第二章 习题（1）

1. （选做）证明 Slater 行列式波函数具有幺正变换不变性：即对构成 Slater 行列式波函数$|\Phi\rangle = |\chi_1\chi_2\cdots\chi_N\rangle$的单电子轨道做幺正变换，

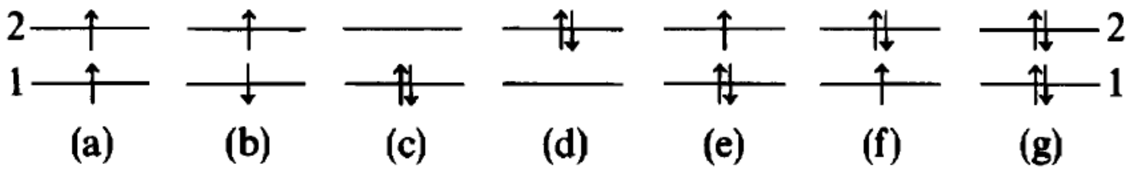
   $\chi_i'(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{N} U_{ji}\chi_j(\mathbf{x})$，则有$|\Phi'\rangle \equiv \det(\mathbf{U})|\chi_1'\chi_2'\cdots\chi_N'\rangle = |\Phi\rangle$。

2. 基于 Slater-Condon 规则，写出如下 Slater 行列式波函数之间的矩阵元表达式：$\langle\Phi_a^r|\hat{H}|\Phi_0\rangle$，$\langle\Phi_{ab}^{rs}|\hat{H}|\Phi_0\rangle$，$\langle\Phi_a^r|\hat{H}|\Phi_b^s\rangle$。

3. 从电子自旋算符的基本对易关系出发，证明$\hat{s}_+|\alpha\rangle = 0$，$\hat{s}_+|\beta\rangle = |\alpha\rangle$，$\hat{s}_-|\beta\rangle = 0$和$\hat{s}_-|\alpha\rangle = |\beta\rangle$。

4. 以电子自旋本征态$|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$为基矢，写出$\hat{s}^2$，$\hat{s}_\pm$，$\hat{s}_x$，$\hat{s}_y$和$\hat{s}_z$ 的矩阵表示。

5. 写出对应于如下占据构型的能量期望值表达式。



6. 设两电子体系(N=2)波函数的自旋部分可写为

$$\Psi(s_1,s_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(s_1)\beta(s_2) + \beta(s_1)\alpha(s_2)]$$

证明这对应 S=1, M_s=0 的自旋本征态。

7. （选做）证明交换积分 $K_{ij} \equiv \int\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \psi_i^*(\mathbf{r}_1)\psi_j^*(\mathbf{r}_2) r_{12}^{-1}\psi_j(\mathbf{r}_1)\psi_i(\mathbf{r}_2) \geq 0$。

8. （选做）根据产生和湮灭算符作用于占据数矢量的定义

$$\hat{a}_i^\dagger|k_1k_2\cdots\cdots k_i\cdots\cdots\rangle = \delta_{k_i,0}\prod_{j=1}^{i-1}(-1)^{k_j}|k_1k_2\cdots\cdots(k_i+1)\cdots\cdots\rangle$$

$$\hat{a}_i|k_1k_2\cdots\cdots k_i\cdots\cdots\rangle = \delta_{k_i,1}\prod_{j=1}^{i-1}(-1)^{k_j}|k_1k_2\cdots\cdots(k_i-1)\cdots\cdots\rangle$$

推导它们之间的反对易关系：

$$\left\{\hat{a}_i, \hat{a}_j\right\} = 0, \quad \left\{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\right\} = 0, \quad \left\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\right\} = \delta_{ij}$$