，并将体系的初态表达为这两个本征矢量的线性组合的形式，再进行进一步的讨论。这是处理时间演化问题的惯常思路，其合理性在于 \hat{H} 的本征矢量随时间演化的规律较为简单，可以有效地简化讨论。

解：利用题给矩阵表示和常规的特征值求解方法，容易得到 \hat{H} 的本征值：

$$\begin{cases} E_1 = \frac{E}{2} \\ E_2 = -\frac{E}{2} \end{cases} \quad (3.1)$$

以及对应的归一化本征态：

$$\begin{cases} |\psi_{E_1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - i|2\rangle) \\ |\psi_{E_2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + i|2\rangle) \end{cases} \quad (3.2)$$

我们知道，力学量算符 \hat{H} 本征值为 E 的本征态 $|\psi_E(t)\rangle$ 随时间演化的规律为：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_E(t)\rangle = E |\psi_E(t)\rangle \Rightarrow |\psi_E(t)\rangle = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} |\psi_E(0)\rangle \quad (3.3)$$

而体系初态可表为：

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_{E_1}\rangle + |\psi_{E_2}\rangle) \quad (3.4)$$

因此有对应的时间演化规律：

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-\frac{iEt}{2\hbar}}|\psi_{E_1}\rangle + e^{\frac{iEt}{2\hbar}}|\psi_{E_2}\rangle\right) \quad (3.5)$$

再将3.2代入上式，整理得到：

$$|\psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{Et}{2\hbar}\right)|1\rangle - \sin\left(\frac{Et}{2\hbar}\right)|2\rangle \quad (3.6)$$

因此，在 t 时刻对力学量 A 进行测量，测量值为 A_1 即态矢量坍缩到 $|1\rangle$ 的概率为：

$$P_1 = \cos^2\left(\frac{Et}{2\hbar}\right) \quad (3.7)$$

显然有 $P_1 + P_2 = 1$ ，结果满足概率归一的要求。

4 第4题

自由粒子的 Hamiltonian 算符为：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

请在 Heisenberg 绘景下求 $[\hat{x}(t), \hat{x}(0)]$ 。

解：依题意，我们希望能够得到 $\hat{x}(t)$ 的显式表达。根据 Heisenberg 运动方程，有：

$$\frac{d}{dt} \hat{x}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}(t), \hat{H}] \quad (4.1)$$

显然, 由于题给 Hamiltonian 算符不显含 t 且与自身对易, 故不随时间演化; 由此或利用 Heisenberg 运动方程:

$$\frac{d}{dt}\hat{p}(t) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}(t), \hat{H}] = 0 \quad (4.2)$$

亦可推得:

$$\hat{p}(t) = \hat{p}(0) \quad (4.3)$$

因而:

$$\frac{d}{dt}\hat{x}(t) = \frac{1}{2mi\hbar} [\hat{x}(t), \hat{p}^2] = \frac{\hat{p}}{m} \quad (4.4)$$

其中利用了绘景变换下同一时刻对易子的不变性, 证明见本题解答末. 由上式可知, 位置算符的时间演化关系应是线性的, 即有:

$$\hat{x}(t) = \hat{x}(0) + \frac{\hat{p}}{m}t \quad (4.5)$$

于是:

$$[\hat{x}(t), \hat{x}(0)] = \left[\hat{x}(0) + \frac{\hat{p}}{m}t, \hat{x}(0) \right] = \frac{t}{m} [\hat{p}, \hat{x}(0)] = -\frac{i\hbar t}{m} \hat{I} \quad (4.6)$$

即为所求.

附: 绘景变换下同一时刻对易子不变性的证明.

记 Schrödinger 绘景下, 有对易关系:

$$[\hat{A}^{(S)}, \hat{B}^{(S)}] = \hat{C}^{(S)} \quad (4.7)$$

注意 $\hat{C}^{(S)}$ 一般不满足 Hermite 性质, 不是力学量算符. 现在, 记 $\hat{A}^{(H)} = \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U}$, 并利用 \hat{U} (注意它实际上 是初始时刻 t_0 和终末时刻 t 的函数, 即 $\hat{U} = \hat{U}(t, t_0)$) 的么正性质, 有:

$$\begin{aligned} [\hat{A}^{(H)}, \hat{B}^{(H)}] &= [\hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U}, \hat{U}^\dagger \hat{B}^{(S)} \hat{U}] \\ &= \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{B}^{(S)} \hat{U} - \hat{U}^\dagger \hat{B}^{(S)} \hat{U} \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{U} \\ &= \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(S)} \hat{B}^{(S)} \hat{U} - \hat{U}^\dagger \hat{B}^{(S)} \hat{A}^{(S)} \hat{U} \\ &= \hat{U}^\dagger [\hat{A}^{(S)}, \hat{B}^{(S)}] \hat{U} = \hat{U}^\dagger \hat{C}^{(S)} \hat{U} = \hat{C}^{(H)} \end{aligned} \quad (4.8)$$

即为欲证结论.

2022秋易为老师量子力学B

习题八参考解答

宋冰睿 刘丰铨

2022年11月12日

1 第一题

一维简谐振子的Hamiltonian为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

(a) 已知在 $t = 0$ 时刻谐振子的坐标和动量算符为 $\hat{x}(0)$ 和 $\hat{p}(0)$, 试在Heisenberg绘景下求坐标算符在任意 $t(t > 0)$ 时刻的表达式 $\hat{x}^H(t)$.

(b) 若在 $t = 0$ 时刻谐振子的量子态为

$$|\psi\rangle = e^{-i\frac{\hat{p}l}{\hbar}}|0\rangle$$

其中 l 是量纲为长度的实数. 试求在任意 $t(t > 0)$ 时刻 $\langle \hat{x}(t) \rangle$ 的表达式.

(c) 说明b中的谐振子在 $t = 0$ 时处于相干态. 在Schrödinger绘景下写出该谐振子在任意时刻 $t(t > 0)$ 所处的态, 并说明其是否仍然是相干态.

首先给出符号约定: 在Heisenberg绘景下, 力学量算符 \hat{A} 在 t 时刻表示为 $\hat{A}^H(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)$, 其中 $\hat{U}(t)$ 是时间演化算符.

1.1 1a

由于坐标算符和动量算符自身不含时, 因此根据Heisenberg运动方程立即有

$$\begin{cases} \frac{d\hat{x}^H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}^H, \hat{H}^H] = \frac{\hat{p}^H}{m} \\ \frac{d\hat{p}^H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}^H, \hat{H}^H] = -m\omega^2\hat{x}^H \end{cases} \quad (1.1)$$

联立两式可得关于坐标算符的微分方程

$$\frac{d^2\hat{x}^H}{dt^2} + \omega^2\hat{x}^H = 0 \quad (1.2)$$

其形式解是

$$\hat{x}^H(t) = C_1 e^{i\omega t} + C_2 e^{-i\omega t} \quad (1.3)$$

将初值条件代入, 可最终得到

$$\hat{x}^H(t) = \hat{x}(0) \cos \omega t + \frac{\hat{p}(0)}{m\omega} \sin \omega t \quad (1.4)$$

上面选取 (\hat{x}, \hat{p}) 这一组力学量对系统的动力学性质进行了描述。事实上，由于 $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ 与之等价，我们当然也可以考虑降算符的Heisenberg运动方程

$$\frac{d\hat{a}^H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{a}^H, \hat{H}^H] = \frac{1}{i\hbar} \hbar\omega \hat{a}^H = -i\omega \hat{a}^H \quad (1.5)$$

从中解得

$$\hat{a}^H(t) = \hat{a}(0) e^{-i\omega t} \quad (1.6)$$

并同时得到 $(\hat{a}^\dagger)^H(t)$ ，辅以升降算符的初值条件即可求得与上面一样的结果。

另外，还可以直接使用时间演化算符，即

$$\hat{a}^H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{a}(0) \hat{U}(t) = \exp \left[i \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \omega t \right] \hat{a} \exp \left[-i \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \omega t \right] \quad (1.7)$$

根据Baker-(Campbell-)Hausdorff公式（证明方法参见习题三参考解答）

$$e^{\lambda \hat{A}} \hat{B} e^{-\lambda \hat{A}} = \hat{B} + \lambda [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\lambda^2}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (1.8)$$

进行化简，也能得到相同结果。

1.2 1b

仍在Heisenberg绘景中考虑问题。任意 t 时刻，坐标算符的期望值可表为

$$\langle \hat{x}(t) \rangle = \langle \psi | \hat{x}^H(t) | \psi \rangle = \left\langle 0 \left| e^{i \frac{\hat{p}l}{\hbar}} \left[\hat{x}(0) \cos \omega t + \frac{\hat{p}(0)}{m\omega} \sin \omega t \right] e^{-i \frac{\hat{p}l}{\hbar}} \right| 0 \right\rangle \quad (1.9)$$

利用BCH公式，或直接使用对易关系交换的技巧，式1.9中bracket的中间项可化为

$$\cos \omega t \cdot e^{i \frac{\hat{p}l}{\hbar}} \hat{x}(0) e^{-i \frac{\hat{p}l}{\hbar}} + \frac{\sin \omega t}{m\omega} \cdot e^{i \frac{\hat{p}l}{\hbar}} \hat{p}(0) e^{-i \frac{\hat{p}l}{\hbar}} = \cos \omega t [\hat{x}(0) + l] + \frac{\sin \omega t}{m\omega} \hat{p}(0) \quad (1.10)$$

最后，根据作业四题7a所证明的谐振子本征态之性质

$$\langle n | \hat{x}(0) | n \rangle = 0 = \langle n | \hat{p}(0) | n \rangle \quad (1.11)$$

式1.9即最终化为

$$\langle \hat{x}(t) \rangle = l \cos \omega t \quad (1.12)$$

1.3 1c

将 \hat{p} 用升降算符表示为

$$\hat{p} = -i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (1.13)$$

欲证明 $|\psi\rangle$ 是相干态，则可尝试将降算符作用于其上，得到

$$\hat{a}|\psi\rangle = \hat{a} \exp \left[-l \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \right] |0\rangle \quad (1.14)$$

根据作业三题4b之结论，我们有

$$\left[\hat{a}, \exp \left[-l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \right] \right] = l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \exp \left[l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \right] \quad (1.15)$$

因此，式1.14可化为

$$\hat{a}|\psi\rangle = \exp \left[l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \right] \hat{a}|0\rangle + l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \exp \left[l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \right] |0\rangle = l\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} |\psi\rangle \quad (1.16)$$

式中第一项为0. 是故1b中谐振子的初态 $|\psi\rangle$ 是相干态，其对应的降算符本征值为 $\lambda = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}l$.

下面考虑 $|\psi\rangle$ 的时间演化. 由于一般情况下，其并非Hamiltonian的本征态，故需将其在Fock态构成的正交完备基上展开，其结果为

$$|\psi\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \quad (1.17)$$

Fock态 $|n\rangle$ 对应的能量本征值为 $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ ，因此在Schrödinger绘景下，任意时刻的量子态可写为

$$|\psi(t)\rangle = e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} |n\rangle \quad (1.18)$$

欲检验其是否仍为相干态，我们有如下两种方法.

1.3.1 法一

从式1.18中不难发现，若记 $\lambda(t) = \lambda e^{-i\omega t} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}l e^{-i\omega t}$ ，则该式可改写为

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{(\lambda e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = e^{-i\omega t/2} |\lambda(t)\rangle \quad (1.19)$$

式中，我们发现中间一项即为相干态在Fock态上的展开形式1.17，故利用本征值 $\lambda(t)$ 对其进行了标定.

可以看到， $|\psi(t)\rangle$ 仅比相干态 $|\lambda(t)\rangle$ 多一个可以忽略的相因子，因此，该谐振子在任意时刻的态均为相干态.

1.3.2 法二

我们也可以效仿证明初态为相干态的思路，直接将降算符作用于其上，得到的是

$$\begin{aligned} \hat{a}|\psi(t)\rangle &= e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{(n-1)!}} e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} \sqrt{n} |n-1\rangle \\ &= \lambda e^{-i\omega t} e^{-|\lambda|^2/2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} |n\rangle \\ &= \lambda(t) |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (1.20)$$

注意由于是在Schrödinger绘景下考虑问题，故降算符 \hat{a} 不随时变.

因此, $|\psi(t)\rangle$ 是降算符的本征态——相干态.

事实上, $\exp(-i\frac{\hat{p}l}{\hbar})$ 是一种相空间平移变换, 只改变态的“位置”而不影响其本身性质, 因此 $|\psi\rangle$ 和 $|0\rangle$ 一样, 是相干态.

另外, 有相当一部分同学在讨论 $|\psi(t)\rangle$ 采取了如下解法. 考虑

$$\hat{a}|\psi(t)\rangle = \hat{a}e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle \quad (1.21)$$

利用作业三题4b之结论求算对易关系

$$\begin{aligned} [\hat{a}, e^{-i\hat{H}t/\hbar}] &= -\frac{it}{\hbar} [\hat{a}, \hat{H}] e^{-i\hat{H}t/\hbar} \\ \hat{a}e^{-i\hat{H}t/\hbar} - e^{-i\hat{H}t/\hbar}\hat{a} &= -i\omega t \hat{a}e^{-i\hat{H}t/\hbar} \end{aligned} \quad (1.22)$$

从而得到

$$\hat{a}e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \frac{1}{1 + i\omega t} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{a} \quad (1.23)$$

代入式1.21中, 得到

$$\begin{aligned} \hat{a}|\psi(t)\rangle &= \frac{1}{1 + i\omega t} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{a}|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{1 + i\omega t} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \lambda |\psi\rangle \\ &= \frac{\lambda}{1 + i\omega t} |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (1.24)$$

从而给出 $\lambda(t) = \frac{\lambda}{1 + i\omega t}$.

乍看之下, 该解法似乎每一步推导都有理有据. 但是, 式1.22的第一步利用的作业三题4b之结论, 其成立需要满足

$$[\hat{H}, [\hat{a}, \hat{H}]] = 0 \quad (1.25)$$

然而该式显然不成立.

这提醒我们, 在应用一些特定公式或结论前, 一定要注意它们的前提条件.

2 第二题

已知一维无限深方势阱

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

(a)写出归一化的能量本征波函数与本征能级.

(b)求粒子处于体系基态时出现在 $(0, a/2)$ 区间内的几率.

2.1 2a

直接解Schrödinger方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.1)$$

可得形式解

$$\psi(x) = \begin{cases} C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}, & 0 < x < a \\ 0, & x < 0 \text{ 或 } x > a \end{cases} \quad (2.2)$$

其中 $k \triangleq \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. 再根据

$$\begin{aligned} \text{边界条件: } \psi(0) &= 0 = \psi(a) \\ \text{归一化条件: } \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 &= 1 \end{aligned} \quad (2.3)$$

即可最终得到($n \in \mathbb{N}^+$)

$$\begin{cases} \psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, & 0 < x < a \\ 0, & x < 0 \text{ 或 } x > a \end{cases} \\ E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \end{cases} \quad (2.4)$$

2.2 2b

在 $(0, a)$ 区间内，基态波函数是

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a} \quad (2.5)$$

因此粒子出现在 $(0, a/2)$ 区间内的概率为

$$P(0 < x < a/2) = \int_0^{a/2} dx |\psi_1(x)|^2 = \frac{1}{2} \quad (2.6)$$

3 第三题

设某粒子在 $t = 0$ 时处在上题势阱能量最低的本征态上. 在 $t > 0$ 时，势阱的形式突变为

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < 2a \\ +\infty, & x < 0 \text{ 或 } x > 2a \end{cases}$$

假设势场在 $t = 0$ 时刻的突变不改变波函数在 $t = 0$ 时刻的形式.

- (a)求新的势阱中能量本征波函数与本征能级.
- (b)写出粒子在 $t > 0$ 时的演化形式.
- (c)写出在 t 时刻粒子处在新的势阱中能量最低本征态的几率.

(d)写出在 t 时刻粒子处在初态的几率.(给出表达式即可)

3.1 3a

在上题结果中作替换 $a \rightarrow 2a$, 即可得到新势阱中能量本征问题的解($n \in \mathbb{N}^+$):

$$\begin{cases} \tilde{\psi}_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} \sin \frac{n\pi x}{2a}, & 0 < x < 2a \\ 0, & x < 0 \text{ 或 } x > 2a \end{cases} \\ \tilde{E}_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \end{cases} \quad (3.1)$$

3.2 3b

下面仅在 $(0, 2a)$ 区间内进行讨论. 粒子的初态依题写为

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{\pi x}{a}, & 0 < x < a \\ 0, & a < x < 2a \end{cases} \quad (3.2)$$

为求时间演化形式, 需首先将其在新能量本征波函数构成的正交完备基上展开:

$$\psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n(0) \tilde{\psi}_n(x) \quad (3.3)$$

展开系数是

$$\begin{aligned} c_n(0) &= \int_0^{2a} dx \tilde{\psi}_n^*(x) \psi(x, 0) \\ &= \frac{\sqrt{2}}{a} \int_0^a dx \sin \frac{\pi x}{a} \sin \frac{n\pi x}{2a} \\ &= \frac{\sqrt{2}}{2a} \int_0^a dx \left\{ \cos \left[\left(\frac{n}{2} - 1 \right) \frac{\pi x}{a} \right] - \cos \left[\left(\frac{n}{2} + 1 \right) \frac{\pi x}{a} \right] \right\} \\ &= \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{2a} \left[\frac{2a}{(n-2)\pi} \sin \left(\frac{n}{2} - 1 \right) \pi - \frac{2a}{(n+2)\pi} \sin \left(\frac{n}{2} + 1 \right) \pi \right], & n \neq 2 \\ \frac{\sqrt{2}}{2a} \int_0^a dx \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{a} \right), & n = 2 \end{cases} \\ &= \begin{cases} \frac{4\sqrt{2}}{(4-n^2)\pi} \sin \frac{n\pi}{2}, & n \neq 2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}, & n = 2 \end{cases} \end{aligned} \quad (3.4)$$

因此, $t > 0$ 时刻粒子所处态的演化形式是

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{+\infty} c_n(0) \exp \left(-i \frac{n^2 \pi^2 \hbar}{8ma^2} t \right) \tilde{\psi}_n(x) \quad (3.5)$$

3.3 3c

粒子在 t 时刻处于新基态的概率

$$P_1(t) = \left| c_1(0) \exp\left(-i\frac{\pi^2\hbar}{8ma^2}t\right) \right|^2 = \frac{32}{9\pi^2} \quad (3.6)$$

为一常数.

推广可知, 粒子处于任一能量本征态的概率时不变, 这是因为每一个本征态均独立演化、互不影响.

3.4 3d

粒子在 t 时刻仍处于初态的概率为

$$\begin{aligned} P(t) &= \left| \int_0^{2a} dx \psi^*(x, 0) \psi(x, t) \right|^2 \\ &= \left| \int_0^{2a} dx \left[\sum_{m=1}^{+\infty} c_m^*(0) \tilde{\psi}_m^*(x) \right] \left[\sum_{n=1}^{+\infty} c_n(0) \exp\left(-i\frac{n^2\pi^2\hbar}{8ma^2}t\right) \tilde{\psi}_n(x) \right] \right|^2 \\ &= \left| \sum_{n=1}^{+\infty} |c_n(0)|^2 \exp\left(-i\frac{n^2\pi^2\hbar}{8ma^2}t\right) \right|^2 \\ &= \left| \frac{32}{9\pi^2} \exp\left(-i\frac{\pi^2\hbar}{8ma^2}t\right) + \frac{1}{2} \exp\left(-i\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}t\right) + \sum_{n=3}^{+\infty} \frac{32}{(n^2-4)^2\pi^2} \sin^2 \frac{n\pi}{2} \exp\left(-i\frac{n^2\pi^2\hbar}{8ma^2}t\right) \right|^2 \end{aligned} \quad (3.7)$$

其中利用了新能量本征波函数的正交归一条件

$$\int_0^{2a} dx \tilde{\psi}_m^*(x) \tilde{\psi}_n(x) = \delta_{mn} \quad (3.8)$$

有的同学可能会对“仍处于初态”感到费解, 认为既然已经演化至别的态, “处于初态”的概率就应为0. 然而这个概率并非是0, 通过 $P(t) = |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2$ 可以进行求算.

实际上, 若记投影算符 $\Pi(0) = |\psi(0)\rangle \langle \psi(0)|$, 密度矩阵 $\psi(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|$, 这个概率可以站在更高的视角理解为投影算符在 t 时刻的期望值

$$\begin{aligned} P(t) &= \text{Tr}(\Pi(0) \psi(t)) \\ &= \text{Tr}(|\psi(0)\rangle \langle \psi(0)| |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|) \\ &= \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle \langle \psi(t) | \psi(0) \rangle \\ &= |\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle|^2 \end{aligned} \quad (3.9)$$

2022 秋易为老师量子力学 B

习题九参考解答

刘丰铨 宋冰睿

2022 年 11 月 30 日

1 第 1 题

某三维粒子的波函数为：

$$\psi(\mathbf{r}) = A(x + y + 2z)e^{-\alpha r}$$

其中 A 为归一化常数且有 $\alpha > 0$. 求 \hat{L}_z 及 \hat{L}_x 可能的测量值和相应的概率.

解：考虑到计算复杂度的区别，一般而言，除非特别要求，我们不在直角坐标系下直接讨论角动量相关问题，而将相应的波函数在球坐标系下表达：

$$\psi(\mathbf{r}) = A(r \sin \theta \cos \phi + r \sin \theta \sin \phi + 2r \cos \theta)e^{-\alpha r} = Are^{-\alpha r}(\sin \theta \cos \phi + \sin \theta \sin \phi + 2 \cos \theta) \quad (1.1)$$

考虑到各角动量算符在坐标表象下作用时的表达式均与 r 无关，我们只需考虑处理波函数中与 θ 和 ϕ 相关的表达式 $(\sin \theta \cos \phi + \sin \theta \sin \phi + 2 \cos \theta)$ 即可.

接下来我们先求解 \hat{L}_z 相关的问题. 我们在课程中已经得知，球谐函数是 \hat{L}_z 及 \hat{L} 在坐标表象下的共同本征函数，因此我们利用：

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad (1.2)$$

$$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (1.3)$$

将上述表达式重新表达为球谐函数的线性组合，即：

$$\begin{aligned} \sin \theta \cos \phi + \sin \theta \sin \phi + 2 \cos \theta &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} (-Y_1^{+1} + Y_1^{-1}) + \frac{i}{2} \sqrt{\frac{8\pi}{3}} (Y_1^{+1} + Y_1^{-1}) + 2 \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0 \\ &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (-1 + i) Y_1^{+1} + \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (1 + i) Y_1^{-1} + 2 \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0 \end{aligned} \quad (1.4)$$

注意以上表达式是未归一化的，亦即该式在球面上积分结果不为 1. 由于：

$$\hat{L}_z^{POS} Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi) \quad (1.5)$$

其中 \hat{L}_z^{POS} 即为算符 \hat{L}_z 在坐标表象下的表达，我们可以断言： \hat{L}_z 的可能测量值为 $\pm\hbar$ 和 0，对应的概率分别为：

$$P(L_z = \hbar) = \frac{\left| \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(-1+i) \right|^2}{\left| \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(-1+i) \right|^2 + \left| \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(1+i) \right|^2 + \left| 2\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \right|^2} = \frac{1}{6} \quad (1.6)$$

$$P(L_z = -\hbar) = \frac{\left| \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(1+i) \right|^2}{\left| \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(-1+i) \right|^2 + \left| \sqrt{\frac{2\pi}{3}}(1+i) \right|^2 + \left| 2\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \right|^2} = \frac{1}{6} \quad (1.7)$$

$$P(L_z = 0) = 1 - P(L_z = \hbar) - P(L_z = -\hbar) = \frac{2}{3} \quad (1.8)$$

接下来我们处理 \hat{L}_x 相关问题。同学们可能已经注意到，本题所考虑的态矢量属于 $l=1$ 的本征子空间，因此也可以考虑仿照第 3 题中的处理，利用表象变换方法求出题给量子态在 (\hat{L}^2, \hat{L}_x) 确立的表象下的表示，从而得到测量值和对应的概率。具体地，量子态在 (\hat{L}^2, \hat{L}_x) 确立的表象下的表示为（已做归一化处理，由于本题只关心概率而不关心态的具体表达，实际计算时可省去该程式）：

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(\hat{L}^2, \hat{L}_x)} \psi^Z = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{12}}(-1+i) \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \\ \sqrt{\frac{1}{12}}(1+i) \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

利用 3e 的结论，我们有：

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(\hat{L}^2, \hat{L}_x)} \psi^X = S\psi^Z = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{12}}(-1+i) \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \\ \sqrt{\frac{1}{12}}(1+i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{12}}(2+i) \\ -\sqrt{\frac{1}{6}} \\ \sqrt{\frac{1}{12}}(-2+i) \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

由此，我们可以断言： \hat{L}_x 的可能测量值为 $\pm\hbar$ 和 0，对应的概率分别为：

$$P(L_x = \hbar) = \frac{\frac{10\pi}{3}}{\frac{10\pi}{3} + \frac{10\pi}{3} + \frac{4\pi}{3}} = \frac{5}{12} \quad (1.11)$$

$$P(L_x = -\hbar) = \frac{\frac{10\pi}{3}}{\frac{10\pi}{3} + \frac{10\pi}{3} + \frac{4\pi}{3}} = \frac{5}{12} \quad (1.12)$$

$$P(L_x = 0) = 1 - P(L_x = \hbar) - P(L_x = -\hbar) = \frac{1}{6} \quad (1.13)$$

至此问题解决。

注：本题还有另一种可行的处理方法。由于我们对 \hat{L}_x 的本征态在坐标表象下的表达式并不熟悉，我们不妨对坐标 (x, y, z) 做轮换，转为 (z', x', y') ，这样一来我们只需求解 $\hat{L}_{z'}$ 的测量值和对应概率的问题。事实上，此时的

波函数表达为：

$$\psi(r) = A(z' + x' + 2y') e^{-\alpha r} = A r e^{-\alpha r} (\sin \theta \cos \phi + 2 \sin \theta \sin \phi + \cos \theta) \quad (1.14)$$

我们根据前述讨论如法炮制，得：

$$\sin \theta \cos \phi + 2 \sin \theta \sin \phi + \cos \theta = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (-1 + 2i) Y_1^{+1} + \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (1 + 2i) Y_1^{-1} + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0 \quad (1.15)$$

所得结论将与前一种解法相同。细心的同学应当已经注意到，若使用这种方法，虽然测量值和概率的计算结果与前一致，但态的表达与前不一致（这是说不同态之间的相位差与表象变换所得到的结果不同）。事实上，我们不十分推荐同学们在解决实际问题时应用此方法；在应试过程中，该方法也需谨慎使用。在附注三中，我们将对此进行更深入的讨论。

2 第2题

对于 \hat{L}^2 和 \hat{L}_z 的共同本征态 $|l, m_z\rangle$ ，计算 \hat{L}_x^2 和 \hat{L}_y^2 的期望值以及 ΔL_x 和 ΔL_y ，并验证不确定性关系。

解：仿照我们在前半学期谐振子的学习中和在期中考试中常用的方法，我们将 \hat{L}_x^2 和 \hat{L}_y^2 表达成角动量升降算符的形式，在此基础上问题将更容易解决。我们有：

$$\hat{L}_x^2 = \left[\frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-) \right]^2 = \frac{1}{4} (\hat{L}_+^2 + \hat{L}_-^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+) \quad (2.1)$$

$$\hat{L}_y^2 = \left[\frac{1}{2i} (\hat{L}_+ - \hat{L}_-) \right]^2 = \frac{1}{4} (-\hat{L}_+^2 - \hat{L}_-^2 + \hat{L}_+ \hat{L}_- + \hat{L}_- \hat{L}_+) \quad (2.2)$$

由升降算符的性质和属于不同本征值的本征态的正交性，我们知道：

$$\langle l, m_z | \hat{L}_+^2 | l, m_z \rangle = \langle l, m_z | \hat{L}_-^2 | l, m_z \rangle = 0 \quad (2.3)$$

同时，根据（我们将在附注一对此加以证明）：

$$\hat{L}_{\pm} |l, m_z\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m_z(m_z \pm 1)} |l, m_z \pm 1\rangle \quad (2.4)$$

（注：可以利用 $\hat{L}_+ |l, l\rangle = 0$ 和 $\hat{L}_- |l, -l\rangle = 0$ 的性质记忆上式中的正负号选取。）可以得到：

$$\begin{aligned} \hat{L}_{\pm} \hat{L}_{\mp} |l, m_z\rangle &= \hbar^2 \sqrt{l(l+1) - m_z(m_z \mp 1)} \hat{L}_{\pm} |l, m_z \mp 1\rangle \\ &= \hbar^2 \sqrt{l(l+1) - m_z(m_z \mp 1)} \sqrt{l(l+1) - (m_z \mp 1)(m_z \mp 1 \pm 1)} |l, m_z\rangle \\ &= \hbar^2 [l(l+1) - m_z(m_z \mp 1)] |l, m_z\rangle \end{aligned} \quad (2.5)$$

因此：

$$\begin{aligned} \langle l, m_z | \hat{L}_x^2 | l, m_z \rangle &= \langle l, m_z | \hat{L}_y^2 | l, m_z \rangle = \frac{1}{4} (\langle l, m_z | \hat{L}_+ \hat{L}_- | l, m_z \rangle + \langle l, m_z | \hat{L}_- \hat{L}_+ | l, m_z \rangle) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} [l(l+1) - m_z(m_z - 1) + l(l+1) - m_z(m_z + 1)] \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m_z^2] \end{aligned} \quad (2.6)$$

而:

$$\langle l, m_z | \hat{L}_x | l, m_z \rangle = \frac{1}{2} (\langle l, m_z | \hat{L}_+ | l, m_z \rangle + \langle l, m_z | \hat{L}_- | l, m_z \rangle) = 0 \quad (2.7)$$

$$\langle l, m_z | \hat{L}_y | l, m_z \rangle = \frac{1}{2i} (\langle l, m_z | \hat{L}_+ | l, m_z \rangle - \langle l, m_z | \hat{L}_- | l, m_z \rangle) = 0 \quad (2.8)$$

因而:

$$\Delta L_x = \sqrt{\langle l, m_z | \hat{L}_x^2 | l, m_z \rangle - \langle l, m_z | \hat{L}_x | l, m_z \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m_z^2]} = \Delta L_y \quad (2.9)$$

我们知道, 倘若 $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, 不确定性关系要求在任意的 $|\psi\rangle$ 下:

$$\Delta A_\psi \Delta B_\psi \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle_\psi| \quad (2.10)$$

在本题所考虑的情况下, 基本对易关系给出:

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{L}_\beta] = i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{L}_\gamma \quad (2.11)$$

而:

$$\begin{aligned} \Delta L_x \Delta L_y - \frac{1}{2} \langle l, m_z | \hbar \hat{L}_z | l, m_z \rangle &= \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m_z^2] - \frac{1}{2} m_z \hbar^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [l(l+1) - m_z(m_z+1)] \geq 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

在 m_z 允许取值的区间 $[-l, l]$ 上成立, 其中等号当且仅当 $m_z = l$ 时成立. 由此, 不确定性关系得到验证.

3 第3题

考虑以 \hat{L}^2 和 \hat{L}_z 的共同本征态 $|l, m_z\rangle$ 为基的 Hilbert 空间中, $l = 1$ 的子空间.

- (a) 写出算符 \hat{L}_z 和 \hat{L}_\pm 的矩阵表示.
- (b) 求算符 \hat{L}_x 和 \hat{L}_y 的矩阵表示.
- (c) 求算符 \hat{L}_x^2 的矩阵表示及其本征值.
- (d) 在 (\hat{L}^2, \hat{L}_z) 确立的表象下求 \hat{L}_z 及 \hat{L}_x 的本征态.
- (e) 求由 (\hat{L}^2, \hat{L}_z) 确立的表象到由 (\hat{L}^2, \hat{L}_x) 的变换矩阵 S , 并验证 (b) 中关于 \hat{L}_x 的结论.
- (f) 在坐标表象下写出 (\hat{L}^2, \hat{L}_x) 的共同本征态波函数.

注: 在本题的求解过程中, 我们以“戴帽子的” \hat{A} 表示算符、以“不戴帽子的” A 指代矩阵表示, 请同学们注意区分~

解: 依题意, 我们考虑的 Hilbert 空间维数为 3, $\{|1, +1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$ 是它的一组正交完备基, 前四问中基的排列顺序以此为准.

3.1 3a

不难得到:

$$\langle 1, m'_z | \hat{L}_z | 1, m_z \rangle = m_z \hbar \delta_{m_z, m'_z} \quad (3.1)$$

因此，算符 \hat{L}_z 的矩阵表示为：

$$\hat{L}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

而由2.4，有：

$$\langle 1, m'_z | \hat{L}_{\pm} | 1, m_z \rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m_z(m_z \pm 1)} \delta_{m_z \pm 1, m'_z} = \hbar \sqrt{2 - m_z(m_z \pm 1)} \delta_{m_z \pm 1, m'_z} \quad (3.3)$$

因此，算符 \hat{L}_{\pm} 的矩阵表示分别为：

$$L_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

$$L_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

3.2 3b

算符的矩阵表示之间的关系和算符之间的关系一致，因此有：

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ - L_-) = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

$$L_y = \frac{1}{2i}(L_+ + L_-) = \frac{\sqrt{2}}{2}i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

3.3 3c

在上题的基础上，有：

$$L_x^2 = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\right)^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

由久期方程 $\det(L_x^2 - \lambda I) = 0$ 得：

$$0 = (\hbar^2 - \lambda) \left(\frac{\hbar^2}{2} - \lambda\right)^2 - (\hbar^2 - \lambda) \left(\frac{\hbar^2}{2}\right)^2 = -(\hbar^2 - \lambda)^2 \lambda \quad (3.9)$$

解得本征值分别为 \hbar^2 和 0，其中前者是二重简并的。考虑到角动量算符的不同分量性质上没有本质区别，这一结果恰在我们意料之中。

3.4 3d

由 3a, 我们知道 L_z 在题给表象下的矩阵表示已经对角化, 相应的本征态即为所取正交归一化基, 对应的表示为:

$$|1, m_z = +1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, m_z = 0\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1, m_z = -1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

而由 3b, 利用线性代数方法可以得到 L_x 的本征值分别为 $\hbar, 0, -\hbar$, 分别对应本征态:

$$|1, m_x = +1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad |1, m_x = 0\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \quad |1, m_x = -1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

3.5 3e

我们知道, 矩阵 S 应当将 $|1, m_x = -1\rangle$ 在表象下的表示由 3.11 的形式变换到 3.10 的形式, 亦即:

$$S \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad S \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad S \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

根据各本征向量的正交归一性, 倘若我们将 3.11 中的第 n 个 ($n = 1, 2, 3$) 列向量依次取共轭转置并作为矩阵的第 n 行, 所得的即为满足要求的 S , 即:

$$S = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

在此基础上, 我们尝试计算 \hat{L}_x 在正交完备基 $\{|1, m_x = +1\rangle, |1, m_x = 0\rangle, |1, m_x = -1\rangle\}$ 下的矩阵表示 L_x^X . 利用 3b 的结论并令其中 $L_x = L_x^Z$, 有:

$$L_x^X = S L_x^Z S^\dagger = \frac{\sqrt{2}\hbar}{8} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

在我们的意料之中.

3.6 3f

利用 3d 的求解结果, 我们知道:

$$\begin{cases} |1, m_x = +1\rangle = \frac{1}{2} (|1, m_z = +1\rangle + \sqrt{2}|1, m_z = 0\rangle + |1, m_z = -1\rangle) \\ |1, m_x = 0\rangle = \frac{1}{2} (\sqrt{2}|1, m_z = +1\rangle - \sqrt{2}|1, m_z = -1\rangle) \\ |1, m_x = -1\rangle = \frac{1}{2} (|1, m_z = +1\rangle - \sqrt{2}|1, m_z = 0\rangle + |1, m_z = -1\rangle) \end{cases} \quad (3.15)$$

由于角量子数和磁量子数仅能确定波函数在球坐标系下角向部分的表达，我们接下来略去径向部分。而由于：

$$\langle \theta, \phi | l, m_z \rangle = Y_l^{m_z}(\theta, \phi) \quad (3.16)$$

有：

$$\begin{cases} \langle \theta, \phi | 1, m_x = +1 \rangle = \frac{1}{2} (Y_1^{+1} + \sqrt{2}Y_1^0 + Y_1^{-1}) \\ \langle \theta, \phi | 1, m_x = 0 \rangle = \frac{1}{2} (\sqrt{2}Y_1^{+1} - \sqrt{2}Y_1^{-1}) \\ \langle \theta, \phi | 1, m_x = -1 \rangle = \frac{1}{2} (Y_1^{+1} - \sqrt{2}Y_1^0 + Y_1^{-1}) \end{cases} \quad (3.17)$$

即为所求。

4 第4题

证明：

(a)

$$\hat{J}_\pm \hat{J}_\mp = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \pm \hbar \hat{J}_z$$

(b)

$$\langle j, m | \hat{J}_\pm \hat{J}_\mp | j, m \rangle = j(j+1)\hbar^2 - m(m \mp 1)\hbar^2$$

4.1 4a

我们已经知道：

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y \quad (4.1)$$

因此，有：

$$\begin{aligned} \hat{J}_\pm \hat{J}_\mp &= (\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \mp i\hat{J}_y) \\ &= \hat{J}_x^2 \mp i\hat{J}_x\hat{J}_y \pm i\hat{J}_y\hat{J}_x + \hat{J}_y^2 \\ &= (\hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2) \mp i[\hat{J}_x, \hat{J}_y] \\ &= \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \mp i(\hbar\hat{J}_z) = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 \pm \hbar\hat{J}_z \end{aligned} \quad (4.2)$$

即为欲证结论。在第四个等号处，我们利用了角动量算符的基本对易关系。

4.2 4b

在 4a 的基础上，我们利用：

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle \quad (4.3)$$

$$\hat{J}_z |j, m\rangle = m |j, m\rangle \hbar \quad (4.4)$$

可以得到：

$$\begin{aligned}
\langle j, m | \hat{J}_\pm \hat{J}_\mp | j, m \rangle &= \langle j, m | (\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \pm \hbar \hat{J}_z) | j, m \rangle \\
&= \langle j, m | j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 \pm \hbar m \hbar | j, m \rangle \\
&= \hbar^2 [j(j+1) - m^2 \pm m] \langle j, m | j, m \rangle \\
&= j(j+1)\hbar^2 - m(m \mp 1)\hbar^2
\end{aligned} \tag{4.5}$$

即为欲证结论.

5 附注

5.1 附注一：2.4的证明

利用 4b 的结论，有：

$$j(j+1)\hbar^2 - m(m \mp 1)\hbar^2 = \langle j, m | \hat{J}_\pm \hat{J}_\mp | j, m \rangle = (\hat{J}_\mp | j, m \rangle)^\dagger (\hat{J}_\mp | j, m \rangle) \tag{5.1}$$

这告诉我们：

$$|\hat{J}_\mp | j, m \rangle| = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \mp 1)} \tag{5.2}$$

同时我们知道 $\hat{J}_\mp | j, m \rangle \sim | j, m-1 \rangle$ ，因此我们总可以选取合适的相位关系，使得：

$$\hat{J}_\mp | j, m \rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \mp 1)} | j, m-1 \rangle \tag{5.3}$$

这就是2.4的结论.

5.2 附注二：轨道角动量算符和一般角动量算符性质异同

本质上，量子力学中一般的角动量算符 \hat{J} 由无穷小转动变换定义，它的分量所满足的基本对易关系：

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{J}_\beta] = i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}_\gamma \tag{5.4}$$

在这一定义下自然导出. 以此为出发点，我们可以讨论相应的升降算符 \hat{J}_\pm 的性质. 而轨道角动量算符 \hat{L} 除了具有上述性质外，还因其定义：

$$\hat{L}_\alpha = \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{x}_\beta \hat{p}_\gamma \tag{5.5}$$

在坐标表象下的表达满足：

$$(\hat{L}^2)^{POS} Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi) \tag{5.6}$$

$$\hat{L}_z^{POS} Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi) \tag{5.7}$$

这一性质对于一般的角动量算符并不成立.

5.3 附注三：第 1 题的进一步讨论

本部分内容已经超出了本课程所要求掌握的范围. 作为开始，我们应当意识到，对坐标 (x, y, z) 做轮换转为 (z', x', y') 的方法更多地出自“直觉”，而缺乏理论的支撑. 因此，本节内容旨在对其合理性进行分析. 首先，我

们知道这一轮换相当于对态矢量 $|\psi\rangle$ 做操作:

$$\exp\left(\frac{i\hat{L}_z\pi}{\hbar}\right)\exp\left(\frac{i\hat{L}_y\pi}{\hbar}\right)|\psi\rangle$$

亦即, 在固定的坐标架 $Oxyz$ 下, 我们要求态矢量 $|\psi\rangle$ 先绕 y 轴顺时针转动 90° , 再绕 z 轴顺时针转动 90° . 现在我们只知道 $|\psi\rangle$ 在 $(\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z)$ 确立的表象下的表达式 (即1.9) :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{(\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z)} \psi^Z = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{12}}(-1+i) \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \\ \sqrt{\frac{1}{12}}(1+i) \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

因此我们也应写出 $\exp\left(\frac{i\hat{L}_z\pi}{\hbar}\right)$ 和 $\exp\left(\frac{i\hat{L}_y\pi}{\hbar}\right)$ 在此表象下的表示. 其中, 算符 \hat{L}_z 在此表象下已对角化, 故利用算符函数的定义:

$$\exp\left(\frac{i\hat{L}_z\pi}{\hbar}\right) \xrightarrow{(\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z)} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} \left[\frac{i\pi}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \right]^n = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\pi}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-\frac{i\pi}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -i \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

而利用算符 \hat{L}_y 与升降算符 \hat{L}_\pm 的关系, 有:

$$\hat{L}_y \xrightarrow{(\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z)} \frac{\sqrt{2}\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix} U^\dagger = UL_zU^\dagger \quad (5.10)$$

其中:

$$U = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2}i & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2}i \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

利用第 6 次作业 3a 的结论, 有:

$$\exp\left(\frac{i\hat{L}_y\pi}{\hbar}\right) = \hat{U} \exp\left(\frac{i\hat{L}_z\pi}{\hbar}\right) \hat{U}^\dagger \xrightarrow{(\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z)} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2}i & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{2}i \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2}i & -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2}i & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

其中已利用 5.9. 由此, 有:

$$\exp\left(\frac{i\hat{L}_z\pi}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{i\hat{L}_y\pi}{\hbar}\right) |\psi\rangle \xrightarrow{(\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z)} \frac{\sqrt{2}\hbar}{2} \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{12}}(-1+i) \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \\ \sqrt{\frac{1}{12}}(1+i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{12}}(-1+2i) \\ \sqrt{\frac{1}{6}} \\ \sqrt{\frac{1}{12}}(1+2i) \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

这里的系数与1.15形成了一一对应的关系(注意:我们转动的是矢量而非坐标轴,因此各态的表示始终在 $(\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z)$ 确立的表象下). 然而, 到此为止, 我们仍然不能确定 $|\psi\rangle$ 应如何表达为 $|1, m_x\rangle$ 的线性叠加, 这是因为我们尚

未考察后者在旋转后的表示. 事实上, 根据3.11, 我们有:

$$\exp\left(\frac{i\hat{L}_z}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)\exp\left(\frac{i\hat{L}_y}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)|1, m_x = +1\rangle \xrightarrow{(\hat{L}^2, \hat{L}_z)} \begin{pmatrix} i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.14)$$

$$\exp\left(\frac{i\hat{L}_z}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)\exp\left(\frac{i\hat{L}_y}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)|1, m_x = 0\rangle \xrightarrow{(\hat{L}^2, \hat{L}_z)} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

$$\exp\left(\frac{i\hat{L}_z}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)\exp\left(\frac{i\hat{L}_y}{\hbar}\frac{\pi}{2}\right)|1, m_x = -1\rangle \xrightarrow{(\hat{L}^2, \hat{L}_z)} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -i \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

结合前式, 有:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sqrt{\frac{1}{12}}(-1+2i)\frac{1}{i}|1, m_x = +1\rangle + \sqrt{\frac{1}{6}}\frac{1}{-1}|1, m_x = 0\rangle + \sqrt{\frac{1}{12}}(1+2i)\frac{1}{-i}|1, m_x = -1\rangle \\ &= \sqrt{\frac{1}{12}}(2+i)|1, m_x = +1\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}}|1, m_x = 0\rangle + \sqrt{\frac{1}{12}}(-2+i)|1, m_x = -1\rangle \end{aligned} \quad (5.17)$$

此处的系数和直接利用表象变换计算得到1.10的方才相同 (倘若读者回顾转动的过程, 会发现系数的一致是必然且平庸的). 这意味着直接对坐标进行轮换后得到的结果1.15至多可以作为计算概率的基础, 而绝不能作为态的展开系数, 否则将导致相位的弥散. 这也正是我们不推荐使用坐标轮换方法解决实际问题的原因.

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,

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

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

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 $\mathrm{Tr}(M\sigma_i)$ 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 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

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

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

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

故 $t_0 + \tau$ 时刻的自旋态

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

- $t_0 + \tau \sim 2t_0 + \tau$ 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.

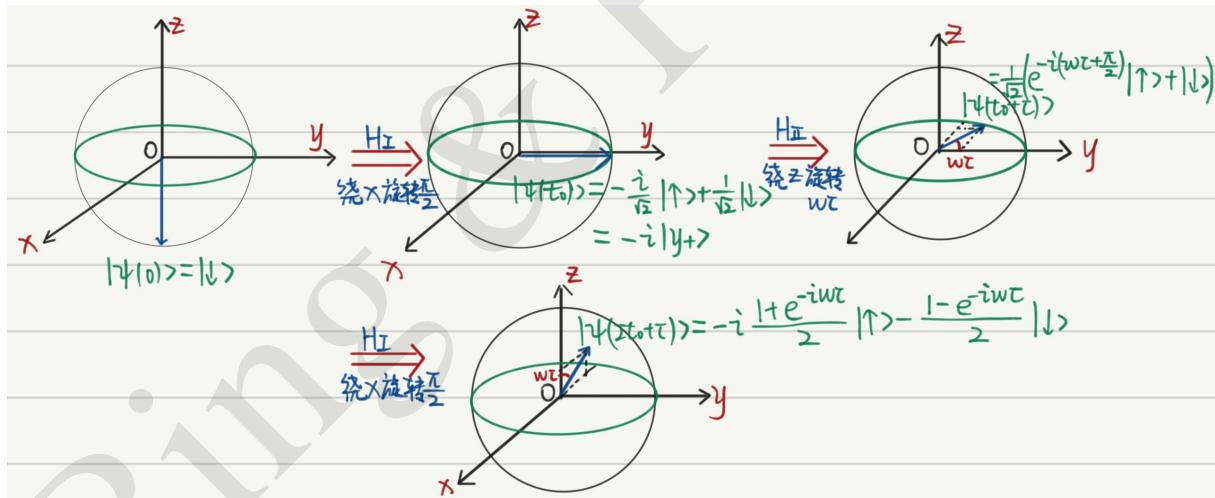


图 1: Bloch球上的演化过程

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。在熟络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

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

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

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

及

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

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

2022 秋易为老师量子力学 B

习题十一参考解答

刘丰铨 宋冰睿

2022 年 12 月 14 日

1 第 1 题

分别记 \hat{S}_1 和 \hat{S}_2 为电子 1 和电子 2 的自旋算符.

- (a) 求算符 $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ 的本征值.
(b) 倘若两电子的自旋在 $t = 0$ 时处于 $|\uparrow\downarrow\rangle$, 体系的 Hamiltonian 为:

$$\hat{H} = \frac{A}{\hbar} \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$$

其中 A 为实常数, 请写出系统在 $t > 0$ 时的状态.

- (c) 接上问, 在 t 时刻测量到电子处于 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 和 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 的概率各为多少?

解: 在本题中, 我们记 $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$, 并记 $|s, m_s\rangle$ 为力学量完全集 $\{\hat{S}^2, \hat{S}_z\}$ 的共同本征态, 那么有我们所熟知的以下结论:

$$|1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \tag{1.1}$$

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \tag{1.2}$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \tag{1.3}$$

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \tag{1.4}$$

由于我们所考虑的 Hilbert 空间是四维的, 以上矢量可以组成空间中一组完备正交基.

1.1 1a

我们知道:

$$\hat{S}^2 = (\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 \tag{1.5}$$

因而:

$$\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2) \tag{1.6}$$

显然, $\{\hat{S}^2, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2\}$ 是一组力学量完全集, 它们的共同本征态恰为 $|S, m_S\rangle$, 因而后者也是算符 $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ 的本征态, 且有:

$$\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 |1, m_S\rangle = \frac{1}{2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2) |1, m_S\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left(2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\right) |1, m_S\rangle = \frac{\hbar^2}{4} |1, m_S\rangle \quad (1.7)$$

$$\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 |0, 0\rangle = \frac{1}{2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2) |0, 0\rangle = \frac{\hbar^2}{2} \left(0 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4}\right) |0, 0\rangle = -\frac{3\hbar^2}{4} |0, 0\rangle \quad (1.8)$$

因此算符 $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ 的本征值分别为 $\frac{\hbar^2}{4}$ (三重简并) 和 $-\frac{3\hbar^2}{4}$.

1.2 1b

在上小问的讨论中, 我们得知, 算符 $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ 的本征态为 $|S, m_S\rangle$, 因而我们首先利用1.3和1.4重新表达 $|\uparrow\downarrow\rangle$:

$$|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle + |0, 0\rangle) \quad (1.9)$$

记 $t \geq 0$ 时刻系统处于态 $|\psi(t)\rangle$, 则 $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle$, 且有:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \exp\left(-\frac{i t \hat{H}}{\hbar}\right) |\psi(0)\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{i A t}{\hbar^2} \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2\right) \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle + |0, 0\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\exp\left(-\frac{i A t \hbar^2}{\hbar^2} \frac{1}{4}\right) |1, 0\rangle + \exp\left(\frac{i A t \hbar^2}{\hbar^2} \frac{3}{4}\right) |0, 0\rangle \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-\frac{i A t}{4}} |1, 0\rangle + e^{\frac{3 i A t}{4}} |0, 0\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{-\frac{i A t}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) + e^{\frac{3 i A t}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\left(e^{-\frac{i A t}{4}} + e^{\frac{3 i A t}{4}} \right) |\uparrow\downarrow\rangle + \left(e^{-\frac{i A t}{4}} - e^{\frac{3 i A t}{4}} \right) |\downarrow\uparrow\rangle \right] \end{aligned} \quad (1.10)$$

1.3 1c

接上小问, 测量得到态 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 的概率为:

$$P(|\uparrow\downarrow\rangle) = \frac{1}{4} \left(e^{\frac{i A t}{4}} + e^{-\frac{3 i A t}{4}} \right) \left(e^{-\frac{i A t}{4}} + e^{\frac{3 i A t}{4}} \right) = \frac{1 + \cos(A t)}{2} = \cos^2\left(\frac{A t}{2}\right) \quad (1.11)$$

而测量得到态 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 的概率为 0. 考虑到 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 是 \hat{H} 的本征态, 而 $\langle \uparrow\uparrow | \psi(0) \rangle = 0$, 这一结果是合理的.

注: 在角动量耦合问题中, 弄清每个算符的作用对象是至关重要的. 以本题为例, \hat{S}_1 仅对电子 1 作用, \hat{S}_2 仅对电子 2 作用, 且有 $[\hat{S}_{1,\alpha}, \hat{S}_{2,\beta}] = 0$. 事实上, 在较为严格的形式理论下, 体系的初态应写为 $|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle$, 而算符 \hat{S}_1 和 \hat{S}_2 应分别表示为 $\hat{S}_1 \otimes \hat{I}_2$ 和 $\hat{I}_1 \otimes \hat{S}_2$. 在现阶段, 同学们只需清楚每个算符的作用对象以及作用在不同对象上的算符互不干扰 (以及互相对易) 即可.

2 第2题

考虑 $l=1$ 的轨道角动量与 $s=\frac{1}{2}$ 的自旋耦合，并设 $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ 。记 $|j, m_j\rangle$ 为力学量完全集 $\{\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{j}_z\}$ 的共同本征态。试在 $j=\frac{3}{2}$ 的子空间内，以 $\{|j, m_j\rangle\}$ 为基，写出 \hat{S}_x 的矩阵表示。

解：在前几次作业中我们已经学到，写出 \hat{S}_x 的矩阵表示的一种方法是先分别求出 \hat{S}_+ 和 \hat{S}_- 的矩阵表示，而后者一般是容易求出的。我们知道， \hat{S}_+ 和 \hat{S}_- 的矩阵表示在非耦合表象 $|l, m_l; s, m_s\rangle$ 中更易得到，因此我们首先考虑将题目所关心的 $j=\frac{3}{2}$ 子空间中的态 $\left|\frac{3}{2}, m_j\right\rangle$ 在非耦合表象下表达。查 Clebsch-Gordan 系数表中 $j_1=1, j_2=\frac{1}{2}$ 的子表格，得：

$$\begin{cases} \left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = \left|1, 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \left|1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left|1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left|1, 0; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left|1, -1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = \left|1, -1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \end{cases} \quad (2.1)$$

同时：

$$\hat{S}_x \left|\frac{3}{2}, m_j\right\rangle = \frac{1}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) \left|\frac{3}{2}, m_j\right\rangle \quad (2.2)$$

并且如我们在上题附注中所提及的，自旋角动量算符只在表达自旋的 Hilbert 空间中作用而与轨道角动量无关，因此有：

$$\begin{cases} \hat{S}_+ \left|1, m_l; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = 0 \\ \hat{S}_+ \left|1, m_l; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \hbar \left|1, m_l; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ \hat{S}_- \left|1, m_l; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \hbar \left|1, m_l; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \\ \hat{S}_- \left|1, m_l; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

利用2.1，有：

$$\begin{cases} \hat{S}_x \left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left|1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \\ \hat{S}_x \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left(\sqrt{\frac{1}{3}} \left|1, 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left|1, 0; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \right) \\ \hat{S}_x \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \left|1, 0; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left|1, -1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \right) \\ \hat{S}_x \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left|1, -1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \end{cases} \quad (2.4)$$

由是，我们可以得到算符 \hat{S}_x 在基 $\left\{\left|\frac{3}{2}, m_j\right\rangle\right\}$ (其中 m_j 由大到小排列) 下的矩阵表示：

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

即为所求。

注 1：事实上，我们不难证明：

$$\hat{J}_z \hat{S}_{\pm} |j, m_j\rangle = (m_j \pm 1) \hbar \hat{S}_{\pm} |j, m_j\rangle \quad (2.6)$$

过程非常简单，同学们不妨自行尝试。从上式中，我们知道， $\hat{S}_{\pm} |j, m_j\rangle$ 是算符 \hat{J}_z 属于本征值 $(m_j \pm 1)\hbar$ 的本征态。然而，从上面的计算我们知道：

$$\hat{S}_- \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \hbar \left| 1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \neq \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (2.7)$$

这是否和我们的结论（蓝字部分）矛盾？答案是否定的。实际上，同学们可以证得， $\hat{S}_{\pm} |j, m_j\rangle$ 不一定为算符 \hat{J}^2 的本征矢量，因此自然不必与 $|j, m_j - 1\rangle$ 平行。回归本题的讨论，以上结论的一个作用是，我们可以不经计算而直接说明，在算符 \hat{S}_x 的矩阵元中，只有 $\langle j, m_j \pm 1 | \hat{S}_x | j, m_j \rangle$ 不为 0，从而降低工作量。

注 2：借此机会，我们介绍一种简单的推算 Clebsch-Gordan 系数的方法。以本题考虑的耦合情况为例，首先，我们找到 j 的最大可能值 $j_{max} = \frac{3}{2}$ ，那么 $|j_{max}, j_{max}\rangle$ 一定可以表为：

$$|j_{max}, j_{max}\rangle = \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \left| 1, 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (2.8)$$

在其上作用降算符 $\hat{J}_- = \hat{L}_- + \hat{S}_-$ ，将得到 $|j_{max}, j_{max} - 1\rangle$ ，即有：

$$(\hat{L}_- + \hat{S}_-) \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = (\hat{L}_- + \hat{S}_-) \left| 1, 1; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left(\sqrt{2} \left| 1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| 1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right) \sim \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (2.9)$$

和 Clebsch-Gordan 系数表所给出的一致。继续作用，可以得到 $j = \frac{3}{2}$ 的本征子空间中的共 4 个本征态的表达式。然后，我们可以求得 $j = \frac{1}{2}$ 的本征子空间中的本征态的表达式。具体地，考虑到 $m_j = \frac{1}{2}$ 的本征子空间维数为 2，同时 $\left\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \middle| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = 0$ ，有：

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \left| 1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \left| 1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (2.10)$$

再将算符 \hat{J}_- 作用其上，可得 $\left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$ 的表达式。至此为止，我们求出了这一耦合问题中的所有 Clebsch-Gordan 系数。这一方法可以推广到任意复杂的耦合情形。

3 第3题

考虑由三个自旋 $\frac{1}{2}$ 的可区分粒子组成的体系，体系的 Hamiltonian 为：

$$\hat{H} = A \left(\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_3 + \hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{S}}_3 \right)$$

其中 A 为实常数。

(a) 求体系能级及简并度。

(b) 记 $\hat{\mathbf{S}}_{12} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$, $\hat{\mathbf{S}}_{123} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_3$, 写出力学量完全集 $\{\hat{\mathbf{S}}_{12}^2, \hat{\mathbf{S}}_{123}^2, (\hat{\mathbf{S}}_{123})_z\}$ 的共同本征态。

解：在本题中，我们记 s_i 为算符 $\hat{\mathbf{S}}_i$ 对应的量子数，并记 $(m_s)_i$ 为算符 $(\hat{\mathbf{S}}_i)_z$ 对应的量子数。

3.1 3a

我们首先尝试重复第 1 题的处理：

$$\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j = \frac{1}{2} \left[(\hat{\mathbf{S}}_i + \hat{\mathbf{S}}_j)^2 - \hat{\mathbf{S}}_i^2 - \hat{\mathbf{S}}_j^2 \right] \quad (3.1)$$

将其代入 Hamiltonian 表达式后，我们仍然不易找到切入点。然而，注意到：

$$(\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_3)^2 = \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + \hat{\mathbf{S}}_3^2 + 2(\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_3 + \hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{S}}_3) \quad (3.2)$$

由此有：

$$(\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_3 + \hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{S}}_3) = \frac{1}{2} \left[(\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_3)^2 - \hat{\mathbf{S}}_1^2 - \hat{\mathbf{S}}_2^2 - \hat{\mathbf{S}}_3^2 \right] \quad (3.3)$$

将上式代入 Hamiltonian 表达式，得到：

$$\hat{H} = \frac{A}{2} \left[(\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_3)^2 - \hat{\mathbf{S}}_1^2 - \hat{\mathbf{S}}_2^2 - \hat{\mathbf{S}}_3^2 \right] = \frac{A}{3} (\hat{\mathbf{S}}_{123}^2 - \hat{\mathbf{S}}_1^2 - \hat{\mathbf{S}}_2^2 - \hat{\mathbf{S}}_3^2) \quad (3.4)$$

容易证明， $\{\hat{\mathbf{S}}_{123}^2, \hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{\mathbf{S}}_2^2, \hat{\mathbf{S}}_3^2\}$ 是一组相容力学量（注意并不是力学量完全集），从而它们的共同本征态（记为 $|s_{123}\rangle$ ）即是能量本征态。由于：

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{S}}_i^2 |s_{123}\rangle = \frac{3\hbar^2}{4} |s_{123}\rangle, & (i = 1, 2, 3) \\ \hat{\mathbf{S}}_{123}^2 |s_{123}\rangle = s_{123} (s_{123} + 1) \hbar^2 |s_{123}\rangle \end{cases} \quad (3.5)$$

根据角动量耦合规则，我们知道 s_{123} 的可能值有 $\frac{3}{2}$ 和 $\frac{1}{2}$ ，所以体系的能级数为 2，对应的能量分别为：

$$E_1 = \frac{A\hbar^2}{2} \left(\frac{3}{2} \times \frac{5}{2} - 3 \times \frac{3}{4} \right) = \frac{3A\hbar^2}{4} \quad (3.6)$$

$$E_2 = \frac{A\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{2} \times \frac{3}{2} - 3 \times \frac{3}{4} \right) = -\frac{3A\hbar^2}{4} \quad (3.7)$$

接下来分析能级的简并度。本问题中，Hilbert 空间是 8 维的（它由三个 2 维的空间做张量积形成，因此维数为这三个低维空间维数之积），而我们现在所选取的相容力学量的本征值并不足以标定 8 个本征态。但是，我们知道，一个完整的 $s_{123} = \frac{3}{2}$ 的本征子空间的维数为 4，而一个完整的 $s_{123} = \frac{1}{2}$ 的本征子空间的维数为 2。与此同

时, Hilbert 空间必须分别由正整数个完整的 $s_{123} = \frac{3}{2}$ 和 $s_{123} = \frac{1}{2}$ 本征子空间组成 (不妨分别设为 n 个和 m 个), 这也就是说, 我们要求:

$$8 = 4n + 2m, \quad n, m \in \mathbb{Z}^+ \quad (3.8)$$

方程的唯一合法解为 $n = 1, m = 2$. 因此, 能量为 E_1 的能级简并度为 $4n = 4$, 能量为 E_2 的能级简并度为 $2m = 4$.

注: 必须承认, 以上解法有取巧之嫌. 一般而言, 要求能级的简并度, 我们会想方法找到一组力学量完全集对所有本征态进行标定 (事实上, 我们在氢原子问题中就利用这种方法, 通过引入算符 \hat{L}^2 和 \hat{L}_z , 标定了各本征态并求得了主量子数为 n 的能级的简并度). 在本问题中, 可以利用下一问给出的 $\{\hat{S}_{12}^2, \hat{S}_{123}^2, (\hat{S}_{123})_z\}$ 对本征态进行标定. 具体地, 可将它们的本征态记为 $|s_{12}, s_{123}, (m_s)_{123}\rangle$, 则有如下可能组合:

$$\begin{cases} s_{12} = 0 \rightarrow s_{123} = \frac{1}{2} \rightarrow (m_s)_{123} = \pm \frac{1}{2} \\ s_{12} = 1 \rightarrow \begin{cases} s_{123} = \frac{1}{2} \rightarrow (m_s)_{123} = \pm \frac{1}{2} \\ s_{123} = \frac{3}{2} \rightarrow (m_s)_{123} = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2} \end{cases} \end{cases} \quad (3.9)$$

考虑到能量本征值只与其中 s_{123} 有关, 而在这 8 种可能的组合中 $s_{123} = \frac{3}{2}$ 和 $s_{123} = \frac{1}{2}$ 各出现 4 次, 因此两个能级的简并度均为 4. 相较而言, 这一解法更加严谨, 但要求同学们在没有下一问的提示的情况下找到合适的力学量完全集, 思维量相对较大.

3.2 3b

按照题目的要求, 我们自然地希望用我们最熟悉的 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ 来表示题目所给的力学量完全集的本征态. 根据力学量完全集的形式特点, 我们可以将三个电子自旋角动量的耦合看作这样的过程: 首先, 电子 1 的自旋角动量 \hat{S}_1 和电子 2 的自旋角动量 \hat{S}_2 耦合得到 \hat{S}_{12} ; 然后, 电子 1、2 的总自旋角动量 \hat{S}_{12} 作为一个整体, 与电子 3 的自旋角动量 \hat{S}_3 耦合, 得到 \hat{S}_{123} . 对于第一步, 我们已在第 1 题指出, 如果记耦合得到的态为 $|s_{12}, (m_s)_{12}\rangle$, 则有:

$$\begin{cases} |1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \\ |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \end{cases} \quad (3.10)$$

然后, 我们执行第二步. 按照上题末尾的讨论, 我们知道前两个电子的总自旋角动量 \hat{S}_{12} 与电子 3 的自旋角动量 \hat{S}_3 耦合将得到三种不同的 $\{s_{12}, s_{123}\}$ 本征值组合. 下面记耦合后系统的态为 $|s_{12}, s_3 = \frac{1}{2}, s_{123}, (m_s)_{123}\rangle$ (同学们如果认为这样写不够直观, 可以将 s_{12} 看作 j_1 , 将 s_3 看作 j_2 , 并将 s_{123} 看作 j , 这会使得问题在形式上回到最一般的角动量耦合情形), 有如下讨论:

(1) 倘若 $\{s_{12}, s_{123}\} = \left\{0, \frac{1}{2}\right\}$, 那么有 $|s_{12}, s_3, s_{123}, (m_s)_{123}\rangle = \left|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, (m_s)_{123}\right\rangle$, 由于 $j_1 = 0$, 不存在耦合. 在这

种情况下，态矢量可以直接在非耦合表象下表达：

$$\begin{cases} \left|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = |0, 0\rangle \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = |0, 0\rangle |\uparrow\rangle \\ \left|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = |0, 0\rangle \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = |0, 0\rangle |\downarrow\rangle \end{cases} \quad (3.11)$$

其中等号右端每一项的第一个 Dirac 右矢规定为 $|s_{12}, (m_s)_{12}\rangle$ ，和 3.10 等号左端的态一致。将后者代入上式，有：

$$\begin{cases} \left|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) |\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle) \\ \left|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) |\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) \end{cases} \quad (3.12)$$

这就是力学量完全集 $\{\hat{S}_{12}^2, \hat{S}_{123}^2, (\hat{S}_{123})_z\}$ 记为 $\left|0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, (m_s)_{123}\right\rangle$ 的共同本征态的表达。

(2) 倘若 $\{s_{12}, s_{123}\} = \left\{1, \frac{1}{2}\right\}$ ，那么有 $|s_{12}, s_3, s_{123}, (m_s)_{123}\rangle = \left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, (m_s)_{123}\right\rangle$ 。这本质上是 $j_1 = 1$ 和 $j_2 = \frac{1}{2}$ 的耦合，得到的总角动量量子数为 $j = \frac{1}{2}$ 。查 Clebsch-Gordan 系数表中 $j_1 = 1, j_2 = \frac{1}{2}$ 的子表格， $j = \frac{1}{2}$ 对应的数据，有：

$$\begin{cases} \left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1\rangle \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 0\rangle \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 0\rangle \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |1, -1\rangle \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \end{cases} \quad (3.13)$$

将 3.10 代入上式，得：

$$\begin{cases} \left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |\uparrow\uparrow\rangle |\downarrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) |\uparrow\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}} (|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle) \\ \left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) |\downarrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |\downarrow\downarrow\rangle |\uparrow\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}} (|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) - \sqrt{\frac{2}{3}} |\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \end{cases} \quad (3.14)$$

这就是力学量完全集 $\{\hat{S}_{12}^2, \hat{S}_{123}^2, (\hat{S}_{123})_z\}$ 记为 $\left|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, (m_s)_{123}\right\rangle$ 的共同本征态的表达。

(3) 倘若 $\{s_{12}, s_{123}\} = \left\{1, \frac{3}{2}\right\}$ ，那么有 $|s_{12}, s_3, s_{123}, (m_s)_{123}\rangle = \left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, (m_s)_{123}\right\rangle$ 。这本质上是 $j_1 = 1$ 和 $j_2 = \frac{3}{2}$ 的耦合，得到的总角动量量子数为 $j = \frac{3}{2}$ 。查 Clebsch-Gordan 系数表中 $j_1 = 1, j_2 = \frac{3}{2}$ 的子表格， $j = \frac{3}{2}$ 对应的数据，有：

$$\begin{cases} \left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = |1, 1\rangle \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 1\rangle \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |1, -1\rangle \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \\ \left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = |1, -1\rangle \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \end{cases} \quad (3.15)$$

将3.10代入上式，得：

$$\begin{cases} \left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle|\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ \left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|\uparrow\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)|\uparrow\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}(|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\rangle) \\ \left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)|\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|\downarrow\downarrow\rangle|\uparrow\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}(|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) + \sqrt{\frac{1}{3}}|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ \left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle|\downarrow\rangle = |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (3.16)$$

这就是力学量完全集 $\{\hat{S}_{12}^2, \hat{S}_{123}^2, (\hat{S}_{123})_z\}$ 记为 $\left|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, (m_s)_{123}\right\rangle$ 的共同本征态的表达.

至此，对三种情况的讨论结束，3.12, 3.14, 3.16即为所求力学量完全集共同本征态的表达.

4 第4题

设一维体系的 Hamiltonian 为：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2\hat{x}^2 + \alpha\hat{x}^3$$

且 α 非常小， ω 为实常数.

(a) 请根据非简并定态微扰论求体系基态波函数（精确到一阶修正）和基态能量（精确到二阶修正）.

(b) 求体系第 n 个能级的能量（精确到二阶修正）.

解：依题意，考虑到我们已经较为熟悉一维谐振子的量子力学解以及 α 非常小，我们将 Hamiltonian 表达式中的前两项选为主要项，而将最后一项选为微扰项，即：

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2\hat{x}^2 \quad (4.1)$$

$$\hat{V} = \alpha\hat{x}^3 \quad (4.2)$$

并且根据升降算符的定义，我们有：

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (4.3)$$

同时，我们记 $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ ，并记其本征值为 n 的本征态为 $|n^{(0)}\rangle$ ，那么：

$$\hat{H}_0 |n^{(0)}\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle \quad (4.4)$$

以上都是一维谐振子的常用结论，同学们现在应已熟知.

记 $|n^{(0)}\rangle$ 的一阶修正为 $|n^{(1)}\rangle$ ，那么非简并定态微扰论给出：

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n, m \in \mathbb{N}} \frac{\langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m^{(0)}\rangle = \sum_{m \neq n, m \in \mathbb{N}} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |m^{(0)}\rangle \quad (4.5)$$

分别记能量的一阶、二阶修正为 $E_n^{(1)}$ 和 $E_n^{(2)}$, 那么非简并定态微扰论给出:

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle = V_{nn} \quad (4.6)$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n, m \in \mathbb{N}} \frac{\left| \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m \neq n, m \in \mathbb{N}} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (4.7)$$

我们看到, 以上三个表达式均与 \hat{V} 的矩阵元有关. 为了进一步求解, 我们首先计算 $\hat{V} |n^{(0)}\rangle$. 对于 $n \geq 3$, 有:

$$\begin{aligned} \hat{V} |n^{(0)}\rangle &= \alpha \hat{x}^3 |n^{(0)}\rangle = \alpha \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega} \right)^{\frac{3}{2}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^3 |n^{(0)}\rangle \\ &= \alpha \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega} \right)^{\frac{3}{2}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2 \left[\sqrt{n+1} |(n+1)^{(0)}\rangle + \sqrt{n} |(n-1)^{(0)}\rangle \right] \\ &= \alpha \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega} \right)^{\frac{3}{2}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \left[\sqrt{(n+2)(n+1)} |(n+2)^{(0)}\rangle + (2n+1) |n^{(0)}\rangle + \sqrt{(n-1)(n-2)} |(n-2)^{(0)}\rangle \right] \\ &= \alpha \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)} |(n+3)^{(0)}\rangle + 3(n+1) \sqrt{n+1} |(n+1)^{(0)}\rangle \right. \\ &\quad \left. + 3n \sqrt{n} |(n-1)^{(0)}\rangle + \sqrt{n(n-1)(n-2)} |(n-3)^{(0)}\rangle \right] \end{aligned} \quad (4.8)$$

其中已经利用:

$$\begin{cases} \hat{a}^\dagger |n^{(0)}\rangle = \sqrt{n+1} |(n+1)^{(0)}\rangle \\ \hat{a} |n^{(0)}\rangle = \sqrt{n} |(n-1)^{(0)}\rangle \end{cases} \quad (4.9)$$

因此, 根据能量本征态的正交性, 我们有:

$$\begin{aligned} V_{nn} &= \langle m^{(0)} | \hat{V} | n^{(0)} \rangle \\ &= \alpha \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \left[\sqrt{(n+3)(n+2)(n+1)} \delta_{m,n+3} + 3(n+1) \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \right. \\ &\quad \left. + 3n \sqrt{n} \delta_{m,n-1} + \sqrt{n(n-1)(n-2)} \delta_{m,n-3} \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

由此我们知道 $E_n^{(1)} = V_{nn} = 0$ 对任意的 $n \geq 3$ 成立.

4.1 4a

特别地, 对于基态 $n = 0$, 仍然可以利用4.10 (注: 事实上该式对 $n < 3$ 也适用. 其合理性在于, 假设 $(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^3$ 展开得到的八项中的某一项作用在 $|n^{(0)}\rangle$ 上得到零矢量, 它对4.10表达式将没有贡献. 我们在推导4.10时, 将八项的作用结果都整合在了最终的表达式中, 其中某一或某些项的贡献为零, 对结果将没有影响.), 得:

$$V_{m0} = \alpha \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\sqrt{6} \delta_{m,3} + 3 \delta_{m,1} + 0 \delta_{m,-1} + 0 \delta_{m,-3} \right) \quad (4.11)$$

我们可以看到后两项系数为零，这也一定程度上为前文的合理性分析提供了支持。由此易知 $V_{00} = 0$ ，基态能量一阶修正为零。同时，利用4.4，基态的一阶修正为：

$$\begin{aligned} |0^{(1)}\rangle &= \sum_{m \neq 0, m \in \mathbb{N}} \frac{|V_{m0}|^2}{-m\hbar\omega} |m^{(0)}\rangle = -\alpha \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{3}{\hbar\omega} |1^{(0)}\rangle + \frac{\sqrt{6}}{3\hbar\omega} |3^{(0)}\rangle \right) \\ &= -\frac{3\sqrt{2}\alpha}{4\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{\mu\omega} \right)^{\frac{3}{2}} |1^{(0)}\rangle - \frac{\sqrt{3}\alpha}{6\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{\mu\omega} \right)^{\frac{3}{2}} |3^{(0)}\rangle \end{aligned} \quad (4.12)$$

记 $\langle x | n^{(0)} \rangle = \psi_n^{(0)}(x)$ ，有基态波函数精确到一阶修正的表达式：

$$\psi_0(x) \approx \psi_0^{(0)}(x) + \psi_0^{(1)}(x) = \psi_0^{(0)}(x) - \frac{3\sqrt{2}\alpha}{4\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{\mu\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \psi_1^{(0)}(x) - \frac{\sqrt{3}\alpha}{6\hbar\omega} \left(\frac{\hbar}{\mu\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \psi_3^{(0)}(x) \quad (4.13)$$

而利用4.7，基态能量的二阶修正为：

$$E_0^{(2)} = \sum_{m \neq 0, m \in \mathbb{N}} \frac{|V_{m0}|^2}{-m\hbar\omega} = -\alpha^2 \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega} \right)^3 \left(\frac{2}{\hbar\omega} + \frac{9}{\hbar\omega} \right) = -\frac{11\alpha^2\hbar^2}{8\mu^3\omega^4} \quad (4.14)$$

因此基态能量精确到二阶修正的表达式为：

$$E_0 \approx E_0^{(0)} + E_0^{(1)} + E_0^{(2)} = \frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{11\alpha^2\hbar^2}{8\mu^3\omega^4} \quad (4.15)$$

以上即为所求。

4.2 4b

我们已经在前文中指出，4.10对 $n < 3$ 的情形也适用。在其基础上，由4.6可以分别得到任意能级能量的一阶修正：

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = 0 \quad (4.16)$$

而由4.7可以分别得到任意能级能量的二阶修正：

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n, m \in \mathbb{N}} \frac{|V_{mn}|^2}{(n-m)\hbar\omega} \\ &= \alpha^2 \left(\frac{\hbar}{2\mu\omega} \right)^3 \left(-\frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{3\hbar\omega} - \frac{9(n+1)^3}{\hbar\omega} + \frac{9n^3}{\hbar\omega} + \frac{n(n-1)(n-2)}{3\hbar\omega} \right) \\ &= -\frac{\alpha^2\hbar^2}{8\mu^3\omega^4} (30n^2 + 30n + 11) \end{aligned} \quad (4.17)$$

因此任意能级能量精确到二阶修正的表达式为：

$$E_n \approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{\alpha^2\hbar^2}{8\mu^3\omega^4} (30n^2 + 30n + 11) \quad (4.18)$$

即为所求。

2022秋易为老师量子力学B

习题十二参考解答

宋冰睿 刘丰铨

2022年12月29日

1 第一题

假设在某四维Hilbert子空间中，体系Hamiltonian的矩阵表示为

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \rightarrow H_0 + V = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & a & d & 0 \\ a & 0 & b & 0 \\ d & b & 0 & c \\ 0 & 0 & c & 0 \end{pmatrix}$$

其中 a, b, c, d 均为实数小量（设它们同量级）。求体系所有能量本征值（精确到二阶小量）。

观察 H_0 ，我们发现两本征值 E_1 和 E_2 均为双重简并。此时当然可以采用简并微扰论进行处理，但更直观的方法是通过对 V 的块对角化操作将其转化为非简并情形。

设题述矩阵表示是在正交完备基 $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle\}$ 下写出的，则 E_1 和 E_2 各自简并子空间 \mathcal{H}_1 和 \mathcal{H}_2 的基分别是 $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ 和 $\{|3\rangle, |4\rangle\}$ 。下面，我们分别在 \mathcal{H}_1 和 \mathcal{H}_2 内对微扰项 \hat{V} 进行对角化。

- 对 $V_{\mathcal{H}_1} = \begin{pmatrix} 0 & a \\ a & 0 \end{pmatrix}$ 作对角化，不难得到本征值和本征矢

$$\begin{cases} a \rightarrow |1'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \\ -a \rightarrow |2'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle) \end{cases} \quad (1.1)$$

- 对 $V_{\mathcal{H}_2} = \begin{pmatrix} 0 & c \\ c & 0 \end{pmatrix}$ 作对角化，同理得到本征值和本征矢

$$\begin{cases} c \rightarrow |3'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|3\rangle + |4\rangle) \\ -c \rightarrow |4'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|3\rangle - |4\rangle) \end{cases} \quad (1.2)$$

因此, \hat{V} 在 $\{|1'\rangle, |2'\rangle, |3'\rangle, |4'\rangle\}$ 这组基下的矩阵表示可写为

$$V' = \begin{pmatrix} a & 0 & V'_{13} & V'_{14} \\ 0 & -a & V'_{23} & V'_{24} \\ V'_{31} & V'_{32} & c & 0 \\ V'_{41} & V'_{42} & 0 & -c \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

由 \hat{V} 的Hermite性我们知道 $V'_{ij} = V'^*_{ji}$, 可只考虑右上角的四个矩阵元, 即*i* = 1, 2; *j* = 3, 4. 有:

$$\begin{cases} V'_{13} = \langle 1' | \hat{V} | 3' \rangle = \frac{1}{2} (\langle 1 | + \langle 2 |) \hat{V} (|3\rangle + |4\rangle) = \frac{d+b}{2} \\ V'_{23} = \langle 2' | \hat{V} | 3' \rangle = \frac{1}{2} (\langle 1 | - \langle 2 |) \hat{V} (|3\rangle + |4\rangle) = \frac{d-b}{2} \\ V'_{14} = \langle 1' | \hat{V} | 4' \rangle = \frac{1}{2} (\langle 1 | + \langle 2 |) \hat{V} (|3\rangle - |4\rangle) = \frac{d+b}{2} \\ V'_{24} = \langle 2' | \hat{V} | 4' \rangle = \frac{1}{2} (\langle 1 | - \langle 2 |) \hat{V} (|3\rangle - |4\rangle) = \frac{d-b}{2} \end{cases} \quad (1.4)$$

故体系Hamiltonian在新基下的矩阵表示是

$$\begin{aligned} H' = H_0 + V' &= \begin{pmatrix} E_1 + a & 0 & \frac{d+b}{2} & \frac{d+b}{2} \\ 0 & E_1 - a & \frac{d-b}{2} & \frac{d-b}{2} \\ \frac{d+b}{2} & \frac{d-b}{2} & E_2 + c & 0 \\ \frac{d+b}{2} & \frac{d-b}{2} & 0 & E_2 - c \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} E_1 + a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_1 - a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_2 + c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_2 - c \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{d+b}{2} & \frac{d+b}{2} \\ 0 & 0 & \frac{d-b}{2} & \frac{d-b}{2} \\ \frac{d+b}{2} & \frac{d-b}{2} & 0 & 0 \\ \frac{d+b}{2} & \frac{d-b}{2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \triangleq H''_0 + V'' \end{aligned} \quad (1.5)$$

若形象地视 V'' 为对 H''_0 的微扰, 则可利用非简并微扰论直接给出精确至二阶修正的本征能量

$$\begin{cases} \varepsilon_1^{\text{II}} = E_1 + a + \frac{(d+b)^2/4}{(E_1+a)-(E_2+c)} + \frac{(d+b)^2/4}{(E_1+a)-(E_2-c)} \approx E_1 + a + \frac{(d+b)^2}{2(E_1-E_2)} \\ \varepsilon_2^{\text{II}} = E_1 - a + \frac{(d-b)^2/4}{(E_1-a)-(E_2+c)} + \frac{(d-b)^2/4}{(E_1-a)-(E_2-c)} \approx E_1 - a + \frac{(d-b)^2}{2(E_1-E_2)} \\ \varepsilon_3^{\text{II}} = E_2 + c + \frac{(d+b)^2/4}{(E_2+c)-(E_1+a)} + \frac{(d-b)^2/4}{(E_2+c)-(E_1-a)} \approx E_2 + c - \frac{d^2+b^2}{2(E_1-E_2)} \\ \varepsilon_4^{\text{II}} = E_2 - c + \frac{(d+b)^2/4}{(E_2-c)-(E_1+a)} + \frac{(d-b)^2/4}{(E_2-c)-(E_1-a)} \approx E_2 - c - \frac{d^2+b^2}{2(E_1-E_2)} \end{cases} \quad (1.6)$$

2 第二题

设体系Hamiltonian为 $\hat{H} = A\hat{L}^2 + B\hat{L}_z + \lambda\hat{L}_y$, 其中 $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{L}_y$ 为角动量算符及其分量, 实参数 $\lambda \ll A, B$. 试求体系能谱, 精确到二阶小量 (即精确到 λ^2 量级).

2.1 法一：非简并微扰论

依题，可记 $\hat{H}_0 = A\hat{\mathbf{L}}^2 + B\hat{L}_z$ ，微扰项 $\hat{V} = \lambda\hat{L}_y$ 。则微扰前的体系能谱为 $E_{lm}^{(0)} = Al(l+1)\hbar^2 + Bm\hbar$ 。

我们考虑 $\hat{L}_y = \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-)$ 对 \hat{H}_0 本征态 $|l, m\rangle$ 的作用情况 ($-l \leq m \leq l$)：

$$\hat{L}_y |l, m\rangle = \frac{\hbar}{2i} [\sqrt{l(l+1)-m(m+1)} |l, m+1\rangle - \sqrt{l(l+1)-m(m-1)} |l, m-1\rangle] \quad (2.1)$$

故 \hat{L}_y 的非零矩阵元有且仅有

$$\begin{cases} \langle l, m+1 | \hat{L}_y | l, m \rangle = \frac{\hbar}{2i} \sqrt{l(l+1)-m(m+1)} \\ \langle l, m-1 | \hat{L}_y | l, m \rangle = -\frac{\hbar}{2i} \sqrt{l(l+1)-m(m-1)} \end{cases} \quad (2.2)$$

其对角元均为0，即能量的一阶修正为0。

最终，我们得到精确至二阶修正的体系能谱

$$\begin{aligned} \varepsilon_{lm}^{\text{II}} &= E_{lm}^{(0)} + 0 + \frac{|\lambda \langle l, m+1 | \hat{L}_y | l, m \rangle|^2}{E_{lm}^{(0)} - E_{l,m+1}^{(0)}} + \frac{|\lambda \langle l, m-1 | \hat{L}_y | l, m \rangle|^2}{E_{lm}^{(0)} - E_{l,m-1}^{(0)}} \\ &= Al(l+1)\hbar^2 + Bm\hbar + \frac{\lambda^2\hbar^2 [l(l+1)-m(m+1)]}{-4B\hbar} + \frac{\lambda^2\hbar^2 [l(l+1)-m(m-1)]}{4B\hbar} \\ &= Al(l+1)\hbar^2 + Bm\hbar + \frac{m\hbar}{2B}\lambda^2 \end{aligned} \quad (2.3)$$

2.2 法二：Taylor展开

有心的同学可能已经发现，本体系的能谱原则上是可以精确求解的。我们只需定义 \mathbb{R}^3 空间中的单位向量

$$\mathbf{n} = \left(0, \frac{\lambda}{\sqrt{B^2 + \lambda^2}}, \frac{B}{\sqrt{B^2 + \lambda^2}} \right) \quad (2.4)$$

即可将体系 Hamiltonian 重新写为

$$\hat{H} = A\hat{\mathbf{L}}^2 + \sqrt{B^2 + \lambda^2}\hat{L}_n \quad (2.5)$$

因此，若选取 $\{\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_n\}$ 为一组新的CSCO，我们将得到体系精确的本征能量

$$E_{lm_n}^{(0)} = Al(l+1)\hbar^2 + \sqrt{B^2 + \lambda^2}m_n\hbar \quad (2.6)$$

其中 $-l \leq m_n \leq l$ 。下面，再对式中右端的第二项关于小量 λ 作 Taylor 展开：

$$\sqrt{B^2 + \lambda^2}m_n\hbar = Bm_n\hbar \sqrt{1 + \left(\frac{\lambda}{B}\right)^2} \approx Bm_n\hbar \left(1 + \frac{\lambda^2}{2B^2}\right) \quad (2.7)$$

并不失一般性地记 $m_n = m$ ，我们同样能够得到精确至二阶修正的体系能谱 2.3.

3 第三题

自旋 $1/2$ 的三维各向同性谐振子处于基态. 求在微扰 $\hat{V} = \lambda \hat{\sigma}_z \hat{x}^2$ 作用下的基态能量 (精确到二阶小量, λ 为实参数) .

微扰前, 本征能量对自旋自由度有双重简并, 即

$$\begin{cases} |n_x, n_y, n_z, \uparrow\rangle \\ |n_x, n_y, n_z, \downarrow\rangle \end{cases} \rightarrow E_{n_x, n_y, n_z}^{(0)} = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right) \hbar\omega \quad (3.1)$$

可以预见, 加入微扰项后该简并将被消除.

引入升降算符 $\{\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger\}$ 和直积符号 $|n_x, n_y, n_z, \text{spin}\rangle = |n_x, n_y, n_z\rangle \otimes |\text{spin}\rangle$, 微扰项可改写为

$$\hat{V} = \lambda \hat{x}^2 \otimes \hat{\sigma}_z = \lambda \frac{\hbar}{2m\omega} \left[\hat{a}_x^2 + (\hat{a}_x^\dagger)^2 + \hat{a}_x \hat{a}_x^\dagger + \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x \right] \otimes \hat{\sigma}_z \triangleq \frac{\lambda \hbar}{2m\omega} \hat{A} \otimes \hat{\sigma}_z \quad (3.2)$$

基态的量子数 $n_x = n_y = n_z = 0$, 因而不难得到 $\hat{A} \otimes \hat{\sigma}_z$ 对零级基态的作用效果:

$$\begin{cases} \hat{A} \otimes \hat{\sigma}_z |000 \uparrow\rangle = |000 \uparrow\rangle + \sqrt{2} |200 \uparrow\rangle \\ \hat{A} \otimes \hat{\sigma}_z |000 \downarrow\rangle = -|000 \downarrow\rangle - \sqrt{2} |200 \downarrow\rangle \end{cases} \quad (3.3)$$

类似于课上例题, 对基态而言, 有用的非零 $\hat{A} \otimes \hat{\sigma}_z$ 矩阵元仅有

$$\begin{cases} \langle 200 \uparrow | \hat{A} \otimes \hat{\sigma}_z | 000 \uparrow \rangle = \sqrt{2} \\ \langle 000 \uparrow | \hat{A} \otimes \hat{\sigma}_z | 000 \uparrow \rangle = 1 \\ \langle 200 \downarrow | \hat{A} \otimes \hat{\sigma}_z | 000 \downarrow \rangle = -\sqrt{2} \\ \langle 000 \downarrow | \hat{A} \otimes \hat{\sigma}_z | 000 \downarrow \rangle = -1 \end{cases} \quad (3.4)$$

由于本体系存在简并, 因此将上述结果以矩阵表示可能更加形象:

$\hat{V} / \frac{\lambda \hbar}{2m\omega}$	000 \uparrow	000 \downarrow	200 \uparrow	200 \downarrow
000 \uparrow	1		$\sqrt{2}$	
000 \downarrow		-1		$-\sqrt{2}$
200 \uparrow	$\sqrt{2}$		\times	\times
200 \downarrow		$-\sqrt{2}$	\times	\times

最终, 我们得到精确至二阶修正的基态能量

$$\begin{cases} \varepsilon_{000\uparrow}^{\text{II}} = E_{000}^{(0)} + \langle 000 \uparrow | \hat{V} | 000 \uparrow \rangle + \frac{|\langle 200 \uparrow | \hat{V} | 000 \uparrow \rangle|^2}{E_{000}^{(0)} - E_{200}^{(0)}} = \frac{3}{2} \hbar\omega + \frac{\hbar}{2m\omega} \lambda - \frac{\hbar}{4m^2\omega^3} \lambda^2 \\ \varepsilon_{000\downarrow}^{\text{II}} = E_{000}^{(0)} + \langle 000 \downarrow | \hat{V} | 000 \downarrow \rangle + \frac{|\langle 200 \downarrow | \hat{V} | 000 \downarrow \rangle|^2}{E_{000}^{(0)} - E_{200}^{(0)}} = \frac{3}{2} \hbar\omega - \frac{\hbar}{2m\omega} \lambda - \frac{\hbar}{4m^2\omega^3} \lambda^2 \end{cases} \quad (3.5)$$

需要注意，不少同学写出的矩阵表示形式是

		000 \uparrow	000 \downarrow	200 \uparrow	200 \downarrow
		000 \uparrow	1	$\sqrt{2}$	
		000 \downarrow	1	$\sqrt{2}$	
\hat{V}	$\frac{\lambda\hbar}{2m\omega}$	200 \uparrow	$\sqrt{2}$	\times	\times
200 \downarrow		$\sqrt{2}$	\times	\times	

是因为将两自旋态 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ 选取为了 $\hat{\sigma}_x$ 的本征态. 该法不如取为 $\hat{\sigma}_z$ 的本征态简洁. 并且, 我们将看到写出第二种矩阵表示后还需将其对角化, 得到的结果正是第一个矩阵, 因而并不需舍近求远.

2022 秋易为老师量子力学 B

习题十三参考解答

刘丰铨 宋冰睿

2022 年 12 月 29 日

1 第 1 题

对于一维谐振子，可取基态变分波函数为：

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right), & |x| < \frac{a}{2} \\ 0, & |x| \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

其中 a 为变分参数。尝试用变分法求解基态能量，并与精确值比较。

解：首先，我们应将题给波函数归一化。不妨设 A 为正实数，由：

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) dx \\ &= A^2 \int_0^{+\frac{a}{2}} \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right] dx \\ &= A^2 \left(\frac{a}{2} + 0 \right) = \frac{A^2 a}{2} \end{aligned} \tag{1.1}$$

有：

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}} \tag{1.2}$$

同时，我们知道，一维谐振子的 Hamiltonian 算符为：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 \tag{1.3}$$

我们将其中 ω 视为已知。由此，利用第七次作业第 2 题的论述，记题给波函数所描述的态为 $|\psi\rangle$ ，我们有：

$$\langle x | \hat{H} | \psi \rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) \tag{1.4}$$

因而体系处于题给态时的能量期望值可表达为（注意：求导过程中可能得到 δ 函数）：

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi | x \rangle \langle x | \hat{H} | \psi \rangle dx \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \psi(x) dx \\
&= A^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \left\{ \frac{\pi \hbar^2}{2ma} \left[\frac{\pi}{a} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \delta\left(x + \frac{a}{2}\right) - \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \right] + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right\} dx \\
&= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \left\{ \frac{\pi \hbar^2}{2ma} \left[\frac{\pi}{a} \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \cos\left(-\frac{\pi}{2}\right) \delta\left(x + \frac{a}{2}\right) - \cos\left(\frac{\pi}{2}\right) \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \right] + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right\} dx \\
&= \frac{2}{a} \int_{-\frac{a}{2}}^{+\frac{a}{2}} \left[\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \right] dx \\
&= \frac{2}{a} \int_0^{\frac{a}{2}} \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right) \left[1 + \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right] dx \\
&= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{m \omega^2 a^2}{24} - \frac{m \omega^2 a^2}{4\pi^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{m \omega^2 a^2}{24\pi^2} (\pi^2 - 6)
\end{aligned} \tag{1.5}$$

其中最后一步使用了分部积分。因而能量期望值对 a 的导数为：

$$\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial a} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^3} + \frac{m \omega^2 a}{12\pi^2} (\pi^2 - 6) \tag{1.6}$$

令之为零，有唯一满足题给条件的解（记之为 a_0 ）：

$$a_0 = \sqrt[4]{\frac{12\pi^4 \hbar^2}{(\pi^2 - 6)m^2 \omega^2}} = \pi \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sqrt[4]{\frac{12}{\pi^2 - 6}} \tag{1.7}$$

考虑到当 $a \rightarrow +\infty$ 和 $a \rightarrow 0$ 时能量期望值均趋于无穷，有 $a = a_0$ 时能量期望值取得极小值。将上式代回1.5，有：

$$\langle E \rangle_{\min} = \frac{\hbar\omega}{2} \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12}} + \frac{\hbar\omega}{2} \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12}} = \hbar\omega \sqrt{\frac{\pi^2 - 6}{12}} \approx 0.57\hbar\omega \tag{1.8}$$

即为所求。结果大于精确值 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ ，这在我们的意料之中。

2 第2题

处于基态的一维谐振子在 $t \geq 0$ 时受到微扰：

$$\hat{V}(t) = V e^{-at} \hat{x}$$

其中 V 和 a 均为正常数。利用一阶含时微扰论，求解 $t \rightarrow +\infty$ 时体系处于第一激发态的概率。

解：记 t 时刻系统处在态 $|\psi(t)\rangle$ ，并记谐振子体系基态为 $|0\rangle = |\psi(0)\rangle$ ，第一激发态为 $|1\rangle$ ，谐振子角频率 ω 视为已知，那么一阶含时微扰论给出：

$$\langle 1 | \psi(t) \rangle = \langle 1 | 0 \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle 1 | \hat{V}(\tau) | 0 \rangle e^{i\omega_0 \tau} d\tau = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle 1 | \hat{V}(\tau) | 0 \rangle e^{i\omega \tau} d\tau \tag{2.1}$$

其中已利用约定：

$$\omega_{mn} = \frac{(E_m - E_n)}{\hbar} = (m - n) \omega \quad (2.2)$$

接下来计算微扰算符的矩阵元 $\langle 1 | \hat{V}(t) | 0 \rangle$. 注意到:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (2.3)$$

并利用升降算符 \hat{a}^\dagger, \hat{a} 的性质, 有:

$$\langle 1 | \hat{V}(t) | 0 \rangle = V e^{-at} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle 1 | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | 0 \rangle = V e^{-at} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle 1 | 1 \rangle = V e^{-at} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad (2.4)$$

代入2.1并计算其模平方, 可以得到 t 时刻体系处于第一激发态的概率:

$$\begin{aligned} P_1(t) &= |\langle 1 | \psi(t) \rangle|^2 = \left| -iV \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \int_0^t e^{-a\tau} e^{i\omega\tau} d\tau \right|^2 \\ &= \left| -\frac{iV}{a - i\omega} \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} (1 - e^{-at} e^{i\omega t}) \right|^2 \end{aligned} \quad (2.5)$$

当 $t \rightarrow +\infty$ 时, 由于 a 为正数, 圆括号内第二项为零, 故:

$$P_1(t \rightarrow +\infty) = \left| -\frac{iV}{a - i\omega} \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \right|^2 = \frac{V^2}{2m\hbar\omega(a^2 + \omega^2)} \quad (2.6)$$

即为所求.

3 第3题

某自旋为 $\frac{1}{2}$ 的粒子在磁场中的 Hamiltonian 为:

$$\hat{H} = -\mu [B_0 \hat{\sigma}_z + B_1 \cos(2\omega_0 t) \hat{\sigma}_x - B_1 \sin(2\omega_0 t) \hat{\sigma}_y]$$

其中 $\omega_0 = \frac{\mu B_0}{\hbar}$ 为 Larmor 频率. 设 $t = 0$ 时粒子处于算符 \hat{S}_z 本征值为 $\frac{\hbar}{2}$ 的本征态 $|\uparrow\rangle$.

- (a) 利用一阶含时微扰论求在时刻 t 粒子处于算符 \hat{S}_z 本征值为 $-\frac{\hbar}{2}$ 的本征态 $|\downarrow\rangle$ 的概率.
- (b) 求上一问题的精确解.

解: 在接下来的解答中, 我们取:

$$\hat{H}_0 = -\mu B_0 \hat{\sigma}_z \quad (3.1)$$

$$\hat{V}(t) = -\mu [B_1 \cos(2\omega_0 t) \hat{\sigma}_x - B_1 \sin(2\omega_0 t) \hat{\sigma}_y] \quad (3.2)$$

以便使用含时微扰论程式. 利用 Pauli 算符的基本性质, 我们有 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 分别对应的零级本征能量:

$$E_\uparrow = -\mu B_0 \quad (3.3)$$

$$E_\downarrow = \mu B_0 \quad (3.4)$$

由此:

$$\omega_{\downarrow\uparrow} = \frac{E_{\downarrow} - E_{\uparrow}}{\hbar} = \frac{2\mu B_0}{\hbar} = 2\omega_0 \quad (3.5)$$

3.1 3a

记 t 时刻系统处在态 $|\psi(t)\rangle$, 则 $|\psi(0)\rangle = |\uparrow\rangle$. 那么一阶含时微扰论给出:

$$\langle \downarrow | \psi(t) \rangle = \langle \downarrow | \uparrow \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle \downarrow | \hat{V}(\tau) | \uparrow \rangle e^{i\omega_{\downarrow\uparrow}\tau} d\tau = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle \downarrow | \hat{V}(\tau) | \uparrow \rangle e^{2i\omega_0\tau} d\tau \quad (3.6)$$

接下来计算微扰算符的矩阵元 $\langle \downarrow | \hat{V}(t) | \uparrow \rangle$. 利用:

$$\begin{cases} \hat{\sigma}_x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \\ \hat{\sigma}_y |\uparrow\rangle = i|\downarrow\rangle \end{cases} \quad (3.7)$$

有:

$$\begin{aligned} \langle \downarrow | \hat{V}(t) | \uparrow \rangle &= \langle \downarrow | -\mu [B_1 \cos(2\omega_0 t) \hat{\sigma}_x - B_1 \sin(2\omega_0 t) \hat{\sigma}_y] | \uparrow \rangle \\ &= -\mu B_1 [\langle \downarrow | \cos(2\omega_0 t) | \downarrow \rangle - \langle \downarrow | i \sin(2\omega_0 t) | \downarrow \rangle] \\ &= -\mu B_1 e^{-2i\omega_0 t} = -\mu B_1 e^{2i\omega_0 t} \end{aligned} \quad (3.8)$$

将上式代入3.6并计算其模平方, 可以得到 t 时刻体系处于 $|\downarrow\rangle$ 的概率:

$$P_{\downarrow, \text{estimated}} = |\langle \downarrow | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \frac{i}{\hbar} \int_0^t \mu B_1 d\tau \right|^2 = \frac{\mu^2 B_1^2 t^2}{\hbar^2} \quad (3.9)$$

即为所求.

3.2 3b

依题意, 要求出精确解, 我们需要求解粒子随时间的演化. 现在, 由于 Hamiltonian 时变且不同时刻的 Hamiltonian 算符不对易, 我们已经难以用时间演化算符的形式对粒子的演化进行描述. 因此, 我们回归到 Schrödinger 方程, 考虑:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (3.10)$$

利用 Pauli 算符在基 $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ 下的矩阵表示:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

我们有算符 \hat{H} 的矩阵表示:

$$H = -\mu \left[B_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + B_1 \cos(2\omega_0 t) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - B_1 \sin(2\omega_0 t) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] = -\mu \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{2i\omega_0 t} \\ B_1 e^{-2i\omega_0 t} & -B_0 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

并记 $|\psi(t)\rangle$ 的矩阵表示为:

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} c_{\uparrow} \\ c_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

那么由3.10可以得到以下表达式:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_{\uparrow} \\ c_{\downarrow} \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{2i\omega_0 t} \\ B_1 e^{-2i\omega_0 t} & -B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\uparrow} \\ c_{\downarrow} \end{pmatrix} = -\mu \begin{pmatrix} B_0 c_{\uparrow} + B_1 e^{2i\omega_0 t} c_{\downarrow} \\ B_1 e^{-2i\omega_0 t} c_{\uparrow} - B_0 c_{\downarrow} \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

记 $\omega_1 = \frac{\mu B_1}{\hbar}$, 则上式可化简为如下二元耦合的一阶偏微分方程 (注意: 这里对时间的偏导数和全导数没有实质区别):

$$\begin{cases} \frac{\partial c_{\uparrow}}{\partial t} = i\omega_0 c_{\uparrow} + i\omega_1 e^{2i\omega_0 t} c_{\downarrow} \\ \frac{\partial c_{\downarrow}}{\partial t} = i\omega_1 e^{-2i\omega_0 t} c_{\uparrow} - i\omega_0 c_{\downarrow} \end{cases} \quad (3.15)$$

方程本身不容易求解. 虽然我们难以通过变换将方程解耦, 但我们知道, 倘若能够让第一式和第二式中分别仅含 c_{\downarrow} 和 c_{\uparrow} , 方程也将变得易于求解. 为此, 我们考虑做如下处理:

$$\begin{cases} c_{\uparrow} = e^{i\omega_0 t} \tilde{c}_{\uparrow} \\ c_{\downarrow} = e^{-i\omega_0 t} \tilde{c}_{\downarrow} \end{cases} \quad (3.16)$$

这实质上相当于在相互作用绘景下考虑问题. 代入前一式中, 我们有:

$$\begin{cases} e^{i\omega_0 t} \frac{\partial \tilde{c}_{\uparrow}}{\partial t} + i\omega_0 e^{i\omega_0 t} \tilde{c}_{\uparrow} = \frac{\partial c_{\uparrow}}{\partial t} = i\omega_0 e^{i\omega_0 t} \tilde{c}_{\uparrow} + i\omega_1 e^{i\omega_0 t} \tilde{c}_{\downarrow} \\ e^{-i\omega_0 t} \frac{\partial \tilde{c}_{\downarrow}}{\partial t} - i\omega_0 e^{-i\omega_0 t} \tilde{c}_{\downarrow} = \frac{\partial c_{\downarrow}}{\partial t} = i\omega_1 e^{-i\omega_0 t} \tilde{c}_{\uparrow} - i\omega_0 e^{-i\omega_0 t} \tilde{c}_{\downarrow} \end{cases} \quad (3.17)$$

整理得:

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{c}_{\uparrow}}{\partial t} = i\omega_1 \tilde{c}_{\downarrow} \\ \frac{\partial \tilde{c}_{\downarrow}}{\partial t} = i\omega_1 \tilde{c}_{\uparrow} \end{cases} \quad (3.18)$$

将上示方程组中第一式两端对时间求偏导数, 并将第二式代入, 得到:

$$\frac{\partial^2 \tilde{c}_{\uparrow}}{\partial t^2} = -\omega_1^2 \tilde{c}_{\uparrow} \quad (3.19)$$

方程的通解为:

$$\tilde{c}_{\uparrow} = A e^{i\omega_1 t} + B e^{-i\omega_1 t} \quad (3.20)$$

利用初值条件 $\tilde{c}_{\uparrow}(t=0) = 1$ 和 $\frac{\partial \tilde{c}_{\uparrow}}{\partial t}(t=0) = i\omega_1 \tilde{c}_{\downarrow}(t=0) = 0$, 可以得到:

$$\begin{cases} A + B = 1 \\ i\omega_1(A - B) = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A = \frac{1}{2} \\ B = \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3.21)$$

代回前一式, 再代入3.18, 可以得到 \tilde{c} 的表达式:

$$\begin{cases} \tilde{c}_{\uparrow} = \frac{1}{2} e^{i\omega_1 t} + \frac{1}{2} e^{-i\omega_1 t} = \cos(\omega_1 t) \\ \tilde{c}_{\downarrow} = \frac{1}{2} e^{i\omega_1 t} - \frac{1}{2} e^{-i\omega_1 t} = i \sin(\omega_1 t) \end{cases} \quad (3.22)$$

根据3.16, 我们知道 $|c| = |\tilde{c}|$, 因此在时刻 t 粒子处于 $|\downarrow\rangle$ 的概率为:

$$P_{\downarrow, \text{precise}} = |\tilde{c}_\downarrow|^2 = |\mathrm{i} \sin(\omega_1 t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\mu B_1 t}{\hbar}\right) \quad (3.23)$$

即为所求. 可见, 当 B_1 足够小时, 精确解与一阶微扰解吻合得相当好, 这事实上也是我们将算符 \hat{V} 视作微扰的先决条件. 然而, 倘若 B_1 较大, 一阶微扰所得解将大大偏离精确解, 这也在我们的意料之中.

实际上, 本题和第三次习题课讲义的第3道补充习题非常相似, 习题课讲义上提供了另一种解决的思路, 同学们可以考虑查阅.

注: 本题所描述的, 在一个大直流磁场的垂直方向加入小交流磁场的处理, 是核磁共振 (NMR, Nuclear Magnetic Resonance) 的基本实现手段. 相应地, 在生物医学工程中, 有为人们所熟知的核磁共振成像 (MRI, Magnetic Resonance Imaging) 技术. 它首先利用频率等于 Larmor 频率的射频小交流磁场对生物组织内的粒子 (一般的成像对象是氢核, 即质子) 进行激发, 然后撤去交流小磁场. 此后, 由于质子磁矩绕 z 轴进动, 质子将继续发射 Larmor 频率的电磁场, 基于探测得到的电磁场的强度和相位便可重建质子的密度分布, 从而实现成像.

PART II

习题课讲义

2022 秋量子力学 B

第一次习题课讲义

课程主讲老师：易为 教授

助教：刘丰铨，宋冰睿

2022 年 10 月 16 日

1 往周习题完成情况总结

总体上看，大家的作业上交及时、完成质量高，但仍有部分细节问题值得额外关注：

- 部分同学不会使用或者不能熟练使用 Einstein 求和约定，如对于角动量算符的平方 $\hat{\mathbf{L}}^2$ ，不少同学宁愿将其写作 $(\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2)$ 的形式，也不利用 $\hat{L}_\alpha \hat{L}_\alpha$ 进行表示。对易子的计算贯穿量子力学课程的学习，同学们倘若能够熟练运用 Einstein 求和约定，或许能够一定程度上降低计算的复杂程度并提高计算的正确率。
- 不少同学对常见的对易子性质的使用不够得心应手，对一些对易关系也不够熟悉。最基本地，位置算符和动量算符的对易关系、角动量算符分量之间的对易关系一定要牢记于心；同时，作业中出现过的较为典型的对易关系（如第 3 次作业第 2、3 题）也建议大家多加熟悉（不需要会背，但应当能够熟练推导）。此外，这里我们再补充一个常用的对易关系。根据角动量算符与转动变换之间的联系，对于三维空间中任意的矢量算符 $\hat{\mathbf{A}}$ ，有：

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{A}_\beta] = i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{A}_\gamma \quad (1.1)$$

注意：三维空间中的位置矢量算符 $\hat{\mathbf{x}}$ 和动量矢量算符 $\hat{\mathbf{p}}$ 皆适用该结论。由此出发，可以快速证明：

$$[\hat{L}_\alpha, \hat{\mathbf{p}}^2] = 0, \quad \alpha = x, y, z \quad (1.2)$$

大家不妨一试。

- 请大家务必熟悉利用对易子化简表达式的技巧。最一般地，倘若表达式 $\hat{A}\hat{B}$ 不易处理，但表达式 $\hat{B}\hat{A}$ 却是我们希望得到的，而对易子 $[\hat{A}, \hat{B}]$ 又已知，我们即可以利用

$$\hat{A}\hat{B} = [\hat{A}, \hat{B}] + \hat{B}\hat{A} \quad (1.3)$$

对表达式进行化简。这一处理方法在第 3 次作业第 4 题和第 4 次作业第 6 题中均有使用，今后还将常常被应用。

另外，请大家在时间允许的情况下尽量抽空阅读作业的参考答案，我们会将批改作业过程中遇到的共性问题或者由题目引出的处理技巧一并编写进文档中。

2 自由电磁场量子化

历史上，人们较早地认识了光的波粒二象性，但电磁场能量量子化的理论支撑却在相当长的时间内处于空白。从我们现在掌握的知识来看，这是十分自然的：早期发展的非相对论量子力学（或经典量子力学）对解释光和物质的相互作用乃至任何光所参与的过程无能为力，因为后者本质上是相对论性的。在现代的理论框架中，辐射场理论属于量子电动力学的范畴。我们显然无意自讨苦吃，去讨论相对论协变性之类的问题，于是我们另辟蹊径，从经典电磁场出发，利用一次量子化程式和我们近期所学习的产生算符 \hat{a}^\dagger 和湮灭算符 \hat{a} 的性质，讨论自由空间中电磁场的量子化问题。在正式对具体问题进行分析前，我们先简单介绍一次量子化程式。

2.1 一次量子化

所谓量子化，指的便是参照系统的经典运动规律，得到其量子运动规律。一次量子化方法并没有强大的理论基础，它事实上更像是一种“约定”，其合理性以理论与实验结果的一致性为支撑。具体地，一次量子化程式如下：

(1) 写出系统的 Hamiltonian 以及它所对应的经典 Hamilton 正则方程：

$$\begin{cases} \dot{q}_\alpha(t) = \frac{\partial H(q, p)}{\partial p_\alpha} \\ \dot{p}_\alpha(t) = -\frac{\partial H(q, p)}{\partial q_\alpha} \end{cases} \quad (2.1)$$

(2) 将以上两方程中的正则坐标 $q_\alpha(t)$ 和正则动量 $p_\alpha(t)$ 视作经典系统的量子对应中的算符，亦即：

$$\begin{aligned} q_\alpha(t) &\rightarrow \hat{Q}_\alpha(t) \\ p_\alpha(t) &\rightarrow \hat{P}_\alpha(t) \end{aligned}$$

(3) 赋予算符 $\hat{Q}_\alpha(t)$ 和 $\hat{P}_\alpha(t)$ 如下对易关系：

$$\begin{cases} [\hat{Q}_\alpha(t), \hat{Q}_\beta(t)] = 0 \\ [\hat{P}_\alpha(t), \hat{P}_\beta(t)] = 0 \\ [\hat{Q}_\alpha(t), \hat{P}_\beta(t)] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}\hat{I} \end{cases} \quad (2.2)$$

(4) 写出量子系统的 Hamiltonian：

$$\hat{H} = H(\hat{Q}, \hat{P}) \quad (2.3)$$

经过以上手续，我们便可以开始对量子系统进行研究和讨论。

注：读者可能会疑惑：迄今为止在我们课堂所及的范围内，力学量似乎都是不显含时间的，而这里的新算符都与时间有关，这是否会增大问题的复杂程度？这其中是否有疏漏？两个问题的答案都是否定的。事实上，一次量子化程式给出的算符是在 Heisenberg 绘景下的算符，它随时间演化而态不随时间演化；迄今为止的课程一般在 Schrödinger 绘景下讨论问题，其中算符不含时而态随时间演化。在量子化后，我们只需要再将 $t=0$ 时刻的算符取为系统的新算符，即 $\hat{A}^S = \hat{A}(t=0)$ ，即可进入 Schrödinger 绘景。后续课程也将更系统地介绍两种绘景，届时读者也许可以从一个更清晰的角度理解此问题。

2.2 准备工作

我们知道，自由空间的电磁场满足 Maxwell 方程组：

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{array} \right. \quad (2.4)$$

规定磁矢势 \mathbf{A} ，满足

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.5)$$

并取 Coulomb 规范

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (2.6)$$

不妨取电势为零，则有：

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (2.7)$$

鉴于我们可以用磁矢势同时表示电场和磁场，我们接下来将其作为考察对象。将 2.5 和 2.7 代入 2.4 的第 4 式，并利用

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} \quad (2.8)$$

有：

$$\nabla^2 \mathbf{A} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} \quad (2.9)$$

这显然是波动方程的形式，它的通解可以自然地写作：

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int (A_{\mathbf{k}} e^{i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + A_{\mathbf{k}}^* e^{-i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}) d\mathbf{k} \quad (2.10)$$

其中 $d\mathbf{k} = dk_x dk_y dk_z$ ，表示积分对所有的矢量 \mathbf{k} 进行；同时，被积函数中互相共轭的系数的选取保证了 $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ 作为物理量的实函数性质，且有：

$$\omega_k = |\mathbf{k}| c \quad (2.11)$$

其中 c 为光速。然而，矢量 $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}$ 在处理上可能存在困难，我们希望可以将其化为分量形式，以处理我们更加熟悉的标量。显然，根据 Coulomb 规范，应当有：

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{k}} = 0 \quad (2.12)$$

因此对于每个确定的 \mathbf{k} ，都可以找到与之垂直的两个单位矢量 $e_{\mathbf{k},1}$ 和 $e_{\mathbf{k},2}$ ，满足：

$$e_{\mathbf{k},1} \times e_{\mathbf{k},2} = \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|} \quad (2.13)$$

$$e_{\mathbf{k},1} \cdot e_{\mathbf{k},2} = 0 \quad (2.14)$$

可以将它们视作极化方向，从而将 \mathbf{A}_k 展开为

$$\mathbf{A}_k = A_{k,1} \mathbf{e}_{k,1} + A_{k,2} \mathbf{e}_{k,2} \quad (2.15)$$

在此基础上，我们可以把2.10改写为

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda=1,2} \int e_{k,\lambda} (A_{k,\lambda} e^{i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + A_{k,\lambda}^* e^{-i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}) d\mathbf{k} \quad (2.16)$$

据此，我们可以分别利用2.7和2.5写出电场和磁场的表达式

$$\mathbf{E} = \sum_{\lambda=1,2} \int i\omega_k e_{k,\lambda} (-A_{k,\lambda} e^{i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + A_{k,\lambda}^* e^{-i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}) d\mathbf{k} \quad (2.17)$$

$$\mathbf{B} = \sum_{\lambda=1,2} \int i\mathbf{k} \times e_{k,\lambda} (-A_{k,\lambda} e^{i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} + A_{k,\lambda}^* e^{-i(\omega_k t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}) d\mathbf{k} \quad (2.18)$$

2.3 量子化程式

如我们在一次量子化一节所讨论的，我们的阶段性目标应是写出电磁场的 Hamiltonian. 现在，根据自由电磁场总能量的表达式，我们有：

$$H = \frac{\epsilon_0}{2} \int (\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2) d\mathbf{r} \quad (2.19)$$

计算得到（具体过程见文档末附录）：

$$H = \epsilon_0 \sum_{\lambda=1,2} \int \omega_k^2 (A_{k,\lambda} A_{k,\lambda}^* + A_{k,\lambda}^* A_{k,\lambda}) d\mathbf{k} \quad (2.20)$$

我们不妨令

$$H_{k,\lambda} = \epsilon_0 \omega_k^2 (A_{k,\lambda} A_{k,\lambda}^* + A_{k,\lambda}^* A_{k,\lambda}) \quad (2.21)$$

并对其进行考察. 不难想到，只要我们能实现 $H_{k,\lambda}$ 的量子化，我们就能够如法炮制，将程式推广到整个系统上. 虽然 $A_{k,\lambda}$ 是经典量，无需考虑与其它量相乘次序问题，但在计算过程中我们仍然保留了相乘的次序以便观察. 相信读者已经注意到，倘若将上式中的各个量用算符替代，所得的表达式将与谐振子的 Hamiltonian 算符在形式上非常相似. 然而一次量子化要求我们只能将正则坐标与正则动量变为相应的算符，注意到二者皆必须为实函数，我们现在考虑基于上式中的复数 $A_{k,\lambda}$ 和 $A_{k,\lambda}^*$ 构造实函数.

自然地，我们想到分别取出复数的实部和虚部，即：

$$\begin{cases} \xi_{k,\lambda} = \frac{1}{2} (A_{k,\lambda}^* + A_{k,\lambda}) \\ \zeta_{k,\lambda} = \frac{i}{2} (A_{k,\lambda}^* - A_{k,\lambda}) \end{cases} \quad (2.22)$$

由此可以用 $\xi_{k,\lambda}$ 和 $\zeta_{k,\lambda}$ 表示 $A_{k,\lambda}$ 和 $A_{k,\lambda}^*$ ，即：

$$\begin{cases} A_{k,\lambda} = \xi_{k,\lambda} + i\zeta_{k,\lambda} \\ A_{k,\lambda}^* = \xi_{k,\lambda} - i\zeta_{k,\lambda} \end{cases} \quad (2.23)$$

将其代回2.21，得：

$$H_{k,\lambda} = 2\epsilon_0 \omega_k^2 (\xi_{k,\lambda}^2 + \zeta_{k,\lambda}^2) \quad (2.24)$$

然而, $\xi_{k,\lambda}$ 和 $\zeta_{k,\lambda}$ 的量纲不满足正则坐标和正则动量的要求, 因此我们令

$$\begin{cases} \xi_{k,\lambda} = b_{k,\lambda} q_{k,\lambda} \\ \zeta_{k,\lambda} = c_{k,\lambda} p_{k,\lambda} \end{cases} \quad (2.25)$$

其中 $b_{k,\lambda}$ 和 $c_{k,\lambda}$ 分别为实常数, $q_{k,\lambda}$ 和 $p_{k,\lambda}$ 分别为满足条件的正则坐标和正则动量. 不妨规定

$$\begin{cases} b_{k,\lambda} = \frac{\sqrt{m}}{2\sqrt{\varepsilon_0}} \\ c_{k,\lambda} = \frac{1}{2\omega_k \sqrt{m\varepsilon_0}} \end{cases} \quad (2.26)$$

则 $H_{k,\lambda}$ 形式上将与谐振子的经典 Hamiltonian 完全一致 (在接下来的讨论中我们将发现 m 的具体取值没有影响, 这事实上也是意料之中的).

现在, 我们将 $q_{k,\lambda}$ 和 $p_{k,\lambda}$ 分别转换成算符 $\hat{Q}_{k,\lambda}$ 和 $\hat{P}_{k,\lambda}$, 并赋予对易关系:

$$\begin{cases} [\hat{Q}_{k,\lambda}(t), \hat{Q}_{k,\lambda}(t)] = 0 \\ [\hat{P}_{k,\lambda}(t), \hat{P}_{k,\lambda}(t)] = 0 \\ [\hat{Q}_{k,\lambda}(t), \hat{P}_{k',\nu}(t)] = i\hbar\delta_{k,k'}\delta_{\lambda\nu}\hat{I} \end{cases} \quad (2.27)$$

这样一来,

$$\begin{cases} \hat{\xi}_{k,\lambda} = \frac{\sqrt{m}}{2\sqrt{\varepsilon_0}} \hat{Q}_{k,\lambda} \\ \hat{\zeta}_{k,\lambda} = \frac{1}{2\omega_k \sqrt{m\varepsilon_0}} \hat{P}_{k,\lambda} \end{cases} \quad (2.28)$$

因而

$$[\hat{\xi}_{k,\lambda}, \hat{\zeta}_{k',\nu}] = i\frac{\hbar}{4\omega_k \varepsilon_0} \delta_{k,k'} \delta_{\lambda\nu} \hat{I} \quad (2.29)$$

$$\hat{A}_{k,\lambda} = \hat{\xi}_{k,\lambda} + i\hat{\zeta}_{k,\lambda} \quad (2.30)$$

$$[\hat{A}_{k,\lambda}, \hat{A}_{k',\nu}^\dagger] = -2i[\hat{\xi}_{k,\lambda}, \hat{\zeta}_{k',\nu}] = \frac{\hbar}{2\omega_k \varepsilon_0} \delta_{k,k'} \delta_{\lambda\nu} \hat{I} \quad (2.31)$$

其中量子系统中的算符 $\hat{A}_{k,\lambda}^\dagger$ 与经典系统中的 $A_{k,\lambda}^*$ 相对应. 现在, 为了利用谐振子量子系统的结论, 引入

$$\hat{a}_{k,\lambda} = \sqrt{\frac{2\omega_k \varepsilon_0}{\hbar}} \hat{A}_{k,\lambda} \quad (2.32)$$

则立即有:

$$[\hat{a}_{k,\lambda}, \hat{a}_{k',\nu}^\dagger] = \delta_{k,k'} \delta_{\lambda\nu} \hat{I} \quad (2.33)$$

这正是谐振子问题中升降算符所满足的对易关系, 也是问题的核心所在, 在谐振子的处理中我们正是从此出发, 得到了一系列结论. 因此, 我们可以把谐振子中的结论悉数应用在电磁场量子化问题上. 事实上, 将2.32代入2.21, 并利用上式, 可以得到:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{k,\lambda} &= \frac{1}{2}\hbar\omega_k (\hat{a}_{k,\lambda}\hat{a}_{k,\lambda}^\dagger + \hat{a}_{k,\lambda}^\dagger\hat{a}_{k,\lambda}) \\ &= \hbar\omega_k \left(\hat{a}_{k,\lambda}^\dagger\hat{a}_{k,\lambda} + \frac{1}{2}\hat{I} \right) = \hbar\omega_k \left(\hat{N}_{k,\lambda} + \frac{1}{2}\hat{I} \right) \end{aligned} \quad (2.34)$$

其中

$$\hat{N}_{\mathbf{k},\lambda} = \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} \quad (2.35)$$

即为波矢为 \mathbf{k} , 极化方向为 $e_{\mathbf{k},\lambda}$ 的电磁场的粒子数算符, 它的本征值方程写作

$$\hat{N}_{\mathbf{k},\lambda} |n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle = n_{\mathbf{k},\lambda} |n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle \quad (2.36)$$

而此处所说的粒子即是我们在所熟知的光子, 方程中的 n 即波矢为 \mathbf{k} , 极化方向为 $e_{\mathbf{k},\lambda}$ 的光子数, 因此它实际上比谐振子系统的粒子数具有更实在的物理意义. 显然:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger |n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle &\sim |n_{\mathbf{k},\lambda} + 1\rangle \\ \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} |n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle &\sim |n_{\mathbf{k},\lambda} - 1\rangle \end{aligned}$$

即 $\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger$ 使光子数增加 1, 而 $\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}$ 使光子数减少 1, 因此它们又被分别称为产生、湮灭算符. 最后, 我们可以利用已有结果, 对总 Hamiltonian 实施量子化, 得到:

$$\hat{H} = \sum_{\lambda=1,2} \int \hat{H}_{\mathbf{k},\lambda} d\mathbf{k} = \sum_{\lambda=1,2} \int \hbar\omega_k \left(\hat{N}_{\mathbf{k},\lambda} + \frac{1}{2} \hat{I} \right) d\mathbf{k} \quad (2.37)$$

现在, 我们已经完成了电磁场量子化的程式, 并具备了在量子力学体系中讨论电磁场作用效果 (如原子跃迁问题) 的基础.

和谐振子情形一致, 我们注意到电磁场也存在零点能. 即使所有态的光子数均为 0, 仍有:

$$H_0 = \sum_{\lambda=1,2} \int \frac{1}{2} \hbar\omega_k d\mathbf{k} = \int \hbar\omega_k d\mathbf{k} \quad (2.38)$$

为无穷大, 我们又称之为真空能. 作为一个完全由量子理论引致的结果, 它在实验上可以引起宏观的物理效果, 其中最著名的或许莫过于 Casimir 效应. 不过, 这又是另一个故事了. 倘若读者对此感兴趣, 可以考虑参看 J.J. Sakurai 和 Jim Napolitano 合著的《现代量子力学 (第二版)》7.6 节.

3 例题选讲

本部分题目来源于多本参考书，并配有参考解答。它们未必十分困难，但都一定程度上具备代表性以及较为清晰的物理图像。

1. 重要对易关系证明。

在 n 维空间中，请证明：

$$[\hat{x}_\alpha, G(\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_n)] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial \hat{p}_\alpha} \quad (3.1)$$

$$[\hat{p}_\alpha, F(\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_n)] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial \hat{x}_\alpha} \quad (3.2)$$

其中函数 F 和 G 均可以展开为其变量的幂级数形式。

解：作为例子，我们只证明第 1 式，而将第 2 式留给读者。依题意，有：

$$G(\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_n) = \sum_{k_1, \dots, k_n} \left(c_{k_1, \dots, k_n} \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right) \quad (3.3)$$

而应用基本对易关系，有：

$$\left[\hat{x}_\alpha, \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right] = \hat{p}_1^{k_1} \cdots \hat{p}_{\alpha-1}^{k_{\alpha-1}} [\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha^{k_\alpha}] \hat{p}_{\alpha+1}^{k_{\alpha+1}} \cdots \hat{p}_n^{k_n} \quad (3.4)$$

引用第 3 次作业第 2 题结论，即

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha^{k_\alpha}] = k_\alpha [\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha] \hat{p}_\alpha^{k_\alpha-1} = i\hbar k_\alpha \hat{p}_\alpha^{k_\alpha-1} \quad (3.5)$$

不难得出：

$$\left[\hat{x}_\alpha, \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right] = i\hbar k_\alpha \hat{p}_1^{k_1} \cdots \hat{p}_{\alpha-1}^{k_{\alpha-1}} \hat{p}_\alpha^{k_\alpha-1} \hat{p}_{\alpha+1}^{k_{\alpha+1}} \cdots \hat{p}_n^{k_n} = i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{p}_\alpha} \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \quad (3.6)$$

因而

$$\begin{aligned} [\hat{x}_\alpha, G(\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_n)] &= \sum_{k_1, \dots, k_n} \left(c_{k_1, \dots, k_n} \left[\hat{x}_\alpha, \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right] \right) \\ &= i\hbar \sum_{k_1, \dots, k_n} \left(c_{k_1, \dots, k_n} \frac{\partial}{\partial \hat{p}_\alpha} \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial \hat{p}_\alpha} \sum_{k_1, \dots, k_n} \left(c_{k_1, \dots, k_n} \prod_{\beta=1}^n \hat{p}_\beta^{k_\beta} \right) \\ &= i\hbar \frac{\partial G}{\partial \hat{p}_\alpha} \end{aligned} \quad (3.7)$$

即为欲证结论。

2. 利用对易关系计算力学量平均值。

设某量子力学体系由 Hamiltonian 算符

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}) \quad (3.8)$$

描写, 请计算对易关系

$$[\hat{r} \cdot \hat{p}, \hat{H}]$$

并据此证明: 对于任意 Hamiltonian 算符的本征态 $|\psi_H\rangle$, 有:

$$\left\langle \frac{\hat{p}^2}{m} \right\rangle_{\psi_H} = \langle \hat{r} \cdot \nabla V(\hat{r}) \rangle_{\psi_H} \quad (3.9)$$

解: 依题意, 利用 Einstein 求和约定, 有:

$$\begin{aligned} [\hat{r} \cdot \hat{p}, \hat{H}] &= \frac{1}{2m} [\hat{r}_\alpha \hat{p}_\alpha, \hat{p}_\beta \hat{p}_\beta] + [\hat{r}_\alpha \hat{p}_\alpha, V(\hat{r})] \\ &= \frac{1}{2m} [\hat{r}_\alpha, \hat{p}_\beta \hat{p}_\beta] \hat{p}_\alpha + \hat{r}_\alpha [\hat{p}_\alpha, V(\hat{r})] \\ &= i \frac{\hbar}{m} \delta_{\alpha\beta} \hat{p}_\beta \hat{p}_\alpha - i \hbar \hat{r}_\alpha \frac{\partial V(\hat{r})}{\partial \hat{r}_\alpha} \\ &= i \hbar \left(\frac{\hat{p}^2}{m} - \hat{r} \cdot \nabla V(\hat{r}) \right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

不难看到, 倘若对易子 $[\hat{r} \cdot \hat{p}, \hat{H}]$ 在 $|\psi_H\rangle$ 的平均值为零, 即可证得结论. 如果上述条件满足, 我们也称力学量 $\hat{r} \cdot \hat{p}$ 为守恒量 (具体的原因将在后续课程中提及, 我们在这里只强调对易子与守恒量、对称性间的联系). 我们假设:

$$\hat{H}|\psi_H\rangle = E_\psi |\psi_H\rangle \quad (3.11)$$

而考虑到:

$$\begin{aligned} \langle \psi_H | [\hat{r} \cdot \hat{p}, \hat{H}] | \psi_H \rangle &= \langle \psi_H | (\hat{r} \cdot \hat{p}) \hat{H} | \psi_H \rangle - \langle \psi_H | \hat{H} (\hat{r} \cdot \hat{p}) | \psi_H \rangle \\ &= E_\psi \langle \psi_H | (\hat{r} \cdot \hat{p}) | \psi_H \rangle - E_\psi \langle \psi_H | (\hat{r} \cdot \hat{p}) | \psi_H \rangle = 0 \end{aligned} \quad (3.12)$$

其中利用了 Hamiltonian 算符的 Hermitian 性质, 结合对易子的表达式, 立即得到:

$$i\hbar \left\langle \psi_H \left| \left(\frac{\hat{p}^2}{m} - \hat{r} \cdot \nabla V(\hat{r}) \right) \right| \psi_H \right\rangle = \left\langle \psi_H | [\hat{r} \cdot \hat{p}, \hat{H}] | \psi_H \right\rangle = 0 \quad (3.13)$$

亦即

$$\left\langle \psi_H \left| \frac{\hat{p}^2}{m} \right| \psi_H \right\rangle = \langle \psi_H | \hat{r} \cdot \nabla V(\hat{r}) | \psi_H \rangle \quad (3.14)$$

即为欲证结论. 它又被称为量子力学版本的 Virial 定理, 在有心力场相关问题中有广泛的应用.

3. 力学量算符的矩阵表示及对角化.

设量子力学体系中的某一力学量算符有如下的 3×3 矩阵表示:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

请找到这个力学量算符的一组归一化本征矢量以及对应的本征值, 并寻找一个使得力学量算符有具体物理含义的量子力学体系.

解: 本题本身难度较低, 但我们希望通过它展现力学量算符和矩阵表示之间的关系, 也希望能够帮助读者从线性代数角度理解寻找本征态的方法. 以下楷体字部分为对问题的讨论, 其它部分为解答过程.

首先我们必须了解，力学量算符不等于矩阵，因此我们并不能武断地把矩阵本征值和本征向量与力学量本征值和本征矢量划上等号。尽管如此，我们依然能够借助矩阵论解决力学量本征值求解的问题。下文即为对此的论证。

我们令该力学量算符为 \hat{A} ，令题给矩阵为 A ，并按照矩阵表示的定义，规定：

$$A_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \hat{A} | \beta \rangle \quad (3.15)$$

其中 $\{|\alpha\rangle\}$ 为题目所选取的一组正交归一化基：

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} \quad (3.16)$$

现在，我们希望找到另一组正交归一化矢量，满足

$$\hat{A}|a_\alpha\rangle = a_\alpha|a_\alpha\rangle \quad (3.17)$$

不妨设

$$\hat{U}|\alpha\rangle = |a_\alpha\rangle \quad (3.18)$$

对所有 α 都成立，很容易得到：

$$\hat{U} = \sum_{\alpha} |a_\alpha\rangle\langle\alpha| \quad (3.19)$$

不难验证 \hat{U} 是酉的，亦即

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = \hat{I} \quad (3.20)$$

令

$$D_{\alpha\beta} = \langle a_\alpha | \hat{A} | a_\beta \rangle = \langle \alpha | \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} | \beta \rangle \quad (3.21)$$

显然矩阵 D 是对角阵。这就是说，我们的问题本质上归结为找到一个酉变换 \hat{U} ，使得 $\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U}$ 在题目所选取的基下的矩阵表示对角化，对角元即是对应的本征值， \hat{U} 对应的矩阵表示的列向量为本征矢量在题目所选取的基下的展开系数。在矩阵论中，问题即转化为求使得矩阵 A 对角化的正交矩阵 U 以及对角矩阵的对角元，或者更简洁地，求矩阵 A 的本征值和本征向量。这是我们用矩阵论处理量子力学问题的基础。

现在我们计算。按照求矩阵本征值的程式，令：

$$\det(\lambda I - A) = 0 \quad (3.22)$$

得到久期方程：

$$\lambda(\lambda^2 - 1) = 0 \quad (3.23)$$

由是矩阵的本征值为 0 和 ± 1 ，解本征方程得到本征向量：

$$a_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad a_0 = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix}, \quad a_{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

因此, 转换回量子力学体系, 我们有: 力学量算符 \hat{A} 的本征值为 0 和 ± 1 , 对应的本征矢量可以表示为:

$$|a = +1\rangle = \frac{1}{2}|1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle \quad (3.25)$$

$$|a = 0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}|1\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}|3\rangle \quad (3.26)$$

$$|a = -1\rangle = \frac{1}{2}|1\rangle - \frac{\sqrt{2}}{2}|2\rangle + \frac{1}{2}|3\rangle \quad (3.27)$$

是为所求. 实际应用中, 倘若某粒子自旋为 1, 题述力学量算符则可视作其 z 向自旋角动量算符 \hat{S}_z .

4. 力学量算符相等的判据.

设算符 \hat{A} 和 \hat{B} 在某给定基上可用 $\mathbb{C}^n (n \in \mathbb{N})$ 上的两个矩阵来表示. 尝试证明: 若对于任意量子态 $|\psi\rangle$, 总有 $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle$, 则 $\hat{A} = \hat{B}$.

解: 欲证 \hat{A} 、 \hat{B} 相等, 只需证明其对应的 \mathbb{C}^n 上矩阵表示 (不妨记为 A 和 B) 相等, 也就是证明二者的每个矩阵元相等. 那么, 不妨令 $\hat{C} = \hat{A} - \hat{B}$, 问题即转化为证明 \hat{C} 的任意矩阵元均为 0. 更具体地, 我们选取一组正交完备基 $|e_\alpha\rangle (\alpha = 1, \dots, n)$, 那么只需在题给条件下证明 $C_{\alpha\beta} = \langle e_\alpha | \hat{C} | e_\beta \rangle = 0$.

首先, 对于 $\forall \alpha (1 \leq \alpha \leq n)$, 倘若取 $|\psi\rangle = |e_\alpha\rangle$, 由条件立即得到:

$$\langle e_\alpha | \hat{C} | e_\alpha \rangle = 0 \quad (3.28)$$

然后, 我们尝试通过构造计算矩阵元中的非对角元. 对于 $\forall \alpha, \beta (1 \leq \alpha, \beta \leq n)$, 取

$$\begin{cases} |\psi_1\rangle = |e_\alpha\rangle + |e_\beta\rangle \\ |\psi_2\rangle = |e_\alpha\rangle + i|e_\beta\rangle \end{cases} \quad (3.29)$$

则

$$\begin{cases} \langle\psi_1|\hat{C}|\psi_1\rangle = \langle e_\alpha | \hat{C} | e_\beta \rangle + \langle e_\beta | \hat{C} | e_\alpha \rangle = 0 \\ \langle\psi_2|\hat{C}|\psi_2\rangle = i\langle e_\alpha | \hat{C} | e_\beta \rangle - i\langle e_\beta | \hat{C} | e_\alpha \rangle = 0 \end{cases} \quad (3.30)$$

对比以上两式, 立即得到 $C_{\alpha\beta} = \langle e_\alpha | \hat{C} | e_\beta \rangle = 0$. 所以 $\hat{C} = 0$, 从而 $\hat{A} = \hat{B}$, 即为欲证结论.

附录

A 推导过程补遗

本节阐述由2.19推导得到2.20的过程。

依照要求，我们首先处理表达式

$$\frac{\epsilon_0}{2} \int \mathbf{E}^2 d\mathbf{r}$$

将电场的表达式2.18代入上式，得：

$$\begin{aligned} \frac{\epsilon_0}{2} \int \mathbf{E}^2 d\mathbf{r} &= \frac{\epsilon_0}{2} \int \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} d\mathbf{r} \\ &= -\frac{\epsilon_0}{2} \sum_{\lambda=1,2} \sum_{\nu=1,2} \int \int \int \omega_{k'} \omega_k \mathbf{e}_{k',\nu} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} (-A_{k',\nu} e^{i(\omega_{k'} t - k' \cdot \mathbf{r})} + A_{k',\nu}^* e^{-i(\omega_{k'} t - k' \cdot \mathbf{r})}) \\ &\quad (-A_{k,\lambda} e^{i(\omega_k t - k \cdot \mathbf{r})} + A_{k,\lambda}^* e^{-i(\omega_k t - k \cdot \mathbf{r})}) d\mathbf{r} dk dk' \\ &= \frac{\epsilon_0}{2} \sum_{\lambda=1,2} \sum_{\nu=1,2} \int \omega_k^2 [\mathbf{e}_{k,\nu} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} (A_{k,\nu} A_{k,\lambda}^* + A_{k,\nu}^* A_{k,\lambda}) - \mathbf{e}_{-k,\nu} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} (A_{-k,\nu}^* A_{k,\lambda}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,\nu} A_{k,\lambda} e^{2i\omega_k t})] dk \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

其中应用了

$$\int e^{i(k'-k) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \quad (\text{A.2})$$

在此基础上，我们不妨规定

$$\mathbf{e}_{-\mathbf{k},1} = -\mathbf{e}_{\mathbf{k},1} \quad (\text{A.3})$$

$$\mathbf{e}_{-\mathbf{k},2} = \mathbf{e}_{\mathbf{k},2} \quad (\text{A.4})$$

不难检验它们与对应的波矢仍满足右手定则，那么利用上式以及 $\mathbf{e}_{k,\lambda}$ 的正交归一性质，有：

$$\begin{aligned} &\frac{\epsilon_0}{2} \sum_{\lambda=1,2} \sum_{\nu=1,2} \int \omega_k^2 [\mathbf{e}_{k,\nu} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} (A_{k,\nu}^* A_{k,\lambda} + A_{k,\nu} A_{k,\lambda}^*) - \mathbf{e}_{-k,\nu} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} (A_{-k,\nu}^* A_{k,\lambda}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,\nu} A_{k,\lambda} e^{2i\omega_k t})] dk \\ &= \frac{\epsilon_0}{2} \sum_{\lambda=1,2} \int \omega_k^2 [(A_{k,\lambda}^* A_{k,\lambda} + A_{k,\lambda} A_{k,\lambda}^*) - \mathbf{e}_{-k,\lambda} \cdot \mathbf{e}_{k,\lambda} (A_{-k,\lambda}^* A_{k,\lambda}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,\lambda} A_{k,\lambda} e^{2i\omega_k t})] dk \\ &= \frac{\epsilon_0}{2} \int \omega_k^2 \left[\sum_{\lambda=1,2} (A_{k,\lambda}^* A_{k,\lambda} + A_{k,\lambda} A_{k,\lambda}^*) + (A_{-k,1}^* A_{k,1}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,1} A_{k,1} e^{2i\omega_k t}) - (A_{-k,2}^* A_{k,2}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,2} A_{k,2} e^{2i\omega_k t}) \right] dk \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

下面考虑对磁场的处理，它与上文高度相似。我们有：

$$\begin{aligned} &\frac{\epsilon_0}{2} c^2 \int \mathbf{B}^2 d\mathbf{r} \\ &= -\frac{\epsilon_0}{2} c^2 \sum_{\lambda=1,2} \sum_{\nu=1,2} \int \int \int (\mathbf{k}' \times \mathbf{e}_{k',\nu}) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{k,\lambda}) (-A_{k',\nu} e^{i(\omega_{k'} t - k' \cdot \mathbf{r})} + A_{k',\nu}^* e^{-i(\omega_{k'} t - k' \cdot \mathbf{r})}) \\ &\quad (-A_{k,\lambda} e^{i(\omega_k t - k \cdot \mathbf{r})} + A_{k,\lambda}^* e^{-i(\omega_k t - k \cdot \mathbf{r})}) d\mathbf{r} dk dk' \\ &= \frac{\epsilon_0}{2} c^2 \sum_{\lambda=1,2} \int [|\mathbf{k}|^2 (A_{k,\lambda} A_{k,\lambda}^* + A_{k,\lambda}^* A_{k,\lambda}) - (-\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{-k,\lambda}) \cdot (\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{k,\lambda}) (A_{-k,\lambda}^* A_{k,\lambda}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-k,\lambda} A_{k,\lambda} e^{2i\omega_k t})] dk \end{aligned}$$

$$= \frac{\varepsilon_0}{2} \int c^2 |\mathbf{k}|^2 \left[\sum_{\lambda=1,2} (A_{\mathbf{k},\lambda} A_{\mathbf{k},\lambda}^* + A_{\mathbf{k},\nu}^* A_{\mathbf{k},\lambda}) - (A_{-\mathbf{k},1}^* A_{\mathbf{k},1}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-\mathbf{k},1} A_{\mathbf{k},1} e^{2i\omega_k t}) + (A_{-\mathbf{k},2}^* A_{\mathbf{k},2}^* e^{-2i\omega_k t} + A_{-\mathbf{k},2} A_{\mathbf{k},2} e^{2i\omega_k t}) \right] d\mathbf{k} \quad (\text{A.6})$$

将上两式相加，得：

$$\frac{\varepsilon_0}{2} \int (\mathbf{E}^2 + c^2 \mathbf{B}^2) d\mathbf{r} = \varepsilon_0 \sum_{\lambda=1,2} \int \omega_k^2 (A_{\mathbf{k},\lambda} A_{\mathbf{k},\lambda}^* + A_{\mathbf{k},\nu}^* A_{\mathbf{k},\lambda}) d\mathbf{k} \quad (\text{A.7})$$

至此推导完成。

2022秋量子力学B

第二次习题课讲义

课程主讲老师：易为 教授
助教：宋冰睿，刘丰铨

2022年11月13日

目录

1	习题情况总结与期中备考指南	1
2	例题选讲	2
2.1	一维谐振子的升降算符佯谬	2
2.1.1	1a	2
2.1.2	1b	3
2.1.3	1c	3
2.2	一维晶格模型	4
2.3	任意算符的表示	6
2.4	盒中光子的测量与分辨	6
2.4.1	4a	7
2.4.2	4b	7
2.5	互相反对易但与Hamiltonian对易的力学量算符	8
2.5.1	法一	8
2.5.1.1	5a	8
2.5.1.2	5b	8
2.5.2	法二	8
2.5.2.1	5a	8
2.5.2.2	5b	9
2.6	Quantum Zeno Effect	9
2.6.1	6a	9
2.6.2	6b	10

1 习题情况总结与期中备考指南

总体上看，大家的作业上交及时、完成质量高，这是令人欣慰的。虽然习题解答已经尽可能详细，这里我们还是着重强调以下几点，以便大家有针对性地复习期中考试。

1. 对易关系计算。

尤其注意务必熟练掌握与谐振子升降算符有关的对易关系计算，如作业5题1的四个小问。对易关系计算是几乎贯穿量子力学课程的基本功之一，常见的技巧有如第一次习题课讲义中的式1.3，大家可参阅并进行巩固练习。

在此基础上，可以注意Baker-(Campbell-)Hausdorff(BCH)公式及Glauber公式的掌握。Glauber公式在作业3中已作为习题要求大家证明过，助教在参考解答中也借此机会引出了BCH公式。如有对此尚不清楚的同学，可以仔细浏览。这两个公式在对易关系表达式中常常可使计算大为简化。

2. 时间演化问题。

由于我们并不深入讨论相互作用绘景，因此只需理清Schrödinger绘景和Heisenberg绘景即可。

类比刚体转动的两种观点，我们常将前者称为主动观点，而将后者称为被动观点。在Schrödinger绘景中，态矢量随时间演化而力学量不变，类似于刚体自身转动而坐标架不动；在Heisenberg绘景中，力学量随时间演化而态矢量不变，类似于坐标架进行转动而刚体自身保持静止。两种观点下，刚体在坐标架中的运动学参数均产生变化，对应于两种绘景中均能看到时间演化给体系带来的影响。

在Schrödinger绘景中，我们常常遇到初态是一些体系能量本征态线性叠加的情况。只需明确，体系将会以保持叠加系数不变的形式让本征态分别随时间演化，基本就能把握住大多数时间演化问题的要义。

而在Heisenberg绘景中，灵活选用Heisenberg运动方程，或时间演化算符 $\hat{U}(t)$ 去求解力学量算符随时间的变化，通常是简化计算的一大法宝，如作业8题1a。

3. 表象变换问题。

该类型问题大致见于作业6，以求解矩阵本征问题为基本方法，以存在简并为主要难点。特别地，应注意表象变换矩阵中的各本征矢的排列位序问题，它们需与本征值的顺序相对应。在作业6中，我们就有不少同学因此出错。

另外，虽然老师主要使用的表象变换矩阵是 S ，但仍需要注意 S 和 U 二者的区别：一个是对基向量的变换，另一个则是对展开系数的变换。由于在作业6题2.1之参考解答中已叙述得十分详细，这里就不再赘述。

另外，请大家尽量抽空阅读作业的参考答案，我们会将批改作业过程中遇到的共性问题，及由题目引出的处理技巧一并编写于其中。

2 例题选讲

2.1 一维谐振子的升降算符佯谬

已知在 $t = 0$ 时刻，某一维谐振子的状态是

$$|\psi\rangle = \cos\alpha|0\rangle + i\sin\alpha|1\rangle$$

为便于讨论，这里采取如下处理方式：作无量纲化，令

$$\hat{x}' = \beta\hat{x}, \hat{p}' = \frac{1}{\hbar\beta}\hat{p}$$

并在以后的叙述略去撇号。式中， $\beta \triangleq \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ 。

(a) 利用升降算符

$$\begin{cases} \hat{a}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) \\ \hat{a}_0^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{p}) \end{cases}$$

求 $t > 0$ 时刻的振子位置坐标的期望值。

(b) 定义算符

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{p} - i\hat{x})$$

试证明 $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ 同样构成一组升降算符，并直接利用它们重新计算问题(a)。

(c) 观察(a)(b)中得到的结果。二者相同吗？若不同，请尝试说明原因。

首先，在 Schrödinger 绘景中我们容易给出 t 时刻的量子态

$$|\psi(t)\rangle = \cos\alpha e^{-i\omega t/2}|0\rangle + i\sin\alpha e^{-i3\omega t/2}|1\rangle \quad (2.1)$$

2.1.1 1a

利用

$$\hat{x} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger) \quad (2.2)$$

可以直接计算 t 时刻振子位置坐标的期望值：

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle \psi(t) \left| (\hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger) \right| \psi(t) \right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos\alpha e^{i\omega t/2} \langle 0 | - i\sin\alpha e^{i3\omega t/2} \langle 1 |) (\hat{a}_0 + \hat{a}_0^\dagger) (\cos\alpha e^{-i\omega t/2} |0\rangle + i\sin\alpha e^{-i3\omega t/2} |1\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos\alpha e^{i\omega t/2} \langle 0 | - i\sin\alpha e^{i3\omega t/2} \langle 1 |) (i\sin\alpha e^{-i3\omega t/2} |0\rangle + \cos\alpha e^{-i\omega t/2} |1\rangle + \sqrt{2}i\sin\alpha e^{-i3\omega t/2} |2\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} i\sin\alpha \cos\alpha (e^{-i\omega t} - e^{i\omega t}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sin 2\alpha \sin \omega t \end{aligned} \quad (2.3)$$

2.1.2 1b

不难看出

$$\hat{a} = -i\hat{a}_0, \hat{a}^\dagger = i\hat{a}_0^\dagger \quad (2.4)$$

故

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = [-i\hat{a}_0, i\hat{a}_0^\dagger] = [\hat{a}_0, \hat{a}_0^\dagger] = \mathbb{1} \quad (2.5)$$

因此, $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ 也是一组升降算符.

下面考虑问题(a). 根据式2.2,

$$\hat{x} = \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (2.6)$$

因此依题, 直接计算 t 时刻振子位置坐标的期望值

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle(t) &= \frac{i}{\sqrt{2}} \langle \psi(t) | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}} (\cos \alpha e^{i\omega t/2} \langle 0 | - i \sin \alpha e^{i3\omega t/2} \langle 1 |) (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) (\cos \alpha e^{-i\omega t/2} | 0 \rangle + i \sin \alpha e^{-i3\omega t/2} | 1 \rangle) \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}} (\cos \alpha e^{i\omega t/2} \langle 0 | - i \sin \alpha e^{i3\omega t/2} \langle 1 |) (i \sin \alpha e^{-i3\omega t/2} | 0 \rangle - \cos \alpha e^{-i\omega t/2} | 1 \rangle - \sqrt{2} i \sin \alpha e^{-i3\omega t/2} | 2 \rangle) \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}} i \sin \alpha \cos \alpha (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin 2\alpha \cos \omega t \end{aligned} \quad (2.7)$$

2.1.3 1c

(a)(b)中答案显然不同. 那么产生这种矛盾的原因是什么呢?

站在全局的角度来考虑这个问题, 我们将发现所涉及到的对象只有两种——升降算符和本征态 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$. 在已经证明两组升降算符均合法的情况下, 矛盾只可能源自谐振子的本征态. 换言之, (b)中不应沿用与(a)相同的本征态 $\{|n\rangle\}$.

我们知道, 相差一个相位对于两个量子态来说没有本质影响——但这是整体相差的情况. 如果两组本征态间每一对态的相差均不同, 则可能就会产生一些意想不到的效果.

遵循这个思路, 下面记(b)中实际本征态为 $\{|n'\rangle\}$, 并尝试设

$$|n'\rangle = c_n |n\rangle \quad (2.8)$$

且 $n' = n$. 由降算子的性质,

$$\hat{a}|n'\rangle = -i\hat{a}_0 c_n |n\rangle = -i c_n \sqrt{n-1} |n-1\rangle = -i \frac{c_n}{c_{n-1}} \sqrt{n'-1} |n'-1\rangle \quad (2.9)$$

立即有

$$-i \frac{c_n}{c_{n-1}} = 1 \quad (2.10)$$

即

$$c_n = i c_{n-1} \quad (2.11)$$

若规定 $c_0 = 1$, 则

$$c_n = e^{in\pi/2} \quad (2.12)$$

因此, 式2.8可改写为

$$|n'\rangle = e^{in\pi/2}|n\rangle \quad (2.13)$$

可以看到, 对于每一对本征态 $|n'\rangle$ 和 $|n\rangle$, 其相差确随 n 变化. 特别地, 对于题中所涉及到的这两个本征态, 我们有

$$|0'\rangle = |0\rangle, |1'\rangle = i|1\rangle \quad (2.14)$$

下面可以重新考虑式2.7. 若在其中代之以式2.14的替换关系, 可将其改写为

$$\begin{aligned} \langle \hat{x} \rangle(t) &= \frac{i}{\sqrt{2}} \langle \psi(t) | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) | \psi(t) \rangle \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}} (\cos \alpha e^{i\omega t/2} \langle 0 | - i \sin \alpha e^{i3\omega t/2} \langle 1 |) (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) (\cos \alpha e^{-i\omega t/2} | 0 \rangle + i \sin \alpha e^{-i3\omega t/2} | 1 \rangle) \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}} (\cos \alpha e^{i\omega t/2} \langle 0' | + \sin \alpha e^{i3\omega t/2} \langle 1' |) (\hat{a} - \hat{a}^\dagger) (\cos \alpha e^{-i\omega t/2} | 0' \rangle + \sin \alpha e^{-i3\omega t/2} | 1' \rangle) \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}} (\cos \alpha e^{i\omega t/2} \langle 0' | + \sin \alpha e^{i3\omega t/2} \langle 1' |) (\sin \alpha e^{-i3\omega t/2} | 0' \rangle - \cos \alpha e^{-i\omega t/2} | 1' \rangle - \sqrt{2} \sin \alpha e^{-i3\omega t/2} | 2' \rangle) \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}} \sin \alpha \cos \alpha (e^{-i\omega t} - e^{i\omega t}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sin 2\alpha \sin \omega t \end{aligned} \quad (2.15)$$

与(a)中结果相同!

因此, 只要我们规定本征态的初始相位, 两种方式计算出的结果就将一致.

2.2 一维晶格模型

设某一维体系共有 N 个电子, 系统电子态可用最近邻交换相互作用模型来描述, 其 Hamiltonian 是

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^N E_0 |n\rangle \langle n| + \sum_{n=1}^N W (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|)$$

其中, $\{|n\rangle\}$ 是一组归一化的正交完备基, E_0, W 为给定参数.

假定有环形边界条件使得 $|N+1\rangle = |1\rangle$, 试求体系的本征能级及能量本征态.

倘若定义

$$\hat{A} = \sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n+1|, \hat{A}^\dagger = \sum_{n=1}^N |n+1\rangle \langle n| \quad (2.16)$$

则 Hamiltonian 可简化为

$$\hat{H} = E_0 + W (\hat{A} + \hat{A}^\dagger) \quad (2.17)$$

进一步地, 我们考察 \hat{A} 和 \hat{A}^\dagger :

$$\hat{A} |n\rangle = |n-1\rangle, \hat{A}^\dagger |n\rangle = |n+1\rangle \quad (2.18)$$

这意味着, $(\hat{A}, \hat{A}^\dagger)$ 有着类似谐振子升降算符的性质. 但不同的是, \hat{A} 是Unitary的, 这是因为

$$\hat{A}^\dagger \hat{A} = \sum_{m=1}^N \sum_{n=1}^N |m+1\rangle \langle m| n\rangle \langle n+1| = \sum_{n=1}^N |n+1\rangle \langle n+1| = \mathbb{1} = \hat{A}\hat{A}^\dagger \quad (2.19)$$

从上式还能看出 \hat{A} 及 \hat{A}^\dagger 互相对易, 进而推知它们均与 Hamiltonian 互相对易. 这意味着 $\{\hat{H}, \hat{A}, \hat{A}^\dagger\}$ 组成一力学量完全集 (Complete Set of Compatible Observables, CSCO), 存在一组共同本征态. 因此, 只要求解 \hat{A} 的本征问题, 体系的能量本征问题也就迎刃而解.

首先写出其矩阵表示

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

解久期方程

$$0 = \det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} -\lambda & 1 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -\lambda & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -\lambda & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & \cdots & -\lambda \end{vmatrix} = (-1)^N (\lambda^N - 1) \quad (2.21)$$

即可得本征值

$$\lambda_k = e^{ik\theta} \left(\theta = \frac{2\pi}{N}, k = 0, 1, \dots, N-1 \right) \quad (2.22)$$

和本征态

$$|E_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{ik\theta} \\ e^{i2k\theta} \\ \vdots \\ e^{i(N-1)k\theta} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{pmatrix} \lambda_k^0 \\ \lambda_k^1 \\ \lambda_k^2 \\ \vdots \\ \lambda_k^{N-1} \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

即有

$$\begin{cases} \hat{A}|E_k\rangle = \lambda_k|E_k\rangle \\ \hat{A}^\dagger|E_k\rangle = \lambda_k^{-1}|E_k\rangle \end{cases} \quad (2.24)$$

因此,

$$\hat{H}|E_k\rangle = [E_0 + W(\lambda_k + \lambda_k^{-1})]|E_k\rangle \quad (2.25)$$

即体系的 N 个本征能量为 $\varepsilon_k = E_0 + 2W \cos k\theta$.

从上述结果中可看出, 体系本征能量有有限个, 且为有限值. 这是与一维谐振子问题的显著区别.

事实上, 本题属于一维晶格模型. 当 $N \rightarrow \infty$ 时, 最后得到的能谱将成为准连续的, 即为能带.

2.3 任意算符的表示

试证明：任意算符 \hat{A} 可表示为

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

其中， \hat{B} 是Hermitian， \hat{C} 是Anti-Hermitian.

我们尝试取

$$\begin{cases} \hat{B} = \frac{1}{2} (\hat{A} + \hat{A}^\dagger) \\ \hat{C} = \frac{1}{2} (\hat{A} - \hat{A}^\dagger) \end{cases} \quad (2.26)$$

由于

$$\begin{cases} \hat{B}^\dagger = \frac{1}{2} (\hat{A}^\dagger + \hat{A}) = \hat{B} \\ \hat{C}^\dagger = \frac{1}{2} (\hat{A}^\dagger - \hat{A}) = -\hat{C} \end{cases} \quad (2.27)$$

分别满足Hermitian及Anti-Hermitian条件，因此该取法成立，命题得证.

本题较为容易，有些类似于高中数学中我们熟知的，任意定义在关于原点对称区间上的函数，可以表示为该区间上奇函数和偶函数的和.

2.4 盒中光子的测量与分辨

设想有两个方盒可以储存光子.

第一个方盒中储存了 10^6 个沿 x 方向偏振的光子 $|H\rangle$ 和 10^6 个沿 y 方向偏振的光子 $|V\rangle$ ，第二个方盒中则储存了 10^6 个右旋圆偏振光子 $|\sigma^+\rangle$ 和 10^6 个左旋圆偏振光子 $|\sigma^-\rangle$. 盒的尺寸远大于光子的相干波长，因此光子所遵从的Bose统计可略. 已知

$$|\sigma^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle \pm i|V\rangle)$$

现在，我们随机选取其中一个方盒（因而不清楚盒中光子有着怎样的偏振行为），并可以将盒子里的光子一一引出，测量它们在 x 方向（事实上任意方向均可）的偏振状态. 当测得光子的偏振为 x 方向时，探测器产生响应；反之，则没有响应（意味着测量结束时该光子偏振为 y 方向）. 假设探测器是理想的.

(a) 能否通过观测来确定，选取的到底是哪一个方盒？

(b) 若能，试估算猜测失败的可能性？

这是一道与众不同的题目，其重点不在我们常见的算符、表象，而在于测量. 通过本题，我们将进一步深化对测量的认识.

倘若我们测量单个光子的偏振状态：

- 对于方盒一，根据所引出光子偏振状态的不同，其结果可以预言，必然为有响应或无响应；
- 对于方盒二，无论引出的光子是何种偏振状态，其结果均无法预言，有响应、无响应的概率各占 $1/2$.

注意两者的区别.

可想而知，我们将无法从单次测量中提取任何有效信息；而只有将盒中的 2×10^6 个光子全部引出测量，才能一窥一二。

从期望值的角度考虑，我们将发现两方盒中，测得 x 方向（有响应）和 y 方向（无响应）的次数期望值均为 10^6 。因此，二者在该意义下不可区分。

不过，它们的涨落是不同的。具体而言：

- 方盒一中，两事件（探测器有/无响应）出现的次数一定均为 10^6 ，其总结果是确定的。换言之，二者恰好为各 10^6 次的概率是

$$P_1 = 1 \quad (2.28)$$

- 方盒二中，两事件出现的次数应当是二项分布，其恰好也为各 10^6 次的概率是

$$P_2 = \frac{C_{2 \times 10^6}^{10^6}}{2^{2 \times 10^6}} \approx 0.00056419 \ll 1 \quad (2.29)$$

基本可以忽略。

2.4.1 4a

原则上，我们只要将盒中所有光子全部引出，并测量它们在 x 方向或 y 方向的偏振状态，就能猜测所选取的是哪一方盒。

- 若探测器有/无响应不是各 10^6 次，则必为方盒二；
- 若探测器有/无响应各为 10^6 次，则基本可以确定为方盒一。

2.4.2 4b

在计算猜测失败的概率前，我们首先要弄明白：什么是所谓的“猜测失败”？

根据(a)中的讨论我们知道，当探测器有/无响应的次数各为 10^6 时，虽然是方盒一的可能性很大，但仍有一定几率 P 是方盒二。

由于我们猜测该盒为方盒一，因此 P 就是我们要求的“猜测失败”的概率。它与 P_2 有关，但不完全等于 P_2 。这是因为， P_2 是在已知该盒是方盒二的条件下求得的条件概率；而在考虑 P 时，这个条件是未知的。

若我们记事件 A =“拿到方盒一”、事件 B =“拿到方盒二”、事件 C =“探测器有/无响应的次数各为 10^6 ”，则 $P_1 = P(C|A)$, $P_2 = P(C|B)$ 。

根据条件概率的Bayes公式，本题要求的实际上

$$\begin{aligned} P &= P(B|C) = \frac{P(B)P(C|B)}{P(A)P(C|A) + P(B)P(C|B)} \\ &= \frac{\frac{1}{2}P_2}{\frac{1}{2}P_1 + \frac{1}{2}P_2} \approx 0.00056387 \ll 1 \end{aligned} \quad (2.30)$$

仍然很小。虽然与 P_2 差别不大，但为求严谨还是应如此计算。

2.5 互相反对易但与Hamiltonian对易的力学量算符

某可用一有限维Hilbert空间描述的量子力学体系存在可观测量 \hat{A} 与 \hat{B} . 它们均与体系的Hamiltonian对易, 但它们之间是反对易的, 且均没有零本征值. 试证明:

- (a) 系统的能量本征态必定都是简并的.
- (b) 力学量算符 \hat{A} 和 \hat{B} 对应矩阵的迹为零, 即 $\text{Tr}(A) = 0 = \text{Tr}(B)$.

2.5.1 法一

2.5.1.1 5a

采用反证法. 假设存在体系的某一本征能级 E_i 无简并, 则可设该能量本征态为 $|\psi_i\rangle$.

已知 $[\hat{H}, \hat{A}] = 0 = [\hat{H}, \hat{B}]$, 则有

$$\hat{H}(\hat{A}|\psi_i\rangle) = \hat{A}\hat{H}|\psi_i\rangle = E_i(\hat{A}|\psi_i\rangle) \quad (2.31)$$

即 $\hat{A}|\psi_i\rangle \propto |\psi_i\rangle$. 因此, $|\psi_i\rangle$ 也是 \hat{A} 的本征态, 对应的本征值记作 a_i , 即 $\hat{A}|\psi_i\rangle = a_i|\psi_i\rangle$.

同理, $|\psi_i\rangle$ 也是 \hat{B} 的本征态, 对应的本征值记作 b_i , 即 $\hat{B}|\psi_i\rangle = b_i|\psi_i\rangle$.

又由于 $\{\hat{A}, \hat{B}\} = 0$, 我们就有

$$0 = (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})|\psi_i\rangle = b_i\hat{A}|\psi_i\rangle + a_i\hat{B}|\psi_i\rangle = 2a_i b_i |\psi_i\rangle \quad (2.32)$$

本征态不能为空态, 因而只有 $a_i b_i = 0$, 意味着 a_i 、 b_i 中至少有一个是0——这与题设中 \hat{A} 和 \hat{B} 没有零本征值矛盾!

因此, 我们最初的假设不成立, 即体系的任意本征能级必然都存在简并.

2.5.1.2 5b

抛开上面反证法的假设, 不失一般性, 我们记 \hat{A} 一组正交完备的本征态为 $\{|\alpha_{ip}\rangle\}$, 其中 $i = 1, \dots, n$, n 为Hilbert空间的维数; $p = 1, \dots, r_i$, r_i 是第*i*个本征值 a_i 的简并度. 且由于 \hat{A} 是力学量算符, 故 $a_i \in \mathbb{R}$.

在以该组本征态构建的表象A中, 根据 $\{\hat{A}, \hat{B}\} = 0$ 有

$$0 = \langle \alpha_{ip} | \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} | \alpha_{ip} \rangle = 2a_i \langle \alpha_{ip} | \hat{B} | \alpha_{ip} \rangle \quad (2.33)$$

而 $a_i \neq 0$, 因此 $\langle \alpha_{ip} | \hat{B} | \alpha_{ip} \rangle = 0$ 对于任意合法的(*i*, *p*)取值成立. 换言之, 在表象A中, 力学量 \hat{B} 对应矩阵 B 的对角元皆为0. 因此,

$$\text{Tr}(B) = \sum_{i=1}^n \sum_{p=1}^{r_i} \langle \alpha_{ip} | B | \alpha_{ip} \rangle = 0 \quad (2.34)$$

注意矩阵的迹不依赖于表象的选择. ($\text{Tr}(A) = 0$ 同理)

2.5.2 法二

2.5.2.1 5a

由于 \hat{H} 与 \hat{A} 对易，因此存在一组共同本征态 $\{|n\rangle\}$ 。对其中任意一个 $|i\rangle$ ，有

$$\hat{H}|i\rangle = E_i|i\rangle, \hat{A}|i\rangle = a_i|i\rangle \quad (2.35)$$

且依题 $a_i \neq 0$ 。

根据 $[\hat{H}, \hat{B}] = 0 = \{\hat{A}, \hat{B}\}$ ，我们有

$$\begin{cases} \hat{H}(\hat{B}|i\rangle) = \hat{B}\hat{H}|i\rangle = E_i(\hat{B}|i\rangle) \\ \hat{A}(\hat{B}|i\rangle) = -\hat{B}\hat{A}|i\rangle = -a_i(\hat{B}|i\rangle) \end{cases} \quad (2.36)$$

上面的第二式说明， $|i\rangle$ 与 $\hat{B}|i\rangle$ 是 \hat{A} 的属于不同本征值 a_i 与 $-a_i$ 的本征态，因而属于不同子空间，故必然是不同的态；而第一式却说明了它们皆为Hamiltonian属于同一本征值 E_i 的本征态——因此， E_i 只能存在简并。

鉴于 E_i 选择上的任意性，我们即得知体系的所有能量本征值均是简并的。

2.5.2.2 5b

由(a)中讨论可知，只要非零实数 a_n 被判定为 \hat{A} 的本征值，其相反数 $-a_n$ 亦是其本征值。

又因为力学量 \hat{A} 对应矩阵 A 的迹是所有本征值的和，因此遍历所有的 a_n 即证得 $\text{Tr}(A) = 0$ 。 $(\text{Tr}(B) = 0$ 同理)

2.6 Quantum Zeno Effect

在一两维Hilbert空间中，假设体系在某Hamiltonian的支配下作时间演化，其量子态的形式是

$$|\psi(t)\rangle = \cos \frac{\omega t}{2} |+\rangle - i \sin \frac{\omega t}{2} |-\rangle$$

其中， $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 是某力学量 \hat{A} 一组正交完备归一的本征态，其对应的本征值分别为 A_+ 和 A_- 。

现在考虑一个测量序列——在 N 个不同时刻 $t_k = \frac{kT}{N}$ 测量体系的力学量 \hat{A} 。 $(k = 1, \dots, N)$

(a) 每次测量结果均为 A_+ 的几率是多少？假设在相邻两次测量间，体系仍在原Hamiltonian的支配下作时间演化。

(b) 当测量次数 $N \rightarrow \infty$ 时，(a)中得到的结果将化为多少？

2.6.1 6a

首先容易得到在 t 时刻作首次测量得到 A_+ 的概率

$$P(t) = |\langle + | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1 + \cos \omega t}{2} \quad (2.37)$$

可能会有一种解答是直接将 N 个不同的 t_k 代入，计算出 N 个概率并将其相乘，即

$$P_N = \prod_{k=1}^N \frac{1 + \cos \frac{\omega k T}{N}}{2} \quad (2.38)$$

然而, 这是不对的. 因为根据题意, 该测量是投影测量——每次测量得到 A_+ 后, 体系量子态均坍缩到 $|+\rangle$. 在直至下一次测量之前的这段时间里, 系统量子态重新从 $|+\rangle$ 开始演化.

因此, 考虑任意两次测量之间的这段时间 (t_k, t_{k+1}) , 我们需在式2.37中作替换 $t \rightarrow T/N$, 才得到连续 N 次测量均得到 A_+ 的概率

$$P_N = \left(\frac{1 + \cos \frac{\omega T}{N}}{2} \right)^N \quad (2.39)$$

2.6.2 6b

当 $N \rightarrow \infty$ 时, $\frac{\omega T}{N} \rightarrow 0$. 考虑

$$\begin{aligned} \ln P_N &= N \ln \left(\frac{1 + \cos \frac{\omega T}{N}}{2} \right) \approx N \ln \left[1 - \frac{1}{4} \left(\frac{\omega T}{N} \right)^2 \right] \\ &\approx N \left[-\frac{1}{4} \left(\frac{\omega T}{N} \right)^2 \right] \rightarrow 0 \end{aligned} \quad (2.40)$$

即可知道

$$P_N \rightarrow 1 \quad (2.41)$$

事实上, 这个问题被称为所谓的Quantum Zeno Effect (量子芝诺效应): 对一个不稳定量子系统频繁的测量可以冻结该系统的初始状态, 或阻止系统的演化. 如若测量的时间间隔足够短, 可以将该测量看作是连续的. 正是由于这样的投影测量所引起的量子态坍缩阻止了量子态之间的跃迁.

"Zeno"这个名字会使人很自然地联想到经典图像下的Zeno佯谬——假设有一位速度为10m/s的运动员和一只速度为1m的乌龟相距10m, 某一时刻, 运动员开始追乌龟, 同时乌龟沿着同向开始逃跑.

古希腊哲学家Zeno认为, 在这个问题中, $t_0 = 1$ s过后, 运动员已经到达了乌龟原来所处的位置, 但此时乌龟向前进了1m; 再过 $t_1 = 0.1$ s, 运动员又到达了乌龟原来所处的位置, 但此时乌龟又向前进了0.1m. 以此类推下去, 似乎运动员永远都到达不了乌龟原来的位置, 也就永远都“追不上乌龟”了.

当然, 我们都很清楚这种思维错在何处: 第 k 段的时间间隔 $t_k = 10^{-k}$ s将会随着 $k \rightarrow \infty$ 而成为无穷小量——正如本题(b)小问中, 测量次数 $N \rightarrow \infty$ 时相邻两次测量的时间间隔趋于0.

2022秋量子力学B

第三次习题课讲义

课程主讲老师：易为 教授
助教：宋冰睿，刘丰铨

2022年12月11日

目录

1	Bloch球与混合态	1
1.1	纯态Bloch向量回溯	1
1.2	混合态概述	3
1.3	Bloch球中的混合态	4
1.4	混合态Bloch向量的求解	4
1.5	混合态Bloch向量的物理意义	5
2	例题选讲	6
2.1	几何相	6
2.1.1	1a	7
2.1.2	1b	7
2.1.3	1c	8
2.2	外磁场中的两自旋1/2粒子体系	9
2.3	时变外磁场中的自旋1/2粒子	11

1 Bloch球与混合态

量子态是Quantum Mechanics中最基础的概念，在不同表象中有着相异的表达形式。尽管“一人千面”，量子态本身似乎缺乏一些具象的描述，若要清晰、透彻地理解它，这将可能带来一些困难。不过，Bloch球这个概念的提出，完美地填补了这一空白，将带来对量子态最本质的思考。并且，它在Rabi振荡、Ramsey干涉等实际物理过程中有着十分重要而广泛的应用，于物理图像的理解而言是大有裨益的。

要明确的是，Bloch球关注的主要是一可用两维复空间 \mathbb{C}^2 描述的双值量子系统。且为简便起见，在本节的讨论中我们略去表示算符的hat。

1.1 纯态Bloch向量回溯

课上我们已经提到，矢量Pauli算符 σ 在 \mathbb{R}^3 空间中单位向量

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (1.1)$$

上的投影 $\sigma_n = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ 的两相互正交本征态

$$|n_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix}, |n_-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

与 $(\mathbf{n}, -\mathbf{n})$ 这组反向平行的向量是一一对应的，如图1所示。

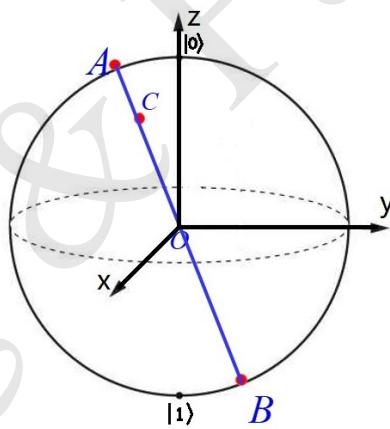


图 1: 反向平行的Bloch向量

然而实际上，该表示还不是最一般的情况。这是因为 \mathbb{C}^2 空间中的任一量子态可写为

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

其中复系数 c_0, c_1 满足归一化条件

$$|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1 \quad (1.4)$$

由于复数具有实、虚部，故 $|\psi\rangle$ 还剩三个独立实参数——比式1.2中的参数多了一个。这个多出来的实参数一般

用一整体相因子 γ 表示（其他两个实参数实际上也有多种取法）。因此，原则上应将式1.2改写为

$$|n_+\rangle = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix}, |n_-\rangle = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

如图2所示。只不过，由于 γ 取任意实值时， $|n_{\pm}(\gamma)\rangle$ 在Bloch球上均对应的是同一 $\pm \mathbf{n}$ ，即它们构成了一个等价类。因此，我们常常将无关紧要的 γ 略去。

不过，有时 γ 仍将发挥其独特的作用，这也正是2.1节的重点。当然这是后话了。

式1.5给我们的一大启发是，决定 $|n_{\pm}\rangle$ 各分量的模的，是 $\frac{\theta}{2}$ 的而非 θ 的三角函数。这一结论在作业10题3（将演化过程在Bloch球中表示）中有着较好的应用。

另外，在式1.5中分别取 $(\theta, \phi, \gamma) = (\frac{\pi}{2}, 0, 0)$ 和 $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4})$ ，即可得到我们熟知的

$$|x_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, |y_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

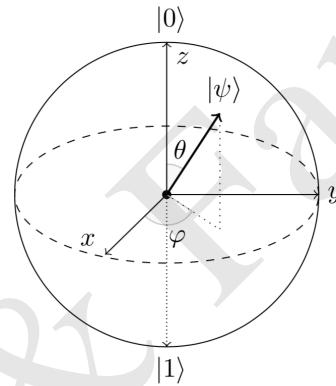


图 2: 纯态Bloch向量

课上提到（且作业10题1c证明过）的另一结论与 \mathbb{C}^2 空间中的任意方阵 M 有关：

$$M = \sum_{i=0}^3 M_i \sigma_i, M_i = \frac{1}{2} \text{Tr}(M \sigma_i) \quad (1.7)$$

式中 M_i 是复系数，且已经约定 $(\sigma_0, \boldsymbol{\sigma}) = (\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = (\mathbb{1}, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 。

对于本征态 $|n_{\pm}\rangle$ 的密度算符，可以证明，“展开系数 M_i ”就是Bloch向量 $\pm \mathbf{n}$ 的分量，即

$$|n_{\pm}\rangle \langle n_{\pm}| = \frac{1}{2} (\mathbb{1} \pm \sigma_x \sin \theta \cos \phi \pm \sigma_y \sin \theta \sin \phi \pm \sigma_z \cos \theta) = \frac{1}{2} (\mathbb{1} \pm \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \quad (1.8)$$

根据该式，并考虑到可利用式1.2计算出的

$$|n_+\rangle \langle n_+| = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} & \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} & \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, |n_-\rangle \langle n_-| = \begin{pmatrix} \sin^2 \frac{\theta}{2} & -\sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ -\sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi} & \cos^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

我们很容易写出 σ_n 的形式:

$$\sigma_n = |n_+\rangle\langle n_+| - |n_-\rangle\langle n_-| = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

我们可用

$$\text{Tr}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = n_i \text{Tr}(\sigma_i) = 0 \quad (1.11)$$

和 σ_n 的Hermite性来简易地验证一下上式, 其中已经采用Einstein求和约定表示了 $\mathbf{n} = n_i \mathbf{e}_i$, $i = 1, 2, 3$.

1.2 混合态概述

上面的讨论均是基于 \mathbb{C}^2 空间中的纯态进行的. 很自然地, 我们会想到倘若面对的是一个混合态, 还能沿用这一套Bloch球的理论吗?

答案当然是可以. 其实从具象的角度来考虑, 只需想到: 纯态是与单位球面上的点一一对应的, 那Bloch球内部的点, 不就有与混合态一一对应的可能了吗? 关于这一考虑, 我们将在随后详细讨论.

由于混合态在课程中涉及得不多, 这里举一个简例帮助回顾.

设有一个双值量子系统, 若对其进行测量将有如下两种可能($p_1 + p_2 = 1$):

- 以 p_1 的概率得到结果一, 系统的状态坍缩至 $|\psi_1\rangle$;
- 以 p_2 的概率得到结果二, 系统的状态坍缩至 $|\psi_2\rangle$.

那么, 若对其进行非选择测量, 就将得到混合态

$$\varepsilon = \{p_1, \psi_1; p_2, \psi_2\} \quad (1.12)$$

其中 $|\psi_i\rangle$ 的密度算符简记为

$$\psi_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (1.13)$$

所谓“非选择测量”的一个典例是, 倘若如上考虑的双值量子系统是基于Stern-Gerlach实验, 则如果将经仪器测量过后的两束银原子重新会聚在一起, 得到的就是两自旋纯态以一定几率组成的混合态.

一般而言, 混合系综 $\varepsilon = \{p_i, \psi_i\}$ 的密度算符是

$$\rho = \sum_i p_i \psi_i = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad p_i \geq 0, \quad \sum_i p_i = 1 \quad (1.14)$$

密度算符除了是Hermitian以外, 有关它的迹, 我们还有根据上式易证的如下性质:

$$\text{Tr}(\rho) = 1, \quad \text{Tr}(\rho^2) \begin{cases} = 1 & , \text{纯态} \\ < 1 & , \text{混合态} \end{cases} \quad (1.15)$$

1.3 Bloch球中的混合态

下面，我们来正式讨论Bloch球中的混合态。根据式1.8，纯态 $|\psi_i\rangle$ ($i = 1, \dots, m$)的密度算符是

$$\rho_i = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_i) \quad (1.16)$$

因而混合态1.14的密度矩阵是

$$\rho = \sum_{i=1}^m p_i \rho_i = \frac{1}{2} \left[\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\sum_{i=1}^m p_i \mathbf{n}_i \right) \right] = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.17)$$

其中

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^m p_i \mathbf{n}_i \quad (1.18)$$

被称为混合态的**Bloch向量**，是 m 个不同单位向量的线性组合。若记

$$\mathbf{r} = r \mathbf{n} \quad (1.19)$$

\mathbf{n} 为单位向量，则显然有

$$0 \leq r \leq 1 \quad (1.20)$$

因此一般地， \mathbf{r} 不是 \mathbb{R}^3 空间中的单位向量。可以说，纯态情形下被称作Bloch向量的 \mathbf{n} ，只是其模长为最大值1的特殊情况。

\mathbf{r} 有三个分量(r, θ, ϕ)—— r 在式1.19中已经显含， (θ, ϕ) 则来自于式1.19的第二个因子 \mathbf{n} 。

如图3所示，Bloch球由所有不同的 \mathbf{r} 构成。当

- $r = 1$ 时，球面上的点一一对应于 \mathbb{C}^2 空间中的纯态；
- $r < 1$ 时，球内部的点一一对应于 \mathbb{C}^2 空间中的混合态。

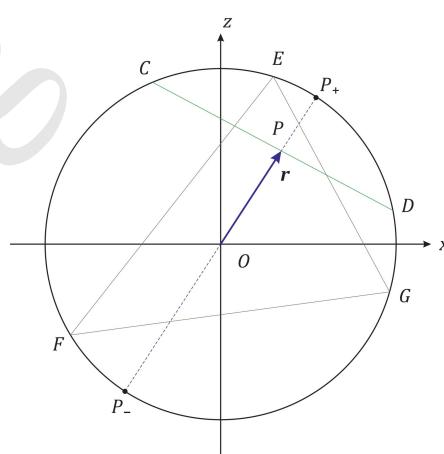


图 3: 混合态Bloch向量

1.4 混合态Bloch向量的求解

上面我们引进了Bloch向量这个概念，却并未讨论在具体问题中如何求出一个态 ρ 对应的 \mathbf{r} 。

这里先给出结论：Bloch向量 $\mathbf{r} = r_i \mathbf{e}_i$ 在直角坐标系下的第 i ($i = 1, 2, 3$) 个分量

$$r_i = \text{Tr} (\sigma_i \rho) \quad (1.21)$$

正是Pauli算符 σ_i 在给定量子态 ρ 上的期望值.

实际上，这与作业10题1c证明过的结论类似. 我们可将密度算符1.17用Einstein求和约定改写为

$$\rho = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + r_j \sigma_j) \quad (1.22)$$

因此式1.21的右端就是

$$\text{Tr} (\sigma_i \rho) = \frac{1}{2} \text{Tr} (\sigma_i + \sigma_i r_j \sigma_j) \quad (1.23)$$

根据Pauli算符性质

$$\text{Tr} (\sigma_i) = 0, \text{Tr} (\sigma_i \sigma_j) = \text{Tr} (\mathbb{1} \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k) = 2 \delta_{ij} \quad (1.24)$$

式1.23就可进一步化简为

$$\text{Tr} (\sigma_i \rho) = 0 + \frac{1}{2} \text{Tr} (r_j \sigma_i \sigma_j) = \frac{1}{2} r_j \cdot 2 \delta_{ij} = r_i \quad (1.25)$$

1.5 混合态Bloch向量的物理意义

我们还可以讨论混合态的本征值、本征矢及Bloch向量的物理意义. 将密度算符1.17再次改写为

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2} (\mathbb{1} + r \sigma_n) \\ &= \frac{1}{2} [|n_+\rangle \langle n_+| + |n_-\rangle \langle n_-| + r (|n_+\rangle \langle n_+| - |n_-\rangle \langle n_-|)] \\ &= \frac{1+r}{2} |n_+\rangle \langle n_+| + \frac{1-r}{2} |n_-\rangle \langle n_-| \end{aligned} \quad (1.26)$$

因而可以说， ρ 的两个本征值是 $\frac{1+r}{2}$ ，相应的本征矢仍为 $|n_\pm\rangle$. $\frac{1-r}{2}$ 对应至图3中，即分别是线段 P_-P 和 P_+P 的长度. 特别地，

- 当 $r = 1$ 时，本征值退化为 1 和 0，对应于纯态；
- 当 $r = 0$ 时，本征值退化为两个 $\frac{1}{2}$ ，对应于最大混合态或称完全混合态.

从这个层面上我们认为，Bloch向量的模长可以表征量子态的混合程度或纯度，如图4所示.

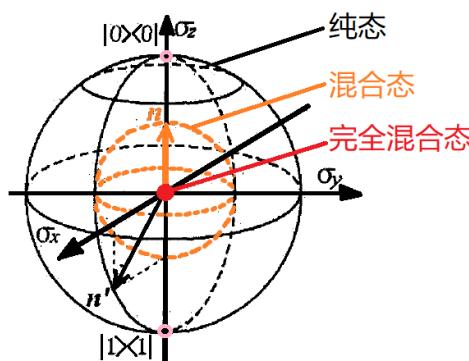


图 4: 不同模长的Bloch向量

实际上，式1.15对于密度算符平方迹的表述也是一套判断量子态纯度的标准.

上面处理的是单个态的Bloch向量. 对于两个不同态，我们又如何利用它们的Bloch向量给出一些相关的信息呢？可以尝试作如下计算：

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(\rho_1\rho_2) &= \mathrm{Tr}\left[\frac{1}{2}(\mathbb{1}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}_1)\cdot\frac{1}{2}(\mathbb{1}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}_2)\right] \\ &= \frac{1}{4}\mathrm{Tr}[\mathbb{1}+r_1\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}_1+r_2\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}_2+r_1r_2(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}_2)] \\ &= \frac{1}{2}+\frac{r_1r_2}{2}\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\mathbf{r}_1\cdot\mathbf{r}_2\end{aligned}\quad (1.27)$$

其中利用了课上推导过的公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}_1)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{n}_2)=\mathbb{1}\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{n}_1\times\mathbf{n}_2) \quad (1.28)$$

会发现，Bloch向量的内积 $\mathbf{r}_1\cdot\mathbf{r}_2$ 表征了两个态间的Overlap——可以定性地理解为其中一个态“处于另一个态的概率”.

在纯态的情形下，这种理解则可能更加直观. 设式1.27中的 $\rho_i=\psi_i=|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ ($i=1,2$)，则有

$$\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\mathbf{n}_1\cdot\mathbf{n}_2=\mathrm{Tr}(\psi_1\psi_2)=\langle\psi_1|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\psi_1\rangle=|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 \quad (1.29)$$

在作业8题3d中，我们已经计算过类似的概率.

2 例题选讲

2.1 几何相

考察纯态 $|\psi(0)\rangle$ 在不含时Hamiltonian \hat{H} 的支配下发生时间演化的过程. 至 τ 时刻，

- 相位的总变化为

$$\gamma(\tau)=\arg\langle\psi(0)|\psi(\tau)\rangle$$

- 单独考虑力学演化所带来的相位改变——力学相(dynamic)为

$$\gamma_d(\tau)=\int_0^\tau d\gamma_d(t)=\int_0^\tau \arg\langle\psi(t)|\psi(t+dt)\rangle$$

上式是基于无穷小演化过程导出的.

(a) 尽可能地化简 $\gamma_d(\tau)$ 的表达式. 是否能说明 $\gamma_d(\tau)=\gamma(\tau)$ ？若否，定义几何相(geometry)

$$\gamma_g(\tau)\triangleq\gamma(\tau)-\gamma_d(\tau)$$

- (b) 具体到 \mathbb{C}^2 空间中，设 $|\psi(0)\rangle=\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle+\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$ 且 $\hat{H}=\frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z$ ，试计算 $\gamma(\tau)$ 和 $\gamma_d(\tau)$. (用 θ, ω, τ 表示)
(c) 当 $\tau=T=2\pi/\omega$ 时，在Bloch球上表示出(b)的演化过程. 分别计算几何相 $\gamma_g(T)$ 和Bloch向量演化路径所围成的立体角 $\Omega=\Omega(\theta)$ ，并寻找能发现什么规律.

2.1.1 1a

根据题意，我们考虑无穷小过程。从 t 时刻至 $t + dt$ 时刻，态的演化可表示为

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi(t+dt)\rangle = |\psi(t)\rangle + |\dot{\psi}(t)\rangle dt \quad (2.1)$$

因此动力学相位的改变是

$$d\gamma_d(t) = \arg \langle \psi(t) | \psi(t+dt) \rangle = \arg \left[1 + \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle dt \right] \quad (2.2)$$

当然， $|\dot{\psi}(t)\rangle$ 的表述并不严谨，它并不是一个严格满足归一化条件的Ket，这里只是用它简化代替了 $\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle$ 。

另一方面，在归一化条件 $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$ 两边对 t 求导，可得

$$\langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle + \langle \dot{\psi}(t) | \psi(t) \rangle = 0 \quad (2.3)$$

即 $\langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle$ 和它复共轭的和为0，因而是纯虚数。于是，式2.2可化为

$$d\gamma_d(t) = \arctan \left(-i \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle dt \right) = -i \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle dt \quad (2.4)$$

也就得到动力学相对时间的导数

$$\dot{\gamma}_d(t) = -i \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle \quad (2.5)$$

考虑到 $t = 0$ 时的动力学相 $\gamma_d(0) = 0$ ，并应用Schrödinger方程，任意 τ 时刻的动力学相可通过积分求出：

$$\gamma_d(\tau) = \frac{1}{i} \int_0^\tau \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle dt = \frac{1}{\hbar} \int_0^\tau \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle dt \quad (2.6)$$

最后，由于已知 \hat{H} 不含时，我们有

$$\langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t) | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{H} | \psi(0) \rangle = E(0) \quad (2.7)$$

因此这是一个守恒量。式中， $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ 是 $0 \sim t$ 时段的时间演化算符， $E(0)$ 是 $t = 0$ 时刻的能量期望值。

最终我们得到

$$\gamma_d(\tau) = \frac{E(0)\tau}{\hbar} \quad (2.8)$$

该值一般与总相差 $\gamma(\tau)$ 相异。

2.1.2 1b

容易得到

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\frac{\omega t}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \quad (2.9)$$

于是可以计算内积

$$\begin{aligned}\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle &= e^{-i\frac{\omega t}{2}} \cos^2 \frac{\theta}{2} + e^{i\frac{\omega t}{2}} \sin^2 \frac{\theta}{2} \\ &= \left(\cos \frac{\omega t}{2} - i \sin \frac{\omega t}{2} \right) \frac{1 + \cos \theta}{2} + \left(\cos \frac{\omega t}{2} + i \sin \frac{\omega t}{2} \right) \frac{1 - \cos \theta}{2} \\ &= \cos \frac{\omega t}{2} - i \cos \theta \sin \frac{\omega t}{2} \\ &\triangleq w(t) e^{i\gamma(t)}\end{aligned}\quad (2.10)$$

其中新引入的两时变参量定义为

$$\begin{cases} w(t) = \sqrt{\cos^2 \frac{\omega t}{2} + \cos^2 \theta \sin^2 \frac{\omega t}{2}} \\ \gamma(t) = -\arctan \left[\cos \theta \tan \frac{\omega t}{2} \right] \end{cases}\quad (2.11)$$

后者即是要求的总相差.

接着可以计算动力学相. 为此, 需先计算

$$\begin{aligned}E(0) &= \frac{\hbar\omega}{2} \left[\cos \frac{\theta}{2} \langle 0 | + \sin \frac{\theta}{2} \langle 1 | \right] \hat{\sigma}_z \left[\cos \frac{\theta}{2} | 0 \rangle + \sin \frac{\theta}{2} | 1 \rangle \right] \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left[\cos \frac{\theta}{2} \langle 0 | + \sin \frac{\theta}{2} \langle 1 | \right] \left[\cos \frac{\theta}{2} | 0 \rangle - \sin \frac{\theta}{2} | 1 \rangle \right] \\ &= \frac{\hbar\omega}{2} \left(\cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \cos \theta\end{aligned}\quad (2.12)$$

利用式2.8, 就得到 τ 时刻的动力学相

$$\gamma_d(\tau) = \frac{\omega\tau}{2} \cos \theta \quad (2.13)$$

2.1.3 1c

依定义, 任意 τ 时刻的几何相

$$\gamma_g(\tau) = -\arctan \left[\cos \theta \tan \frac{\omega\tau}{2} \right] - \frac{\omega\tau}{2} \cos \theta \quad (2.14)$$

故当 $\tau = T = 2\pi/\omega$ 时, 上式化为

$$\gamma_g(T) = \pi(1 - \cos \theta) \quad (2.15)$$

另一方面, 此时系统量子态为

$$|\psi(T)\rangle = -|\psi(0)\rangle \quad (2.16)$$

与初态仅相差一个相位 $\gamma(T) = \pi$, 因而在Bloch球中, 二者以同一单位向量表示, 所要表示的演化过程为一封闭曲线, 如图5所示. 这是一种循环演化(Cyclic Evolution).

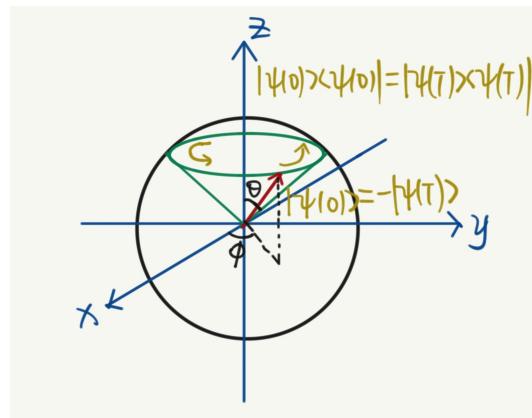


图 5: Bloch球与循环演化

在该时间演化过程中, Bloch向量在 \mathbb{R}^3 中沿着圆锥的母线曲面作进动, 从而在 θ 不变的情况下使得方位角 ϕ 发生 $0 \sim 2\pi$ 的变化. 一个周期 T 过后, 密度算符与 $t = 0$ 时相同, 即 $\psi(T) = |\psi(T)\rangle\langle\psi(T)| = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)| = \psi(0)$, 意味着Bloch向量回到初始位置, 但产生了总相差 π . 该相差需要再一次的循环演化即 $t = 2T$ 时, 才可消除. 这也就是1.1节中提到的实参数 γ 的“独特作用”.

圆锥的底面纬圆是Bloch向量端点的路径, 其围成的立体角是

$$\Omega(\theta) = 2\pi(1 - \cos\theta) \quad (2.17)$$

对比上式及式2.15, 即得到

$$\Omega(\theta) = 2\gamma_g(T) \quad (2.18)$$

因此, 我们可以形象地认为几何相等于路径围成立体角的一半. 对于非循环演化, 可以证明, 用Bloch球上的测地线连接起点和终点所构成的立体角, 仍有“立体角的一半”的结论.

事实上, 不论支配系统演化的Hamiltonian是否含时、甚至是否缓变 (即是否绝热过程), 都将有几何相的存在. 我们上面的推导, 也并非完全的严格化、公理化. 一般而言, 几何相又称Berry Phase, 是由广泛应用于凝聚态物理学中的Berry Curvature和Berry Connection等概念导出. 而我们熟知的Aharonov-Bohm效应, 其实就是电磁场几何相位的一种体现.

1998年沃尔夫物理学奖得主Michael Berry, 上述一系列概念的提出者, 对此曾形象地评述道: “……想象一下, 你正试图将车停在两辆车之间的窄空位. 你觉得自己做得不够好, 离路边还有一段距离. 为了再靠近一点, 你会做一系列蛇形操作, 驾驶并转向、驾驶并转向……每一次循环操作之后, 你就离路边更近一点. 这些细微的侧向移动, 和Berry相位有相同的数学原理: 有些东西改变了又变回来了 (比如你的方向盘); 其他东西改变了, 但变不回来了 (比如车的位置). 在物理的波中, 它以一种更微妙、更困难的方式呈现出来, 尤其是在量子波或光波上.”

2.2 外磁场中的两自旋1/2粒子体系

设某一体系由两个自旋1/2粒子组成, 并置于均匀外磁场 $\mathbf{B} = Be_z$ 中. 系统的Hamiltonian可表示为

$$\hat{H} = a\hat{\sigma}_{1z} + b\hat{\sigma}_{2z} + c\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$$

其中 a, b, c 为非零常系数. 式中, 前两项表征粒子内禀磁矩与外磁场的相互作用, 最后一项则表征两粒子间的自旋-自旋相互作用. 试求体系的能量本征值.

遇到此类涉及多个角动量的耦合问题, 自然需要确定是在耦合表象还是非耦合表象中进行讨论. 鉴于本体系的Hamiltonian含有 $\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 \sim \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ 项, 我们选择前者为宜.

一般而言, 耦合表象的基是 $|s_1, s_2; s, m\rangle$. 在将讨论限于 (s_1, s_2) 所确定的子空间内时, 可将其简记为 $\{|s, m\rangle\} = \{|0, 0\rangle, |1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle\}$. 非耦合表象的基到 $\{|s, m\rangle\}$ 的变换关系已知为

$$\begin{cases} |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (2.19)$$

四个 $|s, m\rangle$ 均与 $\hat{\sigma}_{1z}$ 和 $\hat{\sigma}_{2z}$ 的本征态同时相关. 因此, Hamiltonian的原形式中单独将 $\hat{\sigma}_{1z}$ 及 $\hat{\sigma}_{2z}$ 成项, 相对而言不那么便于处理 (并非不能), 我们不妨尝试将其化为 $\hat{\sigma}_{1z} \pm \hat{\sigma}_{2z}$ 的线性组合, 有

$$\begin{aligned} \hat{H} &= c\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 + t_+(\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z}) + t_-(\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}) \\ &= \frac{4c}{\hbar^2}\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 + \frac{2t_+}{\hbar}\hat{S}_z + \frac{2t_-}{\hbar}(\hat{S}_{1z} - \hat{S}_{2z}) \end{aligned} \quad (2.20)$$

其中 $t_{\pm} \triangleq \frac{a \pm b}{2}$, $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$. 下面, 我们就上式进行逐项分析.

- 首先熟知

$$\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2}(\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2) \quad (2.21)$$

因而四个 $|s, m\rangle$ 均为 $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ 的本征态, 对应本征值为

$$\frac{s(s+1) - 3/2}{2}\hbar^2 = \begin{cases} -\frac{3}{4}\hbar^2, s=0 \\ \frac{1}{4}\hbar^2, s=1 \end{cases} \quad (2.22)$$

- 其次, 四个 $|s, m\rangle$ 也均为 \hat{S}_z 的本征态, 对应本征值为 $m\hbar$.
- 重点是第三项 $\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}$. 为便于理解, 我们引入直积运算, 有

$$\begin{aligned} (\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z})|1, 1\rangle &= (\hat{\sigma}_{1z} \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \hat{\sigma}_{2z})(|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) = |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle - |\uparrow\rangle|\uparrow\rangle = 0 \\ (\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z})|1, -1\rangle &= (\hat{\sigma}_{1z} \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \hat{\sigma}_{2z})(|\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle) = (-|\downarrow\rangle)|\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle(-|\downarrow\rangle) = 0 \end{aligned} \quad (2.23)$$

因此 $|1, 1\rangle$ 和 $|1, -1\rangle$ 是其本征态, 本征值均为0.

类似地，若记 $|\psi_+\rangle = |1, 0\rangle, |\psi_-\rangle = |0, 0\rangle$ ，我们有

$$\begin{aligned} (\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}) |\psi_{\pm}\rangle &= (\hat{\sigma}_{1z} \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \hat{\sigma}_{2z}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \pm |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle \mp |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle) - (-|\uparrow\rangle |\downarrow\rangle \pm |\downarrow\rangle |\uparrow\rangle)] \\ &= \sqrt{2} (|\uparrow\downarrow\rangle \mp |\downarrow\uparrow\rangle) = 2 |\psi_{\mp}\rangle \end{aligned} \quad (2.24)$$

故 $|\psi_{\pm}\rangle$ 不是其本征态。

综上讨论， $|1, \pm 1\rangle$ 是系统的能量本征态，对应能量本征值为

$$c \pm 2t_+ = c \pm (a + b) \quad (2.25)$$

还有两个能量本征值需在 $\{|1, 0\rangle, |0, 0\rangle\}$ 构成的子空间中解出。为此，需要首先写出Hamiltonian在该子空间内的矩阵形式：

$$H = \frac{4c}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{1}{4}\hbar^2 & 0 \\ 0 & -\frac{3}{4}\hbar^2 \end{pmatrix} + 0 + t_- \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & a-b \\ a-b & -3c \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

解久期方程即可得到本征值

$$-c \pm 2\sqrt{c^2 + t_-^2} = -c \pm \sqrt{4c^2 + (a-b)^2} \quad (2.27)$$

在不考虑偶然简并的情况下，体系共有四个能级如式2.25和式2.27。

2.3 时变外磁场中的自旋1/2粒子

一自旋1/2粒子处于时变外磁场

$$\mathbf{B}(t) = B_0 \mathbf{e}_z + B_1 (\cos \omega t \mathbf{e}_x + \sin \omega t \mathbf{e}_y)$$

中，因而其Hamiltonian是

$$\hat{H} = -\hat{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \hat{\sigma}_z + \frac{1}{2} \hbar \omega_1 (\hat{\sigma}_x \cos \omega t + \hat{\sigma}_y \sin \omega t)$$

其中

$$\omega_0 \triangleq \frac{eB_0}{m}, \quad \omega_1 \triangleq \frac{eB_1}{m}$$

若已知体系初态为 $|\psi(0)\rangle$ ，试求体系的时间演化。

直接求解Schrödinger方程固然可以解答本题，但并不简洁优雅。

注意到，在时间演化过程中，本体系的Hamiltonian和量子态均发生变化——这并不是我们想看到的。我们总是希望能够在Schrödinger绘景或Heisenberg绘景中求解时间演化问题。因此，是否可以尝试作某种变换，使得可以在二者其一中进行讨论，就是我们下一步思考的方向。

观察Hamiltonian中含时的一项 $\hat{\sigma}_x \cos \omega t + \hat{\sigma}_y \sin \omega t$, 将发现这与作业10题2的结果相同. 这说明这一项是对 $\hat{\sigma}_x$ 绕 z 方向作角度 ωt 的旋转变换得到的. 因此, 通过其逆变换, 我们原则上能消除这一旋转因子.

考虑酉变换

$$\hat{V}(t) = \exp\left(-i\frac{\hat{S}_z \cdot \omega t}{\hbar}\right) = \exp\left(-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z\right) \quad (2.28)$$

在其所确定的旋转参考系中, 有

$$\begin{cases} \hat{\tilde{H}} = \hat{V}^\dagger(t) \hat{H}(t) \hat{V}(t) = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\hat{\sigma}_z + \frac{1}{2}\hbar\omega_1\hat{\sigma}_x \\ |\tilde{\psi}(t)\rangle = \hat{V}^\dagger(t)|\psi(t)\rangle \end{cases} \quad (2.29)$$

确实使得Hamiltonian成为不含时量.

下面只需正常求解时间演化问题即可. 但要注意, 我们并不能简单地认为旋转参考系中的Schrödinger方程是 $i\hbar \frac{d|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} = \hat{\tilde{H}}|\tilde{\psi}(t)\rangle$, 而应从原始方程

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \quad (2.30)$$

中一步步推导出来. 也即, 不能想当然地利用 \hat{H} 的表达式直接写出“时间演化算符”或“态的演化”.

将式2.29给出的关系代入原始方程, 有

$$\hat{H}(t)\hat{V}(t)|\tilde{\psi}(t)\rangle = i\hbar \left[\hat{V}(t) \frac{d|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} + \frac{d\hat{V}(t)}{dt}|\tilde{\psi}(t)\rangle \right] = i\hbar\hat{V}(t) \frac{d|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} + \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z|\psi(t)\rangle \quad (2.31)$$

再在两端同时左乘 $\hat{V}^\dagger(t)$, 得到

$$\hat{H}|\tilde{\psi}(t)\rangle = i\hbar \frac{d|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} + \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z|\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (2.32)$$

即

$$i\hbar \frac{d|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} = \left[\frac{1}{2}\hbar(\omega_0 - \omega)\hat{\sigma}_z + \frac{1}{2}\hbar\omega_1\hat{\sigma}_x \right]|\tilde{\psi}(t)\rangle \quad (2.33)$$

上式右端方才给出了等效的Hamiltonian

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \frac{1}{2}\hbar\omega_1\hat{\sigma}_x - \frac{1}{2}\hbar\Delta\hat{\sigma}_z = \frac{1}{2}\hbar\Omega\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n} \quad (2.34)$$

其中

$$\Delta \triangleq \omega - \omega_0, \quad \Omega \triangleq \sqrt{\Delta^2 + \omega_1^2}, \quad \mathbf{n} \triangleq \left(\frac{\omega_1}{\Omega}, 0, -\frac{\Delta}{\Omega} \right) \quad (2.35)$$

因此, 最终我们得到

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{V}(t) \exp\left(-i\frac{\hat{H}_{\text{eff}}t}{\hbar}\right) |\psi(0)\rangle \\ &= \exp\left(-i\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z\right) \left(1 \cos \frac{\Omega t}{2} - i\hat{\sigma}_x \frac{\omega_1}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} + i\hat{\sigma}_z \frac{\Delta}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \right) |\psi(0)\rangle \end{aligned} \quad (2.36)$$

2022 秋量子力学 B

原子跃迁理论初步

课程主讲老师：易为 教授
助教：刘丰铨，宋冰睿

2022 年 12 月 31 日

在原子物理课程中，我们已经了解到，原子的偶极跃迁需服从选择定则。然而，课程并未对选择定则的由来进行阐释。现在，在量子力学知识的帮助下，我们已经能够对包括选择定则在内的原子跃迁基础理论进行考察。在本材料中，我们考虑从含时微扰论入手，首先明确待求的物理量（矩阵元）；然后，我们再尝试利用矢量算符的一些性质，对矩阵元进行处理，在此过程中我们将得到 Wigner-Eckart 定理在矢量算符下的表达形式，它能将矩阵元与 Clebsch-Gordan 系数相联系；在此基础上，我们将能够轻松地对矩阵元是否为零进行判断，从而得到偶极跃迁选择定则。

1 简谐微扰

在本节中，我们讨论原子在单频交变电磁场中的能级跃迁行为。我们记电场的表达式为：

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E} \cos(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \mathbf{n}_k \quad (1.1)$$

其中 \mathcal{E} 为电场的振幅， ω 和 \mathbf{k} 为对应的角频率和波矢， \mathbf{n}_k 是波矢方向的单位矢量。由是，我们有电势表达式：

$$\phi(\mathbf{r}, t) = - \int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{E}(\mathbf{r}', t) \cdot d\mathbf{r}' = - \int_0^{\mathbf{r}} \mathcal{E} \cos(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}') \mathbf{n}_k \cdot d\mathbf{r}' \quad (1.2)$$

其中已取 $\mathbf{r} = 0$ 处为电势零点。在我们所感兴趣的近红外至紫外波段，电磁波的波长 (10^{-7} m) 远远大于原子的尺寸 (10^{-10} m)，因而可以认为在原子内电场是均匀的，从而由电势表达式：

$$\phi(\mathbf{r}, t) \approx - \int_0^{\mathbf{r}} \mathbf{E}(0, t) \cdot d\mathbf{r}' = -\mathcal{E} \cos(\omega t) \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{r} \quad (1.3)$$

这一近似也被称为偶极近似。由此，电子与这一交变电磁场相互作用的 Hamiltonian 算符可以写为：

$$\hat{V}(t) = -e\phi(\hat{\mathbf{r}}, t) = e\mathcal{E} \cos(\omega t) \mathbf{n}_k \cdot \hat{\mathbf{r}} \quad (1.4)$$

在写出上式的过程中使用了量子化程式，矢量算符 $\hat{\mathbf{r}}$ 描述电子和原子核之间的相对位矢。事实上，我们可以看到，这恰恰是将原子视为电偶极矩为 $-e\mathbf{r}$ 的电偶极子时相互作用 Hamiltonian 算符的表达式。

接下来，我们在量子力学框架下考虑交变电场对原子的影响。电子的 Hamiltonian 算符可以写为：

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \quad (1.5)$$

其中 \hat{H}_0 为加入外电磁场前的 Hamiltonian 算符，我们自然地将其视为主要项，而把 \hat{V} 视为含时的微扰项。在不考虑超精细结构修正的情况下，可用 $|\alpha, j, m_j\rangle$ 标定 \hat{H}_0 的本征态，其中 α 可视为主量子数， j 为电子在考虑了自旋和轨道角动量的情况下的总角动量量子数， m_j 为电子的总磁量子数。考虑到指数函数相对三角函数而言易于处理，我们将 \hat{V} 进一步写作：

$$\hat{V}(t) = e\mathcal{E} \cos(\omega t) \mathbf{n}_k \cdot \hat{\mathbf{r}} = \frac{\mathcal{E}}{2} \mathbf{n}_k \cdot \mathbf{r} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^\dagger e^{i\omega t} \quad (1.6)$$

可以以此表达的含时微扰又称为简谐微扰，此类微扰的 Hamiltonian 算符简谐地依赖于时间。在本问题中，我们有：

$$\hat{F} = \frac{\mathcal{E}}{2} \mathbf{n}_k \cdot \hat{\mathbf{r}} = \hat{F}^\dagger \quad (1.7)$$

根据含时微扰论，我们知道 \hat{V} 将引起原子的能级跃迁。具体地，分别记我们感兴趣的跃迁初态和跃迁末态为 $|i\rangle = |\alpha, j, m_j\rangle$ 和 $|f\rangle = |\alpha', j', m'_j\rangle$ ，并分别记它们的零级本征能量为 E_i 和 E_f ，那么：

$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar} \quad (1.8)$$

记 t 时刻电子处于态 $|\psi(t)\rangle$ ，则一阶含时微扰论给出：

$$\begin{aligned} \langle f | \psi(t) \rangle &= \langle f | i \rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f | \hat{V}(\tau) | i \rangle e^{i\omega_{fi}\tau} d\tau \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f | (\hat{F} e^{-i\omega\tau} + \hat{F}^\dagger e^{i\omega\tau}) | i \rangle e^{i\omega_{fi}\tau} d\tau \\ &= -\frac{i}{\hbar} \langle f | \hat{F} | i \rangle \int_0^t e^{-i\omega\tau} e^{i\omega_{fi}\tau} d\tau - \frac{i}{\hbar} \langle f | \hat{F}^\dagger | i \rangle \int_0^t e^{i\omega\tau} e^{i\omega_{fi}\tau} d\tau \\ &= \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{fi} - \omega)} \langle f | \hat{F} | i \rangle + \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\hbar(\omega_{fi} + \omega)} \langle f | \hat{F}^\dagger | i \rangle \end{aligned} \quad (1.9)$$

我们假设 $E_f > E_i$ ，那么 $\omega_{fi} > 0$ ，可以看到在 $\omega \approx \omega_{fi}$ 时，上式最后一个等号右端的第一项一般远远大于第二项，此时电子由初态 $|i\rangle$ 吸收交变电磁场的能量跃迁到末态 $|f\rangle$ ，这一现象亦被称为共振吸收（注：在这里我们并未讨论 $\omega = -\omega_{fi}$ 的情况，这是因为实际的交变电磁场原则上要求 $\omega > 0$ 。仅当 $\omega_{fi} < 0$ 时，前述情况可以且必须进行讨论，而此时初态能量高于末态能量，恰恰对应共振发射的情形）。由此，我们有跃迁概率的表达式：

$$P_{fi}(t) = |\langle f | \psi(t) \rangle|^2 \approx \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{fi} - \omega)} \langle f | \hat{F} | i \rangle \right|^2 = \left\{ \frac{\sin \frac{(\omega_{fi} - \omega)t}{2}}{\frac{(\omega_{fi} - \omega)}{2}} \right\}^2 \frac{|\langle f | \hat{F} | i \rangle|^2}{\hbar^2} \quad (1.10)$$

我们感兴趣的是 $t \rightarrow +\infty$ （亦即外场施加的时间足够长，以保证跃迁能充分发生）时的跃迁概率，而根据数学恒等式（证明见附录 A）：

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{\sin^2(\beta t)}{\pi \beta^2 t} = \delta(\beta) \quad (1.11)$$

我们有：

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} P_{fi}(t) = \frac{|\langle f | \hat{F} | i \rangle|^2}{\hbar^2} \pi t \delta \left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2} \right) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \hat{F} | i \rangle|^2 t \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (1.12)$$

其中利用了 δ 函数的性质：

$$\delta\left(\frac{\omega_{fi} - \omega}{2}\right) = \delta\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{2\hbar}\right) = 2\hbar\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (1.13)$$

而由 1.12 我们可以得到跃迁速率：

$$W_{fi} \triangleq \frac{dP_{fi}}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \hat{F} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (1.14)$$

从以上讨论中，我们看到，跃迁是否可能发生（跃迁概率或速率为零与否）完全取决于跃迁矩阵元：

$$\langle f | \hat{F} | i \rangle = \frac{\mathcal{E}}{2} \langle f | \mathbf{n}_k \cdot \hat{\mathbf{r}} | i \rangle = \frac{\mathcal{E}}{2} \langle \alpha', j', m'_j | \mathbf{n}_k \cdot \hat{\mathbf{r}} | \alpha, j, m_j \rangle$$

是否为零。而由于 \mathbf{n}_k 是常矢量，问题即转化为对矩阵元：

$$\langle \alpha', j', m'_j | \hat{r}_i | \alpha, j, m_j \rangle$$

是否为零的判断，亦即我们现在关注位置算符的分量在角动量表象（也是 \hat{H}_0 对应的能量表象）下的矩阵表示。接下来，我们对这一问题进行讨论。

2 跃迁矩阵元处理

我们发现，直接计算矩阵元存在困难。由于我们在角动量表象下考虑问题，构造对易子可能是一个合适的切入点，但根据矢量算符的性质：

$$[\hat{J}_i, \hat{r}_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar\hat{r}_k \quad (2.1)$$

我们也难以由此直接对矩阵元进行处理（注：这实际上是一个需要经过计算得出的结论。同学们可以仿照我们接下来的处理方法，利用对易子计算矩阵元，以对这一论断进行验证。）。不过，我们知道，有时对考察对象变换能够降低问题的求解难度。根据球谐函数与轨道角动量算符在位置表象下的表达的关系：

$$\begin{cases} \hat{L}_z^X Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m} \\ \hat{L}_{\pm}^X Y_{l,m} = \sqrt{l(l+1)-m(m\pm 1)}\hbar Y_{l,m\pm 1} \end{cases} \quad (2.2)$$

同时注意到球谐函数可以表示为 $Y_{l,m}(\mathbf{n})$ ，其中：

$$\mathbf{n} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta) \quad (2.3)$$

我们不妨尝试以矢量算符 $\hat{\mathbf{r}}$ 替代矢量 \mathbf{n} ，并记 $\hat{T}_m^{(l)} = Y_{l,m}(\hat{\mathbf{r}})$ 。它被称为 l 阶球谐张量算符，我们自然地希望它在角动量表象下具有比 \hat{r}_i 更好的性质。特别地，对于 $l=1$ 的球谐函数，替代后得到的表达式关于 $\hat{\mathbf{r}}$ 的分量是线性的，即：

$$\begin{cases} \hat{T}_0^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\hat{r}_z \\ \hat{T}_{\pm 1}^{(1)} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\left(\mp\frac{\hat{r}_x \pm i\hat{r}_y}{\sqrt{2}}\right) \end{cases} \quad (2.4)$$

不难看出，将这三个算符线性组合即可以得到 \hat{r}_i 。接下来我们讨论 $\hat{T}_m^{(l)}$ 的性质，并将在此过程中得到对 1 阶球谐张量成立的 Wigner-Eckart 定理。

2.1 Wigner-Eckart 定理

首先，我们考察 $\hat{T}_m^{(1)}$ 与角动量算符的对易关系，这仍是我们计算跃迁矩阵元的重要入手点。经过简单的对易关系计算（仅需要使用对易子的基本性质以及2.1），我们不难总结出以下性质：

$$\begin{cases} [\hat{J}_z, \hat{T}_m^{(1)}] = m\hbar\hat{T}_m^{(1)} \\ [\hat{J}_{\pm}, \hat{T}_m^{(1)}] = \sqrt{1 \times (1+1) - m(m \pm 1)} \hbar \hat{T}_{m \pm 1}^{(1)} \end{cases} \quad (2.5)$$

可以注意到上式与2.2在形式上非常相近，这也意味着我们引入球谐张量的处理确实能够将原先不易处理的位矢算符的三个分量“变换”成具有较为优良性质的算符。基于此，我们不妨转而计算矩阵元：

$$\langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle$$

我们期望它比矩阵元 $\langle \alpha', j', m'_j | \hat{r}_i | \alpha, j, m_j \rangle$ 更易于计算，而后者无非是前者的线性组合。按照我们已经熟知的处理方法，求2.5的第一式等号两端表达式的矩阵元，得：

$$\begin{aligned} m\hbar \langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle &= \langle \alpha', j', m'_j | [\hat{J}_z, \hat{T}_m^{(1)}] | \alpha, j, m_j \rangle \\ &= \langle \alpha', j', m'_j | (\hat{J}_z \hat{T}_m^{(1)} - \hat{T}_m^{(1)} \hat{J}_z) | \alpha, j, m_j \rangle \\ &= (m'_j - m_j) \hbar \langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle \end{aligned} \quad (2.6)$$

由此我们立即得知， $m'_j = m_j + m$ 是矩阵元 $\langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle$ 不为零的必要条件。考虑到 $m = 0, \pm 1$ ，我们已经得到了偶极跃迁选择定则的一部分：

$$\Delta m_j = 0, \pm 1 \quad (2.7)$$

接下来我们求2.5的第二式等号两端表达式的矩阵元，得：

$$\begin{aligned} \sqrt{1 \times (1+1) - m(m \pm 1)} \hbar \langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_{m \pm 1}^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle &= \langle \alpha', j', m'_j | [\hat{J}_{\pm}, \hat{T}_m^{(1)}] | \alpha, j, m_j \rangle \\ &= \langle \alpha', j', m'_j | (\hat{J}_{\pm} \hat{T}_m^{(1)} - \hat{T}_m^{(1)} \hat{J}_{\pm}) | \alpha, j, m_j \rangle \\ &= \sqrt{j'(j'+1) - m'_j(m'_j \mp 1)} \hbar \langle \alpha', j', m'_j \mp 1 | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle \\ &\quad - \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)} \hbar \langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \pm 1 \rangle \end{aligned} \quad (2.8)$$

这简直是一团乱麻。然而，它确实能够给予我们有用的信息。我们首先对上式进行移项整理，得到：

$$\begin{aligned} \sqrt{j'(j'+1) - m'_j(m'_j \mp 1)} \langle \alpha', j', m'_j \mp 1 | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle &= \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)} \langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \pm 1 \rangle \\ &\quad + \sqrt{1 \times (1+1) - m(m \pm 1)} \langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_{m \pm 1}^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle \end{aligned} \quad (2.9)$$

事实上，它在形式上与 Clebsch-Gordan 系数满足的递归关系非常相近，后者的一般形式写做：

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J+1) - M_J(M_J \mp 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | j_1, j_2, J, M_J \mp 1 \rangle &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)} \langle j_1, m_1 \pm 1; j_2, m_2 | j_1, j_2, J, M_J \rangle \\ &\quad + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 \pm 1 | j_1, j_2, J, M_J \rangle \end{aligned} \quad (2.10)$$

其中我们记 $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ 为非耦合表象的基矢量，并记 $|j_1, j_2, J, M_J\rangle$ 为耦合表象的基矢量（其证明非常简单，同学们可以先尝试利用升降算符性质和完备性关系自证，我们也将在此附录 B 中给出参考证明）。我们已经能够看到，前两式存在相近之处。进一步地，做如下变量替换：

$$\{j_1, m_1; j_2, m_2; J, M_J\} \rightarrow \{j, m_j; 1, m; j', m'_j\}$$

并在等号两端取复共轭（按照一般约定，CG 系数均为实数），即可得到：

$$\begin{aligned} & \sqrt{j'(j'+1) - m'_j(m'_j \mp 1)} \langle j, 1, j', m'_j \mp 1 | j, m_j; 1, m \rangle \\ &= \sqrt{j(j+1) - m_j(m_j \pm 1)} \langle j, 1, j', m'_j | j, m_j \pm 1; 1, m \rangle \\ &+ \sqrt{1 \times (1+1) - m(m \pm 1)} \langle j, 1, j', m'_j | j, m_j; 1, m \pm 1 \rangle \end{aligned} \quad (2.11)$$

其系数与 2.9 已经完全一致。由此，我们非常自然地猜想：

$$\langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle = c(\alpha', j'; \alpha, j) \langle j, 1, j', m'_j | j, m_j; 1, m \rangle \quad (2.12)$$

其中 $c(\alpha', j'; \alpha, j)$ 与 m'_j, m_j, m 均无关。然而，直接给出上式是较为武断的，我们还需对其正确性做进一步说明。事实上，由于 m'_j, m_j, m 对于给定的 α', j', α, j 均有下限，给定矩阵元 $\langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle$ ，只要不断利用 2.9，总可以将其用 $\langle \alpha', j', -j' | \hat{T}_{-1}^{(1)} | \alpha, j, -j \rangle$ 表达。这就是说，对于给定的 α', j', α, j ，由 $\langle \alpha', j', -j' | \hat{T}_{-1}^{(1)} | \alpha, j, -j \rangle$ 可以定出所有的矩阵元 $\langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle$ 。与此同时，CG 系数的逆推规则和球谐张量矩阵元的逆推规则完全一致。在此基础上，我们注意到，总存在常数 c ，使得：

$$\langle \alpha', j', -j' | \hat{T}_{-1}^{(1)} | \alpha, j, -j \rangle = c \langle j, 1, j', -j' | j, -j; 1, -1 \rangle \quad (2.13)$$

由此可以逆推得到其它矩阵元，那么其它矩阵元也无非是 CG 系数的常数 c 倍；同时，上式保证了 c 只能与 α', j', α, j 有关。至此，我们说明了 2.12 的正确性。事实上，它就是一阶球谐张量算符的 Wigner-Eckart 定理。

注：完整的 Wigner-Eckart 定理的表达可参看 J.J. Sakurai 所著 *Modern Quantum Mechanics* 的 3.11 节。事实上，其证明过程和以上所述基本一致，本材料仅对一阶球谐张量算符的定理形式做证明，一方面是为了更好地突出计算偶极跃迁矩阵元的主线，另一方面是希望避免对球谐张量算符的复杂数学讨论。在讨论电四极跃迁等更高阶的跃迁矩阵元时，更高阶的球谐张量算符的使用将不可避免。

2.2 偶极跃迁选择定则

在前文的讨论中，我们提到，给出偶极允许和禁戒跃迁的关键可以归结于矩阵元 $\langle \alpha', j', m'_j | \hat{T}_m^{(1)} | \alpha, j, m_j \rangle$ 为零与否的判断。倘若对于 $m = 0, \pm 1$ 矩阵元均为零，那么任何偏振方向的光都将无法驱动原子在给定能级间发生偶极跃迁，我们即可以断定这些跃迁是禁戒的（注：它只是偶极禁戒跃迁，而仍可能是电四极或更高阶的允许跃迁）。现在，2.12 给予了我们判定矩阵元为零与否的方法。由于跃迁矩阵元正比于对应的 CG 系数，我们想要得到偶极跃迁的选择定则，只需要给出 CG 系数不为零的条件。具体地，对于本问题中的 CG 系数：

$$\langle j, 1, j', m'_j | j, m_j; 1, m \rangle$$

我们知道，它不为零的必要条件是：

$$m'_j = m_j + m, \quad |j - 1| \leq j' \leq |j + 1| \quad (2.14)$$

换言之，我们有：

$$\Delta m_j = 0, \pm 1, \quad \Delta j = 0, \pm 1 \quad (2.15)$$

事实上，满足以上条件的跃迁，除了 $j = 0 \rightarrow j' = 0$ 以及 $\Delta j = 0$ 时 $m_j = 0 \rightarrow m'_j = 0$ 禁戒（前者禁戒原因是 $j = 0$ 与 $l = 1$ 耦合后一定得到 $j' = 1$ ；后者禁戒原因是对应的 CG 系数为零），均是电偶极允许跃迁，这就是我们在原子物理课程中学习的偶极跃迁选择定则。我们可以看到，所考虑的 CG 系数给出的是系统与角动量为 1 的粒子耦合后的状况。事实上，电偶极跃迁即可以看成系统与光场的耦合，同时，结合我们在第一节进行的讨论，不难判断， $\hat{T}_{+1}^{(1)}, \hat{T}_0^{(1)}, \hat{T}_{-1}^{(1)}$ 对应的电场矢量 \mathbf{n}_k 分别代表左旋圆偏振光、线偏振光和右旋圆偏振光；由这三类光驱动的跃迁又分别被称为 σ^+, π, σ^- 跃迁，并对应 $\Delta m_j = +1, 0, -1$ 的情形。利用不同偏振的光对磁量子数的特异性影响和原子的自发辐射，我们可以将原子定向地泵浦到 m_j 最高或最低的态上，这一技术也被称为光抽运，它在实验原子分子物理中有广泛的应用。

值得注意的是，含时微扰论只是考察原子跃迁问题的一种手段，而非必由之路，因此也并非导出选择定则的前提。事实上，对于本问题中所考虑的含时 Hamiltonian，可以利用第 13 次作业第 3 题的方法，直接由 Schrödinger 方程进行求解得到相同的跃迁矩阵元，同学们不妨一试。倘若应用我们在第一次习题课讲义中讨论的电磁场量子化技巧，在量子力学框架下考虑电磁场的影响（本材料中对电磁场的处理仍是经典的），我们还能将自发辐射的理论与受激辐射和共振吸收相统一。同时，在 Wigner-Eckart 定理的基础上，我们还可以对不同能级之间的跃迁速率比值进行定量的考察。这些内容已经大大超出了作为理论基础的量子力学课程的要求，后续课程将带领同学们进行更深层次的探索。希望这一材料能给大家日后的学习或多或少地打下一点基础。

附录

A 数学恒等式1.11的证明

要证明1.11，只需证明对于定义在 $(-\infty, +\infty)$ 上的任意有界连续函数 $g(\beta)$ ，皆有：

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(\beta t)}{\pi \beta^2 t} g(\beta) d\beta = g(0)$$

事实上，这即是 δ 函数的一种定义。注意到：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(\beta t)}{\pi \beta^2 t} g(\beta) d\beta = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{t \sin^2(x)}{\pi x^2} g\left(\frac{x}{t}\right) \frac{1}{t} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(x)}{\pi x^2} g\left(\frac{x}{t}\right) dx \quad (\text{A.1})$$

其中已利用换元 $x = \beta t$ 。现在，在上式等号两端取极限 $t \rightarrow +\infty$ ，利用控制收敛定理交换极限和积分顺序，有：

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(\beta t)}{\pi \beta^2 t} g(\beta) d\beta &= \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(x)}{\pi x^2} g\left(\frac{x}{t}\right) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(x)}{\pi x^2} \lim_{t \rightarrow +\infty} \left[g\left(\frac{x}{t}\right) \right] dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(x)}{\pi x^2} g(0) dx \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

而：

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(x)}{\pi x^2} dx &= \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\sin^2(x)}{x^2} dx \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{1 - \cos(2x)}{2x^2} dx \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{1}{2x^2} \int_0^x 2 \sin(2y) dy dx \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \int_0^x \frac{\sin(2y)}{x^2} dy dx \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \int_y^{+\infty} \frac{\sin(2y)}{x^2} dx dy \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\sin(2y)}{y} dy = \frac{2}{\pi} \int_0^{+\infty} \frac{\sin(z)}{z} dz = 1 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

其中最后一个积分可以通过构造复变函数 $f(z) = \frac{e^{iz}}{z}$ ，取半圆形围道积分并利用 Cauchy 积分定理计算得到，其过程较为简单，同学们可以考虑自行尝试实现。在上式的基础上，结合 A.2，我们有：

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2(\beta t)}{\pi \beta^2 t} g(\beta) d\beta = g(0) \quad (\text{A.4})$$

即为欲证表达式。

本方法由北京大学数学科学学院冯宣瑞同学提供，特此致谢。

B CG 系数递归关系2.10的证明

在本证明中，我们沿用正文中的符号约定。首先，我们利用完备性关系，将耦合表象的基矢量在非耦合表象的基下展开，得到：

$$|j_1, j_2, J, M_J\rangle = \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} |j_1, m'_1; j_2, m'_2\rangle \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2| j_1, j_2, J, M_J\rangle \quad (\text{B.1})$$

然后，我们在上式等号两端以升降算符作用，有：

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J+1) - M_J(M_J \pm 1)} |j_1, j_2, J, M_J\rangle &= \hat{J}_\pm |j_1, j_2, J, M_J \pm 1\rangle \\ &= \hat{J}_\pm \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} |j_1, m'_1; j_2, m'_2\rangle \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2| j_1, j_2, J, M_J\rangle \\ &= \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} (\hat{J}_{1,\pm} + \hat{J}_{2,\pm}) |j_1, m'_1; j_2, m'_2\rangle \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2| j_1, j_2, J, M_J\rangle \\ &= \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} \left[\sqrt{j_1(j_1+1) - m'_1(m'_1 \pm 1)} |j_1, m'_1 \pm 1; j_2, m'_2\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{j_2(j_2+1) - m'_2(m'_2 \pm 1)} |j_1, m'_1; j_2, m'_2 \pm 1\rangle \right] \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2| j_1, j_2, J, M_J\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

再将 $\langle j_1, m'_1; j_2, m'_2|$ 作用其上，并利用正交性，得到：

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J+1) - M_J(M_J \pm 1)} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2| j_1, j_2, J, M_J \pm 1\rangle &= \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} \left[\sqrt{j_1(j_1+1) - m'_1(m'_1 \pm 1)} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2| j_1, m'_1 \pm 1; j_2, m'_2\rangle \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{j_2(j_2+1) - m'_2(m'_2 \pm 1)} \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2| j_1, m'_1; j_2, m'_2 \pm 1\rangle \right] \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2| j_1, j_2, J, M_J\rangle \\ &= \sum_{m'_1} \sum_{m'_2} \left[\sqrt{j_1(j_1+1) - m'_1(m'_1 \pm 1)} \delta_{m_1 \mp 1, m'_1} \delta_{m_2, m'_2} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{j_2(j_2+1) - m'_2(m'_2 \pm 1)} \delta_{m_1, m'_1} \delta_{m_2 \mp 1, m'_2} \right] \langle j_1, m'_1; j_2, m'_2| j_1, j_2, J, M_J\rangle \\ &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \mp 1)} \langle j_1, m_1 \mp 1; j_2, m_2| j_1, j_2, J, M_J\rangle \\ &\quad + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \mp 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 \mp 1| j_1, j_2, J, M_J\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

将全式 \pm 和 \mp 互换，得：

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J+1) - M_J(M_J \mp 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2| j_1, j_2, J, M_J \mp 1\rangle &= \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \pm 1)} \langle j_1, m_1 \pm 1; j_2, m_2| j_1, j_2, J, M_J\rangle \\ &\quad + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \pm 1)} \langle j_1, m_1; j_2, m_2 \pm 1| j_1, j_2, J, M_J\rangle \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

即为欲证表达式。

PART III

参考习题集

2022 秋量子力学 B

参考习题集

课程主讲老师：易为 教授
助教：刘丰铨，宋冰睿

2023 年 2 月 20 日

说明：本习题集供同学们寒假期间及备考期末考试时参考，同学们可以根据自身情况，以自愿为原则，有选择性地完成。倘若在做题过程中遇到困难，欢迎随时和助教讨论。本习题集的完成情况与平时成绩以及总评均无关联。

1. 设 $|l, m\rangle$ 为力学量完全集 $\{\hat{L}^2, \hat{L}_z\}$ 的共同本征态，其中 \hat{L} 和 \hat{L}_z 分别为轨道角动量算符及其在 z 方向上的分量， l, m 为相应的量子数。考虑 $l = 1$ 的子空间：

- (a) 请写出 \hat{L}_x^2 在此子空间内的矩阵表示，并注明所用的基。
- (b) 倘若在 $|l = 1, m = 1\rangle$ 态上对力学量 L_x^2 做测量，求可能的测值和相应的概率。
- (c) 求 $\langle l = 1, m = 1 | \hat{L}_x^2 | l = 1, m = 1 \rangle$ 。

解：本题的部分结论来源于第九次作业第 3 题。

(a) 根据第九次作业第 3 题前三小问的结果，取 $\{|1, m_z\rangle\}$ （其中 m_z 从大到小排列，此后如无特别说明，均遵照这一约定进行排列）为基，有矩阵表示：

$$L_x^2 = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\hbar\right)^2 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1)$$

即为所求。（亦可直接以算符 \hat{L}_x 的本征态为基，得到对角的矩阵表示。）

(b) 在上题所选基下， $|1, m_z = 1\rangle$ 的矩阵表示为：

$$|1, m_z = 1\rangle \xrightarrow{(\hat{L}^2, \hat{L}_z)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

而由第九次作业第 3 题第 5 小问求得的表象变换矩阵 S ，我们有 $|1, m_z = 1\rangle$ 在以 $\{|1, m_x\rangle\}$ 为基的表象下的矩阵表示：

$$|1, m_z = 1\rangle \xrightarrow{(\hat{L}^2, \hat{L}_x)} S \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{2} & 1 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & -\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \quad (3)$$

亦即：

$$|1, m_z = 1\rangle = \frac{1}{2} |1, m_x = 1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{2} |1, m_x = 0\rangle + \frac{1}{2} |1, m_x = -1\rangle \quad (4)$$

因此力学量 L_x^2 的可能测量值分别为 $\hbar^2, 0$, 测得概率各为 $\frac{1}{2}$.

(c) 所求即为力学量 L_x^2 在态 $|1, m_z = 1\rangle$ 下的统计平均值. 利用上一小问的结论, 我们立即有:

$$\langle l = 1, m_z = 1 | \hat{L}_x^2 | l = 1, m_z = 1 \rangle = \frac{1}{2} \times \hbar^2 + \frac{1}{2} \times 0 = \frac{\hbar^2}{2} \quad (5)$$

即为所求.

2. 对两个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子组成的体系, 定义算符 $\hat{P} = \frac{1}{2} (\hat{l} + \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2)$.

(a) 求 \hat{P} 的本征值和本征态.

(b) 求 $\hat{P}|\uparrow\downarrow\rangle$ 和 $\hat{P}|\downarrow\uparrow\rangle$.

(c) 证明: $\hat{P}\hat{\sigma}_1\hat{P} = \hat{\sigma}_2$.

解: 在本题求解过程中, 我们约定粒子可分辨.

(a) 欲求本征态, 我们首先希望找到用于标定本征态的力学量完全集. 利用常规处理思路, 我们将表达式 $\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2$ 替换为:

$$\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 = \frac{1}{2} [(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)^2 - \hat{\sigma}_1^2 - \hat{\sigma}_2^2] \quad (6)$$

因此, 我们有:

$$\hat{P} = \frac{1}{2} \hat{l} + \frac{1}{4} [(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2)^2 - \hat{\sigma}_1^2 - \hat{\sigma}_2^2] \quad (7)$$

记 $\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2 = \hat{\sigma}_t$, 不难得知, $\{\hat{\sigma}_1^2, \hat{\sigma}_2^2, \hat{\sigma}_t^2, \hat{\sigma}_{t,z}\}$ 是一组力学量完全集, 不妨以 $|s, m_s\rangle$ 标定其共同本征态 (注意到 $\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i, i = 1, 2$, 立即有 $\hat{\sigma}_1^2$ 和 $\hat{\sigma}_2^2$ 的本征值必为 3, 不将其加入本征态的标定中将不会导致信息的缺失), 不难看到它也是 \hat{P} 的本征态. 按照角动量耦合的基本规则, 我们知道, s 的取值只能为 0 或 1. 而:

$$\hat{P}|s = 1, m_s\rangle = \left[\frac{1}{2} \hat{l} + \frac{1}{4} (8 - 3 - 3) \hat{l} \right] |s = 1, m_s\rangle = |s = 1, m_s\rangle \quad (8)$$

$$\hat{P}|s = 0, 0\rangle = \left[\frac{1}{2} \hat{l} + \frac{1}{4} (0 - 3 - 3) \hat{l} \right] |s = 0, 0\rangle = -|s = 0, 0\rangle \quad (9)$$

因此, \hat{P} 的本征值分别为 1 (三重简并) 和 -1, 对应的本征态分别为 $|1, m_s\rangle$ 和 $|0, 0\rangle$.

(b) 我们知道:

$$|s = 1, m_s = 0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (10)$$

$$|s = 0, m_s = 0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (11)$$

因而：

$$|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} (|s=1, m_s=0\rangle + |s=0, m_s=0\rangle) \quad (12)$$

$$|\downarrow\uparrow\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} (|s=1, m_s=0\rangle - |s=0, m_s=0\rangle) \quad (13)$$

故：

$$\hat{P}|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \hat{P}(|s=1, m_s=0\rangle + |s=0, m_s=0\rangle) = \frac{\sqrt{2}}{2} (|s=1, m_s=0\rangle - |s=0, m_s=0\rangle) = |\downarrow\uparrow\rangle \quad (14)$$

$$\hat{P}|\downarrow\uparrow\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2} \hat{P}(|s=1, m_s=0\rangle - |s=0, m_s=0\rangle) = \frac{\sqrt{2}}{2} (|s=1, m_s=0\rangle + |s=0, m_s=0\rangle) = |\uparrow\downarrow\rangle \quad (15)$$

即为所求。

(c) 容易求得：

$$\hat{P}|\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \quad (16)$$

$$\hat{P}|\downarrow\downarrow\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad (17)$$

结合上一小问结论，可以将算符 \hat{P} 的效果视为交换两个粒子的自旋状态。我们知道， $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$ 是我们考虑的 Hilbert 空间中的一组完备基。因此，要证明 $\hat{P}\hat{\sigma}_1\hat{P} = \hat{\sigma}_2$ ，只需证明它们在这组基下的矩阵元相等。事实上，我们有：

$$\langle \uparrow\downarrow | \hat{P}\hat{\sigma}_1\hat{P} | \downarrow\uparrow \rangle = \langle \downarrow\uparrow | \hat{\sigma}_1 | \uparrow\downarrow \rangle = \langle \uparrow\downarrow | \hat{\sigma}_2 | \downarrow\uparrow \rangle \quad (18)$$

后一个等号成立的出发点是 $\hat{\sigma}_1$ 仅作用在第一个粒子上而 $\hat{\sigma}_2$ 仅作用在第二个粒子上，因此倘若交换两个粒子的状态并把 $\hat{\sigma}_1$ 替换为 $\hat{\sigma}_2$ ，表达式的值将不会改变。在以上讨论过程中，我们只利用了算符 \hat{P} 的自旋交换性质，因此以上结论可以推广至我们所选择的基下的所有矩阵元，故：

$$\hat{P}\hat{\sigma}_1\hat{P} = \hat{\sigma}_2 \quad (19)$$

即为欲证结论。

3. 考虑 $l=1$ 的轨道角动量与 $s=\frac{1}{2}$ 的自旋角动量耦合，得 $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ ， $|j, m_j\rangle$ 为力学量完全集 $\{\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{j}_z\}$ 的共同本征态。

(a) 求以 $\{|j, m_j\rangle\}$ 为基的耦合表象对应的 $l=1, s=\frac{1}{2}$ 的子空间维度。

(b) 已知耦合表象与非耦合表象间态的关系为：

$$\begin{aligned} \left| j = \frac{3}{2}, m_j \right\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m_j}{3}} \left| m_l = m_j + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m_j}{3}} \left| m_l = m_j - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| j = \frac{1}{2}, m_j \right\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{m_j}{3}} \left| m_l = m_j + \frac{1}{2}, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{m_j}{3}} \left| m_l = m_j - \frac{1}{2}, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

其中 m_j, m_l, m_s 分别为 $\hat{j}_z, \hat{l}_z, \hat{s}_z$ 的量子数，求 $\langle j, m_j | \hat{s}_z | j, m_j \rangle$ 。

(c) 在 (a) 的子空间内以耦合表象为基，写出 \hat{s}_x 的矩阵表示。

(d) 倘若 $\hat{\mathbf{J}}$ 再与 $I = \frac{3}{2}$ 的核自旋角动量耦合, 得 $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{I}}$, 求新的耦合表象在本问题框架下对应的子空间维数, 并分别求出总角动量 $\hat{\mathbf{F}}$ 对应的量子数 F 的可能取值以及它们各自对应的子空间维度.

解:

(a) 依题意, 按照角动量耦合规则, j 的可能取值为 $\frac{1}{2}$ 和 $\frac{3}{2}$, 对应的子空间维数分别为 2 和 4, 因此 $l = 1, s = \frac{1}{2}$ 的子空间维度为 6.

(b) 根据基的正交归一性以及题给耦合表象和非耦合表象间态的关系, 我们有:

$$\left\langle \frac{3}{2}, m_j \middle| \hat{S}_z \middle| \frac{3}{2}, m_j \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left[-\left(\frac{1}{2} - \frac{m_j}{3} \right) + \left(\frac{1}{2} + \frac{m_j}{3} \right) \right] = \frac{m_j \hbar}{3} \quad (20)$$

$$\left\langle \frac{1}{2}, m_j \middle| \hat{S}_z \middle| \frac{1}{2}, m_j \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left[-\left(\frac{1}{2} + \frac{m_j}{3} \right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{m_j}{3} \right) \right] = -\frac{m_j \hbar}{3} \quad (21)$$

(c) 根据上一小问的条件, 我们有:

$$\begin{cases} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \left| m_l = 1, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \left| m_l = 1, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left| m_l = 0, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left| m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left| m_l = -1, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \left| m_l = -1, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left| m_l = 1, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \left| m_l = 0, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \left| m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \left| m_l = -1, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \end{cases} \quad (22)$$

以及算符 \hat{S}_x 的作用结果:

$$\begin{cases} \hat{S}_x \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left| m_l = 1, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \hat{S}_x \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left(\sqrt{\frac{2}{3}} \left| m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left| m_l = 1, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ \hat{S}_x \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left(\sqrt{\frac{1}{3}} \left| m_l = -1, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left| m_l = 0, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ \hat{S}_x \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left| m_l = -1, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \\ \hat{S}_x \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left(-\sqrt{\frac{1}{3}} \left| m_l = 0, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left| m_l = 1, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ \hat{S}_x \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left(-\sqrt{\frac{2}{3}} \left| m_l = -1, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \left| m_l = 0, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \right) \end{cases} \quad (23)$$

在此基础上，我们可以得到算符 \hat{S}_x 在以如上顺序排列的基下的矩阵表示：

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & \frac{2}{3} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & -\frac{1}{3} \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \end{pmatrix} \quad (24)$$

本小问可视作第十一次作业第 2 题的拓展.

(d) 根据角动量耦合规则，可给出下表（其中右侧最后一列是对应子空间的维数，即 $2F+1$ ）：

$$\begin{aligned} J = \frac{3}{2} &\rightarrow \begin{cases} F = 3 \rightarrow 7 \\ F = 2 \rightarrow 5 \\ F = 1 \rightarrow 3 \\ F = 0 \rightarrow 1 \end{cases} \\ J = \frac{1}{2} &\rightarrow \begin{cases} F = 2 \rightarrow 5 \\ F = 1 \rightarrow 3 \end{cases} \end{aligned}$$

在新的耦合表象下子空间的总维数为 24.

4. 考虑 $l=2$ 的轨道角动量与 $s=\frac{1}{2}$ 的自旋角动量耦合，得 $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$, $|j, m_j\rangle$ 为力学量完全集 $\{\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{j}_z\}$ 的共同本征态.

(a) 求以 $\{|j, m_j\rangle\}$ 为基的耦合表象对应的 $l=2, s=\frac{1}{2}$ 的子空间维度.

(b) 倘若 $\hat{\mathbf{J}}$ 再与 $I=\frac{3}{2}$ 的核自旋角动量耦合，得 $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{I}}$ ，求新的耦合表象在本问题框架下对应的子空间维数，并分别求出总角动量 $\hat{\mathbf{F}}$ 对应的量子数 F 的可能取值以及它们各自对应的子空间维度.

解：本题求解思路和上题完全一致，因此略去过程直接给出答案：(a) 10. (b) 总维数为 40. 如下表：

$$\begin{aligned} J = \frac{5}{2} &\rightarrow \begin{cases} F = 4 \rightarrow 9 \\ F = 3 \rightarrow 7 \\ F = 2 \rightarrow 5 \\ F = 1 \rightarrow 3 \end{cases} \\ J = \frac{3}{2} &\rightarrow \begin{cases} F = 3 \rightarrow 7 \\ F = 2 \rightarrow 5 \\ F = 1 \rightarrow 3 \\ F = 0 \rightarrow 1 \end{cases} \end{aligned}$$

5. 考虑由三个可分辨自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子构成的体系，其 Hamiltonian 算符为：

$$\hat{H} = A\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + B(\hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{S}}_3 + \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_3)$$

其中 A, B 均为实常数。求体系能级及简并度。

解：本题同第十一次作业第 3 题相似。首先，我们注意到题给 Hamiltonian 等号右边第二个括号内的项不易进行处理。因此，我们首先将 \hat{H} 改写为：

$$\hat{H} = (A - B)\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + B(\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_2 \cdot \hat{\mathbf{S}}_3 + \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_3) \quad (25)$$

进而，记 $\hat{\mathbf{S}}_{123} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2 + \hat{\mathbf{S}}_3$, $\hat{\mathbf{S}}_{12} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ ，有：

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{A - B}{2}(\hat{\mathbf{S}}_{12}^2 - \hat{\mathbf{S}}_1^2 - \hat{\mathbf{S}}_2^2) + \frac{B}{2}(\hat{\mathbf{S}}_{123}^2 - \hat{\mathbf{S}}_1^2 - \hat{\mathbf{S}}_2^2 - \hat{\mathbf{S}}_3^2) \\ &= \frac{A - B}{2}\hat{\mathbf{S}}_{12}^2 + \frac{B}{2}\hat{\mathbf{S}}_{123}^2 - \frac{A}{2}\hat{\mathbf{S}}_1^2 - \frac{A}{2}\hat{\mathbf{S}}_2^2 - \frac{B}{2}\hat{\mathbf{S}}_3^2 \end{aligned} \quad (26)$$

此时，我们注意到， $\{\hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{\mathbf{S}}_2^2, \hat{\mathbf{S}}_3^2, \hat{\mathbf{S}}_{12}^2, \hat{\mathbf{S}}_{123}^2\}$ 是一组对易力学量算符，从而它们与 \hat{H} 也对易。同时，我们知道，对于以上力学量算符的共同本征态（不妨记为 $|s_{12}, s_{123}\rangle$ ）。我们也可以将 s_{12}, s_{123} 称为体系的“好量子数”， $\hat{\mathbf{S}}_1^2, \hat{\mathbf{S}}_2^2, \hat{\mathbf{S}}_3^2$ 的本征值一定为 $\frac{3\hbar^2}{4}$ ，故有：

$$\begin{aligned} \hat{H}|s_{12}, s_{123}\rangle &= \left(\frac{A - B}{2}\hat{\mathbf{S}}_{12}^2 + \frac{B}{2}\hat{\mathbf{S}}_{123}^2 - \frac{A}{2}\hat{\mathbf{S}}_1^2 - \frac{A}{2}\hat{\mathbf{S}}_2^2 - \frac{B}{2}\hat{\mathbf{S}}_3^2 \right)|s_{12}, s_{123}\rangle \\ &= \left[\frac{A - B}{2}s_{12}(s_{12} + 1)\hbar^2 + \frac{B}{2}s_{123}(s_{123} + 1)\hbar^2 - \frac{3A\hbar^2}{4} - \frac{3B\hbar^2}{8} \right]|s_{12}, s_{123}\rangle \\ &= \left[\frac{A - B}{2}s_{12}(s_{12} + 1) + \frac{B}{2}s_{123}(s_{123} + 1) - \frac{3A}{4} - \frac{3B}{8} \right]\hbar^2|s_{12}, s_{123}\rangle \end{aligned} \quad (27)$$

其中有以下三种可能的 $\{s_{12}, s_{123}\}$ 取值组合：

$$\{s_{12}, s_{123}\} = \left\{ 1, \frac{3}{2} \right\} \rightarrow \hat{H} \left| 1, \frac{3}{2} \right\rangle = \left(\frac{1}{4}A + \frac{1}{2}B \right)\hbar^2 \left| 1, \frac{3}{2} \right\rangle \quad (28)$$

$$\{s_{12}, s_{123}\} = \left\{ 1, \frac{1}{2} \right\} \rightarrow \hat{H} \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle = \left(\frac{1}{4}A - B \right)\hbar^2 \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (29)$$

$$\{s_{12}, s_{123}\} = \left\{ 0, \frac{1}{2} \right\} \rightarrow \hat{H} \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{3}{4}A\hbar^2 \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle \quad (30)$$

因此，当 $A \neq B$ 时，体系有三个能级，能量分别为 $\left(\frac{1}{4}A + \frac{1}{2}B \right)\hbar^2, \left(\frac{1}{4}A - B \right)\hbar^2, -\frac{3}{4}A\hbar^2$ ，简并度分别为 4, 2, 2；当 $A = B$ 时，体系与第十一次作业第 3 题给出的完全相同，有两个能级，能量分别为 $-\frac{3}{4}A\hbar^2$ 和 $\frac{3}{4}A\hbar^2$ ，简并度均为 4。

（注：请同学们注意，本题不宜将每个 $\hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j$ 都表达为 $\frac{1}{2}(\hat{\mathbf{S}}_{ij}^2 - \hat{\mathbf{S}}_i^2 - \hat{\mathbf{S}}_j^2)$ 的形式后处理，这是因为 $\hat{\mathbf{S}}_{ij}$ 与 $\hat{\mathbf{S}}_{jk}$ 不对易，不存在完备的共同本征态集合，而这将使我们无法在其基础上计算能级。）

6. 考虑由四个可分辨自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子构成的体系，其 Hamiltonian 算符为：

$$\hat{H} = J(\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 + \hat{S}_2 \cdot \hat{S}_3 + \hat{S}_3 \cdot \hat{S}_4 + \hat{S}_4 \cdot \hat{S}_1)$$

其中 J 为正数。请选择一组合适的相容力学量，并：

(a) 求出体系能级及简并度。

(b) 给出基态在非耦合表象下的表达式（即表达为形如 $|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$ 的态的线性组合）。倘若粒子为磁偶极子，系统将体现出反铁磁性，请根据本小问的讨论解释该现象。

解：首先，利用和上问相似的处理程式，我们有：

$$\begin{aligned}\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 + \hat{S}_2 \cdot \hat{S}_3 + \hat{S}_3 \cdot \hat{S}_4 + \hat{S}_4 \cdot \hat{S}_1 &= \frac{1}{2} \left(\hat{S}_{1234}^2 - \sum_{i=1}^4 \hat{S}_i^2 \right) - \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_3 - \hat{S}_2 \cdot \hat{S}_4 \\ &= \frac{1}{2} \left(\hat{S}_{1234}^2 - \sum_{i=1}^4 \hat{S}_i^2 \right) - \frac{1}{2} (\hat{S}_{13}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_3^2) - \frac{1}{2} (\hat{S}_{24}^2 - \hat{S}_2^2 - \hat{S}_4^2) \\ &= \frac{1}{2} (\hat{S}_{1234}^2 - \hat{S}_{13}^2 - \hat{S}_{24}^2)\end{aligned}\quad (31)$$

那么：

$$\hat{H} = \frac{J}{2} (\hat{S}_{1234}^2 - \hat{S}_{13}^2 - \hat{S}_{24}^2) \quad (32)$$

不难验证， $\{\hat{S}_{1234}^2, \hat{S}_{13}^2, \hat{S}_{24}^2, \hat{H}\}$ 是一组相容力学量，它们的共同本征态可以用 $|s_{13}, s_{24}, s_{1234}\rangle$ 表示，后者满足：

$$\hat{H}|s_{13}, s_{24}, s_{1234}\rangle = \frac{J}{2} [s_{1234}(s_{1234}+1) - s_{13}(s_{13}+1) - s_{24}(s_{24}+1)] \hbar^2 |s_{13}, s_{24}, s_{1234}\rangle \quad (33)$$

我们可以将总自旋角动量 \mathbf{S}_{1234} 看作 \mathbf{S}_{13} 和 \mathbf{S}_{24} 的耦合。

(a) 在以上讨论的基础上，我们可以轻松地计算体系能级和简并度，如下表：

$$\begin{array}{lll}\{s_{13}, s_{24}\} = \{1, 1\} & \rightarrow & \begin{cases} s_{1234} = 2 \rightarrow E = J\hbar^2, & f = 5 \\ s_{1234} = 1 \rightarrow E = -J\hbar^2, & f = 3 \\ s_{1234} = 0 \rightarrow E = -2J\hbar^2, & f = 1 \end{cases} \\ \{s_{13}, s_{24}\} = \{1, 0\} & \rightarrow & s_{1234} = 1 \rightarrow E = 0, \quad f = 3 \\ \{s_{13}, s_{24}\} = \{0, 1\} & \rightarrow & s_{1234} = 1 \rightarrow E = 0, \quad f = 3 \\ \{s_{13}, s_{24}\} = \{0, 0\} & \rightarrow & s_{1234} = 0 \rightarrow E = 0, \quad f = 1\end{array}$$

综上所述，体系共有四个能级，能量分别为 $J\hbar^2, 0, -J\hbar^2, -2J\hbar^2$ ，简并度分别为 5, 7, 3, 1。

(b) 由 (a) 中结论，由 J 为正数，有基态能量为 $-2J\hbar^2$ ，基态态矢量为 $|s_{13} = 1, s_{24} = 1, s_{1234} = 0\rangle$ 。接下来，我们求它在非耦合表象下的表达。直接处理四角动量耦合问题较为复杂，作为替代，我们将其拆分为两步。首先，我们可以将 $|s_{13} = 1, s_{24} = 1, s_{1234} = 0, m_{s,1234} = 0\rangle$ 表达为 $|s_{13} = 1, m_{s,13}; s_{24} = 1, m_{s,24}\rangle$ 的线性组合的形式。查 CG 系数表中 1×1 的子表，得：

$$|s_{13} = 1, s_{24} = 1, s_{1234} = 0, m_{s,1234} = 0\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 1; 1, -1\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 0; 1, 0\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |1, -1; 1, 1\rangle \quad (34)$$

然后, 根据 (10) 和:

$$|s = 1, m_s = 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \quad (35)$$

$$|s = 1, m_s = -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad (36)$$

可将 $|s_{13} = 1, s_{24} = 1, s_{1234} = 0, m_{s,1234} = 0\rangle$ 完全在非耦合表象下展开, 整理得到:

$$|s_{13} = 1, s_{24} = 1, s_{1234} = 0, m_{s,1234} = 0\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - \frac{\sqrt{3}}{6}(|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle) + \sqrt{\frac{1}{3}}|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \quad (37)$$

即为所求, 其中每个 Dirac 右矢中的四个箭头依次表示四个粒子的自旋状态. 当粒子均为磁偶极子时, 由于基态下系统总自旋角动量为零, 故基态下系统磁矩为零. 因此, 材料宏观净磁矩较小 (当环境温度为趋于 0K 时趋于零), 表现出反铁磁性. (注意: 这仅是反铁磁性现象的较为简单和片面的解释.)

7. 一个自旋为 1 的粒子的 Hamiltonian 算符为:

$$\hat{H} = A\hat{S}_z^2 + B(\hat{S}_x^2 - \hat{S}_y^2)$$

其中 A, B 均为实常数. 求体系的能量本征值以及相应的能量本征态.

解: 我们在以 $\{|s = 1, m_s\rangle\}$ 为基 (其中 m_s 是算符 \hat{S}_z 对应的量子数) 的表象下处理本问题. 第九次作业第 3 题第二问给出, 在这一表象下, 算符 \hat{S}_x 和算符 \hat{S}_y 的矩阵表示分别为:

$$S_x = \frac{1}{2}(L_+ - L_-) = \frac{\sqrt{2}}{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (38)$$

$$S_y = \frac{1}{2i}(L_+ - L_-) = \frac{\sqrt{2}}{2}i\hbar \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (39)$$

因此, 有:

$$S_x^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (40)$$

$$S_y^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (41)$$

因此 Hamiltonian 算符 \hat{H} 在我们所选取的表象下的矩阵表示为:

$$\hat{H} = A\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{B\hbar^2}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right] = \hbar^2 \begin{pmatrix} A & 0 & B \\ 0 & 0 & 0 \\ B & 0 & A \end{pmatrix} \quad (42)$$

对角化程式给出如下的能量本征值及对应的本征矢量:

$$E_1 = (A + B)\hbar^2, \quad |E_1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}(|1, 1\rangle + |1, -1\rangle) \quad (43)$$

$$E_2 = (A - B)\hbar^2, \quad |E_2\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}(|1, 1\rangle - |1, -1\rangle) \quad (44)$$

$$E_3 = 0, \quad |E_3\rangle = |1, 0\rangle \quad (45)$$

即为所求.

8. 已知 ^{171}Yb 原子核自旋为 $I = \frac{1}{2}$, 分别写出其基态 $6s^2$ 及第一激发态 $6s6p$ 所有可能的光谱项及超精细结构能级(选用合适的量子数进行标定).

解: 我们首先简要回顾原子物理课程中给出的谱项记法:

$$^{2s+1}L_j$$

其中 s 为组态的自旋量子数, $2s + 1$ 为组态的多重数即可能的自旋状态数, L 为组态的轨道角动量子数对应的大写字母, j 为组态的总角动量量子数. (1) 对于基态 $6s^2$, Pauli 不相容原理要求两电子的自旋磁量子数相异, 因此两电子只能构成自旋单重态, $s = 0$. 同时, 由于 s 轨道的轨道角动量量子数为 0, 故有 $6s^2$ 的谱项:

$$^1S_0 \quad (46)$$

相应地, 根据角动量耦合规则, 有 $F = \frac{1}{2}$, 所得超精细能级可用:

$$^1S_0, \quad F = \frac{1}{2} \quad (47)$$

表示, 这相当于使用量子数 L, S, J, F 对其进行了标定.

(2) 对于第一激发态 $6s6p$, 电子自旋取向没有约束, 因此 s 的取值可以为 0 或 1, 故有 $6s6p$ 的可能谱项:

$$^3P_{2,1,0}, ^1P_1 \quad (48)$$

相应地, 根据角动量耦合规则, 有以下超精细结构能级:

$$\begin{aligned} & ^3P_2, \quad F = \frac{5}{2}, \frac{3}{2} \\ & ^3P_1, \quad F = \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \\ & ^3P_0, \quad F = \frac{1}{2} \\ & ^1P_1, \quad F = \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (49)$$

即为所求.

9. 考虑氢原子:

(a) 请利用基本对易关系证明:

$$[\hat{L}^2, [\hat{L}^2, \hat{r}_i]] = 2\hbar^2 (\hat{L}^2 \hat{r}_i + \hat{r}_i \hat{L}^2)$$

其中 \hat{L} 为轨道角动量算符, \hat{r}_i 为位置算符的分量.

(b) 请以此为基础, 给出矩阵元 $\langle n'l'm' | \hat{r}_i | nlm \rangle$ 不为零的必要条件, 由此可以得到氢原子偶极跃迁角量子数的选择定则.

解:

(a) 我们首先计算 $[\hat{L}^2, \hat{r}_i]$. 根据欲证结论形式, 我们希望能够尽可能多地消去角动量算符分量 \hat{L}_j 而保留 \hat{r}_i . 利用基本对易关系和对易子的性质, 我们有:

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, \hat{r}_i] &= [\hat{L}_j \hat{L}_j, \hat{r}_i] \\ &= \hat{L}_j [\hat{L}_j, \hat{r}_i] + [\hat{L}_j, \hat{r}_i] \hat{L}_j \\ &= i\hbar \epsilon_{jik} \hat{L}_j \hat{r}_k + i\hbar \epsilon_{jik} \hat{r}_k \hat{L}_j \\ &= i\hbar \epsilon_{jik} [\hat{L}_j, \hat{r}_k] + 2i\hbar \epsilon_{jik} \hat{r}_k \hat{L}_j \\ &= -\hbar^2 \epsilon_{jik} \epsilon_{jkm} \hat{r}_m + 2i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{L}_k \\ &= 2\hbar^2 \delta_{im} \hat{r}_m + 2i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{L}_k \\ &= 2\hbar^2 \hat{r}_i + 2i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{L}_k \end{aligned} \quad (50)$$

其中已利用 $\epsilon_{jki} \epsilon_{jkm} = 2\delta_{im}$, 进而, 我们有:

$$\begin{aligned} [\hat{L}^2, [\hat{L}^2, \hat{r}_i]] &= 2\hbar^2 [\hat{L}^2, \hat{r}_i] + 2i\hbar \epsilon_{ijk} [\hat{L}^2, \hat{r}_j \hat{L}_k] \\ &= 2\hbar^2 [\hat{L}^2, \hat{r}_i] + 2i\hbar \epsilon_{ijk} [\hat{L}^2, \hat{r}_j] \hat{L}_k \end{aligned} \quad (51)$$

我们看到, 上式最后一个等号右端第一项已经同欲证形式相似, 而第二项中仍然存在多余的 \hat{L}_k . 利用(50), 我们可以将上式中第二项改写为:

$$2i\hbar \epsilon_{ijk} [\hat{L}^2, \hat{r}_j] \hat{L}_k = 4i\hbar^3 \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{L}_k - 4\hbar^2 \epsilon_{ijk} \epsilon_{jmn} \hat{r}_m \hat{L}_n \hat{L}_k \quad (52)$$

等号右端第一项似乎不容易处理, 因此我们先处理第二项:

$$\begin{aligned} -4\hbar^2 \epsilon_{ijk} \epsilon_{jmn} \hat{r}_m \hat{L}_n \hat{L}_k &= -4\hbar^2 \epsilon_{ijk} \epsilon_{jmn} \hat{r}_m \hat{L}_n \hat{L}_k \\ &= 4\hbar^2 (\delta_{im} \delta_{kn} - \delta_{in} \delta_{km}) \hat{r}_m \hat{L}_n \hat{L}_k \\ &= 4\hbar^2 \hat{r}_i \hat{L}_k \hat{L}_k - 4\hbar^2 \hat{r}_k \hat{L}_i \hat{L}_k \\ &= 4\hbar^2 \hat{r}_i \hat{L}^2 - 4\hbar^2 \hat{r}_k [\hat{L}_i, \hat{L}_k] - 4\hbar^2 \hat{r}_k \hat{L}_k \hat{L}_i \\ &= 4\hbar^2 \hat{r}_i \hat{L}^2 - 4i\hbar^3 \epsilon_{jik} \hat{r}_k \hat{L}_j - 4\hbar^2 (\hat{r} \cdot \hat{L}) \hat{L}_i \\ &= 4\hbar^2 \hat{r}_i \hat{L}^2 - 4i\hbar^3 \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{L}_k \end{aligned} \quad (53)$$

其中已利用轨道角动量的性质. 代入前式, 得:

$$2i\hbar \epsilon_{ijk} [\hat{L}^2, \hat{r}_j] \hat{L}_k = 4i\hbar^3 \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{L}_k + 4\hbar^2 \hat{r}_i \hat{L}^2 - 4i\hbar^3 \epsilon_{ijk} \hat{r}_j \hat{L}_k = 4\hbar^2 \hat{r}_i \hat{L}^2 \quad (54)$$

再代入(51), 我们有:

$$[\hat{L}^2, [\hat{L}^2, \hat{r}_i]] = 2\hbar^2 [\hat{L}^2, \hat{r}_i] + 4\hbar^2 \hat{r}_i \hat{L}^2 = 2\hbar^2 (\hat{L}^2 \hat{r}_i + \hat{r}_i \hat{L}^2) \quad (55)$$

即为欲证结论.

(b) 首先, 我们计算 $\langle n' l' m' | [\hat{L}^2, [\hat{L}^2, \hat{r}_i]] | nlm \rangle$. 具体地, 有:

$$\begin{aligned} \langle n' l' m' | [\hat{L}^2, [\hat{L}^2, \hat{r}_i]] | nlm \rangle &= \langle n' l' m' | \hat{L}^2 [\hat{L}^2, \hat{r}_i] | nlm \rangle - \langle n' l' m' | [\hat{L}^2, \hat{r}_i] \hat{L}^2 | nlm \rangle \\ &= \hbar^2 [l'(l'+1) - l(l+1)] \langle n' l' m' | [\hat{L}^2, \hat{r}_i] | nlm \rangle \\ &= \hbar^4 [l'(l'+1) - l(l+1)]^2 \langle n' l' m' | \hat{r}_i | nlm \rangle \end{aligned} \quad (56)$$

然后, 我们计算 $\langle n' l' m' | [2\hbar^2 (\hat{L}^2 \hat{r}_i + \hat{r}_i \hat{L}^2)] | nlm \rangle$:

$$\langle n' l' m' | [2\hbar^2 (\hat{L}^2 \hat{r}_i + \hat{r}_i \hat{L}^2)] | nlm \rangle = 2\hbar^2 [l'(l'+1) + l(l+1)] \langle n' l' m' | \hat{r}_i | nlm \rangle \quad (57)$$

我们在(a)中所证明的对易关系要求上两式最后一个等号右端的表达式相等, 即:

$$\hbar^4 [l'(l'+1) - l(l+1)]^2 \langle n' l' m' | \hat{r}_i | nlm \rangle = 2\hbar^4 [l'(l'+1) + l(l+1)] \langle n' l' m' | \hat{r}_i | nlm \rangle \quad (58)$$

整理得:

$$(l' - l - 1)(l' - l + 1)(l' + l)(l' + l + 2) \langle n' l' m' | \hat{r}_i | nlm \rangle = 0 \quad (59)$$

同时考虑到 $l, l' \geq 0$, 有矩阵元 $\langle n' l' m' | \hat{r}_i | nlm \rangle$ 不为零的必要条件:

$$l' - l = \Delta l = \pm 1, \quad l' = l = 0 \quad (60)$$

经简单检验, 当 $l' = l = 0$, 跃迁矩阵元也为零 ($l = 0$ 时角向波函数为 $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$, 由此可对结论进行验证). 因此, 氢原子偶极跃迁角量子数的选择定则为 $\Delta l = \pm 1$.

10. 一个自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子处在一维简谐势阱中, 并受到微扰. 体系的 Hamiltonian 算符为:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 \hat{x}^2 + \lambda\hbar\omega\hat{\sigma}_x + \sqrt{\frac{\mu\hbar\omega^3}{2}}\varepsilon\hat{\sigma}_z\hat{x}$$

其中 $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_z$ 为 Pauli 算符, $\lambda, \varepsilon \ll 1$ 均为小量.

(a) 记一维谐振子的本征态为 $|n\rangle, n \in \mathbb{N}$. 请在 $n = 0, 1$ 的子空间内以 $|n, m_z\rangle$ 为基写出 \hat{H} 的矩阵表示, 其中 m_z 为 z 方向上的自旋磁量子数.

(b) 利用定态微扰论求谐振子体系基态子空间 ($n = 0$) 的各态能量, 精确到二阶小量.

解: 按照一般的微扰论程式, 记:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 \hat{x}^2 \quad (61)$$

其本征态即为 $|n\rangle$, 对应的能量本征值为:

$$E_{n, m_z}^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (62)$$

记 m_z 的可能取值分别为 \uparrow, \downarrow . 同时, 利用:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (63)$$

我们有:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda\hbar\omega\hat{\sigma}_x + \frac{\varepsilon}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (64)$$

(a) 因而, 根据升降算符和 Pauli 算符的基本性质, 可以计算得到:

$$\hat{H}|0, \uparrow\rangle = \hbar\omega \left(\frac{1}{2}|0, \uparrow\rangle + \lambda|0, \downarrow\rangle + \frac{\varepsilon}{2}|1, \uparrow\rangle \right) \quad (65)$$

$$\hat{H}|0, \downarrow\rangle = \hbar\omega \left(\frac{1}{2}|0, \downarrow\rangle + \lambda|0, \uparrow\rangle - \frac{\varepsilon}{2}|1, \downarrow\rangle \right) \quad (66)$$

$$\hat{H}|1, \uparrow\rangle = \hbar\omega \left(\frac{3}{2}|1, \uparrow\rangle + \lambda|1, \downarrow\rangle + \frac{\sqrt{2}\varepsilon}{2}|2, \uparrow\rangle + \frac{\varepsilon}{2}|0, \uparrow\rangle \right) \quad (67)$$

$$\hat{H}|1, \downarrow\rangle = \hbar\omega \left(\frac{3}{2}|1, \downarrow\rangle + \lambda|1, \uparrow\rangle - \frac{\sqrt{2}\varepsilon}{2}|2, \downarrow\rangle - \frac{\varepsilon}{2}|0, \downarrow\rangle \right) \quad (68)$$

由此, 可以写出在基 $\{|0, \uparrow\rangle, |0, \downarrow\rangle, |1, \uparrow\rangle, |1, \downarrow\rangle\}$ 下 Hamiltonian 算符 \hat{H} 的矩阵表示:

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \lambda & \frac{\varepsilon}{2} & 0 \\ \lambda & 1 & 0 & -\frac{\varepsilon}{2} \\ \frac{\varepsilon}{2} & 0 & \frac{3}{2} & \lambda \\ 0 & -\frac{\varepsilon}{2} & \lambda & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \quad (69)$$

即为所求.

(b) 我们看到, 在本问题中, $n = 0$ 的子空间是二维; 在未施加微扰时, $|0, \uparrow\rangle$ 和 $|0, \downarrow\rangle$ 是简并的. 同时, 根据 (65) 和 (66), 施加微扰后, $n = 0$ 的子空间仅与 $n = 1$ 的子空间发生耦合, 因此 (69) 给出的矩阵已包含所有我们需要的矩阵元. 现在, 我们首先确定 $n = 0$ 的子空间中的零级态. 技术上, 这等同于对角化矩阵 (69) 左上角 2×2 的子矩阵 $H_{n=0}$. 不难看出, 对该部分矩阵做如下酉变换:

$$U_{n=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (70)$$

(这又被称为 Hadamard 变换) 可将其对角化为:

$$H'_{n=0} = U_{n=0}^\dagger H_{n=0} U_{n=0} = \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \lambda & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} - \lambda \end{pmatrix} \quad (71)$$

其本征值:

$$E_{0,+}^{(0)} = \left(\frac{1}{2} + \lambda\right) \hbar\omega \quad (72)$$

$$E_{0,-}^{(0)} = \left(\frac{1}{2} - \lambda\right) \hbar\omega \quad (73)$$

对应的本征矢量可分别记为:

$$|0,+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0,\uparrow\rangle + |0,\downarrow\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (74)$$

$$|0,-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0,\uparrow\rangle - |0,\downarrow\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (75)$$

至此, 我们得到了 $n = 0$ 子空间中的零级态以及它们所对应的“零级能量”的表达。(注意: 事实上, 这里得到的零级能量已经包含了一阶修正。简并的解除恰恰是一阶修正的结果。)

接下来, 我们求能量的二阶修正。在新的基 $\{|0,+\rangle, |0,-\rangle, |1,\uparrow\rangle, |1,\downarrow\rangle\}$ 下, 算符 \hat{H} 的矩阵表示为:

$$H' = U^\dagger H U = \hbar\omega \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \lambda & 0 & \frac{\varepsilon}{2\sqrt{2}} & -\frac{\varepsilon}{2\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{2} - \lambda & \frac{\varepsilon}{2\sqrt{2}} & \frac{\varepsilon}{2\sqrt{2}} \\ \frac{\varepsilon}{2\sqrt{2}} & \frac{\varepsilon}{2\sqrt{2}} & \frac{3}{2} & \lambda \\ -\frac{\varepsilon}{2\sqrt{2}} & \frac{\varepsilon}{2\sqrt{2}} & \lambda & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \quad (76)$$

其中变换矩阵:

$$U = \begin{pmatrix} U_{n=0} & 0 \\ 0 & I_{2 \times 2} \end{pmatrix} \quad (77)$$

而 $I_{2 \times 2}$ 为二阶单位阵; 矩阵乘法可简化为分块矩阵相乘。接下来, 由于 $n = 0$ 子空间的简并已经解除, 我们可以在非简并微扰论框架下求能量的二阶修正。具体地, 我们有:

$$E_{0,+}^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n, m_z | \hat{H} | 0, + \rangle|^2}{E_{0,+}^{(0)} - E_{n,m_z}^{(0)}} = -\frac{\varepsilon^2}{4} \hbar\omega \quad (78)$$

$$E_{0,-}^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle n, m_z | \hat{H} | 0, - \rangle|^2}{E_{0,-}^{(0)} - E_{n,m_z}^{(0)}} = -\frac{\varepsilon^2}{4} \hbar\omega \quad (79)$$

其中已利用 (62), (72) 和 (73)。综上所述, 我们有, 在精确到二阶小量的条件下:

$$E_{0,+} = \left(\frac{1}{2} + \lambda - \frac{\varepsilon^2}{4}\right) \hbar\omega \quad (80)$$

$$E_{0,-} = \left(\frac{1}{2} - \lambda - \frac{\varepsilon^2}{4}\right) \hbar\omega \quad (81)$$

即为所求。

11. 考虑一维受微扰的谐振子，其 Hamiltonian 算符写做：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \delta m\omega^2 \hat{x} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2$$

其中 $\delta \ll 1$ 为小量.

(a) 利用定态微扰论求体系能量本征值，精确到二阶小量.

(b) 精确求解体系本征值问题，并与 (a) 的结果相比较.

解：在本题中，我们记：

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 \quad (82)$$

$$\hat{V} = \delta m\omega^2 \hat{x} \quad (83)$$

并记算符 \hat{H}_0 的本征态为 $|n\rangle$ ，对应的本征值为：

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (84)$$

进一步地，利用算符 \hat{x} 可被分解为谐振子体系产生、湮灭算符的性质 (63)，有：

$$\hat{V} = \delta \sqrt{\frac{m\hbar\omega^3}{2}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad (85)$$

(a) 利用非简并态微扰论程式，有能量的一阶、二阶修正：

$$E_n^{(1)} = \langle n | \hat{V} | n \rangle = \delta \sqrt{\frac{m\hbar\omega^3}{2}} \langle n | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | n \rangle = 0 \quad (86)$$

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \hat{V} | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \\ &= \sum_{m \neq n} \frac{\delta^2 m \hbar \omega^3}{2} \frac{|\langle m | (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) | n \rangle|^2}{(n - m) \hbar \omega} \end{aligned} \quad (87)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{m \neq n} \frac{\delta^2 m \omega^2}{2} \frac{|\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1}|^2}{n - m} \\ &= \frac{\delta^2 m \omega^2}{2} (-n - 1 + n) = -\frac{m \omega^2}{2} \delta^2 \end{aligned}$$

因此，我们有，在精确到二阶小量的条件下：

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2\delta^2 \quad (88)$$

即为所求.

(b) 我们注意到，题给 Hamiltonian 算符表达式可改写做：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 (\hat{x}^2 + 2\delta\hat{x} + \delta^2\hat{I}) - \frac{1}{2}m\omega^2\delta^2\hat{I} \xrightarrow{\hat{x}^2 = \hat{x} + \delta\hat{I}} \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2\delta^2\hat{I} \quad (89)$$

容易验证:

$$[\hat{x}', \hat{p}] = i\hbar \quad (90)$$

这正是一维谐振子理论的基石. 因此, 我们可以在新的 Hamiltonian 表达式的基础上重新定义产生、湮灭算符, 并令 $|n\rangle'$ 满足:

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}'^2 \right) |n\rangle' = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega |n\rangle' \quad (91)$$

由此, $|n\rangle'$ 亦是 \hat{H} 的本征态, 有:

$$\hat{H} |n\rangle' = \left[\left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2 \delta^2 \right] |n\rangle' \quad (92)$$

这与 (a) 的结果完全一致.

12. 设某二能级体系在含时外场作用下的 Hamiltonian 算符为:

$$\hat{H} = E_a |a\rangle \langle a| + E_b |b\rangle \langle b| + V(t) |a\rangle \langle b| + V^*(t) |b\rangle \langle a|$$

其中 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$ 分别是能量为 E_a 和 E_b 的能级对应的本征态 (E_a 和 E_b 均不含时).

(a) 对于任意量子态 $|\varphi\rangle = c_a |a\rangle + c_b |b\rangle$, 求系数 c_a 和 c_b 满足的时间演化方程.

(b) 做变换:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_a &= e^{iE_a t/\hbar} c_a \\ \tilde{c}_b &= e^{iE_b t/\hbar} c_b \end{aligned}$$

求 \tilde{c}_a 和 \tilde{c}_b 满足的时间演化方程.

(c) 设体系在 $t = 0$ 时刻满足 $\tilde{c}_a = 1, \tilde{c}_b = 0$, 利用一阶含时微扰论写出在任意时刻 $t \geq 0$ 体系处在能级 b 的概率.

解:

(a) 根据 Schrödinger 方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\varphi\rangle = \hat{H} |\varphi\rangle \quad (93)$$

而:

$$\hat{H} |\varphi\rangle = c_a (E_a + V) |a\rangle + c_b (E_b + V^*) |b\rangle \quad (94)$$

所以有:

$$i\hbar \frac{\partial c_a}{\partial t} |a\rangle + i\hbar \frac{\partial c_b}{\partial t} |b\rangle = (E_a c_a + V c_b) |a\rangle + (E_b c_b + V^* c_a) |b\rangle \quad (95)$$

亦即:

$$\begin{cases} \frac{\partial c_a}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} (E_a c_a + V c_b) \\ \frac{\partial c_b}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} (E_b c_b + V^* c_a) \end{cases} \quad (96)$$

即为所求.

(b) 将题给变换代入上式，并记：

$$\omega_{ba} = \frac{E_b - E_a}{\hbar} \quad (97)$$

得：

$$\begin{cases} \frac{\partial \tilde{c}_a}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} V(t) e^{-i\omega_{ba}t} c_b \\ \frac{\partial \tilde{c}_b}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} V^*(t) e^{i\omega_{ba}t} c_a \end{cases} \quad (98)$$

即为所求。

(c) 记 t 时刻系统处在态 $|\varphi(t)\rangle$ ，则初始条件给出 $|\varphi(0)\rangle = |a\rangle$ 。不难看出，在本问题中微扰项可取为：

$$\hat{V} = V(t)|a\rangle\langle b| + V^*(t)|b\rangle\langle a| \quad (99)$$

那么一阶含时微扰论给出：

$$\begin{aligned} P_b(t) &= |\langle b|\varphi(t)\rangle|^2 = \left| \langle b|\varphi(0)\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle b|\hat{V}(\tau)|\varphi(0)\rangle e^{i\omega_{ba}\tau} d\tau \right|^2 \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t V^*(\tau) e^{i\omega_{ba}\tau} d\tau \right|^2 \end{aligned} \quad (100)$$

即为所求。同学们也许已经注意到，上式最后一个等号右端表达式恰恰是(98)第二式中将 c_a 置 1，积分后取模平方的结果。