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.

   (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 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.

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.

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

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

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

(c) 在能量表象中, 计算 a 和 $a^\dagger$ 的矩阵元.

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:

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

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, $q = |\vec{q}|$, $x = |\vec{x}|$,

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

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 $\left\langle c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}'\sigma'} \right\rangle = \left\langle c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} \right\rangle \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\sigma,\sigma'}$, 以及 $\left\langle c_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\vec{k}\uparrow} \right\rangle = \left\langle c_{\vec{k}\downarrow}^{\dagger} c_{\vec{k}\downarrow} \right\rangle$. 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 $\hat{R}(\alpha)$ 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.

(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.

(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.

(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.