量子力学 B
2021 秋季学期
作业 10 *(截止期: 12 月 15 号周三课上)*

1. 电子磁矩算符可以表示为 $\hat{\vec{\mu}} = -\dfrac{e}{2mc}(\hat{\vec{\ell}} + 2\hat{\vec{s}})$，其中 m 为电子质量，c 为光速，e 为电子电荷，$\hat{\vec{\ell}}$ 和 $\hat{\vec{s}}$ 分别为电子轨道角动量和自旋。求 $\langle \ell s j m_j | \hat{\mu}_z | \ell s j m_j \rangle$

在 $m_j = j$

时的可能取值。其中 $| \ell s j m_j \rangle$ 为 $(\hat{\vec{\ell}}^2, \hat{\vec{s}}^2, \hat{\vec{j}}^2, \hat{j}_z)$ 的共同本征态，$\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{\ell}} + \hat{\vec{s}}$。

2. 写出氦原子基态 $(1s)^2$ 及电子激发态 (1s2p) 所有可能的光谱项 ($^{2S+1}L_J$) 及相应电子自旋态。

3. 如 $\hat{\vec{s}}_1$ 和 $\hat{\vec{s}}_2$ 分别为电子 1 和电子 2 的自旋算符:

a. 求 $\hat{\vec{s}}_1 \cdot \hat{\vec{s}}_2$ 的本征值。

b. 如两电子的自旋在 t=0 时刻处于 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 态, 体系哈密顿量为 $H = \frac{A}{\hbar}\hat{\vec{s}}_1 \cdot \hat{\vec{s}}_2$, 请写出电子自旋在 t 时刻的状态（$A$ 为常数)。

c. 在上一问中的 t 时刻测量到电子处于 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 态和 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 态的几率各为多少？

4. 考虑 $l = 1$ 的轨道角动量与 $s = \frac{1}{2}$ 的自旋耦合: $\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{l}} + \hat{\vec{s}}$。$|j, m_j\rangle$ 为力学量完全集 $\{\hat{\vec{l}}^2, \hat{\vec{s}}^2, \hat{\vec{j}}^2, \hat{j}_z\}$ 的共同本征态。试在 $j = 3/2$ 的子空间内，以耦合表象为基，写出 $\hat{s}_x$ 的矩阵表示。

$\hat{\vec{J}} + \hat{\vec{S}}$

1. 电子磁矩算符可以表示为 $\hat{\mu} = -\frac{e}{2mc}(\hat{\ell} + 2\hat{s})$，其中 m 为电子质量，c 为光速，e 为电子电荷，$\hat{\ell}$ 和 $\hat{s}$ 分别为电子轨道角动量和自旋。求 $\langle \ell s j m_j | \hat{\mu}_z | \ell s j m_j \rangle$ 在 $m_j = j$

时的可能取值。其中 $|\ell s j m_j\rangle$ 为 $(\hat{\ell}^2, \hat{s}^2, \hat{j}^2, \hat{j}_z)$ 的共同本征态，$\hat{j} = \hat{\ell} + \hat{s}$。

解：利用结论

$$|j_1 \tfrac{1}{2} j m_j\rangle = \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}}\,|j_1 m_j+\tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}}\,|j_1 m_j-\tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}\, \tfrac{1}{2}\rangle$$

for $j = j_1 + \frac{1}{2}$

与

$$|j_1 \tfrac{1}{2} j m_j\rangle = \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2j+2}}\,|j_1, m_j+\tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{j-m_j+1}{2j+2}}\,|j_1, m_j-\tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}\, \tfrac{1}{2}\rangle$$

for $j = j_1 - \frac{1}{2}$

得到

$j = l + \frac{1}{2}$ 时

$$\langle l s j m_j | \hat{l}_z | l s j m_j\rangle = \frac{j-m_j}{2j}(m_j+\tfrac{1}{2})\hbar + \frac{j+m_j}{2j}(m_j-\tfrac{1}{2})\hbar$$

$$= \frac{2j-1}{2j} m_j \hbar$$

$$\langle l s j m_j | \hat{S}_z | l s j m_j\rangle = \frac{j-m_j}{2j}(-\tfrac{1}{2}\hbar) + \frac{j+m_j}{2j}(\tfrac{1}{2})\hbar = \frac{m_j}{2j}\hbar$$

$j = l - \frac{1}{2}$ 时

$$\langle l s j m_j | \hat{l}_z | l s j m_j\rangle = \frac{j+m_j+1}{2j+1}(m_j+\tfrac{1}{2})\hbar + \frac{j-m_j+1}{2j+2}(m_j-\tfrac{1}{2})\hbar$$

$$= m_j\hbar + \frac{m_j}{2j+2}\hbar$$

$$\langle l s j m_j | \hat{S}_z | l s j m_j\rangle = \frac{j+m_j+1}{2j+2}(-\tfrac{1}{2})\hbar + \frac{j-m_j+1}{2j+2}(\tfrac{1}{2})\hbar = -\frac{m_j}{2j+2}\hbar$$

$m_j = j$ 时，$\langle \hat{l}_z\rangle = \frac{2j-1}{2}\hbar$，$\langle \hat{S}_z\rangle = \frac{1}{2}\hbar$

$\langle \hat{l}_z\rangle + 2\langle \hat{S}_z\rangle = \frac{2j+1}{2}\hbar$ for $j = l + \frac{1}{2}$；

$\langle \hat{l}_z\rangle = \frac{2j+3}{2j+2} j\hbar$　$\langle \hat{S}_z\rangle = -\frac{j}{2j+2}\hbar$

$\langle \hat{l}_z\rangle + 2\langle \hat{S}_z\rangle = (2j^2+j)\hbar / 2j+2$ for $j = l - \frac{1}{2}$

则 $\langle \hat{\mu}_z \rangle_{jm_j}$ 的可能取值为

$-\frac{e}{2mc}(j+\frac{1}{2})\hbar$， $j=l+\frac{1}{2}$ 或

$-\frac{e}{2mc}\frac{(2j^2+j)\hbar}{2j+2}$， $j=l-\frac{1}{2}$

2. 写出氦原子基态 $(1s)^2$ 及电子激发态 (1s2p) 所有可能的光谱项 ($^{2S+1}L_J$) 及相应电子自旋态。

解：(1) 1S1S： $L=0 \quad S=0 \Rightarrow J=0$. 光谱项 $^1S_0$

电子自旋态： $\frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)$

(2) 1S2p： $L=1 \quad S=0\ 1$.

① $L=1 \quad S=0$ 时

$J=1$ 光谱项为 $^1P_1$

电子自旋态： $\frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)$

② $L=1 \quad S=1$ 时

$J=0, 1, 2$. 光谱项分别为 $^3P_0$ $^3P_1$ $^3P_2$

电子自旋态： $|\uparrow\uparrow\rangle$， $m_s=1$

$\frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$， $m_s=0$

$|\downarrow\downarrow\rangle$， $m_s=-1$

3. 如 $\hat{\vec{s}}_1$ 和 $\hat{\vec{s}}_2$ 分别为电子 1 和电子 2 的自旋算符：

a. 求 $\hat{\vec{s}}_1\cdot\hat{\vec{s}}_2$ 的本征值。

b. 如两电子的自旋在 t=0 时刻处于 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 态，体系哈密顿量为 $H=\frac{A}{\hbar}\hat{\vec{s}}_1\cdot\hat{\vec{s}}_2$，请写出电子自旋在 t 时刻的状态（$A$ 为常数）。

c. 在上一问中的 t 时刻测量到电子处于 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 态和 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 态的几率各为多少？

解：

a. 令 $\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2$

则 $\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + 2\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$

$\Rightarrow \hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2}(\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2)$

而 $\hat{S}_1^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \hat{I} = \hat{S}_2^2$

所以 $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2 = \frac{1}{2}\hat{S}^2 - \frac{3}{4}\hbar^2 \hat{I}$

我们能得到 $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ 与 $\hat{S}^2$ 有相同的本征态

$\hat{S}^2$ 的本征态为 $|0,0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$, $|1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$,

$|1,0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$, $|1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle$, 本征值分别为

0, 2, 2, 2 则 $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ 对应上面本征态的本征值分别为

$-\frac{3}{4}\hbar^2$, $\frac{1}{4}\hbar^2$, $\frac{1}{4}\hbar^2$, $\frac{1}{4}\hbar^2$

即 $\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2$ 的本征值为 $-\frac{3}{4}\hbar^2$, $\frac{1}{4}\hbar^2$

b. $|\uparrow\downarrow\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}(|0,0\rangle + |1,0\rangle)$

则 $|\psi(t)\rangle = e^{\frac{-i\hat{H}t}{\hbar}} |\uparrow\downarrow\rangle$

$$= \frac{\sqrt{2}}{2} e^{\frac{-iAt}{\hbar^2}\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2} (|0,0\rangle + |1,0\rangle)$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{2}\left(e^{\frac{3}{4}iAt}|0,0\rangle + e^{-\frac{1}{4}iAt}|1,0\rangle\right)$$

c. $|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}\left[e^{\frac{3}{4}iAt}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) + e^{-\frac{1}{4}iAt}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)\right]$

$$= \frac{1}{2}\left(e^{\frac{3}{4}iAt} + e^{-\frac{1}{4}iAt}\right)|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2}\left(e^{-\frac{1}{4}iAt} - e^{\frac{3}{4}iAt}\right)|\downarrow\uparrow\rangle$$

即测到 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 态的几率为 $\frac{1}{4}\left(e^{\frac{3}{4}iAt} + e^{-\frac{1}{4}iAt}\right)\left(e^{-\frac{3}{4}iAt} + e^{\frac{1}{4}iAt}\right)$

$$= \frac{1}{4}(2 + e^{iAt} + e^{-iAt})$$

$$= \frac{1}{2}(1 + \cos At)$$

测到 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 的几率为 0.（否则角动量不守恒）

4. 考虑$l=1$的轨道角动量与$s=\frac{1}{2}$的自旋耦合：$\hat{\vec{j}}=\hat{\vec{l}}+\hat{\vec{s}}$。$|j,m_j\rangle$为力学量完全集$\{\hat{\vec{l}}^2,\hat{\vec{s}}^2,\hat{\vec{j}}^2,\hat{j}_z\}$的共同本征态。试在$j=3/2$的子空间内，以耦合表象为基，写出$\hat{s}_x$的矩阵表示。

如 $j=j_1+\frac{1}{2}$

$$\begin{cases}\sqrt{j_1+m+\frac{1}{2}}\,C_{-\frac{1}{2}}=\sqrt{j_1-m+\frac{1}{2}}\,C_{\frac{1}{2}}\\ C_{-\frac{1}{2}}^2+C_{\frac{1}{2}}^2=1\end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix}C_{-\frac{1}{2}}\\ C_{\frac{1}{2}}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2j_1+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{j_1-m+\frac{1}{2}}\\ \sqrt{j_1+m+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2j}}\begin{pmatrix}\sqrt{j-m}\\ \sqrt{j+m}\end{pmatrix}$$

即：

$$|j_1,\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},j,m\rangle=\sqrt{\frac{j-m}{2j}}\,|j_1,\overset{m_1}{m+\tfrac{1}{2}};\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},\overset{m_2}{-\tfrac{1}{2}}\rangle+\sqrt{\frac{j+m}{2j}}\,|j_1,\overset{m_1}{m-\tfrac{1}{2}};\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},\overset{m_2}{\tfrac{1}{2}}\rangle$$

如 $j=j_1-\frac{1}{2}$ 考试会给

$$\begin{cases}\sqrt{j_1-m+\frac{1}{2}}\,C_{-\frac{1}{2}}=-\sqrt{j_1+m+\frac{1}{2}}\,C_{\frac{1}{2}}\\ C_{\frac{1}{2}}^2+C_{-\frac{1}{2}}^2=1\end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix}C_{-\frac{1}{2}}\\ C_{\frac{1}{2}}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2j_1+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{j_1+m+\frac{1}{2}}\\ -\sqrt{j_1-m+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2j+2}}\begin{pmatrix}\sqrt{j+m+1}\\ -\sqrt{j-m+1}\end{pmatrix}$$

即：

$$|j_1,\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},j,m\rangle=\sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}}\,|j_1,\overset{m_1}{m+\tfrac{1}{2}};\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},\overset{m_2}{-\tfrac{1}{2}}\rangle-\sqrt{\frac{j-m+1}{2j+2}}\,|j_1,\overset{m_1}{m-\tfrac{1}{2}};\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},\overset{m_2}{\tfrac{1}{2}}\rangle$$

解：$|j,m_j\rangle \qquad |l_z,S_z\rangle$

$$|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\rangle=|1,\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|1,-\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|0,\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|0,-\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|-1,\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\rangle=|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|1,-\tfrac{1}{2}\rangle-\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|0,\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|0,-\tfrac{1}{2}\rangle-\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|-1,\tfrac{1}{2}\rangle$$

则

$$\begin{pmatrix}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle\\ |\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle\\ |\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle\\ |\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle\\ |\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle\\ |\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0 & -\sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}}\\ -\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}}\\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}|-1,\frac{1}{2}\rangle\\ |0,\frac{1}{2}\rangle\\ |1,\frac{1}{2}\rangle\\ |-1,-\frac{1}{2}\rangle\\ |0,-\frac{1}{2}\rangle\\ |1,-\frac{1}{2}\rangle\end{pmatrix}$$

即 $|j,m_j\rangle = S\,|l_z,S_z\rangle$

在$\{|l_z,S_z\rangle\}$表象下 $\hat{S}_x$ 对应矩阵为

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & I\\ I & 0\end{pmatrix}\hat{=}S_x$$

则在 $|j, m_j\rangle$ 表象下的矩阵为

$$S S_x S^{+} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{3} & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 \\ -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & \frac{2}{3} & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \\ 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}$$

则在 $\{|\frac{3}{2}, m_j\rangle\}$ 下 S_x 表示为

$$\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{2}{3} & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}$$

量子力学 B
2021 秋季学期
作业 10 *(截止期: 12 月 15 号周三课上)*

1. 电子磁矩算符可以表示为 $\hat{\vec{\mu}} = -\frac{e}{2mc}(\hat{\vec{\ell}} + 2\hat{\vec{s}})$，其中 m 为电子质量，c 为光速，e 为电子电荷，$\hat{\vec{\ell}}$ 和 $\hat{\vec{s}}$ 分别为电子轨道角动量和自旋。求 $\left\langle \ell s j m_j \left| \hat{\mu}_z \right| \ell s j m_j \right\rangle$ 在 $m_j = j$

时的可能取值。其中 $\left| \ell s j m_j \right\rangle$ 为 $(\hat{\vec{\ell}}^2, \hat{\vec{s}}^2, \hat{\vec{j}}^2, \hat{j}_z)$ 的共同本征态， $\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{\ell}} + \hat{\vec{s}}$ 。

2. 写出氦原子基态 $(1s)^2$ 及电子激发态 (1s2p) 所有可能的光谱项 $({}^{2S+1}L_J)$ 及相应电子自旋态。

3. 如 $\hat{\vec{s}}_1$ 和 $\hat{\vec{s}}_2$ 分别为电子 1 和电子 2 的自旋算符:

a. 求 $\hat{\vec{s}}_1 \cdot \hat{\vec{s}}_2$ 的本征值。

b. 如两电子的自旋在 t=0 时刻处于 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 态, 体系哈密顿量为 $H = \frac{A}{\hbar}\hat{\vec{s}}_1 \cdot \hat{\vec{s}}_2$, 请写出电子自旋在 t 时刻的状态（$A$ 为常数）。

c. 在上一问中的 t 时刻测量到电子处于 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 态和 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 态的几率各为多少？

4. 考虑 $l = 1$ 的轨道角动量与 $s = \frac{1}{2}$ 的自旋耦合：$\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{l}} + \hat{\vec{s}}$。$|j, m_j\rangle$ 为力学量完全集 $\{\hat{\vec{l}}^2, \hat{\vec{s}}^2, \hat{\vec{j}}^2, \hat{j}_z\}$ 的共同本征态。试在 $j = 3/2$ 的子空间内，以耦合表象为基，写出 $\hat{s}_x$ 的矩阵表示。

1. 电子磁矩算符可以表示为 $\hat{\vec{\mu}} = -\frac{e}{2mc}(\hat{\vec{\ell}} + 2\hat{\vec{s}})$，其中 m 为电子质量，c 为光速，e 为电子电荷，$\hat{\vec{\ell}}$ 和 $\hat{\vec{s}}$ 分别为电子轨道角动量和自旋。求 $\langle \ell s j m_j | \hat{\mu}_z | \ell s j m_j \rangle$

在 $m_j = j$

时的可能取值。其中 $|\ell s j m_j\rangle$ 为 $(\hat{\vec{\ell}}^2, \hat{\vec{s}}^2, \hat{\vec{j}}^2, \hat{j}_z)$ 的共同本征态，$\hat{\vec{j}} = \hat{\vec{\ell}} + \hat{\vec{s}}$。

解：利用结论

$$|j_1 \tfrac{1}{2} j m_j\rangle = \sqrt{\frac{j-m_j}{2j}}\, |j_1 m_j+\tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}\, -\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{j+m_j}{2j}}\, |j_1 m_j-\tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}\, \tfrac{1}{2}\rangle$$
for $j = j_1 + \frac{1}{2}$

与

$$|j_1 \tfrac{1}{2} j m_j\rangle = \sqrt{\frac{j+m_j+1}{2j+2}}\, |j_1, m_j+\tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{j-m_j+1}{2j+2}}\, |j_1, m_j-\tfrac{1}{2}; \tfrac{1}{2}\, \tfrac{1}{2}\rangle$$
for $j = j_1 - \frac{1}{2}$

得到

$j = l + \frac{1}{2}$ 时

$$\langle l s j m_j | \hat{l}_z | l s j m_j \rangle = \frac{j-m_j}{2j}(m_j+\tfrac{1}{2})\hbar + \frac{j+m_j}{2j}(m_j-\tfrac{1}{2})\hbar$$
$$= \frac{2j-1}{2j} m_j \hbar$$

$$\langle l s j m_j | \hat{S}_z | l s j m_j \rangle = \frac{j-m_j}{2j}(-\tfrac{1}{2}\hbar) + \frac{j+m_j}{2j}(\tfrac{1}{2})\hbar = \frac{m_j}{2j}\hbar$$

$j = l - \frac{1}{2}$ 时

$$\langle l s j m_j | \hat{l}_z | l s j m_j \rangle = \frac{j+m_j+1}{2j+1}(m_j+\tfrac{1}{2})\hbar + \frac{j-m_j+1}{2j+2}(m_j-\tfrac{1}{2})\hbar$$
$$= m_j\hbar + \frac{m_j}{2j+2}\hbar$$

$$\langle l s j m_j | \hat{S}_z | l s j m_j \rangle = \frac{j+m_j+1}{2j+2}(-\tfrac{1}{2})\hbar + \frac{j-m_j+1}{2j+2}(\tfrac{1}{2})\hbar = -\frac{m_j}{2j+2}\hbar$$

$m_j = j$ 时，$\langle \hat{l}_z \rangle = \frac{2j-1}{2}\hbar$，$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{1}{2}\hbar$

$$\langle \hat{l}_z \rangle + 2\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{2j+1}{2}\hbar \quad \text{for } j = l + \tfrac{1}{2};$$

$$\langle \hat{l}_z \rangle = \frac{2j+3}{2j+2} j\hbar \quad \langle \hat{S}_z \rangle = -\frac{j}{2j+2}\hbar$$

$$\langle \hat{l}_z \rangle + 2\langle \hat{S}_z \rangle = (2j^2+j)\hbar / 2j+2 \quad \text{for } j = l - \tfrac{1}{2}$$

则 $\langle \hat{\mu}_z \rangle_{jm_j}$ 的可能取值为

$-\frac{e}{2mc}(j+\frac{1}{2})\hbar$, $j=l+\frac{1}{2}$ 或

$-\frac{e}{2mc}\frac{(2j^2+j)\hbar}{2j+2}$, $j=l-\frac{1}{2}$

2. 写出氦原子基态 $(1s)^2$ 及电子激发态 $(1s2p)$ 所有可能的光谱项 $(^{2S+1}L_J)$ 及相应电子自旋态。

Pauli principle $\Rightarrow S\neq 1$

解: (1) 1S1S: $L=0$ $S=0 \Rightarrow J=0$. 光谱项 $^1S_0$

电子自旋态: $\frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$

(2) 1S2p: $L=1$ $S=0$ 1.

① $L=1$ $S=0$ 时

$J=1$ 光谱项为 $^1P_1$

电子自旋态: $\frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$

② $L=1$ $S=1$ 时

$J=0, 1, 2$. 光谱项分别为 $^3P_0$ $^3P_1$ $^3P_2$

电子自旋态: $|\uparrow\uparrow\rangle$, $m_s=1$

$\frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$, $m_s=0$

$|\downarrow\downarrow\rangle$, $m_s=-1$

3. 如$\hat{\vec{s}}_1$和$\hat{\vec{s}}_2$分别为电子 1 和电子 2 的自旋算符:

a. 求$\hat{\vec{s}}_1 \cdot \hat{\vec{s}}_2$的本征值。

b. 如两电子的自旋在 t=0 时刻处于$|\uparrow\downarrow\rangle$态, 体系哈密顿量为$H=\frac{A}{\hbar}\hat{\vec{s}}_1 \cdot \hat{\vec{s}}_2$, 请写出电子自旋在 t 时刻的状态（$A$为常数）。

c. 在上一问中的 t 时刻测量到电子处于$|\uparrow\downarrow\rangle$态和$|\uparrow\uparrow\rangle$态的几率各为多少?

解:

a. 令 $\hat{S}=\hat{S}_1+\hat{S}_2$

则 $\hat{S}^2=\hat{S}_1^2+\hat{S}_2^2+2\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2$

$\Rightarrow \hat{S}_1\cdot\hat{S}_2=\frac{1}{2}(\hat{S}^2-\hat{S}_1^2-\hat{S}_2^2)$

而 $\hat{S}_1^2=\frac{3}{4}\hbar^2\hat{I}=\hat{S}_2^2$

所以 $\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2=\frac{1}{2}\hat{S}^2-\frac{3}{4}\hbar^2\hat{I}$

我们能得到 $\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2$ 与 $\hat{S}^2$ 有相同的本征态

$\hat{S}^2$ 的本征态为 $|0,0\rangle=\frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)$, $|1,1\rangle=|\uparrow\uparrow\rangle$,

$|1,0\rangle=\frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)$, $|1,-1\rangle=|\downarrow\downarrow\rangle$, 本征值分别为

$0, 2, 2, 2$ 则 $\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2$ 对应上面本征态的本征值分别为

$-\frac{3}{4}\hbar^2, \frac{1}{4}\hbar^2, \frac{1}{4}\hbar^2, \frac{1}{4}\hbar^2$

即 $\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2$ 的本征值为 $-\frac{3}{4}\hbar^2$, $\frac{1}{4}\hbar^2$

b. $|\uparrow\downarrow\rangle=\frac{\sqrt{2}}{2}(|0,0\rangle+|1,0\rangle)$

则 $|\psi(t)\rangle=e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}}|\uparrow\downarrow\rangle$

$$=\frac{\sqrt{2}}{2}e^{-\frac{iAt}{\hbar^2}\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2}(|0,0\rangle+|1,0\rangle)$$

$$=\frac{\sqrt{2}}{2}\left(e^{\frac{3}{4}iAt}|0,0\rangle+e^{-\frac{1}{4}iAt}|1,0\rangle\right)$$

c. $|\psi(t)\rangle=\frac{1}{2}\left[e^{\frac{3}{4}iAt}(|\uparrow\downarrow\rangle-|\downarrow\uparrow\rangle)+e^{-\frac{1}{4}iAt}(|\uparrow\downarrow\rangle+|\downarrow\uparrow\rangle)\right]$

$$=\frac{1}{2}(e^{\frac{3}{4}iAt}+e^{-\frac{1}{4}iAt})|\uparrow\downarrow\rangle+\frac{1}{2}(e^{-\frac{1}{4}iAt}-e^{\frac{3}{4}iAt})|\downarrow\uparrow\rangle$$

即测到 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 态的几率为 $\frac{1}{4}(e^{\frac{3}{4}iAt}+e^{-\frac{1}{4}iAt})(e^{-\frac{3}{4}iAt}+e^{\frac{1}{4}iAt})$

$$=\frac{1}{4}(2+e^{iAt}+e^{-iAt})$$

$$=\frac{1}{2}(1+\cos At)$$

测到 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 的几率为 0.(否则角动量不守恒)

4. 考虑$l=1$的轨道角动量与$s=\frac{1}{2}$的自旋耦合：$\hat{\vec{j}}=\hat{\vec{l}}+\hat{\vec{s}}$。$|j,m_j\rangle$为力学量完全集$\{\hat{\vec{l}}^2,\hat{\vec{s}}^2,\hat{\vec{j}}^2,\hat{j}_z\}$的共同本征态。试在$j=3/2$的子空间内，以耦合表象为基，写出$\hat{s}_x$的矩阵表示。

解：$|j,m_j\rangle \qquad |l_z,s_z\rangle$

$$|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\rangle=|1,\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|1,-\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|0,\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|0,-\tfrac{1}{2}\rangle+\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|-1,\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\rangle=|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|1,-\tfrac{1}{2}\rangle-\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|0,\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|0,-\tfrac{1}{2}\rangle-\sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|-1,\tfrac{1}{2}\rangle$$

如 $j=j_1+\frac{1}{2}$

$$\begin{cases}\sqrt{j_1+m+\frac{1}{2}}\,C_{-\frac{1}{2}}=\sqrt{j_1-m+\frac{1}{2}}\,C_{\frac{1}{2}}\\ C_{-\frac{1}{2}}^2+C_{\frac{1}{2}}^2=1\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{pmatrix}C_{-\frac{1}{2}}\\C_{\frac{1}{2}}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2j_1+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{j_1-m+\frac{1}{2}}\\\sqrt{j_1+m+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2j}}\begin{pmatrix}\sqrt{j-m}\\\sqrt{j+m}\end{pmatrix}$$

即：

$$|j_1,\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},j,m\rangle=\sqrt{\frac{j-m}{2j}}\,|j_1,\overset{m_1}{m+\tfrac{1}{2}};\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},\overset{m_2}{-\tfrac{1}{2}}\rangle+\sqrt{\frac{j+m}{2j}}\,|j_1,\overset{m_1}{m-\tfrac{1}{2}};\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},\overset{m_2}{\tfrac{1}{2}}\rangle$$

考试会给.

如 $j=j_1-\frac{1}{2}$

$$\begin{cases}\sqrt{j_1-m+\frac{1}{2}}\,C_{-\frac{1}{2}}=-\sqrt{j_1+m+\frac{1}{2}}\,C_{\frac{1}{2}}\\ C_{\frac{1}{2}}^2+C_{-\frac{1}{2}}^2=1\end{cases}$$

$$\Rightarrow\begin{pmatrix}C_{-\frac{1}{2}}\\C_{\frac{1}{2}}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2j_1+1}}\begin{pmatrix}\sqrt{j_1+m+\frac{1}{2}}\\-\sqrt{j_1-m+\frac{1}{2}}\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2j+2}}\begin{pmatrix}\sqrt{j+m+1}\\-\sqrt{j-m+1}\end{pmatrix}$$

即：

$$|j_1,\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},j,m\rangle=\sqrt{\frac{j+m+1}{2j+2}}\,|j_1,\overset{m_1}{m+\tfrac{1}{2}};\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},\overset{m_2}{-\tfrac{1}{2}}\rangle-\sqrt{\frac{j-m+1}{2j+2}}\,|j_1,\overset{m_1}{m-\tfrac{1}{2}};\overset{j_2}{\tfrac{1}{2}},\overset{m_2}{\tfrac{1}{2}}\rangle$$

则

$$\begin{pmatrix}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\\|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle\\|\tfrac{3}{2},\tfrac{3}{2}\rangle\\|\tfrac{3}{2},\tfrac{1}{2}\rangle\\|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle\\|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}\rangle\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&-\sqrt{\tfrac{1}{3}}&0&0&0&\sqrt{\tfrac{2}{3}}\\-\sqrt{\tfrac{2}{3}}&0&0&0&\sqrt{\tfrac{1}{3}}&0\\0&0&1&0&0&0\\0&\sqrt{\tfrac{2}{3}}&0&0&0&\sqrt{\tfrac{1}{3}}\\\sqrt{\tfrac{1}{3}}&0&0&0&\sqrt{\tfrac{2}{3}}&0\\0&0&0&1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}|-1,\tfrac{1}{2}\rangle\\|0,\tfrac{1}{2}\rangle\\|1,\tfrac{1}{2}\rangle\\|-1,-\tfrac{1}{2}\rangle\\|0,-\tfrac{1}{2}\rangle\\|1,-\tfrac{1}{2}\rangle\end{pmatrix}$$

即 $|j,m_j\rangle=S\,|l_z,s_z\rangle$

在$\{|l_z,s_z\rangle\}$表象下 $\hat{S}_x$对应矩阵为

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&I\\I&0\end{pmatrix}\doteq S_x \longleftarrow$$

$$\hat{S}_x=\frac{1}{2}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)$$

$$\langle s\,m_z|\hat{S}_x|s'\,m_z'\rangle$$

$$=\frac{\hbar}{2}\sqrt{s'(s'+1)-m_z'(m_z'+1)}\;\delta_{s's}\,\delta_{m_z'+1,m_z}$$

$$+\frac{\hbar}{2}\sqrt{s'(s'+1)-m_z'(m_z'-1)}\;\delta_{s's}\,\delta_{m_z'-1,m_z}$$

则在 $|j, m_j\rangle$ 表象下的矩阵为

$$
S S_x S^{+} = \begin{pmatrix}
0 & -\frac{1}{3} & \sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 \\
-\frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} \\
\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 \\
0 & \frac{\sqrt{2}}{3} & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\
-\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & \frac{2}{3} & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \\
0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} & 0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0
\end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}
$$

则在 $\{|\frac{3}{2}, m_j\rangle\}$ 下 S_x 表示为

$$
\begin{pmatrix}
0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & 0 \\
\sqrt{\frac{1}{3}} & 0 & \frac{2}{3} & 0 \\
0 & \frac{2}{3} & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} \\
0 & 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & 0
\end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}
$$