第一章　量子力学的基本原理与数学表达

1.1　量子力学的基本假设

1. 微观态的状态用希尔伯特空间的波函数表示

2. 微观系统的力学量用希尔伯特空间的线性厄米算符来表示; 本征值方程 $\hat{A}\left|a_i\right\rangle = a_i\left|a_i\right\rangle$

   - 力学量的取值仅限于它的本征值
   - 完备性：$|\psi(t)\rangle = \sum\limits_i c_i\left|a_i\right\rangle$, $|c_i|^2$ 给出测量 $\hat{A}$ 得到 a_i 的概率 $\sum\limits_i |c_i|^2 = 1$
   - 设测量 $\hat{A}$ 得到 a_i ，则系统测量后会进入本征态 a_i 中

3. 微观系统中每个粒子在直角坐标中的坐标算符和动量算符满足下列关系：$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \quad \left[\hat{x}_i,\hat{p}_j\right] = \delta_{ij}i\hbar$ 。对于同一粒子：$\left[r_i,r_j\right] = 0 \quad \left[p_i,p_j\right] = 0$ ，不同粒子全部对易均为零。

4. 微观系统状态 $|\psi(t)\rangle$ 随时间的变化规律有薛定谔方程来决定。

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$$

5. 全同性原理任意两粒子的波函数状态对调后的波函数是对称的 (玻色子) 或反对称的 (费米子)

1.2 Dirac 符号，若干常用算符

1.2.1 右矢与左矢 (Dirac 记号)

1. 右矢 (ket) 态矢量：$|\psi(t)\rangle, |\varphi(t)\rangle$; 本征态：$|a_i\rangle . |x\rangle, |\vec{p}\rangle, |lm\rangle$

2. 左矢：$\langle\psi(t)|, \langle\varphi(t)|$ ，本征态：$\langle a_i|, \langle s|, \langle\vec{p}| . \langle lm|$

1.2.2 内积 (inner product)

$$\langle\varphi(t)| \cdot |\psi(t)\rangle \equiv \langle\varphi(t)|\psi(t)\rangle$$

$$\langle a_i| \cdot |a_j\rangle = \langle a_i|a_j\rangle$$

内积的性质：$\langle\varphi|\psi\rangle \equiv \langle\psi|\varphi\rangle^*$ (复共轭)

上式中，令 $\varphi = \psi$ ，则有 $\langle\psi|\psi\rangle \equiv \langle\psi|\psi\rangle^* \Rightarrow \langle\psi|\psi\rangle$ 为实常数。写作 $\langle\psi|\psi\rangle \equiv |\psi|$ (模方)。$|\psi|^2 \geq 0$ ，仅当 $|\psi\rangle = 0$ 时，等号成立。

- $\langle\varphi|\psi\rangle = 0, (|\varphi\rangle \neq 0, |\psi\rangle \neq 0)$
- 态的归一化 $\langle\psi|\psi\rangle = 1 \quad \langle a_i|a_i\rangle = 1$
- Chwartz 不等式
$$|\langle\varphi|\psi\rangle|^2 \leq \langle\varphi|\varphi\rangle\langle\psi|\psi\rangle$$
- 三角不等式：$\sqrt{(\langle\varphi|^\dagger\ |\psi\rangle(|\varphi\rangle^\dagger\ |\psi\rangle))} \leq \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle} + \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$

1.2.3 外积 (outer product)

$|\varphi\rangle\langle\psi|$ or($|\psi\rangle\langle\varphi|$) 外积是算符。

$$\begin{cases} (|\varphi\rangle\langle\psi|)|a\rangle = \langle\psi|a\rangle\ |\varphi\rangle \\ \langle b|(|\varphi\rangle\langle\psi|) = \langle b|\varphi\rangle\langle\psi| \end{cases}$$

投影算符 $\hat{p}_\phi = |\phi\rangle\langle\phi|$

$$\begin{cases} \hat{p}_\phi = \langle\phi|a\rangle\ |\phi\rangle \\ \langle b|\,\hat{p}_\phi = \langle b|\phi\rangle\langle\phi| \end{cases}$$

1.2.4 线性算符与反线性算符

- 线性算符 $\hat{A}$

$$\hat{A}(c_1\left|\psi_1\right\rangle + c_2\left|\psi_2\right\rangle) = c_1\hat{A}\left|\psi_1\right\rangle + c_2\hat{A}\left|\psi_2\right\rangle$$

- 反线性算符 $\hat{B}$

$$\hat{B}(c_1\left|\psi_1\right\rangle + c_2\left|\psi_2\right\rangle) = c_1^*\hat{B}\left|\psi_1\right\rangle + c_2^*\hat{B}\left|\psi_2\right\rangle$$

1.2.5 厄米共轭算符与厄米算符、反厄米算符

- 考虑 $\left|\psi'\right\rangle = \hat{A}\left|\psi\right\rangle$ 则 $\left\langle\psi'\right| = \left\langle\psi\right|\hat{A}^\dagger$ $\hat{A}^\dagger$ 是 $\hat{A}$ 的厄米共轭算符

$$\begin{cases} \langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle \\ \langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^* = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^* \end{cases} \Rightarrow \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^*$$

对于任意的 $\left|\psi\right\rangle$ 和 $\left|\varphi\right\rangle$ 若算符 $\hat{B}$ 满足

$$\langle\psi|\hat{B}^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle^*$$

则 $\hat{B}$ 即为 $\hat{A}$ 的厄米共轭算符 $\hat{B} = \hat{A}^\dagger$.

由上式关系可证：

$$\begin{cases} \left(\hat{A}\hat{B}\right)^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \\ \left(\hat{A}^\dagger\right)^\dagger = \hat{A} \\ (|\psi\rangle\langle\varphi|)^\dagger = |\varphi\rangle\langle\psi|, \left(\text{若 } |\varphi\rangle = |\psi\rangle \Rightarrow (|\psi\rangle\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle\langle\psi|\right) \\ c^\dagger = c^*, \left(c\text{为复常数}\right) \end{cases}$$

若 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, 则称 $\hat{A}$ 为厄米算符。(显然，投影算符 $\hat{p}_\phi = |\phi\rangle\langle\phi|$ 是厄米算符)

厄米算符的若干特性

1. $\hat{A}\left|a_i\right\rangle = a_i\left|a_i\right\rangle$, 本征值 a_i 为实数
2. 正交性：厄米算符的属于不同本征值的本征态正交 $\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, i = j \\ 0, i \neq j \end{cases}$
3. 完备性：$\left|\psi(t)\right\rangle = \sum\limits_i c_i(t)\left|a_i\right\rangle$

若 $\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$, 则称 $\hat{A}$ 为反厄米算符。

1.2.6 幺正算符 $\hat{U}$ (unitary operator)

定义式：$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \Rightarrow \hat{U}\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{-1}\hat{U} = I \Rightarrow \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = I$，其中 I 为单位矩阵。

$\hat{U}\left|\psi\right\rangle \equiv \left|\psi'\right\rangle, \hat{U}\left|\varphi\right\rangle \equiv \left|\varphi'\right\rangle$

则有：

$$\langle\psi'|\varphi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle$$

因此幺正算符作用下，内积保持不变。

幺正算符的本征值是模为 1 的复数

1.2.7 正规算符 $\hat{N}$ (normal operator)

定义式：$\left[\hat{N}, \hat{N}^\dagger\right] = 0$

厄米算符、幺正算符是正规算符。

正规算符属于不同本征值的不同本征态正交：

$$\hat{N}\left|n\right\rangle = n\left|n\right\rangle, \hat{N}\left|m\right\rangle = m\left|m\right\rangle \Rightarrow \langle n|m\rangle = 0 \quad (n \neq m)$$

谱展开

$$\hat{N} = \sum_n n\left|n\right\rangle\!\left\langle n\right|$$

1.3 表现与表象变换

1.3.1 $\hat{A}-$ 表象 $\left(\hat{A}^\dagger = \hat{A}\right)$ 分立谱

$$\hat{A}\left|a_i\right\rangle = a_i\left|a_i\right\rangle$$

$$\begin{cases} \langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij} & \text{正交性} \\ \left|\psi(t)\right\rangle = \sum\limits_{i=1}^{n} c_i(t)\left|a_i\right\rangle & \text{完备性} \end{cases}$$

完备性的算符表达式：

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i(t)\,|a_i\rangle$$

$$\langle a_j|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^{n} \langle a_j|a_i\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{n} c_i(t)\delta_{ij} = c_j(t)$$

$$c_i(t) = \langle a_i|\psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow c_i(t) = \langle a_i|\psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow |\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^{n} |\psi(t)\rangle\ |a_i\rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle\ \langle a_i|\psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow I\,|\psi(t)\rangle = \left[\sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle\langle a_i|\right]|\psi(t)\rangle$$

$$I = \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle\langle a_i|$$

- $|\psi(t)\rangle = I\,|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle\langle a_i|\ |\psi(t)\rangle$
- $|b_j\rangle = I\,|b_j\rangle = \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle\langle a_i|\ |b_j\rangle$

称采用了 $\hat{A}-$ 表象。

而 $|a_1\rangle, \cdots, |a_n\rangle$ 称为该 n -维希尔伯特空间的基矢。

1. $\hat{A}-$ 表象中的态矢量的表示

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^{n} |a_i\rangle\langle a_i|\ |\psi(t)\rangle$$

不同的态矢量对于不同的展开系数集合：$\{|a_i\rangle\langle\psi(t)|\}$

2. $|\psi(t)\rangle \Rightarrow \begin{pmatrix} \langle a_1|\psi(t)\rangle \\ \vdots \\ \langle a_n|\psi(t)\rangle \end{pmatrix} \equiv \psi(t)\ \langle a_i|\psi(t)\rangle$ 为几率幅。

3. $\langle\psi(t)| = \langle\psi(t)|\, I = \sum\limits_{i=1}^{n} \langle\psi(t)|a_i\rangle \langle a_i| = \sum\limits_{i=1}^{n} \langle a_i|\psi(t)\rangle^* \langle a_i|$

4. $\langle\psi(t)| = (\,\langle a_1|\psi(t)\rangle^*, \cdots, \langle a_n|\psi(t)\rangle^*) =\equiv \psi^(t)(t)$

5. 内积：

$$\begin{aligned}
\langle\varphi|\psi\rangle &= \langle\varphi|I|\psi\rangle \\
&= \sum_{i=1}^{n} \langle\varphi|a_i\rangle \, \langle a_i|\psi\rangle \\
&= (\,\langle a_1|\psi(t)\rangle^*, \cdots, \langle a_n|\psi(t)\rangle^*) =\equiv \psi^(t)(t)\begin{pmatrix} \langle a_1|\psi(t)\rangle \\ \vdots \\ \langle a_n|\psi(t)\rangle \end{pmatrix} \\
&= \varphi^\dagger\psi
\end{aligned}$$

6. $\hat{A}-$ 表象中的算符表示

$$\begin{aligned}
\hat{F} &= \left(\sum_i |a_k\rangle\langle a_i|\, \hat{F} \sum_j |a_j\rangle\langle a_j|\right) \\
&= \sum_{jk} |a_i\rangle\langle a_i|\, \hat{F}\, |a_j\rangle\langle a_j| \\
&= \sum_{jk} |a_i\rangle\, F_{ij}\, \langle a_j|
\end{aligned}$$

其中 $F_{ij} = \langle a_i|F|a_j\rangle$.

7. 算符 $\hat{F}$ 对应于一个 $n \times n$ 的方阵。

$$\hat{F} \longrightarrow \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdots & F_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{n1} & F_{n2} & \cdots & F_{nn} \end{pmatrix}$$

$\hat{F}$ 和 $\hat{F}^\dagger$ 的矩阵元之间的关系

$$\begin{aligned}
F_{ij} &= \langle a_i|\hat{F}|a_j\rangle = \langle a_j|\hat{F}^\dagger|a_i\rangle^* \\
&= \left(F^\dagger_{ji}\right)^*
\end{aligned}$$

$$\rightarrow F^\dagger_{ij} = F^*_{ji}$$

对于厄米算符：$\hat{F}^\dagger = \hat{F}, F^\dagger_{ij} = F_{ij} \Rightarrow F_{ij} = F^*_{jk}$

$\hat{U}$ 与 $\hat{U}^{-1}$ 的矩阵元之间的关系 ($\hat{U}^{\dagger} = \hat{U}^{-1}$)

$$\begin{aligned} U_{ij}^{-1} &= U_{ij}^{\dagger} = U_{ji}^{*} \\ \Rightarrow U_{ij}^{-1} &= U_{ji}^{*} \end{aligned}$$

算符 $\hat{A}$ 的矩阵元 ($\hat{A}$– 表象)

$$A_{ij} = \left\langle a_i \middle| \hat{A} \middle| a_j \right\rangle = a_j \left\langle a_i | a_j \right\rangle = a_j \delta_{ij} (\text{对角矩阵})$$

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & a_i & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & a_j & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & a_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{A} &= \sum_{ij} A_{ij} \left\langle a_i | a_j \right\rangle \\ &= \sum_{ij} a_i \delta_{ij} \left| a_i \right\rangle\!\left\langle a_j \right| = \sum_{i} a_i \left| a_i \right\rangle\!\left\langle a_i \right| \end{aligned}$$

$$|\alpha\rangle\langle\beta| = \begin{pmatrix} \langle a_i|\alpha\rangle \\ \vdots \\ \langle a_n|\alpha\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\beta|a_1\rangle & \cdots & \langle\beta|a_n\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle a_1|\alpha\rangle\,\langle\beta|a_i\rangle & \cdots & \langle a_1|\alpha\rangle\,\langle\beta|a_n\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a_n|\alpha\rangle\,\langle\beta|a_1\rangle & \cdots & \langle a_n|\alpha\rangle\,\langle\beta|a_n\rangle \end{pmatrix}$$

第二章　量子动力学、密度矩阵、路径积分

第三章　角动量理论

第四章　量子力学中的对称性及相位

第五章　二次量子化

第六章　相对论量子力学