第一章　2022秋高等量子力学期末考核

1.1　单项选择

1. 让大量热化的自旋通过 **Stern-Gerlach** 装置**SG** $\hat{z}$,测得 S_+^z 的概率是?

   大量热化自旋表示充分随机, 所以 $P(S_+^z) = ||\chi_+^{z\dagger}\frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_+^z + \chi_-^z)||^2 = \boxed{\frac{1}{2}}$

2. **Pauli** 矩阵 $\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, 那么 $\sigma^x\sigma^z$ 等于?

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

3. 混态可以用混态的密度矩阵来描述. 假设系统处于态 $|\phi_i\rangle$ 的概率为 p_i, 注意 $\sum\limits_i p_i = 1$, 那么该系统的密度矩阵为 $\rho = \sum\limits_i |\phi_i\rangle p_i\langle\phi_i|$, 那么 **Tr**$[\rho]$ 应满足?

   因为密度矩阵的迹表示系统的总概率, 而概率必须归一化, 即 $\mathrm{Tr}[\rho] = \sum\limits_i p_i = \boxed{1}$

4. 如果 ρ 是混态的密度矩阵, 那么 **Tr**$[\rho^2]$ 应满足?

   对任意密度矩阵总有$\hat{\rho} = \sum\limits_\alpha p_\alpha|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|$. 那么$\hat{\rho}^2 = \sum\limits_\alpha p_\alpha|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|\sum\limits_\beta p_\beta|\psi_\beta\rangle\langle\psi_\beta| = \sum\limits_\alpha p_\alpha^2|\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha|$. 对于纯态($p_n^2 = p_n$) $\mathrm{Tr}[\rho^2] = \mathrm{Tr}[\rho] = 1$, 而混态($p_n^2 \neq p_n$)则是 $\mathrm{Tr}[\rho^2]\boxed{<1}$.

5. 考虑系统哈密顿量 H 不显含时间, 时间演化算符为 $U(t,0) = e^{-iHt/\hbar}$. 在海森堡绘景中, 我们让算符承载时间演化, 海森堡绘景中的算符定义为 $A_H(t) = U^\dagger(t,0)AU(t,0)$, 其中 A 是薛定谔绘景中的算符, 如果 A 不显含时间, 那么 $\mathrm{d}A_H(t)/\mathrm{d}t$ 等于?

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}A_H(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(e^{iHt/\hbar}\right)Ae^{-iHt/\hbar} + e^{iHt/\hbar}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(Ae^{-iHt/\hbar}\right) \\
&= \frac{iH}{\hbar}e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar} - e^{iHt/\hbar}A\frac{iH}{\hbar}e^{-iHt/\hbar} = \frac{i}{\hbar}\left(He^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar} - e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar}H\right) \\
&= \frac{i}{\hbar}[H, A_H(t)] = \boxed{\frac{1}{i\hbar}[A_H(t), H]}
\end{aligned}
$$

6. 电磁场中电荷为 q 的单粒子哈密顿量为 $H = \dfrac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi$, 那么薛定谔方程 $i\hbar\dfrac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$ 满足规范不变性: $\vec{A} \to \vec{A} - \nabla\Lambda$, $\phi \to \phi + \dfrac{\partial\Lambda}{\partial t}$, $\psi \to$?

   推导极其麻烦, 建议直接背结论, 不要试图考场现推. 假设 $\psi' = \psi e^{if(\vec{r},t)}$ 是满足规范变换的, 其中 $f(\vec{r},t)$ 是待定函数. 连同其它的规范变换, 代入薛定谔方程得到 $f(\vec{r},t)$ 的微分方程:

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\psi e^{if(\vec{r},t)}\right] &= \left[\frac{(-i\hbar\vec{\nabla}-q(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda))^2}{2m}+q\left(\phi+\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right)\right]\left[\psi e^{if(\vec{r},t)}\right] \\
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left[\psi e^{if(\vec{r},t)}\right] &= \left[i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}-\hbar\psi\frac{\partial f}{\partial t}\right]e^{if(\vec{r},t)} \\
\vec{\nabla}\left(\psi e^{if(\vec{r},t)}\right) &= \left(\vec{\nabla}\psi+\psi i\vec{\nabla}f\right)e^{if(\vec{r},t)} \\
\left[-i\hbar\vec{\nabla}-q(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\right]\left[\psi e^{if(\vec{r},t)}\right] &= \left[-i\hbar\vec{\nabla}\psi+\hbar\psi\vec{\nabla}f-q(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\psi\right]e^{if(\vec{r},t)}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\left[-i\hbar\vec{\nabla}-q(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\right]^2\left[\psi e^{if(\vec{r},t)}\right] = \left[-i\hbar\vec{\nabla}-q(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\right]\left\{\left[-i\hbar\vec{\nabla}\psi+\hbar\psi\vec{\nabla}f-q(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\psi\right]e^{if(\vec{r},t)}\right\} \\
&= (-i\hbar)\left\{\left[-i\hbar\nabla^2\psi+\hbar(\vec{\nabla}\psi)\cdot(\vec{\nabla}f)+\hbar\psi\nabla^2 f-q(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}-\nabla^2\Lambda)\psi-q(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\cdot(\vec{\nabla}\psi)\right]e^{if(\vec{r},t)}\right. \\
&\left.+\left[-i\hbar\vec{\nabla}\psi+\hbar\psi\vec{\nabla}f-q(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\psi\right]\cdot i(\vec{\nabla}f)e^{if(\vec{r},t)}\right\} \\
&-q(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\cdot\left[-i\hbar\vec{\nabla}\psi+\hbar\psi\vec{\nabla}f-q(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\psi\right]e^{if(\vec{r},t)}
\end{aligned}
$$

展开变换前的薛定谔方程:

$$
i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\frac{(-i\hbar\vec{\nabla}-q\vec{A})^2}{2m}+q\phi\right]\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+\frac{i\hbar q}{2m}(\vec{\nabla}\cdot\vec{A})\psi+\frac{i\hbar q}{m}\vec{A}\cdot(\vec{\nabla}\psi)+\frac{q^2A^2}{2m}\psi+q\phi\psi \tag{①}
$$

展开变换后的薛定谔方程:

$$
\begin{aligned}
&\left[i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}-\hbar\psi\frac{\partial f}{\partial t}\right]e^{if(\vec{r},t)} \\
&= e^{if(\vec{r},t)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi-\frac{i\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}\psi)\cdot(\vec{\nabla}f)-\frac{i\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2 f+\frac{i\hbar q}{2m}(\vec{\nabla}\cdot\vec{A}-\nabla^2\Lambda)\psi+\frac{i\hbar q}{2m}(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\cdot(\vec{\nabla}\psi)\right. \\
&+\frac{-i\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}\psi)\cdot(\vec{\nabla}f)+\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}f)^2\psi-\frac{\hbar q}{2m}(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\cdot(\vec{\nabla}f)\psi \\
&+\frac{i\hbar q}{2m}(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)(\vec{\nabla}\psi)-\frac{q\hbar}{2m}(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\cdot(\vec{\nabla}f)\psi+\frac{q^2}{2m}(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)^2\psi \\
&\left.+q\left(\phi+\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right)\psi\right]
\end{aligned} \tag{②}
$$

(②) − (①) $\cdot\, e^{if(\vec{r},t)}$, 得到

$$
\begin{aligned}
&\left[\cancel{i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}}-\hbar\psi\frac{\partial f}{\partial t}\right]e^{if(\vec{r},t)} \\
&= e^{if(\vec{r},t)}\left[\cancel{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2}\psi-\frac{i\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}\psi)\cdot(\vec{\nabla}f)-\frac{i\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2 f+\frac{i\hbar q}{2m}(\cancel{\vec{\nabla}\cdot\vec{A}}-\nabla^2\Lambda)\psi+\frac{i\hbar q}{2m}(\cancel{\vec{A}}-\vec{\nabla}\Lambda)\cdot(\vec{\nabla}\psi)\right. \\
&+\frac{-i\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}\psi)\cdot(\vec{\nabla}f)+\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{\nabla}f)^2\psi-\frac{\hbar q}{2m}(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\cdot(\vec{\nabla}f)\psi \\
&+\frac{i\hbar q}{2m}(\cancel{\vec{A}}-\vec{\nabla}\Lambda)(\vec{\nabla}\psi)-\frac{q\hbar}{2m}(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\cdot(\vec{\nabla}f)\psi+\frac{q^2}{2m}\left(\cancel{A^2}+(\vec{\nabla}\Lambda)^2-2\vec{A}\cdot(\vec{\nabla}\Lambda)\right)\psi \\
&\left.+q\left(\cancel{\phi}+\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\right)\psi\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
-\hbar\psi\frac{\partial f}{\partial t} = &-\frac{i\hbar^2}{m}(\vec{\nabla}\psi)\cdot(\vec{\nabla}f) - \frac{i\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2 f - \frac{i\hbar q}{2m}\psi\nabla^2\Lambda - \frac{i\hbar q}{m}(\vec{\nabla}\Lambda)\cdot(\vec{\nabla}\psi) \\
&+ \frac{\hbar^2}{2m}\psi(\nabla f)^2 - \frac{\hbar q}{m}(\vec{A}-\vec{\nabla}\Lambda)\cdot(\vec{\nabla}f)\psi \\
&+ \frac{q^2}{2m}\left[(\vec{\nabla}\Lambda)^2 - 2\vec{A}\cdot(\vec{\nabla}\Lambda)\right]\psi \\
&+ q\frac{\partial\Lambda}{\partial t}\psi
\end{aligned}
$$

重点观察含 $\vec{A}$ 的项, 由于需要对任意 $\vec{A}$ 都成立, 所以 $\vec{A}$ 的系数必须为 0, 即

$$
\vec{A}\cdot\left(-\frac{\hbar q}{m}\vec{\nabla}f - \frac{q^2}{2m}2\vec{\nabla}\Lambda\right) = 0
$$

最简单的解法即 $f = \dfrac{-q\Lambda}{\hbar}$, 所以规范变换后的波函数为 $\psi' = \boxed{\psi e^{-iq\Lambda/\hbar}}$. 需要关注一开始给出的 Λ 的符号, 从而影响整体变换的正负.

7. **角动量的对易关系为 $[J_i, J_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$, 升降算符定义为 $J_\pm = J_x \pm iJ_y$, 那么 $[J_+, J_-] =$?**

$$
\begin{aligned}
[J_+, J_-] &= [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] \\
&= [J_x, J_x] - i[J_x, J_y] + i[J_y, J_x] + [J_y, J_y] = -2i[J_x, J_y] = -2i(i\hbar J_z) \\
&= \boxed{2\hbar J_z}
\end{aligned}
$$

8. **二维谐振子的哈密顿量为 $H = \hbar\omega\left(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + 1\right)$ 其第一激发态的简并度为?**

二维谐振子的哈密顿量用粒子数算符写作 $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{n}_1 + \hat{n}_2 + \dfrac{1}{2}\right)$, 所以第一激发态即 $n_1 + n_2 = 1$, 这代表了 $|01\rangle$ 和 $|10\rangle$ 两个正交态, 所以简并度为 $\boxed{2}$.

9. **量子比特 A 和 B 构成双量子比特体系, 双量子比特态 $|\psi\rangle$ 中量子比特 A 的纠缠熵定义为 $S(A) = -\mathbf{Tr}[\rho_A \ln\rho_A]$, 其中 ρ_A 是约化密度矩阵, 由密度矩阵求迹掉量子比特 B 的自由度得到. 考虑自旋单态 $|\psi\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$, 计算可得量子比特 A 的纠缠熵为?**

密度矩阵为

$$
\begin{aligned}
\rho = |\psi\rangle\langle\psi| &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_A\otimes|\downarrow\rangle_B - |\downarrow\rangle_A\otimes|\uparrow\rangle_B\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\langle\uparrow|_A\langle\downarrow|_B - \langle\downarrow|_A\langle\uparrow|_B\right) \\
&= \frac{1}{2}\left(|\uparrow\rangle_A\langle\uparrow|_A\otimes|\downarrow\rangle_B\langle\downarrow|_B - |\uparrow\rangle_A\langle\downarrow|_A\otimes|\downarrow\rangle_B\langle\uparrow|_B - |\downarrow\rangle_A\langle\uparrow|_A\otimes|\uparrow\rangle_B\langle\downarrow|_B + |\downarrow\rangle_A\langle\downarrow|_A\otimes|\uparrow\rangle_B\langle\uparrow|_B\right)
\end{aligned}
$$

接下来进行部分求迹, 从而得到所需的约化密度矩阵 ρ_A. 迹被定义为对角线元素之和, 所以我们通过矢量 $\mathbb{I}_A\otimes|\uparrow\rangle_B$ 和$\mathbb{I}_A\otimes|\downarrow\rangle_B$ 来提取对角元素. 具体方法是

$$
\begin{aligned}
&(\mathbb{I}_A\otimes\langle\uparrow|_B)\rho(\mathbb{I}_A\otimes|\uparrow\rangle_B) = \frac{1}{2}|\downarrow\rangle_A\langle\downarrow|_A, \\
&(\mathbb{I}_A\otimes\langle\downarrow|_B)\rho(\mathbb{I}_A\otimes|\downarrow\rangle_B) = \frac{1}{2}|\uparrow\rangle_A\langle\uparrow|_A,
\end{aligned}
$$

$$
\Rightarrow \rho_A = \sum_i^{\uparrow,\downarrow}(\mathbb{I}_A\otimes\langle i|_B)\rho(\mathbb{I}_A\otimes|i\rangle_B) = \frac{1}{2}\left(|\downarrow\rangle_A\langle\downarrow|_A + |\uparrow\rangle_A\langle\uparrow|_A\right) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}
$$

计算 ρ_A 的纠缠熵:

$$
\begin{aligned}
S(A) = -\mathrm{Tr}[\rho_A\ln\rho_A] &= -\sum_i^{\uparrow,\downarrow}(\langle i|_A)\rho_A(|i\rangle_A)\ln\left[(\langle i|_A)\rho_A(|i\rangle_A)\right] \\
&= -\left(\frac{1}{2}\ln\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\ln\frac{1}{2}\right) = \boxed{\ln 2 = 1\ \text{bit}}
\end{aligned}
$$

10. **假设哈密顿量 H 是厄密的, 其基态能量为 E_0, 给定某个态Ψ, 测得能量期望值为 $E[\Psi]=\dfrac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$, $E(\Psi)$ 和 E_0 的关系为?**

任意态均可通过基矢展开, 形式为 $|\Psi\rangle=\sum_n|n\rangle\langle n|\Psi\rangle$, 则

$$
\begin{aligned}
E[\Psi]&=\left(\sum_m\langle\Psi|m\rangle\langle m|\right)\hat{H}\left(\sum_n|n\rangle\langle n|\Psi\rangle\right)=\sum_{m,n}\langle\Psi|m\rangle\langle m|\hat{H}|n\rangle\langle n|\Psi\rangle\\
&=\sum_{m,n}c_m^*E_n\delta_{mn}c_n=\sum_n|c_n|^2E_n\geq\sum_n|c_n|^2E_0=E_0
\end{aligned}
$$

1.2　多项选择

1. **与总角动量算符的平方 $\vec{J}^2$ 对易的算符在 (J_x,J_y,J_z,J_+,J_-) 中有?**

已知角动量的基本对易关系 $[J_i,J_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}J_k$, 那么

$$
\begin{aligned}
[J^2,J_l]=[\sum_i^3J_i^2,J_l]=\sum_i^3[J_i^2,J_l]&=\sum_i^3\left(J_i[J_i,J_l]+[J_i,J_l]J_i\right)\\
&=\sum_i^3\left(J_ii\hbar\epsilon_{ilk}J_k+i\hbar\epsilon_{ilk}J_kJ_i\right)\\
&=i\hbar\sum_i^3(\epsilon_{ilk}J_iJ_k-\epsilon_{kli}J_kJ_i)=0.
\end{aligned}
$$

其中利用了 ϵ_{ijk} 的反对称性质以及 $k\iff i$ 的地位等价. 而 $J_\pm=J_x\pm iJ_y$ 是 $\{J_l\}$ 的线性组合, 根据对易关系的线性性质可知 $[J^2,J_\pm]=0$, 所以待选项均为正确答案.

2. **在原子单位制下 $\hbar=c=1$, 和能量同单位的量在 (距离, 动量, 时间, 质量, 角动量) 中有?**

能量单位为 J=kg·m^2/s^2, 距离单位为 m, 动量单位为 kg·m/s, 时间单位为 s, 质量单位为 kg, 角动量单位为 kg·m^2/s. 现在要求 kg·m^2/s=m/s=1, 即寻找如何通过除以 $\hbar(\mathrm{kg\cdot m^2/s})$, $c(\mathrm{m/s})$ 来进行量纲变换

(a) $\boxed{\text{距离}}$. $\dfrac{\mathrm{kg\cdot m^2/s^2}}{\mathrm{kg\cdot m^2/s}}=\dfrac{1}{\mathrm{s}}$, 是时间的倒数, 因此和能量同单位.

(b) $\boxed{\text{动量}}$. $E=pc$

(c) 时间. $E=\hbar\omega=\hbar\dfrac{1}{\tau}$, 所以时间和能量单位互为倒数.

(d) $\boxed{\text{质量}}$. $E=mc^2$.

(e) 角动量. 角动量的量纲正好是 kg·m^2/s, 即无量纲数, 而能量无法通过除以 $\hbar$ 或 c 来变成角动量的量纲, 所以角动量和能量不同单位.

3. **宇称算符 $\mathbb{P}$ 连续作用两次为恒等变换, 这说明宇称算符 $\mathbb{P}$ 的本征值在 $(0,1,-1,i,-i)$ 中有?**

不妨设 $\mathbb{P}\psi=\lambda\psi$, 那么 $\mathbb{P}^2\psi=\lambda^2\psi=\psi$, 所以 $\lambda^2=1$, 即 $\lambda=\pm1$. 所以宇称算符的本征值为 $\boxed{1,-1}$.

4. **如果算符 A 满足 $A^2=A$, 那么算符 A 的本征值有 $(0,1,-1,i,-i)$ 中有?**

不妨设 $A\psi=\lambda\psi$, 那么 $A^2\psi=A(\lambda\psi)=\lambda^2\psi$, $\lambda^2=\lambda$, 即 $\lambda=0,1$. 所以算符 A 的本征值为 $\boxed{0,1}$.

5. **玻色子产生和湮灭算符满足对易关系 $\left[b_\alpha^\dagger,b_\beta^\dagger\right]=[b_\alpha,b_\beta]=0$, $\left[b_\alpha,b_\beta^\dagger\right]=\delta_{\alpha\beta}$, 那么和总粒子数算符 $N=\sum_\alpha b_\alpha^\dagger b_\alpha$ 对易的算符在 $(b_\alpha,b_\alpha^\dagger b_\alpha,b_\alpha^\dagger b_\beta,b_\alpha^\dagger b_\beta b_\mu,b_\alpha^\dagger b_\beta b_\mu^\dagger b_\nu)$ 中有?**

已知 $[N,A]=\sum_i\left[b_i^\dagger b_i,A\right]=\sum_i\left\{b_i^\dagger[b_i,A]+\left[b_i^\dagger,A\right]b_i\right\}$, 代入以上各算符 A 判断是否对易.

(a) $[N,b_\alpha]=\sum_i\left\{b_i^\dagger[b_i,b_\alpha]+\left[b_i^\dagger,b_\alpha\right]b_i\right\}=\sum_i\{0+(-\delta_{i\alpha})b_\alpha\}=-b_\alpha$

(b)

$$\begin{aligned}
\boxed{[N,b_\alpha^\dagger b_\alpha]}&=\sum_i\left[b_i^\dagger b_i,b_\alpha^\dagger b_\alpha\right]=\sum_i\left\{b_i^\dagger[b_i,b_\alpha^\dagger b_\alpha]+\left[b_i^\dagger,b_\alpha^\dagger b_\alpha\right]b_i\right\}\\
&=\sum_i\left\{b_i^\dagger\left(b_\alpha^\dagger[b_i,b_\alpha]+\left[b_i,b_\alpha^\dagger\right]b_\alpha\right)+\left(b_\alpha^\dagger[b_i^\dagger,b_\alpha]+[b_i^\dagger,b_\alpha^\dagger]b_\alpha\right)b_i\right\}\\
&=\sum_i\left\{b_i^\dagger(b_\alpha^\dagger\cdot 0+\delta_{i\alpha}b_\alpha)+(b_\alpha^\dagger(-\delta_{i\alpha})+0\cdot b_\alpha)b_i\right\}\\
&=\sum_i\delta_{i\alpha}(b_i^\dagger b_\alpha-b_\alpha^\dagger b_i)=0
\end{aligned}$$

(c)

$$\begin{aligned}
\boxed{[N,b_\alpha^\dagger b_\beta]}&=\sum_i\left[b_i^\dagger b_i,b_\alpha^\dagger b_\beta\right]=\sum_i\left\{b_i^\dagger[b_i,b_\alpha^\dagger b_\beta]+\left[b_i^\dagger,b_\alpha^\dagger b_\beta\right]b_i\right\}\\
&=\sum_i\left\{b_i^\dagger(b_\alpha^\dagger[b_i,b_\beta]+[b_i,b_\alpha^\dagger]b_\beta)+(b_\alpha^\dagger[b_i^\dagger,b_\beta]+[b_i^\dagger,b_\alpha^\dagger]b_\beta)b_i\right\}\\
&=\sum_i\left\{b_i^\dagger(b_\alpha^\dagger\cdot 0+\delta_{i\alpha}b_\beta)+(b_\alpha^\dagger(-\delta_{i\beta})+0\cdot b_\beta)b_i\right\}\\
&=\sum_i\left(b_i^\dagger b_\beta\delta_{i\alpha}-b_\alpha^\dagger b_i\delta_{i\beta}\right)=0.
\end{aligned}$$

(d)

$$[N,b_\alpha^\dagger b_\beta b_\mu]=b_\alpha^\dagger b_\beta[N,b_\mu]+[N,b_\alpha^\dagger b_\beta]b_\mu=-b_\alpha^\dagger b_\beta b_\mu$$

(e)

$$\boxed{[N,b_\alpha^\dagger b_\beta b_\mu^\dagger b_\nu]}=b_\alpha^\dagger b_\beta[N,b_\mu^\dagger b_\nu]+[N,b_\alpha^\dagger b_\beta]b_\mu^\dagger b_\nu=0+0=0$$

1.3 简答题

1. **中心势场中的单粒子哈密顿量为** $H=\dfrac{\vec{p}^2}{2M}+V(r)$**. 轨道角动量** $\vec{L}=\vec{r}\times\vec{p}$**, 那么** $[\vec{L},H]=?$

   由于是中心势场, 不妨设 $V(r)=r^n$, 则

$$\begin{aligned}
[\vec{L},H]&=\left[\sum_{ijk}\epsilon_{ijk}\hat{x}_i x_j p_k,\sum_\alpha^3\frac{p_\alpha^2}{2m}+r^n\right]=\frac{1}{2m}\sum_{ijk\alpha}\epsilon_{ijk}\hat{x}_i[x_jp_k,p_\alpha^2]+\sum_{ijk}\epsilon_{ijk}\hat{x}_i[x_jp_k,r^n]\\
&=\frac{1}{2m}\sum_{ijk\alpha}\hat{x}_i\epsilon_{ijk}\left\{\cancel{x_jp_\alpha[p_k,p_\alpha]}+\cancel{x_j[p_k,p_\alpha]p_\alpha}+p_\alpha[x_j,p_\alpha]p_k+[x_j,p_\alpha]p_\alpha p_k\right\}+\sum_{ijk}\epsilon_{ijk}\hat{x}_i x_j[-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_k},r^n]\\
&=\frac{1}{2m}\sum_{ijk\alpha}2i\hbar\delta_{j\alpha}p_\alpha p_k+\sum_{ijk}\epsilon_{ijk}\hat{x}_i x_j\left(-i\hbar n r^{n-1}r^{-\frac{1}{2}}x_k\right)\\
&=\sum_{ijk}\epsilon_{ijk}\hat{x}_i\left\{\frac{i\hbar}{m}p_jp_k+(-i\hbar n r^{n-\frac{3}{2}})x_jx_k\right\}
\end{aligned}$$

   注意到 $j\iff k$ 和 ϵ_{ijk} 的反对称性质, 可以得到 $[\vec{L},H]=\boxed{0}$.

2. **考虑一阶近似, 当** $i\neq f$ **时, 跃迁概率为**

$$P_{i\to f}(t)=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t \mathrm{d}t'\langle f|V(t')|i\rangle e^{\mathrm{i}\omega_{fi}t'}\right|^2$$

其中 $\hbar\omega_{fi}=E_f-E_i$. 当微扰为

$$V(t)=\begin{cases}Ve^{-\mathrm{i}\omega t} & t>0\\ 0 & t<0\end{cases}$$

跃迁概率为?

$$\begin{aligned}P_{i\to f}(t)&=\frac{1}{\hbar^2}\left|\left|\int_0^t \mathrm{d}t'\langle f|Ve^{-\mathrm{i}\omega t'}|i\rangle e^{\mathrm{i}\omega_{fi}t'}\right|\right|^2=\frac{1}{\hbar^2}\left|\left|\int_0^t \mathrm{d}t'\langle f|V|i\rangle e^{-\mathrm{i}\omega t'}e^{\mathrm{i}\omega_{fi}t'}\right|\right|^2\\ &=\frac{1}{\hbar^2}\left|\left|\int_0^t \mathrm{d}t'\langle f|V|i\rangle e^{\mathrm{i}(\omega_{fi}-\omega)t'}\right|\right|^2=\frac{1}{\hbar^2}\left|\left|\int_0^t \mathrm{d}t'\langle f|V|i\rangle e^{\mathrm{i}\Delta\omega t'}\right|\right|^2\\ \left|\left|\int_0^t \mathrm{d}t' e^{\mathrm{i}\Delta\omega t'}\right|\right|^2&=\left|\left|\frac{e^{\mathrm{i}\Delta\omega t}-1}{\mathrm{i}\omega}\right|\right|^2=\frac{(e^{\mathrm{i}\Delta\omega t}-1)(e^{-\mathrm{i}\Delta\omega t}-1)}{(\Delta\omega)^2}=\frac{2-2\cos\Delta t}{(\Delta\omega)^2}=\frac{4}{(\Delta\omega)^2}\sin^2\left(\frac{\Delta\omega t}{2}\right)\\ P_{i\to f}(t)&=\boxed{\frac{4\left|\langle f|V|i\rangle\right|^2}{\hbar^2(\Delta\omega)^2}\sin^2\left(\frac{\Delta\omega t}{2}\right)}\end{aligned}$$

3. 算符 $\Omega(t)\equiv U^{-1}(t)U_0(t)$, 算符 $\Omega_\pm\equiv\lim\limits_{t\to\mp\infty}\Omega(t)$, 其中 $U_0(t)=e^{-\mathrm{i}H_0t/\hbar}$ 是自由系统 H_0 的时间演化算符, $U(t)=e^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}$ 是短程势散射系统的时间演化算符, $H=H_0+V$. 散射算符定义为 $S\equiv\Omega_-^\dagger\Omega_+$, 那么 $[S,H_0]=?$

4. 动量空间中自由粒子的 **Dirac** 方程可以写为

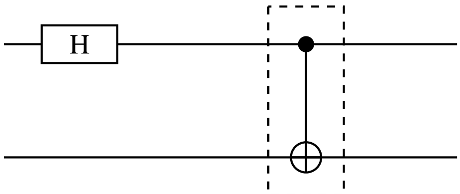
$$\begin{aligned}(E-\vec\sigma\cdot\vec p)\,\chi_+(\vec p)&=m\chi_-(\vec p)\\ (E+\vec\sigma\cdot\vec p)\,\chi_-(\vec p)&=m\chi_+(\vec p)\end{aligned}$$

当质量 $m=0$时, 两个 **Weyl** 旋量之间没有耦合, 得到动量空间中的 **Weyl** 方程

$$(E-\vec\sigma\cdot\vec p)\,\chi_+=0,\quad (E+\vec\sigma\cdot\vec p)\,\chi_-=0$$

定义螺旋度算符为 $\frac{1}{2}\hat{\vec p}\cdot\vec\sigma$, 其中 $\hat{\vec p}=\vec p/|\vec p|$, 那么可知 **Weyl** 旋量 $\chi_\pm$ 恰好是螺旋度算符的本征态, 本征值分别为?

5. 一个可以制备 **Bell** 态的简单量子线路为



它包含两个张量: 一个 **Hadamard gate (H)** 和一个 **controlled NOT gate (CNOT)**(虚线框里), 在 S^z 表象下它们的矩阵表示为,

$$H=\frac{1}{\sqrt2}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix},$$
$$\textbf{CNOT}=e^{\frac{\mathrm{i}\pi}{4}(\mathbb{I}-\sigma_1^z)\otimes(\mathbb{I}-\sigma_2^x)}$$

将以上量子线路作用到 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 上得到的态为?

1.4 应用题

1. 矩阵对角化和表象变换

   (a) 对角化矩阵 L 就是去找到幺正变换 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 是一个幺正矩阵, 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 $\sigma^x=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$ 的幺正矩阵 V, 并找到 σ^x 的本征值.

通过求解其特征方程以得到 $\sigma^x_{(z)}$ 的本征值:

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

解得 $\boxed{\lambda=\pm 1}$. 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 $|+\rangle^x_{(z)}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}$. 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 $|-\rangle^x_{(z)}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ -1\end{pmatrix}$. 在求解过程中已经对这些本征矢进行了归一化, 所以可以得到幺正矩阵 $V=[|+\rangle^x_{(z)},|-\rangle^x_{(z)}]=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}$. 对角矩阵 Λ 对角线上依次是本征值, 即

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

于是我们可以通过幺正矩阵 V 来对 $\sigma^x_{(z)}$ 进行对角化:

$$\sigma^x_{(z)}=V^\dagger\Lambda V=V^\dagger\sigma^z_{(z)}V$$

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:

$$\sigma^x_{(z)}=V^\dagger\sigma^z_{(z)}V=V^\dagger\sigma^x_{(x)}V\Rightarrow\sigma^x_{(x)}=\left(V^\dagger\right)^{-1}\sigma^x_{(z)}(V)^{-1}$$

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

$$\sigma^x_{(x)}=V\sigma^x_{(z)}V$$

(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 $\vec{S}=\dfrac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$, 其中 $\vec{\sigma}$ 的三个分量为 Pauli 矩阵 σ^x, σ^y, σ^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

$$S^x_{(z)}=\frac{\hbar}{2}\sigma^x_{(z)}=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$

从前文中可知, $\sigma^x_{(z)}$ 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 表象的幺正矩阵为

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

在 S^z 表象中有

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

因此

$$
\begin{aligned}
S^x_{(x)} &= VS^x_{(z)}V = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\\
S^y_{(x)} &= VS^y_{(z)}V = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\\
S^z_{(x)} &= VS^z_{(z)}V = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

在 S^x 表象中的基矢为

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

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 $[Q,P]$, $[a,a^\dagger]$, $[a,a^\dagger a]$, $[a^\dagger,a^\dagger a]$;

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

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

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

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:

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

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

(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 $\vec{J}_1^2=\vec{J}_2^2=j(j+1)\hbar^2$, $J^2=J(J+1)\hbar^2$, $J=2j,2j-1,\cdots,1,0$. 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.

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.

(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.

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,

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

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

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

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

$$|\mathbf{FS}\rangle = \prod_{k<k_F,\sigma} c^\dagger_{\vec{k}\sigma} |0\rangle$$

(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.

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

(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 $\left\langle c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}'\sigma'} \right\rangle = \left\langle c^\dagger_{\vec{k}\sigma} c_{\vec{k}\sigma} \right\rangle \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'}$, 以及 $\left\langle c^\dagger_{\vec{k}\uparrow} c_{\vec{k}\uparrow} \right\rangle = \left\langle c^\dagger_{\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\downarrow} \right\rangle$. 计算系统总能量, 并与 $E^{(0)} + E^{(1)}$ 比较大小.

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 $\hat{R}(\alpha)$,

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

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 $\hat{R}S(\alpha)$ 是一个幺正算符, 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

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

其中 $g\cos\left(2\hat{\theta}\right)$ 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

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

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.**

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

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 $V = -g\cos\left(2\hat{\theta}\right)$ 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 $\langle N|V|N'\rangle$). 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.**

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

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.**

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

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.