矩阵力学简介

- 线代回顾 …… 量力之工具

{矩阵与线性方程组
 线性空间与线性变换

◦基本概念

1. 线性空间 $A=\{\cdots\}$ …… 封闭性、运算律
2. 基 …… 线性无关、完备性
3. 坐标向量 $\vec{e}_x, \vec{e}_y \cdots \Rightarrow \lambda_1\vec{a}_1+\lambda_n\vec{a}_n \cdots$
4. 坐标变换 表象
5. 特(本)征值 $A\vec{x}=\lambda\vec{x}$

(对角化) $|A-\lambda I|=0$

关注基、组合数(系数) 基变换 过渡矩阵

6. 相似变换

特征向量、$x=\mu_1 a_1+\cdots+\mu_n a_n = A^k(\mu_1 a_1+\cdots+\mu_n a_n)$
$= \mu_1\lambda_1^k a_1+\cdots+\mu_n\lambda_n^k a_n$ …… 简化计算

$\hat{H}\psi = E\psi$ 定态Sch.

$|\psi\rangle$ 向量形式

Matrix

$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

H的本征值E. 本征向量$|\psi\rangle$

⇒本征态→定态

相似变换 $A \sim B$ $B = P^{-1}AP$

可表同一个线性变换

e.g $A_{n\times n} \to$ 对角 for "n" "λ"

实方阵 相似于正交对角阵.

复方阵 酉相似于实对角阵 $A = A^H$

A为厄米矩阵

标准正交基

• 态矢及其性质

Sch. E.q 解. 1.定态波函数 $\psi = a_1\psi_1 + \dots$

$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + \dots + c_n|\psi_n\rangle$ → 态矢

2. 解空间的一组基

实际波函数是定态的叠加

定态叠加 → 实际状态

态矢 ↔ 波函数 ↔ 状态

态矢相关定义

braket.

1. 列向量　右矢(ket)

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

复数域

符号 $|\uparrow\rangle$ $|\downarrow\rangle$

转置

2. 行向量　左矢(bra)

$$\langle\psi| = (c_1^*, c_2^* \cdots c_n^*)$$

$|\psi\rangle = \langle\psi|^+$　互为厄米共轭.

3. 加法 数乘

$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$$

position part.

$$\Leftrightarrow \quad \psi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 \quad \left(\psi_1 = \psi_1 e^{-\frac{iE_1t}{\hbar}}\right)$$

基一般与时间无关.　组合系数是时间的函数

$$c_j = a_j e^{-\frac{iE_jt}{\hbar}} \qquad |c_j| = |a_j|$$

4. 内积

线代：$[x, y] = y^T x$

now　$(x, y) = y^H x = (y_1^* \cdots y_n^*)\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n^* \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{n} y_i^* x_i$

量力写法：$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = |\psi_1\rangle^+|\psi_2\rangle = \cdots\cdots \in \mathbb{C}$.

5. 外积

$$|\psi_1\rangle\langle\psi_2| = |\psi_1\rangle|\psi_2\rangle^{+} = \text{方阵}.$$

Note. $|1\rangle = \begin{pmatrix}1\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}$ $|2\rangle = \begin{pmatrix}0\\ 1\\ \vdots\\ 0\end{pmatrix}$

1° 标准正交性 $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$

2° $I = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|$. 矩阵元

3° $A_{n\times n}$ $a_{ij} = \langle i|A|j\rangle$ → e.g. $\begin{pmatrix}1 & 3\\ 2 & 4\end{pmatrix}$

i, j 为基矢量. $a_{21} = (1,0)\begin{pmatrix}1 & 3\\ 2 & 4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix} = 3$

$$\iiint \psi_i^{*}\psi_j \, dV = \delta_{ij}$$

厄米算符 $\hat{H}^{*} = \hat{H}^{T}$

○ 组合系数归一性

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} c_i|\psi_i\rangle \qquad \iiint |\psi|^2 dV \to 1$$

$$\Rightarrow \sum_{i=1}^{n} |a_i|^2 = 1 = \sum_{i=1}^{n} |c_i|^2$$

○ 物理量的均值.

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x|\psi|^2 dx \quad \text{归类.}$$

用积分求之 $$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^{*} x \psi \, dx$$

- Sch. Eq 矩阵形式

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

$$\psi = \sum C_i(t)\,u_i(\vec r)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat H \psi \qquad \hat H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

$Ax=b$ 转化.

$$i\hbar \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial C_i}{\partial t} u_i(\vec r) = \sum_i \hat H C_i(t)\, u_i(\vec r)$$

左乘 u_j^* 并三重积分

$$i\hbar \frac{\partial C_j}{\partial t} = \sum_i C_i \iiint u_j^* \hat H u_i \, dv$$

形式上 $\vec b = A\vec x \Leftrightarrow b_j = \sum_i A_{ji} x_i$ 地位同等.

$$i\hbar \frac{\partial C_j}{\partial t} \sim i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t}$$

$$C_i \sim |\psi\rangle$$

set $H_{ji} = \iiint u_j^* \hat H u_i \, dv$

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} = \underline{\hat H}\, |\psi\rangle$$

when $|\psi\rangle = (C_1 \cdots C_n)^T$ n元PDE.

难点

1. 正确写出H矩阵
2. 解 $C_1 \cdots C_n$ 的微分方程组