Quantum Mechanics(Primary)

14,Septembre,2022

Lecturer: Prof. Weihua,Wang
SolidPhysics,CAS
whwangnk@nankai.edu.cn

- Jargon List&Terminology
- **Main Content**
  - Basic assumptions of QM
  - Introduction
    - birth of the quantum theory
    - Appendix
  - Schrödinger equation and wave function
    - Statistical Interpretation
    - Principal of superposition state
    - Coordination&momentum&operator and their average
    - Static schrödinger equation
    - Linear Hamonic oscillator
    - Appendix
  - Barrier and Potential Well
    - Potential Well
    - Barrier
  - Operators
    - Momentum operators
    - Angular momentum operators
    - Hermitian operator
      - Definition
      - Properties of eigenfunction
    - Commutation relation
      - Commonly used commutation identity
      - Commutation indentity
      - Basic commutation
      - commutation linked with momentum and coordination
      - Physical meaning of commutative operators
    - Appendix
  - Conservation law
    - Ehrenfest principal
    - Virial theorem
    - Hellmann-Feynman theorem
    - conserved quantity
    - Appendix
  - Dirac notation
    - Basic form
    - The completeness of eigenvector
  - Angular momentum
    - Angular momentum operator
    - Commutation relation of AM
    - Eigenfunction of L_z
    - Eigenfunction of $\hat{L}^2$
    - Appendix
  - Centeral force field
    - Prerequisite
    - Radial equation
    - Coulomb potential field
      - Radial Eigenfuncation
      - Eigenvalue
      - General Laguerre polynomial
  - Harmonic osicllator
    - Algebraic solutions
      - Ascending and descending operators
      - Properties of Ascend and descend operators
      - Eigenfunction and eigenvalue
      - Normalization factors
    - Appendix
  - Matrix mechanics
    - Some Conceptions
    - The matrix form of QM
    - Representation transform
      - unitary transformation
      - Numerical Representations and Coherent States
        - Numerical Representions

Symbols in numerical representions
Coherent state
Appendix
Three Picture in QM
Conception of Picture
Represention and Picture
Schrödinger Picture
Heisenberg Picture
Interaction Picture
Appendix
附录一
附录二
附录三
附录四
附录五
附录六
附录七

Jargon List&Terminology

> 非顺序性排列

1. wave-particle duality
2. Compton scatter
3. normalization:归一化
4. orthogonal:正交的
5. Hermitian:厄米，埃尔米特
6. eigenfunction:本征函数
7. Commutation:对易
8. Harmonic oscillator:谐振子
9. virial theorem:位力定理
10. unitary matrix:幺正矩阵
11. picture:绘景

> Abbreviation explanation

1. Q.M.=Quantum mechanics
2. C.M. =Classical mechanics

Main Content

Main Content

Basic assumptions of QM

以下是量子理论建立的基本假设(基本原理)，这些假设不能由宏观世界物理规律导出，它们是由微观现象直接相关的实验建立和检验的

1. 量子系统的状态
2. 物理量和算符
3. 算符和测量的关系
4. 状态随时间变化

5. 全同性原理
6. 自旋

H2 Introduction

> **Tips** **Question**
>
> Why to learn QM?

- 研究对象：研究微观粒子运动变化规律的科学
- 经典力学是量子力学的极限形式
    - 经典力学-非相对论量子力学
    - 相对论力学-相对论量子力学
    - 经典电动力学-量子电动力学
    - 经典统计力学-量子场论&高能物理
    - Planck const: $h = 6.62559 * 10^{-34}$
- 光和实物的波粒二象性是量子力学诞生的基础
- 旧量子场论：经典理论及与其矛盾的假设
- 量子：场的最小激发

> **Tips** 经典物理的困难

- 经典物理学的成功
    - Newton mechanics
    - Maxwell Equation
- 困难
    - 黑体辐射
        - Definition: 能够吸收射到其上的全部辐射的物体，全吸收辐射同时自身向外放出辐射
        - Property:
            - 辐射平衡时，能量密度与辐射波长的分布曲线只与黑体的绝对温度有关，与黑体的形状和材料无关
            - 黑体在任何高于绝对零度的情况下都会辐射电磁波
            - 在相同温度下，黑体的辐射比其他任何物体都强
        - 黑体辐射公式：
            - Wien: 在高频段良好匹配

$$\rho_\nu \mathrm{d}\mu = \nu^3 f(\frac{\nu}{T}) \mathrm{d}\nu \tag{1}$$

            - Rdeigh-Jeans: 在低频段良好符合，在高频段发散，紫外灾难

$$\rho_\nu \mathrm{d}\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T \mathrm{d}\nu \tag{2}$$

        - 黑体辐射的物理机制
            - 物体中含有电子、质子等带电粒子，在高于绝对零度的情况下，这些粒子就存在热振动。带电粒子的振动形成电偶极子，电偶极子辐射电磁波。带电粒子的温度越高，振动速度越快，辐射强度越高，即黑体辐射与辐射体自身的温度有关，因此黑体辐射也称为热辐射。此外，带电粒子的能量服从玻尔兹曼分布，因此他们具有的能量是连续变化的，并且粒子振动的幅度与取向也是连续变化的，故黑体辐射呈现连续谱分布
    - 光电效应
        - def: 光照射到金属上，有光电子逸出的现象
        - Property: 存在临界频率[1]，光电子的能量只与入射光频率有关而与光强无关[2]，逸出时间短(ns)[3]
    - 氢原子线状光谱(分立光谱)
    - 固体的低温电子比热

H3 birth of the quantum theory

Tips Planck黑体辐射定律

- 黑体空腔壁与辐射的能量交换是不连续的，能量子
- 辐射的每一个振动方式相当于一个振子，能量值取值的几率与其大小成正比
- Planck equation:

$$\rho_\nu \mathrm{d}\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_BT}}-1}\mathrm{d}\nu \tag{3}$$

Tips 原子结构的波尔理论

- 玻尔假定，定态条件
  - 能量不连续&角动量量子化
  - 量子跃迁，轨道量子化
- **局限性**
  - 不能解释除氢原子外更复杂原子的光谱
  - 不能给出谱线（相对）强度
  - 不能处理非束缚问题
  - 玻尔的理论假设没有清晰的理论本质

Tips 康普顿效应(compton effect)

- 光粒子性的进一步验证

- 康普顿效应：X射线被轻元素(如白蜡、石墨等)散射后，除了原来的波长外，出现了一个新的波长$\lambda\prime$[1]，这一新波长比原来波长λ_0长，并且相对增量$\Delta\lambda$随着散射角θ增大[2]

$$\Delta\lambda = 2\lambda_0 \sin\frac{\theta}{2} \tag{4}$$

- 定性解释
  - 光子与电子碰撞后将部分能量传递给电子，因此散射后的光子能量降低，从而频率降低而波长增大

Tips 实物粒子的波粒二象性

- 德布罗意、戴维孙、G.P汤姆逊

- L. De Broglie relationship

$$\begin{aligned} E &= h\nu = \hbar\omega \\ p &= \frac{h}{\lambda} = \hbar k \end{aligned} \tag{5}$$

- L. De Broglie wave

$$\psi(\vec{r}) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)} \tag{6}$$

- standing-wave condition

$$2\pi r = n\lambda \tag{7}$$

由驻波条件可以道处Bohr的角动量量子化条件

> 驻波
> - 振动方向相同
> - 频率相同
> - 振幅相同
> - 传播方向相反
>
> 驻波特性
> - 振动距离为半波长整数倍

Appendix

附录一

我们提供了更多的资料供读者阅览，但出于篇幅限制，我们将其放在附录中，读者可以点击上方锚点快速跳往相关位置，此后章节类似并不再说明

Schrödinger equation and wave function

Statistical Interpretation

> 波函数的统计解释

1. 状态的描述

   微观粒子的运动状态用波函数描述

2. 玻恩的统计学诠释

   波函数描绘微观粒子的运动状态，波函数在空间中某点的强度(振幅绝对值平方，$|\Psi|^2$)，与在该点找到该粒子的几率成正比，它反映微观粒子运动的统计规律，波函数也称概率幅

   - 波函数的强度(模)表示任意时刻粒子在空间位矢处的单位体积中出现的概率
   - 波函数本身没有可观测的物理意义，可观测的是波函数的模
   - 波函数描述的概率分布是相对概率分布，这也是为什么常数因子不影响波函数对概率幅的描述

> Remind 波函数为什么用复数?
>
> - The complex number lose the property of magnitude yet remains the associativity and commutativity. As the wave function shall be normalized to one, and the wave function only re present the state motion of particles, therefore, to compare which wave function is bigger is meaningless. Based on that fact, we use complex forms to describe wave function.
> - ......

> 波函数的性质

1. 波函数模有概率密度的含义
2. 模平方可积(自由粒子波函数除外)：在全域中找到粒子的概率为一
3. 归一化波函数：相差常数因子倍数的波函数描述同一概率幅
4. 自由粒子的波函数就是平面波的归一化问题
5. 波函数的标准条件(自然边界条件)：单值、有限、连续

> 量子力学的基本假定

1. 波函数完全描述粒子的状态
2. 波函数随时间的演化遵循薛定谔方程

Principal of superposition state

1. 若$\Psi_i, i\in N^+$是体系可能的状态，则这些状态的线性组合也是体系的可能状态，需要指出的是叠加常数系数是复数

$$\Psi=\sum_i C_i\Psi_i,\quad C_i\in C \tag{8}$$

2. 量子力学中的态叠加与经典物理态叠加的区别

   - 经典中波场的叠加是真实场的叠加，量子力学中的是波函数的叠加
   - 经典中相差常数系数表示的不是同一状态，而量子力学中描述同一状态
   - 量子力学中的波函数不能处处为零，而经典中可以为零(场不存在)

H3 Coordination&momentum&operator and their average

1. 力学量的平均值
   1. 位置均值

$$\overline{x}=\langle x\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}x|\psi(x)|^2\mathrm{dx} \tag{9}$$

   2. 动量均值

      更多参见表象理论

$$\overline{P_x}=\int_{-\infty}^{\infty}\hat{P}_x|\psi(x)|^2\mathrm{dx} \tag{10}$$

      算符$\hat{P}_x$表示将动量表示为坐标空间的函数，用算符表示力学量，称为一次量子化

      具体推演参见附录

   3. 力平均值

      对于一个动量为P。势能为V的微观粒子，经典力学基本方程

$$\frac{\mathrm{d}\langle \mathrm{P}\rangle}{\mathrm{dt}}=\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\rangle \tag{11}$$

      依然成立，上式右侧是力函数的平均值 [1]

$$F(x)=\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\rangle \tag{12}$$

2. 算符
   1. 坐标算符

      坐标表示在坐标空间就是它本身，即：

$$\begin{gathered}\hat{x}=x\\ \hat{r}=\vec{r}\end{gathered} \tag{13}$$

   2. 动量算符

$$\hat{P}_x=-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}} \tag{14}$$

$$\hat{\vec{P}}=-i\hbar[\vec{i}\frac{\partial}{\partial x}+\vec{j}\frac{\partial}{\partial y}+\vec{k}\frac{\partial}{\partial z}]=-i\hbar\nabla \tag{15}$$

   3. 能量算符

$$\hat{E}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V=\hat{H} \tag{16}$$

   4. 角动量算符

$$\hat{L}=\hat{r}\times\hat{p}=-i\hbar(\vec{r}\times\nabla)=-i\hbar\begin{bmatrix}i & j & k\\ x & y & z\\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z}\end{bmatrix} \tag{17}$$

3. 算符的本征方程

   通常算符作用在一个函数上得到的是另一个函数，但存在一种特殊情况：算符作用在一个函数上的结果等于一个常数乘以这个函数本身，即：

$$\hat{F}\psi=\lambda\psi \tag{18}$$

   这个称为算符的本征函数，常数值称为本征值，作用函数称为对应于本征值的本征函数，在量子力学中也称为本征态

4. 量子力学算符的一个基本假设

   量子力学中表示力学量的算符$\hat{F}$是厄米算符，它们的本征函数构成完备集。当体系处于任意波函数$f(x)$所描述的状态时，力学量F没有确定的数值，而是有一系列可能的取值，这些取值就是算符$\hat{F}$的本征值。

   力学量在任意态中的平均值

   1. 分立谱

      如果体系的状态$f(x)$就是算符$\hat{F}$的一个本征态，那么：

$$\langle\hat{F}\rangle=\int\psi_n^*(x)\hat{F}\psi_n(x)\mathrm{dx}=\lambda_n \tag{19}$$

      任意态函数在本征函数系$\psi_n(x)$的展开为：

$$f(x)=\sum_{n}c_n\psi_n(x) \tag{20}$$

$$c_n = \int \psi_n^*(x) f(x) \mathrm{dx}$$

力学量F在任意态$f(x)$的平均值便是：

$$\langle F \rangle = \sum_n \lambda_n |c_n|^2 \tag{21}$$

它具有统计平均的形式，可以一般性的简化为：

$$\langle \hat{F} \rangle = \int f^*(x) \hat{F} f(x) \mathrm{dx} \tag{22}$$

2. 连续谱

   如果算符$\hat{F}$的本征值组成连续谱，则相应的本征方程为：

$$\hat{F} \psi_\lambda(x) = \lambda \psi_\lambda(x) \tag{23}$$

   这里的本征值是连续变化的实数，这时本征函数的正交关系为：

$$\int \psi_{\lambda'}^* \psi_\lambda \mathrm{dx} = \delta(\lambda - \lambda') \tag{24}$$

   任意态函数$f(x)$在本征函数集$\psi_\lambda(x)$的展开则表示为对本征值的积分：

$$f(x) = \int c(\lambda) \psi_\lambda(x) \mathrm{d}\lambda \tag{25}$$

   连续谱下的概率幅$c(\lambda)$为：

$$\begin{aligned} \int \psi_{\lambda'}^*(x) f(x) \mathrm{dx} &= \int \psi_{\lambda'}^*(x) [\int c_\lambda \psi_\lambda(x) \mathrm{d}\lambda] \mathrm{dx} \\ &= \int c(\lambda) [\int \psi_{\lambda'}^* \psi_\lambda \mathrm{dx}] \mathrm{d}\lambda \\ &= \int c(\lambda) \delta(\lambda - \lambda') \mathrm{d}\lambda \\ &= c(\lambda') \end{aligned} \tag{26}$$

   即：

$$c(\lambda) = \int \psi_\lambda(x) f(x) \mathrm{dx} \tag{27}$$

   力学量在$f(x)$态中的平均值为：

$$\langle F \rangle = \int \lambda |c(\lambda)|^2 \mathrm{d}\lambda \tag{28}$$

   连续谱形式下的一般形式与分立谱一致：

$$\langle \hat{F} \rangle = \int f^*(x) \hat{F} f(x) \mathrm{dx} \tag{29}$$

Static schrödinger equation

1. 定态薛定谔方程

$$\begin{aligned} \hat{H} \psi(\vec{r}) &= E \psi(\vec{r}) \\ \hat{H} |\psi\rangle &= E |\psi\rangle \end{aligned} \tag{30}$$

   不含时间的哈密顿算符的本征方程，即能量本征方程，$\psi(\vec{r})$是本征函数或本征态，E是本征值，即能量

2. 定态问题求解步骤
   1. 列出定态方程
   2. 基于单值、有限、连续条件给出本征值问题
   3. 解出本征值及其对应本征函数，确定归一化系数
   4. 给出完整含时波函数
3. 性质
   1. 概率密度不随时间演化
   2. 本征解归一化
   3. 平均值不随时间演化，满足守恒定律

Linear Hamonic oscillator

1. 线性谐振子在平衡点附近的势能形式为

$$U(x)=U(x_0)+\frac{k}{2}(x-x_0)^2,\quad k=\mu\omega_0^2,\text{固有频率} \tag{31}$$

2. 线性谐振子势能定态薛定谔方程
   1. 线性谐振子能级

$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega, n\in N \tag{32}$$

   $n=0$时的能量称为零点能

Appendix

附录二

Barrier and Potential Well

Potential Well

1. 一维对称无限深势阱

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi=E\psi \\ k^2=\frac{2mE}{\hbar^2} \\ \psi=A\cos(kx)+B\sin(kx) \\ \Leftrightarrow\psi=C\exp(ikx)+C'\exp(-ikx) \\ \Leftrightarrow\psi=D\sin(kx+\delta) \end{aligned} \tag{33}$$

> 上面三种解的形式是等价的，但在处理不同问题时难易程度不一样
>
> 解形式一对于势阱问题直观好理解
>
> 解形式二多用于势垒问题
>
> 解形式三在利用一些边界条件时方便

$$\begin{aligned} &\psi(-a)=A\cos(-ka)+B\sin(-ka)=0 \\ &\psi(a)=A\cos(ka)+B\sin(ka)=0 \\ \Rightarrow&\begin{vmatrix}\cos(-ka) & \sin(-ka) \\ \cos(ka) & \sin(ka)\end{vmatrix}=0 \\ \Rightarrow&\sin(2ka)=0 \\ \Rightarrow&k=\frac{n\pi}{2a} \\ \Rightarrow&E_n=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} \\ \Rightarrow&\psi=D\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a) \\ &normalization \\ \Rightarrow&D=\frac{1}{\sqrt{a}} \\ \Rightarrow&\psi=\frac{1}{\sqrt{a}}\sin\frac{n\pi}{2a}(x+a), x\in(-a,a), n\in N^+ \end{aligned} \tag{34}$$

从结果看到，n为偶数时为奇函数，波函数具有奇宇称；n为奇数时为偶函数，波函数具有偶宇称

空间波函数$\psi_n(x)$具有$(n-1)$个节点(零点)，其对应的概率密度具有n个极大值

2. 高维无限深势阱

对于高维势阱，进一步分离空间函数，按照类似的方法去推导，就能发现最终的波函数形式是各个正交坐标基矢上波函数的直乘形式

$$\begin{aligned}\psi(x,y) &= \sqrt{\frac{2}{l_x}}\sqrt{\frac{2}{l_y}}\sin\frac{n_x\pi x}{l_x}\sin\frac{n_y\pi y}{l_y} \\ E_i &= \frac{n_i^2\pi^2\hbar^2}{2ml_i^2}\end{aligned}\tag{35}$$

$$\begin{aligned}\psi(x,y,z) &= \sqrt{\frac{8}{l_xl_yl_z}}\sin\frac{n_x\pi x}{l_x}\sin\frac{n_y\pi y}{l_y}\sin\frac{n_z\pi z}{l_z} \\ E_i &= \frac{n_i^2\pi^2\hbar^2}{2ml_i^2}\end{aligned}\tag{36}$$

当各个方向上的势阱长度相等时，就会出现能级简并，能量本征值为

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\sum n_i^2 \tag{37}$$

能级的简并度取决于

$$\sum n_i^2 = \frac{2ma^2E}{\pi^2\hbar^2} \tag{38}$$

的整数解$(n_1, n_2, \cdots)$的个数

3. 态密度

态密度就是单位能量范围内的状态数

本节式子中：势阱全为无限深，N为势阱中占据的量子态总数，能量为E，各方向上势阱宽度为L，质量为m

$$\rho(E) = \frac{\mathrm{dN}}{\mathrm{dE}} \tag{39}$$

1. 一维势阱

一维势阱中，设一个粒子占据一个本征态，一维中，量子态总数与本征态总数相等，即$N = n$

$$\begin{aligned}E &= \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} = \frac{N^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \\ \mathrm{dE} &= \frac{N\pi^2\hbar^2}{mL^2}\mathrm{dN} \\ \rho(E) &= \frac{L}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2m}{E}}\end{aligned}\tag{40}$$

2. 二维势阱

设一个粒子占据一个本征态，二维中，一个量子态由坐标(n_1, n_2)表征，坐标系中每一个点表征一个量子态。空间中总量子态数就是以$\sqrt{n_1^2+n_2^2}$为半径的四分之一圆的面积，这是因为n_i全是正整数。

$$\begin{aligned}N &= \frac{1}{4}\pi(n_1^2+n_2^2) \\ E &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_1^2+n_2^2) \\ \rho(E) &= \frac{L^2m}{2\pi\hbar^2}\end{aligned}\tag{41}$$

可见，二维无限深势阱中态密度与能量本征值无关

3. 三维势阱——金属自由电子气模型

同样地，三维中，一个量子态由坐标(n_1, n_2, n_3)表征，空间中总量子态数是以$\sqrt{n_1^2+n_2^2+n_3^2}$为半径的八分之一球空间的点数目，即体积大小。

$$\begin{aligned}N &= \frac{1}{8}\frac{4\pi}{3}(n_1^2+n_2^2+n_3^2)^{\frac{3}{2}} \\ E &= \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2) \\ \rho(E) &= \frac{L^3}{4\pi^2\hbar^3}(2m)^{\frac{3}{2}}\sqrt{E}\end{aligned}\tag{42}$$

4. 费米面与费米能级

> 联动半导体物理学习

令三维无限深势阱中体系的本征能量方程为

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2\pi^2}{L_x^2}+\frac{n_2^2\pi^2}{L_y^2}+\frac{n_3^2\pi^2}{L_z^2}\right) = \frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{43}$$

$$\vec{k} \equiv \{k_x, k_y, k_z\} = \{\frac{n_1\pi}{L_x}, \frac{n_2\pi}{L_y}, \frac{n_3\pi}{L_z}\} \tag{44}$$

这是固体中电子波矢量的允许值，对应三维k空间的第一卦限

1. 费米面

   在三维k空间中，每个电子态占据的体积为$\frac{\pi^3}{L_xL_yL_z}=\frac{\pi^3}{V}$。假设固体包含$N$个原子，每个原子具有$q$个自由电子。一个电子有两种自选状态，因此每个状态占据的体积为$\frac{\pi^3}{2V}$，其倒数即为态密度

   k空间中电子对应占据的八分之一球体半径为k_F，空间中所有Nq个电子状态占据的体积等于空间的体积

$$
\begin{aligned}
&Nq\frac{\pi^3}{2V}=\frac{\pi k_F^3}{6}\\
&\rho=\frac{Nq}{V},\text{自由电子密度}\\
&k_F=(3\rho\pi^2)^{\frac{1}{3}}
\end{aligned}
\tag{45}
$$

   k空间中电子态所占据的区域与未被占据部分的分界面称为费米面，是一个八分之一球面，球半径为k_F，即费米半径

2. 费米能级

   费米半径对应的能级称费米能级，对于自由电子气

$$
E_F=\frac{\hbar^2k_F^2}{2m}\tag{46}
$$

3. 体积为V的固体中全部电子的总能量

   k空间中八分之一球壳的体积是

$$
\frac{1}{8}4\pi k^2\mathrm{dk}\tag{47}
$$

   这一球壳中的电子态数目为

$$
\frac{1}{2}\pi k^2\mathrm{dk}*\frac{2V}{\pi^3}\tag{48}
$$

   总能量为

$$
\frac{1}{2}\pi k^2\mathrm{dk}*\frac{2V}{\pi^3}*\frac{\hbar^2k^2}{2m}\tag{49}
$$

   积分结果

$$
E=\frac{\hbar^2Vk_F^5}{10\pi^2m}\tag{50}
$$

Barrier

势垒贯穿是一维散射问题

下面假定粒子从无限远处沿坐标轴正向射入势垒，势垒的势函数如下

$$
V(x)=\begin{Bmatrix}V_0,x\in(0,a)\\0,else\end{Bmatrix}\tag{51}
$$

这一问题我们需要探索反射系数和透射系数。反射系数是反射粒子数与入射总粒子数之比，即反射流密度与入射流密度之比。根据概率流密度守恒，透射系数即用一减去反射系数即可

由于势垒的存在，在$x\in(-\infty,0)$区域内，即存在入射粒子，也存在反射粒子；在$x\in(a,\infty)$区域内，只有透射粒子存在。波函数形式如下

$$
\psi(x)=\begin{Bmatrix}Ae^{ikx}+Re^{-ikx},x\in(-\infty,0)\\Se^{ikx},x\in(a,\infty)\end{Bmatrix}\tag{52}
$$

入射流粒子密度

$$
J_{in}=\frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^*-\psi^*\nabla\psi)=\frac{A^2\hbar k}{m}\tag{53}
$$

类似地有反射和投射粒子流密度，进一步得到投射和反射系数

$$
Re=R^2,Tr=S^2,(\text{取}A^2=1)\tag{54}
$$

在势垒内部的定态方程

$$
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2}\psi-\frac{2m}{\hbar^2}(V_0-E)\psi=0\tag{55}
$$

边界条件由波函数及其一阶导数在$x=0$的连续性确定

剩下的工作就与前面类似了

结论就是即便在入射能量小于势垒的情况下，透射系数依然不为零，这一现象就是量子隧穿效应

Operators

1. 算符满足交换律和结合律
2. 线性算符之和仍然是线性算符
3. 线性算符之积不一定是线性算符
4. 取逆算符、取复共轭算符、开方算符等不是线性算符

Momentum operators

> 对于分立谱，归一化结果归一化到1;
>
> 对于连续谱，归一化结果为狄拉克函数

1. 位置坐标本征方程
    1. 在坐标表象下，位置坐标算符在自身表象下是本身，本征方程为
    $$x\delta(x-x\prime)=x\prime\delta(x-x\prime) \tag{56}$$
    其中$x\prime$就是本征值，$\delta(x-x\prime)$就是本征函数
    2. 在动量表象下，位置坐标算符为
    $$\hat{x}=i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x} \tag{57}$$
    本征方程为
    $$i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}\psi_{x\prime}(p_x)=x\prime\phi_{x\prime}(p_x) \tag{58}$$
    本征值为$x\prime$
    本征函数为
    $$\phi_{x\prime}(p_x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(-ip_xx\prime) \tag{59}$$
2. 动量本征方程
    1. 在坐标表象下，动量本征方程为
    $$-i\hbar\nabla\psi_p(\vec{r})=\vec{p}\psi_p(\vec{r}) \tag{60}$$
    $$\psi_p(\vec{r})=C\exp\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r} \tag{61}$$
    归一化
    $$\begin{gathered}\int\psi_{p'}^*\psi_p\mathrm{dx}=C^2\int\exp(\frac{i}{\hbar}(p-p')x)\mathrm{dx}=C^2(2\pi\hbar)\delta(p-p')\\ \Rightarrow C=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\end{gathered} \tag{62}$$
    本征函数为
    $$\psi_p(\vec{r})=C^3\exp(\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}) \tag{63}$$
    2. 在动量表象下，算符是其本身
    $$p_x\delta(p_x-p_{x'})=p_{x'}\delta(p_x-p_{x'}) \tag{64}$$

Angular momentum operators

角动量算符我们单独成章节，点击下方传送门前往角动量章节

角动量传送

Hermitian operator

所有力学量的数值都是实数。当量子体系处于一个算符的本征态时，该算符的本征值就是这个力学量的取值，这样的本征值必须为实数。厄米算符的本征值就是实数，因此量子力学中表示力学量的算符都是厄米算符

Definition

1. 厄米算符定义

   对于任意两个函数ψ, ϕ，如果算符$\hat{F}$满足如下等式：

$$\int \psi^* \hat{F} \phi \mathrm{dx} = \int (\hat{F}\psi)^* \phi \mathrm{dx} \tag{65}$$

   则称该算符为厄米算符

2. 算符的厄米共轭

   算符$\hat{F}$的厄米共轭用$\hat{F}^\dagger$表示，定义如下：

$$\int (\hat{F}\psi)^* \phi \mathrm{dx} = \int \psi^* \hat{F}^\dagger \phi \mathrm{dx} \tag{66}$$

   比较厄米算符的定义可以知道，如果一个算符与它的厄米共轭相等，这该算符是厄米算符，这也是厄米算符的另一种定义

3. 体系的哈密顿算符是厄米算符

Properties of eigenfunction

厄米算符本征函数具有以下性质：

1. 正交性

   相互正交的定义如下：两个函数ψ_1, ψ_2满足关系式

$$\int \psi_1 \psi_2^* \mathrm{dx} = 0 \tag{67}$$

   厄米算符属于不同本征值的两个本征函数相互正交

   厄米算符属于同一本征值的本征函数互相正交，此情况对应简并情况

2. 完备性

   设厄米算符$\hat{F}$的正交归一本征函数是$\phi_n(x)$，对应的本征值是λ_n，则任意函数$\psi(x)$可以按$\phi_n(x)$展开为级数

$$\psi_x = \sum_n c_n \phi_n(x) \tag{68}$$

   系数c_n与自变量无关。本征函数具有的这种性质称为完备性

Commutation relation

所谓对易，就是在运算过程中可以调换顺序

在经典力学中，所有力学量都用函数表示，他们之间都是对易的

但在量子力学中，算符之间存在不对易性。量子力学算符对易关系定义如下：

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \tag{69}$$

算符的对易关系与所选择的坐标系和表象无关

Commonly used commutation identity

1. 对易式满足的代数恒等式

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$$
$$[\hat{A}, \hat{A}] = 0$$

$$
\begin{aligned}
&[\hat{A},c]=0\\
&[\hat{A},\hat{B}+\hat{C}]=[\hat{A},\hat{B}]+[\hat{A},\hat{C}]\\
&[\hat{A},\hat{B}\hat{C}]=\hat{B}[\hat{A},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{B}]\hat{C}\\
&[\hat{A}\hat{B},\hat{C}]=\hat{A}[\hat{B},\hat{C}]+[\hat{A},\hat{C}]\hat{B}\\
&[\hat{A},\hat{B}]^\dagger=[\hat{B}^\dagger,\hat{A}^\dagger]\\
&[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]=0
\end{aligned}
\tag{70}
$$

2. 设$\vec{A},\vec{B}$为矢量算符，F为标量算符

$$
\begin{aligned}
&[F,\vec{A}\cdot\vec{B}]=F\vec{A}\cdot\vec{B}-\vec{A}\cdot\vec{B}F\\
&[F,\vec{A}\times\vec{B}]=\vec{A}\times[F,\vec{B}]+[F,\vec{A}]\times\vec{B}
\end{aligned}
\tag{71}
$$

3. 设算符A,B和他们的对易式$[A,B]$都对易，有

$$
\begin{aligned}
&[A,B^n]=nB^{n-1}[A,B]\\
&[A^n,B]=nA^{n-1}[A,B]
\end{aligned}
\tag{72}
$$

Commutation indentity

1. 如果$[A,B]\neq 0$，λ是实数，则有

$$
e^{\lambda A}F(B)e^{-\lambda A}=F(e^{\lambda A}Be^{-\lambda A})
\tag{73}
$$

2. Hadamard公式

   如果$[A,B]\neq 0$，则有

$$
e^{A}Be^{-A}=B+\frac{1}{1!}[A.B]+\frac{1}{2!}[A,[A,B]]+\frac{1}{3!}[A,[A,[A,B]]]+\cdots
\tag{74}
$$

   证明提示：参量微分法，构造$F(\lambda)=e^{A\lambda}Be^{-A\lambda}$，在零点泰勒展开比对即可

3. Baker-Campbell-Hausdriff公式

   在处理指数形式算符的过程中，BCH公式特别实用

   如果算符$\hat{A},\hat{B}$满足$[\hat{A},\hat{B}]=\hat{C}$，并且算符$\hat{C}$和算符$\hat{A},\hat{B}$对易，则有：

$$
\exp(\hat{A}\alpha+\hat{B}\beta)=exp(\hat{B}\beta)\exp(\hat{A}\alpha)\exp(\frac{\beta\alpha}{2}\hat{C})
\tag{75}
$$

Basic commutation

力学量都是坐标和动量的函数，利用位置和动量之间的对易关系可以得出其他力学量之间的对易关系，因此位置和动量的对易关系称为基本对易式

$$
[\hat{x_\alpha},\hat{p_\beta}]=i\hbar\delta_{\alpha\beta}
\tag{76}
$$

其中$\hat{x_\alpha}(\alpha=1,2,3)\equiv(x,y,z),\hat{p_\beta}(\beta=1,2,3)\equiv(\hat{p_x},\hat{p_y},\hat{p_z})$

对易关系本质是算符间作用于波函数的一种表达，所以在证明对易关系时要借助波函数ψ

相关证明参见本节附录

commutation linked with momentum and coordination

以下公式族中$\vec{r}$表示位置算符，$F(\vec{r},\vec{p})$为标量算符，$V(r)$为标势

$$
\begin{aligned}
&[p_x,f(x)]=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}f(x)\\
&[\vec{p},F]=-i\hbar\nabla F\\
&[\vec{p},V(r)]=-i\hbar\nabla V(r)\\
&[\vec{p},\frac{1}{r}]=i\hbar\frac{\vec{r}}{r^3}\\
&[p^2,\frac{1}{r}]=2\hbar^2\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\\
&[p^2,r^2]=-\hbar^2(6+4r\frac{\partial}{\partial r})\\
&[\vec{r},F]=i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{p}}F\\
&[\vec{r},p^2]=2i\hbar\vec{p}\\
&[\vec{r}\cdot\vec{p},p^2]=2i\hbar p^2\\
&[\vec{r}\cdot\vec{p},V(r)]=-i\hbar\vec{r}\cdot(\nabla V(r))
\end{aligned}
\tag{77}
$$

部分相关证明参见本节附录

Physical meaning of commutative operators

1. 定理

   如果两个算符有一组共同的本征矢$|n\rangle$，并且它们构成完备集，则这两个算符对易

2. 逆定理

   如果两个算符对易，则他们有共同的本征矢

3. 推广定理

   如果一组算符有共同的本征矢，且它们构成完备集，则这一组算符中任意两个算符对易，并且该定理的逆定理也成立

Appendix

附录三

Conservation law

Ehrenfest principal

1. 埃伦费斯特定理

   埃伦费斯特定理时描述力学量的平均值随时间的演化关系

   > 注意这里描述的是力学量的平均值对时间的演化，而不是力学量随时间变化的平均值

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle A\rangle=\frac{1}{i\hbar}[A,H]+\langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle \tag{78}$$

   数学证明参见附录

2. 海森堡运动方程

   当力学量不随时间演化，埃伦费斯特定理就转化为海森堡运动方程

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle A\rangle=\frac{1}{i\hbar}[A,H] \tag{79}$$

3. 位置、动量和力的平均值关系

$$\begin{gathered}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle x\rangle=\frac{1}{i\hbar}\langle[x,H]\rangle=-\frac{1}{i\hbar}\langle[H,x]\rangle\\=\frac{i}{\hbar}\langle[H,x]\rangle=\frac{i}{2m\hbar}\langle[p_x^2+p_y^2+p_z^2,x]\rangle\\=\frac{i}{2m\hbar}\langle[p_x^2,x]\rangle=\frac{i}{2m\hbar}\langle p_x[p_x,x]\rangle+\frac{i}{2m\hbar}\langle[p_x,x]p_x\rangle\\=\frac{1}{m}\langle p_x\rangle\end{gathered} \tag{80}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle\vec{r}\rangle=\frac{1}{m}\langle\vec{p}\rangle \tag{81}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle p_x\rangle=\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\rangle \tag{82}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle\vec{p}\rangle=\langle-\nabla V\rangle \tag{83}$$

   这些结果与经典力学的牛顿定律形式是一致的

Virial theorem

1. 位力定理描述当体系处于定态下与动能相关的平均值

$$2\langle T\rangle=\langle\vec{r}\cdot(\nabla V)\rangle \tag{84}$$

   数学证明见附录

   特别的，如果势场$V(x,y,z)$是x,y,z的n次齐次函数，则有

$$2\langle T\rangle=n\langle V\rangle \tag{85}$$

这一关系称为欧拉齐次定理

1. 对于谐振子势，$n=2$
2. 对于库伦势，$n=1$
3. 对于δ势，$n=-1$

Hellmann-Feynman theorem

1. 借助赫尔曼-费曼定理可以得出关于力学量平均值的许多信息而不必借助波函数进行繁琐计算

   设体系的哈密顿量中含有某个参数λ，E_n是体系哈密顿量的本征值，相应的本征函数已经归一化，则有

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda}=\langle\psi_n|\frac{\partial H}{\partial \lambda}|\psi_n\rangle=\langle\frac{\partial H}{\partial \lambda}\rangle_n \tag{86}$$

   数学证明参见附录

conserved quantity

1. 守恒量：与时间无关的力学量与体系的哈密顿量对易

$$[A,H]=0 \tag{87}$$

2. **守恒量的性质**
   1. 守恒量的平均值不随时间变化(Ehrenfest Principal)
   2. 任意态ψ_n上测量守恒力学量的测量值的概率分布不随时间变化

      证明参见本节附录
3. 能级简并与守恒量的关系

   定理：如果体系存在两个彼此不对易的守恒量，则体系的能级一般是兼并的

   推论：如果体系有一个守恒量，并且体系的某一能级不简并，那么对应于该能量本征值的本征态只有一个，并且该本征态必然是守恒量的本征态

   推论：如果体系的两个守恒量彼此不对易，并且对易值为常数，则体系的所有能级都简并，并且简并都为无穷大
4. 一些体系的守恒量
   1. 若体系的哈密顿量不显含时间，则体系的哈密度量是守恒量
   2. 自由粒子的角动量和哈密顿量都是守恒量
   3. 处于中心力场中的例子，角动量守恒但动量不守恒
5. 定态与守恒量的比较
   1. 定态
      1. 定态是体系的能量本征态，是体系的特殊状态
      2. 定态下力学量的平均值和测量值的概率分布与时间无关，不论力学量是不是守恒量
   2. 守恒量
      1. 守恒量是体系的特殊力学量，与体系的哈密顿量对易
      2. 守恒量在一切状态下的平均值与测量值的概率分布都不随时间变化，不论是否处于定态
   3. 断言

      只有当量子体系不处于定态，并且所关注的力学量不是守恒量，那么我们才需要关注该力学量的平均值和测量值的概率分布随时间的变化

Appendix

附录四

Dirac notation

Basic form

在量子力学中，系统的状态由波函数描述的是波动力学的方法，也可以用态矢量描述，这是矩阵力学的方法。采用狄拉克符号能直观地表达量子力学的概念和量子系统的性质，并能用来简洁的处理运算过程

1. 系统的态用狄拉克符号$|\rangle$来表示，例如
   1. $|\Psi\rangle$表示波函数Ψ
   2. $\langle\Psi|$表示波函数Ψ的复共轭Ψ^*
   3. $|\psi_n\rangle$表示一个算符的本征态
   4. $|x'\rangle$表示坐标的本征态，本征值为x'
   5. $|p'\rangle$表示动量的本征态，本征值为p'
   6. $|lm\rangle$表示(l^2, l_z)的共同本征态，本征值分别为$l(l+1), m\hbar$
2. 分立谱，算符本征态的正交归一性表示为：
$$\int \psi_m^* \psi_n \mathrm{dx} = \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn} \tag{88}$$
3. 连续谱，算符本征态的正交归一性表示为：
$$\int \psi_{\lambda'}^* \psi_\lambda \mathrm{dx} = \langle\psi_{\lambda'}|\psi_\lambda\rangle = \delta(\lambda - \lambda') \tag{89}$$
4. 在矩阵力学中，本征态$|\psi_n\rangle$称为本征矢(基矢)，$\langle\psi_m|\psi_n\rangle$可以理解为基矢$|\psi_n\rangle$向基矢$\langle\psi_m|$的投影，下标不同时，二基矢正交，投影为零；下标相同时两者重合
5. 任意两个量子态的内积表示为：
$$\int \psi^* \phi \mathrm{dx} = \langle\psi|\phi\rangle \tag{90}$$
这个也可以理解为态矢量之间的投影。复共轭形式为
$$\langle\psi|\phi\rangle^* = \langle\phi|\psi\rangle \tag{91}$$
6. 一个任意态矢量$|\psi\rangle$向坐标本征矢$\langle x|$的投影就是这个态以x为变量的波函数
$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x) \tag{92}$$
7. 算符$\hat{F}$的本征方程为
$$\hat{F}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle \tag{93}$$
8. 薛定谔方程表示为
$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(x)\rangle \tag{94}$$
9. 一个算符$\hat{F}$作用于态矢量$|\psi(x)\rangle$得到新的态矢量$|\phi(x)\rangle = \hat{F}|\psi(x)\rangle$，它的复共轭为
$$\langle\phi(x)| = (\hat{F}|\psi(x)\rangle)^* = \langle\psi(x)|F^\dagger \tag{95}$$
10. 算符$\hat{F}$在任意态$|\psi\rangle$的平均值(期望)表示为
$$\int \psi^* \hat{F} \psi \mathrm{dx} = \langle\psi|\hat{F}\psi\rangle = \langle\hat{F}\rangle \tag{96}$$
11. 投影算符

投影算符的一般定义为$|\alpha\rangle\langle\beta|$，它作用于$|\Psi\rangle$给出$|\alpha\rangle\langle\beta|\Psi\rangle$，这是将态矢量$\Psi$投影到态矢量$|\alpha\rangle$上，给出一个长度为$\langle\beta|\Psi\rangle$、沿$|\alpha\rangle$方向的态矢量
$$|\alpha\rangle\langle\beta|\Psi\rangle = \langle\beta|\Psi\rangle|\alpha\rangle \tag{97}$$

The completeness of eigenvector

设$\{|\psi_n\rangle\}$是算符$\hat{F}$的本征矢集，相应的本征值为λ_n，本征方程为
$$\hat{F}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle \tag{98}$$
相应的复共轭函数为
$$\langle\psi_n|\hat{F}^\dagger = \langle\psi_n|\lambda_n^* \tag{99}$$
将任意态Ψ按本征矢$|\psi_n\rangle$展开
$$\Psi = \sum_n c_n|\psi_n\rangle \tag{100}$$

n

相应的概率幅为

$$c_n = \int \psi^*(x)\Psi(x)\mathrm{dx} = \langle\psi_n|\Psi\rangle \tag{101}$$

因为$\langle\psi_n|\Psi\rangle$是一个数，因此是可对易的，可以放在本征矢之后，即

$$|\Psi\rangle = \sum_n \langle\psi_n|\Psi|\psi_n\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\Psi\rangle \tag{102}$$

上式可以理解为一个算符$|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$作用在一个任意态上，我们将这个算符称为密度算符。为保证左右的恒等，要求

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1 \tag{103}$$

表明密度算符对所有本征态的求和结果为一个单位算符。上式所表示的性质等价于本征矢的封闭性，通常称为本征矢的完备性关系式，因为利用它可以将任意态矢量按本征矢展开

$$|\Psi\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|\Psi\rangle = \sum_n \langle\psi_n|\Psi|\psi_n\rangle = \sum_n c_n|\psi_n\rangle \tag{104}$$

再注意下面这个式子，我们将密度算符两边进行投影

$$\sum_n \langle x\prime|\psi_n\rangle\langle\psi_n|x\rangle = \langle x\prime|x\rangle \tag{105}$$

$\langle x|\psi\rangle$的含义是将态函数在x上投影，得到的就是$\psi(x)$，$\langle x\prime|x\rangle$则描述了坐标算符在坐标表象中的正交性，其值为$\delta(x-x\prime)$

由此得到

$$\sum_n \psi(x)^*\psi(x\prime) = \delta(x-x\prime) \tag{106}$$

这就是本征态的封闭性

Angular momentum

角动量锚点

> 为便于书写，我们用AM替代角动量

Angular momentum operator

1. 直角坐标下角动量表示

$$\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \tag{107}$$

由此得到角动量各个分量

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= yp_z - zp_y \\ \hat{L}_y &= zp_x - xp_z \\ \hat{L}_z &= xp_y - yp_x \end{aligned} \tag{108}$$

2. 球坐标下角动量表示

$$\hat{L}_x = i\hbar(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

$$\hat{L}_y = i\hbar(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}) \tag{109}$$

$$\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

3. 角动量平方算符的球坐标形式

$$l^2=-\hbar^2\Big[\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2})+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})\Big] \tag{110}$$

4. 总角动量算符球坐标形式

$$\vec{L}=-i\hbar\Big[\vec{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\vec{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\Big] \tag{111}$$

可见总角动量算符与径向坐标r无关，只依赖于角量(θ,φ)

Commutation relation of AM

1. 常见的算符对易关系如下

$$\begin{gathered}[l_\alpha,x_\beta]=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}i\hbar x_\gamma\\ [l_\alpha,p_\beta]=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}i\hbar p_\gamma\\ [l_\alpha,l_\beta]=\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}i\hbar l_\gamma\\ [l_\alpha,r^2]=0\\ [l_\alpha,p^2]=0\\ [l_\alpha,l^2]=0\\ \vec{l}\times\vec{l}=i\hbar\vec{l}\end{gathered} \tag{112}$$

$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$是$Ricci$符号，相关数学证明参考本节附录

2. 与角动量算符有关的对易式
   1. $\vec{l}=\vec{r}\times\vec{p}$，$F=F(\vec{r},\vec{p})$为标量算符，则有

   $$[F,\vec{l}]=i\hbar\vec{r}\times\frac{\partial F}{\partial\vec{r}}-i\hbar\frac{\partial F}{\partial p}\times\vec{p} \tag{113}$$

   2. $V(r)$为径向坐标函数

   $$[\vec{l},V(r)]=0 \tag{114}$$

   角动量与径向坐标无关，因此上式的成立是显然的

   3. **动能算符球坐标形式**

   $$\begin{gathered}\hat{T}=\frac{p_r^2}{2m}+\frac{l^2}{2mr^2}\\ p_r=-i\hbar(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r})\end{gathered} \tag{115}$$

   相关证明见本节附录

Eigenfunction of L_z

球坐标系下角动量z分量的形式为

$$\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{116}$$

对应的本征方程为

$$\begin{gathered}\hat{L}_z\psi(\varphi)=l_z\psi(\varphi)\\ \Rightarrow\frac{\dot{\psi}}{\psi}=\frac{il_z}{\hbar}\\ \Rightarrow\psi(\varphi)=C\exp(\frac{il_z}{\hbar}\varphi)\end{gathered} \tag{117}$$

注意周期性边界条件

$$\begin{aligned}&\psi(\varphi+2\pi)=\psi(\varphi)\\&\Rightarrow \exp(\frac{2\pi i l_z}{\hbar})=1\\&\Rightarrow l_z=m\hbar,\quad m\in Z\end{aligned}\tag{118}$$

归一化得到

$$\int_0^{2\pi}\psi^*\psi \mathrm{d}\varphi=2\pi C^2=1\Rightarrow C=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\tag{119}$$

由此得到$\hat{L}_z$对应的本征值和本征函数为

$$l_z=m\hbar\quad \psi_m(\varphi)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\quad m\in Z\tag{120}$$

本征函数族$\psi_m(\varphi)$是完备正交基

Eigenfunction of $\hat{L}^2$

角动量平方算符在球坐标系下的表示为

$$\hat{L}^2=-\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]\tag{121}$$

角动量平方算符对应的本征函数是球谐函数

$$\hat{L}^2Y(\theta,\varphi)=\lambda\hbar^2Y(\theta,\varphi)\tag{122}$$

前面我们说过角动量算符与径向坐标无关，在这里还可以看到角动量平方算符关于θ,φ的作用是独立的，因此可以进一步分离球谐函数

$$Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi)\tag{123}$$

带入本征函数整理得到

$$\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}+\lambda\sin^2\theta=0\tag{124}$$

上式是关于两个独立部分函数的组合，恒成立的条件是关于不同独立变量函数的值互为相反数

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}=-k\\&\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\lambda\sin^2\theta=k\end{aligned}\tag{125}$$

注意到关于φ的函数需要满足自然周期性边界条件，关于φ的函数解形式为

$$\Phi(\varphi)=ce^{im\varphi}+de^{-im\varphi},\quad m=\sqrt{k},m\in N,k\in N\tag{126}$$

显然上式的等价表述如下

$$\Phi(\varphi)=Ae^{im\varphi},\quad m\in Z\tag{127}$$

关于θ的函数是连带勒让德方程，当$m=k=0$时退化为勒让德方程

$$\begin{aligned}&x=\cos\theta,\quad \Theta(\theta)=y(x)\\&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}}[(1-x^2)\frac{\mathrm{dy}}{\mathrm{dx}}]+(\lambda-\frac{m^2}{1-x^2})y=0\end{aligned}\tag{128}$$

勒让德方程的解是勒让德多项式。关于球谐函数的更多内容请参考数学物理方程，这里只给出最终结论

角动量平方算符的本征值和本征函数为

$$\hat{L}^2=l(l+1)\hbar^2,\quad l\in N\tag{129}$$

$$Y_{lm}(\theta,\varphi)=A_{lm}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi},\quad l\in N,m=0,\pm1,\cdots,\pm l\tag{130}$$

归一化系数为

$$A_{lm} = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} \tag{131}$$

球谐函数$Y_{lm}(\theta,\varphi)$是角动量平方算符和$\hat{L}_z$算符的共同本征函数

$$\begin{aligned}\hat{L}_z Y_{lm}(\theta,\varphi) &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}(A_{lm}P_l^m(\cos\theta)e^{im\varphi}) \\ &= m\hbar Y_{lm}(\theta,\varphi)\end{aligned} \tag{132}$$

角动量平方算符和角动量z分量的本征值分别为$l(l+1)\hbar^2, m\hbar$。因为l表征角动量的大小，所以称为角量子数，因为m与体系的磁矩性质有关，所以称为磁量子数。对于一个给定的l，m有$(2l+1)$个取值，因此对于角动量平方算符的一个本征值，对应有$(2l+1)$个不同的本征函数

这种一个本征值对应有一个以上本征函数的情况称为简并，对应于同一个本征值的本征函数的数目称为简并度，因此角动量平方算符的本征值是$(2l+1)$度简并的

> 根据光谱学，我们将：
>
> 1. $l=0$：s态(sharp)
> 2. $l=1$：p态(principal)
> 3. $l=2$：d态(diffuse)
> 4. $l=3$：f态(fundamental)
>
> 处于这些态的粒子简称s,p,d,f粒子

H3 Appendix

附录五

H2 Centeral force field

H3 Prerequisite

1. 中心力场中粒子的角动量及其分量是守恒量
2. 中心力场中粒子的角动量分量彼此不对易，这一点表明
   - 角动量分量不能同时具有确定值，即中心力场粒子运动不能简化为一个平面运动
   - 中心力场中的粒子能级一般简并
3. 中心力场中粒子自由度为3，通常选取$(H,\hat{l}^2,\hat{l}_z)$为守恒量完全集

H3 Radial equation

势场函数只是径向变量r而与角量θ,φ无关的函数是球对称的，这样的势场称为中心势场。粒子在中心势场中的哈密顿算符为

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \tag{133}$$

球坐标系下动能算符$\hat{T}$的形式为

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} \tag{134}$$

于是中心力场中的能量本征方程为

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} + V(r)\right]\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{135}$$

势场只是径向函数而与角量无关，做分离变量并结合能量本征方程和角动量平方算符本征值即有

$$
\begin{aligned}
&\Big[\frac{\hat{p}_r^2}{2m}+\frac{\hat{l}^2}{2mr^2}+V(r)\Big]R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=ER_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)\\
&\Big[\frac{\hat{p}_r^2}{2m}+\frac{\hat{l}^2}{2mr^2}\Big]R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)+[V(r)-E]R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=0\\
&Y_{lm}(\theta,\varphi)\frac{\hat{p}_r^2}{2m}R_l(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)-[E-V(r)]R_l(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)=0\\
&\frac{\hat{p}_r^2}{2m}R_l(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}R_l(r)-[E-V(r)]R_l(r)=0
\end{aligned}
\tag{136}
$$

注意到

$$
\begin{aligned}
\hat{p}_r&=-i\hbar[\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}]\\
\hat{p}_r^2&=-\hbar^2[\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}]\\
&=-\hbar^2\frac{1}{r}[\frac{\partial^2}{\partial r^2}r]
\end{aligned}
\tag{137}
$$

即得

$$
\Big[\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))+\frac{l(l+1)}{r^2}\Big]R_l=0 \tag{138}
$$

中心力场径向方程为

$$
\ddot{\chi}_l+\Big[\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(r))+\frac{l(l+1)}{r^2}\Big]\chi_l=0,\quad \chi_l=R_l\cdot r \tag{139}
$$

1. 不同的中心力场决定了不同的径向波函数和能量本征值
2. 径向方程中不包含磁量子数，因此能量本征值与m无关而只与l有关
3. 中心力场中粒子的能量是$(2l+1)$度简并的

请记住下面这个关系

$$
\frac{1}{r}[\frac{\partial^2}{\partial r^2}r]=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} \tag{140}
$$

H3 Coulomb potential field

库伦势场是最常见的中心势场，我们考虑单电子情形

H4 Radial Eigenfuncation

电子在库伦势场中的势能为

$$
V(r)=-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}=-\frac{Ze_s^2}{r} \tag{141}
$$

带入中心力场径向方程得到

$$
\ddot{\chi}_l+\Big[\frac{2m}{\hbar^2}(E+\frac{Ze_s^2}{r})-\frac{l(l+1)}{r^2}\Big]\chi_l=0,\quad \chi_l=R_l\cdot r \tag{142}
$$

为便利求解引入参数

$$
\alpha=\sqrt{\frac{-8mE}{\hbar^2}}\quad \beta=\frac{2mZe_s^2}{\alpha\hbar^2}\quad \rho=\alpha r \tag{143}
$$

$$
\frac{\ddot{\chi}_l}{\alpha^2}=\frac{\mathrm{d}^2\chi_l}{\mathrm{d}(\alpha r)^2}\quad \frac{2mZe_s^2}{\alpha^2\hbar^2 r}=\frac{\beta}{\rho} \tag{144}
$$

因此库伦势场中径向方程为

$$
\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}\rho^2}+\Big[\frac{\beta}{\rho}-\frac{1}{4}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\Big]\chi \tag{145}
$$

Eigenvalue

本节给出库伦势场能量本征函数的本征值，采取的数学工具有渐进分析和级数求解法，涉及数学较多。考虑到本节的重要性，故不放在附录而置于此呈现

1. 渐进分析：考虑当$\rho \to \infty$

$$\frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{1}{4}\chi = 0 \tag{146}$$

方程的形式解满足

$$\chi = Ae^{-\frac{1}{2}\rho} + Be^{\frac{1}{2}\rho} \tag{147}$$

考虑到波函数的有界性，应该略去上侧第二项

由此，径向方程的形式解可以表述为

$$\chi(\rho) = e^{-\frac{1}{2}\rho}f(\rho) \tag{148}$$

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}\rho} &= -\frac{1}{2}e^{-\frac{\rho}{2}}f + e^{-\frac{1}{2}\rho}\frac{\mathrm{df}}{\mathrm{d}\rho} \\ \frac{\mathrm{d}^2\chi}{\mathrm{d}\rho^2} &= \frac{1}{4}e^{-\frac{1}{2}\rho}f - e^{-\frac{1}{2}\rho}\frac{\mathrm{df}}{\mathrm{d}\rho} + e^{-\frac{1}{2}\rho}\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{f}}{\mathrm{d}\rho^2} \end{aligned} \tag{149}$$

整理得到径向方程为

$$\frac{\mathrm{d}^2\mathrm{f}}{\mathrm{d}\rho^2} - \frac{\mathrm{df}}{\mathrm{d}\rho} + \left[\frac{\beta}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]f = 0 \tag{150}$$

2. 级数分析：径向方程在$\rho = 0$处是奇点，方程在这一点附近不能展开为幂级数，但可以写成广义幂级数

$$\begin{gathered} f(\rho) = \sum_{v=0}^{\infty} b_v\rho^{s+v} \quad (b_0 \neq 0) \\ \chi = \exp{(-\frac{1}{2}\rho)}f(\rho) \end{gathered} \tag{151}$$

径向波函数R_l为

$$R_l = \frac{\chi}{r} = \frac{\alpha\chi}{\alpha r} = \frac{\alpha\chi}{\rho} = \alpha e^{-\frac{\rho}{2}}\sum_{v=0}^{\infty} b_v\rho^{s+v-1} \tag{152}$$

径向波函数在$r \to 0$为有限值，即指数不能为负数，因此必须至少有$s \geq 1$

3. 技术分析：将级数形式解带入径向方程得到

$$\sum_{v=0}^{\infty}[(s+v)(s+v-1) - l(l+1)]b_v\rho^{s+v-2} + \sum_{v=0}^{\infty}[\beta - (s+v)]b_v\rho^{s+v-1} = 0 \tag{153}$$

单独列出上式左侧第一求和项的第零项

$$[s(s-1) - l(l+1)]b_0\rho^{s-2} + \sum_{v=1}^{\infty}[(s+v)(s+v-1) - l(l+1)]b_v\rho^{s+v-2} + \sum_{v=0}^{\infty}[\beta - (s+v)]b_v\rho^{s+v-1} = 0 \tag{154}$$

将上式两个求和式进行整合

$$[s(s-1) - l(l+1)]b_0\rho^{s-2} + \sum_{v=0}^{\infty}\Big[[(s+v+1)(s+v) - l(l+1)]b_{v+1} + [\beta - (s+v)]b_v\Big]\rho^{s+v-1} = 0 \tag{155}$$

基于幂级数各项系数须为零得到

$$\begin{gathered} s(s-1) - l(l+1) = 0 \\ [(v+s+1)(v+s) - l(l+1)]b_{v+1} = (v+s-\beta)b_v \end{gathered} \tag{156}$$

由前式得到

$$s = l+1 \quad s = -l \tag{157}$$

我们根据前面镜像函数在趋于原点的极限性质可知应当舍去非正数项

由后式得到

$$b_{v+1} = \frac{v+l+1-\beta}{(v+1)(v+2+2l)}b_v \tag{158}$$

$$f(\rho) = \sum_{v=0}^{\infty} b_v\rho^{v+l+1} \quad b_v \neq 0 \tag{159}$$

容易看到幂级数系数是收敛的，收敛半径无穷大

$$\lim_{v\to\infty}\frac{b_{v+1}}{b_v}=\frac{1}{v} \tag{160}$$

注意自然指数形式的泰勒展开式

$$e^x=\sum_{v=0}^{\infty}\frac{1}{v!}x^v \tag{161}$$

幂指数系数在$v\to\infty$时的比值也为$\frac{1}{v}$，根据无穷级数的性质，在v很大时，$f(\rho)$与e^{ρ}相当，于是

$$R_l=\frac{\chi}{r}=\frac{\alpha e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho)}{\rho}=\frac{\alpha e^{\frac{\rho}{2}}}{\rho}\quad(v\to\infty) \tag{162}$$

明显波函数在无穷远处是发散的，不满足波函数的有界性

为保障波函数的基本有界性要求，势必要求级数在某一项开始后截断中止为多项式

4. 级数分析

考虑$f(\rho)$的级数求和终止于最高指标数n_r

$$f(\rho)=\sum_{v=0}^{n_r}b_v\rho^{v+l+1} \tag{163}$$

$$\chi=e^{-\frac{\rho}{2}}f(\rho) \tag{164}$$

多项式的发散速度小于负指数函数的收敛速度，因此径向函数的收敛性得以保障

高于最高指标数的幂级数系数均为零，根据递推式有

$$b_{nr+1}=\frac{n_r+l+1-\beta}{(n_r+2l+2)(n_r+1)}b_{nr}=0 \tag{165}$$

若$b_{nr}\neq 0$则

$$n\equiv n_r+l+1=\beta\quad\alpha=\sqrt{\frac{-8mE}{\hbar^2}}\quad\beta=\frac{2mZe_s^2}{\alpha\hbar^2} \tag{166}$$

表明β是正整数，上式扮演了一个量子化条件，由此可以确定各量子数的取值范围

5. 径向量子数

上面我们看到最高指标数n_r量子数，称为径向量子数，它的最小取值为零，最大取值为$\max(n-l-1)=n-1$，因此取值许可范围为

$$n_r=0,1,2,\cdots,n-1 \tag{167}$$

同样的分析，角量子数的取值范围是

$$l=0,1,2,\cdots,n-1 \tag{168}$$

主量子数的取值范围是

$$n=1,2,\cdots \tag{169}$$

由此得到能量本征值为

$$n=\beta=\frac{2mZe_s^2}{\alpha\hbar^2}=\frac{2mZe_s^2}{\hbar^2}\frac{\hbar}{\sqrt{-8mE}}=\frac{Ze_s^2\sqrt{m}}{\hbar\sqrt{-2E}} \tag{170}$$

$$E_n=-\frac{mZ^2e_s^4}{2\hbar^2n^2}\quad e_s^2=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \tag{171}$$

经过上面的分析可以得到结论：在体系能量处于小于零的状态(束缚态)，体系能量量子化来自波函数在无穷远处的有界性条件

H4 General Laguerre polynomial

将$f(\rho)$的级数截断多项式形式和系数递推公式结合，并将所有系数表示为b_0，就得到如下结果

$$f(\rho)=b_0\rho^{l+1}\frac{(2l+1)!(n-l-1)!}{(n+l)!}L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \tag{172}$$

其中L_{n-l-1}^{2l+1}就是广义拉盖尔多项式，它的一般性定义为

$$L_n^{\alpha}(x)=\Gamma(n+\alpha+1)\sum_{k=0}^{n}\frac{(-1)^k}{k!(n-k)!\Gamma(k+\alpha+1)} \tag{173}$$

拉盖尔多项式的正交关系为

$$\int_0^{\infty}L_m^{\alpha}L_n^{\alpha}e^{-x}x^{\alpha}\mathrm{dx}=\delta_{mn}\frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!} \tag{174}$$

包含拉盖尔多项式形式的径向方程为

$$R_{nl}(\rho)=N_{nl}e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^lL_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \tag{175}$$

$$\rho = \alpha r = \sqrt{\frac{-8mE}{\hbar^2}} r \quad E_n = -\frac{mZ^2 e_s^4}{2\hbar^2 n^2} \tag{176}$$

第一玻尔半径是

$$a = \frac{\hbar^2}{m e_s^2} \tag{177}$$

$$\rho = \frac{2Z}{an} r \tag{178}$$

于是

$$R_{nl}(r) = N_{nl} (\frac{2Z}{an} r)^l \exp(-\frac{Z}{an} r) L_{n-l-1}^{2l+1} (\frac{2Z}{an} r) \tag{179}$$

需要强调的是镜像函数本身已经是归一化的，即

$$\int_0^\infty R_{nl}^2 r^2 \mathrm{dr} = 1 \tag{180}$$

由此得到N_{nl}为

$$N_{nl} = \sqrt{(\frac{2Z}{an})^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} \tag{181}$$

Harmonic osicllator

只要振幅足够小，任何震动都可以近似为简谐振动。固体中的晶格振动、原子核的表面振动、分子与分子之间的相互作用势、核子与核子之间的相互作用势，这些势场在平衡点附近的展开准确到二阶后就是谐振子势

在物理上，任何连续振动的体系，都可以等价地看成无限多个谐振子的集合，比如辐射场可以看成是无穷多个谐振子发出的简谐波的叠加

Algebraic solutions

代数解法指的是通过算符代数运算的方法求解量子谐振子的本征问题

通常，量子力学体系 的本征值问题，特别是能理本征值问题，习惯采用分析的方法。所谓分析的方法，即在一定的边界条件下求解微分方程来解决问题

在代数解法中，守恒量的利用表现得格外明显和必不可少。谐振子哈密顿量的因式分解法，是由薛定鄂在40年代提出来的。在因式分解中，引进了**升、降算符**的概念。升降算符把相邻的能级、本征态联系起来

升算符也称产生算符(Generation)，降算符也称湮灭算符(Annihilation)，后面我们会理解名称的含义

Ascending and descending operators

本节引入升降算符的概念

我们知道谐振子的哈密顿量可以表示为

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \tag{182}$$

考虑因式分解公式

$$v^2 + u^2 = (v - iu)(v + iu) \tag{183}$$

利用因式分解公式对哈密顿量重新构造，但要注意$[x, \hat{p}]$是不对易的

$$\hat{H} = \frac{m\omega}{2\hbar} \left(x - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \left(x + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right) \hbar\omega + \frac{1}{2} \hbar\omega \tag{184}$$

第二项加数是因为算符的不对易引入的，需要消除算符的不对易。定义新的算符

$$\hat{a}_+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - \frac{i}{m\omega}\hat{p}) \quad \hat{a}_- = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + \frac{i}{m\omega}\hat{p}) \tag{185}$$

算符$\hat{a}_+$称为 升算符 ，算符$\hat{a}_-$称为 降算符 ，显然升降算符互为共轭

用升降算符表示谐振子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}) \tag{186}$$

可以用升降算符表示坐标和动量算符

$$\begin{aligned} \hat{x} &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \\ \hat{p} &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}_+ - \hat{a}_-) \end{aligned} \tag{187}$$

Properties of Ascend and descend operators

1. **升，降算符不是厄密算符**

$$\begin{aligned} \hat{a}_- &\neq \hat{a}_-^\dagger \\ \hat{a}_+ &\neq \hat{a}_+^\dagger \end{aligned} \tag{188}$$

不过显然有这件事情，因为共轭的性质嘛

$$\begin{aligned} \hat{a}_-^\dagger &= \hat{a}_+ \\ \hat{a}_+^\dagger &= \hat{a}_- \end{aligned} \tag{189}$$

2. **算符$\hat{a}_+\hat{a}_-$是厄米算符**

$$(\hat{a}_+\hat{a}_-)^\dagger = \hat{a}_-^\dagger\hat{a}_+^\dagger = \hat{a}_+\hat{a}_- \tag{190}$$

上式第二个等号由共轭性质得到

同理，**算符$\hat{a}_-\hat{a}_+$也是厄米算符**

为了方便，我们定义算符$\hat{N} = \hat{a}_+\hat{a}_-$

3. **升，降算符不对易**，对易关系为

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1 \tag{191}$$

证明参见附录

4. **算符$\hat{N}$与算符$\hat{a}_+, \hat{a}_-$不对易**，对易关系为

$$\begin{aligned} [\hat{N}, \hat{a}_-] &= -\hat{a}_- \\ [\hat{N}, \hat{a}_+] &= \hat{a}_+ \end{aligned} \tag{192}$$

证明参见附录

Eigenfunction and eigenvalue

引入升降算符后，谐振子的哈密顿量为

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2}) \tag{193}$$

算符$\hat{N}$与算符$\hat{H}$只差一个常数，因此两个算符具有共同的本征态(本征矢)

在算符对易的物理意义一节中，我们提到了一个很重要的定理：**如果两个算符具有共同的本征矢$|a\rangle$并且构成完全集，那么这两个算符对易，该定理的逆定理也成立**

这意味着系统的哈密顿量与升降算符的对易关系与$\hat{N}$与升降算符的对易关系是形式一致的，差别就是常数$\hbar\omega$，即

$$[\hat{H}, \hat{a}_-] = -\hbar\omega\hat{a}_- \quad [\hat{H}, \hat{a}_+] = \hbar\omega\hat{a}_+ \tag{194}$$

假设算符$\hat{N}$的本征方程为

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \tag{195}$$

那么谐振子系统哈密顿量的本征方程即为

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega(\hat{N}+\frac{1}{2})|n\rangle = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})|n\rangle \tag{196}$$

于是谐振子系统哈密顿算符的本征值即为

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \tag{197}$$

这实际上说明：求出算符$\hat{N}$的本征值、本征函数(本征态)也就得到了谐振子系统哈密顿量的本征值和本征函数(本征态)，**下面就寻求本征值和本征函数的具体形式**，下面的内容很重要！！！！！！！！

1. 设降算符作用于态$|n\rangle$得到一个新的态$|b\rangle$

$$\hat{a}_-|n\rangle = |b\rangle \tag{198}$$

共轭为

$$\langle n|\hat{a}_-^\dagger = \langle b| \tag{199}$$

于是

$$\langle n|\hat{a}_+\hat{a}_-|n\rangle = \langle n|\hat{N}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = \langle b|b\rangle \geq 0 \tag{200}$$

因为$\langle b|b\rangle$是概率的含义所以不为负数，因此算符$\hat{N}$的本征值是非负的

2. 由$[\hat{N},\hat{a}_-] = -\hat{a}_-$有

$$\hat{a}_-|n\rangle = -[\hat{N},\hat{a}_-]|n\rangle = \hat{a}_-\hat{N}|n\rangle - \hat{N}\hat{a}_-|n\rangle = n\hat{a}_-|n\rangle - \hat{N}\hat{a}_-|n\rangle \tag{201}$$

移项即得

$$\hat{N}\hat{a}_-|n\rangle = n\hat{a}_-|n\rangle - \hat{a}_-|n\rangle = (n-1)\hat{a}_-|n\rangle \tag{202}$$

这表明$\hat{a}_-|n\rangle$也是算符$\hat{N}$的本征态，相应的本征值为$n-1$

同理由$[\hat{N},\hat{a}_+] = \hat{a}_+$有

$$\hat{N}\hat{a}_+|n\rangle = (n+1)\hat{a}_+|n\rangle \tag{203}$$

表明$\hat{a}_+|n\rangle$也是算符$\hat{N}$的本征态，相应的本征值为$n+1$

探索可以发现相关内容可以进一步递推

$$\hat{N}(\hat{a}_-)^2|n\rangle = (\hat{a}_-\hat{N}-\hat{a}_-)\hat{a}_-|n\rangle = \hat{a}_-(n-1)\hat{a}_-|n\rangle - \hat{a}_-\hat{a}_-|n\rangle = (n-2)(\hat{a}_-)^2|n\rangle \tag{204}$$

类似的可以发现

$$\hat{N}(\hat{a}_+)^2|n\rangle = (\hat{a}_+\hat{N}+\hat{a}_+)\hat{a}_+|n\rangle = (n+2)(\hat{a}_+)^2|n\rangle \tag{205}$$

进一步的

$$\begin{gathered}\hat{N}(\hat{a}_-)^3|n\rangle = (\hat{a}_-\hat{N}-\hat{a}_-)(\hat{a}_-)^2|n\rangle = \hat{a}_-(n-2)(\hat{a}_-)^2|n\rangle - (\hat{a}_-)^3|n\rangle = (n-3)(\hat{a}_-)^3|n\rangle \\ \vdots\end{gathered} \tag{206}$$

由此可以归纳：

$$\begin{cases}\text{本征态}:(\hat{a}_+)^k|n\rangle \quad \text{本征值}:k+n, k\in N^+ \\ \text{本征态}:|n\rangle \quad \text{本征值}:n \\ \text{本征态}:(\hat{a}_-)^k|n\rangle \quad \text{本征值}:n-k, k\in N^+\end{cases} \tag{207}$$

前面我们知道算符$\hat{N}$的本征值都是非负的，因此应当存在最小的本征值n_0，并且我们说最小本征值必定满足$n_0=0$且

$$\hat{a}_-|n_0\rangle = 0 \Leftrightarrow \hat{a}_-|0\rangle = 0 \tag{208}$$

否则由于$\hat{N}\hat{a}_-|n_0\rangle = (n_0-1) < n_0$将产生矛盾，态矢量$|0\rangle$称为基态

因此算符$\hat{N}$本征值的具体数值为

$$n = 0,1,2,\cdots \tag{209}$$

故一位谐振子的能量本征值即为

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega \quad n=0,1,2,\cdots \tag{210}$$

3. 按照我们在前面的约定：

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \to \hat{N}|n-1\rangle = (n-1)|n-1\rangle \tag{211}$$

在前一点中我们又得到

$$\hat{N}\hat{a}_-|n\rangle = (n-1)\hat{a}_-|n\rangle \tag{212}$$

这意味着$|n-1\rangle$和$\hat{a}_-|n\rangle$描述的是同一个量子态，根据波函数的统计诠释，相差一个常数因子的波函数不改变所描述的量子态，即是同一个量子态，因此$|n-1\rangle$和$\hat{a}_-|n\rangle$之间可能存在一个常数因子

$$\hat{a}_-|n\rangle = C|n-1\rangle \tag{213}$$

取共轭有

$$\langle n|\hat{a}_+| = C^*\langle n-1| \tag{214}$$

$$\langle n|\hat{a}_+\hat{a}_-|n\rangle = n\langle n|n\rangle = |C|^2\langle n-1|n-1\rangle \tag{215}$$

即$|C|^2 = n$，我们就取$C = \sqrt{n}$

因此有**(下面这组关系千万要记住涅！特别要留心系数奥)**

$$\begin{gathered}\hat{a}_-|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\ \hat{a}_+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle\end{gathered} \tag{216}$$

这样我们就看到升降算符的真正含义了，降算符作用于本征态后得到的是本征值减一所对应的本征态；升算符作用于本征态后得到的是本征值加一所对应的本征态

降算符$\hat{a}_-$也称湮灭算符，升算符$\hat{a}_+$也称产生算符

Normalization factors

假设基态波函数已经归一化，即$\langle 0|0\rangle = 1$

1. 本征值$n=0$，本征态为$|0\rangle$
2. 本征值$n=1$，本征态为

$$|1\rangle = A\hat{a}_+|0\rangle \tag{217}$$

进行归一化(注意系数有概率的含义，是非负数奥)

$$\langle 1|1\rangle = A^2\langle 0|\hat{a}_-\hat{a}_+|0\rangle = A^2\langle 0|(1+\hat{N})|0\rangle = A^2 = 1 \Rightarrow A = 1 \tag{218}$$

3. 本征值$n=2$，本征态为

$$|2\rangle = A\hat{a}_+|1\rangle \tag{219}$$

进行归一化

$$\langle 2|2\rangle = A^2\langle 1|(1+\hat{N})|1\rangle = 2A^2 = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{220}$$

我们当然可以这么表示

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{a}_+\frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}_+|0\rangle \tag{221}$$

4. 依次递推可以得到

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{a}_+|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n|0\rangle \tag{222}$$

另一方面有$|n\rangle = A\hat{a}_+|n-1\rangle$

$$\langle n|n\rangle = A^2\langle n-1|(\hat{N}+1)|n-1\rangle = nA^2 = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{n}} \tag{223}$$

可以相互印证彼此的成立，这就是上面我们说很重要的公式

Appendix

附录六

Matrix mechanics

1. 表象的概念

顾名思义，表象就是表现形式的空间

量子力学的态函数是按照什么样的基矢展开，就是处在什么样的表象之下。比如说按照坐标基矢展开，就是坐标表象；按照动量基矢展开，就是动量表象

表象只是量子力学态的一种表现形式，引入表象变换是为了便利分析问题

量子体系的一个状态可以抽象成态矢量$|\psi\rangle$，这个态矢量可以投影在不同的坐标空间中进行表述，这就是量子力学中表象的概念

2. 希尔伯特空间

   量子力学中一个任意态可以在一族正交完备本征函数上展开，这族完备函数可以视为空间的完备正交基矢，一个量子态就是这个空间的一个矢量，称为态矢。将量子体系的本征函数抽象成一个空间，称为希尔伯特空间

   本征函数是波动力学的叫法，在矩阵力学中，改称态矢(态矢量)、基矢(本征矢)

Some Conceptions

1. 幺正矩阵和厄密矩阵

   酉空间中的幺正矩阵对应欧几里得空间中的正交矩阵

   酉空间中的厄密矩阵对应欧几里得空间中的实对称矩阵

2. 正交和幺正

   1. 正交矩阵

      正交矩阵的定义是

      $$A^TA=I\Leftrightarrow A^T=A^{-1} \tag{224}$$

      正交矩阵的行(列)向量组是欧几里得空间的标准正交向量组

   2. 幺正矩阵

      幺正矩阵(酉矩阵)的定义是

      $$A^\dagger A=I\Leftrightarrow A^\dagger=A^{-1} \tag{225}$$

      幺正矩阵的行(列)向量组是酉空间的标准正交向量组

3. 酉空间

   酉空间是一种线性空间，且是正定的复线性空间，是一类以厄密函数作内积的复线性空间

   1. 正定：

      对于复线性空间V，对于任意相量$\vec{\alpha}\in V$，内积$(\vec{\alpha},\vec{\alpha})>0$，当且仅当$\vec{\alpha}=\vec{0}$时$(\vec{\alpha},\vec{\alpha})=0$

   2. n维酉空间中总存在一个标准正交基，对酉空间的任意线性变换σ总存在它的共轭变换σ^*

   厄密函数的性质：用V表示酉空间，T是一种线性变换

   1. 正规变换的定义：T是V的线性变换，如果对于V中任意向量a,b有$(Ta,Tb)=(T^*a,T^*b)$成立，则称T是V的正规变换
   2. 定理：设T是V的线性变换，那么
      1. T是正规变换
      2. $T^*T=TT^*$
      3. T在标准正交基下的矩阵是正规矩阵
   3. 定理：设T是正规变换，λ是复数，I是单位变换，那么
      1. λT是正规变换
      2. $T-\lambda I$是正规变换
   4. 定理：设T_1,T_2是正规变换，若$T_1^*T_2=T_2T_1^*$，那么
      1. T_1+T_2是正规变换
      2. T_1T_2是正规变换

4. 实对称和厄密

   1. 实对称矩阵

      实对称矩阵的定义是

      $$A^T=T \tag{226}$$

      1. 实对称矩阵的特征值都是实数
      2. 对于实对称矩阵，属于不同特征值的特征向量一定彼此正交，属于相同特征值的特征向量可以通过施密特正交化方法处理，因此也彼此正交，这时候特征向量组合的矩阵为正交矩阵
      3. 对于任意实对称矩阵，总存在正交矩阵P，使得实对称矩阵A对角化

      $$P^{-1}AP=\mathbf{\Lambda} \tag{227}$$

   2. 厄密矩阵

      厄密矩阵的定义是

      $$A^\dagger=A \tag{228}$$

1. 厄密矩阵的特征值都是实数
2. 对于厄密矩阵，属于不同特征值的特征向量一定彼此正交，属于相同特征值的特征向量可以通过施密特正交化方法处理。这时候特征向量组合的矩阵为幺正矩阵
3. 对于任意的厄密矩阵，一定存在幺正矩阵P，使得矩阵A对角化

$$P^{-1}AP = \mathbf{\Lambda} \tag{229}$$

The matrix form of QM

1. 态的矢量形式

表示力学量的算符为$\hat{F}$，它的本征矢为$|\phi_n\rangle$，相应的本征值为q_n，则算符的本征方程为

$$\hat{F}|\phi_n\rangle = q_n|\phi_n\rangle \tag{230}$$

相应的本征矢满足正交关系

$$\langle\phi_m|\phi_n\rangle = \delta_{mn} \tag{231}$$

同时满足完备性

$$\sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n| = 1 \tag{232}$$

将态矢量$\Psi(t)$按本征矢展开

$$\Psi(t) = \sum_n c_n\phi_n \tag{233}$$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\Psi(t)\rangle = \sum c_n(t)|\phi_n\rangle \tag{234}$$

其中$c_n(t)$是含时概率幅

$$c_n(t) = \langle\phi_n|\Psi(t)\rangle = \int \phi_n^*(x)\Psi(x,t)\mathrm{d}x \tag{235}$$

假设态矢量是归一化的，那么

$$\begin{aligned}
\langle\Psi|\Psi\rangle &= \sum_m \langle\Psi|\phi_m\rangle\langle\phi_m| \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\Psi\rangle \\
&= \sum_m\sum_n \langle\Psi|\phi_m\rangle\delta_{mn}\langle\phi_n|\Psi\rangle \\
&= \sum_m\sum_n c_m^* c_n \delta_{mn} \\
&= \sum_n c_n^2(t) = 1
\end{aligned} \tag{236}$$

$c_n^2(t)$是在态矢量$\Psi(t)$中测量力学量Q得到本征值为q_n的概率
态矢量Ψ在表象Q中是概率幅的组合

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{237}$$

相应的厄米共轭为

$$|\Psi(t)\rangle^\dagger = \begin{pmatrix} c_1^*(t) & c_2^*(t) & \cdots & c_n^*(t) & \cdots \end{pmatrix} \tag{238}$$

关于表象Q及其本征矢ϕ_n的理解，简单的可以认为，一种表象就是一种坐标系，相应的本征矢是对应坐标系下的基矢，一个态矢量在特定表象中就是在各个基矢上的投影矢量和

表象的本征态张成了一个高维空间，这就是希尔伯特空间

2. 算符的矩阵形式

算符作用在函数上通常得到另一个函数，作用在一个态矢量上得到另一个态矢量

$$\hat{F}|\Psi(t)\rangle = |\Phi(t)\rangle \tag{239}$$

将两个态矢量按表象Q的本征矢展开

$$\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle &= \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle \\
|\Phi(t)\rangle &= \sum |\phi_n\rangle\langle\phi_n|\Phi(t)\rangle = \sum c_n(t)|\phi_n\rangle
\end{aligned} \tag{240}$$

$$|\Psi(t)\rangle=\sum_m|\phi_m\rangle\langle\phi_m|\Psi(t)\rangle=\sum_m c_m(t)|\phi_m\rangle$$

即得

$$\sum_m c_m(t)|\phi_m\rangle=\hat{F}\sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle$$

$$\Rightarrow\sum_m\langle\phi_k|c_m(t)|\phi_m\rangle=\langle\phi_k|\hat{F}\sum_n c_n(t)|\phi_n\rangle \tag{241}$$

$$\Rightarrow c_k=\sum F_{kn}c_n(t),\quad F_{kn}=\langle\phi_k|\hat{F}|\phi_n\rangle$$

为了便于区分，下面令$b_k=c_k,a_n=c_n$，上式可以写成矩阵

$$\begin{pmatrix}b_1\\ \vdots\\ b_n\\ \vdots\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}F_{11}&F_{12}&\cdots\\ F_{21}&F_{22}&\cdots\\ \vdots&\vdots&\ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\ a_2\\ \vdots\end{pmatrix} \tag{242}$$

由此可见，算符$\hat{F}$在表象中的形式是一个矩阵

3. 算符矩阵形式的性质
    1. 任何一个算符在以本征矢为基矢的自身表象中是对角矩阵
    2. 厄密算符的矩阵形式是厄密矩阵

       根据厄密算符的定义，算符是厄密算符的充要条件是算符的厄密共轭是算符本身

$$\hat{F}^*_{mn}=\langle\phi_m|\hat{F}|\phi_n\rangle^\dagger=\langle\phi_n|\hat{F}^\dagger|\phi_m\rangle=\langle\phi_n|\hat{F}|\phi_m\rangle=\hat{F}_{nm} \tag{243}$$

       到表象中的矩阵去看，实际上更容易发现这件事情，就是关于主对角线的共轭对称
4. 本征值和本征矢

   算符$\hat{F}$的本征方程为

$$\hat{F}|\Psi(t)\rangle=\lambda|\Psi(t)\rangle \tag{244}$$

   本征方程在Q表象的矩阵形式为

$$F\Psi=\lambda\Psi \tag{245}$$

$$\begin{pmatrix}F_{11}&F_{12}&\cdots&F_{1n}&\cdots\\ F_{21}&F_{22}&\cdots&F_{2n}&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1(t)\\ a_2(t)\\ \vdots\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}a_1(t)\\ a_2(t)\\ \vdots\end{pmatrix} \tag{246}$$

   求解本征值的方法与我们在线性代数中学的是一致的

$$\begin{pmatrix}F_{11}-\lambda&F_{12}&\cdots&F_{1n}&\cdots\\ F_{21}&F_{22}-\lambda&\cdots&F_{2n}&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\ F_{m1}&F_{m2}&\cdots&F_{mn}-\lambda&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1(t)\\ a_2(t)\\ \vdots\\ a_m(t)\\ \vdots\end{pmatrix}=0 \tag{247}$$

   这样只需要求解左侧第一个矩阵的行列式。根据线性代数，矩阵方程存在非平凡解的条件是系数矩阵的行列式值为零。求解得到的本征值为$\lambda_1,\lambda_2\cdots$，本征值相对应的本征态为$\{a_1^1,a_2^1\cdots\},\{a_2^1,a_2^2,\cdots\},\cdots$

   a_j^k表示第j个本征值λ_j对应的本征矢

   下面给出一般性的求解步骤

    1. 求解系数矩阵的行列式为零

$$\begin{vmatrix}F_{11}-\lambda&F_{12}&\cdots&F_{1n}&\cdots\\ F_{21}&F_{22}-\lambda&\cdots&F_{2n}&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\ F_{m1}&F_{m2}&\cdots&F_{mn}-\lambda&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots\end{vmatrix}=0 \tag{248}$$

       这个代数方程称为久期方程，相应的根就是算符的本征值。如果算符的矩阵形式是N维的，相应的就存在N个解，可能有重根
    2. 求解本征态，将解出的每个本征值重新带回原始矩阵方程，比如

$$\begin{pmatrix}F_{11}-\lambda_1&F_{12}&\cdots&F_{1n}&\cdots\\ F_{21}&F_{22}-\lambda_1&\cdots&F_{2n}&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\ F_{m1}&F_{m2}&\cdots&F_{mn}-\lambda_1&\cdots\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1(t)\\ a_2(t)\\ \vdots\\ a_m(t)\\ \vdots\end{pmatrix}=0 \tag{249}$$

$$\begin{pmatrix} \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \vdots \end{pmatrix}$$

按行展开成多元方程组

$$\begin{cases} (F_{11}-\lambda_1)a_1+F_{12}a_2+F_{13}a_3+\cdots=0 \\ F_{21}a_1+(F_{22}-\lambda_1)a_2+F_{23}a_3+\cdots=0 \\ F_{31}a_1+F_{32}a_2+(F_{33}-\lambda_1)a_3+\cdots=0 \\ \vdots \end{cases} \tag{250}$$

相应的解$\{a_1^1,a_1^2\cdots\}$就是本征矢λ_1对应的本征矢

5. 薛定谔方程的矩阵形式

哈密顿算符的薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}|\Psi(t)\rangle=\hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{251}$$

将任意态矢量Ψ在以$\{\phi\}$为正交完全集的基矢上展开有

$$|\Psi(t)\rangle=\sum_n|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\Psi(t)\rangle=\sum_n a_n(t)|\phi_n\rangle \tag{252}$$

根据前面小节的内容我们知道$a_n(t)$是含时概率幅的含义，即$a_n(t)=\langle\phi_n|\Psi(t)\rangle$

带入薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\sum_n a_n(t)|\phi_n\rangle=\hat{H}\sum_n a_n(t)|\phi_n\rangle \tag{253}$$

将上式向本征矢$\langle\phi_m|$做投影，并利用正交完备性

$$\begin{gathered} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\sum_n\langle\phi_m|a_n(t)|\phi_n(t)\rangle=\sum_n a_n(t)\langle\phi_m|\hat{H}|\phi_n\rangle \\ \Rightarrow i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}a_m(t)=\sum_n H_{mn}a_n(t) \end{gathered} \tag{254}$$

表示为矩阵形式

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ a_3(t) \\ \vdots \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n}\cdots \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n}\cdots \\ H_{31} & H_{32} & \cdots & H_{3n}\cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ a_3(t) \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{255}$$

H3 Representation transform

在处理具体问题时，为了简化运算，常常需要从一个表象变换到另一个表象，表象变换的技术手段就是幺正变换

先说以下表象变换的一些重要不变性质

1. 两个态矢的内积不变
2. 力学量的平均值不变
3. 算符的本征值不变

H4 unitary transformation

1. 态矢量的幺正变换

如同一个普通矢量可以在直角坐标系和直角坐标系中展开一样，一个态矢量$|\Psi(t)\rangle$可以分别按A的本征态$\{|a\rangle\}$和B的本征态$\{|b\rangle\}$展开，即

$$\begin{gathered} |\Psi(t)\rangle=\sum_a|a\rangle\langle a|\Psi\rangle=\sum_a C_a^A|a\rangle \\ |\Psi(t)\rangle=\sum_b|b\rangle\langle b|\Psi\rangle=\sum_b C_b^B|b\rangle \end{gathered} \tag{256}$$

其中

$$C_a^A(t)=\langle a|\Psi(t)\rangle \quad C_b^B(t)=\langle b|\Psi(t)\rangle \tag{257}$$

将两种展开同时向B表象的基矢$\langle b'|$投影得到

$$\langle b'|\sum_a C_a^A|a\rangle=\langle b'|\sum_b C_b^B|b\rangle \tag{258}$$

利用正交关系可以得到

$$C_{b'}^{B}(t)=\sum_{a}C_{a}^{A}\langle b'|a\rangle \tag{259}$$

基矢b'是任意的，不妨就取$b'=b$

$$C_{b}^{B}(t)=\sum_{a}C_{a}^{A}\langle b|a\rangle=\sum_{a}S_{ba}C_{a}^{A}\qquad S_{ba}=\langle b|a\rangle \tag{260}$$

$S_{ba}=\langle b|a\rangle$的含义就是$A$表象下的基矢向$B$表象下基矢的投影，我们将上式展开写成矩阵的形式

$$\begin{pmatrix} C_1^B(t)\\ C_2^B(t)\\ C_3^B(t)\\ \vdots \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & \cdots\\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & \cdots\\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & \cdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_1^A(t)\\ C_2^A(t)\\ C_3^A(t)\\ \vdots \end{pmatrix} \tag{261}$$

矩阵形式简写为

$$C^B(t)=SC^A \tag{262}$$

这就是态矢量从A表象到B表象的变换形式，我们称矩阵S为变换矩阵

> Tips 提示
>
> 注意一件事情：变换矩阵S是自共轭矩阵！自共轭的意思是，矩阵转置后取共轭与矩阵本身相等，证明如下
>
> $$\begin{gathered} a=x+iy,\quad b=w+iz\\ b^*a=(w-iz)(x+iy)=(xw+yz)+i(wy-xz)\\ a^*b=(x-iy)(w+iz)=(xw+yz)+i(xz-wy)\\ \Rightarrow (a^*b)^*=b^*a \end{gathered} \tag{263}$$
>
> 下面马上就要用到这个事情！

2. 幺正算符

上一节中我们知道变换矩阵的作用就是将一个表象下的态矢量变化到另一个表象下，变换矩阵的元为$S_{ba}=\langle b|a\rangle$

根据态矢量的正交归一完备性质有

$$\delta_{a'a}=\langle a'|a\rangle=\langle a'\sum_{b}|b\rangle\langle b|a\rangle=\sum_{b}\langle a'|b\rangle\langle b|a\rangle=\sum_{b}S_{a'b}S_{ba}=\sum_{b}S_{ba'}^{*}S_{ba}=(S^{\dagger}S)_{a'a} \tag{264}$$

$$\delta_{b'b}=\langle b'|a\rangle=\langle b'\sum_{a}|a\rangle\langle a|b\rangle=\sum_{a}\langle b'|a\rangle\langle a|b\rangle=\sum_{a}S_{b'a}S_{ab}=\sum_{a}S_{b'a}S_{ba}^{*}=(SS^{\dagger})_{b'b} \tag{265}$$

上面推演中就用到了变换矩阵的自共轭性

即：

$$S^{\dagger}S=SS^{\dagger}=\mathbf{I}\Rightarrow S^{\dagger}=S^{-1} \tag{266}$$

满足上式条件的矩阵就称为幺正矩阵，写成幺正矩阵的算符称为幺正算符，由幺正矩阵所确定的变换称为幺正变换

> Warning 区分
>
> 幺正矩阵和厄密矩阵的定义是不同的！
>
> 1. 厄密矩阵定义
>
> $$A=A^{\dagger} \tag{267}$$
>
> 2. 幺正矩阵定义
>
> $$S^{-1}=S^{\dagger} \tag{268}$$
>
> 正如同我们在本章开篇中概念组中的介绍，厄密矩阵可以类比为对称矩阵，而幺正矩阵可以类比为正交矩阵

幺正矩阵不一定是厄密矩阵

3. **表象变换不改变基矢内积**

考虑表象A下的基矢量$|a_1\rangle,|a_2\rangle$，在幺正变换矩阵作用下变为B表象下的基矢$|b_1\rangle,|b_2\rangle$

$$\begin{gathered}|b_1\rangle=S|a_1\rangle\\ |b_2\rangle=S|a_2\rangle\end{gathered} \tag{269}$$

内积为

$$\langle b_1|b_2\rangle=\langle a_1|S^{\dagger}S|a_2\rangle=\langle a_1a_2\rangle \tag{270}$$

这就是说，和S相联系的幺正变换保持表象中的标积不变，因而模方也不变，从而不改变正交关系。因此一组基矢经过幺正变换之后仍是这个空间的基矢。从这一点来看，在物理上有时称矢量的幺正变换为矢量（在多维空间中）的转动

> Remind 强调
>
> 幺正变换不改变内积，即表象变换不改变内积
>
> 表象变换也不改变力学量的平均值
>
> 表象变换还不改变算符的本征值

4. **幺正算符的性质**
   1. 幺正算符的定义：如果一个算符的逆算符等于它的共轭转置算符，呢么称该算符为幺正算符，其矩阵形式为幺正矩阵
   2. 性质
      1. 如果A是厄米算符，那么$T=e^{iA}$是幺正算符

$$\begin{gathered}T^{\dagger}=e^{-iA^{\dagger}}=e^{-iA}\\ T^{\dagger}T=TT^{\dagger}=\mathbf{I}\end{gathered}\tag{271}$$

      2. 两个幺正算符的乘积也是幺正算符

$$\begin{gathered}AA^{\dagger}=\mathbf{I},BB^{\dagger}=\mathbf{I}\\ (AB)^{\dagger}(AB)=B^{\dagger}A^{\dagger}AB=\mathbf{I}\\ (BA)^{\dagger}(BA)=A^{\dagger}B^{\dagger}BA=\mathbf{I}\end{gathered}\tag{272}$$

   3. 幺正算符的本征值和本征矢
      1. 本征值

         设$|a_n\rangle$是幺正算符$\hat{U}$的正交归一化完全本征矢，本征值为a_n，有

$$\hat{U}|a_n\rangle=a_n|a_n\rangle\tag{273}$$

         考虑内积

$$\langle a_n|\hat{U}^{\dagger}U|a_n\rangle=a_n^*a_n\langle a_n|a_n\rangle=|a_n|^2\tag{274}$$

         因为表象变换不改变态矢基矢的内积，这要求

$$|a_n|^2=\langle a_n|a_n\rangle=\delta_{nn}=1\tag{275}$$

         幺正算符的本征值只能是模为1的复数

$$a_n=e^{i\phi_n}\tag{276}$$

      2. 本征矢

         幺正算符的任意两个不同本征值对应的本征矢是彼此正交的

$$\langle a_m|U^{\dagger}U|a_n\rangle=a_m^*a_n\langle a_m|a_n\rangle=a_m^*a_n\delta_{mn}\tag{277}$$

5. 基矢、算符的幺正变换

   基矢的幺正变换

$$|b_n\rangle=S|a_n\rangle\tag{278}$$

   算符的幺正变换
   1. 定义：算符A经过幺正变换得到算符B满足：算符A在原表象下的矩阵元应该等于算符B在新表象下的矩阵元，这可以通过表象变换不改变内积的性质理解

$$\begin{gathered}\langle b_m|B|b_n\rangle=\langle a_m|A|a_n\rangle\\ \langle a_m|U^{\dagger}BU|a_n\rangle=\langle a_m|A|a_n\rangle\end{gathered}\tag{279}$$

      由此得到算符的幺正变换为

$$B=UAU^{\dagger}\tag{280}$$

   2. 幺正变换不改变算符的本征值

$$\begin{gathered}A|a_n\rangle=a_n|a_n\rangle\\ B|b_n\rangle=UAU^{\dagger}U|a_n\rangle=UA|a_n\rangle=Ua_n|a_n\rangle=a_n|b_n\rangle\end{gathered}\tag{281}$$

上式表明表象变换，或说幺正变换不改变算符的本征值

3. 幺正变换不改变算符对应矩阵的迹

$$B = UAU^\dagger \tag{282}$$

线性代数中一个重要的知识是：取迹轮换不变性

$$Tr(B) = Tr(U^\dagger AU) = Tr(UU^\dagger A) = Tr(A) \tag{283}$$

上式表明：表象变换，或说幺正变换不改变算符的迹

4. 算符幺正变换的性质

   1. 算符A经过幺正变换得到的算符$\tilde{A}$共轭转置算符$(\tilde{A})^\dagger$就是算符A的的共轭转置算符$A^\dagger$经过幺正变换得到的算符

$$(\tilde{A})^\dagger = (SAS^\dagger)^\dagger = SA^\dagger S^\dagger = (\tilde{A^\dagger}) \tag{284}$$

   2. 推广：算符A的函数$F(a)$的幺正变换$\tilde{F}(A)$就是算符A经过幺正变换得到的算符$\tilde{A}$的函数$F(\tilde{A})$

   比如考虑算符函数

$$(\tilde{A})^2 = (SAS^\dagger)(SAS^\dagger) = SAAS^\dagger = \tilde{A}^2 \tag{285}$$

6. 幺正变换的物理意义

我们由幺正变换的矩阵元$S_{ab} = \langle a|b\rangle$写出$A, B$两种表象之间基矢的变换关系

$$|b\rangle = \sum_a |a\rangle\langle a|b\rangle = \sum_a S_{ab}|a\rangle \tag{286}$$

共轭形式

$$\langle b| = \sum_{a'} \langle b|a'\rangle\langle a'| = \sum_{a'} S_{ba'}\langle a'| = \sum_{a'} S^*_{a'b}\langle a'| \tag{287}$$

基矢是归一化的，这样

$$\langle b|b\rangle = \sum_{a'} S^*_{a'b}\langle a'| \sum_a S_{ab}|a\rangle = \sum_{a'}\sum_a S^*_{a'b}S_{ab}\langle a'|a\rangle = \sum_a |S_{ab}|^2 = 1 \tag{288}$$

这意味着

$$|S_{1b}|^2 + |S_{2b}|^2 + \cdots + |S_{ab}|^2 + \cdots = 1 \tag{289}$$

即$|S_{ab}|^2$表示在态$|b\rangle$中出现态$|a\rangle$的概率，那么$|S_{ba}|^2$就表示在态$|a\rangle$中出现$|b\rangle$的概率

幺正变换的物理意义就是概率守恒

Numerical Representations and Coherent States

Numerical Representions

在线性谐振子一节中，我们引入升降算符，或者说产生湮灭算符表示系统的哈密顿量，得到了一系列结论

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}) = \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})$$
$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}) \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{290}$$

升降算符的对易关系为

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1 \tag{291}$$

升降算符的含义体现在

$$\hat{a}_-|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$
$$\hat{a}_+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{292}$$

我们用$|n\rangle$表示谐振子的本征态，用$|0\rangle$表示基态，也是真空态，对应的能量称为真空零点能

我们通过递推得到如下关系

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n|0\rangle \tag{293}$$

对于算符$\hat{N}$我们知道了一个重要的关系

$$\hat{N}(\hat{a}_+)^k|n\rangle = (k+n)(\hat{a}_+)^k|n\rangle \tag{294}$$

$$\hat{N}(\hat{a}_-)^k|n\rangle = (n-k)(\hat{a}_-)^k|n\rangle$$

并且

$$\hat{N}|n\rangle = \hat{a}_+\hat{a}_-|n\rangle = \hat{a}_+\sqrt{n}|n-1\rangle = n|n\rangle \tag{295}$$

上式的含义可以理解为定义了以$|n\rangle$为本征矢的表象，相应的本征值为$n = 0, 1, 2, \cdots$，是自然数，因此本征态$|n\rangle$也被称为数态，相应的表象称为数态表象

根据波函数的统计全是我们知道$|n\rangle, \hat{a}_+|n-1\rangle$描述的是一个量子态，二者之间相差一个常数积，这个常数就是升降算符含义部分所给出的重要关系式

下面说说数态的物理意义

因为谐振子能量随自然数n变化，变化间隔就是$\hbar\omega$，而这一能量间隔正好是一个微观粒子的能量，这样我们就可以认为数态$|n\rangle$表示体系在这个状态下共有n个微观粒子，这样，**算符$\hat{N}$可以称为粒子数算符**

这样我们回看降算符，降算符作用在一个态上得到的是当前本征值减一的态，即数态减一，体系的粒子数少了一个，所以称为湮灭算符，相应地就能理解产生算符的含义

本征态需要满足完备正交归一性，因此要求

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn} \qquad \sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \tag{296}$$

下面说说任意态在数态表象下的波函数

将任意态矢量按照数态展开

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}a_n|n\rangle \tag{297}$$

态矢量在数态表象下的波函数就是列矢量

$$\Psi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{298}$$

并且我们知道a_n具有概率幅的含义，因此下式就表示数态$|n\rangle$出现的概率

$$P_n = |a_n|^2 = |\langle n|\Psi\rangle|^2 \tag{299}$$

Symbols in numerical representions

1. 算符$\hat{N} = \hat{a}_+\hat{a}_-$在自身数态表象中的矩阵表示

   矩阵元为

$$N_{mn} = \langle m|\hat{N}|n\rangle = n\langle m|n\rangle = n\delta_{mn} \tag{300}$$

   因此算符$\hat{N}$为对角矩阵

$$N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \tag{301}$$

2. 产生、湮灭算符在数态表象中的矩阵表示

$$\begin{aligned} \langle m|\hat{a}_-|n\rangle &= \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1} \\ \langle m|\hat{a}_+|n\rangle &= \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} \end{aligned} \tag{302}$$

   相应的矩阵分别为

$$a_- = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} \tag{303}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \end{pmatrix}$$

$$a_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix}$$

Coherent state

湮灭算符的本征态被定义为相干态

$$\hat{a}_-|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{304}$$

其中α为相应的本征值(为任意复数)，相干态可以按照数态展开为

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_0^\infty \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{305}$$

其中展开系数的绝对值平方表示相应态出现的概率，是一个泊松分布

$$P_n = \langle n|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2}\frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \tag{306}$$

1. **平移算符**

   相干态$|\alpha\rangle$可以表示为

$$|\alpha\rangle = e^{\alpha a_+ - \alpha^* a_-}|0\rangle = D(\alpha)|0\rangle \tag{307}$$

   称$D(\alpha) = e^{\alpha a_+ - \alpha a_-}$为由产生湮灭算符构成的平移算符

   平移算符的作用是将真空态(基态)平移至相干态，上式说明相干态是谐振子基态被平移后的形式

   关于相干态可以如上表述的证明参见本章附录

   平移算符有一些性质和特点

   - 平移算符是幺正算符

$$D(\alpha)^\dagger = D(-\alpha) \tag{308}$$

   - 平移算符的平移特性

$$\begin{aligned} D(\alpha)^\dagger a_- D(\alpha) &= a_- + \alpha \\ D(\alpha)^\dagger a_+ D(\alpha) &= a_+ + \alpha^* \end{aligned} \tag{309}$$

Appendix

附录七

Three Picture in QM

本节简述量子力学中的三个绘景——薛定谔绘景、海森堡绘景、相互作用绘景

Conception of Picture

绘景描述的是：量子力学系统随时间演化的图像

Represention and Picture

绘景和表象是两个不同的概念

1. 绘景是对体系一般性质的描述方式，对时间演化方式的处理方式不同就会产生不同的绘景
2. 表象是对体系性质的具体描述方式，在希尔伯特空间中选择的基矢不同就会产生不同的表象
3. 绘景问题不涉及基矢的选择，它考虑的是系统的演化如何在态矢量和算符之间进行分配的问题

形象的理解绘景和表象的区别，可以用参考系和坐标系来类比：

例如在描述刚体上质点的运动状态时，参考系可以采用实验系，也可以采用与刚体一起转动的参考系。在选择的参考系中，既可以采用笛卡尔坐标基确定质点的运动方程，也可以采用极坐标基确定质点的运动方程

量子力学中三种绘景分别是

1. 薛定谔绘景：态矢量承担系统随时间的演化，算符(力学量)不承担系统的演化
2. 海森堡绘景：算符(力学量)承担系统随时间的演化，态矢量不承担系统的演化
3. 相互作用绘景：算符(力学量)和态矢量同时承担系统随时间的演化

下面的内容中不做特殊说明时，以S表示薛定谔绘景下的量，以H表示海森堡绘景下的量，以I表示相互作用绘景下的量

Schrödinger Picture

1. 态矢量

   态矢量：$|\psi_S(t)\rangle=|\psi(t)\rangle$

   薛定谔方程：$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle$
2. 算符

   在薛定谔绘景下，除了可能的外场外，算符不随时间演化，即$\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_S(t)=0$
3. 算符平均值

   根据埃伦费斯特定理：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle\hat{A}\rangle=\frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}]+\frac{\partial}{\partial t}\hat{A} \tag{310}$$

   在薛定谔绘景下，表示力学量的算符不随时间演化，如果力学量的平均值是守恒量，那么该力学量一定与系统的哈密顿量对易
4. 表象基矢

   以$\hat{A}$作为表象，相应的基矢为$\{|a_n\rangle\}$

   本征方程表述为

$$\hat{A}|a_n\rangle=a_n|a_n\rangle \tag{311}$$

   基矢的正交归一性表述为

$$\langle a_m|a_n\rangle=\delta_{mn} \tag{312}$$

   基矢的完备性表述为

$$\sum_n|a_n\rangle\langle a_n|=1 \tag{313}$$

   再次强调，在薛定谔绘景下，态矢量随时间演化，基矢、算符(力学量)不随时间演化

Heisenberg Picture

1. 态矢量

   态矢量：$|\psi_H(t)\rangle=\hat{U}(t,t_0)^\dagger|\psi_S(t)\rangle$

   逆关系：$|\psi_S(t)\rangle=\hat{U}(t,t_0)|\psi_H(t)\rangle$

   当$t=t_0$时$|\psi_H(t_0))\rangle=|\psi_S(t)\rangle$

$$|\psi_H\rangle=\hat{U}(t,t_0)^\dagger\hat{U}(t,t_0)|\psi_H\rangle\Rightarrow\hat{U}^\dagger(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)=I\Rightarrow\hat{U}^\dagger=\hat{U}^{-1} \tag{314}$$

   在海森堡绘景下，规定态矢量不随时间演化，$\frac{\partial}{\partial t}|\psi_H(t)\rangle=0$
2. 算符

$$\hat{A}_H(t)=\hat{U}(t,t_0)^\dagger\hat{A}_S(t)\hat{U}(t,t_0) \tag{315}$$

   当$t=t_0$时$\hat{A}_H(t_0)=\hat{A}_S(t_0)$，这也是初始条件

   算符随时间演化：

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\hat{A}_H(t)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}(\hat{U}^\dagger\hat{A}_S\hat{U})\\&=\frac{\mathrm{d}\hat{U}^\dagger}{\mathrm{dt}}\hat{A}_S\hat{U}+\hat{U}^\dagger\hat{A}_S\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{dt}}\\&=\frac{1}{i\hbar}[\hat{U}^\dagger,\hat{H}_H]\hat{A}_S\hat{U}+\hat{U}^\dagger\hat{A}_S\frac{1}{i\hbar}[\hat{U},\hat{H}_H]\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{i\hbar}[\hat{U}^\dagger, U^\dagger \hat{H}_S \hat{U}]\hat{A}_S\hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A}_S \frac{1}{i\hbar}[\hat{U}, U^\dagger \hat{H}_S \hat{U}] \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger \hat{H}_S \hat{U}\hat{U}^\dagger \hat{A}_S \hat{U} + \frac{1}{i\hbar}\hat{U}^\dagger \hat{A}_S \hat{U}\hat{U}^\dagger \hat{H}_S \hat{U} \\
&= \frac{1}{i\hbar}[\hat{U}^\dagger \hat{A}_S \hat{U}, \hat{U}^\dagger \hat{H}_S \hat{U}] \\
&= \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}_H, \hat{H}_H]
\end{aligned}
\tag{316}
$$

推演中右侧第二个等号只有两项是因为，在薛定谔绘景中，算符不随时间演化；推演中右侧第五个等号中两项都加了一个单位矩阵$\hat{U}\hat{U}^\dagger$，是为了便于凑出对易括号

算符随时间演化的方程称为海森堡运动方程，这一点我们在很早之前提到过哦

3. 算符平均值

   算符$\hat{A}_H$的平均值为

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{A}_H(t) \rangle &= \langle \psi_H(t)|\hat{A}_H(t)|\psi_H(t)\rangle \\
&= \langle \psi_H(t)|\hat{U}^\dagger \hat{A}_S(t)\hat{U}|\psi_H(t)\rangle \\
&= \langle \psi_S(t)|\hat{U}\hat{U}^\dagger \hat{A}_S(t)\hat{U}\hat{U}^\dagger|\psi_S(t)\rangle \\
&= \langle \psi_S(t)|\hat{A}_S(t)|\psi_S(t)\rangle \\
&= \langle \hat{A}_S \rangle
\end{aligned}
\tag{317}
$$

4. 表象基矢

   以$\hat{A}_H$作为表象，基矢为$\{|a_n(t)\rangle_H\}$
   本征方程表述为

$$
\hat{A}_H|a_n(t)\rangle_H = a_n|a_n(t)\rangle_H \tag{318}
$$

   其中$|a_n(t)\rangle_H = U^\dagger|a_n\rangle$
   正交归一性表述为

$$
\langle a_m(t)|a_n(t)\rangle_H = \delta_{mn} \tag{319}
$$

   完备性表述为

$$
\sum_m |a_n(t)\rangle\langle a_n(t)|_H = 1 \tag{320}
$$

   再次强调，海森堡绘景下，态矢量不随时间演化，基矢量，算符随时间演化

Interaction Picture

> 相互作用绘景起源于微扰论
>
> 相互作用绘景下哈密顿量表述为：$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + V(t)$，$\hat{H}_0$表示未受到干扰的哈密顿量

1. 态矢量

   态矢量：$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}_0^\dagger(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle$
   其中$\hat{U}_0 = \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0(t - t_0))$
   其中$\hat{H}_0 = \hat{U}_0^\dagger \hat{H}_{0S}\hat{U}_0$
   当$t = t_0$时$|\psi_I(t_0)\rangle = |\psi_S(t_0)\rangle$，这也是初始条件
   态随时间的演化：

$$
\begin{aligned}
i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}|\psi_I(t)\rangle &= i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}(\hat{U}_0^\dagger(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle) \\
&= (H - H_0)\hat{U}_0^\dagger|\psi_S(t)\rangle \\
&= V(t)|\psi_S(t)\rangle
\end{aligned}
\tag{321}
$$

   这表明态矢量随着时间的演化与微扰$\hat{V}(t)$有关

2. 算符

算符：$\hat{A}_I(t)=\hat{U}_0^\dagger(t,t_0)\hat{A}_S(t)\hat{U}_0(t,t_0)$

当$t=t_0$时$\hat{A}_I(t_0)=\hat{A}_S(t_0)$

算符随时间的演化：

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\hat{A}_I &= i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{U}_0^\dagger}{\mathrm{dt}}\hat{A}_S\hat{U}_0+i\hbar\hat{U}_0^\dagger\hat{A}_S\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\hat{U}_0 \\ &= -\hat{H}_0\hat{U}_0^\dagger\hat{A}_S\hat{U}_0+\hat{U}_0^\dagger\hat{A}_S\hat{U}_0\hat{H}_0 \\ &= [\hat{A}_I,\hat{H}_0] \end{aligned} \tag{322}$$

这表明算符随时间的演化与未受到围绕的哈密顿量有关

3. 算符平均值

算符的平均值为

$$\langle\hat{A}_I\rangle=\langle\psi_I|\hat{A}_I|\psi_I\rangle=\langle\psi_s|\hat{A}_S|\psi_s\rangle=\langle\hat{A}_S\rangle \tag{323}$$

4. 表象基矢

以算符$\hat{A}_I$作为表象，基矢为$\{|a_n(t)\rangle_I\}$

本征方程表述为

$$\hat{A}_I|a_n(t)\rangle_I=a_n|a_n(t)\rangle_I \tag{324}$$

正交归一表述为

$$\langle a_m(t)|a_n(t)\rangle_I=\delta_{mn} \tag{325}$$

完备性表述为

$$\sum_n|a_n(t)\rangle\langle a_n(t)|_I=1 \tag{326}$$

相互作用绘景又称为狄拉克绘景，就是在未受到微扰时的海森堡绘景，在相互作用绘景下，态矢量和基矢都随时间演化

Appendix List

Appendix

H2 附录一

附录一锚点

1. 关于瑞丽-金斯定律

黑体辐射的平衡状态时内部辐射的能量等于吸收的能量，从表观看等效于无能量发散。黑体辐射平衡空腔内的电磁波均为驻波。

根据驻波特性：振动的距离为半波长的整数倍；存在结点，结点在内壁上 [2]

另外，当波阵面固定时，从一个方向上观察，在该方向上，两个波阵面之间的最小距离为空间周期，其倒数即为空频 [2]，翻译成数学如下，其中α,β,γ为空间直线方位角：

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_x}{2}\cos\alpha=\frac{\lambda}{2} \\ \frac{\lambda_y}{2}\cos\beta=\frac{\lambda}{2} \\ \frac{\lambda_z}{2}\cos\gamma=\frac{\lambda}{2} \end{aligned} \tag{327}$$

根据驻波振动距离为半波长整数倍的特性：

$$n_x\lambda_x = 2a \quad n_y\lambda_y = 2a \quad n_z\lambda_z = 2a \tag{328}$$

由上两式可以得到：

$$\frac{1}{\lambda^2} = \frac{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}{(2a)^2} \tag{329}$$

上式表明，一组正整数(n_x, n_y, n_z)对应一个波长

在λ到$\lambda + \mathrm{d}\lambda$范围内包含的能量等于在这一范围内存在多少个波长，等价于存在多少组这样的数，即在空间中存在多少个点。注意到上式的数学意义表征一个球，由于全为正整数，实际上反映的只有八分之一个球。定义：

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \tag{330}$$

这样就将问题转化为半径为n，厚度为dn的球壳内存在多少个点。我们知道一个立方体的顶点被八个全同的立方体共用，相当于一个立方体内只有一个点。于是球点的个数等效于球体积，即波的个数为：

$$\frac{1}{8}4\pi n^2 \mathrm{dn} \tag{331}$$

电磁波是两个互相垂直的振动，因此乘以前置系数2

$$2 \cdot \frac{1}{8}4\pi n^2 \mathrm{dn} \tag{332}$$

利用光速公式：

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{2a}{n} \tag{333}$$

根据能均分定理。一个波长分到kT的能量。由以上，得到频率$\mathrm{d}\nu$内单位体积的能量为：

$$\rho(\nu)\mathrm{d}\nu = \frac{2 \cdot \frac{1}{8} \cdot 4\pi(\frac{2a\nu}{c})^2 \frac{2\nu}{c}\mathrm{d}\nu}{a^3} kT \tag{334}$$

2. 戴维孙-革末电子衍射实验

   内容：电子正入射到镍单晶上观察电子束强度和散射角之间的关系

   现象：散射电子束强度随散射角改变，当取某些散射角时散射强度具有最大值

   结论：电子具有波动性

3. 斯特恩-盖拉赫实验

   结论：氢原子有磁矩，原子的磁矩在磁场中只有两种取向，即原子磁矩时空间量子化的

4. 玻尔-索末非量子化条件

   玻尔角动量量子化条件仅使用于圆形轨道，索末非将玻尔角动量量子化条件推广为

$$\oint \mathrm{pdq} = nh \tag{335}$$

   注意这里是普朗克常数而不是约化普朗克常数。p, q是一对共轭的正则坐标与正则动量，闭合回路积分代表对周期运动积分的一个周期

H2 附录二

附录二锚点

1. 薛定谔方程推演

   由自由粒子波函数及德布罗意关系：

$$\begin{gathered} \varepsilon(\vec{r}, t) = \varepsilon_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t)} \\ \vec{p} = \hbar k, E = \hbar\omega \end{gathered} \tag{336}$$

   自由粒子波函数为：

$$\Psi(\vec{r}, t) = A \exp\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et) \tag{337}$$

   将上式分别对时间求一阶偏导和对坐标求二阶偏导得到：

$$\begin{gathered} \frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\Psi \\ \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2}\Psi \end{gathered}$$

$$
\begin{aligned}
&\partial x^2 \qquad \hbar^2 \\
&\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=-\frac{p_y^2}{\hbar^2}\Psi \\
&\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=-\frac{p_z^2}{\hbar^2}\Psi
\end{aligned} \tag{338}
$$

其中：

$$
\vec{p}\cdot\vec{r}=(p_x i+p_y j+p_z k)\cdot(xi+yj+zk),\quad i,j,k=\vec{i},\vec{j},\vec{k} \tag{339}
$$

注意Laplace算符，于是：

$$
\begin{aligned}
\nabla^2\Psi&=-\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi \\
i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=E\Psi&=\frac{\hbar^2p^2}{2m\hbar^2}\Psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi
\end{aligned} \tag{340}
$$

一般地粒子在势场中存在势场，于是：

$$
\begin{aligned}
E&=\frac{p^2}{2m}+V(\vec{r}) \\
i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}&=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+V(\vec{r})\Psi
\end{aligned} \tag{341}
$$

2. 概率流守恒定律

概率流守恒定律自动地包含在薛定谔方程中，下面从波函数的统计解释出发得到这一结论

$$
\rho=\rho(\vec{r},t)=\Psi(\vec{r},t)\Psi^*(\vec{r},t)=\Psi\Psi^* \tag{342}
$$

概率密度随时间的变化率为：

$$
\frac{\partial\rho}{\partial t}=\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}+\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{343}
$$

由薛定谔方程：

$$
i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+V(\vec{r})\Psi \tag{344}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial\Psi}{\partial t}&=\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\Psi+\frac{1}{i\hbar}V(\vec{r})\Psi \\
\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}&=-\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\Psi^*-V(\vec{r})\Psi^*
\end{aligned} \tag{345}
$$

得到概率随时间的变化关系式为：

$$
\frac{\partial\rho}{\partial t}=\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*)=\frac{i\hbar}{2m}\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*) \tag{346}
$$

令($\vec{J}$称为概率流密度)：

$$
\vec{J}=-\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*) \tag{347}
$$

即：

$$
\frac{\partial\rho}{\partial t}+\nabla\vec{J}=0 \tag{348}
$$

概率流守恒定律表明：在相对论力学中，一般来说，粒子既不能产生，也不会湮灭，体系的离子数守恒，粒子必然会在全空间出现，这是个必然事件。即，在全空间中找到粒子的概率为1

3. 波函数归一化的时间不变性

数学表述：

$$
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi\Psi^*\mathrm{d}\vec{\mathrm{r}}=0 \tag{349}
$$

证明阐述：

从玻恩的统计学诠释中可以证明这一点：波函数强度表征在任意时刻在空间位矢处找到粒子的概率密度，因此全空间积分值为1，即需要满足归一化条件。隐藏条件时，在任意时刻都能找到这个粒子，即任意时刻必须归一化为1

4. 动量算符推演

数学推演：

$$
\frac{\mathrm{d\langle x\rangle}}{\mathrm{dt}}=\int_{-\infty}^{\infty}x\frac{\partial}{\partial t}(|\Psi|^2\mathrm{dx}) \tag{350}
$$

注意到：

$$
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \tag{351}
$$

即：

$$
\begin{aligned}
\langle v\rangle=\frac{\mathrm{d}\langle \mathrm{x}\rangle}{\mathrm{dt}}&=\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}x\frac{\partial}{\partial x}\big(\frac{\partial}{\partial x}(\Psi\Psi^*)\big)\mathrm{dx}\\
&=\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}x\frac{\partial}{\partial x}\big(-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}+\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\big)\mathrm{dx}\\
&=\frac{i\hbar}{2m}x\big(-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}+\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\big)|_{-\infty}^{\infty}-\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{\infty}\big(-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}+\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\big)\mathrm{dx}\\
&=-\frac{i\hbar}{m}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\mathrm{dx}
\end{aligned}
\tag{352}
$$

故：

$$
\begin{aligned}
\langle P\rangle=m\langle v\rangle&=\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi\mathrm{dx}\\
&=\int_{-\infty}^{\infty}\hat{P}|\Psi|^2\mathrm{dx}
\end{aligned}
\tag{353}
$$

5. 厄米算符本征函数正交性证明

设$\hat{F}\psi_k=\lambda_k\psi_k,\hat{F}\psi_l=\lambda_l\psi_l$，并且$l\neq k$时，$\lambda_l\neq\lambda_k$

根据厄米算符的本征值是实数，有：

$$(\hat{F}\psi_k)^*=\lambda_k\psi_k^* \tag{354}$$

用ψ_l右乘上式并对全域积分有：

$$\int(\hat{F}\psi_k)^*\psi_l\mathrm{d}\tau=\int\lambda_k\psi_k^*\psi_l\mathrm{d}\tau \tag{355}$$

用ψ_k^*左乘并对全域积分有：

$$\int\psi_k^*(\hat{F}\psi_l)\mathrm{d}\tau=\int\psi_k^*\lambda_l\psi_l\mathrm{d}\tau \tag{356}$$

由厄米算符定义：

$$\int\psi_k^*(\hat{F}\psi_l)\mathrm{d}\tau=\int(\hat{F}\psi_k)^*\psi_l\mathrm{d}\tau \tag{357}$$

即：

$$\int\lambda_k\psi_k^*\psi_l\mathrm{d}\tau=\int\psi_k^*\lambda_l\psi_l\mathrm{d}\tau \tag{358}$$

故：

$$\int\psi_k^*\psi_l\mathrm{d}\tau=0 \tag{359}$$

附录三

附录三锚点

1. 动量与位置坐标对易关系证明
   1. $[x,\hat{p_x}]=i\hbar$

$$
\begin{aligned}
[x,\hat{p_x}]\psi&=x\hat{p_x}\psi-\hat{p_x}x\psi\\
&=-xi\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi+i\hbar\frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\\
&=i\hbar\psi
\end{aligned}
\tag{360}
$$

   2. $[x,\hat{p_y}]=0$

$$
\begin{aligned}
[x,\hat{p_y}]\psi&=x\hat{p_y}\psi-\hat{p_y}x\psi\\
&=-xi\hbar\frac{\partial}{\partial y}\psi+i\hbar\frac{\partial}{\partial y}(x\psi)\\
&=0
\end{aligned}
\tag{361}
$$

2. 与位置、动量有关的算符对易关系

$$
\begin{aligned}
[\vec{p},F]&=[\hat{p_x}\vec{i}+\hat{p_y}\vec{j}+\hat{p_z}\vec{k},F]\\
&=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}F\vec{i}-i\hbar\frac{\partial}{\partial y}F\vec{j}-i\hbar\frac{\partial}{\partial z}F\vec{k}\\
&=-i\hbar\nabla F
\end{aligned}
\tag{362}
$$

$$[\vec{p},\frac{1}{r}]=-i\hbar\nabla\frac{1}{r}=i\hbar\frac{\vec{r}}{r^3} \tag{363}$$

$$
\begin{aligned}
[\vec{r},p^2] &= [\vec{r},p_x^2]+[\vec{r},p_y^2]+[\vec{r},p_z^2] \\
&= [x,p_x^2]\vec{i}+[y,p_y^2]\vec{j}+[z,p_z^2]\vec{k} \\
&= [p_x[x,p_x]+[x,p_x]p_x]\vec{i}+[p_y[y.p_y]+[y,p_y]p_y]\vec{j}+[p_z[z.p_z]+[z,p_z]p_z]\vec{k} \\
&= 2i\hbar\vec{p}
\end{aligned} \tag{364}
$$

$$
[\vec{r}\cdot\vec{p},p^2]=\vec{r}[\vec{p},p^2]+[\vec{r},p^2]\vec{p}=[\vec{r},p^2]\vec{p}=2i\hbar\vec{p}\cdot\vec{p}=2i\hbar p^2 \tag{365}
$$

附录四

附录四锚点

1. 埃伦费斯特定理的证明

$$
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle A\rangle=\frac{1}{i\hbar}[A,H]+\langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle \tag{366}
$$

$$
\langle A\rangle=\int\psi^*A\psi\mathrm{d}\tau \tag{367}
$$

$$
\begin{gathered}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi=\hat{H}\psi \\
-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*=\psi^*\hat{H}
\end{gathered} \tag{368}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle A\rangle &= \int\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*A\psi)\mathrm{d}\tau \\
&= \int(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}A\psi+\psi^*\frac{\partial A}{\partial t}\psi+\psi^*A\frac{\partial\psi}{\partial t})\mathrm{d}\tau \\
&= -\frac{1}{i\hbar}\int(\psi^*HA\psi-\psi^*AH\psi)\mathrm{d}\tau+\int\psi^*\frac{\partial A}{\partial t}\psi\mathrm{d}\tau \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int\psi^*[A,H]\psi\mathrm{d}\tau+\langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle+\langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle
\end{aligned} \tag{369}
$$

2. 位力定理证明

利用埃伦费斯特定理证明如下

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle\vec{r}\cdot\vec{p}\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\langle[\vec{r}\cdot\vec{p},H]\rangle \\
[\vec{r}\cdot\vec{p},\frac{p^2}{2m}+V] &= [\vec{r}\cdot\vec{p},\frac{p^2}{2m}]+[\vec{r}\cdot\vec{p},V] \\
&= \frac{1}{2m}[\vec{r},p^2]\cdot\vec{p}+[\vec{r}\cdot\vec{p},V] \\
&= \frac{1}{2m}2i\hbar p^2-i\hbar\vec{r}\cdot\nabla V \\
\Rightarrow\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle\vec{r}\cdot\vec{p}\rangle &= \frac{1}{m}\langle p^2\rangle-\langle\vec{r}\cdot\nabla V\rangle
\end{aligned} \tag{370}
$$

定态条件下$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}\langle\vec{r}\cdot\vec{p}\rangle=0$，因此

$$
\frac{1}{m}\langle p^2\rangle=\langle\vec{r}\cdot\nabla V\rangle\Leftrightarrow 2\langle T\rangle=\langle\vec{r}\cdot\nabla V\rangle \tag{371}
$$

3. 赫尔曼-费曼定理证明

$$
\begin{gathered}
\because H|\psi_n\rangle=E_n|\psi_n\rangle \\
\because\frac{\partial}{\partial\lambda}(H|\psi_n\rangle)=\frac{\partial}{\partial\lambda}(E_n|\psi_n\rangle) \\
\therefore\frac{\partial H}{\partial\lambda}|\psi_n\rangle+H\frac{\partial|\psi_n\rangle}{\partial\lambda}=\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}|\psi_n\rangle+E_n\frac{\partial|\psi_n\rangle}{\partial\lambda} \\
\therefore\langle\psi_n|\frac{\partial H}{\partial\lambda}|\psi_n\rangle+\langle\psi_n|H\frac{\partial|\psi_n\rangle}{\partial\lambda}=\langle\psi_n|\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}|\psi_n\rangle+\langle\psi_n|E_n\frac{\partial|\psi_n\rangle}{\partial\lambda}
\end{gathered} \tag{372}
$$

$$\because \langle\psi_n|H = \langle\psi_n|E_n$$

$$\therefore \langle\psi_n|\frac{\partial H}{\partial\lambda}|\psi_n\rangle + \langle\psi_n|E_n\frac{\partial|\psi_n\rangle}{\partial\lambda} = \langle\psi_n|\frac{\partial E_n}{\partial\lambda}|\psi_n\rangle + \langle\psi_n|E_n\frac{\partial|\psi_n\rangle}{\partial\lambda}$$

上式整理即得

$$\frac{\partial E_n}{\partial\lambda} = \langle\psi_n|\frac{\partial H}{\partial\lambda}|\psi_n\rangle = \langle\frac{\partial H}{\partial\lambda}\rangle_n \tag{373}$$

4. 守恒量概率分布与时无关性证明

选择包括体系哈密顿量和力学量在内的守恒量完全集，它们共同的本征函数为ϕ_k

$$H\phi_k = E\phi_k \quad A\phi_k = A_k\phi_k \tag{374}$$

将体系的任何一个态函数在完备本征函数集ϕ_k上展开

$$\psi(t) = \sum_k a_k(t)\phi_k \quad a_k(t) = \langle\phi_k|\psi(t)\rangle \tag{375}$$

在任意时刻测量力学量得到本征值A_k的概率为$|a_k(t)|^2$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}|\mathrm{a_k}|^2}{\mathrm{dt}} &= \frac{\mathrm{da_k^*}}{\mathrm{dt}}a_k + a_k^*\frac{\mathrm{da_k}}{\mathrm{dt}} \\ &= \frac{\partial(\langle\psi(t)|\phi_k\rangle)}{\partial t}a_k + cplx \\ &= \langle\frac{\partial\psi(t)}{\partial t}|\phi_k\rangle\langle\phi_k|\psi(t)\rangle + cplx \\ &= \langle\frac{H}{i\hbar}\psi(t)|\phi_k\rangle\langle\phi_k|\psi(t)\rangle + cplx \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|H\phi_k\rangle\langle\phi_k|\psi(t)\rangle + cplx \\ &= -\frac{1}{i\hbar}E_n|\phi_k|\psi_k|^2 + cplx = 0\end{aligned} \tag{376}$$

附录五

附录五锚点

1. 角动量算符常见对易关系的证明

   1. 对$[l_\alpha, x_\beta]$的证明

$$\begin{aligned}[l_x, x] &= [yp_z - zp_y, x] \\ &= y[p_z, x] + [y, x]p_z - z[p_y, x] - [z, x]p_y \\ &= 0\end{aligned} \tag{377}$$

$$\begin{aligned}[l_x, y] &= [yp_z - zp_y, y] \\ &= y[p_z, y] + [y, y]p_z - z[p_y, y] - [z, y]p_y \\ &= i\hbar z\end{aligned} \tag{378}$$

$$[l_y, x] = [zp_x - xp_z, x] = -i\hbar z \tag{379}$$

   2. 对$[l_\alpha, p_\beta]$的证明

$$\begin{aligned}[l_x, p_y] &= [yp_z - zp_y, p_y] \\ &= y[p_z, p_y] + [y, p_y]p_z - z[p_y, p_y] - [z, p_y]p_y \\ &= i\hbar p_z\end{aligned} \tag{380}$$

$$\begin{aligned}[l_x, p_x] &= [yp_z - zp_y, p_x] \\ &= y[p_z, p_x] + [y, p_x]p_z - z[p_y, p_x] - [z, p_x]p_y \\ &= 0\end{aligned} \tag{381}$$

$$\begin{aligned}[l_y, p_x] &= [zp_x - xp_z, p_x] \\ &= -i\hbar p_z\end{aligned} \tag{382}$$

   3. 对$[l_\alpha, l_\beta]$的证明

$$\begin{aligned}[l_x, l_y] &= l_xl_y - l_yl_x \\ &= (yp_z - zp_y)(zp_x - xp_z) - (zp_x - xp_z)(yp_z - zp_y) \\ &= yp_zzp_x - yp_zxp_z - zp_yzp_x + zp_yxp_z - zp_xyp_z + zp_xzp_y + xp_zyp_z - xp_zzp_y\end{aligned} \tag{383}$$

$$
\begin{aligned}
&= yp_z zp_x + zp_y xp_z - zp_x yp_z - xp_z zp_y \\
&= p_z zyp_x + zp_z xp_y - zp_z yp_x - p_z zxp_y \\
&= (zp_z - p_z z)(xp_y - yp_x) \\
&= i\hbar l_z
\end{aligned} \tag{383}
$$

化简中充分利用对易量的可交换性质

另外一种简单的证明方式如下

$$
\begin{aligned}
[l_x, l_y] &= [yp_z - zp_y, l_y] = [yp_z, l_y] - [zp_y, l_y] \\
&= y[p_z, l_y] + [y, l_y]p_z - z[p_y, l_y] - [z, l_y]p_y \\
&= -i\hbar yp_x + i\hbar xp_y \\
&= i\hbar(xp_y - yp_x) \\
&= i\hbar l_z
\end{aligned} \tag{384}
$$

4. 关于$\vec{l} \times \vec{l} = i\hbar\vec{l}$的证明

$$
\begin{aligned}
\vec{l} \times \vec{l} &= (l_x\vec{i} + l_y\vec{j} + l_z\vec{k}) \times (l_x\vec{i} + l_y\vec{j} + l_z\vec{k}) \\
&= (l_x l_y - l_y l_x)\vec{k} + (l_z l_x - l_x l_z)\vec{j} + (l_y l_z - l_z l_y)\vec{i} \\
&= [l_x, l_y]\vec{k} + [l_z, l_x]\vec{j} + [l_y, l_z]\vec{i} \\
&= i\hbar l_z\vec{k} + i\hbar l_y\vec{j} + i\hbar l_x\vec{i} \\
&= i\hbar\vec{l}
\end{aligned} \tag{385}
$$

5. 关于$[l_\alpha, r^2]$对易关系的证明

$$
\begin{aligned}
[l_x, r^2] &= [l_x, x^2 + y^2 + z^2] \\
&= [l_x, x^2] + [l_x, y^2] + [l_x, z^2] \\
&= x[l_x, x] + [l_x, x]x + \cdots \\
&= 2i\hbar yz - 2i\hbar yz \\
&= 0
\end{aligned} \tag{386}
$$

6. 关于$[l_\alpha, p^2]$对易关系的证明

$$
\begin{aligned}
[l_x, p^2] &= [l_x, p_x^2 + p_y^2 + p_z^2] \\
&= [l_x, p_x^2] + \cdots \\
&= p_x[l_x, p_x] + [l_x, p_x]p_x + \cdots \\
&= 2i\hbar p_y p_z - 2i\hbar p_x p_y \\
&= 0
\end{aligned} \tag{387}
$$

7. 关于$[l_\alpha, l^2]$对易关系的证明

$$
\begin{aligned}
[l_x, l^2] &= [l_x, l_x^2 + l_y^2 + l_z^2] \\
&= l_x[l_x, l_x] + [l_x, l_x]l_x \cdots \\
&= 2i\hbar l_y l_z - 2i\hbar l_z l_y \\
&= 0
\end{aligned} \tag{388}
$$

8. 角动量算符相关证明

$$
\begin{aligned}
[F, \vec{l}] &= [F, \vec{r} \times \vec{p}] \\
&= \vec{r} \times [F, \vec{p}] + [F, \vec{r}] \times \vec{p} \\
&= \vec{r} \times i\hbar\frac{\partial F}{\partial \vec{r}} - i\hbar\frac{\partial}{\partial \vec{p}} \times \vec{p}
\end{aligned} \tag{389}
$$

附录六

附录六锚点

1. 升，降算符对易关系的证明

$$
[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1 \Leftrightarrow [\hat{a}_+, \hat{a}_-] = -1 \tag{390}
$$

证明：

$$
\begin{aligned}
[\hat{a}_-, \hat{a}_+] &= [\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x + \frac{i}{m\omega}\hat{p}), \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}(x - \frac{i}{m\omega}\hat{p})] \\
&= \frac{m\omega}{2\hbar}[x + \frac{i}{m\omega}\hat{p}, x - \frac{i}{m\omega}\hat{p}] \\
&= \frac{m\omega}{2\hbar}\frac{i}{m\omega}[-i\hbar - i\hbar] \\
&= 1
\end{aligned} \tag{391}
$$

2. 算符$\hat{N}=\hat{a}_+\hat{a}_-$与算符$\hat{a}_-,\hat{a}_+$的对易关系

$$
\begin{aligned}
[\hat{N},\hat{a}_-]&=-\hat{a}_-\\
[\hat{N},\hat{a}_+]&=\hat{a}_+
\end{aligned}
\tag{392}
$$

证明：

$$
\begin{aligned}
[\hat{N},\hat{a}_-]&=[\hat{a}_+\hat{a}_-,\hat{a}_-]\\
&=\hat{a}_+[\hat{a}_-,\hat{a}_-]+[\hat{a}_+,\hat{a}_-]\hat{a}_-\\
&=-\hat{a}_-\\
[\hat{N},\hat{a}_+]&=[\hat{a}_+\hat{a}_-,\hat{a}_+]\\
&=\hat{a}_+
\end{aligned}
\tag{393}
$$

附录七

附录七锚点 a

1. 相干态表示性的证明

考虑产生和湮灭算符的对易关系

$$
\begin{aligned}
&[a_-,a_+]=1\\
&\Rightarrow[\hat{a}_-,\alpha\hat{a}_+-\alpha^*\hat{a}_-]=\alpha
\end{aligned}
\tag{394}
$$

反复利用这一关系有

$$
\begin{aligned}
[a_-,(\alpha a_+-\alpha^*a_-)^n]&=[a_-,(\alpha a_+-\alpha^*a_-)\cdot(\alpha a_+-\alpha^*a_-)^{n-1}]\\
&=(\alpha a_+-\alpha^*a_-)[a_-,(\alpha a_+-\alpha^*a_-)^{n-1}]+[a_-,(\alpha a_+-\alpha^*a_-)](\alpha a_+-\alpha^*a_-)^{n-1}\\
&=(\alpha a_+-\alpha^*a_-)(\alpha a_+-\alpha^*a_-)[a_-,(\alpha a_+-\alpha^*a_-)^{n-2}]+(\alpha a_+-\alpha^*a_-)[a_-,(\alpha a_+-\alpha^*a_-)](\alpha a_+-\alpha^*a_-)^{n-2}+\alpha(\alpha\\
&=(\alpha a_+-\alpha^*a_-)(\alpha a_+-\alpha^*a_-)[a_-,(\alpha a_+-\alpha^*a_-)^{n-2}]+2\alpha(\alpha a_+-\alpha^*a_-)^{n-1}\\
&=\cdots\\
&=n\alpha(\alpha a_+-\alpha^*a_-)^{n-1}
\end{aligned}
$$

注意到自然指数的泰勒展开形式为

$$
e^x=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}x^n \tag{396}
$$

基于此

$$
\begin{aligned}
[a_-,e^{\alpha a_+-\alpha^*a_-}]&=[a_-,\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\alpha a_+-\alpha^*a_-)^n]\\
&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[a_-,(\alpha a_+-\alpha^*a_-)^n]\\
&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}n\alpha(\alpha a_+-\alpha^*a_-)^{n-1}\\
&=\alpha\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha a_+-\alpha^*a_-)^{n-1}}{(n-1)!}\\
&=\alpha e^{\alpha a_+-\alpha^*a_-}
\end{aligned}
\tag{397}
$$

将上式两侧作用于任意态得到

$$
\alpha e^{\alpha a_+-\alpha^*a_-}|\psi\rangle=[a_-,e^{\alpha a_+-\alpha^*a_-}]|\psi\rangle=a_-e^{\alpha a_+-\alpha^*a_-}|\psi\rangle-e^{\alpha a_+-\alpha^*a_-}a_-|0\rangle \tag{398}
$$

如果考虑该态为真空态(0态)，并且因为$a_-|0\rangle=0$

因此可以得到

$$
a_-e^{\alpha a_+-\alpha^*a_-}=\alpha e^{\alpha a_+-\alpha^*a_-}|0\rangle \tag{399}
$$

表明$e^{\alpha a_+ - \alpha^* a_-}|0\rangle$是湮灭算符的本征态，本征值为$\alpha$

前面我们将湮灭算符的本征态定义为相干态$|\alpha\rangle$，因此$e^{\alpha a_+ - \alpha^* a_-}|0\rangle$也就是相干态$|\alpha\rangle$

这样我们就看到了$e^{\alpha a_+ - \alpha^* a_-}$的作用，就是将真空态平移到相干态上，将零本征值变更为α

---

1. 这是埃伦费斯特定理的特殊形式，该定理表明，由量子行为向经典退化的一个途径是取力学量的期望值 ↩
2. 参见《光学》 ↩ ↩