第一章　课堂讲义

1.1　导论

1.2　对称性

1.2.1　群的定义

集合 $\mathcal{G}$ 包含元素 g_i, 使用乘法 $\cdot$, 满足

1. $\forall g_1, g_2 \in \mathcal{G}, \quad g_1 \cdot g_2 \in \mathcal{G}$;
2. $(g_1 \cdot g_2) \cdot g_3 = g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3)$;
3. $1 \in \mathcal{G}, \quad \text{s.t.} \quad 1 \cdot g = g \cdot 1 = g$;
4. $\forall g \in \mathcal{G}, \quad \exists g^{-1} \in \mathcal{G} \quad \text{s.t.} \quad g \cdot g^{-1} = g^{-1} \cdot g = 1$

1.2.2　群的表示举例

1.2.3　连续对称性和守恒律

一个对称变换对应一个幺正算符 U. 若 $[U, H] = 0$, 则 $H = U^\dagger H U$, U 是 H 的一个对称性. 若 $H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$, 那么 $HU|\psi_n\rangle = E_n U|\psi_n\rangle$. 如果 E_n 是 m 重简并的, 那么会存在其简并子空间, 通过基矢 $\{|\psi_{n,m}\rangle\}$ 张成. 而 U 相当于使 $|\psi_n\rangle$ 在这个子空间内转动, 如

$$\begin{aligned} U|\psi_{n,i}\rangle &= \left(\sum_{k=1}^{m} |\psi_{n,k}\rangle\langle\psi_{n,k}|\right) U|\psi_{n,i}\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{m} |\psi_{n,k}\rangle\Big(\langle\psi_{n,k}|U|\psi_{n,i}\rangle\Big) \end{aligned}$$

也就是说, 对于幺正变换 U, 在 E_n 的简并子空间中, 可以使用矩阵来进行描述, 矩阵元是 $\langle\psi_{n,k}|U|\psi_{n,i}\rangle$, 观察发现共有 n, k, i 三个指标, 所以矩阵可以用 $D^{(n)}(U)_{ki}$ 来表示. 存在关系 $D^{(n)}(U_2)D^{(n)}(U_1) = D^{(n)}(U_2U_1)$.

可以通过一系列无穷小对称变换累积构造出的对称变换是连续对称性, 反之是离散对称性.

若物理量 $G = G^\dagger$ 守恒, 则 $\frac{\mathrm{d}G}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[G, H] = 0$, 即 $[G, H] = 0$. 那么定义幺正算符 $U = e^{i\theta G/\hbar}$, 它将满足

$$\begin{aligned} U^\dagger H U &= \left(1 + \frac{i\theta}{\hbar}G\right) H \left(1 - \frac{i\theta}{\hbar}G\right) \\ &= H + \frac{i\theta}{\hbar}[G, H] = H \end{aligned}$$

G 被称作该对称性的生成元.

1.2.3.1　空间平移

对于 $x \to x+a$, 有平移算符 $T(a)=e^{-ipa/\hbar}$. 这是一个幺正算符, 具有性质

1. $[T(a)]^{-1}=T(-a)$.
2. $T(a_1)T(a_2)=T(a_1+a_2)$.
3. $T^\dagger(a)xT(a)=x+a$, 用到公式 $e^BAe^{-B}=A+[B,A]+\frac{1}{2!}[B,[B,A]]+\cdots$

推广至 d 维($x_i \to x_i+a_i$), 平移算符为

$$
\begin{gathered}
T(\{a_i\})=\prod_i T_i(a_i)=\prod_i e^{-ip_ia_i/\hbar} \\
[T_i(a_i),T_j(a_j)]=0 \iff [p_i,p_j]=0
\end{gathered}
$$

1.2.3.2　时间平移

时间平移表示能量守恒 $\dfrac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=0$, 对应幺正算符为 $U(t)=e^{-iHt/\hbar}$

1.2.3.3　转动

1.2.3.3.1　角动量是转动的生成元　对于 d 维空间, 转动使得 $\vec{x}_i \to \vec{x}_i'=\sum_{j=1}^{d}R_{ij}\vec{x}_j$. 转动操作具有保内积性质 $\vec{x}\cdot\vec{y}=\vec{x}'\cdot\vec{y}'$,

$$
\begin{aligned}
\sum_i x_iy_i=\sum_i x_i'y_i'&=\sum_i\left(\sum_j R_{ij}x_j\right)\left(\sum_k R_{ik}y_k\right)=\sum_i\sum_j\sum_k R_{ij}R_{ik}x_jy_k \\
&=\sum_j\sum_k\left(\sum_i R_{ij}R_{ik}\right)x_jy_k\overset{?}{=}\sum_j\sum_k\delta_{kj}x_jy_k=\sum_j x_jy_j \\
\Rightarrow\sum_i R_{ij}R_{ik}&=\sum_i R^T_{ji}R_{ik}=\delta_{kj}\to R^TR=\mathbb{I}
\end{aligned}
$$

而 R 和 R^{-1} 的行列式值相同, 所以 $\det R=\pm1$. 其中 $\det R=1$ 表示的是正常转动, 组成 SO(d) (特殊正交)群.

R 对应一个幺正算符 $\mathcal{D}(R)$, 即 $|\alpha_R\rangle=\mathcal{D}(R)|\alpha\rangle$. 设矢量算符 $\vec{V}$, 那么

$$
\begin{gathered}
\langle\beta_R|V_i|\alpha_R\rangle=\langle\beta|\mathcal{D}^\dagger(R)V_i\mathcal{D}(R)|\alpha\rangle=R_{ij}\langle\beta|V_j|\alpha\rangle \\
\Rightarrow\mathcal{D}^\dagger(R)V_i\mathcal{D}(R)=R_{ij}V_j
\end{gathered}
$$

使用无穷小转动 $R\approx\mathbb{I}-\omega+\mathcal{O}(\omega^2)$, 而 $R^TR\approx(\mathbb{I}-\omega^T)(\mathbb{I}-\omega)=\mathbb{I}$, 因此 $\omega^T=-\omega$, 这代表 ω 是一个反对称阵. 对应于 $\mathcal{D}(R)$, 进行展开

$$
\mathcal{D}(R)=1-\frac{i}{2\hbar}\sum_{i,j}\omega_{ij}J_{ij}+\mathcal{O}(\omega^2)
$$

1.2.3.3.2　角动量代数　角动量对易关系 $[J_i,J_j]=i\hbar\epsilon_{ijk}J_k,\quad[\vec{J}^2,J_i]=0$. 由于 $\vec{J}^2$ 和 J_z 有共同本征态, 各取一个参数 j,m 标记, 即 $|j,m\rangle$.

$$
\vec{J}^2|j,m\rangle=a|j,m\rangle,\quad J_z|j,m\rangle=b|j,m\rangle
$$

引入升降算符 $J_\pm=J_x\pm iJ_y$, 有对易关系 $[J_+,J_-]=2\hbar J_z,\quad[J_z,J_\pm]=\pm\hbar J_\pm,\quad[J^2,J_\pm]=0$

注意到, 升降算符会使 J_z 的本征值升降 $\hbar$:

$$
J_zJ_\pm|j,m\rangle=(J_\pm J_z\pm\hbar J_\pm)|j,m\rangle=(b\pm\hbar)J_\pm|j,m\rangle
$$

$$\vec{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) = J_z^2 + \frac{1}{2}\left(J_+J_+^\dagger + J_-J_-^\dagger\right)$$

这说明 $\langle j,m|\vec{J}^2 - \vec{J}_z^2|j,m\rangle = a - b^2 \geq 0, \quad \forall|j,m\rangle$, 因此存在一个最大值 b_{max} 使得 $-b_{\text{max}} \leq b \leq b_{\text{max}}$. 那么升降算符不能无限地升降 J_z 的本征值. 所以添加限制 $J_\pm|b\rangle = J_\pm|b_{\text{max}}\rangle = J_\pm|{\tfrac{\text{max}}{\text{min}}}\rangle = 0$.

$$\begin{aligned}
J_-J_+|\text{max}\rangle &= (J_x - iJ_y)(J_x + iJ_y)|\text{max}\rangle = (\vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|\text{max}\rangle = 0\\
a - b_{\text{max}}^2 - \hbar b_{\text{max}} &= 0 \to a = b_{\text{max}}(b_{\text{max}} + \hbar)\\
J_+J_-|\text{min}\rangle &= (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y)|\text{min}\rangle = (\vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z)|\text{min}\rangle = 0\\
a - b_{\text{min}}^2 + \hbar b_{\text{min}} &= 0 \to a = b_{\text{min}}(b_{\text{min}} - \hbar), \quad b_{\text{min}} = -b_{\text{max}}
\end{aligned}$$

假定从 $|\text{min}\rangle$ 到 $|\text{max}\rangle$ 需要 n 次 J_+, 即有 $b_{\text{max}} = -b_{\text{max}} + n\hbar \iff b_{\text{max}} = \frac{n}{2}\hbar \equiv j\hbar$, 这就将前面选定的 j, m 联系起来了:

$$\begin{aligned}
a &= j(j+1)\hbar^2, \quad j \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}\\
b &= m\hbar, \quad m = -j, -j+1, \cdots, j-1, j
\end{aligned}$$

既然已选定基矢, 那么就可以计算矩阵元.

$$\begin{aligned}
\langle j', m'|\vec{J}^2|j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2\delta_{jj'}\delta_{mm'}\\
\langle j', m'|J_z|j,m\rangle &= m\hbar\delta_{jj'}\delta_{mm'}\\
\langle j,m|J_-J_+|j,m\rangle &= \langle j,m|\vec{J}^2 - J_z^2 - \hbar J_z|j,m\rangle = [j(j+1) - m^2 - m]\hbar^2\\
&= (J_+|j,m\rangle)^\dagger(J_+|j,m\rangle) = (c_{j,m}|j,m\rangle)^\dagger c_{j,m}|j,m\rangle = |c_{j,m}|^2\\
\Rightarrow c_{j,m} &= \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\hbar\\
\langle j,m|J_+J_-|j,m\rangle &= \langle j,m|\vec{J}^2 - J_z^2 + \hbar J_z|j,m\rangle = [j(j+1) - m^2 + m]\hbar^2\\
&= (J_-|j,m\rangle)^\dagger(J_-|j,m\rangle) = (c'_{j,m}|j,m\rangle)^\dagger c'_{j,m}|j,m\rangle = |c'_{j,m}|^2\\
\Rightarrow c'_{j,m} &= \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\hbar\\
\langle j', m'|J_\pm|j,m\rangle &= \hbar\sqrt{j(j+1) - m(m\pm1)}\delta_{j,j'}\delta_{m,m'\pm1}
\end{aligned}$$

既然升降算符已定, 那么就可反解出 J_x, J_y. 一般需要先确定角动量量子数 j, 从而确定矩阵的大小. 比如 $j = \dfrac{1}{2}$ 时, 所得的各矩阵就是泡利矩阵; $j = 1$ 时, 则有

$$J_z = \hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}, \quad J_x = \frac{J_+ + J_-}{2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{J_+ - J_-}{2i} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{pmatrix}$$

1.2.3.3.3 SO(3), SU(2)

1.2.3.3.4 中心势场中的单粒子问题

1.2.3.3.5 角动量相加 若两个系统 1 和 2 分别有角动量 j_1 和 j_2, 这个复合系统的 Hilbert 空间为 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. 要确定复合系统的角动量, 就需要选定一个基矢, 常用方法是子系统基矢的直积; 对应地, 复合系统的算符也是子系统算符的直积, 即

$$\begin{aligned}
|j_1, m_2; j_2, m_2\rangle &= |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle\\
\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 &\equiv \vec{J}_1 \otimes \mathbb{I}_2 + \mathbb{I}_1 \otimes \vec{J}_2
\end{aligned}$$

为了简便, 常常去除直积符号和单位算符, 而只是简单的相加. 不同子系统的角动量互不干涉, 所以 $[J_{1\alpha}, J_{2\beta}] = 0$. 但是总角动量 $\vec{J}^2$ 并不单独与子系统角动量 $J_{\alpha,z}$对易, 所以基矢 $|j_1, m_1; j_2, m_2\rangle$ 不是 $\vec{J}^2$ 的本征矢.

由于 $\vec{J}_2, J_z, \vec{J}_1^2, J_2^2$ 相互对易, 所以基矢为 $|j,m;j_1,j_2\rangle$.比如熟悉的两电子系统 $\frac{1}{2}\otimes\frac{1}{2}$,

$$
\begin{aligned}
\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle &= |++\rangle; \quad \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = |+-\rangle; \\
\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2};\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle &= |-+\rangle; \quad \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2};\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = |--\rangle \\
\text{单态:}\quad |0,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right) \\
\text{三重态:}\quad |1,1\rangle &= |++\rangle, \quad |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle + |-+\rangle\right), \quad |1,-1\rangle = |--\rangle
\end{aligned}
$$

这就涉及到基矢变换 $|j_1,m_1;j_2,m_2\rangle \to |j,m;j_1,j_2\rangle$:

$$
\begin{aligned}
|j,m;j_1,j_2\rangle &= \sum_{m_1,m_2} |j_1,m_1;j_2,m_2\rangle \overbrace{\langle j_1,m_1;j_2,m_2|j,m;j_1,j_2\rangle}^{\text{CG 系数}} \\
&= \sum_{m_1,m_2} C^{j,m}_{j_1,j_2,m_1,m_2} |j_1,m_1;j_2,m_2\rangle
\end{aligned}
$$

1. 磁量子数守恒. $J_z = J_{1,z} + J_{2,z}$.
2. $|j_1 - j_2| \le j \le j_1 + j_2$.
3. 若 $j_1, j_2 \in \mathbb{Z}$ 或 $j_1, j_2 \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}$, 则 $j \in \mathbb{Z}$. 不失一般性地, 若 $j_1 \in \mathbb{Z}$, $j_2 \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}$, 则 $j \in \frac{1}{2}\mathbb{Z}$.
4. 递推公式. 为了后续方便 $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$ 的计算, 在原求和公式的 m_1, m_2 添加上标 $'$ 以示区别.

$$
\begin{aligned}
&\langle j_1,m_1;j_2,m_2|J_\pm|j,m;j_1,j_2\rangle = \langle j_1,m_1;j_2,m_2|(J_{1\pm}+J_{2\pm})\sum_{m_1',m_2'} C^{j,m}_{j_1,j_2,m_1',m_2'}|j_1,m_1';j_2,m_2'\rangle \\
&\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}\langle j_1,m_1;j_2,m_2|j,m\pm1;j_1,j_2\rangle \\
&= \langle j_1,m_1;j_2,m_2| \sum_{m_1',m_2'} \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1'(m_1'\pm1)}|j_1,m_1'\pm1;j_2,m_2'\rangle C^{j,m}_{j_1,j_2,m_1',m_2'} \\
&+ \langle j_1,m_1;j_2,m_2| \sum_{m_1,m_2} \sqrt{j_2(j_2+1)-m_2'(m_2'\pm1)}|j_1,m_1';j_2,m_2'\pm1\rangle C^{j,m}_{j_1,j_2,m_1',m_2'} \\
&\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}C^{j,m\pm1}_{j_1,j_2,m_1,m_2} \\
&= \sum_{m_1',m_2'} \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1'(m_1'\pm1)}\delta_{m_1,m_1'\pm1}\delta_{m_2,m_2'}C^{j,m}_{j_1,j_2,m_1',m_2'} \\
&+ \sum_{m_1',m_2'} \sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2\pm1)}\delta_{m_1,m_1'}\delta_{m_2,m_2'\pm1}C^{j,m}_{j_1,j_2,m_1',m_2'}
\end{aligned}
$$

通过求和消去 δ 函数, 第一项即 $m_1' = m_1 \mp 1$ 且 $m_2 = m_2'$, 第二项即 $m_1 = m_1'$ 且 $m_2' = m_2 \mp 1$. 化简得到

$$
\begin{aligned}
&\sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}C^{j,m\pm1}_{j_1,j_2,m_1,m_2} \\
&= \sqrt{j_1(j_1+1)-(m_1\mp1)m_1}C^{j,m}_{j_1,j_2,m_1\mp1,m_2} + \sqrt{j_2(j_2+1)-(m_2\mp1)m_2}C^{j,m}_{j_1,j_2,m_1,m_2\mp1}
\end{aligned}
$$

通过约定 $\langle j_1,j_1;j_2,j_2|j_1+j_2,j_1+j_2;j_1,j_2\rangle = C^{j_1+j_2,j_1+j_2}_{j_1,j_2,j_1,j_2} = 1$, 就能递推出各系数.

1.2.4 离散对称性

1.2.4.1 宇称

1.2.4.1.1 波函数的宇称

1.2.4.1.2 动量本征态和角动量本征态的宇称

1.2.4.1.3 宇称选择定则

1.2.4.2 时间反演

1.2.4.2.1 时间反演和自旋

1.2.4.2.2 无自旋粒子

1.2.4.2.3 时间反演对称不对应守恒律

1.2.4.2.4 半整数自旋体系的 Kramer 定理

1.2.4.3 晶格平移

1.3 单体问题的代数解法

1.3.1 类氢原子

1.3.1.1 量级分析

$$H=\frac{\vec{p}^2}{2\mu}-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r},\quad \mu=\frac{m_eM}{m_e+M}$$

使用不确定性原理临界 $\Delta x\Delta p\sim\hbar$ 可知

$$\begin{aligned}
H(\Delta r)&\sim\frac{\hbar^2}{2\mu(\Delta r)^2}-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\Delta r}\\
\Rightarrow r&\sim\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{Ze^2\mu}\equiv\frac{1}{Z}\frac{m_e}{\mu}a_0\\
E_0&\sim-\frac{1}{2}\frac{\mu}{\hbar^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\equiv-Z^2\frac{\mu}{m_e}\mathrm{Ry},\quad \mathrm{Ry}=\frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0a_0}
\end{aligned}$$

1.3.1.2 径向波函数

$$\begin{aligned}
&\nabla^2=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right),\quad \psi(r,\theta,\phi)=R(r)Y(\theta,\phi)\\
&\Rightarrow\begin{cases}\dfrac{1}{R}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\dfrac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)-\dfrac{2mr^2}{\hbar^2}\left[\dfrac{1}{4\pi\epsilon_0}\dfrac{1}{r}-E\right]=l(l+1)\\ \dfrac{1}{Y}\left\{\dfrac{1}{\sin\theta}\dfrac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\dfrac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\dfrac{1}{\sin^2\theta}\dfrac{\partial^2Y}{\partial\phi^2}\right\}=-l(l+1)\end{cases}
\end{aligned}$$

令 $\kappa\equiv\dfrac{\sqrt{-2m_eE}}{\hbar}$, $\rho\equiv\kappa r$, 径向波函数化为

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2}&=\left[1-\frac{\rho_0}{\rho}+\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]u.\quad \rho_0\equiv\frac{m_ee^2}{2m_e\varepsilon_0\hbar^2\kappa}\\
\lim_{\rho\to\infty}u&\sim Ae^{-\rho},\quad \lim_{\rho\to0}u\sim C\rho^{l+1}\Rightarrow u(\rho)=\rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho)\\
&\Rightarrow\rho\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}+2(l+1-\rho)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho}+\Big[\rho_0-2(l+1)\Big]v=0
\end{aligned}$$

设 $v(\rho)=\sum_{j=0}^{\infty}c_j\rho_j$, 代入得到递推关系

$$c_{j+1}=\frac{2(j+l+1)-\rho_0}{(j+1)\Big[j+2(l+1)\Big]}c_j$$

1.3.2 简谐振子

1.3.2.1 一维谐振子

1.3.2.1.1 哈密顿量

$$H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2,\quad \omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$$
$$\text{无量纲化:}\quad p=P\sqrt{\hbar m\omega},\quad x=Q\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$
$$\Rightarrow H=\frac{1}{2}\hbar\omega(P^2+Q^2),\quad [P,Q]=i$$

1.3.2.1.2 玻色子概念 $E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right),\quad n=0,1,2,\cdots$. 每个单位能量 $\hbar\omega$ 对应的是玻色子的激发. 产生: $a^\dagger:|0\rangle\rightarrow|1\rangle\rightarrow|2\rangle\rightarrow\cdots$, 湮灭: $a:\cdots\rightarrow|2\rangle\rightarrow|1\rangle\rightarrow|0\rangle$.

1.3.2.1.3 产生湮灭算符

$$a=\frac{1}{\sqrt{2}}(Q+iP)$$
$$a^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}(Q-iP)$$
$$[a,a^\dagger]=1\Leftrightarrow aa^\dagger=a^\dagger a+1$$

1.3.2.1.4 玻色子占据数表象

$$a|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle$$
$$a^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle$$
$$a^\dagger a|n\rangle=n|n\rangle,\quad aa^\dagger|n\rangle=(n+1)|n\rangle$$

1.3.2.1.5 Fock 空间的构造 定义粒子数算符 $\hat{n}=a^\dagger a$, 本征态为 $|n\rangle$, 本征值 $\lambda_n=n$.

1.3.2.1.6 矩阵表示 选定矩阵基矢为 $|0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\\vdots\end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix}0\\0\\1\\\vdots\end{pmatrix}, \quad \cdots$, 即可计算产生湮灭算符的矩阵表示:

$$
\begin{aligned}
a_{mn} &= \langle m|a|n\rangle = \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1} \\
a^\dagger_{mn} &= \langle m|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}
\end{aligned}
$$

$$
a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \cdots \\ & 0 & \sqrt{2} & & \cdots \\ & & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ & & & 0 & \ddots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & & & & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & & & \cdots \\ & \sqrt{2} & 0 & & \cdots \\ & & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}
$$

$$
Q = \frac{a+a^\dagger}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & & & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & & \cdots \\ & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ & & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad P = \frac{a-a^\dagger}{\sqrt{2}i} = \frac{1}{\sqrt{2}i}\begin{pmatrix} 0 & +\sqrt{1} & & & \cdots \\ -\sqrt{1} & 0 & +\sqrt{2} & & \cdots \\ & -\sqrt{2} & 0 & +\sqrt{3} & \cdots \\ & & -\sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}
$$

1.3.2.1.7 能谱

$$
\begin{aligned}
H = \hbar\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) &\to E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \\
|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left[a^\dagger\right]^n|0\rangle, &\quad \hat{n}|n\rangle = a^\dagger a|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}a^\dagger a\left[a^\dagger\right]^n|0\rangle \\
a\left[a^\dagger\right]^n = aa^\dagger\left[a^\dagger\right]^{n-1} &= (a^\dagger a+1)\left[a^\dagger\right]^{n-1} = a^\dagger a\left[a^\dagger\right]^{n-1} + [a^\dagger]^{n-1} \\
a^\dagger a\left[a^\dagger\right]^{n-1} = a^\dagger a a^\dagger\left[a^\dagger\right]^{n-2} &= a^\dagger\left(a^\dagger a+1\right)\left[a^\dagger\right]^{n-2} = \left[a^\dagger\right]^2 a\left[a^\dagger\right]^{n-2} + \left[a^\dagger\right]^{n-1} \\
\Rightarrow \hat{n}|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}a^\dagger\left\{\cancel{\left[a^\dagger\right]^n} a + n\left[a^\dagger\right]^{n-1}\right\}|0\rangle &= \frac{n}{\sqrt{n!}}\left[a^\dagger\right]^n|0\rangle = n|n\rangle
\end{aligned}
$$

1.3.2.1.8 波函数 根据 $a|0\rangle = 0$, 且应用 $P = -i\dfrac{\partial}{\partial Q}$, 基态 $|0\rangle$ 满足 $\left(Q+\dfrac{\partial}{\partial Q}\right)\psi_0(Q) = 0$. 所以 $\psi_0(Q) = \dfrac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{1}{2}Q^2}$. 通过 $a^\dagger$ 产生激发态, 如第一激发态 $|1\rangle = a^\dagger|0\rangle$:

$$
\begin{aligned}
\psi_1(Q) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q-\frac{\partial}{\partial Q}\right)\psi_0(Q) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}}\sqrt{2}Qe^{-\frac{1}{2}Q^2} \\
\psi_n(Q) &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{2^n n!}}H_n(Q)e^{-\frac{1}{2}Q^2} \\
\bar{\psi}_n(P) &= \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{2^n n!}}H_n(P)e^{-\frac{1}{2}P^2}
\end{aligned}
$$

1.3.2.1.9 不确定性关系

$$
\Delta Q\delta P \geq \frac{1}{2}\left|[Q,P]\right|^2 = \frac{1}{2}
$$

使用 Fock 态 $|n\rangle$ 检验. ΔQ 和 ΔP 即标准差, 有

$$
\begin{aligned}
Q = \frac{a+a^\dagger}{\sqrt{2}}, \quad P = \frac{a-a^\dagger}{\sqrt{2}i} \\
\langle n|Q|n\rangle = 0, \quad \langle n|Q^2|n\rangle = \frac{1}{2}\langle n|(a+a^\dagger)^2|n\rangle = n+\frac{1}{2} \\
\to \Delta Q = \sqrt{\langle n|q^2|n\rangle - (\langle n|Q|n\rangle)^2} = \sqrt{n+\frac{1}{2}} \\
\langle n|P|n\rangle = 0, \quad \langle n|P^2|n\rangle = -\frac{1}{2}\langle n|(a-a^\dagger)^2|n\rangle = -n-\frac{1}{2} \\
\to \Delta P = \sqrt{\langle n|P^2|n\rangle - (\langle n|P|n\rangle)^2} = \sqrt{n+\frac{1}{2}} \\
\Rightarrow \Delta Q\Delta P = \sqrt{n+\frac{1}{2}}\sqrt{n+\frac{1}{2}} = n+\frac{1}{2} \geq \frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

1.3.2.2 相干态

1.3.2.2.1 定义 相干态是湮灭算符 a 的本征态, 也是使得不确定性最小的态.

$$
\begin{aligned}
& a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \alpha\in\mathbb{C}, \quad \langle\alpha_1|\alpha_2\rangle \neq \delta(\alpha_1-\alpha_2) \\
& \langle\alpha|Q|\alpha\rangle = \langle\alpha|\frac{a+a^\dagger}{\sqrt{2}}|\alpha\rangle = \frac{\alpha^*+\alpha}{\sqrt{2}} = \sqrt{2}\mathrm{Re}(\alpha) \\
& \langle\alpha|Q^2|\alpha\rangle = \langle\alpha|\frac{[a^\dagger]^2+aa^\dagger+a^\dagger a+a^2}{2}|\alpha\rangle = \frac{\alpha^2+2\alpha^*\alpha+[\alpha^*]^2+1}{2} = \frac{(\alpha^*+\alpha)}{2}+\frac{1}{2} = 2[\mathrm{Re}\alpha]^2+\frac{1}{2} \\
& \Rightarrow \Delta Q = \sqrt{\langle\alpha|x^2|\alpha\rangle - (\langle\alpha|x|\alpha\rangle)^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \\
& \langle\alpha|P|\alpha\rangle = \langle\alpha|\frac{a-a^\dagger}{\sqrt{2}i}|\alpha\rangle = \frac{\alpha^*-\alpha}{\sqrt{2}i} = \sqrt{2}\mathrm{Im}(\alpha) \\
& \langle\alpha|P^2|\alpha\rangle = \langle\alpha|\frac{[a^\dagger]^2-aa^\dagger-a^\dagger a+a^2}{2}|\alpha\rangle = \frac{\alpha^2-2\alpha^*\alpha+[\alpha^*]^2+1}{2} = \frac{(\alpha^*-\alpha)}{2}+\frac{1}{2} = 2[\mathrm{Im}\alpha]^2+\frac{1}{2} \\
& \Rightarrow \Delta P = \sqrt{\langle\alpha|P^2|\alpha\rangle - (\langle\alpha|P|\alpha\rangle)^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \\
& \Delta Q\Delta P = \frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

1.3.2.2.2 Fock 态表象 以 Fock 态为基矢展开相干态 $|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$. 它的含义是, 遍历所有可能的 $|n\rangle$, 并使用对应的 n 个湮灭算符将其降阶至基态 $|0\rangle$.

1. $|0\rangle$ 也是相干态, 相当于 $\alpha=0$.
2. 相干态 $|\alpha=n\rangle$ 和粒子数表象的 $|n\rangle$ 不同.
3. 在相干态 $|\alpha\rangle$ 中测得 n 个玻色子的概率为 $p_\alpha(n) = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}e^{-|\alpha|^2} \equiv \frac{\lambda^2}{n!}e^{-\lambda}$, 也就是说这是一个 Poisson 分布. 这也是 $\langle n\rangle_\alpha = \langle\alpha|\hat{n}|\alpha\rangle = |\alpha|^2$ 的例证.

1.3.2.2.3　时间演化

$$
\begin{aligned}
U(t) &= e^{-iHt/\hbar} = e^{-i\omega\left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right)t} = e^{-\frac{i\omega t}{2}} e^{-i\omega t\hat{n}} \\
U(t)|\alpha\rangle &= e^{-\frac{i\omega t}{2}} e^{-i\omega t\hat{n}} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}} e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t n}|n\rangle \\
&= e^{-\frac{i\omega t}{2}} e^{-\frac{1}{2}|\alpha e^{-i\omega t}|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = |\alpha e^{-i\omega t}\rangle \\
\Rightarrow \alpha(t) &= \alpha(0) e^{-i\omega t}
\end{aligned}
$$

1.3.2.2.4　U(1)对称性

1.3.2.2.5　坐标表象

1.3.2.2.6　BCH 公式

1.3.2.2.7　位移公式

1.3.2.2.8　超完备性

$$
\langle\beta|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)+\alpha\beta^*} \to P(|\alpha\rangle->|\beta\rangle) = |\langle\beta|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha-\beta|^2}
$$

1. 非正交性: $\langle\beta|\alpha\rangle \neq \delta_{\alpha\beta}$.
2. 完备性关系:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} \mathrm{d}\alpha|\alpha\rangle\langle\alpha| &= \frac{1}{\pi}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{m!n!}}\int_{\mathbb{C}}\mathrm{d}\alpha e^{-|\alpha|^2}\alpha^m[\alpha^*]^n|m\rangle\langle n| \\
\alpha = re^{i\varphi}: \quad &= \frac{1}{\pi}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{m!n!}}\int_0^{\infty} r\mathrm{d}r e^{-r^2} r^{m+n}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi e^{i(m-n)\varphi}|m\rangle\langle n| \\
&= \frac{1}{\pi}\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{m!n!}}2\pi\delta_{mn}\int_0^{\infty} r\mathrm{d}r e^{-r^2} r^{m+n}|m\rangle\langle n| \\
s = r^2: \quad &= \frac{1}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\pi\int_0^{\infty}\mathrm{d}s e^{-s}s^n|n\rangle\langle n| \\
&= \frac{1}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{\cancel{n!}}\pi\cancel{\Gamma(n+1)}|n\rangle\langle n| \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n| = \mathbb{I}
\end{aligned}
$$

3. 超完备性(任何相干态都可以用其它相干态展开):

$$
|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}}\mathrm{d}\beta|\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}}\mathrm{d}\beta|\beta\rangle e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2+|\beta|^2)+\alpha\beta^*}
$$

1.3.2.3 三维谐振子

1.3.2.3.1 哈密顿量

$$
\begin{aligned}
H &= \frac{\hbar\omega}{2}\left(\vec{P}^2+\vec{Q}^2\right), \quad [Q_i,P_j]=i\delta_{ij}, \quad [Q_i,Q_j]=[P_i,P_j]=0 \\
\vec{a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{Q}+i\vec{P}), \quad \vec{a}^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{Q}-i\vec{P}), \quad [a_i,a_j^\dagger]=\delta_{ij}, \quad [a_i,a_j]=[a_i^\dagger,a_j^\dagger]=0 \\
H &= \hbar\omega\left(\vec{a}^\dagger\cdot\vec{a}+\frac{3}{2}\right)=\hbar\omega\left(a_1^\dagger a_1+a_2^\dagger a_2+a_3^\dagger a_3+\frac{3}{2}\right)
\end{aligned}
$$

1.3.2.3.2 能级和简并

$$
\begin{aligned}
E &= \hbar\omega\left(n_1+n_2+n_3+\frac{3}{2}\right)=\hbar\omega\left(N+\frac{3}{2}\right) \\
D &= \sum_{n_1,n_2,n_3}\delta_{N,n_1+n_2,n_3}=\frac{1}{2}(N+1)(N+2)
\end{aligned}
$$

1.3.2.3.3 角动量算符

$$
\vec{L}=\vec{x}\times\vec{p} \iff L_i=\epsilon_{ijk}x_jp_k \iff L_i=-i\epsilon_{ijk}a_j^\dagger a_k
$$

1.3.2.3.4 Fock 态表象