

高等量子力学笔记

陈炎柯^{*}

版本: 1.00

更新时间: *October 1, 2020*

^{*}chenyanke@stu.pku.edu.cn, 个人主页 <http://yankechen.xyz>

写在前面

该笔记是在北京大学 2020 年秋季学期上尹澜教授的高等量子力学课程所记录，该课程主要使用的教材是 J. J. Sakurai 以及 Jim Napolitano 所著的《Modern Quantum Mechanics》。课程和教材本身的难度不高，易于理解，对于细节的讲述十分详细，本笔记主要用于快速浏览，追求简短，故省略了大部分如推导一类的过程。主要记录思路 and 结果。

笔记大部分是随着上课在课堂上写的，目前还没有进行订正，所以可能会有很多笔误，等后续慢慢再修改吧。

第一章的内容省略了很多，主要原因是我在第一章上课时笔记是手写的，由于内容都是基础，后面也比较懒，就没再整理成 LaTeX 版的。

笔记模板来自 ElegantL^AT_EX Group，模板下载地址：<https://ddswhu.me/resource/>

随课程进行每周更新。

2020.09.30 更新至 2.3 节

目录

1	量子力学的数学基础和基本原理	4
1.1	量子力学的数学基础	4
1.2	测量、观测量与不确定原理	4
2	量子动力学	5
2.1	时间演化与薛定谔方程	5
2.2	两种绘景	5
2.3	谐振子	6

1 量子力学的数学基础和基本原理

1.1 量子力学的数学基础

希尔伯特空间、算符、本征态和本征值的基本介绍略。

厄米算符的重要性质 (证明略)

- 厄米算符的本征值是实数。
- 厄米算符的属于不同本征值的本征态相互正交

完备性定理:

可以把任意态矢用厄米算符的本征态展开, 设 $\hat{A}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle$ 。

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle, \quad c_n = \langle\psi_n|\Psi\rangle \quad (1.1)$$

$|\psi\rangle_n$ 方向的投影算符为: $|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$, 且

$$\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = 1 \quad (1.2)$$

算符的矩阵表示:

设 $\hat{A}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle$, 则

$$\hat{B} = \sum_{m,n} |\psi_m\rangle\langle\psi_m|\hat{B}|\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \sum_{m,n} B_{mn} |\psi_m\rangle\langle\psi_n| \quad (1.3)$$

1.2 测量、观测量与不确定原理

观测: 观测前系统处于 $|\Psi\rangle$, 针对可观测量 \hat{A} 进行观测, 则观测结果为本征值 λ_n , 观测到个本征值的几率为 $|c_n|^2 = |\langle\psi_n|\Psi\rangle|^2$, 且期望为:

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_n c_n^* c_n A_n = A_n P_n \quad (1.4)$$

不确定原理

$$\langle\Delta\hat{A}^2\rangle\langle\Delta\hat{B}^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle|^2 \quad (1.5)$$

位置空间、动量空间的展开, 波函数等略。

2 量子动力学

2.1 时间演化与薛定谔方程

时间演化算符 $|\psi_t\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle$

$$\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle \Rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{U} = 1 \quad (2.1)$$

$$\hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0) = \hat{U}(t_2, t_0), \quad \hat{U}(t_1, t_0) = \exp \left[\frac{-i\hat{H}(t_1 - t_0)}{\hbar} \right] \quad (2.2)$$

$$\hat{U}(t + dt, t_0) - \hat{U}(t, t_0) = \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) dt \Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (2.3)$$

设 $\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$, 以 $|\psi_n\rangle$ 为基矢

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n\rangle, \quad c_n(t) = \langle\psi_n|\Psi(t)\rangle \Rightarrow c_n(t) = c_n(0) e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \quad (2.4)$$

可观测量随时间的变化:

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi(t_0)|\hat{U}^\dagger(t, t_0)\hat{A}\hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (2.5)$$

如果 $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ 则 $\langle\hat{A}\rangle$ 不随时间变化, 如果 $[\hat{A}, \hat{H}] \neq 0$, 则在 \hat{H} 本征矢做基底的情况下

$$\langle\hat{A}\rangle = \sum_{n,m} A_{mn} c_m^*(t_0) c_n(t_0) \exp \left[\frac{-i(E_n - E_m)(t - t_0)}{\hbar} \right], \quad \omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (2.6)$$

时间关联函数:

$$C(t) = \langle\psi(t_0)|\psi(t)\rangle = \sum_n |c_n(t_0)|^2 \exp \left[\frac{-iE_n(t - t_0)}{\hbar} \right] \quad (2.7)$$

关于时间的测不准原理

$$\Delta t \Delta E \geq \hbar \quad (2.8)$$

其中 Δt 是系统状态变化的特征时间, ΔE 是系统在能量空间的分布范围。

2.2 两种绘景

薛定谔绘景: 算符不随时间变化, 态矢随时间的变化由薛定谔方程描述

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle, \quad i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H} |\psi(t)\rangle \Rightarrow |\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle \quad (2.9)$$

海森堡绘景: 态矢不随时间变化, 算符随时间的变化由海森堡方程描述

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}(0) \hat{U}(t), \quad \frac{d\hat{F}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left(-\hat{U}^\dagger \hat{H} \hat{F} \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{F} \hat{H} \hat{U} \right) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}(t), \hat{H}(t)] \quad (2.10)$$

以上约定两种绘景在 $t_0 = 0$ 时刻是相同的

$$\hat{A}^H(t_0 = 0) = \hat{A}^S, \quad |\psi^H\rangle = |\psi^S(t_0 = 0)\rangle, \quad \hat{U}(t) = \hat{U}(t, t_0 = 0) \quad (2.11)$$

埃伦福斯特定理:

$$m \frac{d^2}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = -\langle \nabla V(\hat{x}) \rangle \quad (2.12)$$

基矢的变化:

在薛定谔绘景下

$$\hat{A}^S = |\psi_n\rangle = \lambda_n |\psi_n\rangle, \quad |\psi^S(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n\rangle, \quad c_n(t) = \langle \psi_n | \psi^S(t) \rangle \quad (2.13)$$

在海森堡绘景下:

$$\hat{A}^H(t) |\psi^H(t)\rangle = \lambda_n |\psi_n^H(t)\rangle, \quad |\psi_n^H(t)\rangle = \hat{U}^\dagger(t) |\psi^H\rangle \quad (2.14)$$

$$|\psi^H\rangle = c_n(t) |\psi_n^H(t)\rangle, \quad c_n(t) = \langle \psi_n^H(t) | \psi^H \rangle \quad (2.15)$$

从海森堡绘景下也可以得到形式上的薛定谔方程 (两种绘景相互等价)

2.3 谐振子

一维谐振子

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2 \quad (2.16)$$

(后面为了简单不算符不写上标了) 定义:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right), \quad a^\dagger = a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right) \quad (2.17)$$

可得

$$[a, a] = 0, \quad [a^\dagger, a^\dagger] = 0, \quad [a, a^\dagger] = 1 \quad (2.18)$$

定义粒子数算符

$$N = a^\dagger a, \quad N^\dagger = N, \quad [N, a] = -a, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger \quad (2.19)$$

则有

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \quad (2.20)$$

设 $N |n\rangle = n |n\rangle$, 有

$$H |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = \langle n | a^\dagger a | n \rangle \geq 0 \quad (2.21)$$

此外有

$$Na|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \quad (2.22)$$

可设 $a|n\rangle = c_n(n-1)$, 可得 $c_n = \sqrt{n}$, 即

$$a_n|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (2.23)$$

由于 $n \geq 0$ 不能无限减小, 需设 $a^{n+1}|\alpha\rangle = 0$, 可得 $\alpha = n$ 。 n 必须为非负整数。 H 的基态为 $|0\rangle$, $E_0 = 1/2\hbar\omega$

$$|n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle, \quad E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad (2.24)$$

易得

$$\langle n|x|n\rangle = \langle n|p|n\rangle = 0, \quad \langle \frac{m\omega^2 x^2}{2} \rangle = \langle \frac{p^2}{2m} \rangle = \frac{\langle H \rangle}{2} \quad (2.25)$$

在基态有

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.26)$$

本征波函数

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle, \langle x|a|0\rangle = 0 \quad (2.27)$$

$$(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx})\psi_0(x) = 0, \quad \psi_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}} e^{-\frac{1}{2}(\frac{x}{x_0})^2}, \quad x_0 = \frac{\hbar}{m\omega} \quad (2.28)$$

$$\psi_n(x) = \langle x| \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}} \right) \left(\frac{1}{x_0^{n+1/2}} \right) \left(x - x_0^2 \frac{d}{dx} \right)^n \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^2 \right] \quad (2.29)$$

时间的演化:

由海森堡方程可得:

$$\frac{da}{dt} = -i\omega a, \quad \frac{da^\dagger}{dt} = i\omega a^\dagger \quad (2.30)$$

定义相干态 $|\alpha\rangle$, 是 a 的本征态, $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$, 对 N 的本征态 $|n\rangle$ 展开:

$$|\alpha\rangle = \sum_n \alpha_n |n\rangle, \quad \alpha_{n+1}\sqrt{n+1} = \alpha_n \alpha, \quad \alpha_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \alpha_0 \quad (2.31)$$

$$|\alpha\rangle = \alpha_0 \sum_n \frac{\alpha^n}{n!} (a^\dagger)^n |0\rangle \quad (2.32)$$

由于 a 不是厄米算符, 基矢没有正交性, 约定归一化系数

$$|\alpha_0|^2 e^{|\alpha|^2} = 1 \quad (2.33)$$

有完备性

$$\int d\alpha d\alpha^* |\alpha\rangle \langle \alpha| = \pi \quad (2.34)$$

Homework: Sakurai 书 (版本不同以教学网为准)

chapter1 : 1, 4(a)(b), 7(a)(b), 16, 30

chapter2 : 4, 5, 8(a)(b), 11

10月12日(周一) 上交