3.28 考虑由两个自旋 1/2 的粒子组成的一个系统。观察者 A 专门测量其中一个粒子的自旋分量（s_{1z},s_{1x}，等等），同时观察者 B 测量另一个粒子的自旋分量。假定已知系统处在自旋单态，即 $S_{总}=0$。

(a) 当观察者 B 不作任何测量时，观察者 A 得到 $s_{1z}=\hbar/2$ 的概率是什么？对于 $s_{1x}=\hbar/2$ 求解同样的问题。

(b) 观察者 B 肯定地确认粒子 2 的自旋处于 $s_{2z}=\hbar/2$ 态。如果观察者 A (i) 测量 s_{1z}；(ii) 测量 s_{1x}，则对观察者 A 的测量结果能给出的结论是什么？解释你的答案。

解: (a) 系统处于自旋单态

$$|00\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\hat{\boldsymbol{z}}+,\hat{\boldsymbol{z}}-\rangle-|\hat{\boldsymbol{z}}-,\hat{\boldsymbol{z}}+\rangle\right) \tag{1}$$

这意味着 A 要得到 $s_{1z}=\hbar/2$ 系统只能处于 $|\hat{\boldsymbol{z}}+,\hat{\boldsymbol{z}}-\rangle$ 态，因此观察到 $s_{1z}=\hbar/2$ 的概率应为 1/2。同时自旋单态还可以按 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 方向角动量本征态展开为

$$|00\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\hat{\boldsymbol{x}}+,\hat{\boldsymbol{x}}-\rangle-|\hat{\boldsymbol{x}}-,\hat{\boldsymbol{x}}+\rangle\right) \tag{2}$$

同理，观察到 $s_{1x}=\hbar/2$ 的概率为 1/2。

(b) B 的观察使得系统确定地处于 $|\hat{\boldsymbol{z}}-,\hat{\boldsymbol{z}}+\rangle$ 态。此时观察者 A

(i) 测量 s_{1z}。由于系统处于 S_{1z} 的本征值 $\hbar/2$ 的本征态，观察者 A 只能测量得到 $s_{1z}=-\hbar/2$。

(ii) 测量 s_{1x}。由于

$$|\hat{\boldsymbol{z}}-\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\hat{\boldsymbol{x}}+\rangle-|\hat{\boldsymbol{x}}-\rangle)$$

故系统状态 $|\hat{\boldsymbol{z}}-,\hat{\boldsymbol{z}}+\rangle$ 可展开为

$$|\hat{\boldsymbol{z}}-,\hat{\boldsymbol{z}}+\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\hat{\boldsymbol{x}}+,\hat{\boldsymbol{z}}+\rangle-|\hat{\boldsymbol{x}}-,\hat{\boldsymbol{z}}+\rangle\right) \tag{3}$$

此时 A 将以各 1/2 的概率观察到 $s_{1x}=\pm\hbar/2$ 的结果。

3.30 (a) 用两个不同的矢量 $\boldsymbol{U}=(U_x,U_y,U_z)$ 和 $\boldsymbol{V}=(V_x,V_y,V_z)$ 构造一个秩为 1 的球张量。明确地用 $U_{x,y,z}$ 和 $V_{x,y,z}$ 写出 $T^{(1)}_{\pm1,0}$。

(b) 用两个不同的矢量 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 构造一个秩为 2 的球张量。明确地用 $U_{x,y,z}$ 和 $V_{x,y,z}$ 写出 $T^{(2)}_{\pm2,\pm1,0}$。

解: 首先从矢量算符的分量 U_i 和 V_j 构造秩 1 的球张量

$$\begin{cases}U_+=-\dfrac{U_x+\mathrm{i}U_y}{\sqrt{2}}\\ U_-=\dfrac{U_x-\mathrm{i}U_y}{\sqrt{2}}\\ U_0=U_z\end{cases}\qquad\text{以及}\qquad\begin{cases}V_+=-\dfrac{V_x+\mathrm{i}V_y}{\sqrt{2}}\\ V_-=\dfrac{V_x-\mathrm{i}V_y}{\sqrt{2}}\\ V_0=V_z\end{cases} \tag{4}$$

式(4)省略了上标 (1)。教材(3.11.27)式给出两个球张量可以组合为另一球张量

$$T_q^{(k)}=\sum_{q_1,q_2}\langle k_1k_2;q_1q_2|k_1k_2;kq\rangle\,X_{q_1}^{(k_1)}Z_{q_2}^{(k_2)} \tag{3.11.27}$$

其中 $\langle k_1k_2;q_1q_2|k_1k_2;kq\rangle$ 为 CG 系数。教材式(3.8.33)给出角动量合成式

$$|j_1j_2;jm\rangle=\sum_{m_1,m_2}|j_1j_2;m_1m_2\rangle\langle j_1j_2;m_1m_2|j_1j_2;jm\rangle \tag{3.8.33}$$

在(3.8.33)式中作代换

$$|j_1j_2;m_1m_2\rangle\to X_{q_1}^{(k_1)}Z_{q_2}^{(k_2)},\quad |j_1j_2;jm\rangle\to T_q^{(k)} \tag{5}$$

即可得到张量组合的公式(3.11.27)。我们已经在习题 3.24 中求出 $j_1=j_2=1$ 情形的各 CG 系数及角动量合成规则

$$j=1:\begin{cases}|1,1\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|{+0}\rangle-|0{+}\rangle\right)\\|1,0\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|{+-}\rangle-|{-+}\rangle\right)\\|1,-1\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|0{-}\rangle-|{-0}\rangle\right)\end{cases},\quad j=2:\begin{cases}|2,\pm2\rangle=|{\pm\pm}\rangle\\|2,\pm1\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|0{\pm}\rangle+|{\pm0}\rangle\right)\\|2,0\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{6}}\left(|{+-}\rangle+2\,|00\rangle+|{-+}\rangle\right)\end{cases} \tag{6}$$

因此可以类比(6)式从 U_i 与 V_j 构造

(a) 秩为 1 的球张量

$$\begin{aligned}T_1^{(1)}&=\frac{1}{\sqrt{2}}(U_+V_0-U_0V_+)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{U_x+\mathrm{i}U_y}{\sqrt{2}}\cdot V_z+U_z\cdot\frac{V_x+\mathrm{i}V_y}{\sqrt{2}}\right)\\&=\frac{1}{2}\left[U_zV_x-U_xV_z+\mathrm{i}(U_zV_y-U_yV_z)\right]\end{aligned} \tag{7a}$$

$$\begin{aligned}T_{-1}^{(1)}&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(U_-V_0-U_0V_-\right)\\&=\frac{1}{2}\left[U_xV_z-U_zV_x+\mathrm{i}(U_zV_y-U_yV_z)\right]\end{aligned} \tag{7b}$$

$$\begin{aligned}T_0^{(1)}&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(U_+V_--U_-V_+\right)\\&=\frac{1}{2\sqrt{2}}\left[-(U_x+\mathrm{i}U_y)(V_x-\mathrm{i}V_y)+(U_x-\mathrm{i}U_y)(V_x+\mathrm{i}V_y)\right]\\&=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left(U_xV_y-U_yV_x\right)\end{aligned} \tag{7c}$$

(b) 秩为 2 的球张量

$$
\begin{aligned}
T_{\pm 2}^{(2)} &= U_\pm V_\pm = \frac{1}{2}(U_x \pm \mathrm{i}U_y)(V_x \pm \mathrm{i}V_y) \\
&= \frac{1}{2}\left[U_xV_x - U_yV_y \pm \mathrm{i}(U_xV_y + U_yV_x)\right] \qquad (8a) \\
T_1^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(U_+V_0 + U_0V_+\right) = \frac{1}{2}\left[-(U_x + \mathrm{i}U_y)V_z - U_z(V_x + \mathrm{i}V_y)\right] \\
&= -\frac{1}{2}\left[U_xV_z + U_zV_x + \mathrm{i}(U_zV_y + U_yV_z)\right] \qquad (8b) \\
T_{-1}^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(U_-V_0 + U_0V_-\right) \\
&= \frac{1}{2}\left[U_xV_z + U_zV_x - \mathrm{i}(U_zV_y + U_yV_z)\right] \qquad (8c) \\
T_0^{(2)} &= \frac{1}{\sqrt{6}}\left(U_+V_- + 2U_0V_0 + U_-V_+\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}}\left[-\frac{1}{2}(U_x + \mathrm{i}U_y)(V_x - \mathrm{i}V_y) - \frac{1}{2}(U_x - \mathrm{i}U_y)(V_x + \mathrm{i}V_y) + 2U_zV_z\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{6}}\left(2U_zV_z - U_xV_x - U_yV_y\right) \qquad (8d)
\end{aligned}
$$

3.32 (a) 把 xy，xz 和 (x^2-y^2) 写成一个秩为 2 的球 (不可约) 张量的分量。

(b) 期待值

$$Q \equiv e\,\langle \alpha, j, m=j|(3z^2-r^2)|\alpha, j, m=j\rangle$$

被称为*四极矩*，利用 Q 和适当的 Clebsch-Gordan 系数，求

$$e\,\langle \alpha, j, m'|(x^2-y^2)|\alpha, j, m=j\rangle$$

其中 $m' = j, j-1, j-2, \cdots$。

解: (a) 由于所求量只含坐标算符，考虑利用秩 2 的球张量算符

$$T_q^{(2)} := Y_2^q(\hat{\boldsymbol{n}}) \qquad (9)$$

表示。附录 B 中给出球谐函数 Y_l^m 的表达式

$$
\begin{cases}
Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\sin^2\theta \mathrm{e}^{\pm 2\mathrm{i}\varphi} = \sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\dfrac{(x\pm \mathrm{i}y)^2}{r^2} \\
Y_2^{\pm 1} = \mp\sqrt{\dfrac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\varphi} = \mp\sqrt{\dfrac{15}{32\pi}}\dfrac{(x\pm \mathrm{i}y)z}{r^2} \\
Y_2^0 = \sqrt{\dfrac{5}{16\pi}}\dfrac{3z^2-r^2}{r^2}
\end{cases} \qquad (10)
$$

故可以重新组合球谐函数得到

$$xy = \sqrt{\frac{2\pi}{15}}\mathrm{i}r^2\left(Y_2^{-2} - Y_2^2\right) \qquad (11a)$$

$$xz = \sqrt{\frac{2\pi}{15}}r^2\left(Y_2^{-1} - Y_2^1\right) \qquad (11b)$$

$$x^2 - y^2 = \sqrt{\frac{8\pi}{15}}r^2\left(Y_2^2 + Y_2^{-2}\right) \qquad (11c)$$

(b) 可以将 Q 与待求量用秩为 2 的球算符表示为

$$\begin{aligned}Q &= e\langle\alpha,j,m=j|(3z^2-r^2)|\alpha,j,m=j\rangle \\ &= \sqrt{\frac{16\pi}{5}}r^2e\langle\alpha,j,m=j|Y_2^0|\alpha,j,m=j\rangle \end{aligned}\tag{12a}$$

$$\begin{aligned}A &:= e\langle\alpha,j,m'|(x^2-y^2)|\alpha,j,m=j\rangle \\ &= \sqrt{\frac{8\pi}{15}}r^2e\left(\langle\alpha,j,m'|Y_2^2|\alpha,j,m=j\rangle+\langle\alpha,j,m'|Y_2^{-2}|\alpha,j,m=j\rangle\right)\end{aligned}\tag{12b}$$

由 Wigner-Eckart 定理知 $\langle\alpha',j',m'|T_q^{(k)}|\alpha,j,m\rangle$ 可以写为与磁量子数 m,m',q 相关的 C-G 系数 $\langle jk;mq|jk;j'm'\rangle$ 与独立于 m,m',q 的部分 $\dfrac{\langle\alpha'j'||T^{(k)}||\alpha j\rangle}{\sqrt{2j'+1}}$ 的乘积，因此式(12)中各项相比可以得到

$$\frac{\langle\alpha,j,m'|Y_2^{-2}|\alpha,j,m=j\rangle}{\langle\alpha,j,m=j|Y_2^0|\alpha,j,m=j\rangle}=\frac{\langle j,m=-2|j,m'\rangle}{\langle j,m=0|j,m'=j\rangle}\tag{13a}$$

$$\frac{\langle\alpha,j,m'|Y_2^{2}|\alpha,j,m=j\rangle}{\langle\alpha,j,m=j|Y_2^0|\alpha,j,m=j\rangle}=\frac{\langle j,m=2|j,m'\rangle}{\langle j,m=0|j,m'=j\rangle}\tag{13b}$$

式(13a)右侧分子仅当 $m'=j-2$ 时不为 0。而(13b)式右侧分子仅当 $m'=j+2>j$ 时不为 0，这时 $\langle j,m=2|j,m'\rangle$ 本身亦为 0。故

$$\begin{aligned}&\frac{\langle\alpha,j,m'|Y_2^{-2}|\alpha,j,m=j\rangle}{\langle\alpha,j,m=j|Y_2^0|\alpha,j,m=j\rangle} \\ =&\frac{\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\frac{1}{r^2e}\cdot e\langle\alpha,j,m'|(x^2-y^2)|\alpha,j,m=j\rangle}{\sqrt{\frac{5}{16\pi}}\frac{1}{r^2e}\cdot e\langle\alpha,j,m=j|(3z^2-r^2)|\alpha,j,m=j\rangle} \\ =&\sqrt{6}\frac{A}{Q}=\frac{\langle j,-2|j,j-2\rangle}{\langle j,0|j,j\rangle}\end{aligned}\tag{14}$$

即

$$e\langle\alpha,j,m'|(x^2-y^2)|\alpha,j,m=j\rangle=\begin{cases}\dfrac{Q}{\sqrt{6}}\dfrac{\langle j,-2|j,j-2\rangle}{\langle j,0|j,j\rangle} & m'=j-2\\ 0 & \text{otherwise.}\end{cases}\tag{15}$$

3.10 (a) 考虑全同制备的自旋 1/2 系统的一个纯系综。假定期待值 $\langle S_x\rangle$ 和 $\langle S_z\rangle$ 已知，而 $\langle S_y\rangle$ 的符号也已知。证明如何确定态矢量。为什么不必知道 $\langle S_y\rangle$ 的大小？

(b) 考虑一个自旋 1/2 系统的混合系综. 假定系综平均值 $[S_x]$，$[S_y]$ 和 $[S_z]$ 都是已知的。证明如何可以构造表征这个系综的 2×2 密度矩阵。

解: (a) 纯系综的密度算符可以写为

$$\rho=|\psi\rangle\langle\psi|\tag{16}$$

其中 $|\psi\rangle$ 正是系统所处的态。在自旋 $\dfrac{1}{2}$ 系统中系统的态可以按 $|\uparrow\rangle$ 与 $|\downarrow\rangle$ 展开为

$$|\psi\rangle=a|\uparrow\rangle+b|\downarrow\rangle\tag{17}$$

其中 a 与 b 均为待定的复系数。可以知道的是

$$1 = \langle\psi|\psi\rangle = |a|^2 + |b|^2 \tag{18a}$$

$$\langle S_z\rangle = \langle\psi|S_z|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}(|a|^2 - |b|^2) \tag{18b}$$

$$\langle S_x\rangle = \frac{\hbar}{2}(a^*b + b^*a) = \hbar\,\mathrm{Re}(a^*b) \tag{18c}$$

$$\langle S_y\rangle = \frac{\hbar}{2\mathrm{i}}(a^*b - b^*a) = \hbar\,\mathrm{Im}(a^*b) \tag{18d}$$

由于 $\langle S_z\rangle$ 已知，由式(18a)与(18b)可以得到

$$|a|^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{\hbar}\langle S_z\rangle \tag{19a}$$

$$|b|^2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{\hbar}\langle S_z\rangle \tag{19b}$$

或

$$a = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{\hbar}\langle S_z\rangle} \tag{20a}$$

$$b = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{\hbar}\langle S_z\rangle} \tag{20b}$$

其中相位 α 与 β 为两个实数。由于 $\langle S_x\rangle$ 已知，根据式(18c)可以得到

$$\mathrm{Re}(a^*b) = \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{\hbar^2}\langle S_z\rangle^2}\cos(\beta - \alpha) \tag{21}$$

即

$$\cos(\beta - \alpha) = \frac{\mathrm{Re}(a^*b)}{\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{\hbar^2}\langle S_z\rangle^2}} = \frac{\langle S_x\rangle}{\hbar\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{\hbar^2}\langle S_z\rangle^2}} \tag{22}$$

若知道 $\langle S_y\rangle$ 的符号就可以根据式(18d)确定

$$\sin(\beta - \alpha) = \frac{\langle S_y\rangle}{\hbar\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{\hbar^2}\langle S_z\rangle^2}}$$

的符号，从而在一个周期 $0 \sim 2\pi$ 内唯一确定 $\beta - \alpha$ 的值。代回(17)式即为

$$|\psi\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\left(\sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{\hbar}\langle S_z\rangle}\,|\uparrow\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\beta-\alpha)}\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{\hbar}\langle S_z\rangle}\,|\downarrow\rangle\right) \tag{23}$$

由于总体相位 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ 不改变态矢，因此态矢量 $|\psi\rangle$ 被(23)式唯一确定。

在纯系综下系统处于纯态，总是具有确定的总角动量 $S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$，只要知道了 $\langle S_x\rangle$ 与 $\langle S_z\rangle$ 就可以确定

$$\langle S_y\rangle^2 = \frac{4}{3}\hbar^2 - \langle S_x\rangle^2 - \langle S_z\rangle^2 \tag{24}$$

若知道 $\langle S_y\rangle$ 的符号就可以完全确定 $\langle S_y\rangle$ 的值，从而唯一确定系统的态矢量。

(b) 由于 ρ 总是厄米的，可以一般性地将 ρ 表示为密度矩阵

$$\rho \doteq \begin{pmatrix} a & c\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta} \\ c\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} & b \end{pmatrix} \tag{25}$$

其中 a, b, c, θ 均为实数。类似于式(18)可以写出 ρ 的矩阵元满足的方程

$$1 = \mathrm{tr}(\rho) = a + b \tag{26a}$$
$$[S_z] = \mathrm{tr}(\rho S_z) = a - b \tag{26b}$$
$$[S_x] = \mathrm{tr}(\rho S_x) = 2c\cos\theta \tag{26c}$$
$$[S_y] = \mathrm{tr}(\rho S_y) = 2c\sin\theta \tag{26d}$$

从式(26)可以解出

$$a = \frac{1}{2}(1 + [S_z])$$
$$b = \frac{1}{2}(1 - [S_z])$$
$$c = \frac{1}{2}\sqrt{[S_x]^2 + [S_y]^2}$$

并且从 $[S_{x,y}]/2c$ 的值中在一个周期 $0 \sim 2\pi$ 内唯一确定 θ 的值。这样就完成了对密度矩阵 ρ 的构造。

3.11 (a) 证明密度算符 ρ（在薛定谔绘景中）的时间演化由下式给定

$$\rho(t) = \mathscr{U}(t, t_0)\rho(t_0)\mathscr{U}^\dagger(t, t_0)$$

(b) 假定在 $t = 0$ 时有一个纯系综。证明只要时间演化由薛定谔方程控制，则它不可能演化成一个混合系综。

解: (a) 密度算符的定义给出

$$\rho(t) := \sum_i p_i \left|\psi_i, t\right\rangle \left\langle\psi_i, t\right| \tag{27}$$

在薛定谔绘景下算符的时间演化为

$$\left|\psi, t\right\rangle = \mathscr{U}(t, t_0)\left|\psi, t_0\right\rangle \tag{28a}$$
$$\left\langle\psi, t\right| = \left\langle\psi, t_0\right|\mathscr{U}^\dagger(t, t_0) \tag{28b}$$

将上式代入(27)可以得到

$$\rho(t) = \mathscr{U}(t, t_0)\sum_i p_i \left|\psi_i, t_0\right\rangle \left\langle\psi_i, t_0\right|\mathscr{U}^\dagger(t, t_0) = \mathscr{U}(t, t_0)\rho(t_0)\mathscr{U}^\dagger(t, t_0) \tag{29}$$

(b) 纯系综是满足 $\rho^2 = \rho$ 的系综。在这里，随时间演化下

$$\rho^2(t) = \mathscr{U}(t)\rho(0)\mathscr{U}^\dagger(t)\mathscr{U}(t)\rho(0)\mathscr{U}^\dagger(t) = \mathscr{U}(t)\rho^2(0)\mathscr{U}^\dagger(t) \tag{30}$$

由于 $t = 0$ 时系综为纯系综，有 $\rho^2(0) = \rho(0)$，故

$$\rho^2(t) = \mathscr{U}(t)\rho(0)\mathscr{U}^\dagger(t) = \rho(t) \tag{31}$$

这表明在时间演化下纯系综仍然演化为纯系综。