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?**

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

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

   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

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

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

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

计算 ρ_A 的纠缠熵:

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

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) 距离. $\dfrac{E}{\hbar c}=\dfrac{\mathrm{kg\cdot m^2/s^2}}{\mathrm{kg\cdot m^2/s\cdot m/s}}=\dfrac{1}{\mathrm{m}}$, 说明距离和能量在单位上互为倒数.

(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)

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

可以不严谨地总结出一条规律: 粒子数算符 $\hat{N}$ 只会与另一个粒子数算符对易, 而与单独的产生湮灭算符均不对易.

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

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

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?

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

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**

$$(E - \vec{\sigma}\cdot\vec{p})\,\chi_+(\vec{p}) = m\chi_-(\vec{p}), \quad (E + \vec{\sigma}\cdot\vec{p})\,\chi_-(\vec{p}) = m\chi_+(\vec{p})$$

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

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

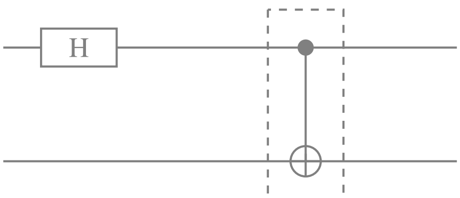
定义螺旋度算符为 $\frac{1}{2}\hat{\vec{p}}\cdot\vec{\sigma}$, 其中 $\hat{\vec{p}} = \frac{\vec{p}}{|\vec{p}|}$, 那么可知 Weyl 旋量 $\chi_\pm$ 恰好是螺旋度算符的本征态, 本征值分别为?

当 $m = 0$ 且 $|\vec{p}| = E$ 时, 原 Dirac 方程即为

$$\begin{aligned} &(1 - \hat{\vec{p}}\cdot\vec{\sigma})\chi_+(\vec{p}) = 0, \quad (1 + \hat{\vec{p}}\cdot\vec{\sigma})\chi_-(\vec{p}) = 0 \\ \Rightarrow\ &(1 - 2\hat{h})\chi_+(\vec{p}) = 0, \quad (1 + 2\hat{h})\chi_-(\vec{p}) = 0 \end{aligned}$$

其中 $\hat{h}$ 即为螺旋度算符. 显然 χ_+ 和 χ_- 分别是 $\hat{h}$ 的本征态, 本征值则为 $\boxed{\pm\frac{1}{2}}$

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,

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

$$\mathrm{CNOT} = \exp\left\{\mathrm{i}\pi\frac{1}{4}(\mathbb{I} - \sigma_1^z)\otimes(\mathbb{I} - \sigma_2^x)\right\}$$

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

注意到

$$
\begin{aligned}
A &= \frac{1}{4}(\mathbb{I}-\sigma_1^z)\otimes(\mathbb{I}-\sigma_2^x) = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} & \\ & 2\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}1 & -1\\ -1 & 1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & & \\ & & & \\ & & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ & & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\\
A^2 &= A\\
e^{i\alpha A} &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(i\alpha A)^n = \mathbb{I}+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}(i\alpha)^n(A)^n = \mathbb{I}+A\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(i\alpha)^n-1\right)\\
&= \mathbb{I}+A(e^{i\alpha}-1)\\
\Rightarrow \mathrm{CNOT} &= \mathbb{I}-2A = \begin{pmatrix}1 & & & \\ & 1 & & \\ & & & 1\\ & & 1 & \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

因此, CNOT 的作用是调换第三, 第四元素的位置, 这个作用当且仅当第一个量子比特为 $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ 时才会发生.

$$
\begin{aligned}
&\left(\hat{H}_{(1)}\otimes\mathbb{I}_{(2)}\right)|\uparrow\rangle_{(1)}\otimes|\uparrow\rangle_{(2)} = \hat{H}_{(1)}|\uparrow\rangle_{(1)}\otimes|\uparrow\rangle_{(2)} = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1\\ 1 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\right]\otimes\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{(1)}+|\downarrow\rangle_{(1)})\otimes|\uparrow\rangle_{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{(1)}\otimes|\uparrow\rangle_{(2)}+|\downarrow\rangle_{(1)}\otimes|\uparrow\rangle_{(2)}).\\
&\mathrm{CNOT}\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{(1)}\otimes|\uparrow\rangle_{(2)}+|\downarrow\rangle_{(1)}\otimes|\uparrow\rangle_{(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{(1)}\otimes|\uparrow\rangle_{(2)}+\mathrm{CNOT}|\downarrow\rangle_{(1)}\otimes|\uparrow\rangle_{(2)})\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{(1)}\otimes|\uparrow\rangle_{(2)}+|\downarrow\rangle_{(1)}\otimes|\downarrow\rangle_{(2)}) = \boxed{\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle+|\downarrow\downarrow\rangle)}, \quad \text{for simplicity.}
\end{aligned}
$$

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 $\boxed{\lambda=\pm1}$. 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

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

在 S^x 表象中的基矢为

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

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;

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

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.**

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.**

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

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:

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

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:**

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

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,**

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

$v(q)$ **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.**

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 $\dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} = \sum_i \dfrac{\hbar^2 k_i^2}{2m}$, 其中 $k_i = \dfrac{\sqrt{2mE_i}}{\hbar}$. 由于使用了箱归一化, 即有边界条件 $k_i l_i = n_i \pi (n_i \in \mathbb{N}^*)$, 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 $\vec{k} = \left(\dfrac{\pi}{l_x}n_x, \dfrac{\pi}{l_y}n_y, \dfrac{\pi}{l_z}n_z\right)$ 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 $\prod_i^3 \dfrac{\pi}{l_i} = \dfrac{\pi^3}{l_x l_y l_z} = \dfrac{\pi^3}{V}$, 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

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

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 $\dfrac{1}{8}$ 费米球, 于是求和化为积分形式, 即有 $E_{\text{tot}} = \sum_i^{k\le k_F} \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow \int_0^{k_F} \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m} f(k)\mathrm{d}k$, 其中 $f(k)$ 是态密度, 表示在同一能量 $\dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ 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 $\mathrm{d}k$ 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

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

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:

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

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

(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.

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

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

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

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.

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

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 $V = -g\cos\left(2\hat{\theta}\right)$ 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.