第一讲

主要参考书: J. J. Sakurai　　Date 2022.

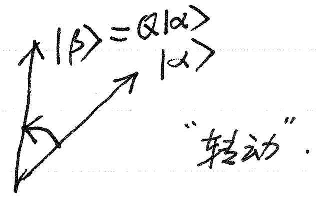
量子力学基本原理回顾.

1. Hilbert space: 状态由矢量 $|\alpha\rangle$ 表示, 对偶空间: $\langle\alpha|$
　　右矢(ket)　　左矢(bra)

约定: $|\alpha\rangle$ 与 $c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c$ 表示同一个物理状态. c 为复数.

- 维度: $|\alpha\rangle = \sum_i c_i |i\rangle$, 独立的右矢 $|i\rangle$ 的数目 N, c_i 为复数

用到加法: $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$



2. 力学量是厄密算符:

$$Q|\alpha\rangle = |\beta\rangle \leftrightarrow \langle\beta| = \langle\alpha|Q^\dagger$$, $Q^\dagger$ 是 Q 的厄密共轭算符

↳ 有时记 $|\beta\rangle = |Q\alpha\rangle$

如果 $Q = Q^\dagger$, 则 Q 是厄密算符.

本征方程: $Q|q_i\rangle = q_i|q_i\rangle$, $i = 1, \cdots, N$

q_i 称本征值, $|q_i\rangle$ 是属于 q_i 的本征态

$Q = Q^\dagger \Rightarrow$
- q_i 是实数
- $\langle q_i|q_j\rangle = 0$, 即正交, 如果 $q_i \neq q_j$

这里 $\langle\alpha|\beta\rangle$ 称为内积, 一般为一个复数. (对应 (ψ, φ))

性质: 1. $\langle\alpha|\beta\rangle = (\langle\beta|\alpha\rangle)^*$

2. $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$.

$|\alpha\rangle\langle\beta|$ 称为外积, 是一个算符.

结合公理: 左矢, 右矢, 算符的合法乘法中的任意组合.

$$(|\beta\rangle\langle\alpha|)\cdot|\gamma\rangle = |\beta\rangle\cdot(\langle\alpha|\gamma\rangle)$$

$\langle\beta|\cdot Q|\alpha\rangle = \langle\beta|Q\cdot|\alpha\rangle$, 设 $Q = Q^\dagger$

则上式 $= \langle\beta|Q^\dagger\cdot|\alpha\rangle = (Q|\beta\rangle)^\dagger\cdot|\alpha\rangle$

也写作 $(Q\psi, \varphi) = (\psi, Q\varphi)$

No / Date / /

3、测量：测力学量 Q，系统处于 $|\alpha\rangle$.

$$|\alpha\rangle = \sum_i c_i |q_i\rangle, \qquad c_i = \langle q_i|\alpha\rangle$$

- 测值为 q_i，几率为 $|c_i|^2$
- 期望值 $\langle Q\rangle = \sum_i |c_i|^2 q_i = \langle\alpha|Q|\alpha\rangle$
- 涨落 ~ 概率，测不准.

证明：$\langle\alpha|Q|\alpha\rangle = \sum_{ij} \langle q_i|c_i^* c_j q_j|q_j\rangle$ 由于 $\langle q_i|q_j\rangle = \delta_{ij}$

例：x, P_x, S_x, S_y, S_z.

4. 动力学：(时间演化)

脱胎于经典力学：$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$, $\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$

如果一个力学量是 p, q 的函数 $Q(p,q)$，则

$$\frac{d}{dt}Q(p,q) = \{Q, H\},$$

$$\{Q,H\} = \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q}$$ 为泊松括号

易证：$\frac{d}{dt}Q = \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{dp}{dt}$

量子力学：
- Heisenberg picture：$\frac{dQ^{(H)}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[Q^{(H)}, H]$

  但 $\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t} = 0 \Longrightarrow |\alpha(t)\rangle_H = |\alpha(0)\rangle_H$ — Dirac 写出

  $[Q,H] = QH - HQ$, $[x,p] = i\hbar$ ← 海

注：Q 可以没有经典对应（即 $\{Q,H\}$ 没有）比如 $\vec{S}$.

- Schrödinger picture：$i\hbar\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t} = H|\alpha\rangle$

  但 $\frac{dQ^{(S)}}{dt} = 0$. $|\alpha(t)\rangle_S = e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|\alpha(0)\rangle = U(t)|\alpha(0)\rangle$ $U^+U = \mathbb{1}$ 幺正

- $\frac{d}{dt}\langle Q\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle\alpha|[Q,H]|\alpha\rangle$ 与 H, S picture 无关，或一样.

$Q^{(H)} = U^+ Q^{(S)} U$, $|\alpha(t)\rangle_S = U(t)|\alpha(0)\rangle$

5. 表象： 以Q的本征矢 $|q_i\rangle$, $i=1,2,\cdots,N$ 为基矢，称Q表象.

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix}, \quad \langle\alpha| = (c_1^*, c_2^*, \cdots, c_N^*)$$

$c_i = \langle q_i|\alpha\rangle$

注： $c_i(t) = \langle i|\underbrace{U(t)|\alpha(0)\rangle}_{|\alpha(t)\rangle} = (\langle i|U)\cdot|\alpha(0)\rangle$

S-P. H-P ∵ $Q^{(H)}$ 的本征矢为 $U^+|i\rangle$.

算符 $A \xrightarrow{定义} A_{ij} = \boxed{\langle q_i|A|q_j\rangle}$ transition 振幅.

由 $i\hbar\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t} = H|\alpha\rangle$ $\boxed{t=0, |\alpha\rangle=|\alpha\rangle}$.

$$\Rightarrow \quad \boxed{i\hbar\frac{\partial c_i}{\partial t} = \sum_j H_{ij}c_j}$$

S-pic: $\langle b|\cdot(U(t)|\alpha\rangle)$

H-pic $= (\langle b|U(t))\cdot|\alpha\rangle$

$= \langle b|U(t,0)|\alpha\rangle$

用到 $\boxed{\sum_i |q_i\rangle\langle q_i| = \mathbb{1} \quad \leftarrow 完备性}$

$b_i = \sum_j A_{ij}a_j$

$|\beta\rangle = A|\alpha\rangle$ 表为 $\langle q_i|\beta\rangle = \sum_j \langle q_i|A|q_j\rangle\langle q_j|\alpha\rangle \Rightarrow$

• 坐标表象： $i\hbar\frac{\partial\langle x|\alpha\rangle}{\partial t} = \langle x|H|\alpha\rangle$, $H = H(p, x)$

连续谱： $\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle$, 本征值 x' 为连续实数.

$\langle x|\alpha\rangle \equiv \psi_\alpha(x)$, $\langle x|\cdot H|\alpha\rangle = \hat{H}\psi_\alpha(x)$

$\langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'')$

$\int dx'\,|x'\rangle\langle x'| = \mathbb{1}$

其中 $\hat{H} = H(\hat{p}, \hat{x})$ 微分算符

$\boxed{\hat{p} = -i\hbar\nabla, \quad \hat{x} = x}$.

* 将 $H|\alpha\rangle$ 定义为 $|\beta\rangle$, 设 $\langle x|\beta\rangle = \psi_\beta(x)$. 利用 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$

可得 $\psi_\beta(x) = \hat{H}\psi_\alpha(x)$;

设 $\langle x|p|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|\alpha\rangle$

$\langle x|x|\alpha\rangle = x\langle x|\alpha\rangle = x\psi_\alpha(x)$

满足 $\langle x|[x,p]|\alpha\rangle = i\hbar\langle x|\alpha\rangle$

∵上 $= x\langle x|p|\alpha\rangle - \langle x|p\,x|\alpha\rangle$

$= x(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi_\alpha - (-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})(x\psi_\alpha)$

6. 量子化（守则）

写出经典力学的 $H(p, q)$

将 $p \to \hat{p}$, $q \to \hat{q}$,

状态 $(\vec{q}, \vec{p}) \to |\alpha\rangle$,

空间运动 坐标表象 $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, $\hat{x} = x$

$|\alpha\rangle \to \psi_\alpha(\vec{x})$

S-eq 或 H-eq.