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.**

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

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

   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 $\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$, 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.**

   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

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

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.

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 $C_{j,m,j,-m}^{0,0}=\dfrac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}$, 显然因为平方消去了可能存在的负号, 使得 $|j,m;j,-m\rangle,\quad\forall m\in\{-j,-j+1,\cdots,j-1,j\}$ 等概率, 所以得到

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

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

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

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.

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

(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.**

$$
\begin{gathered}
H_0|s,m\rangle = \left(S^z\right)^2|s,m\rangle = m^2|s,m\rangle \\
\Rightarrow E_{-1}^{(0)} = 1, \quad E_0 = 0, \quad E_1 = 1
\end{gathered}
$$

注意到 m^2 会带来 $m = \pm 1$ 的简并, 所以后续计算时会涉及简并态的微扰处理. 首先观察简并态, 简并态矢张成独立子空间, 于是求解这个子空间中 V 的矩阵:

$$
V_{\text{sub}} = \begin{pmatrix} \langle 1,1|V|1,1\rangle & \langle 1,1|V|1,-1\rangle \\ \langle 1,-1|V|1,1\rangle & \langle 1,-1|V|1,-1\rangle \end{pmatrix}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle 1,1|V|1,1\rangle &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = 1, \\
\langle 1,1|V|1,-1\rangle &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0, \\
\langle 1,-1|V|1,1\rangle &= 0, \\
\langle 1,-1|V|1,-1\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -1. \\
\Rightarrow V_{\text{sub}} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

注意到计算得到的子空间中 V_{sub} 完成了对角化, 这说明沿用的 $|s,m\rangle$ 基矢已经是 "好量子态". 所以回归到非简并微扰论的方法. 一阶能量修正各为

$$
\begin{aligned}
E_1^{(1)} &= \langle 1,1|V|1,1\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \boxed{1}, \\
E_0^{(1)} &= \langle 1,0|V|1,0\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \boxed{0}, \\
E_{-1}^{(1)} &= \langle 1,-1|V|1,-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \boxed{-1},
\end{aligned}
$$

二阶能量修正由公式 $E_m^{(n)} = \sum_{n\neq m} \frac{|\langle n|V|m\rangle|^2}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}$ 给出:

$$E_1^{(2)} = \frac{|\langle 1,0|V|1,1\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_0^0} + \frac{|\langle 1,-1|V|1,1\rangle|^2}{E_1^{(0)} - E_{-1}^{(0)}} = \frac{\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2}{1-0} + \frac{0^2}{1-1} = \boxed{\frac{1}{2}},$$

$$E_0^{(2)} = \frac{|\langle 1,1|V|1,0\rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}} + \frac{|\langle 1,-1|V|1,0\rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_{-1}^{(0)}} = \frac{\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2}{0-1} + \frac{0^2}{0-(-1)} = \boxed{-\frac{1}{2}},$$

$$E_{-1}^{(2)} = \frac{|\langle 1,0|V|1,-1\rangle|^2}{E_{-1}^{(0)} - E_0^{(0)}} + \frac{|\langle 1,1|V|1,-1\rangle|^2}{E_{-1}^{(0)} - E_1^{(0)}} = \frac{\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2}{-1-0} + \frac{0^2}{1-1} = \boxed{-\frac{1}{2}}$$

可见, 只要在 $E_i^{(1)} - E_j^{(1)} = 0$ 时分子也为 0, 我们就可以无视分母为 0 的问题. 接下来是对态函数的微扰修正. 一阶修正由 $|m\rangle^{(1)} = \sum_{n\neq m} |n\rangle \frac{\langle n|V|m\rangle}{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}$ 给出:

$$\begin{aligned}
|1,1\rangle^{(1)} &= |1,0\rangle \frac{\langle 1,0|V|1,1\rangle}{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}} + |1,-1\rangle \frac{\langle 1,-1|V|1,1\rangle}{E_1^{(0)} - E_{-1}^{(0)}} = |1,0\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{1-0} + |1,-1\rangle \cdot 0 \\
&= \boxed{\frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle} \\
|1,0\rangle^{(1)} &= |1,1\rangle \frac{\langle 1,1|V|1,0\rangle}{E_0^{(0)} - E_1^{(0)}} + |1,-1\rangle \frac{\langle 1,-1|V|1,0\rangle}{E_0^{(0)} - E_{-1}^{(0)}} = |1,1\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{0-1} + |1,-1\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{0-(-1)} \\
&= \boxed{\frac{1}{\sqrt{2}}(-|1,1\rangle + |1,-1\rangle)} \\
|1,-1\rangle^{(1)} &= |1,1\rangle \frac{\langle 1,1|V|1,-1\rangle}{E_{-1}^{(0)} - E_1^{(0)}} + |1,0\rangle \frac{\langle 1,0|V|1,-1\rangle}{E_{-1}^{(0)} - E_0^{(0)}} = |1,1\rangle \cdot 0 + |1,0\rangle \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{-1-0} \\
&= \boxed{-\frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle}
\end{aligned}$$

总结:

$$\begin{aligned}
E_1 &= 1 + 1\lambda + \frac{1}{2}\lambda^2 + o(\lambda^2) \\
E_0 &= 0 + 0\lambda - \frac{1}{2}\lambda^2 + o(\lambda^2) \\
E_{-1} &= 1 - 1\lambda - \frac{1}{2}\lambda^2 + o(\lambda^2) \\
|1,1\rangle &= |1,1\rangle + \frac{\lambda}{\sqrt{2}}|1,0\rangle + o(\lambda) \\
|1,0\rangle &= |1,0\rangle + \frac{\lambda}{\sqrt{2}}(-|1,1\rangle + |1,-1\rangle) + o(\lambda) \\
|1,-1\rangle &= |1,-1\rangle - \frac{\lambda}{\sqrt{2}}|1,0\rangle + o(\lambda)
\end{aligned}$$

对于这类可以使用矩阵形式讨论的问题, 还有一种笨办法, 就是直接严格对角化含 λ 微扰的哈密顿量, 然后进行 Taylor 展开得到各级数. 但是在三阶矩阵下的计算已经非常复杂, 所以还是建议使用一般微扰论方法, 毕竟考试时是会给出公式的.

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 $\varepsilon_{\vec{k}}=\dfrac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}$ **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,** $q=|\vec{q}|$**,** $x=|\vec{x}|$**,**

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

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**

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

(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 $\dfrac{\hbar^2\hat{k}^2}{2m}\psi=E\psi$. 于是能量本征值为 $\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}=\sum_i\dfrac{\hbar^2k_i^2}{2m}$, 其中 $k_i=\dfrac{\sqrt{2mE_i}}{\hbar}$. 由于使用了箱归一化, 即有边界条件 $k_il_i=n_i\pi(n_i\in\mathbb{N}^*)$, 代入即得

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

每个波矢 $\vec{k}=\left(\dfrac{\pi}{l_x}n_x,\dfrac{\pi}{l_y}n_y,\dfrac{\pi}{l_z}n_z\right)$ 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 $\prod_i^3\dfrac{\pi}{l_i}=\dfrac{\pi^3}{l_xl_yl_z}=\dfrac{\pi^3}{V}$, 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$f(\epsilon)=\dfrac{1}{1+e^{\beta(\epsilon-\mu)}}$. 绝对零度($\beta\to\infty$)下, 电子可占据的最高能级即为费米能级 $\lim_{\beta\to\infty}\mu=\varepsilon_F$, 对应波矢 $|k|\le k_F$. 由于前面讨论 $k_i\in\mathbb{N}^*$, 因此 $k\le k_F$ 在 $\vec{k}$ 空间中会形成 $\dfrac{1}{8}$ 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

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

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 $\dfrac{1}{8}$ 费米球, 于是求和化为积分形式, 即有 $E_{\text{tot}}=\sum_i^{k\le k_F}\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}\Rightarrow\int_0^{k_F}\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}f(k)\mathrm{d}k$, 其中 $f(k)$ 是态密度, 表示在同一能量 $\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$ 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 $\mathrm{d}k$ 的 $\dfrac{1}{8}$ 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 $\dfrac{1}{8}(4\pi k^2\mathrm{d}k)$, 又已知每个格点体积为 $\dfrac{\pi^3}{V}$, 因此球壳中电子数目为

$$\text{格点数}\times2=\frac{\frac{1}{8}(4\pi k^2\mathrm{d}k)}{\frac{\pi^3}{V}}\times2=\frac{k^2V}{\pi^2}\mathrm{d}k=f(k)\mathrm{d}k$$

因此总能量为

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

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:

$$\begin{aligned} k_F &= (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} \\ \frac{E^{(0)}}{V} &= \frac{\hbar^2 k_F^5}{10m\pi^2} = \frac{\hbar^2}{10m\pi^2} \cdot (3\pi^2 n)^{\frac{5}{3}} = \boxed{\frac{(3n)^{\frac{5}{3}} \hbar^2 \pi^{\frac{4}{3}}}{10m}} \end{aligned}$$

(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.

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

代 $v(\vec{q})$ 入两体相互作用部分, 有

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

(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.**

代 $|\mathrm{HF}\rangle = \prod_{k \le k_F, \sigma} c^\dagger_{\vec{k},\sigma} |0\rangle$ 入能量一阶修正, 有

$$\langle \mathrm{HF} | H_0 | \mathrm{HF} \rangle = \sum_{\vec{k},\sigma} \langle \mathrm{HF} | \frac{k^2}{2} c^\dagger_{\vec{k},\sigma} c_{\vec{k},\sigma} | \mathrm{HF} \rangle$$

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

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:

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

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

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

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.