量子物理复习笔记

不考的内容：周期性，一维谐振子经典求解

重点考察的内容：薛定谔方程，本征值本征矢求解，哈密顿算符

数学基础

波函数空间

量子物理中单个粒子用$\Psi(\vec{r},t)$表示，波函数的模的平方（波的强度）代表时刻 t、在空间$\vec{r}$点处，单位体积元中微观粒子出现的概率。

波函数空间F上内积的定义：$(\phi,\psi)=\int d^3r\phi^*(r)\psi(r)$

波函数空间上内积的性质：

- $(\phi,\psi)=(\psi,\phi)^*$
- $(\phi,\lambda_1\psi_1+\lambda_2\psi_2)=\lambda_1(\phi,\psi_1)+\lambda_2(\phi,\psi_2)$
- $(\lambda_1\phi_1+\lambda_2\phi_2,\psi)=\lambda_1^*(\phi_1,\psi)+\lambda_2^*(\phi_2,\psi)$

内积对第二个是线性的，对第一个因子是反线性的。

离散正交基

- $(u_i,u_j)=\delta_{ij}$
- F中任意波函数都可以由$u_i(\vec{r})$唯一的展开。$\Psi(\vec{r})=\sum_i c_iu_i(\vec{r})$。$c_i$称为波函数在$u_i$上的分量。$c_i=(u_i,\Psi)$

基矢完备性（封闭性）条件：

$$\sum_i u_i^*(\vec{r'})u_i(\vec{r})=\delta(\vec{r}-\vec{r'})$$

正交归一性条件：

$$(u_i,u_j)=\delta_{ij}$$

连续正交基

连续，不属于L_2空间，但波函数依然可以在其上展开，同样满足正交归一性和完备性。

	离散基 $\{u_i(\boldsymbol{r})\}$	连续基 $\{w_\alpha(\boldsymbol{r})\}$
正交归一关系式	$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$	$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$
封闭性关系式	$\sum_i u_i(\boldsymbol{r}) u_i^*(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$	$\int \mathrm{d}\alpha w_\alpha(\boldsymbol{r}) w_\alpha^*(\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$
波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 的展开式	$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_i c_i u_i(\boldsymbol{r})$	$\psi(\boldsymbol{r}) = \int \mathrm{d}\alpha c(\alpha) w_\alpha(\boldsymbol{r})$
$\psi(\boldsymbol{r})$ 的分量	$c_i = (u_i, \psi) = \int \mathrm{d}^3 r u_i^*(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r})$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int \mathrm{d}^3 r w_\alpha^*(\boldsymbol{r}) \psi(\boldsymbol{r})$
标量积	$(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\varphi, \psi) = \int \mathrm{d}\alpha b^*(\alpha) c(\alpha)$
模方	$(\psi, \psi) = \sum_i \lvert c_i \rvert^2$	$(\psi, \psi) = \int \mathrm{d}\alpha \lvert c(\alpha) \rvert^2$

左矢和右矢

右矢：态空间中的元素

一个量子态可以用一个态矢量表示，每个波函数可与态矢量一一对应。

$$\Psi(\vec{r}) \in F \Leftrightarrow |\Psi\rangle \in E$$

态空间内积$(|\Psi\rangle, |\phi\rangle) = \langle\Psi|\phi\rangle$为一个复数。

左矢：态空间对偶空间中的元素

- 每一个右矢都对应于一个左矢，但并非每一个左矢都对应于一个右矢。
- $|\lambda\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle$, $\langle\lambda\phi| = \lambda^*\langle\phi|$

线性算符

线性算符A使每一个右矢$|\psi\rangle$都有一个对应的右矢$|\psi'\rangle$,
且这种对应关系是线性的:

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle$$

对易子算符

$$[A,B]=AB-BA$$

一些恒等式:

$$\begin{aligned}
&[A,B]=-[B,A]\\
&[A,B+C]=[A,B]+[A,C]\\
&[A+B,C]=[A,C]+[B,C]\\
&[A,BC]=[A,B]C+B[A,C]\\
&[AB,C]=[A,C]B+A[B,C]
\end{aligned}$$

$[A,B]=0$ 称为满足对易关系

矩阵元

$\langle\phi|\,A\,|\psi\rangle$ 是一个数

投影算符

$$P_\psi=|\psi\rangle\,\langle\psi|$$

其中ψ满足$\langle\psi|\,|\psi\rangle=1$

将其作用于任一右矢，即得到与$|\psi\rangle$成正比的右矢。

性质：$P_\psi^n=P_\psi$

厄米共轭

伴随算符

A的伴随算符为$A^\dagger$

$$\langle\psi|\,A^\dagger\,|\phi\rangle=\langle\phi|\,A\,|\psi\rangle^*$$

$$(\phi,A\psi)=(A^\dagger\phi,\psi)$$

$$(AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger$$

运算规则

- 将常数换成其共轭复数

- 将右矢换成其对应的左矢
- 将左矢换成其对应的右矢
- 将算符换成其伴随算符
- 即颠倒各因子的顺序（但常数的位置无关紧要）

$$(\lambda \langle u| A |v\rangle)^\dagger = \lambda^* \langle v| A^\dagger |u\rangle$$

厄米算符

$$A = A^\dagger$$

$$\langle\psi| A |\phi\rangle = \langle\phi| A |\psi\rangle^*$$

薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r},t)\right]\Psi(\vec{r},t)$$

若势能U与时间无关，则可得到定态薛定谔方程。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

引入哈密顿算符

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\vec{r})\right]$$

定态薛定谔方程变为

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

$\psi(\vec{r})$为本征函数，E为本征值。本征函数构成正交归一集。

能量平均值$\langle H\rangle = E$。

含时