

0.1 应用题

1. 矩阵对角化和表象变换

- (a) 对角化矩阵 L 就是去找到么正变换 V , 使得 $L = V\Lambda V^\dagger$, 其中 Λ 是一个对角矩阵, 它的对角元是本征值. V 是一个么正矩阵, 它的列矢量是本征矢, 和 Λ 中的本征值一一对应. 找到一个能对角化 **Pauli** 矩阵 $\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ 的么正矩阵 V , 并找到 σ^x 的本征值.

通过求解其特征方程以得到 $\sigma_{(z)}^x$ 的本征值:

$$\det(\sigma_{(z)}^x - \lambda I) = \det \begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0,$$

解得 $\lambda = \pm 1$. 对于 $\lambda_+ = 1$ 有:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = 1 \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \Rightarrow v_1 = v_2.$$

所以对应于 λ_+ 的本征矢是 $|+\rangle_{(z)}^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. 对于 $\lambda_- = -1$ 有

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = -1 \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \Rightarrow v_1 = -v_2.$$

所以对应于 λ_- 的本征矢是 $|-\rangle_{(z)}^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$. 在求解过程中已经对这些本征矢进行了归一化, 所以可以得到么正矩阵 $V = [|+\rangle_{(z)}^x, |-\rangle_{(z)}^x] = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$. 对角矩阵 Λ 对角线上依次是本征值, 即

$$\Lambda = \text{diag}\{\lambda_+, \lambda_-\} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_{(z)}^z$$

于是我们可以通过么正矩阵 V 来对 $\sigma_{(z)}^x$ 进行对角化:

$$\sigma_{(z)}^x = V^\dagger \Lambda V = V^\dagger \sigma_{(z)}^z V$$

我们注意到, 对角矩阵 Λ 和 $\sigma_{(z)}^z$ 形式完全一致, 这意味着不同表象 i 下, $\sigma_{(i)}^i$ 的形式都是 $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, 这就是我们通过 V 来改变表象的依据:

$$\sigma_{(z)}^x = V^\dagger \sigma_{(z)}^z V = V^\dagger \sigma_{(x)}^x V \Rightarrow \sigma_{(x)}^x = (V^\dagger)^{-1} \sigma_{(z)}^x (V)^{-1}$$

我们标记 $\sigma_{(z)}^x$ 为 σ^x 在 σ^z 表象下的矩阵. 注意 $V = V^\dagger = V^{-1}$, 所以

$$\sigma_{(x)}^x = V \sigma_{(z)}^x V$$

- (b) 自旋 1/2 的自旋角动量算符 \vec{S} 的三个分量为 S^x, S^y, S^z . 如果采用 S^z 表象, 它们的矩阵表示为 $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$, 其中 $\vec{\sigma}$ 的三个分量为 **Pauli** 矩阵 $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$. 现在考采用 S^x 表象, 请列出 S^x 表象中你约定的基矢顺序, 并求出在该表象下算符 \vec{S} 的三个分量的矩阵表示.

在 S^z 表象下有

$$S_{(z)}^x = \frac{\hbar}{2} \sigma_{(z)}^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

从前文中可知, $\sigma_{(z)}^x$ 的本征矢为:

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

用以将 S^z 表象转换为 S^x 表象的么正矩阵为

$$V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

在 S^z 表象中有

$$S_{(z)}^x = \frac{\hbar}{2} \sigma^x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_{(z)}^y = \frac{\hbar}{2} \sigma^y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_{(z)}^z = \frac{\hbar}{2} \sigma^z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

因此

$$\begin{aligned} S_{(x)}^x &= V S_{(z)}^x V = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ S_{(x)}^y &= V S_{(z)}^y V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ S_{(x)}^z &= V S_{(z)}^z V = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

在 S^x 表象中的基矢为

$$|+\rangle_{(x)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle_{(x)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

2. 谐振子问题

一维谐振子的哈密顿量为

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

坐标算符 x 和动量算符 p 满足对易式 $[x, p] = i\hbar$. 对动量算符和坐标算符进行重新标度

$$p = P \sqrt{\hbar m \omega}, \quad x = Q \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}}$$

注意新的坐标算符 Q 和动量算符 P 是无量纲的, 哈密顿量重新写为

$$H = \frac{1}{2} \hbar \omega (P^2 + Q^2)$$

引入玻色子产生和湮灭算符, a^\dagger 和 a .

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q + iP), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (Q - iP)$$

(a) 计算 $[Q, P], [a, a^\dagger], [a, a^\dagger a], [a^\dagger, a^\dagger a]$;

$$\begin{aligned}
[Q, P] &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \sqrt{\frac{1}{\hbar m\omega}} p \right] = \frac{1}{\hbar} [x, p] = \frac{1}{\hbar} i\hbar = \boxed{1}, \\
[a, a^\dagger] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP), \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP) \right] \\
&= \frac{1}{2} [Q + iP, Q - iP] = \frac{1}{2} ([Q, Q] - i[Q, P] + i[P, Q] + [P, P]) \\
&= \frac{1}{2} [0 - i \cdot i + i \cdot (-i) + 0] = \boxed{1}, \\
[a, a] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP), \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP) \right] \\
&= \frac{1}{2} [Q + iP, Q + iP] = \frac{1}{2} ([Q, Q] + i[Q, P] + i[P, Q] + [P, P]) \\
&= \frac{1}{2} [0 + i \cdot i + i \cdot (-i) + 0] = 0, \\
[a^\dagger, a^\dagger] &= \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP), \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP) \right] \\
&= \frac{1}{2} [Q - iP, Q - iP] = \frac{1}{2} ([Q, Q] - i[Q, P] - i[P, Q] + [P, P]) \\
&= \frac{1}{2} (0 - i \cdot i - i \cdot (-i) + 0) = 0, \\
[a, a^\dagger a] &= a^\dagger [a, a] + [a, a^\dagger] a = a^\dagger \cdot 0 + 1 \cdot a = \boxed{a}, \\
[a^\dagger, a^\dagger a] &= a^\dagger [a^\dagger, a] + [a^\dagger, a^\dagger] a = a^\dagger \cdot (-1) + 0 \cdot a = \boxed{-a^\dagger}.
\end{aligned}$$

(b) 将哈密顿量 H 用 a 和 a^\dagger 表示. 并求出全部能级;

$$\begin{aligned}
a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + iP), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - iP) \\
\Rightarrow Q &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger), \quad P = \frac{1}{\sqrt{2}i}(a - a^\dagger) \\
\Rightarrow H &= \frac{1}{2}\hbar\omega(P^2 + Q^2) = \frac{1}{2}\hbar\omega \left\{ \left[\frac{1}{\sqrt{2}i}(a - a^\dagger) \right]^2 + \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(a + a^\dagger) \right]^2 \right\} \\
&= \frac{1}{2}\hbar\omega \left\{ -\frac{1}{2}(aa - aa^\dagger - a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger) + \frac{1}{2}(aa + aa^\dagger + a^\dagger a + a^\dagger a^\dagger) \right\} \\
&= \frac{1}{2}\hbar\omega (a^\dagger a + aa^\dagger)
\end{aligned}$$

当然, 也可以利用 $[a, a^\dagger] = 1 \iff aa^\dagger = a^\dagger a + 1$ 将 H 变换为熟知的粒子数表象形式:

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

所以 $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$

(c) 在能量表象中, 计算 a 和 a^\dagger 的矩阵元.

能量表象的本征矢满足 $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, 则矩阵元为

$$\begin{aligned}
a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\
\Rightarrow \langle m|a|n\rangle &= \boxed{\sqrt{n}\delta_{m,n-1}}, \quad \langle m|a^\dagger|n\rangle = \boxed{\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}}
\end{aligned}$$

3. 角动量耦合

两个大小相等, 属于不同自由度的角动量 \vec{J}_1 和 \vec{J}_2 耦合成总角动量 $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$, 设 $\vec{J}_1^2 = \vec{J}_2^2 = j(j+1)\hbar^2$, $J^2 = J(J+1)\hbar^2$, $J = 2j, 2j-1, \dots, 1, 0$. 在总角动量量子数 $J = 0$ 的状态下, 求 $J_{1,z}$ 和 $J_{2,z}$ 的可能取值及相应概率.

根据 $J = 0$, 而 $-|J| \leq M \leq |J|$, 夹逼定理得到 $M = 0$. 而磁量子数守恒, 所以 $J_{1,z} + J_{2,z} = J_z = 0$. 已知 C-G 系数可以用于将 $|J, M; j_1, j_2\rangle$ 以基矢 $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ 展开, 代入上述讨论结果有

$$|0, 0; j, j\rangle = \sum_{m, -m}^{-j \leq m \leq j} C_{j,j,m,-m}^{0,0} |j, m; j, -m\rangle$$

概率即为 $P(m_1 = m, m_2 = -m) = |C_{j,j,m,-m}^{0,0}|^2$. 那么问题就来到如何计算这个特殊的 C-G 系数. 根据 C-G 系数的递推定义, 可以得到其解析表达式

$$\begin{aligned} & \langle j_1, m_1; j_2, m_2 | J, M; j_1, j_2 \rangle \\ &= \sqrt{\frac{(2J+1)(J+j_1-j_2)!(J-j_1+j_2)!(j_1+j_2-J)!}{(j_1+j_2+J+1)!}} \\ & \times \sqrt{(J+M)!(J-M)!(j_1+m_1)!(j_1-m_1)!(j_2+m_2)!(j_2-m_2)!} \\ & \times \sum_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{(-1)^k}{k!(j_1+j_2-J-k)!(j_1-m_1-k)!(j_2+m_2-k)!(J-M-k)!} \\ & \times \frac{1}{(J-j_2+m_1+k)!(J-j_1-m_2+k)!} \\ & k_{\min} = \max\{0, j_2 - m_1 - J, j_1 + m_2 - J\}, \quad k_{\max} = \min\{j_1 + j_2 - J, j_1 - m_1, j_2 + m_2\} \end{aligned}$$

所以代入 $j_1 = j_2 = j$, $m_1 = -m_2 = m$, 即有 $C_{j,j,m,-m}^{0,0} = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}$, 显然因为平方消去了可能存在的负号, 使得 $|j, m; j, -m\rangle$, $\forall m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\}$ 等概率, 所以得到

$$P(m_1 = m, m_2 = -m) = \frac{1}{2j+1}$$

4. 自旋-1 模型

考虑自旋-1 体系, 自旋算符为 \vec{S} , 考虑 (\vec{S}^2, S^z) 表象, 基矢顺序为 $|1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$, 简记为 $|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle$. 设 $\hbar = 1$.

(a) 写出 S^x 和 S^z 的矩阵表示.

由于是在 (\vec{S}^2, S^z) 表象, 所以 S^z 的矩阵一定是对角矩阵. 选定基矢为 $\{|s, m\rangle\}$, 即 $|1, 1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1, 0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $|1, -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. 根据本征方程 $S^z|s, m\rangle = m|s, m\rangle$, 得到

$$S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

而对于 S^x (包括题解不要求的 S^y), 我们实际上是使用的升降算符 S^\pm 来定义的.

$$\begin{aligned}
 S^+|s, m\rangle &= \sqrt{s(s+1) - m(m+1)}|s, m+1\rangle, \\
 S^-|s, m\rangle &= \sqrt{s(s+1) - m(m-1)}|s, m-1\rangle. \\
 \Rightarrow S^+|1, 1\rangle &= 0, \quad S^+|1, 0\rangle = \sqrt{2}|1, 1\rangle, \quad S^+|1, -1\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle, \\
 S^-|1, 1\rangle &= \sqrt{2}|1, 0\rangle, \quad S^-|1, 0\rangle = \sqrt{2}|1, -1\rangle, \quad S^-|1, -1\rangle = 0. \\
 \Rightarrow S^+ &= \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \\
 \Rightarrow S^x &= \frac{1}{2}(S^+ + S^-) = \boxed{\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}
 \end{aligned}$$

(b) 考虑哈密顿量 $H(\lambda) = H_0 + \lambda V$, 其中 $H_0 = (S^z)^2$, $V = S^x + S^z$. 考虑为 λV 微扰, 利用微扰论计算微扰后的各能级和各能态, 其中能级微扰准确到二阶, 能态微扰准确到一阶.

首先计算 H_0 的本征矢和本征值:

n	states	E_n
1	$ 1, +1\rangle = \psi_1\rangle, \quad 1, -1\rangle = \psi_3\rangle$	$E_1 = 1$
0	$ 0, 0\rangle = \psi_2\rangle$	$E_0 = 0$

计算波函数的修正:

$$\begin{aligned}
 |1, \pm 1\rangle' &= |1, \pm 1\rangle + |0, 0\rangle \frac{V_{00,0\pm 1}^{m\beta, n\alpha}}{E_1^{(1)} - E_0^{(0)}} \lambda + \dots \\
 &= |1, \pm 1\rangle + |0, 0\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} \lambda + \dots \\
 |0, 0\rangle' &= |0, 0\rangle + |1, +1\rangle \frac{V_{1+1,00}^{m\beta, n\alpha}}{E_0^{(0)} - E_1^{(1)}} \lambda + |1, -1\rangle \frac{V_{1-1,00}^{m\beta, n\alpha}}{E_0^{(0)} - E_1^{(1)}} \lambda + \dots \\
 &= |0, 0\rangle - (|1, +1\rangle + |1, -1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}} \lambda + \dots
 \end{aligned}$$

可见在 $n=1$ 存在简并子空间. 选定 $|1, +1\rangle'$ 和 $|1, -1\rangle'$ 作为基矢. 有效哈密顿量的矩阵元为

$$\begin{aligned}
 E_{+1, +1}^{(1)} &= E_1^{(0)} + V_{1+1, 1+1}^{n\alpha, m\beta} \lambda + \frac{V_{1+1, 00}^{n\alpha, m\gamma} V_{00, 1+1}^{m\gamma, n\beta}}{E_1^{(1)} - E_0^{(0)}} \lambda^2 = 1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} \\
 E_{-1, -1}^{(1)} &= E_1^{(0)} + V_{1-1, 1-1}^{n\alpha, m\beta} \lambda + \frac{V_{1-1, 00}^{n\alpha, m\gamma} V_{00, 1-1}^{m\gamma, n\beta}}{E_1^{(1)} - E_0^{(0)}} \lambda^2 = 1 - \lambda + \frac{\lambda^2}{2} \\
 E_{+1, -1}^{(1)} &= V_{1+1, 1-1}^{n\alpha, m\beta} \lambda + \frac{V_{1+1, 00}^{n\alpha, m\gamma} V_{00, 1-1}^{m\gamma, n\beta}}{E_1^{(1)} - E_0^{(0)}} \lambda^2 = \frac{\lambda^2}{2} \\
 E_{-1, +1}^{(1)} &= V_{1-1, 1+1}^{n\alpha, m\beta} \lambda + \frac{V_{1-1, 00}^{n\alpha, m\gamma} V_{00, 1+1}^{m\gamma, n\beta}}{E_1^{(1)} - E_0^{(0)}} \lambda^2 = \frac{\lambda^2}{2}
 \end{aligned}$$

有效哈密顿量为 $H_1^{\text{eff}} = \begin{pmatrix} 1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} & \frac{\lambda^2}{2} \\ \frac{\lambda^2}{2} & 1 - \lambda + \frac{\lambda^2}{2} \end{pmatrix}$, 此时对角元已经不等, 说明简并已经解除. 那么在这个更小的子

空间中, 进一步使用微扰, 即一阶修正后的能量和波函数视为原始哈密顿量和波函数:

$$H_1^{\text{eff}} = \begin{pmatrix} 1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} & \frac{\lambda^2}{2} \\ \frac{\lambda^2}{2} & 1 - \lambda + \frac{\lambda^2}{2} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} & 0 \\ 0 & 1 - \lambda + \frac{\lambda^2}{2} \end{pmatrix}}_{H'_0} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \frac{\lambda^2}{2} \\ \frac{\lambda^2}{2} & 0 \end{pmatrix}}_{V'}$$

$$|1, +1\rangle'' = |1, +1\rangle' + |1, -1\rangle' \frac{V'_{-1, +1}}{E'_{+1} - E'_{-1}} + \dots = |1, +1\rangle' + |1, -1\rangle' \frac{\lambda}{4} + \dots$$

$$|1, -1\rangle'' = |1, -1\rangle' + |1, +1\rangle' \frac{V'_{+1, -1}}{E'_{-1} - E'_{+1}} + \dots = |1, -1\rangle' - |1, +1\rangle' \frac{\lambda}{4} + \dots$$

代入 $|1, \pm 1\rangle'$ 即可得到进一步考虑了简并微扰的波函数, 注意要忽略 λ^2 阶:

$$|1, +1\rangle'' = |1, +1\rangle + |1, 0\rangle \frac{\lambda}{\sqrt{2}} + |1, -1\rangle \frac{\lambda}{4}$$

$$|1, -1\rangle'' = |1, -1\rangle + |1, 0\rangle \frac{\lambda}{\sqrt{2}} - |1, +1\rangle \frac{\lambda}{4}$$

能量修正:

$$E''_{1, +1} = E'_{1, +1} + V'_{1, +1} + \frac{V'_{1, +1} V'_{1, -1}}{E'_{1, +1} - E'_{1, -1}} = 1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

$$E''_{1, -1} = E'_{1, -1} + V'_{1, -1} + \frac{V'_{1, -1} V'_{1, +1}}{E'_{1, -1} - E'_{1, +1}} = 1 - \lambda + \frac{\lambda^2}{2} + \mathcal{O}(\lambda^3)$$

5. 均匀电子气

考虑三维相互作用均匀电子气, 哈密顿量为 $H = H_0 + H_I$. 考虑系统体积为 $V = L^3$, 每个方向的系统尺寸为 L . 采用箱归一化, 所以 \vec{k} 是离散的, $\vec{k} = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z)$, n_x, n_y, n_z 为整数. 采用二次量子化的语言, 可给出哈密顿量在动量空间的形式. H_0 为单体部分:

$$H_0 = \sum_{\vec{k}\sigma} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma}$$

其中 $\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$ 是自由电子的色散关系. 用 ε_F 表示费米能, k_F 表示费米波矢的大小.

H_I 为两体相互作用部分,

$$H_I = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} \sum_{\sigma\sigma'} v(q) c_{\vec{k}_1 + \vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}_2 - \vec{q}, \sigma'}^\dagger c_{\vec{k}_2, \sigma'} c_{\vec{k}_1, \sigma}$$

$v(q)$ 是相互作用 $v(x)$ 的傅里叶变换形式, $q = |\vec{q}|$, $x = |\vec{x}|$,

$$v(q) = \frac{1}{V} \int v(x) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{x}} d^3 \vec{x}$$

这里我们考虑短程势, 也就是说 $v(q=0)$ 不发散.

自由电子气零温下处于电子填充到费米能 ε_F 的费米海态(Fermi sea state), 简记为 FS, 利用费米子产生算符作用到真空态上可以表示 FS 态为

$$|\text{FS}\rangle = \prod_{k < k_F, \sigma} c_{k\sigma}^\dagger |0\rangle$$

- (a) 考虑零温下的自由电子气, 计算总粒子数 N 和粒子数密度 n , 计算总能量 $E^{(0)}$ 并把总能量密度 $E^{(0)}/V$ 表示成粒子数密度 n 的函数.

分离变量法求解薛定谔方程 $\frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m} \psi = E \psi$. 于是能量本征值为 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \sum_i \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m}$, 其中 $k_i = \frac{\sqrt{2mE_i}}{\hbar}$. 由于使用了箱归一化, 即有边界条件 $k_i l_i = n_i \pi (n_i \in \mathbb{N}^*)$, 代入即得

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\sum_i^3 \left(\frac{\pi}{l_i} \right)^2 n_i^2 \right] = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\sum_i^3 \frac{n_i^2}{l_i^2} \right)$$

每个波矢 $\vec{k} = \left(\frac{\pi}{l_x} n_x, \frac{\pi}{l_y} n_y, \frac{\pi}{l_z} n_z \right)$ 都是在 \vec{k} 空间中的一个格点, 这种格点所占据的 \vec{k} 空间体积为

$\prod_i^3 \frac{\pi}{l_i} = \frac{\pi^3}{l_x l_y l_z} = \frac{\pi^3}{V}$, 其中 V 代表了物质在 \vec{x} 空间的体积(实体积). 电子是全同费米子, 每个格点上(每个状态)能且

只能容纳两个电子. 而费米-狄拉克分布为 $f(\epsilon) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon - \mu)}}$. 绝对零度($\beta \rightarrow \infty$)下, 电子可占据的最高能级即为费米能级 $\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mu = \epsilon_F$, 对应波矢 $|k| \leq k_F$. 由于前面讨论 $k_i \in \mathbb{N}^*$, 因此 $k \leq k_F$ 在 \vec{k} 空间中会形成 $\frac{1}{8}$ 球体. 由于题解要求, 我们略去讨论各原子贡献的自由电子数目, 而是直接使用总粒子(电子)数 N :

$$\frac{1}{8} \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right) = \frac{N}{2} \left(\frac{\pi^3}{V} \right)$$

其中 N 除以 2 是因为泡利不相容原理. 具体到题目中, 有 $l_i = L, \forall i$, 于是进一步化简得到

$$\boxed{N = \frac{k_F^3 V}{3\pi^2}}, \quad \frac{N}{V} = \boxed{n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}}$$

接下来计算总能量. 假设 N 充分大, 使得电子可存在的状态遍布整个半径为 k_F 的 $\frac{1}{8}$ 费米球, 于是求和化为积分形式, 即有 $E_{\text{tot}} = \sum_i^{\leq k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} f(k) dk$, 其中 $f(k)$ 是态密度, 表示在同一能量 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ 上的电子数目, 所以这就

要求我们对电子态密度进行计算. 对于半径为 k , 厚度为 dk 的 $\frac{1}{8}$ 球壳, 在这个球壳上电子的能量都是相同的. 而这个球壳的体积为 $\frac{1}{8}(4\pi k^2 dk)$, 又已知每个格点体积为 $\frac{\pi^3}{V}$, 因此球壳中电子数目为

$$\text{格点数} \times 2 = \frac{\frac{1}{8}(4\pi k^2 dk)}{\frac{\pi^3}{V}} \times 2 = \frac{k^2 V}{\pi^2} dk = f(k) dk$$

因此总能量为

$$E^{(0)} = \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{k^2 V}{\pi^2} dk = \frac{\hbar^2 V}{2m\pi^2} \int_0^{k_F} k^4 dk = \frac{\hbar^2 V}{2m\pi^2} \frac{k_F^5}{5} = \boxed{\frac{\hbar^2 V k_F^5}{10m\pi^2}}$$

反解粒子数密度表达式得到 $k_F(n)$, 代入 $E^{(0)}$ 计算总能量密度:

$$k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}}$$

$$\frac{E^{(0)}}{V} = \frac{\hbar^2 k_F^5}{10m\pi^2} = \frac{\hbar^2}{10m\pi^2} \cdot (3\pi^2 n)^{\frac{5}{3}} = \boxed{\frac{(3n)^{\frac{5}{3}} \hbar^2 \pi^{\frac{4}{3}}}{10m}}$$

- (b) 计算能量的一阶修正 $E^{(1)} = \langle \mathbf{FS} | H_I | \mathbf{FS} \rangle$.

题目中定义的傅里叶变换是非幺正的, 代入结论的时候需要注意系数.

$$v(\vec{q}) = \frac{1}{V} \int \frac{1}{|\vec{x}|} e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} d\vec{x} = \frac{1}{V} \frac{4\pi}{q^2}$$

代 $v(\vec{q})$ 入两体相互作用部分, 有

$$H_I = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} \sum_{\sigma, \sigma'} \frac{1}{V} \frac{4\pi}{q^2} c_{\vec{k}_1 + \vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}_2 - \vec{q}, \sigma'}^\dagger c_{\vec{k}_2, \sigma'} c_{\vec{k}_1, \sigma}$$

(c) 利用 **Hatree Fock** 平均场近似, 并假设平均场参数是自旋对角的, 并且保持了自旋对称性, 以及平移对称性, 因此我们期待 $\langle c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}'\sigma'} \rangle = \langle c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \rangle \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta_{\sigma, \sigma'}$, 以及 $\langle c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} \rangle = \langle c_{\vec{k}\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow} \rangle$. 计算系统总能量, 并与 $E^{(0)} + E^{(1)}$ 比较大小.

代 $|\text{HF}\rangle = \prod_{\vec{k} \leq k_F, \sigma} c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger |0\rangle$ 入能量一阶修正, 有

$$\begin{aligned} \langle \text{HF} | H_0 | \text{HF} \rangle &= \sum_{\vec{k}, \sigma} \langle \text{HF} | \frac{k^2}{2} c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} | \text{HF} \rangle \\ \langle \text{HF} | H_I | \text{HF} \rangle &= \frac{1}{2V} \frac{4\pi}{V} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} \sum_{\sigma, \sigma'} \frac{1}{q^2} \langle \text{HF} | \underbrace{c_{\vec{k}_1 + \vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}_2 - \vec{q}, \sigma'}^\dagger c_{\vec{k}_2, \sigma'} c_{\vec{k}_1, \sigma}}_{c_\lambda^\dagger c_\mu^\dagger c_\rho c_\nu} | \text{HF} \rangle \\ &= \frac{1}{2V} \frac{4\pi}{V} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{q}} \sum_{\sigma, \sigma'} \frac{1}{q^2} (\delta_{\vec{k}_1 + \vec{q}, \vec{k}_1} \delta_{\vec{k}_2 - \vec{q}, \vec{k}_2} - \delta_{\vec{k}_1 + \vec{q}, \vec{k}_2} \delta_{\sigma, \sigma'} \delta_{\vec{k}_2 - \vec{q}, \vec{k}_1} \delta_{\sigma', \sigma}), \quad v(\vec{q}=0) \text{ 不发散} \\ &= -\frac{1}{2V} \frac{4\pi}{V} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} \sum_{\vec{q}} \sum_{\sigma} \sum_{\sigma'} \frac{1}{q^2} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{q}, \vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_2 - \vec{q}, \vec{k}_1} \delta_{\sigma', \sigma} \delta_{\sigma, \sigma'} \\ &= -\frac{1}{2V} \frac{4\pi}{V} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} \sum_{\vec{q}} \sum_{\sigma} \frac{1}{q^2} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{q}, \vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_2 - \vec{q}, \vec{k}_1} \\ &= -\frac{1}{V} \frac{4\pi}{V} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{q^2} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{q}, \vec{k}_2} \delta_{\vec{k}_2 - \vec{q}, \vec{k}_1} \\ &= -\frac{1}{V} \frac{4\pi}{V} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} \int d\vec{q} \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2} \delta_{\vec{q}, \vec{k}_2 - \vec{k}_1} \delta_{\vec{q}, \vec{k}_2 - \vec{k}_1} \\ &= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} \frac{4\pi}{|\vec{k}_1 - \vec{k}_2|^2} \end{aligned}$$

在第二行消去了一项, 这是因为它会引起 $\vec{q} = 0$. 有关于最后一行的求和, 这是一个固定结论, 没有必要在考场现场计算求和, 在这里直接给出答案:

$$\begin{aligned} \langle \text{HF} | H_I | \text{HF} \rangle &= -\frac{k_F^3 V}{4\pi^3} = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} n^{\frac{4}{3}} V \\ \Rightarrow E &= \frac{(3n)^{\frac{5}{3}} \pi^{\frac{4}{3}} V}{10} - \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} n^{\frac{4}{3}} V \end{aligned}$$

6. 量子转子模型

量子转子的角度坐标 $\theta \in [0, 2\pi)$, 注意 $\theta \pm 2\pi$ 和 θ 是等价的. 用 $|\theta\rangle$ 表现 $\hat{\theta}$ 算符的本征态, $|\theta \pm 2\pi\rangle$ 和 $|\theta\rangle$ 是相同的态. 定义量子转子的转动算符为 $\hat{R}(\alpha)$,

$$\hat{R}(\alpha) = \int_0^{2\pi} d\theta |\theta - \alpha\rangle \langle \theta|$$

所以 $\hat{R}(\alpha)|\theta\rangle = |\theta - \alpha\rangle$, 并且 $\hat{R}(2\pi)$ 是单位算符.

转动算符 $\hat{R}S(\alpha)$ 是一个么正算符, 它的产生子为厄米算符 \hat{N} , 与量子转子的角动量算符 \hat{L} 的关系为 $\hat{L} = \hbar \hat{N}$, 所以 $\hat{R}(\alpha) = e^{i\hat{N}\alpha}$, 在 $\hat{\theta}$ 表象下可求得 $\hat{N} = -i \frac{\partial}{\partial \theta}$.

考虑一个特定的量子转子模型, 它的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2} \left(\hat{N} - \frac{1}{2} \right)^2 - g \cos(2\hat{\theta})$$

其中 $g \cos(2\hat{\theta})$ 是一个小的外势, 可以当成微扰处理. 假设 $|N\rangle$ 是算符 \hat{N} 的本征态, 本征值为 N , 即 $\hat{N}|N\rangle = N|N\rangle$. 可计算出 $|N\rangle$ 用 $|\theta\rangle$ 展开为

$$|N\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} e^{iN\theta} |\theta\rangle$$

(a) 利用 $\hat{R}(2\pi)$ 是单位算符证明 N 必须是整数.

因为 $\hat{R}(2\pi) = \mathbb{I}$, 所以有 $|\theta - 2\pi\rangle = |\theta\rangle$. 对于算符 \hat{N} 的本征态 $|N\rangle$ 有

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\theta e^{iN(\theta-2\pi)} |\theta - 2\pi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\theta e^{iN\theta} |\theta\rangle \\ \iff \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\theta e^{iN(\theta-2\pi)} |\theta\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\theta e^{iN(\theta-2\pi)} |\theta\rangle \\ &\iff e^{iN\theta} = e^{iN(\theta-2\pi)} = e^{iN\theta} e^{-i2\pi N} \end{aligned}$$

因此为了保持 θ 转动 2π 后的不变性, N 应当是整数.

(b) 考虑无微扰时的哈密顿量 $H_0 = \frac{1}{2} \left(\hat{N} - \frac{1}{2} \right)^2$, 证明 $|N\rangle$ 也是 H_0 的本征态, 并求出本征能量, 证明每个能级都是两重简并的.

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 |N\rangle &= \frac{1}{2} \left(\hat{N} - \frac{1}{2} \right)^2 |N\rangle = \frac{1}{2} \left(N - \frac{1}{2} \right)^2 |N\rangle \Rightarrow E_N^{(0)} = \frac{1}{2} \left(N - \frac{1}{2} \right)^2 \\ &\Rightarrow N_{\pm} - \frac{1}{2} = \pm \sqrt{2E_N^{(0)}} \Rightarrow N_{\pm} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{2E_N^{(0)}} \end{aligned}$$

这意味着对于任意整数 N , 都对应存在着 $N' = 1 - N$ 使得能级简并.

(c) 采用 $\{|N\rangle\}$ 作为基组, 写出微扰项 $V = -g \cos(2\hat{\theta})$ 的表示矩阵, 并证明微扰不会连接简并的能级(即如果 $|N\rangle$ 和 $|N'\rangle$ 简并, 那么 $\langle N|V|N'\rangle = 0$). 因此尽管 H_0 的能级是简并的, 我们仍然可以使用非简并微扰论.

$$\begin{aligned} \cos 2\hat{\theta} &= \frac{1}{2} (e^{i2\hat{\theta}} + e^{-i2\hat{\theta}}) \\ e^{i2\hat{\theta}} |N\rangle &= e^{i2\hat{\theta}} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\theta e^{iN\theta} |\theta\rangle \right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\theta e^{iN\theta} e^{i2\hat{\theta}} |\theta\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i(N+2)\theta} |\theta\rangle = |N+2\rangle \\ \Rightarrow \cos 2\hat{\theta} |N\rangle &= \frac{1}{2} (e^{i2\hat{\theta}} + e^{-i2\hat{\theta}}) |N\rangle = \frac{1}{2} (|N+2\rangle + |N-2\rangle) \\ \Rightarrow \langle N|\hat{V}|N'\rangle &= -g \langle N|\cos 2\hat{\theta}|N'\rangle = -\frac{g}{2} (\langle N|N'+2\rangle + \langle N|N'-2\rangle) \\ &= -\frac{g}{2} (\delta_{N,N'+2} + \delta_{N,N'-2}) \end{aligned}$$

和前文一致, 如果 $|N\rangle$ 和 $|N'\rangle$ 简并, 那么 $N + N' = 1$ 使得只要 $N \in \mathbb{Z}$, 那么 $\delta \neq 0$. 所以仍然可以使用非简并微扰论.

(d) 计算每个能级 E_N 的微扰修正到 g 的二阶, 并证明此时所有的能级简并仍然没有被解除.

$$\begin{aligned} E_N^{(1)} &= \langle N|\hat{V}|N\rangle = -\frac{g}{2} (\langle N|N+2\rangle + \langle N|N-2\rangle) = 0 \\ E_N^{(2)} &= \sum_{N' \neq N} \frac{|\langle N|\hat{V}|N'\rangle|^2}{E_N^{(0)} - E_{N'}^{(0)}} = \sum_{N' \neq N} \frac{\left(-\frac{g}{2} (\delta_{N,N'+2} + \delta_{N,N'-2}) \right)^2}{\frac{1}{2} \left(N - \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{2} \left(N' - \frac{1}{2} \right)^2} \\ &= \boxed{\frac{g^2}{(2N-3)(2N+1)}} \end{aligned}$$

微扰修正后的能级为

$$E_N \approx \frac{1}{2} \left(N - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{g^2}{(2N-3)(2N+1)}$$

代入 $N' = 1 - N$ 以检查能级简并性:

$$\begin{aligned} E_{N'} &= \frac{1}{2} \left(1 - N - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{g^2}{[2(1-N)-3][2(1-N)+1]} \\ &= \frac{1}{2} \left(N - \frac{1}{2} \right)^2 + \frac{g^2}{(2N+1)(2N-3)} = E_N \end{aligned}$$

所以简并度未变化.