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。主要记录思路和结果。

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 ElegantLaTeX 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

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 $\hat{A}\left|\psi_n\right\rangle = \lambda_n \left|\psi_n\right\rangle$。

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n \left|\psi_n\right\rangle, \quad c_n = \left\langle\psi_n \middle| \Psi\right\rangle \tag{1.1}$$

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

$$\sum_n \left|\psi_n\right\rangle\left\langle\psi_n\right| = 1 \tag{1.2}$$

算符的矩阵表示:

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

$$\hat{B} = \sum_{m,n} \left|\psi_m\right\rangle\left\langle\psi_m\right| \hat{B} \left|\psi_n\right\rangle\left\langle\psi_n\right| = \sum_{m,n} B_{mn} \left|\psi_m\right\rangle\left\langle\psi_n\right| \tag{1.3}$$

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 $|c_n|^2 = |\left\langle\psi_n \middle| \Psi\right\rangle|^2$，且期望为:

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

不确定原理

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

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 $|\psi_t\rangle = \hat{U}(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$

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

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

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

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

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

可观测量随时间的变化:

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

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

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

时间关联函数:

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

关于时间的测不准原理

$$\Delta t\Delta E \geq \hbar \tag{2.8}$$

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

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

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

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

以上约定两种绘景在 $t_0 = 0$ 时刻是相同的

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

埃伦福斯特定理:

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

基矢的变化:

在薛定谔绘景下

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

在海森堡绘景下:

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

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

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

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

(后面为了简单不算符不写上标了) 定义:

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

可得

$$[a, a] = 0, \quad [a^\dagger, a^\dagger] = 0, \quad [a, a^\dagger] = 1 \tag{2.18}$$

定义粒子数算符

$$N = a^\dagger a, \quad N^\dagger = N, \quad [N, a] = -a, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger \tag{2.19}$$

则有

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

设 $N|n\rangle = n|n\rangle$，有

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

此外有

$$Na\,|n\rangle = (n-1)a\,|n\rangle \tag{2.22}$$

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

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

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 $|0\rangle$，$E_0 = 1/2\hbar\omega$

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

易得

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

在基态有

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

本征波函数

$$\psi_0(x) = \langle x|\,0\rangle, \langle x|\,a\,|0\rangle = 0 \tag{2.27}$$

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

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

时间的演化:

由海森堡方程可得:

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

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:

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

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

由于 a 不是厄米算符，基矢没有正交性，约定归一化系数

$$|\alpha_0|^2e^{|\alpha|^2} = 1 \tag{2.33}$$

有完备性

$$\int d\alpha d\alpha^*\,|\alpha\rangle\,\langle\alpha| = \pi \tag{2.34}$$

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