Homework15 答案

December 30, 2020

1 一对正负电子处于自旋单态，计算关联$\langle(\vec{n}_1\cdot\vec{s}(1))(\vec{n}_2\cdot\vec{s}(2))\rangle$. ($\vec{n}_1,\vec{n}_2$是任意方向矢量)

解：设$\vec{n}_1,\vec{n}_2$方向角为$(\theta_1,\varphi_1),(\theta_2,\varphi_2)$. 波函数可表示为

$$|\psi\rangle=|0,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|\frac{1}{2}\rangle|-\frac{1}{2}\rangle-|-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\rangle)$$

分别计算$\langle s_x(1)s_x(2)\rangle,\langle s_y(1)s_y(2)\rangle,\langle s_z(1)s_z(2)\rangle$,
$\langle s_x(1)s_y(2)\rangle,\langle s_x(1)s_z(2)\rangle,\langle s_y(1)s_x(2)\rangle,\langle s_y(1)s_z(2)\rangle,\langle s_z(1)s_x(2)\rangle,\langle s_z(1)s_y(2)\rangle$, 得到

$$\langle s_x(1)s_x(2)\rangle=\langle s_y(1)s_y(2)\rangle=\langle s_z(1)s_z(2)\rangle=-\frac{1}{4}\hbar^2$$

交叉项均为0. 故我们可以得到

$$\langle(\vec{n}_1\cdot\vec{s}(1))(\vec{n}_2\cdot\vec{s}(2))\rangle=-\frac{\hbar^2}{4}\vec{n}_1\cdot\vec{n}_2=-\frac{\hbar^2}{4}(cos\theta_1cos\theta_2+sin\theta_1sin\theta_2cos(\varphi_1-\varphi_2))$$

以上计算结果的原因是自旋单态

$$\begin{aligned}\chi_{00}\quad&=\tfrac{1}{\sqrt{2}}(|+,z\rangle|-,z\rangle-|-,z\rangle|+,z\rangle)\\&=-\tfrac{1}{\sqrt{2}}(|+,x\rangle|-,x\rangle-|-,x\rangle|+,x\rangle)\\&=-i\tfrac{1}{\sqrt{2}}(|+,y\rangle|-,y\rangle-|-,y\rangle|+,y\rangle)\end{aligned}$$

就是说无论从哪个方向看都是反向纠缠。

另外我们也可以将$\vec{n}_1\cdot\vec{s}(1),\vec{n}_2\cdot\vec{s}(2)$写成矩阵表示形式

$$\begin{aligned}s_{n1}&=\begin{pmatrix}cos\theta_1 & sin\theta_1e^{-i\varphi_1}\\ sin\theta_1e^{i\varphi_1} & -cos\theta_1\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\\ s_{n2}&=\begin{pmatrix}cos\theta_2 & sin\theta_2e^{-i\varphi_2}\\ sin\theta_2e^{i\varphi_2} & -cos\theta_2\end{pmatrix}\frac{\hbar}{2}\end{aligned}$$

如果用$|1\rangle,|2\rangle$分别标记$|\frac{1}{2}\rangle,|-\frac{1}{2}\rangle$. 我们可以得到$\langle i|s_n|j\rangle$值恰好对应于$s_n$的矩阵元$s_{n(ij)}$, 其中$i,j=1,2$. 因此

$$\begin{aligned}&\langle(\vec{n}_1\cdot\vec{s}(1))(\vec{n}_2\cdot\vec{s}(2))\rangle\\=&\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle\frac{1}{2}|\langle-\frac{1}{2}|-\langle-\frac{1}{2}|\langle\frac{1}{2}|)\cdot s_{n1}s_{n2}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}(|\frac{1}{2}\rangle|-\frac{1}{2}\rangle-|-\frac{1}{2}\rangle|\frac{1}{2}\rangle)\\=&\frac{1}{2}[s_{n1(11)}s_{n2(22)}-s_{n1(12)}s_{n2(21)}-s_{n1(21)}s_{n2(12)}+s_{n1(22)}s_{n2(11)}]\\=&-\frac{\hbar^2}{4}(cos\theta_1cos\theta_2+sin\theta_1sin\theta_2cos(\varphi_1-\varphi_2))\end{aligned}$$

由以上关系可知，当设定的两个观测方向反向时, 即$\theta_2=\pi-\theta_1,\varphi_2=\varphi_1+\pi$, 关联数值最大，为$\frac{\hbar^2}{4}$；当观测方向同向时，关联数值最小为$-\frac{\hbar^2}{4}$。此两者关联的绝对值最大。如果观察方向垂直，关联绝对值最小，为零。

2. 两个自旋1/2的粒子构成的体系，其哈密顿量为$H=J\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2$. 设$t=0$时，处于$\alpha(1)\beta(2)$。求$t>0$时，（1）粒子1自旋向上的几率。（2）粒子1和粒子2自旋均向上的几率。（3）总自旋量子数$S=0,1$的几率。（4）求$\langle\vec{s}(1)\rangle,\langle\vec{s}(2)\rangle$

解：求解含时波函数主要有两种方法。一种方法是在Schrodinger表象下计算；另一种方法是在Heisnberg表象下计算。显然用Heisenberg表象计算比较复杂。因此我们采用Schrodinger表象. 在Schrodinger表象求解，首先我们需要求解H的本征值和本征态。然后将$t=0$时刻的态用本征态作展开。最后得到t时刻的波函数。

易得H的本征态即为自旋单态和自旋三重态，本征值分别为

$$
\begin{aligned}
&|0,0\rangle, \quad E_1=-\frac{3J}{4}\hbar^2\\
&|1,1\rangle, \quad E_2=\frac{J}{4}\hbar^2\\
&|1,0\rangle, \quad E_3=\frac{J}{4}\hbar^2\\
&|1,-1\rangle, \quad E_4=\frac{J}{4}\hbar^2
\end{aligned}
$$

初态波函数为$|\psi(0)\rangle=|\frac{1}{2}\rangle_1|-\frac{1}{2}\rangle_2$以自旋单态和自旋三重态为基矢展开

$$|\psi(0)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}|0,0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle$$

我们得到t时刻波函数为

$$|\psi(t)\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{i3J\hbar t}{4}}|0,0\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{-iJ\hbar t}{4}}|1,0\rangle$$

(1) 将t时刻波函数写为

$$|\psi(t)\rangle=\frac{1}{2}(e^{\frac{i3J\hbar t}{4}}+e^{\frac{-iJ\hbar t}{4}})|\frac{1}{2}\rangle_1|-\frac{1}{2}\rangle_2+\frac{1}{2}(e^{\frac{-iJ\hbar t}{4}}-e^{\frac{i3J\hbar t}{4}})|-\frac{1}{2}\rangle_1|\frac{1}{2}\rangle_2$$

由上式知粒子1自旋向上的几率为$|\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{\frac{i3J\hbar t}{4}}+e^{\frac{-iJ\hbar t}{4}})|^2=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}cos(J\hbar t)$

(2) 粒子1和粒子2自旋均向上的几率为0

(3) 总自旋量子数$S=0,1$的几率分别为$\frac{1}{2},\frac{1}{2}$

(4) 计算$\langle\vec{s}(1)\rangle,\langle\vec{s}(2)\rangle$

$$
\begin{aligned}
\langle s_z(1)\rangle &= \frac{\hbar}{2}|\frac{1}{2}(e^{\frac{i3J\hbar t}{4}}+e^{\frac{-iJ\hbar t}{4}})|^2-\frac{\hbar}{2}|\frac{1}{2}(e^{\frac{i3J\hbar t}{4}}-e^{\frac{-iJ\hbar t}{4}})|^2=cos(J\hbar t)\frac{\hbar}{2}\\
\langle s_z(2)\rangle &= -\frac{\hbar}{2}|\frac{1}{2}(e^{\frac{i3J\hbar t}{4}}+e^{\frac{-iJ\hbar t}{4}})|^2+\frac{\hbar}{2}|\frac{1}{2}(e^{\frac{i3J\hbar t}{4}}-e^{\frac{-iJ\hbar t}{4}})|^2=-cos(J\hbar t)\frac{\hbar}{2}
\end{aligned}
\tag{1}
$$

由于$s_x(1)$ 将第一个粒子自旋翻转，第二个粒子自旋状态不变，因此计算内积时所有项正交。

$$\begin{aligned} \langle s_x(1)\rangle &= 0 \\ \langle s_x(2)\rangle &= 0 \\ \text{同理：} \langle s_y(1)\rangle &= 0 \\ \langle s_y(2)\rangle &= 0 \end{aligned}$$

3. 三个自旋1/2不同粒子组成的系统。
(a).求总自旋$S^2 = (s_1 + s_2 + s_3)^2$的本征值;
(b).设体系能量为$H = (s_1 \cdot s_2 + s_2 \cdot s_3 + s_3 \cdot s_1)\omega$,此所谓Heisenberg model，求能谱并说明简并度。
解：(a)为了方便书写，记$\hbar = 1$,我们把粒子1、2自旋之和记为$\mathbf{S}_{12}$,总自旋记为$\mathbf{S}_{123}$,其余以此类推。总自旋S^2可以写成如下形式

$$\begin{aligned} S^2 &= (\mathbf{S}_{12} + s_3)^2 \\ &= s_1^2 + s_2^2 + s_3^2 + 2s_1 \cdot s_2 + 2s_2 \cdot s_3 + 2s_1 \cdot s_3 \\ &= S_{123}^2 = S(S+1) \end{aligned} \tag{2}$$

总自旋S^2的本征值就很容易求得，只需要把S的量子数代入上述方程即可，三自旋的耦合S可以取，3/2,1/2两个值。

(b)考虑到(a)的结果，H可以写成

$$\begin{aligned} H &= (s_1 \cdot s_2 + s_2 \cdot s_3 + s_3 \cdot s_1)\omega \\ &= \frac{1}{2}(S_{123}^2 - 3 \times \frac{3}{4})\omega \end{aligned} \tag{3}$$

因此，能级为（取$\hbar = 1$）

$$E_S = \frac{1}{2}[S(S+1) - \frac{9}{4}]\omega$$

完全由总自旋量子数决定。

总自旋矢量可以理解为矢量S_{12}与矢量s_3之和。力学量的完全集可以取$[S_{123}^2, (S_{123})_Z, S_{12}^2, s_3^2]$, 本征值为

$$\begin{aligned} S_{12}^2 = S'(S'+1), S' = 1, 0 \\ S_{123}^2 = S(S+1), S = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\text{当}S' = 1\text{时;} \\ S = \frac{1}{2}, \text{当}S' = 0\text{时;} \\ (S_{123})_Z = S, S-1, \cdots, (-S), \text{对于每个给定}S. \end{aligned}$$

量子数S', S的可能组合为$S = S' \pm \frac{1}{2} > 0$,即

$$\begin{aligned} S &= 3/2, S' = 1 \\ S &= 1/2, S' = 1, 0 \end{aligned}$$

对于每一对(S, S'),能级都是$(2S+1)$度简并的，所以

$$E_{3/2} = \frac{3}{4}, S = 3/2, S' = 1 \tag{4}$$

简并度4.

$$E_{1/2}=-\frac{3}{4},S=1/2,S'=1,0 \tag{5}$$

简并度4.

4. 考虑两个角动量，其量子数为$j_1=j_2=1$.
(1).利用C-G系数，写出J_1^2,J_2^2,J^2,J_z的共同本征态$|j,m_j\rangle$在非耦合表象下的表示;
(2).记α,β,γ为每个角动量z分量$m=1,0,-1$的三个态，利用$J^2=J_1^2+J_2^2+2J_{1z}J_{2z}+J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+}$ 直接写出并证明之。
解：(1)J_1^2,J_2^2,J^2,J_z的共同本征态$|j,m_j\rangle$在非耦合表象下的表示

$$|j,m_j\rangle=\sum_{m_1,m_2}C^{j,m_j}_{m_1,m_2}\left|j_1,m_1\right\rangle_1\left|j_2,m_2\right\rangle_2$$

上式中的展开系数$C^{j,m_j}_{m_1,m_2}$,我们称之为C-G系数，C-G系数自然应该是满足归一化条件的。这里$j_1=j_2=1$,j可能的取值就是$j=2,1,0$,因此

$$\begin{aligned}
j=2,m_j=0,\pm1,\pm2, \qquad & \qquad (6)\\
|2,m_j\rangle &= \sqrt{\frac{(1+m_j)(2+m_j)}{12}}\,|1,m_j-1\rangle\,|1,1\rangle\\
&+ \sqrt{\frac{(2-m_j)(2-m_j)}{6}}\,|1,m_j\rangle\,|1,0\rangle\\
&+ \sqrt{\frac{(1-m_j)(2-m_j)}{12}}\,|1,m_j+1\rangle\,|1,-1\rangle\\
j=1,m_j=0,\pm1, \qquad & \qquad (7)\\
|1,m_j\rangle &= -\sqrt{\frac{(1+m_j)(2+m_j)}{4}}\,|1,m_j-1\rangle\,|1,1\rangle\\
&+ \sqrt{\frac{m_j}{2}}\,|1,m_j\rangle\,|1,0\rangle\\
&+ \sqrt{\frac{(1-m_j)(2+m_j)}{4}}\,|1,m_j+1\rangle\,|1,-1\rangle\\
j=0,m_j=0, \qquad & \qquad (8)\\
|0,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\,|1-1\rangle\,|1,1\rangle-\frac{1}{\sqrt{3}}\,|1,0\rangle\,|1,0\rangle+\frac{1}{\sqrt{3}}\,|1,1\rangle\,|1,-1\rangle
\end{aligned}$$

(2)在(1)中，我们完整的给出了J_1^2,J_2^2,J^2,J_z的共同本征态$|j,m_j\rangle$在非耦合表象下的表示，总共有9种，记α,β,γ为每个角动量z分量$m=1,0,-1$的三个态，我们就需要对上述C-G系数给出的结果逐一证明，显然α,β,γ的两两组合有9种

$$\alpha\alpha,\beta\beta,\gamma\gamma,\alpha\beta,\beta\alpha,\beta\gamma,\gamma\beta,\alpha\gamma,\gamma\alpha \tag{9}$$

构成非耦合表象的基矢。将上述基矢组合，可以表示出耦合表象的9个基矢。

无论如何线性组合，以上9个基矢都是$J_1^2+J_2^2+2J_{1z}J_{2z}$的本征矢，因而我们关注$J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+}$的本征矢即可。

考虑

$$\begin{aligned} J_+(\alpha,\beta,\gamma) &= \sqrt{2}(0,\alpha,\beta) \\ J_-(\alpha,\beta,\gamma) &= \sqrt{2}(\beta,\gamma,0) \end{aligned} \tag{10}$$

我们进行组合：

$$(J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+})\alpha\alpha = 0 \tag{11}$$

$$(J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+})\gamma\gamma = 0 \tag{12}$$

$$(J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+})(\alpha\beta\pm\beta\alpha) = 2(\beta\alpha\pm\alpha\beta) \tag{13}$$

$$(J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+})(\beta\gamma\pm\gamma\beta) = 2(\gamma\beta\pm\beta\gamma) \tag{14}$$

$$(J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+})(2\beta\beta\pm(\alpha\gamma+\gamma\alpha)) = \pm 2(2\beta\beta\pm 2(\alpha\gamma+\gamma\alpha)) \tag{15}$$

$$(J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+})(\alpha\gamma-\gamma\alpha) = 0 \tag{16}$$

除（15)之外，都是本征矢。但是加上$J_{1z}+J_{2z}$之后，因为$J_{1z}J_{2z}\beta\beta=0$, 我们发现$2\beta\beta+(\alpha\gamma+\gamma\alpha)$和$\alpha\gamma+\gamma\alpha-\beta\beta$是本征矢.

归一化后，这些本征矢就是耦合表象下的9个基矢，他们被表示成非耦合表象基矢的叠加。证毕！

为了清楚一些，作为例子

$$\begin{aligned} |2,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}}|1-1\rangle|1,1\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}|1,0\rangle|1,0\rangle+\frac{1}{\sqrt{6}}|1,1\rangle|1,-1\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}}\gamma\alpha+\sqrt{\frac{2}{3}}\beta\beta+\frac{1}{\sqrt{6}}\alpha\gamma \end{aligned}$$

就是我们找到的本征矢：(15)中取"+"。

5. 两个粒子在谐振子势中。（1）忽略相互作用。写出系统的基态与第一基发态波函数和能量。（2）假设相互作用为$a\delta(x_1-x_2)$, 计算基态和第一基态发能量。以上分可分辨，全同玻色(无自旋)和全同费米（自旋1/2）三种情况讨论。（微扰计算到一级）。

解：单粒子能级和波函数(空间部分)为

$$\begin{aligned} \psi_n &= N_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}H_n(\alpha x) \\ E_n &= (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \\ \alpha &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}},\ n=0,1,2,\cdots \end{aligned}$$

(1) <u>粒子为可分辨粒子</u>

基态波函数和能级为

$$\begin{aligned} \Psi_0 &= \psi_0(1)\psi_0(2) \\ E_0 &= E_0(1)+E_0(2)=\hbar\omega \end{aligned}$$

第一激发态波函数和能级为

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= \psi_0(1)\psi_1(2)\\ E_1 &= E_0(1)+E_1(2)=2\hbar\omega\\ \Psi_1' &= \psi_1(1)\psi_0(2)\\ E_1' &= E_1(1)+E_0(2)=2\hbar\omega\end{aligned}$$

粒子为玻色子
基态波函数和能级为

$$\begin{aligned}\Psi_0 &= \psi_0(1)\psi_0(2)\\ E_0 &= E_0(1)+E_0(2)=\hbar\omega\end{aligned}$$

第一激发态波函数和能级为

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(1)\psi_1(2)+\psi_1(1)\psi_0(2))\\ E_1 &= E_0+E_1=2\hbar\omega\end{aligned}$$

粒子为费米子
基态波函数和能级为

$$\begin{aligned}\Psi_0 &= \psi_0(1)\psi_0(2)\chi_{00}\\ E_0 &= E_0(1)+E_0(2)=\hbar\omega\end{aligned}$$

费米的第一激发态波函数较为复杂，但总是遵循波函数反对称的原则。这就涉及到对空间波函数和自旋波函数的分类讨论。如果空间波函数是对称的，那么自旋波函数必然是反对称的；如果自旋波函数是对称的，那么空间波函数必然是反对称的。因此第一激发态波函数和能级为和能级为

$$\begin{aligned}\Psi_1 &= \begin{cases}\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(1)\psi_1(2)+\psi_1(1)\psi_0(2))\chi_{00}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(1)\psi_1(2)-\psi_1(1)\psi_0(2))\chi_{11}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(1)\psi_1(2)-\psi_1(1)\psi_0(2))\chi_{10}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0(1)\psi_1(2)-\psi_1(1)\psi_0(2))\chi_{1-1}\end{cases}\\ E_1 &= E_0+E_1=2\hbar\omega\end{aligned}$$

(2)因为三种情况下，基态均不简并所以基态能级的一级近似能量为

$$\begin{aligned}E_1^{(1)} &= \langle H'\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\psi_0^2(x_1)\psi_0^2(x_2)a\delta(x_1-x_2)=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\psi_0^4(x_1)=\frac{a\alpha}{\sqrt{2\pi}}\\ E_1 &= \hbar\omega+\frac{a\alpha}{\sqrt{2\pi}}\end{aligned}$$

对于第一激发态，如果粒子为可分辨粒子，第一激发态二度简并。因为H'矩阵元计算得到均为$\frac{a\alpha}{2\sqrt{2\pi}}$，解其久期方程得到劈裂能级

$$E_1 = \begin{cases}2\hbar\omega+\frac{a\alpha}{\sqrt{2\pi}}\\ 2\hbar\omega\end{cases}$$

如果粒子为玻色子，自旋波函数也不简并(我们只讨论自旋为0的情况)，则第一激发态能级为

$$E_1 = 2\hbar\omega + \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x_1 \mathrm{d}x_2 \frac{1}{2}(\psi_0(x_1)\psi_1(x_2) + \psi_1(x_1)\psi_0(x_2))^2 a\delta(x_1 - x_2) = 2\hbar\omega + \frac{a\alpha}{\sqrt{2\pi}}$$

如果粒子为费米子，能级4重简并。因为自旋波函数正交，H'的非对角元为0, 对角元即为一级修正. 本征态不变，对称波函数（空间部分）对应能级为

$$E_1 = 2\hbar\omega + \frac{a\alpha}{\sqrt{2\pi}}$$

空间波函数反对称的3个态能级不变.

6. 证明:

$$\sigma_x(1)\sigma_x(2)\sigma_z(1)\sigma_z(2) = \sigma_x(1)\sigma_z(1) \otimes \sigma_x(2)\sigma_z(2) = -i\sigma_y(1) \otimes (-i\sigma_y(2)) \tag{17}$$

$$\sigma_z(1)\sigma_z(2)\sigma_x(1)\sigma_x(2) = \sigma_z(1)\sigma_x(1) \otimes \sigma_z(2)\sigma_x(2) = i\sigma_y(1) \otimes i\sigma_y(2) \tag{18}$$

7 某个能级有Ω个简并态，N个无相互作用粒子占据($\Omega > N$)，分可分辨，全同玻色，全同费米三种情况讨论有多少种占据方式。

解：如果粒子可分辨，每个粒子都有Ω种占据方式，故共有ω^N种占据方式。

如果粒子为玻色子，其占据方式方式等同于用$\Omega - 1$个隔板将N个粒子分开，隔开的粒子分别占据一个态。其组合数$C_{N+\Omega-1}^{\Omega-1}$

如果粒子为费米子，其占据方式方式等同于在Ω位置上选择N个占据，其组合数C_{Ω}^{N}