测量不仅干扰被测对象，而且产生了它，我们迫使它给出了一个确定值——若尔当（哥本哈根学派）
(嗯, 说测量产生了粒子性是没错的)
你相不相信月亮只在我们看着它的时候存在?——爱因斯坦（决定论）
Shut up and calculate ——狄拉克 or 费曼（实用主义）
量子力学永远不可能被“理解”，你们只需去习惯它。——朗道
对前人的知识遗产, 既不可轻率否定, 也不可盲目相信——曾谨言

基本公设

非相对论单粒子量子力学基本公设:
① **状态空间** (孤立) 系统的状态用希尔伯特空间(复内积空间) 中的归一化矢量表示 (复变, 线性叠加)
② **演化** 封闭量子系统的演化可以用幺正算符作用在态矢上来描述, 例如时间演化遵从薛定谔方程
③ **测量** 量子测量由一组测量算符 $\{X_x\}$ 描述, 这些算符作用在态矢上以概率 $p_x = \langle\psi|X_x^\dagger X_x|\psi\rangle$ 得实验结果 x, 测量后体系的状态变成 $\frac{1}{\sqrt{p_x}} X_x|\psi\rangle$ (要求测量算符完备 $\sum X_x^\dagger X_x = I$, 从而概率和 $\sum p_x = 1$)
(③ 可能可由 ② 推出)
Positive Operator-Valued Measure
POVM 测量 可知 $E_x \equiv X_x^\dagger X_x$ 是半正定算符, 满足完备性(不要求正交) 的 $\{E_x\}$ 称为一个 POVM
(不考虑测量后处于什么状态, 不必具有可重复性, 适用于如光子被测量后被吸收了的情况)
⟨– 量子信息 ⟩
projective measurement
E_x 构成正交投影算符 → **投影测量** 厄米算符 $\hat{X}$ 有谱分解 $\hat{X} = \sum x \hat{P}_x$, 投影算符 $\hat{P}_x = |x\rangle\langle x|$, 则测得 x
collapse
的概率为 $p_x = \langle\psi|\hat{P}_x|\psi\rangle$, 测量后状态坍缩到本征态 $\frac{1}{\sqrt{p_x}}\hat{P}_x|\psi\rangle$ (→ 可观测量由厄米算符表示, p_x 为概率幅的模方, 测量平均值 $\langle\hat{X}\rangle \equiv \langle\psi|\hat{X}|\psi\rangle$ 和经典对应)
repeatability
投影测量有**可重复性** 坍缩后重复测量, 每次都得 x, 不改变状态

⟨ 光 –⟩ 普朗克黑体辐射

薛方程

wave particle duality
波粒二象性 微观粒子的运动由概率幅波来描述 (引入复数就是引入相位)
不是波包, 自由粒子的波包要扩散 ⟨– 相干态 ⟩ 不是疏密波, 单粒子就有波动性
de Broglie
德布罗意波 $k = p/\hbar, \omega = E/\hbar$ (标量波, 不存在横纵性或偏振)
加入自旋变成旋量便可反映偏振?
粒子的德布罗意波长大于与之相互作用粒子的尺度时必须用量子力学来处理
例 电子波长 ~原子核大小, $E = \frac{h}{\lambda}c \approx 400$ MeV　　中子波长 ~晶格间距, $T = \frac{E}{k_\mathrm{B}} \approx 240$ K
wave function
经典波动方程 $\exp[\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)]$ → $\exp[\mathrm{i}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)/\hbar]$ **波函数**
如上式所给出的信息，便可推知 $\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi = E\psi$
Schrödinger equation
按经典力学的定义, 哈密顿量 H 与能量 E 等价, 得出 **薛定谔方程** $\mathrm{i}\hbar\partial_t\psi = \hat{H}\psi$
定态薛方程 $\hat{H}\psi = E\psi$ → $(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}))\psi = E\psi$
定态的波函数就是 $\psi_i(\vec{r},t) = \psi_i(\vec{r})\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_i t/\hbar}$
记相位为 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(\vec{r})}$, 有 $-\mathrm{i}\hbar\nabla\psi = \hbar(\nabla\varphi)\psi = p\psi$ 把动量 p 表达出来了 $\hat{p} \doteq -\mathrm{i}\hbar\nabla$
statistical interpretation
统计诠释 波函数的模方是概率的体密度 (历史上曾被诠释为真实粒子数密度, 会导致奇怪结果)
最早由玻恩给出, 当你测量电子到底在哪个位置时, 这个连续的分布突然收缩成一个点, 不再在空间扩展
$$\partial_t(\psi^*\psi) = \psi^*\partial_t\psi + \psi\partial_t\psi^* \xlongequal[\text{若势函数为实}]{\psi^*(\text{方程}) - (\text{方程})^*\psi} \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right) = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2m}\nabla\left(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right)$$

probability density

概率密度 $\rho(\vec{r},t)=|\psi(\vec{r},t)|^2$ (对体积积分得概率)

probability flux

概率流 $\vec{j}=\frac{-\mathrm{i}\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*)=\frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}(\psi^*\nabla\psi)$

可记作 $\displaystyle\int \mathrm{d}^3\vec{r}\,\vec{j}=\frac{\mathrm{Re}\langle\vec{p}\rangle}{m}$,

例 平面波 $\psi=\sqrt{\rho}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}$, $\vec{j}=\rho\frac{\hbar k}{m}=\rho\vec{v}$, 球面波 $\psi=\frac{1}{r}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}kr}$, $\vec{j}=\frac{\hbar k}{mr^2}\vec{e_r}$

例 若势函数为复 $V=V_0-\mathrm{i}\Gamma$, 则粒子数不守恒, 为指数衰减 $\tau=\frac{\hbar}{2\Gamma}$, ⟨ 核物 –⟩ 描述吸收

定义 $\vec{v}=\frac{\vec{j}}{\rho}=\frac{-\mathrm{i}\hbar}{2m}(\frac{\nabla\psi}{\psi}-\mathrm{c.c.})\propto(\nabla(\ln\psi)-\mathrm{c.c.})=\nabla(\ln(\frac{\psi}{\psi^*}))$ 推论 $\nabla\times\vec{v}=0$

($\vec{v}$ 不是真的速度, 因为不可能同时测准速度和位置)

$\partial_t\rho=0$ 要求 $\psi(\pm\infty,t)\to0$

概率流在无穷远面积分为零 → 概率 (粒子数) 守恒 $\partial_t\rho+\nabla\cdot\vec{j}=0$ → 归一化条件不随时间变化

若把波函数记作 $\psi=\sqrt{\rho}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S}$, $\rho(\vec{r},t)>0$, $S(\vec{r},t)\in\mathbb{R}$, 则可得 $\vec{j}=\frac{\rho\nabla S}{m}$, 即相位的空间变化导致了概率流

把这样的波函数代入薛方程, 在$\hbar\to0$ 极限下, 方程变成哈雅方程 $\frac{1}{2m}|\nabla S|^2+V+\partial_t S=0$, S 为 Hamilton's principle function

对于定态我们分离出 $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$, 相当于哈密顿主函数可分离 $S(\vec{r},t)=W(\vec{r})-Et$, W 为 Hamilton's characteristic function, 经典力学给出 $\vec{p}=\nabla S=\nabla W$

WKB 近似?

波函数

⟨– 表象 ⟩

波函数就是连续表象中的展开系数, 其模方诠释为概率 (密度?) $|\psi\rangle\doteq\int \mathrm{d}x\,|x\rangle\langle x|\psi\rangle$ →

波函数进入 $\hat{X}$ 表象 $\psi(x)=\langle x|\psi\rangle$, 里面的 x 表示实数, $|x\rangle$ 表示 $\hat{X}$ 的取 x 值的本征态

推论 $\langle x-\mathrm{d}x|\psi\rangle=\langle x|\psi\rangle-\mathrm{d}x\,\partial_x\langle x|\psi\rangle$ $(1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{p}\,\mathrm{d}x)|\psi\rangle=\int \mathrm{d}x\,|x\rangle(\langle x|\psi\rangle-\mathrm{d}x\,\partial_x\langle x|\psi\rangle)$ →

$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle=-\mathrm{i}\hbar\,\partial_x\langle x|\psi\rangle$ (不用薛方程就得到了 $\hat{p}$ 的表达式, 进而解出平面波的表达式) →

δ 函数归一化 $\langle x_1|x_2\rangle=\delta(x_1-x_2)=\int \mathrm{d}p\,\langle x_1|p\rangle\langle p|x_2\rangle=|A|^2\int \mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p(x_1-x_2)}=|A|^2 2\pi\hbar\,\delta(x_1-x_2)$

$\psi_p(x)=\langle x|p\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}$ (同时也是两个连续表象间的表象变换函数) 三维的 $\langle\vec{x}|\vec{p}\rangle=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{x}}$

例 $\psi(x)=\langle x|\psi\rangle=\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\langle p|\psi\rangle=\mathcal{F}^{-1}[\psi(p)]$

常用 d 维 δ 函数傅里叶变换 $\int \mathrm{d}^d x\, f(x)\delta^{(d)}(x)=f(0)$, 因此 $\frac{1}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}k\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}=\delta(x)$

平面波的归一化问题 (方形)

Gaussian wave packet

高斯型波包 满足最小不确定度

洛仑兹型波包

例 $\psi(x,0)=\delta(x)$, 则 $\psi(x,t)=\sqrt{\frac{m}{2\mathrm{i}\pi\hbar t}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{mx^2}{2\hbar t}}$, 从而 $|\psi(x,t)|^2=\frac{m}{2\pi\hbar t}$ (TODO: 不是说归一化不变吗?)

实际上是传播子, 薛图景下 $K(x,t;x_0,t_0)=\langle x|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|x_0\rangle=\int \mathrm{d}p\,\langle x|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)}|p\rangle\langle p|x_0\rangle\overset{[\hat{p},\hat{H}]=0}{=\!=\!=}$

$$\int \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}(t-t_0)}\langle x|p\rangle\langle p|x_0\rangle\,\mathrm{d}p=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[-\frac{p^2}{2m}(t-t_0)+p(x-x_0)]}=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar\mathrm{i}(t-t_0)}}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{m(x-x_0)^2}{2(t-t_0)}}$$

附用到的高斯积分公式 $\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{a}{2}p^2}\mathrm{d}p=\sqrt{\frac{2\pi}{a}}$ → $\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\frac{a}{2}p^2+bp}\mathrm{d}p=\sqrt{\frac{2\pi}{a}}\mathrm{e}^{\frac{b^2}{2a}}$

可用于研究波包会扩散

谐振子的传播子 (没算?) 总之就是插能量本征态 $K=\sum_n\psi_n(x)\psi_n^*(x_0)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_0(t-t_0)}$

束缚态

定理 若 ψ 是能量为 E 定态薛的解, 只要 V 为实, 则 ψ^* 也是方程对应能量为 E 的一个解

→ 若 E 下无简并, 可取 ψ 为实 (可加任意常数相位?) 若有简并, 总能找出一组实解

parity

宇称算符 $\hat{P}\psi(\vec{r})=\psi(-\vec{r})$, 厄米, 设其本征值为 π $\hat{P}^2\psi=\pi^2\psi=\psi$ $\pi=\pm1$

定理 若 $V(\vec{r})=V(-\vec{r})$, 则 $\psi(-\vec{r})$ 也是方程对应能量为 E 的一个解, 若无简并, 则 ψ 必有确定宇称

→ 若有简并, 总能找出一组有确定宇称的解 (如自由粒子可写成 $\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}kr}$ 或 $\sin kr$, $\cos kr$)

定理 若势函数在某点连续或有限阶跃, 则 ψ 和 ψ' 在该点连续 定态薛在该点附近积分 ⟨– δ 势 ⟩

定理 若 ψ_1,ψ_2 都是 E 下的解，有 $(\psi_1\psi_2'-\psi_1'\psi_2)'=0\ (\forall\vec{r})$，对于束缚态，常数是零，$\psi_1\psi_2'=\psi_1'\psi_2$
→ 除少数不规则 (有奇点?) 的势场外，粒子若存在束缚态，能级必不简并 若 ψ 能除作分母，可积分得 $\ln\psi_1=\ln\psi_2+C$，即只差个系数
→ 规则 (regular) 势场为实函数时，一维束缚态的概率流密度为零

boundary state　　scattering state
$\boxed{\text{束缚态}}$ $\lim\limits_{r\to\infty}\psi(\vec{r})\to 0$，否则称为 $\boxed{\text{散射态}}$
束缚态的能量 E 需满足条件 $V_{\min}<E<V_{\text{out,min}}$

ground state
能量最低的束缚态称为 $\boxed{\text{基态}}$，除 $r=\pm\infty$ 之外基态波函数无节点

excited
能量比基态高的态称为 $\boxed{\text{激发态}}$，激发态的节点数依次增加一个，能量越高波函数振荡越厉害

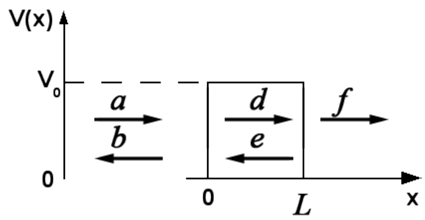
势场

infinite square well
例 一维 $\boxed{\text{无限深方势阱}}$
$\psi(x)=A\sin(kx)\ (0<x<L)=0$ (其它)，$k=\frac{n\pi}{L}$，$E_n=\frac{\hbar^2}{2m}k^2$，$A^2=\frac{2}{L}$，$\langle x\rangle=\frac{L}{2}$，$\langle x^2\rangle=[\frac{1}{3}-\frac{1}{2(n\pi)^2}]L^2$
最低能级不为零，因为动量为零的波无意义？也可用不确定度原理估算出能量 $\Delta p\sim\frac{\hbar}{L}$
除端点外，第 n 激发态波函数有 $(n-1)$ 个节点，波函数在全空间连续，波函数的导数在端点不连续
若取中点为原点，解出的 E_n 不变 (波函数其实也没变只是平移?)
波函数有两种宇称 $\psi_n=A\cos(kx)$，$n=1,3,\dots$ (偶宇称)，$=A\sin(kx)$，$n=2,4,\dots$ (奇宇称)
$\boxed{\text{Morse 势}}$ $V(x)=V_0(\mathrm{e}^{-2ax}-2\mathrm{e}^{-ax})$，合流超几何方程 $E_{n_r}=-V_0+\hbar\omega_0(n_r+\frac{1}{2})-\frac{(\hbar\omega_0)^2}{4V_0}(n_r+\frac{1}{2})^2$，$\omega_0=a\sqrt{\frac{2V_0}{\mu}}$，
$n_r=0,1,\dots$ 因 E 要大于势的最小值 $-V_0<E_{n_r}<0$，得 $n_r+\frac{1}{2}<\frac{\sqrt{8\mu V_0}}{a\hbar}$
例 二维无限深圆势阱
例 半径 a 高 L 无限深圆柱势阱 $\lambda=\frac{n\pi}{L}$，令 $r=\sqrt{k^2-\lambda^2}\rho$，得贝塞尔方程 $R''+\frac{1}{r}R'+(1-\frac{m^2}{r^2})R=0$
在 $r=0$ 有界的解为 $J_m(r)$，且需满足 $J_m(\sqrt{k^2-\lambda^2}a)=0$ 设其零点为 $x_{m,\gamma}$
$E_{nm\gamma}=\dfrac{\hbar^2}{2\mu}(\dfrac{n^2\pi^2}{L^2}+\dfrac{x_{m\gamma}^2}{a^2})$，$\psi_{nm\gamma}=J_m(\dfrac{x_{m\gamma}}{a}\rho)\sin(\dfrac{n\pi}{L}z)\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}$

harmonic oscillator
例 一维 $\boxed{\text{谐振子}}$ 势 $V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 无量纲化 $\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$，$\xi=\alpha x$，$\lambda=\frac{E}{\frac{1}{2}\hbar\omega}$，定态薛方程化为 $\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2}=(\xi^2-\lambda)\psi$
$\xi\to\pm\infty$ 的渐进解为 $\mathrm{e}^{\xi^2/2}$，但取正号不满足束缚态，故再设 $\psi(x)=\mathrm{e}^{-\xi^2/2}u(\xi)$，得 $\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2}-2\xi\,\mathrm{d}_\xi u+(\lambda-1)u=0$
此为厄米方程，要求 $(\lambda-1)=2n$ → $E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$，解归一化后为 $\psi_n(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{n!2^n\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-(\alpha x)^2/2}H_n(\alpha x)=h(\alpha x)$?
基态 $\psi_0(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-(\alpha x)^2/2}$，$\psi(x,t)=\psi(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}$
动量表象 $\psi(p)=\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-(\alpha x)^2/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}\mathrm{d}x\xlongequal{\text{配方}-\frac{\alpha^2}{2}(x-\frac{\mathrm{i}p}{\alpha^2\hbar})^2}\sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\sqrt{\frac{2}{\alpha^2}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-y^2}\mathrm{d}y\,\mathrm{e}^{-\frac{p^2}{2\alpha^2\hbar^2}}=\sqrt{\frac{1}{\alpha\hbar\sqrt{\pi}}}\mathrm{e}^{-}$
$\psi_1(x)=\sqrt{\frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}}}(\alpha x)\mathrm{e}^{-(\alpha x)^2/2}$，$\psi_3(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}}(2(\alpha x)^2-1)\mathrm{e}^{-(\alpha x)^2/2}$
宇称同 n，$\langle x\rangle=0$，$\langle E_\mathrm{k}(x)\rangle=\langle V(x)\rangle=\frac{E_n}{2}$
递推关系可用 $\hat{x}=\hat{a}+\hat{a}^\dagger$ 推出来 $\hat{x}|n\rangle=\frac{1}{\alpha}(\sqrt{\frac{n}{2}}|n-1\rangle+\sqrt{\frac{n+1}{2}}|n+1\rangle)$
例 三维自由谐振子
库仑势 ⟨– 氢原子 ⟩
定理 只要势是球对称的 $V=V(r)$，束缚态有 $|\psi(0)|^2=\frac{m}{2\pi\hbar}\langle \mathrm{d}_rV\rangle$

finite square well
例 一维 $\boxed{\text{有限深方势阱}}$

scattering state
$\boxed{\text{散射态}}$



例 一维方势垒 $V(x)=V_0\ (x\geqslant 0),=0\ (x<0)$，粒子从左向右运动，$E>V_0$
$\psi(x>0)=d\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_1x}+e\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k_1x}$
用波函数连续条件定出透射系数和反射系数

delta-function potential

例 δ 势

定态薛在该点附近积分 $\psi'(0_+)-\psi'(0_-)=\pm\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0)$

例 线性势

Airy function

艾里函数

S-matrix　　localized

散射矩阵 若势是局域的，设入射前 $\psi(x)=a\,\mathrm{e}^{ikx}+b\,\mathrm{e}^{-ikx}$，入射后 $\psi(x)=c\,\mathrm{e}^{ikx}+d\,\mathrm{e}^{-ikx}$，有 $\begin{bmatrix}c\\b\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}S_{11}&S_{12}\\S_{21}&S_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\d\end{bmatrix}$

则 S 为幺正矩阵 概率流守恒 $|a|^2-|b|^2=|c|^2+|d|^2$，对比 $|c|^2+|b|^2=|a|^2+|d|^2$ 可证 $S^\dagger S=I$

态矢

state vector　　Hilbert space

一个物理状态用 态矢 来表示，波函数/态矢存在于 希尔伯特空间 $\mathcal{H}$，任意维复变向量空间 ⟨ 实变 –⟩

(然而算符不是属于态矢空间，$\hat{H}\psi=E\psi$ 中左边的运算是“作用”而不是乘法，所以 ψ 不能约) ⟨ 算符代数 –⟩

$c|\psi\rangle=|\psi\rangle c$，物理上认为 $|\psi\rangle$ 和 $c|\psi\rangle$ 代表同一个态，但为了诠释概率应归一化 → 相位不定性

(不限长度的矢量，数学上叫作射线 ray)

null ket　　additive identity

为了与真空态 $|0\rangle$ 区分 空右矢 $|\emptyset\rangle=0|\psi\rangle\doteq\vec{0}$ (加运算的单位元) (无法归一化?)

bra　　ket　　dual correspondence

左矢 $\langle\psi|$ ($\doteq$ 行矢量) 是 右矢 $|\psi\rangle$ ($\doteq$ 列矢量) 的对偶

operator

可观测量用 算符 表示，右算符总是从左边往右作用 $\hat{F}|\psi\rangle\leftrightarrow\langle\psi|\hat{F}^\dagger$

adjoint　　Hermite conjugate　　anti-linearity

左右算符互称为 伴随，在矩阵表示中就是 厄米共轭 $\hat{F}^\dagger=(\hat{F}^*)^T$，反线性性 $(a_i\hat{F}_i)^\dagger=a_i^*\hat{F}_i^\dagger$，$(\hat{F}^\dagger)^\dagger=\hat{F}$

同矩阵代数，没有乘法交换律 $\hat{F}\hat{X}|\psi\rangle\leftrightarrow\langle\psi|\hat{X}^\dagger\hat{F}^\dagger$

null operator

算符相等 $\hat{X}=\hat{Y}\Leftrightarrow\forall\psi,\hat{X}|\psi\rangle=\hat{Y}|\psi\rangle$，空算符 $\forall\psi,\hat{X}|\psi\rangle=|\emptyset\rangle$

inner product　　positive definite metric

内积 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle=\langle\psi_2|\psi_1\rangle^*\in\mathbb{C}$ → $\langle\psi|\psi\rangle\in\mathbb{R}$，正定规范 $\langle\psi|\psi\rangle\geqslant0$ (仅当空态矢取等号)

indefinite metric

(违背此假设的叫不定规范)

outer product

外积 的结果是算符 $|\psi_1\rangle\langle\psi_2|=\hat{X}$ → $\hat{X}^\dagger=|\psi_2\rangle\langle\psi_1|$

direct product

直积 / 张量积 $|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle=|\psi_1\rangle\otimes|\psi_2\rangle$ (左大右小？)，自身直积记作 $|\psi\rangle^{\otimes n}$

性质 转置，共轭，厄米对直积分配 $(\hat{A}\otimes\hat{B})^\dagger=\hat{A}^\dagger\otimes\hat{B}^\dagger$

推论 厄米/半正定/幺正算符的直积是厄米/半正定/幺正的

reducible representation

ψ_1,ψ_2 必须属于不同的态矢空间，否则无意义 → 可约化表象

associative axiom

结合公理 $(|\psi_1\rangle\langle\psi_2|)|\psi_3\rangle=|\psi_1\rangle(\langle\psi_2|\psi_3\rangle)$

$\langle\psi_1|(\hat{X}|\psi_2\rangle)=(\langle\psi_1|\hat{X})|\psi_2\rangle=\langle\psi_1|\hat{X}|\psi_2\rangle=\langle\psi_2|\hat{X}^\dagger|\psi_1\rangle^*$

($(\hat{X}^\dagger|\psi\rangle)^\dagger=\langle\psi|\hat{X}$ 对非厄米算符照样成立，矩阵元不用变，由矩阵乘法结合律计算结果不变)

orthogonal　　normalize

正交 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle=0$ 归一化 (非空态矢) $|\psi'\rangle=\frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}}|\psi\rangle$ → $\langle\psi'|\psi'\rangle=1$

eigenvalue spectra

⟨ 线代 –⟩ 本征值和本征矢 $\hat{F}|\psi_i\rangle=f_i|\psi_i\rangle$，称为 本征值谱，

spectral decomposition　　operator function

正规算符 $\hat{X}$ 的 谱分解 $\hat{X}=\sum x|x\rangle\langle x|$，定义 算符函数 $f(\hat{X})=\sum f(x)|x\rangle\langle x|$

(正规算符可定义指数，半正定算符可定义平方根，正定算符可定义对数)

向量空间的维度 N 就是独立本征态的数目 (可以是有限维，可数维，连续维...)

欲对角化就是求解久期方程? $|F-\lambda I|=0$ ⟨– 双态 ⟩

厄米算符

Hermite / self-adjoint
厄米算符 / 自伴算符 $\hat{F}^\dagger=\hat{F}$, 平均值总为实数
若 $\hat{A},\hat{B}$ 是厄米算符, 则 $(\hat{A}+\hat{B})^n$ 是厄米算符, $\mathbf{i}[\hat{A},\hat{B}]$ 是厄米算符, 若还对易则 $\hat{A}\hat{B}$ 是厄米算符
normal spectral decomposition theorem
正规算符 $\hat{F}\hat{F}^\dagger=\hat{F}^\dagger\hat{F}$ **谱分解定理** 算符正规 $\Leftrightarrow$ 可对角化 **定理** 正规算符厄米 $\Leftrightarrow$ 本征值为实
positive operator positive definite
半正定算符 $\forall|\psi\rangle,\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle\geqslant 0$, 半正定 $\subset$ 厄米 任意算符可写成 $\hat{A}+\mathbf{i}\hat{B}$, **正定** $\forall|\psi\rangle\neq|\emptyset\rangle,\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle>0$
推论 对任意算符 $\hat{A}$, $\hat{A}^\dagger\hat{A}$ 是半正定的
dynamical ariable
力学量 动力学变量 (几乎所有物理量都是, 在非相对论量子力学中时间不是) 在非相对论量子力学中, 任何力学量（可观测量）的算符总是厄米的。厄米算符最重要的性质是总可以对角化且特征值是实数, 如果不是厄米的会得到复值的测量结果
波粒二象性 $\leftrightarrow$ 不确定度原理
$[\Delta\hat{X},\Delta\hat{Y}]=[\hat{X},\hat{Y}]\rightarrow\langle\Delta\hat{X}\Delta\hat{Y}\rangle=\frac{1}{2}\langle[\hat{X},\hat{Y}]\rangle+\frac{1}{2}\langle\{\Delta\hat{X},\Delta\hat{Y}\}\rangle$, 前一项纯虚, 后一项纯实
uncertainty relation
施瓦茨不等式 $\Delta X^2\Delta Y^2\geqslant\left|\langle\Delta\hat{X}\Delta\hat{Y}\rangle\right|^2\rightarrow$ **不确定度关系** $\Delta X^2\Delta Y^2\geqslant\left(\frac{\langle[\hat{X},\hat{Y}]\rangle}{2\mathrm{i}}\right)^2$
除 $\mathbf{i}$ 是因为分子是虚数, 取等号的条件: 施瓦茨不等式取等号, 纯实部分为零
两个力学量的不确定度由它们的对易和态共同控制
在非相对论量子力学中, $\Delta t=\Delta\hat{F}\Big/\left|\frac{\mathrm{d}\langle\hat{F}\rangle}{\mathrm{d}t}\right|$
位力定理 $2\langle\hat{E}_{\mathrm{k}}\rangle=\langle\vec{r}\cdot\nabla V(\vec{r})\rangle\xlongequal{若齐次}n\langle V(\vec{r})\rangle$ (若 V 是 xyz 的齐次函数)

表象

orthonormal set
定理 厄米算符的本征值为实数, 属于不同本征值的本征矢正交 **正交归一系** $\langle e_i|e_j\rangle=\delta_{ij}$
degenerate
简并 同一本征值下有多个线性独立本征矢 ⟨ 线代 —⟩ 施密特正交化
identity operator completeness relation projection operator
单位算符 I **完备性条件** $\sum_i|e_i\rangle\langle e_i|=I$ **投影算符** $\hat{P}_i=|e_i\rangle\langle e_i|$, 厄米算符, 幂等 $\hat{P}_i^2=\hat{P}_i$,
orthogonal complement
本征值只有 0 或 1, $\hat{P}_i$ 的作用就是只选出第 i 态, 剩下的部分 $\hat{Q}=I-\hat{P}$ 叫作 $\hat{P}$ 的**正交补**
任意态矢可在完备的本征态系上展开 $|\psi\rangle=\sum_i^N c_i|e_i\rangle$, 态系正交则表法唯一
base ket
满足正交归一完备则可作为 **基矢**, 归一化态矢的展开系数 $\sum_i|c_i|^2=1$, 符合概率诠释
expectation value
测量只能得到某本征值, 测得值的平均 $\rightarrow$ **期望值** $\langle F\rangle=\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle,\langle\psi|\psi\rangle=1$ (平均值是确定的, 和经典一致)
variance / dispersion
对于某个特定的态, $\Delta\hat{F}=\hat{F}-\langle F\rangle$, **方差 / 离差** 记 $\Delta F^2=\langle(\Delta\hat{F})^2\rangle=\langle\hat{F}^2-2\hat{F}\langle F\rangle+\langle F\rangle^2\rangle=\langle\hat{F}^2\rangle-\langle F\rangle^2$,
uncertainty
(差方均 = 方均 − 均方) 数 ΔF 为 **不确定度**
representation
表象 “表示为” $\doteq$ **进入表象** 就是完备地乘以投影算符

	连续谱	离散谱
$\hat{X}$ 的本征矢	$\hat{X}\vert x\rangle=x\vert x\rangle, x\in\mathbb{R}$	$\hat{X}\vert x_i\rangle=x_i\vert x_i\rangle$
正交归一性	$\langle x_1\vert x_2\rangle=\delta(x_1-x_2)$	$\langle x_i\vert x_j\rangle=\delta_{ij}$
完备性条件	$\int \mathrm{d}x\vert x\rangle\langle x\vert=I$	$\sum_x\vert x\rangle\langle x\vert=I$
任意态矢内积 $\langle\psi_1\vert\psi_2\rangle=$	$\int \mathrm{d}x\psi_1^*(x)\psi_2(x)$	$\sum_i c_{1i}^*c_{2i}?$
态矢展开	$\vert\psi\rangle=\int \mathrm{d}x\vert x\rangle\langle x\vert\psi\rangle$	$\vert\psi\rangle=\sum_i\vert x_i\rangle\langle x_i\vert\psi\rangle$
在自身表象算符 $f(\hat{X})\doteq$	$f(x), x\in\mathbb{R}$	对角矩阵, $f(X_{ii})=f(x_i)$
平均值 $\langle f(\hat{X})\rangle=\langle\psi\vert f(\hat{X})\vert\psi\rangle$	$\int \mathrm{d}x\psi^*(x)f(x)\psi(x)$	$\sum_i f(x_i)\vert c_i\vert^2$
在 $\hat{X}$ 表象算符 $\hat{F}\doteq$	连续算子	$n\times n$ 方阵, $F_{ij}=\langle x_i\vert\hat{F}\vert x_j\rangle$
在 $\hat{X}$ 表象态 $\vert\psi\rangle\doteq\psi(x)=\langle x\vert\psi\rangle=$	$\int \mathrm{d}x\vert x\rangle\langle x\vert\psi\rangle$	$\psi_i=\langle x_i\vert\psi\rangle$, 右矢为列矢, 左矢为行矢

乘法同矩阵乘法 $\langle e_i|\hat{X}\hat{Y}|e_j\rangle=\sum_k\langle e_i|\hat{X}|e_k\rangle\langle e_k|\hat{Y}|e_j\rangle$,
$|\psi_1\rangle=\hat{X}|\psi_2\rangle\rightarrow\langle e_i|\psi_1\rangle=\langle e_i|\hat{X}|\psi_2\rangle=\sum_j\langle e_i|\hat{X}|e_j\rangle\langle e_j|\psi_2\rangle$

对易

commutator　anti-commutator
对易式 $[\hat{A},\hat{B}]\equiv\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$ 反对易式 $\{\hat{A},\hat{B}\}\equiv\hat{A}\hat{B}+\hat{B}\hat{A}$ **推论** $[\hat{A},\hat{B}]^\dagger=[\hat{B}^\dagger,\hat{A}^\dagger]$

⟨ 分析力学 –⟩ 对易式等于泊松括号乘 $\mathrm{i}\hbar$, 故 $\hbar\rightarrow 0$ 极限下所有量都对易

simultaneous diagonalization theorem
同时对角化定理 $\hat{A},\hat{B}$ 为厄米算符, 则 ∃ 表象(标准正交基) 使 $\hat{A},\hat{B}$ 都是对角的 ⇔ $[\hat{A},\hat{B}]=0$

定理 若 $\hat{X}$ 没有简并, 则和 $\hat{X}$ 对易的算符在 $\hat{X}$ 表象下是对角的 $\langle x_i|[\hat{X},\hat{Y}]|x_j\rangle=(x_i-x_j)\langle x_i|\hat{Y}|x_j\rangle=0$

simutaneous eigenket
算符对易 ⇔ 有共同本征矢 $|x_i,y_i\rangle$ 必要性: $[\hat{X},\hat{Y}]|\psi\rangle=\sum_i(x_iy_i-y_ix_i)|x_i,y_i\rangle=0$

充分性: $\hat{X}\hat{Y}|x\rangle=\hat{Y}\hat{X}|x\rangle=x\hat{Y}|x\rangle$ 说明 $\hat{Y}|x\rangle$ 也是 $\hat{X}$ 的属于 x 的本征矢, 只能差常数 y

对易算符, 一个取本征态, 另一个不一定能确定态, 例如 $\hat{L}^2$ 确定时 $\hat{L}_z$ 不能确定, 有简并

对于某些特殊的 $|\psi\rangle$ (甚至某子空间, 如 s 态 $l=0$), 有可能不对易算符也以它为共同本征态 ($[\hat{l}_x,\hat{l}_y]|\psi\rangle=0$)

Complete Set of Commuting Observables
对易可观测量完全集 一组力学量彼此独立, 两两对易, 有共同本征矢, 则给定一组量子数 (本征值无量纲化) 后, 可完全确定一个态 (常用于一个力学量存在简并, 用其它量来确定状态, 先测 $\hat{X}$ 再测 $\hat{Y}$ 不会破坏 $\hat{X}$ 的状态)

例如 $[\hat{x},\hat{y}]=0, |\vec{r}\rangle$ 是 $\hat{x},\hat{y},\hat{z}$ 的共同本征矢, $\hat{x}|\vec{r}\rangle=x|\vec{r}\rangle$, 记位矢算符 $\hat{\vec{r}}=(\hat{x},\hat{y},\hat{z}), [\hat{x}_i,\hat{p}_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij}$

(目前的理解: 矢量算符只是其分量的打包写法, 不能说矢量算符是个什么空间)

电子自旋

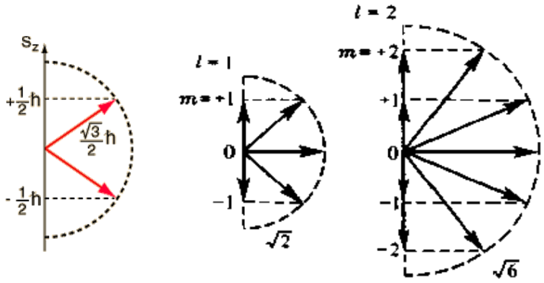
Stern-Gerlach experiment
施特恩–格拉赫实验 加热射出一束中性银($4\mathrm{d}^{10}5\mathrm{s}^1$ 核 $\frac{1}{2}^-$) 原子 ($\sim10^3$ m/s),
沿 y 方向通过 z 方向有梯度的磁场, 原子束分裂成分立的两束, 迫使人们假设电子除轨道角动量外还有内部转动自由度

⟨– 狄方程 ⟩ (自由电子束自旋和轨道磁矩带来的分裂相当, 朗道能级简并?)

spin　intrinsic　extrinsic
自旋 电子内禀的角动量 (和电子本身的空间转动无关, 不能分解成电子的组份的外在轨道角动量)

$\vec{F}=-\nabla V=\mu_z\partial_z B_z\vec{e_z},\ \vec{\mu}\propto\vec{S}$ (第 47 个电子的自旋)

角动量 $\vec{l}=m_e r^2\omega$ 守恒, 磁矩 $\vec{\mu}=\frac{-e}{T}\pi r^2=\frac{-e}{2m_e}\vec{l}$



orbit

电子轨道磁矩 $\vec{\mu}_l=-\mu_B\frac{\vec{l}}{\hbar}$ Bohr magneton **玻尔磁子** $\mu_B=\frac{e\hbar}{2m_e}$

spin

电子自旋磁矩 $\vec{\mu}_s=-2\mu_B\frac{\vec{s}}{\hbar}$

Landé g factor

朗德 g 因子 $\mu_s=g_s\sqrt{s(s+1)}\mu_B,\ g_e\approx-2.002\approx g_\mu, g_p\approx 5.586, g_n\approx-3.826,\ \mu_l=g_l\sqrt{l(l+1)}\mu_B, g_l=1$

sequential Stern-Gerlach experiment

级联施特恩－格拉赫实验 取 S_z^+ 束后测 S_x 得 $S_x^\pm$ (按经典应都得零),

取 S_z^+ 后测 S_x 并取 S_x^+ 后又测 S_z 得 $S_z^\pm$ → $\hat{S}_x,\hat{S}_z$ 不能同时测准

自旋算符

(用旋转变换的性质来定义 (作为生成元), 与 $\vec{r}\times\vec{p}$ 无关)

简并度为 $2s+1$ → $s=\frac{1}{2}\hbar$

假设基本对易关系 $[\hat{S}_x,\hat{S}_y]=\mathrm{i}\hbar\hat{S}_z$ 也适用于自旋 → eng **自旋角动量算符** $\hat{\vec{S}}=\frac{\hbar}{2}\hat{\vec{\sigma}}$ (无量纲了)

任何表象上 $\hat{S}_x^2=\hat{S}_y^2=\hat{S}_z^2=\frac{1}{4}\hbar^2$, 定义 $\hat{\vec{S}}\cdot\hat{\vec{S}}=\hat{\vec{S}}^2=\frac{3}{4}\hbar^2$ (对于更高自旋 $\hat{\vec{S}}^2$ 不是常数, 但仍有 $[\hat{\vec{S}}^2,\hat{S}_i]=0$)

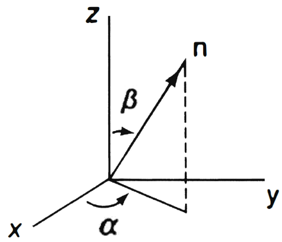
Pauli matrix

泡利矩阵 $\hat{\sigma}_z\doteq\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}$, (右手系) 取 $\hat{\sigma}_x\doteq\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}$, $|s_x^\pm\rangle\doteq\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\\pm1\end{bmatrix}$, 相应 $\hat{\sigma}_y\doteq\begin{bmatrix}0&-\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0\end{bmatrix}$, $|s_y^\pm\rangle\doteq\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1\\\pm\mathrm{i}\end{bmatrix}$

(这样的态矢就叫 two component spinor)

$\hat{\sigma}_i^2=1$ → 正则反对易 $\{\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j\}=2\delta_{ij}$ (仅对于自旋半整数)

$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=\mathrm{i}\hat{\sigma}_z$ → $[\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y]=2\mathrm{i}\hat{\sigma}_z$, 又 $[\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_x]=0$ → $[\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j]=2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$ 或写作 $\hat{\vec{\sigma}}\times\hat{\vec{\sigma}}=2\mathrm{i}\hat{\vec{\sigma}}$



推论 $(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{a})(\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{b})=\sum_{i,j}(\frac{1}{2}\{\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j\}+\frac{1}{2}[\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j])a_ib_j=\vec{a}\cdot\vec{b}+\mathrm{i}\hat{\vec{\sigma}}\cdot(\vec{a}\times\vec{b})$

($\vec{p}\times\vec{p}=0$, 但注意 $\vec{l}\times\vec{l}=\mathrm{i}\hbar\vec{l}$)

记 $\hat{\sigma}_n=\hat{\vec{\sigma}}\cdot\vec{e_n}=\hat{\sigma}_x n_x+\hat{\sigma}_y n_y+\hat{\sigma}_z n_z$

若取 $\vec{e_n}=(\cos\alpha\sin\beta,\sin\alpha\sin\beta,\cos\beta)$, 则 $\hat{\sigma}_n$ 本征值为 ±1

$\hat{\sigma}_z$ 表象本征矢为 $|\sigma_n^+\rangle\doteq\begin{bmatrix}\cos\frac{\beta}{2}\\\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\sin\frac{\beta}{2}\end{bmatrix}$, $|\sigma_n^-\rangle\doteq\begin{bmatrix}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\sin\frac{\beta}{2}\\-\cos\frac{\beta}{2}\end{bmatrix}$

直接求 $\begin{bmatrix}\cos\beta&\sin\beta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}\\\sin\beta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}&-\cos\beta\end{bmatrix}$ 的本征值, 或用旋转变换 $\chi_+\doteq\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\sigma}_z\alpha/2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\sigma}_y\theta/2}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$

Bloch

布洛赫球 ⟨— 量子信息 ⟩

(泡利矩阵可由实验分裂两束等强得出, 进一步推广可用升降算符)

$s=1$ 的自旋算符为:

不同粒子的 $\hat{\sigma}$ 对易, 即使有耦合 $\hat{H}+=\vec{s}_1\vec{s}_2$ 态矢空间是张量积而成

自旋进动

以电子在匀强 B_z 为例, $\hat{H}=-\vec{\mu}\cdot\vec{B}=\frac{eB_z}{m_e}\hat{s}_z=\omega\hat{s}_z$ (why mu.B? griffiths 电磁学)

光子自旋

SG 实验可用经典电磁波的偏振类比: $S_z^\pm$ 是 0°,90° 线偏, $S_x^\pm$ 是 45°,135° 线偏, $S_y^\pm$ 是 L,R 圆偏

虽然光子 $s=1$, 但光子由于始终为光速,0 偏振态 (即纵波模式) 看不到

$$\hat{S}_z\doteq\hbar\begin{bmatrix}1&&\\&0&\\&&-1\end{bmatrix},\hat{S}^+\doteq\sqrt{2}\hbar\begin{bmatrix}0&1&0\\0&0&1\\0&0&0\end{bmatrix},\hat{S}^-\doteq\sqrt{2}\hbar\begin{bmatrix}0&0&0\\1&0&0\\0&1&0\end{bmatrix},\hat{S}_x\doteq\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{bmatrix},\hat{S}_y\doteq\frac{\hbar}{\sqrt{2}\mathrm{i}}\begin{bmatrix}0&1&0\\-1&0&1\\0&-1&0\end{bmatrix}$$

可以验证 $(G_i)_{jk}=-\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}$ 满足角动量对易关系，故是光子自旋的另一种表象

推论 $\hat{\vec{S}}^2=2I, \hat{S}_i(\hat{S}_i+\hbar I)(\hat{S}_i-\hbar I)=0, \hat{S}_i^n=\hat{S}_i^{n-2}\ (n\geqslant 3)$
$\{\hat{S}_i,\hat{S}_j\}\neq 0, \hat{S}_i\hat{S}_j\hat{S}_i=0, \{\hat{S}_i,\hat{S}_j^2\}=\hat{S}_i\ (i\neq j)$,
"四维空间微分转动算符"! $\hat{R}\psi(\vec{x})=\exp(-\delta\phi(\vec{n}\times\vec{x})\cdot\nabla)\psi(\vec{x})$
四维空间不是向量积，**SO**(4) 空间转动群的样子应该是 $\exp(-\frac{1}{2}\sum_{i=1}^3\sum_{j=1}^3\theta_{ij}\omega_{ij})$

轨道角动量

定义 $\vec{l}=\vec{r}\times\vec{p}\doteq-\mathrm{i}\hbar\vec{r}\times\nabla$ (分量形式 $\hat{l}_z=\hat{x}\hat{p}_y-\hat{y}\hat{p}_x$)，可以证明 $[\hat{l}_i,\hat{l}_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{l}_k$,
$(1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{l}_z\delta\phi)|x,y,z\rangle=|x-y\delta\phi,y+x\delta\phi,z\rangle$，轨道角动量算符的坐标表示 $\langle\vec{r}|\hat{l}_z|\psi\rangle=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}\langle\vec{r}|\psi\rangle$,
$\frac{\partial}{\partial x}=\frac{\partial r}{\partial x}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial\phi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial\phi}$，注意 $\frac{\partial r}{\partial x}\neq(\frac{\partial x}{\partial r})^{-1}$ $\hat{l}_x=\mathrm{i}\hbar(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}), \hat{l}_y=\mathrm{i}\hbar(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi})$
$\hat{l}^+=\hbar\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}(\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}), \hat{l}^-=\hbar\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}(-\frac{\partial}{\partial\theta}+\mathrm{i}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}), \vec{l}^2=-\hbar^2(\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2})$
$\vec{l}^2=\vec{r}^2\vec{p}^2-(\vec{r}\cdot\vec{p})^2+\mathrm{i}\hbar\vec{r}\cdot\vec{p}\doteq r^2\vec{p}^2+\hbar^2(r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}+2r\frac{\partial}{\partial r})$

〈数理一〉分离变量法解出 $\hat{l}_z$ 的本征值 $m\hbar$，本征函数 $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}$，**磁量子数** (magnetic quantum number) $m=0,\ldots,\pm l$
$\vec{l}^2$ 的本征值 $l(l+1)\hbar^2$，本征函数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$，**角量子数** (azimuthal quantum number) l 只能为非负整数
(半整数的 m 导致波函数转 2π 变负，不单值，另外可从轨道角动量升降算符推出半整数球谐函数解矛盾)
可以证明对有心势 $[\hat{L}^2,\hat{L}_z]=0,\ [\hat{H},\hat{L}^2]=0,\ [\hat{H},\hat{L}_z]=0$
$\hat{L}_z=\mathrm{i}\hbar(\hat{a}_x\hat{a}_y^\dagger-\hat{a}_y\hat{a}_x^\dagger)$ 证明见冷原子作业 2.4
动量表象中的角动量算符矩阵表示 $(\hat{L}_x)_{\vec{p}\vec{p}'}=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}(y\hat{p}_z-z\hat{p}_y)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\vec{p}'\cdot\vec{r}/\hbar}\mathrm{d}\vec{r}=\mathrm{i}\hbar(p_z\partial_{p_y}-p_y\partial_{p_z})\delta(\vec{p}-\vec{p}')$

算符矢量及对易

$[\nabla,r]=(\nabla r)=\vec{e_r}\rightarrow\frac{1}{2}[\nabla^2,r]=\frac{1}{2}(\nabla\cdot(\vec{e_r}\psi)+\vec{e_r}\cdot\nabla\psi)=\frac{1}{2}(2\vec{e_r}\cdot\nabla+(\nabla\cdot\vec{e_r}))\psi=\partial_r+\frac{1}{r}$
而 $[\nabla,\vec{r}]=(\vec{e_i}\vec{e_i}+\vec{e_j}\vec{e_j}+\vec{e_k}\vec{e_k})$ 是张量，∇ 和这张量做点乘 $\frac{1}{2}[\nabla^2,\vec{r}]=\nabla$
定义径向动量算符 $\hat{p}_r=\frac{1}{2}(\vec{p}\cdot\vec{e_r}+\vec{e_r}\cdot\vec{p})=-\mathrm{i}\hbar\left(\partial_r+\frac{1}{r}\right)$，厄米，有 $[\hat{r},\hat{p}_r]=\mathrm{i}\hbar$
(还有一项 $+1/r^2$ 呢?) $\hat{p}_r^2=-\hbar^2\frac{1}{r^2}\partial_r(r^2\partial_r)$，$\hat{\vec{p}}^2=\frac{1}{r^2}\vec{l}^2+\hat{p}_r^2$ (所以 $\vec{l}^2$ 很像 ∇^2 的角度部分)

角动量算符

已知 $\hat{\sigma}^\pm=\frac{1}{2}(\hat{\sigma}_x\pm\mathrm{i}\hat{\sigma}_y), \hat{\sigma}^+\doteq\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix}, \hat{\sigma}^-\doteq\begin{bmatrix}0&0\\1&0\end{bmatrix}, \hat{\sigma}_x^2=\hat{\sigma}_y^2=\hat{\sigma}_z^2=I$,
得 $\hat{\sigma}^+\hat{\sigma}^-=\frac{1}{4}(2I-\mathrm{i}[\hat{\sigma}_x,\hat{\sigma}_y])=\frac{1}{2}(I+\hat{\sigma}_z),\ \hat{\sigma}^-\hat{\sigma}^+=\frac{1}{2}(I-\hat{\sigma}_z)\rightarrow\{\hat{\sigma}^-,\hat{\sigma}^+\}=I$ (费米)
不同粒子的泡利矩阵对易
一般地
$[\hat{J}_x,\hat{J}_y]=\mathrm{i}\hbar\hat{J}_z$，引入**升降算符** $\hat{J}^\pm=\hat{J}_x\pm\mathrm{i}\hat{J}_y\rightarrow[\hat{J}^+,\hat{J}^-]=2\hbar\hat{J}_z, [\hat{J}_z,\hat{J}^\pm]=\pm\hbar\hat{J}^\pm, [\vec{J}^2,\hat{J}^\pm]=0$
由于 $[\vec{J}^2,\hat{J}_z]=0$，设 $\hat{J}_z$ 的本征值为 m，记 $|jm\rangle$ 为 $\vec{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 的共同本征矢
$\vec{J}^2=\hat{J}^+\hat{J}^-+\hat{J}_z^2-\hbar\hat{J}_z=\hat{J}^-\hat{J}^++\hat{J}_z^2+\hbar\hat{J}_z$ 在 m 取到最大值 j 时 $\hat{J}^+|jj\rangle=0$ $\vec{J}^2$ 的本征值为 $j(j+1)\hbar^2$,
总角量子数 j 可为零，正整数，半整数，简并度为 $2j+1$，**总磁量子数** $m=-j,-j+1,\ldots,j$
$\hat{J}^\pm|jm\rangle=\hbar\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}|jm\pm1\rangle=\hbar\sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}|jm\pm1\rangle$
对任意自旋均可用上式推出升降算符，例如 $S=\frac{3}{2}, \hat{S}_z=\mathrm{diag}\begin{bmatrix}3/2&1/2&-1/2&-3/2\end{bmatrix}$

$$\hat{S}^+=\begin{bmatrix}0&\sqrt{3}&0&0\\0&0&2&0\\0&0&0&\sqrt{3}\\0&0&0&0\end{bmatrix}, \hat{S}^-=\begin{bmatrix}0&0&0&0\\\sqrt{3}&0&0&0\\0&2&0&0\\0&0&\sqrt{3}&0\end{bmatrix}, \hat{S}_x=\frac{1}{2}\begin{bmatrix}0&\sqrt{3}&0&0\\\sqrt{3}&0&2&0\\0&2&0&\sqrt{3}\\0&0&\sqrt{3}&0\end{bmatrix}, \hat{S}_y=\frac{1}{2\mathrm{i}}\begin{bmatrix}0&\sqrt{3}&0&0\\-\sqrt{3}&0&2&0\\0&-2&0&\sqrt{3}\\0&0&-\sqrt{3}&0\end{bmatrix}$$

$S=2, \hat{S}_z=\mathrm{diag}\begin{bmatrix}2&1&0&-1&-2\end{bmatrix}, \hat{S}^+=$偏右上$\begin{bmatrix}2&\sqrt{6}&\sqrt{6}&2\end{bmatrix}, \hat{S}^-=$偏左下$\begin{bmatrix}2&\sqrt{6}&\sqrt{6}&2\end{bmatrix}$,

角动量耦合

两个(任意类型) 角动量合成 $\vec{j}=\vec{j}_1+\vec{j}_2$, 可以证明总角动量 $[\hat{j}_i,\hat{j}_j]=\mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{j}_k$ 是个角动量算符

$[\hat{j}_{1i},\hat{j}_{2j}]=0$ 即 $\vec{j}_1,\vec{j}_2$ 有共同本征矢

uncoupled

非耦合表象 $|j_1m_1j_2m_2\rangle=|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$, 但 $\vec{j}^2$ 在这表象不对角 $[\vec{j}^2,\hat{j}_{iz}]\neq 0$, 不便求本征值

(耦合表象才是总角动量的本征态)

例 $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{H}_{\text{interaction}}$, $\hat{H}_0$ 可用非耦合表象, $\hat{H}_{\text{int}}$ 含有 $\vec{j}_1\cdot\vec{j}_2$ 项, 但仍然可在 $\hat{H}_0$ 的非耦合表象展开

$\vec{j}^2=\frac{1}{2}(\hat{j}^+\hat{j}^-+\hat{j}^-\hat{j}^+)+\hat{j}_z^2$ 推广 $\vec{j}_1\cdot\vec{j}_2=\hat{j}_{1z}\hat{j}_{2z}+\frac{1}{2}(\hat{j}_1^+\hat{j}_2^-+\hat{j}_1^-\hat{j}_2^+)$ → $\langle m_1m_2|\vec{j}_1\cdot\vec{j}_2|m_1m_2\rangle=m_1m_2\hbar^2$

⟨ 凝态 –BEC trap⟩

耦合表象 $|j_1j_2jm\rangle=\sum\limits_{m_1=-j_1}^{j_1}\sum\limits_{m_2=-j_2}^{j_2}C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}|j_1m_1j_2m_2\rangle$

Clebsch-Gordan coefficient

表象变换 **CG 系数** $C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}=\langle j_1m_1j_2m_2|j_1j_2jm\rangle\in\mathbb{R}$

$j_1=\frac{1}{2},j_2=\frac{1}{2}$

m	m_1,m_2	$j=1$	$j=0$
1	$\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	1	-
0	$\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$
0	$-\frac{1}{2},\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$

$j_1=1,j_2=\frac{1}{2}$

m	m_1,m_2	$j=3/2$	$j=\frac{1}{2}$
3/2	$1,\frac{1}{2}$	1	-
$\frac{1}{2}$	$1,-\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$
$\frac{1}{2}$	$0,\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$

$j_1=1,j_2=1$

m	m_1,m_2	$j=2$	$j=1$	$j=0$
2	1,1	1	-	-
1	1,0	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	-
1	0,1	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$	-
0	1,−1	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$
0	0,0	$\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$
0	−1,1	$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$

$m<0$ 的可从对称性关系 $C^{j-m}_{j_1-m_1j_2-m_2}=(-1)^{j_1+j_2-j}C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}$ 得出

(只有满足三角形法则的系数不为零: $|j_1-j_2|<j<j_1+j_2, |m_i|\leqslant j_i, m=m_1+m_2$)

3-j symbol

更方便的是 **3 j 符号** $\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{bmatrix}=\dfrac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}}\langle j_1m_1j_2m_2|j_3-m_3\rangle$ $(j_3=j, m_3=-m)$

用于计算下列形式球谐函数积分

$\int Y_{l_1m_1}(\theta,\varphi)Y_{l_2m_2}(\theta,\varphi)Y_{l_3m_3}(\theta,\varphi)\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\varphi=\sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi}}\begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{bmatrix}$

全同多粒子体系 ⟨– 自旋耦合 ⟩

3 个角动量耦合: **6 j 符号**, 4 个角动量耦合: **9 j 符号**

幺正算符

unitary

幺正 / 酉算符 $\hat{U}^\dagger=\hat{U}^{-1}$, 平均值总为纯虚数, 本征值模为 1, 即均可写成 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta},\theta\in\mathbb{R}$ 形式

幺正算符是正规算符

representaion transformation matrix

表象变换算符 从 $\hat{X}$ 变到 $\hat{Z}$, $S^\dagger_{ij}=\langle z|x\rangle$, 幺正矩阵, 非厄米

$\psi(z)=S^\dagger\psi(x)$, $\hat{F}_{(z)}=S^\dagger\hat{F}_{(x)}S$ $\langle z_i|\hat{F}|z_j\rangle=\langle z_i|x_i\rangle\langle x_i|\hat{F}|x_j\rangle\langle x_j|z_j\rangle$

连续表象间变换就是用本征波函数 $\langle x|\psi\rangle=\int\mathrm{d}p\,\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle$ → $\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px}\psi(p)$ (恰好是傅变换)

(一般只有不对易 (有关系) 的算符间才做表象变换?)

linear

⟨– 线代 ⟩ **线性性** $\mathrm{tr}(\hat{X}+\hat{Z})=\mathrm{tr}(\hat{X})+\mathrm{tr}(\hat{Z})$, $\mathrm{tr}(a\hat{X})=a\,\mathrm{tr}(\hat{X})$

cyclic

循环性 $\mathrm{tr}(\hat{X}\hat{Z})=\mathrm{tr}(\hat{Z}\hat{X})$ → $\mathrm{tr}(S^\dagger\hat{F}S)=tr(\hat{F})$, **常用** $\mathrm{tr}(|z\rangle\langle x|)=\langle x|z\rangle$, $\mathrm{tr}(\hat{F}|\psi\rangle\langle\psi|)=\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle$

trace inner product / Hilbert–Schmidt inner product

* 可以证明 **迹内积** $(\hat{A},\hat{B})\equiv\mathrm{tr}(\hat{A}^\dagger\hat{B})$ 满足内积空间要求

推论 表象变换不改变可观测量(内积, 平均值, 分布, 归一性, 本征值, 迹, 行列式),

不改变算符作用式(加, 乘, 对易关系) $([\hat{A}_{(x)},\hat{B}_{(x)}]=\hat{C}_{(x)}$ → $[\hat{A}_{(z)},\hat{B}_{(z)}]=\hat{C}_{(z)})$

→ 幺正等价的可观测量有相同的本征值谱

算符函数

算符的逆

若 $\hat{A}^{-1}$ 存在, λ 为小量, 则 $(\hat{A}-\lambda\hat{B})^{-1}=(1-\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B})^{-1}\hat{A}^{-1}=\sum_{n=0}^{\infty}(\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B})^n\hat{A}^{-1}$

$=\hat{A}^{-1}+\lambda\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\lambda^2\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A}^{-1}+\ldots$ (场论?)

算符的指数

平移变换算符 $\psi'=\psi(x+\mathrm{d}x)=\hat{U}\psi(x)$ (x 是经典数, 不是算符)

定义 $\mathrm{e}^{\hat{A}}=\sum_{i=0}^{\infty}\frac{\hat{A}^n}{n!}$ (收不收敛另说) (Q: 量纲怎么算?)

$[\hat{x},f(\hat{x},\hat{p})]=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial f}{\partial\hat{p}}, [\hat{p},f(\hat{x},\hat{p})]=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial f}{\partial\hat{x}}$

常用 $(1+\hat{T})\hat{A}(1-\hat{T})=\hat{A}+[\hat{T},\hat{A}]+$高阶小 → BCH 公式 (Baker Campbell Hausdorff formula) $\mathrm{e}^{\hat{T}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\hat{T}}=\hat{A}+[\hat{T},\hat{A}]+\frac{1}{2!}[\hat{T},[\hat{T},\hat{A}]]+\ldots$

定义函数 $\hat{A}(\lambda)=\mathrm{e}^{\lambda\hat{T}}\hat{A}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{T}}$, 从 $\lambda=0$ 泰勒展开 $\hat{A}(\lambda)=\sum\frac{1}{n!}\hat{A}^{(n)}(\lambda)|_{\lambda=0}\lambda^n$, $\hat{A}(\lambda)|_{\lambda=0}=\hat{A}$,
$\mathrm{d}_\lambda\hat{A}(\lambda)|_{\lambda=0}=(\mathrm{e}^{\lambda\hat{T}}\hat{T}\hat{A}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{T}}-\mathrm{e}^{\lambda\hat{T}}\hat{A}\hat{T}\mathrm{e}^{-\lambda\hat{T}})|_{\lambda=0}=[\hat{T},\hat{A}]$

推论 $\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}=\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$, $\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}=\mathrm{e}^{[\hat{A},\hat{B}]}\mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{\hat{A}}$, 注意 $[\hat{A},\hat{B}]=0\Rightarrow\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}=\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}}$ 的逆命题不成立

若 $[\hat{A},\hat{B}]=C$ (常数) , 则 $[\hat{A},\mathrm{e}^{\hat{B}}]=C\,\mathrm{e}^{\hat{B}}$

(从肩膀上求导下来, 不一定落在左边或右边...)

空间平移

infinitesimal translation

微分平移算符 $\hat{T}(\mathrm{d}\vec{r})|\vec{r}\rangle=|\vec{r}+\mathrm{d}\vec{r}\rangle$

$\hat{T}(\mathrm{d}\vec{r})|\psi\rangle=\iiint\mathrm{d}^3r|\vec{r}+\mathrm{d}\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle=\iiint\mathrm{d}^3r|\vec{r}\rangle\langle\vec{r}-\mathrm{d}\vec{r}|\psi\rangle$

前者是主动变换, 波函数向前, 后者是被动变换, 坐标系向后

由于 $\hat{T}(\vec{0})=I,\hat{T}(-\mathrm{d}\vec{r})=\hat{T}^{-1}(\mathrm{d}\vec{r})=\hat{T}^\dagger(\mathrm{d}\vec{r})$, 故构造 $\hat{T}=I-\mathrm{i}\hat{\vec{k}}\cdot\mathrm{d}\vec{r}$, 其中 $\hat{\vec{k}}$ 厄米

$[\hat{\vec{r}},\hat{T}]|\psi\rangle=\iiint\mathrm{d}^3r(\vec{r}+\mathrm{d}\vec{r}-\vec{r})|\vec{r}+\mathrm{d}\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle\approx\mathrm{d}\vec{r}|\psi\rangle$ 通过与 $\hat{\vec{r}}$ 的对易关系发现 $\hat{\vec{k}}=\hat{\vec{p}}/\hbar$

(此处太假, 另寻书吧) 〈分析力学 – 正则变换〉

有限的平移 $\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot\triangle\vec{r}\right)$, 从 $[\hat{T}(\triangle\vec{x}),\hat{T}(\triangle\vec{y})]=0$ 可推出 $[\hat{p}_x,\hat{p}_y]=0$

$\hat{T}(\triangle\vec{r})|\vec{p}\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\triangle\vec{r}}|\vec{p}\rangle$ 只是变了相位, 故 $|p\rangle$ 是 $\hat{T}$ 的本征态, $|x\rangle$ 不是

时间平移

(非相对论量子力学, 时间只是参数, 不是算符)

时间平移变换 $|\psi,t\rangle=\hat{U}(t,t_0)|\psi,t_0\rangle,\hat{U}(0,0)=I$

若
- $\hat{H}$ 不含时间 (如恒磁场) $\hat{U}(t,t_0)=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)\right)$
- $\hat{H}$ 含时间但对易 (磁场强度时变但方向不变) $\hat{U}(t,t_0)=\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^t\hat{H}(\tau)\mathrm{d}\tau\right)$
- 不同时间的 $\hat{H}$ 不对易 (磁场强度和方向都变) 戴森级数

Dyson series

戴森级数 $\hat{U}(t,t_0)=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^t\mathrm{d}t_1\hat{H}(t_1)+(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar})^2\int_{t_0}^t\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)+\cdots$

$$=1+\sum_{n=1}^{\infty}(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar})^n\int_{t_0}^t\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2)\cdots\hat{H}(t_n)$$

quantum dynamics

量子动力学

Schrödinger equation

薛定谔方程 $\mathrm{i}\hbar\partial_t|\psi,t\rangle=\hat{H}|\psi,t\rangle$

海森堡图景

Ehrenfest theorem

可以在薛定谔图景下证明 爱伦费斯特定理

Hellman-Feynman theorem

赫尔曼费曼定理 λ 是某参数, $\partial_\lambda E_n(\lambda)=\langle\psi_n|\partial_\lambda\hat{H}(\lambda)|\psi_n\rangle$

例 $\hat{H}_0=\frac{\hat{p}_x^2}{2m}+V(x)$, 求 $\hat{H}=\hat{H}_0+\frac{\lambda\hat{p}_x}{m}$ 的能量本征值 $E_n=E_n^{(0)}-\frac{\lambda^2}{2m}$

设 ψ_n 是 $\hat{H}$ 的本征函数, $\partial_\lambda E_n(\lambda)=\langle\psi_n|\frac{\lambda\hat{p}_x}{m}|\psi_n\rangle=\mathrm{i}\hbar\langle\psi_n|([\hat{x},\hat{H}]-\frac{\lambda}{m})|\psi_n\rangle=-\frac{\lambda}{m}$

例 若两个势阱恒有 $V_1(x)\leqslant V_2(x)$, 则 $E_{1n}\leqslant E_{2n}$ 构造 $\hat{H}(\lambda)=\frac{\hat{p}^2}{2m}+(1-\lambda)V_1+\lambda V_2$, 则 $\partial_\lambda E_n=\langle V_2-V_1\rangle\geqslant 0$

eng

海森堡方程 $\frac{\mathrm{d}\hat{F}(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{F},\hat{H}]+\frac{\partial\hat{F}(t)}{\partial t}$

守恒量在两图景表达式相同 $\hat{F}(t)=\hat{U}^\dagger\hat{F}\hat{U}$

空间转动

$\hat{\sigma}_n^2=I$, 偶数次幂是常数, 相当于欧拉公式中的虚数单位, 泰勒展开即证 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{\sigma}_n\theta}=I\cos\theta+\mathrm{i}\hat{\sigma}_n\sin\theta$

自旋 $s=\frac{1}{2}$ 的粒子绕 $\vec{e_n}$ 方向的轴转 θ, $\hat{R}_n(\theta)=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{S}_n\theta}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\sigma}_n\theta/2}=I\cos(\frac{1}{2}\theta)-2\mathrm{i}\frac{\hat{S}_n}{\hbar}\sin(\frac{1}{2}\theta)$

因此自旋 $\frac{1}{2}$ 转 2π 弧度后波函数反号, 需 4π 的周期才能复原

对于 $s=1$, $(\frac{\hat{S}_i}{\hbar})^n=(\frac{\hat{S}_i}{\hbar})^{n-2}, n\geqslant 3\rightarrow\hat{R}_i(\theta)=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{S}_i\theta}=I-\mathrm{i}\frac{\hat{S}_i}{\hbar}\sin\theta-(\frac{\hat{S}_i}{\hbar})^2(1-\cos\theta)$, 故转 2π 即复原

对于一般的 j, 转 2π 后乘相位 $d^j_{mm}=(-1)^{2j}$, 故自旋整数复原, 自旋为零意味着粒子球对称

$[\hat{S}_z,[\hat{S}_z,\hat{S}_x]]=\hbar^2\hat{S}_x$ $\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{S}_z\theta}\hat{S}_x\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{S}_z\theta}=\hat{S}_x\cos\theta-\hat{S}_y\sin\theta$ 同经典图像

〈理力 — 欧拉角〉任意三维空间转动 $\hat{R}(\alpha,\beta,\gamma)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\hat{J}_{z''}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\hat{J}_{y'}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\hat{J}_z}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha\hat{J}_z}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\hat{J}_y}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\hat{J}_z}$

Wigner D-matrix

维格纳 D 矩阵 $\hat{R}$ 在 $|jm\rangle$ 表象的矩阵元, $D^{j'j}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=\langle j'm'|\hat{R}(\alpha,\beta,\gamma)|jm\rangle$, 所有 $j'\neq j$ 的阵元为零

故为分块对角矩阵, 同一 j 下有 $(2j+1)$ 维子空间,

$D^j_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(m'\alpha+m\gamma)}d^j_{m'm}(\beta)$, $d^j_{m'm}(\beta)=\langle jm'|\mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_y}|jm\rangle$

$j=\frac{1}{2}$, $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{J}_y\beta}=\cos(\beta/2)-\mathrm{i}\hat{\sigma}_y\sin(\beta/2)\rightarrow d^{1/2}_{1/2,1/2}=\cos(\beta/2)$, $d^{1/2}_{1/2,-1/2}=-\sin(\beta/2)$

$d^1_{1,1}=\frac{1}{2}(1+\cos\beta)$, $d^1_{1,0}=-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\beta$, $d^1_{1,-1}=\frac{1}{2}(1-\cos\beta)$, $d^1_{0,0}=\cos\beta$

矩阵这么对称 $d^j_{m',m}=(-1)^{m-m'}d^j_{m,m'}=d^j_{-m,-m'}$

球谐函数就是轨道角动量本征态在球坐标系下的表示 $Y_{lm}(\theta,\phi)=\langle r,\theta,\phi|lm\rangle$

有效势 已知 $\theta=0$ 处, $m\neq 0$ 的 $Y_{lm}(0,\phi)=0$, 有 $Y_{lm}(0,\phi)=\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}}\delta_{m0}$

按类似 $\hat{\sigma}_n$ 的方法, 球坐标系先绕 y 轴转 θ, 再绕 z 轴转 ϕ, 得 $|r,\theta,\phi\rangle=\hat{R}_z(\phi)\hat{R}_y(\theta)|r,0,\phi\rangle\rightarrow$

$$Y^*_{lm}(\theta,\phi)=\langle lm|r,\theta,\phi\rangle=\sum_{m'}\langle lm|\hat{R}_z(\phi)\hat{R}_y(\theta)|lm'\rangle\langle lm'|r,0,\phi\rangle=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\phi}d^l_{m0}(\theta)\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}}\rightarrow d^l_{00}(\theta)=P_l(\cos\theta)$$

$D^l_{-ms}(\alpha,\beta,-\gamma)=(-1)^m\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}{}_sY_{lm}(\beta,\alpha)\mathrm{e}^{\mathrm{i}s\gamma}$

空间反射

(经典力学无宇称这一力学量, 因为都是连续变换, 不能从 r 突变到 $-r$)

例 若势有宇称, 则体系宇称守恒

例 球谐函数宇称为 $(-1)^l$

时间反演

守恒律

定态 能量本征态, 体系能量取确定值

在定态上, 任何力学量(只要不显含时间, 不管是不是守恒量) 的平均值和取值的概率分布都不随时间变化 (薛图景下默认力学量不显含时间?)

定态的组合当然不一定是定态 $|c_1\psi_1+c_2\psi_2|^2=c_1^2\psi_1^2+c_2^2\psi_2^2+2c_1c_2\psi_1\psi_2\cos[(E_2-E_1)t/\hbar]$

时间演化方程 $\frac{\mathrm{d}\overline{F}}{\mathrm{d}t}=\langle\partial_t\psi|\hat{F}|\psi\rangle+\langle\psi|\partial_t\hat{F}|\psi\rangle+\langle\psi|\hat{F}|\partial_t\psi\rangle=\frac{-1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|\hat{H}\hat{F}|\psi\rangle+\overline{\partial_t\hat{F}}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle\psi|\hat{F}\hat{H}|\psi\rangle=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\overline{[\hat{F},\hat{H}]}+\overline{\partial_t\hat{F}}$

(力学量本身没有确定值, 但其平均值是确定值, 不确定度另算)

守恒量 在任意态上(不只是定态) 的平均值不随时间变化 (不是随空间守恒) $\Leftrightarrow$ $\hat{F}$ 和 $\hat{H}$ 对易

推论 如果哈氏量显含时间, 则能量不守恒

例 $\hat{H}=\frac{1}{2m}\vec{p}^2+V(\vec{r})$, 若 $V=0$ 则为自由粒子, 动量守恒, 势场有梯度时动量不守恒

例 ⟨ 力 – 中心力场 ⟩ 或 ⟨– 径向动量算符 ⟩ $\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2mr^2}\partial_r(r^2\partial_r)+\frac{\hat{\vec{L}}^2}{2mr^2}+V(r)$ → $[\hat{\vec{L}}^2,\hat{H}]=[\hat{L}_z,\hat{H}]=0$ 守恒, 可用于分波分析

既然 $\hat{F},\hat{H}$ 对易, 设 ψ_n 是共同本征态,

$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\langle\psi_n|\psi(t)\rangle|^2=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\langle\psi_n|\psi\rangle\langle\psi|\psi_n\rangle)=\langle\psi_n|\partial_t\psi\rangle\langle\psi|\psi_n\rangle+\text{c.c.}=\frac{E_n}{\mathrm{i}\hbar}|\langle\psi_n|\psi\rangle|^2+\text{c.c.}=0$

推论 守恒量取值的概率分布不随时间变化 (不意味着守恒量取确定值)

推论 若体系初始时处于守恒量的本征态, 则恒处于该本征态, 否则恒不处于本征态

故习惯上用**好量子数**守恒力学量本征值的量子数来标志状态

对称性

symmetry operator

设有一**对称性算符** $\hat{S}$ (不含时), 记变换后的态 $|\psi'\rangle=\hat{S}|\psi\rangle$, 变换前的态满足 $\hat{H}$ 的薛方程 $\mathrm{i}\hbar\partial_t|\psi\rangle=\hat{H}|\psi\rangle$

变换后的态满足 $\hat{H}'$ 的薛方程 $\mathrm{i}\hbar\partial_t|\psi'\rangle=\mathrm{i}\hbar\hat{S}\partial_t|\psi\rangle=\hat{S}\hat{H}|\psi\rangle=\hat{S}\hat{H}\hat{S}^{-1}\hat{S}|\psi\rangle\equiv\hat{H}'|\psi'\rangle$ → $\hat{H}'=\hat{H}\Leftrightarrow[\hat{S},\hat{H}]=0$

symmetry

若 $\hat{S}$ 和 $\hat{H}$ 对易, 称体系在变换 $\hat{S}$ 下具有不变性, 或 **对称性**

(体系就是哈氏量, 构造一个体系就是构造哈氏量, 对称性可用于猜哈氏量)

① 若 $\hat{S}$ 厄米, 那本身就是守恒力学量

② 若 $\hat{S}$ 是厄米算符 $\hat{F}$ 的函数 $S(\hat{F})$ ($\hat{F}$ 称为生成元) , 则要求 $\hat{F}$ 是守恒量

③ 其他情况的对称性无物理意义?

总结

连续变换	无限小变换	有限变换	守恒量
spacial translation 空间平移	$\hat{T}(\mathrm{d}\vec{r})=1-\mathrm{d}\vec{r}\frac{\partial}{\partial\vec{r}}=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\mathrm{d}\vec{r}$	$\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}\right)$	$\vec{p}$
time translation 时间平移	$\hat{U}(\mathrm{d}t)=1-\mathrm{d}t\frac{\partial}{\partial t}=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{H}\,\mathrm{d}t$	见 $\hat{U}(t,t_0)$	H
spacial rotation 空间转动	$\hat{R}(\theta)=1-\mathrm{d}\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}=1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\hat{J}_z\,\mathrm{d}\varphi$	$\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\vec{J}\cdot\vec{e}_n\varphi\right)$	$\vec{J}$
spacial inversion 空间反射	对算符 $\vec{r}'=\hat{P}\hat{r}\hat{P}^{-1}=-\vec{r}$, 对态 $\hat{P}\psi(\vec{r})=\psi(-\vec{r})$		π
time reversal 时间反演	$\hat{T}\psi(\vec{r},t)=\psi^*(\vec{r},-t)$?		?

对称化 $\vec{p}$ 和 $\vec{l}$ 均为厄米算符, 但 $(\vec{p}\times\vec{l})^\dagger=-\vec{l}\times\vec{p}$, 所以我们得这样构造厄米算符 $\frac{1}{2}(\vec{p}\times\vec{l}-\vec{l}\times\vec{p})$

如果势有对称性则束缚态有对称性, 一般解出波函数的对称性比哈氏量的对称性少,

emergent physics

但新发现 **?** 低能物理现象比原哈氏量更丰富 ⟨– 冷原子 ⟩

全同粒子

全同粒子 内禀性质(质量, 电荷, 自旋等) 完全相同的粒子
(经典力学中物理量连续, 两粒子的性质可无限接近但不会全同, 总可区分)

permutation symmetry
交换对称性 交换算符就是宇称算符?
坐标空间换坐标, 动量空间换动量

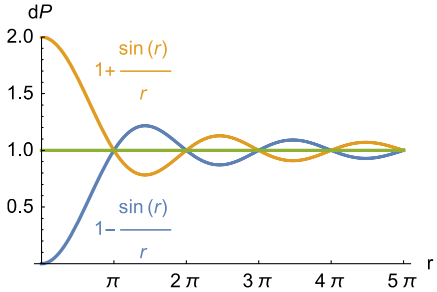
boson fermion
玻色子 $P_{ij}|n\rangle=|n\rangle$ 费米子 $P_{ij}|n\rangle=-|n\rangle$

定理 自旋整数为玻色子, 自旋半奇数为费米子 从实验现象来的, 需相对论量子力学来证

Pauli exclusion principle
泡利不相容原理

例 设两个自由粒子(都是平面波) , 设相对位矢为 $\vec{r}$, 相对动量为 $\vec{k}$, 交换两粒子时 r 变号 k 不变
以其中一个为参考系, 另一个的相对运动波函数为 $\psi(\vec{r})=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, 以下省略归一化系数
若两个粒子不全同, 在半径为 r 的球壳内找到另一个粒子的概率密度为 $\frac{dP}{4\pi r^2 dr}=\frac{1}{4\pi}\int|\psi|^2 d\Omega=1$
若要求波函数交换反对称 $\psi(\vec{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}-e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}})=i\sqrt{2}\sin(\vec{k}\cdot\vec{r})$, 若交换对称 $=\sqrt{2}\cos(\vec{k}\cdot\vec{r})$
$\frac{2}{4\pi}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin^2(kr\cos\theta)\sin\theta\, d\theta=\int_{-1}^{1}\sin^2(krx)\,dx=\frac{1}{2kr}\int_{-kr}^{kr}(1-\cos(2x))\,dx=1-\frac{\sin(2kr)}{2kr}$, $\cos^2$ 则变成加

全同性要求会影响力学量平均值, 因此全同粒子的交换对称性是可观测效应, 玻色子靠近几率增大, 像有吸引力, 费米子靠近几率减小



交换力 不是真正意义上的力, 无施力者, $r\to\infty$ 时消失

bunching antibunching
聚团? 两粒子关联函数, 玻色子在一起加倍, 而费米子 反聚束

2 个同一轨道(相同 l) 的价电子, 考虑全同性后, L,S 不能随便取, 两电子体系, $(L+S)$ 总为偶数?
以前我们就求薛方程, 现在还需对称化, 带来很多可观测效应 (动力学的, 热力学的)

自旋耦合

两个 $s=\frac{1}{2}$ 的粒子 (不必全同) , $\vec{s}=\vec{s}_1+\vec{s}_2$, 非耦合表象 $|\pm\pm\rangle$, 耦合表象 $|sm\rangle$
$\vec{s}_1\cdot\vec{s}_2=\frac{1}{2}(\hat{s}^2-\hat{s}_1^2-\hat{s}_2^2)=\frac{1}{2}(\hat{s}^2-\frac{3}{2}\hbar^2)$ (注意 $\langle\hat{s}^2\rangle=s(s+1)$)
可用 $\hat{j}^{\pm}=(\hat{j}_1^{\pm}\oplus\hat{j}_2^{\pm})$ 从 $|j\pm j\rangle=|$全$\pm\rangle$ 开始推, 然后推 $|j-1,m\rangle$ 要用到正交性

singlet triplet
单态 $|00\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle-|-+\rangle)$, 三重态 $|1-1\rangle=|--\rangle, |10\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle+|-+\rangle), |11\rangle=|++\rangle$
自旋是内禀 (内部) 空间, 可以和坐标 (外部) 对易, 总的希尔伯特空间是位形空间和自旋空间的直积
单态自旋反对称($S=0$) , 空间对称(l 为偶数) , 三重态自旋对称($S=1$) , 空间反对称(l 为奇数) ,
(对于排斥库仑势) (n,l 量子数相同?) 三重态能量比单态低 (和 s 波还是 p 波没必然联系?)

例 两相同质量无相互作用粒子在无穷深方势阱中, 则最低能级为 $2E_1$, 次低能级为 $5E_1$
① 非全同粒子, 自旋 $\frac{1}{2}$, 基态有 $\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)|00\rangle$ 和 $\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)|1m\rangle$, 共 4 重简并
第一激发态为 $\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)$ 或 $\psi_2(x_1)\psi_1(x_2)$, 和 $|00\rangle$ 或 $|1m\rangle$ 组合, 共 $2\times4=8$ 重简并
② 全同粒子, 自旋 $\frac{1}{2}$, 基态为 $\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)|00\rangle$, 无简并
第一激发态有 $[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)+\psi_2(x_1)\psi_1(x_2)]|00\rangle$ 和 $[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)-\psi_2(x_1)\psi_1(x_2)]|1m\rangle$, 共 4 重简并
③ 全同粒子, 自旋为 1, 基态有 $\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)|00\rangle$ 和 $\psi_1(x_1)\psi_1(x_2)|2m\rangle$, 共 6 重简并
第一激发态有和 ② 相同的那两组, 加上 $[\psi_1(x_1)\psi_2(x_2)+\psi_2(x_1)\psi_1(x_2)]|2m\rangle$, 共 9 重简并

Hund's rule
洪德定则 自旋先排成同向的

entangled state separable state
纠缠态 不能写成各子系统态矢的直积, 如 $|00\rangle, |10\rangle$, 可分离态 就是非耦合本征态, 如 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle\pm|00\rangle)$
(没有耦合时才能分离变量)

升降算符

本来不需要产灭算符我们也可以解出哈密顿量的本征值，只不过狄拉克发明出了一种方法，在本征值等间隔时，可以用产生算符生成所有的本征值。粒子数算符的本征值是非负整数，是等间隔的，所以可以用这种解法。

canonical commutation relation　　canonical anticommutation relation

正则对易关系 $[\hat{x}_i,\hat{x}_j]=0,[\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0,[\hat{x}_i,\hat{p}_j]\propto\delta_{ij}$，换成花括号就是 正则反对易关系

用自然单位制，推导完后再 scale 回去即可

raising lowering

$[\hat{x},\hat{p}]=\mathbf{i}\hbar$，引入 升降算符 $\hat{a}^{\pm}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x}\pm\mathbf{i}\hat{p})$ → （不是厄米算符，因为有 $\mathbf{i}$）

互为厄米，自己和自己对易，$[\hat{a}^{-},\hat{a}^{+}]=1$ （谐振能量量子玻色？）

得 $\hat{H}=\hbar\omega(\hat{a}^{\pm}\hat{a}^{\mp}\pm\frac{1}{2})$，可以证明，若 $\hat{H}\psi=E\psi$，则 $\hat{H}(\hat{a}^{\pm}\psi)=(E\pm\hbar\omega)(\hat{a}^{\pm}\psi)$

由 $\hat{a}\psi_0=0$ 可解得 $\psi_0(x)\propto\mathrm{e}^{-x^2}$

产灭算符 ⟨— 量子场论 ⟩

定义真空态 $\hat{a}\,|0\rangle=0\,|0\rangle\doteq\vec{0}$ （真空态不是空态矢，$\hat{a}^{\dagger}|0\rangle=|1\rangle$，而 $\hat{a}^{\dagger}(0|0\rangle)=0|1\rangle\doteq\vec{0}$）

真空态是唯一的！ → $|n\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^n\,|0\rangle$ $[\hat{a},(\hat{a}^{\dagger})^n]=n(\hat{a}^{\dagger})^{n-1}$

$$\mathrm{e}^{f\hat{a}^{\dagger}}\,|0\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle\,,\hat{a}\,\mathrm{e}^{f\hat{a}^{\dagger}}\,|0\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{f^n}{\sqrt{(n-1)!}}\,|n-1\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{f^{(n+1)}}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle=f\,\mathrm{e}^{f\hat{a}^{\dagger}}\,|0\rangle$$

⟨ 高能 — 粒子数表象 ⟩

消灭算符有本征矢 $\mathrm{e}^{-|f|^2/2}\,\mathrm{e}^{f\hat{a}^{\dagger}}\,|0\rangle$，产生算符没有

coherent state

相干态 ⟨ 光学 — 量子光学 ⟩

规范变换

正则动量才满足正则对易关系，动力学动量才满足规范不变 $\hat{H}=\frac{1}{2m}(-\mathbf{i}\hbar\nabla-q\vec{A})^2+q\varphi+V$，若有自旋，需用手加进去这些项 $\dfrac{\mathrm{d}_r V}{2m^2c^2r}\vec{S}\cdot\vec{l}+\dfrac{q}{m}\vec{S}\cdot\vec{B}$

⟨— 狄方程 ⟩可推出来这些项

$\vec{j}=\frac{1}{m}\mathrm{Re}[\psi^*(\hat{\vec{p}}-q\vec{A})\psi]$

Landau

朗道能级 电子在均匀磁场中运动，垂直于磁场方向的运动的能量要量子化

$\hat{H}_{/\!/}=\frac{1}{2m}\hat{p}_z^2$，$\hat{H}_{\perp}=\frac{1}{2m}[\hat{p}_x^2+\hat{p}_y^2+eB_0(y\hat{p}_x-x\hat{p}_y)+\frac{1}{4}e^2B_0^2(x^2+y^2)]=(\hat{b}^{\dagger}\hat{b}+\frac{1}{2})\hbar\omega$，$\omega=\frac{eB_0}{m}$

$\hat{b}=\frac{1}{\sqrt{2e\hbar B_0}}[\mathbf{i}\hat{p}_x-\hat{p}_y+\frac{1}{2}eB_0(x+\mathbf{i}y)]$

振子能量为正 $\frac{|q|\hbar}{2m}(2n+1)B$，故磁矩为负，即无论电荷正负自由气体具有反磁性

路径积分

在薛定谔图景里面，传播子就是时间演化算符在坐标表象的矩阵元

在海森堡图景里面，传播子就是不同时间的坐标本征态的跃迁概率幅

封闭传播子（起点终点相同）就是统计物理中的配分函数（用到虚时的概念）

量子力学认为概率是某个复数的模方，叫作概率幅：$P_{ab}=|\varphi_{ab}|^2,P_{bc}=|\varphi_{bc}|^2,P'_{ac}=|\varphi_{ac}|^2$

假设你依次做了三个实验，A 实验得结果 a，B 实验得结果 b，C 实验得结果 c，那么在 A 测得 a 后，在 C 测得 c 的概率是多少捏？

经典力学认为 $P_{ac}=\sum_b P_{ab}P_{bc}=\sum_b|\varphi_{ab}|^2|\varphi_{bc}|^2,\sum$ 是对 B 所有可能测得的 b 求和

量子力学认为应该是概率幅相乘：$\varphi_{ac}=\sum_b\varphi_{ab}\varphi_{bc},P_{ac}=\left|\sum_b\varphi_{ab}\varphi_{bc}\right|^2$

两式算出来的概率一般是对不上的，两式仅当 $[\hat{A},\hat{B}]=0$ 或 $[\hat{B},\hat{C}]=0$ 时等价 （例如在级联施特恩格拉赫实验中经典力学就不好使了）

区别就在于你有没有真的做 B 这个测量，如果没测 B,B 的实验结果 b 是一个不确定的数，只要你做了哪怕最轻微的测量，不管你测量后去不去看测量结果，测量都影响到了粒子的状态，量子力学实际上就是

告诉你, 如果中间没测量 B 的话, 按概率幅来计算传播概率

我的理解是经典的物体一路都在被测量（不管你有没有刻意去看测量结果）, 所以路径是确定的

decoherence
退相干 环境就是探测器, 在双缝处有探测器的情况下, 电子被迫做出选择, 干涉消失

和环境的相互作用导致退相干 $|c_1+c_2|^2 \leftrightarrow |c_1|^2+|c_2|^2$

费曼路径积分似乎解释了最小作用量原理, 0 时, 不同路径的相位差异剧烈, 所以被附近的路径相互抵销, 只有 S 变化最小的路径才不会被附近的路径所抵消 stationary phase 稳相

最一般的高斯积分公式···

AB 效应

电磁场中用正则动量 $\vec{p}=\hbar\nabla\varphi(\vec{r})=m\vec{v}+q\vec{A}(\vec{r})$, 可见有附加相位 $\Delta\varphi=\frac{q}{\hbar}\vec{A}$

电子束经路径 (1) 或 (2) 由 O 点到 P 点 $\int_{(1)}{}_O^P-\int_{(2)}{}_O^P=\oint_{O(1)P(2)O}$ $\rightarrow$ $\Delta\varphi=\frac{q}{\hbar}\oint\vec{A}\cdot\mathrm{d}\,\vec{l}=\frac{q}{\hbar}\Phi_B$

Aharonov Bohm
A-B 效应 螺线管外没有磁感应强度泄漏, 然而被包围有磁通量, 实验上观察到了电子束干涉

磁通量子化

Aharonov Casher
A-C 效应

Berry phase
贝利相位

约瑟夫森效应

Superconducting **QU**antum **I**nterference **D**evice
超导量子干涉器

微扰论全部扔到〈 原子 – 各种效应 〉

参考文献

赵凯华. 新概念物理教程—量子物理. 高等教育出版社 (初学入门)

Griffiths. Introduction to quantum mechanics. Pearson (最好的初量教材)

└ 中译: 机械工业出版社

曾谨言. 量子力学教程 (第三版). 科学出版社 (初量, 数学很详细) 【算刷完了】

周世勋. 量子力学教程 (第二版). 高等教育出版社 (初量, 也可参考用)

程檀生. 量子力学习题指导. 北京大学出版社 (研究生将碰到的常用结论很多都在这里有证明...)

J. J. Sakurai. Modern Quantum Mechanics (2nd edition). Wesley (现量, 讲概念不错, 但符号记号陈旧)

Merzbacher. Quantum Mechanics (3rd edition). Wiley (进阶高量)

张礼. 量子力学的前沿问题. 清华大学出版社 (知识面极广, 但没条理, 适合有基础后再看)