

高等量子力学笔记

陈炎柯^{*}

版本: 1.02

更新时间: *October 21, 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 Elegant $\text{L}^{\text{A}}\text{T}_{\text{E}}\text{X}$ Group，模板下载地址：<https://ddswu.me/resource/>

随课程进行每周更新。

2020.09.30 更新至 2.3 节

2020.10.14 更新至 2.6 节

2020.10.21 更新至 3.4 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
2.4	薛定谔方程经典极限和 WKB 近似	8
2.5	路径积分	9
2.6	A-B 效应	11
3	角动量理论	13
3.1	转动与角动量	13
3.2	自旋 $\frac{1}{2}$ 系统	14
3.3	角动量本征态	14
3.4	轨道角动量	15

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

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

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

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

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:

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

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

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

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

2.4 薛定谔方程经典极限和 WKB 近似

系统的哈密顿量为:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V, \quad \langle r|V|r'\rangle = V(r)\delta(r-r') \quad (2.35)$$

在坐标表象下:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = [-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)]\psi(r) \quad (2.36)$$

稳态解:

$$\psi_n(\vec{r}, t) = e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\vec{r}) \quad (2.37)$$

$$[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r)]\psi_n = E_n \psi_n \quad (2.38)$$

几率密度与几率流: 由薛定谔方程可以推导出几率密度和几率流:

$$\rho = \psi^* \psi, \quad \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \nabla \psi - (\nabla \psi^*) \psi], \quad \frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad (2.39)$$

设波函数为:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sqrt{\rho(\vec{r}, t)} \exp\left(\frac{iS(\vec{r}, t)}{\hbar}\right), \quad \psi^* \nabla \psi = \sqrt{\rho} \nabla(\sqrt{\rho}) + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \rho \nabla S \quad (2.40)$$

可以得到:

$$\vec{j} = \frac{\rho \nabla S}{m} \quad (2.41)$$

即相位在坐标空间的变化导致几率流。

经典极限: 将刚刚写出的波函数的形式应用于薛定谔方程:

$$\begin{aligned} -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) \left[\nabla^2 \sqrt{\rho} + \left(\frac{2i}{\hbar}\right) (\nabla \sqrt{\rho}) \cdot (\nabla S) - \left(\frac{1}{\hbar^2}\right) \sqrt{\rho} |\nabla S|^2 + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \sqrt{\rho} \nabla^2 S \right] + \sqrt{\rho} V \\ = i\hbar \left[\frac{\partial \sqrt{\rho}}{\partial t} + \left(\frac{i}{\hbar}\right) \sqrt{\rho} \frac{\partial S}{\partial t} \right] \end{aligned} \quad (2.42)$$

在经典极限下, $\hbar |\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2$, 可以得到:

$$\frac{1}{2m} |\nabla S|^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (2.43)$$

此即 Hamilton-Jacobi 方程。从经典极限上看, 波函数的相位对应经典力学中的作用量。

WKB 近似: 考虑一维问题, 在 $E > V$ 时

$$S(x, t) = W(x) - Et \Rightarrow W(x) = \pm \int^x dx' \sqrt{2m(E - V)} \quad (2.44)$$

对于稳态, 由连续性方程以及:

$$\vec{j} = \frac{\rho \nabla W}{m} \quad (2.45)$$

即:

$$\rho \propto (\nabla W)^{-1} = \left(\sqrt{2m(E-V)} \right)^{-1} \quad (2.46)$$

波函数即可写为:

$$\psi(x, t) \propto \frac{1}{(E-V)^{1/4}} \exp \left[\pm \frac{i}{\hbar} \int^x dx' \sqrt{2m(E-V)} \right] e^{-iEt/\hbar} \quad (2.47)$$

对于 $E < V$ 类似地可以得到:

$$\psi(x, t) \propto \frac{1}{(V-E)^{1/4}} \exp \left[\pm \frac{1}{\hbar} \int^x dx' \sqrt{2m(V-E)} \right] e^{-iEt/\hbar} \quad (2.48)$$

WKB 近似条件 $\hbar |\nabla^2 S| \ll |\nabla S|^2$, 对应:

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(E-V)}} \ll \frac{2(E-V)}{\left| \frac{dV}{dx} \right|} \quad (2.49)$$

即德布罗意波长远小于势井的特征长度。

在 $E = V(x)$ 附近, WKB 近似不成立, 在 $E = V(x_0)$ 附近做线性展开:

$$V(x) \simeq V(x_0) + V'(x - x_0) \quad (2.50)$$

然后严格求解薛定谔方程, 本征波函数为 1/3 阶贝塞尔函数。

2.5 路径积分

$$\psi(\mathbf{x}'', t) = \int d^3x' K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) \psi(\mathbf{x}', t_0) \quad (2.51)$$

其中传播子为:

$$K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle \exp \left[\frac{-iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar} \right] \quad (2.52)$$

有两点值得注意:

- (1). $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0)$ 在 \mathbf{x}', t_0 给定的情况下, 作为 \mathbf{x}'', t 的函数, 满足 Schrödinger 方程。
- (2). $\lim_{t \rightarrow t_0} K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = \delta^3(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}')$
- (3). $K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = 0$, for $t < t_0$

传播子是含时 Schrödinger 方程的格林函数, 即:

$$\left[- \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \nabla'^2 + V(\mathbf{x}'') - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) = -i\hbar \delta^3(\mathbf{x}'' - \mathbf{x}') \delta(t - t_0) \quad (2.53)$$

于是只需要得到 K 就可解出 Schrödinger 方程。

例 2.1 自由粒子: 选取动量本征态 $p |p\rangle = p' |p'\rangle$ $H |p\rangle = \left(\frac{p'^2}{2m}\right) |p'\rangle$

$$K(x'', t; x', t_0) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dp' \exp \left[\frac{ip(x'' - x')}{\hbar} - \frac{ip'^2(t - t_0)}{2m\hbar} \right] \quad (2.54)$$

积分后可以得到

$$K(x'', t; x', t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar(t - t_0)}} \exp \left[\frac{im(x'' - x')^2}{2\hbar(t - t_0)} \right] \quad (2.55)$$

可以将传播子写为另一种形式:

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) &= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle \exp \left[\frac{-iE_{a'}(t - t_0)}{\hbar} \right] \\ &= \sum_{a'} \left\langle \mathbf{x}'' \left| \exp \left(\frac{-iHt}{\hbar} \right) \right| a' \right\rangle \left\langle a' \left| \exp \left(\frac{iHt_0}{\hbar} \right) \right| \mathbf{x}' \right\rangle \\ &= \langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle \end{aligned} \quad (2.56)$$

传播子除了理解为跃迁振幅外, 也可以理解为在海森堡绘景下对两组位置基矢的变换, 海森堡绘景中也有完备性条件:

$$\int d^3x'' |\mathbf{x}'', t''\rangle \langle \mathbf{x}'', t''| = 1 \quad (2.57)$$

我们可以在传播子中插入完备集将时间间隔分成多个部分:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}''', t''' | \mathbf{x}', t' \rangle &= \int d^3x'' \langle \mathbf{x}''', t''' | \mathbf{x}'', t'' \rangle \langle \mathbf{x}'', t'' | \mathbf{x}', t' \rangle \\ &\quad (t''' > t'' > t') \end{aligned} \quad (2.58)$$

这成为跃迁振幅的结合性。我们可以任意的将时间间隔分为无穷多份:

$$\begin{aligned} \langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle &= \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \langle x_N, t_N | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \\ &\quad \times \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_{N-2}, t_{N-2} \rangle \cdots \langle x_2, t_2 | x_1, t_1 \rangle \end{aligned} \quad (2.59)$$

由于 $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \langle \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{x}, t \rangle \rightarrow \delta(\Delta \mathbf{x})$, 可以只考虑 $\Delta \mathbf{x}$ 很小的情况。

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{x}, t \rangle &= \langle \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x} | e^{-iH\Delta t/\hbar} | \mathbf{x} \rangle \\ &= \langle \mathbf{x} + \Delta \mathbf{x} | e^{-i(p^2/2m)\Delta t/\hbar} | \mathbf{x} \rangle \exp(-iV(\mathbf{x})\Delta t/\hbar) \\ &= \left(\frac{m}{2\pi m\Delta t}\right)^{3/2} \exp \left[\frac{-i\Delta}{\hbar} \left(-\left(\frac{\Delta \mathbf{x}}{\Delta t}\right)^2 + V(\mathbf{x}) \right) \right] \\ &= \left(\frac{m}{2\pi m\Delta t}\right)^{3/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \right] \\ \Rightarrow \langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle &= \int_{\mathbf{x}'}^{\mathbf{x}''} D[\mathbf{x}] \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dt L(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}) \right] \end{aligned} \quad (2.60)$$

2.6 A-B 效应

在电磁场中运动的电子:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 + e\phi \quad (2.61)$$

连续性方程为:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (2.62)$$

其中:

$$\mathbf{j} = \left(\frac{\hbar}{m} \right) \text{Im}(\psi^* \nabla \psi) - \left(\frac{e}{mc} \right) \mathbf{A} |\psi|^2 = \left(\frac{\rho}{m} \right) \left(\nabla S - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \quad (2.63)$$

规范变换: 矢势和标势的选取不唯一

$$\phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad (2.64)$$

此式电场和磁场不发生变化:

$$\mathbf{E} = -\nabla \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.65)$$

但是哈密顿量和薛定谔方程会发生变化:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi' = H' \psi', \quad H' = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}'}{c} \right)^2 + e\phi' \quad (2.66)$$

即:

$$H' = g H g^\dagger, \quad g = \exp \left[\frac{ie\Lambda(\mathbf{x})}{\hbar c} \right] \quad (2.67)$$

有性质:

$$g^\dagger g = 1, \quad g^\dagger \mathbf{x} g = \mathbf{x}, \quad g^\dagger \mathbf{p} g = \mathbf{p} + \frac{e + \nabla \Lambda}{e} \quad (2.68)$$

$$\psi' = g\psi, \quad S' = S + \frac{e\Lambda}{c} \quad (2.69)$$

考虑在图 2.1 中 $\rho_a < \rho < \rho_b$ 部分运动的电子, 均匀磁场为: $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$, 产生的磁矢势为:

$$\mathbf{A} = \left(\frac{B\rho_a^2}{2\rho} \right) \hat{\mathbf{e}}_\phi, \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (2.70)$$

其中 $\hat{\mathbf{e}}_\phi$ 为沿幅角变化的单位矢量, 在柱坐标系下:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2, \quad \nabla = \hat{\mathbf{e}}_\rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \hat{\mathbf{z}} \frac{\partial}{\partial z} + \hat{\mathbf{e}}_\phi \frac{1}{\phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (2.71)$$

考虑边界条件:

$$\psi(\mathbf{x})|_{\rho=\rho_a, \rho_b} = 0 \quad (2.72)$$

考虑 $\rho_a \rightarrow \rho_b$ 的情况, 可以分离变量, 只考虑沿幅角变化的方向, 将问题简化为沿圆周运动的一维问题:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho_a^2} \left[\frac{\partial}{\partial \rho} - \left(\frac{ie}{\hbar c} \frac{B\rho_a^2}{2} \right) \right]^2 \quad (2.73)$$

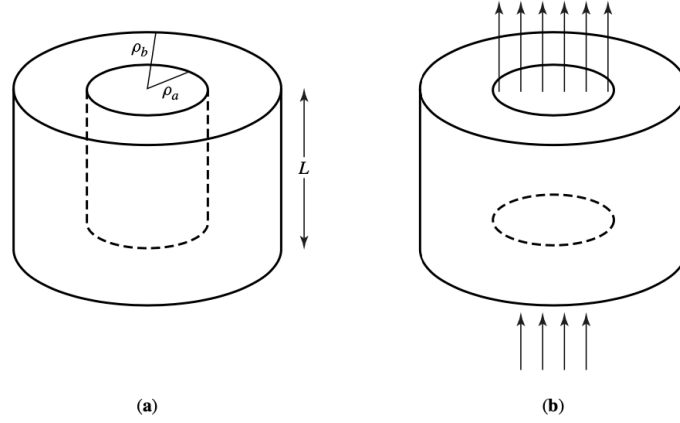


图 2.1: Hollow cylindrical shell (a) without a magnetic field, (b) with a uniform magnetic field.

本征函数和本征值为:

$$\psi_n = e^{in\phi}, \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2m\rho_a^2} \left(n - \frac{eB\rho_a^2}{2\hbar c} \right)^2 \quad (2.74)$$

当 $\frac{eB\rho_a^2}{2\hbar c}$ 为整数 n_0 时, 有基态 $\psi_{n_0}, E_{n_0} = 0$, 对于磁通:

$$\frac{\phi}{\phi_0} = n_0, \quad \phi = \pi\rho_a^2 B, \quad \phi_0 = \frac{\hbar c}{e} \quad (2.75)$$

虽然电子不会感受到磁场, 但是会感受其他区域的磁场。下面从路径积分角度分析这个问题, 对于图 2.2所示的两条积分路径

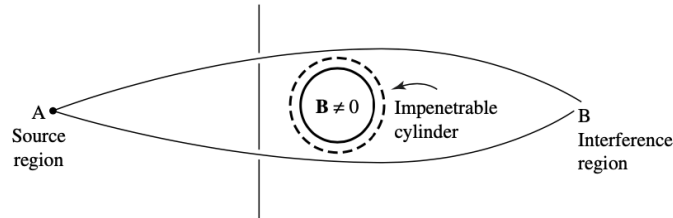


图 2.2: The Aharonov-Bohm effect.

上下路径的相位差为:

$$\Delta S = \int_t^{t'} dt (L_{\text{above}} - L_{\text{down}}), \quad L_{\text{classical}}^{(0)} = \frac{m}{2} \left(\frac{d\mathbf{x}}{dt} \right)^2 \rightarrow L_{\text{classical}}^{(0)} + \frac{e}{c} \frac{d\mathbf{x}}{dt} \cdot \mathbf{A} \quad (2.76)$$

只考虑磁场引起的相位差:

$$\begin{aligned} \Delta S_B &= \left[\left(\frac{e}{\hbar c} \right) \int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right]_{\text{above}} - \left[\left(\frac{e}{\hbar c} \right) \int_{\mathbf{x}_1}^{\mathbf{x}_N} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \right]_{\text{below}} = \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \\ &= \left(\frac{e}{\hbar c} \right) \Phi_B \end{aligned} \quad (2.77)$$

两条路径相同相位, 传播几率大, 有利于电子运动。

3 角动量理论

3.1 转动与角动量

用 $R(\phi)$ 表示实空间的一个转动，实空间矢量经过转动变换为：

$$V'_i = R_{ij}(\phi)V_j \quad (3.1)$$

R_{ij} 即为转动操作的表示矩阵，这是一个实正交矩阵，即 $\mathbf{e}R^T R = RR^T = 1$ 。

量子力学中的转动：

设系统的初始状态为 $|\psi\rangle$ ，经过转动后变为 $|\psi\rangle_R$ ：

$$|\psi\rangle_R = \mathcal{D}(R)|\psi\rangle \quad (3.2)$$

考虑绕 z 轴有一无穷小转动：

$$\mathcal{D}(R) = 1 - i\frac{J_z}{\hbar}d\phi + \cdots \quad (3.3)$$

J_z 即为 z 方向转动的生成元，也是量子力学中的角动量算符。绕一般的方向为 $\hat{\mathbf{n}}$ 的无穷小转动为：

$$\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, d\phi) = 1 - i\left(\frac{\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}}{\hbar}\right)d\phi \quad (3.4)$$

对于有限转动 ϕ ，可以写成 e 指数的形式：

$$\mathcal{D}(\hat{\mathbf{n}}, \phi) = \exp\left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar}\right) \quad (3.5)$$

转动变换生成元 J_i 形成 Lie 代数关系：

$$[J_i, J_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}J_k \quad (3.6)$$

可以引入角动量的升降算符：

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y, \quad [J_z, J_{\pm}] = \pm\hbar J_{\pm}, \quad [J_+, J_-] = 2\hbar J_z \quad (3.7)$$

$$\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2 \quad (3.8)$$

角动量的各分量不存在共同的本征态，但是 \mathbf{J}^2 与所有角动量分量对易：

$$[\mathbf{J}^2, J_i] = 0 \quad (3.9)$$

通常选取 $\{\mathbf{J}^2, J_z\}$ 作为动力学量的完备集，其本征态为 $|j, m\rangle$ 。利用升降算符推导，可以得到：

$$\mathbf{J}^2 |j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m\rangle, \quad J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \quad (3.10)$$

其中 $m = -J, -J+1, \cdots, J-1, J$ 。

3.2 自旋 $\frac{1}{2}$ 系统

自选 $\frac{1}{2}$ 系统是一个两分量系统，设：

$$S_z |+\rangle = +\frac{1}{2}\hbar |+\rangle, \quad S_z |-\rangle = -\frac{1}{2}\hbar |-\rangle \quad (3.11)$$

$$S_x = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \{(|+\rangle\langle -|) + (|-\rangle\langle +|)\} \quad (3.12a)$$

$$S_y = \left(\frac{i\hbar}{2}\right) \{-(|+\rangle\langle -|) + (|-\rangle\langle +|)\} \quad (3.12b)$$

$$S_z = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \{(|+\rangle\langle +|) - (|-\rangle\langle -|)\} \quad (3.12c)$$

绕 z 轴的转动为：

$$\mathcal{D}_z(\phi) = \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) \quad (3.13)$$

例 3.1 计算经过转动的自旋算符：

$$\exp\left(\frac{iS_z\phi}{\hbar}\right) S_x \exp\left(\frac{-iS_z\phi}{\hbar}\right) = S_x \cos \phi - S_y \sin \phi \quad (3.14)$$

两分量系统转动构成 $SU(2)$ 群，该群与 $SO(3)$ 群同态但是不同构。 N 个基矢态空间的转动构成 $SU(N)$ 群。

两分量系统的旋量表示：

$$|+\rangle \doteq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \equiv \chi_+ \quad |-\rangle \doteq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \equiv \chi_- \quad (3.15a)$$

$$S_i \rightarrow \sigma_i \quad (3.15b)$$

绕 $\hat{\mathbf{n}}$ 轴的转动为：

$$\exp\left[-i\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi\right] = \cos \frac{\phi}{2} - i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{n}} \sin \frac{\phi}{2} \quad (3.16)$$

欧拉角

3.3 角动量本征态

用角动量本征态 $|jm\rangle$ 进行表示：

$$\langle jm | J_z | j'm' \rangle = \hbar m \delta j j' \delta m m', \quad \langle jm | J^2 | j'm' \rangle = \hbar^2 j(j+1) \delta j j' \delta m m' \quad (3.17)$$

对于升降阶算符：

$$J_+ |j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \hbar |j, m+1\rangle \quad (3.18a)$$

$$J_-|j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar |j, m-1\rangle \quad (3.18b)$$

即:

$$\langle j', m' | J_{\pm} | j, m \rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}\hbar \delta_{j'j} \delta_{m', m \pm 1} \quad (3.19)$$

Wigner 函数

$$\mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R) = \left\langle j, m' \left| \exp \left(\frac{-i\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{n}}\phi}{\hbar} \right) \right| j, m \right\rangle \quad (3.20)$$

Wigner 函数的性质:

- (1). $\sum_{m'} \mathcal{D}_{m''m'}^{(j)}(R_1) \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R_2) = \mathcal{D}_{m''m}^{(j)}(R_1 R_2)$
- (2). $\mathcal{D}_{m'm}(R^{-1}) = \mathcal{D}_{mm'}^*(R)$
- (3). $\mathcal{D}(R)|j, m\rangle = \sum_{m'} |j, m'\rangle \langle j, m' | \mathcal{D}(R) | j, m \rangle = \sum_{m'} |j, m'\rangle \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(R)$

用欧拉角表示 $D(R)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &= \left\langle j, m' \left| \exp \left(\frac{-iJ_z\alpha}{\hbar} \right) \exp \left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar} \right) \exp \left(\frac{-iJ_z\gamma}{\hbar} \right) \right| j, m \right\rangle \\ &= e^{-i(m'\alpha+m\gamma)} \left\langle j, m' \left| \exp \left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar} \right) \right| j, m \right\rangle \end{aligned} \quad (3.21)$$

只需要知道 y 方向转动的表示即可:

$$d_{m'm}^{(j)}(\beta) \equiv \left\langle j, m' \left| \exp \left(\frac{-iJ_y\beta}{\hbar} \right) \right| j, m \right\rangle \quad (3.22)$$

$j = \frac{1}{2}$ 系统:

$$d^{1/2} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix} = \cos\frac{\beta}{2} - i\sigma_y \sin\frac{\beta}{2} \quad (3.23)$$

$j = 1$ 系统, 见 Sakurai 书 198 页, 笔记里略了。

3.4 轨道角动量

没有自旋的自由度, 所有态都可以用位置的本征态 $|\vec{r}\rangle$ 来表示, 首先说明, 轨道角动量的表达式和对易关系为:

$$\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}, \quad [L_i, L_j] = i\varepsilon_{ijk}\hbar L_k \quad (3.24)$$

为了验证该表达式, 考虑绕 z 轴的转动:

$$\exp \left[-i \frac{\delta\phi}{\hbar} L_z \right] |x', y', z'\rangle = |x' - y'\delta\phi, y' + x'\delta\phi\rangle \quad (3.25)$$

或者写为:

$$\begin{aligned} \left[1 - i \left(\frac{\delta\phi}{\hbar} \right) L_z \right] |x', y', z'\rangle &= \left[1 - i \left(\frac{p_y}{\hbar} \right) (\delta\phi x') + i \left(\frac{p_x}{\hbar} \right) (\delta\phi y') \right] |x', y', z'\rangle \\ &= |x' - y'\delta\phi, y' + x'\delta\phi, z'\rangle \end{aligned} \quad (3.26)$$

于是可以得到验证。在球坐标系下:

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \quad (3.27)$$

剩下的略了, 在 Sakurai 书中 200-201 页

球谐函数

对于一个中心势, 系统的 Hamiltonian 的本征函数:

$$\langle \mathbf{x}' | n, l, m \rangle = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (3.28)$$

球谐函数:

$$Y_l^m(\theta, \phi) \propto P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (3.29)$$

满足:

$$L_z Y_l^m = \hbar m Y_l^m, \quad L^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m \quad (3.30)$$

球谐函数的正交性:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d(\cos\theta) Y_l^{m'*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (3.31)$$

球谐函数的完备性:

$$\sum_{l,m} Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta', \phi') = \delta(\hat{\mathbf{n}} - \hat{\mathbf{n}}') = \delta(\phi - \phi') \sin\theta \delta(\theta - \theta') \quad (3.32)$$

球谐函数的一般表达式:

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \frac{(-1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\phi} \frac{1}{\sin^m\theta} \frac{d^{l-m}}{d(\cos\theta)^{l-m}} (\sin\theta)^{2l} \quad (3.33)$$

球谐函数有性质:

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m [Y_l^m(\theta, \phi)]^* \quad (3.34)$$

球谐函数和 Wigner 函数之间的关系

对一方位角方向 $\hat{\mathbf{n}}$ ，都可以找到一个转动操作:

$$|\hat{\mathbf{n}}\rangle = \mathcal{D}(R)|\mathbf{z}\rangle \quad (3.35)$$

用欧拉角表示应满足:

$$\mathcal{D}(R) = \mathcal{D}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \quad (3.36)$$

可以表示为:

$$|\hat{\mathbf{n}}\rangle = \sum_l \sum_m \mathcal{D}(R)|l, m\rangle \langle l, m | \hat{\mathbf{z}}\rangle \quad (3.37)$$

也就是说:

$$\langle l, m' | \hat{\mathbf{n}}\rangle = \sum_m \mathcal{D}_{m'm}^{(l)}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \langle l, m | \hat{\mathbf{z}}\rangle \quad (3.38)$$

进一步推导可得:

$$Y_l^{m'*}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} \mathcal{D}_{m'0}^{(l)}(\alpha = \phi, \beta = \theta, \gamma = 0) \quad (3.39)$$

或者写为:

$$\mathcal{D}_{m0}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma = 0) = \sqrt{\frac{4\pi}{(2l+1)}} Y_l^{m*}(\theta, \phi) \Big|_{\theta=\beta, \phi=\alpha} \quad (3.40)$$