Quantum Mechanics

白塔

2019 年 9 月 9 日

1 早期量子现象

1.1 光电效应

1.2 Compton 效应

1.3 氢原子光谱

1.4 Franck-Hertz 实验

1.5 Stem-Gerlach 实验

1.6 Wien 辐射定律

1.7 Rayleigh-Jeans 辐射定律

1.8 Planck 辐射定律

2 波粒二象性

2.1 De Broglie 波

De Broglie 假说: 和光子一样, 物质微粒也具有波动性.

2.2 de Broglie 关系

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

2.3 Young 双缝实验

2.4 物质波的衍射

2.5 波函数

波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 满足的条件:

1. 平方可积, 归一性条件
$$\int |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 \,\mathrm{d}^3 r = 1$$
2. 任意次可微

2.6 波函数的统计解释

2.7 Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r},t) + V(\boldsymbol{r},t)\psi(\boldsymbol{r},t)$$

2.8 连续性方程

2.9 叠加原理

由于 Schrödinger 方程对 ψ 是线性的, 叠加原理成立, 再加上概率幅的解释, 就能给出波动型的结果.

2.10 自由粒子

若粒子在空间各点 $V = C$, 则粒子未受力的作用, 我们说它是自由的.

2.11 波包

2.12 自由波包的时间演化

3 力学量的表述

3.1 线性算符

线性算符 A 定义

$$\begin{cases} |\psi'\rangle = A|\psi\rangle \\ A[\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle] = \lambda_1 A|\psi_1\rangle + \lambda_2 A|\psi_2\rangle \end{cases}$$

3.2 厄密算符

厄密算符 $A^\dagger$ 定义:

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle \iff \langle\psi| = \langle\psi|A^\dagger$$

推论:

1. 厄米算符 A 的本征值都是实数.
2. A 向左作用: 当 $\langle\varphi|$ 是 A 的本征矢, 对于任意 $|\psi\rangle$ 均有
$$\langle\psi|A|\varphi\rangle = \lambda_\psi\langle\psi|\varphi\rangle$$
3. 厄米算符两个互异本征值的本征矢互相正交.

$$\boxed{\begin{aligned} \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle &= \langle\varphi|A|\psi\rangle^* \\ \langle A\psi| &= \langle\psi|A^\dagger \\ \langle A^\dagger\varphi|\psi\rangle &= \langle\varphi|A\psi\rangle \\ (|u\rangle\langle v|)^\dagger &= |v\rangle\langle u| \end{aligned}}$$

3.3 位置算符

3.4 动量算符

3.5 动能算符

3.6 角动量算符

3.7 哈密顿算符

3.8 量子力学中的基本对易关系

定义对易子:

$$[A, B] = AB - BA$$

3.9 正则量子化

3.10 Heisenberg 不确定性原理

3.11 能量-时间不确定性原理

3.12 位置算符、动量算符、角动量算符的本征值和本征函数

4 不含时标量势场中粒子的运动

4.1 空间变量与时间变量的分离

4.2 定态

4.3 定态的叠加

4.4 一维方势场

5 量子力学的数学工具

5.1 单粒子波函数空间

L^2 为所有平方可积函数的集合, 称由 L^2 中充分正规函数 (归一化, 可微等) 构成的波函数集合 (空间) 为 $\mathscr{F}$.

5.2 波函数空间的结构

$\mathscr{F}$ 是一个矢量空间.

5.3 标量积

定义内积

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(r)\psi(r)\,\mathrm{d}^3 r$$

内积与第二个因子线性, 与第一个因子反线性:

$$\begin{cases} (\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^* \\ (\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2) \\ (\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1, \psi) + \lambda_2^*(\varphi_2, \psi) \end{cases}$$

5.4 离散正交归一基底

正交归一基定义:
设可列函数集合 $\{u_i(r)\} \in \mathscr{F}$, 当

$$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$$

且任意函数 $\psi(r) \in \mathscr{F}$ 可按 $u_i(r)$ 展开

$$\psi(r) = \sum c_i u_i(r), \quad c_i = (u_i, \psi)$$

则 $\{u_i(r)\}$ 是一个正交归一基.

5.5 态空间

5.6 Dirac 符号

5.7 左矢与右矢

5.8 表象的定义

5.9 正交归一关系

5.10 封闭性关系

$$\boxed{\begin{cases} P_{u_i} = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| & = \mathbb{1} \\ P_{w_a} = \int |w_a\rangle\langle w_a|\,\mathrm{d}a & = \mathbb{1} \end{cases}}$$

其含义为将任意 $|\psi\rangle$ 向空间的基投影, 得到其自身.

5.11 左矢的表示

5.12 右矢的表示

5.13 算符的表示

5.14 表象变换

变换基 $|u_i\rangle \to |t_k\rangle$ 的变换矩阵为

$$S_{ik} = \langle u_i|t_k\rangle$$
$$(S^\dagger)_{ki} = (S_{ik})^*$$

5.15 右矢分量的变换

由右矢在旧基中的分量得到新基中的分量:

$$\langle t_k|\psi\rangle = \sum_i S^\dagger_{ki}\langle u_i|\psi\rangle$$

5.16 左矢分量的变换

由右矢在旧基中的分量得到新基中的分量:

$$\langle\psi|t_k\rangle = \sum_i \langle\psi|u_i\rangle S_{ik}$$

5.17 算符矩阵元的变换

$$\langle t_k|A|t_l\rangle = \sum_{i,j} \langle t_k|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|t_l\rangle$$

或写作

$$A_{kl} = \sum_{i,j} S^\dagger_{ki} A_{ij} S_{jl}$$

5.18 可观测量

可观察量用观察算符描述. 一个厄米算符 A 的互异本征值是正交的, 通过选择, 总可以让每一个相同本征值的子空间的各个本征矢也是正交的.
按定义, 如果本征矢的厄米算符 A 的正交归一系构成一个基, 则厄米算符 A 构成一个观察算符. 构成基可用封闭性关系式描述.

5.19 可观测量完全集

定理 I
如果两个算符 A 和 B 是对易的, 且 $|\psi\rangle$ 是 A 的一个本征矢, 则 $B|\psi\rangle$ 也是 A 的本征矢, 即 A 的本征子空间在 B 的作用下不变.

定理 II
如果两个观察算符 A, B 是对易的, 且 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ 是 A 的不同本征值的两个本征矢, 那么 $\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$.

定理 III(基本定理)
如果两个观察算符 A, B 是对易的, 则 A, B 的共同本征矢构成态空间的一个正交归一基.

ECOC
若 $A, B, \ldots$ 的共同本征矢构成一个正交归一基, 则 $A, B, \ldots$ 构成一个 ECOC. 此时, 1. $A, B, \ldots$ 是两两对易的. 2. 给出了全体 $A, B, \ldots$ 的本征值的一个数组, 便足以决定唯一的共同本征矢.
两个典型的 ECOC: $\{X, Y, Z\}$, $\{P_x, P_y, P_z\}$, $\{X, P_y, P_z\}$.