量子力学 II 作业 13

郑晓旸

202111030007

2025 年 6 月 5 日

习题 1

考虑两个厄密算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征态 $|\Psi\rangle$。如果 $\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$，则 $|\Psi\rangle$ 有什么性质？可以利用宇称算符 $\hat{\pi}$ 和动量算符 $\hat{\boldsymbol{p}}$ 来说明。

1 解答

1.1 一般性质推导

设 $|\Psi\rangle$ 是厄密算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征态，对应的本征值分别为 a 和 b。由于 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 是厄密算符，它们的本征值 a 和 b 都是实数。根据定义，我们有：

$$\hat{A}|\Psi\rangle = a|\Psi\rangle$$

$$\hat{B}|\Psi\rangle = b|\Psi\rangle$$

其中 $|\Psi\rangle \neq 0$。题目给出的条件是两个算符的反对易子为零：

$$\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$$

我们将这个算符作用在共同本征态 $|\Psi\rangle$ 上：

$$(\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A})|\Psi\rangle = 0|\Psi\rangle = 0$$

展开左边：

$$\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle + \hat{B}\hat{A}|\Psi\rangle = 0$$

利用 $|\Psi\rangle$ 是 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 的共同本征态的性质：

$$\hat{A}(b|\Psi\rangle) + \hat{B}(a|\Psi\rangle) = 0$$

由于 a 和 b 是标量（本征值），可以将它们提到算符作用之外：

$$b(\hat{A}|\Psi\rangle) + a(\hat{B}|\Psi\rangle) = 0$$

再次利用本征态的性质：

$$b(a|\Psi\rangle) + a(b|\Psi\rangle) = 0$$

$$ab|\Psi\rangle + ab|\Psi\rangle = 0$$

$$2ab|\Psi\rangle = 0$$

因为 $|\Psi\rangle$ 是本征态，所以它不是零矢量，即 $|\Psi\rangle \neq 0$。因此，我们必须有：

$$2ab = 0$$

这意味着：

$$ab = 0$$

这个结论表明，对于共同本征态 $|\Psi\rangle$，其对应的算符 $\hat{A}$ 的本征值 a 与算符 $\hat{B}$ 的本征值 b 的乘积必须为零。换句话说，**至少有一个本征值为零**。即，要么 $a = 0$，要么 $b = 0$，或者两者都为零。所以，如果两个厄密算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 满足 $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0$，并且它们存在共同的本征态 $|\Psi\rangle$，那么对于这个态 $|\Psi\rangle$，它要么是算符 $\hat{A}$ 的零本征值本征态，要么是算符 $\hat{B}$ 的零本征值本征态（或两者皆是）。

1.2 利用宇称算符和动量算符说明

我们考虑一维空间中的宇称算符 $\hat{\pi}$ 和动量算符 $\hat{p}$（为简洁，这里用 $\hat{p}$ 代表 $\hat{p}_x$）。**宇称算符** $\hat{\pi}$：宇称算符作用于坐标的效应是 $\hat{\pi}\hat{x}\hat{\pi}^\dagger = -\hat{x}$。它是一个厄密算符 ($\hat{\pi}^\dagger = \hat{\pi}$) 且满足 $\hat{\pi}^2 = \hat{I}$（其中 $\hat{I}$ 是单位算符）。因此，宇称算符的本征值只能是 $+1$（偶宇称）或 -1（奇宇称）。这些本征值均不为零。**动量算符** $\hat{p}$：动量算符 $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$ 是一个厄密算符。其本征值可以是任意实数。**宇称算符与动量算符的关系**：宇称算符作用于动量算符的效应是：

$$\hat{\pi}\hat{p}\hat{\pi}^\dagger = -\hat{p}$$

因为 $\hat{\pi}^\dagger = \hat{\pi}$ 且 $\hat{\pi}^2 = \hat{I}$，我们可以将上式右乘 $\hat{\pi}$：

$$\hat{\pi}\hat{p}\hat{\pi}\hat{\pi} = -\hat{p}\hat{\pi}$$

$$\hat{\pi}\hat{p}\hat{I} = -\hat{p}\hat{\pi}$$

$$\hat{\pi}\hat{p} = -\hat{p}\hat{\pi}$$

这可以改写为：

$$\hat{\pi}\hat{p} + \hat{p}\hat{\pi} = 0$$

这完全符合题目中 $\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$ 的形式，其中我们可以令 $\hat{A}=\hat{\pi}$ 和 $\hat{B}=\hat{p}$。**共同本征态的性质**：假设存在一个宇称算符 $\hat{\pi}$ 和动量算符 $\hat{p}$ 的共同本征态 $|\Psi\rangle$。设其对应的本征值分别为 λ_π 和 λ_p：

$$\hat{\pi}|\Psi\rangle=\lambda_\pi|\Psi\rangle$$

$$\hat{p}|\Psi\rangle=\lambda_p|\Psi\rangle$$

根据我们上面的一般推导，对于这个共同本征态 $|\Psi\rangle$，必须有：

$$\lambda_\pi\lambda_p=0$$

我们知道宇称算符 $\hat{\pi}$ 的本征值 λ_π 只能是 $+1$ 或 -1。这两种情况 λ_π 都不为零。因此，为了满足 $\lambda_\pi\lambda_p=0$，必须有：

$$\lambda_p=0$$

这意味着，如果一个量子态同时是宇称算符和动量算符的本征态，那么这个态的动量本征值必须为零。**物理实例**：一个动量为零的平面波（在非相对论量子力学中，严格来说是理想化情况，常数波函数）$\Psi(x)=C$ (其中 C 是常数) 是一个动量本征值为 $p=0$ 的态。同时，$\hat{\pi}\Psi(x)=\Psi(-x)=C$。所以 $\hat{\pi}\Psi(x)=(+1)\Psi(x)$。因此，常数波函数是 $\hat{\pi}$ 和 $\hat{p}$ 的共同本征态，其宇称本征值为 $+1$，动量本征值为 0。这与我们的结论 $\lambda_p=0$ 一致。如果一个态是动量 $p\neq 0$ 的本征态，例如 $\Psi(x)=e^{ipx/\hbar}$，那么 $\hat{\pi}\Psi(x)=\Psi(-x)=e^{-ipx/\hbar}$。这个态通常不是宇称的本征态，除非 $p=0$。我们可以构造宇称本征态，如 $\cos(px/\hbar)$ (偶宇称) 或 $\sin(px/\hbar)$ (奇宇称)，但这些态是动量 $+p$ 和 $-p$ 的叠加态，而不是动量算符 $\hat{p}$ 的本征态（它们是 $\hat{p}^2$ 的本征态）。

1.3 结论

如果两个厄密算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 满足反对易关系 $\{\hat{A},\hat{B}\}=\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}=0$，并且它们有一个共同的本征态 $|\Psi\rangle$，那么对于这个态，它所对应的 $\hat{A}$ 的本征值与 $\hat{B}$ 的本征值的乘积为零。这意味着至少其中一个本征值为零。在宇称算符 $\hat{\pi}$ 和动量算符 $\hat{p}$ 的例子中，由于宇称算符的本征值总是非零的 (±1)，任何它们与动量算符的共同本征态，其动量本征值必须为零。

习题 2

一个自旋 1/2 粒子在球面上运动，其哈密顿量为 $H=\frac{\mathbf{L}^2}{2\mu R^2}+a\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$。能量本征态为 $|l,j,m_j\rangle$。

1. 给出对应波函数的奇偶性质。
2. $H'=\mathbf{S}\cdot\mathbf{p}$，证明 H' 是赝标量 (pseudo scalar)。
3. 如果在零时刻加上微扰，利用 H' 的属性给出跃迁定则。

2 解答

2.1 波函数的奇偶性

能量本征态 $|l, j, m_j\rangle$ 是由轨道角动量量子数 l、总角动量量子数 j (其中 $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$) 和总角动量磁量子数 m_j 标记的。波函数的奇偶性由宇称算符 $\hat{\pi}$ 决定。宇称算符作用于空间坐标 $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$。

- 轨道部分：与轨道角动量量子数 l 相关的空间波函数（例如球谐函数 $Y_{lm_l}(\theta, \phi)$）在宇称变换下的行为是：

  $$\hat{\pi} Y_{lm_l}(\theta, \phi) = Y_{lm_l}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{lm_l}(\theta, \phi)$$

  因此，轨道部分的宇称为 $(-1)^l$。

- 自旋部分：自旋是粒子的内禀属性，宇称算符只作用于空间坐标，不直接作用于自旋自由度。因此，自旋波函数在宇称变换下不变。

  $$\hat{\pi}|s, m_s\rangle = |s, m_s\rangle$$

态 $|l, j, m_j\rangle$ 是通过 Clebsch-Gordan 系数将轨道角动量态 $|l, m_l\rangle$ 和自旋态 $|s, m_s\rangle$ (其中 $s = 1/2$) 耦合得到的：

$$|l, j, m_j\rangle = \sum_{m_l, m_s} C(l, s, j; m_l, m_s, m_j)|l, m_l\rangle|s, m_s\rangle$$

其中 $C(l, s, j; m_l, m_s, m_j)$ 是 Clebsch-Gordan 系数。对整个态作用宇称算符：

$$\begin{aligned}
\hat{\pi}|l, j, m_j\rangle &= \sum_{m_l, m_s} C(l, s, j; m_l, m_s, m_j)(\hat{\pi}|l, m_l\rangle)(\hat{\pi}|s, m_s\rangle) \\
&= \sum_{m_l, m_s} C(l, s, j; m_l, m_s, m_j)((-1)^l|l, m_l\rangle)(|s, m_s\rangle) \\
&= (-1)^l \sum_{m_l, m_s} C(l, s, j; m_l, m_s, m_j)|l, m_l\rangle|s, m_s\rangle \\
&= (-1)^l|l, j, m_j\rangle
\end{aligned}$$

因此，对应波函数 $|l, j, m_j\rangle$ 的奇偶性为 $(-1)^l$。

2.2 证明 $H' = \mathbf{S} \cdot \mathbf{p}$ 是赝标量

一个算符 $\hat{O}$ 是赝标量，如果它在宇称变换 $\hat{\pi}$ 下满足 $\hat{\pi}\hat{O}\hat{\pi}^\dagger = -\hat{O}$。已知 $\hat{\pi}^\dagger = \hat{\pi}$ 且 $\hat{\pi}^2 = \hat{I}$。我们需要考察自旋算符 $\mathbf{S}$ 和动量算符 $\mathbf{p}$ 在宇称变换下的行为。

- 动量算符 $\mathbf{p}$：动量是极矢量 (polar vector)。在宇称变换下，$\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$，因此 $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla \to -(-i\hbar\nabla) = -\mathbf{p}$。即：
$$\hat{\pi}\mathbf{p}\hat{\pi}^\dagger = -\mathbf{p}$$
- 自旋算符 $\mathbf{S}$：自旋是内禀角动量，其变换性质与轨道角动量 $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ 类似。轨道角动量是轴矢量 (axial vector 或 pseudovector)。
$$\hat{\pi}\mathbf{L}\hat{\pi}^\dagger = (\hat{\pi}\mathbf{r}\hat{\pi}^\dagger) \times (\hat{\pi}\mathbf{p}\hat{\pi}^\dagger) = (-\mathbf{r}) \times (-\mathbf{p}) = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{L}$$
自旋算符 $\mathbf{S}$ 也是轴矢量，因此：
$$\hat{\pi}\mathbf{S}\hat{\pi}^\dagger = \mathbf{S}$$

现在考虑 $H' = \mathbf{S} \cdot \mathbf{p}$：
$$\hat{\pi}H'\hat{\pi}^\dagger = \hat{\pi}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{p})\hat{\pi}^\dagger$$
由于点积的标量性质，我们可以将其写为：
$$\hat{\pi}H'\hat{\pi}^\dagger = (\hat{\pi}\mathbf{S}\hat{\pi}^\dagger) \cdot (\hat{\pi}\mathbf{p}\hat{\pi}^\dagger)$$
代入 $\mathbf{S}$ 和 $\mathbf{p}$ 的变换性质：
$$= (\mathbf{S}) \cdot (-\mathbf{p})$$
$$= -(\mathbf{S} \cdot \mathbf{p})$$
$$= -H'$$
由于 $\hat{\pi}H'\hat{\pi}^\dagger = -H'$，所以 $H' = \mathbf{S} \cdot \mathbf{p}$ 是一个赝标量。

2.3 利用 H' 的属性给出跃迁定则

微扰 $H' = \mathbf{S} \cdot \mathbf{p}$ 引起从初态 $|i\rangle = |l, j, m_j\rangle$ 到末态 $|f\rangle = |l', j', m'_j\rangle$ 的跃迁。跃迁几率幅与矩阵元 $\langle f|H'|i\rangle$ 成正比。
$$\langle f|H'|i\rangle = \langle l', j', m'_j|H'|l, j, m_j\rangle$$
我们利用 H' 的属性来确定跃迁定则。**宇称选择定则 (来自 H' 的赝标量属性)**：初态 $|i\rangle$ 的宇称为 $\epsilon_i = (-1)^l$。末态 $|f\rangle$ 的宇称为 $\epsilon_f = (-1)^{l'}$。算符 H' 是赝标量，其宇称为 $\epsilon_{H'} = -1$。对于矩阵元 $\langle f|H'|i\rangle$ 不为零，必须满足：
$$\epsilon_f^* \epsilon_{H'} \epsilon_i = 1$$
由于宇称是实数 (±1)，$\epsilon_f^* = \epsilon_f$。所以：
$$\epsilon_f \epsilon_{H'} \epsilon_i = 1$$
$$(-1)^{l'}(-1)(-1)^l = 1$$

$$(-1)^{l'+l+1} = 1$$

这意味着指数 $l'+l+1$ 必须是偶数。因此，$l'+l$ 必须是奇数。这表明 l 和 l' 的奇偶性必须不同。换句话说，轨道角动量量子数 l 必须改变宇称。例如，如果 l 是偶数，则 l' 必须是奇数；如果 l 是奇数，则 l' 必须是偶数。这意味着 $\Delta l = |l'-l|$ 必须是奇数 $(1, 3, 5, \ldots)$。**角动量选择定则 (来自 H' 的标量旋转属性)**：$H' = \mathbf{S} \cdot \mathbf{p}$ 是两个矢量算符的点积。尽管 $\mathbf{S}$ 是轴矢量，$\mathbf{p}$ 是极矢量，它们的点积在空间旋转下是一个标量。一个在旋转下的标量算符与总角动量算符 $\mathbf{J}$ 对易：

$$[\hat{J}_k, H'] = 0 \quad (k = x, y, z)$$

$$[\mathbf{J}^2, H'] = 0$$

因此，在微扰 H' 作用下，总角动量量子数 j 和其 z 分量 m_j 必须守恒。跃迁定则为：

$$\Delta j = j' - j = 0$$

$$\Delta m_j = m_j' - m_j = 0$$

对 Δl 的进一步限制 (来自 $\mathbf{p}$ 的性质)：算符 $\mathbf{p}$ 是一个秩为 1 的张量算符 (矢量算符)，它只作用于空间部分。根据 Wigner-Eckart 定理，对于矢量算符，轨道角动量量子数的变化为 $\Delta l = l' - l = 0, \pm 1$。结合宇称选择定则 ($l'+l$ 为奇数，即 Δl 为奇数)，以及 $\Delta l = 0, \pm 1$，我们得到：

$$\Delta l = \pm 1$$

(因为 $\Delta l = 0$ 会导致 $l'+l = 2l$ 为偶数，与宇称选择定则矛盾)。综上所述，利用 H' 的属性（赝标量和旋转标量），以及构成 H' 的算符 $\mathbf{p}$ 的性质，得到的跃迁定则为：

1. $\Delta l = \pm 1$ (轨道角动量量子数改变 1，宇称改变)
2. $\Delta j = 0$ (总角动量量子数不变)
3. $\Delta m_j = 0$ (总角动量 z 分量不变)

题目特别强调“利用 H' 的属性”，其作为赝标量的属性直接给出了宇称选择定则 ($l'+l$ 为奇数)，其作为旋转标量的属性给出了 $\Delta j = 0, \Delta m_j = 0$。