量子期末复习

第五章 WKB近似

重要公式：

$$\psi(x) \approx \frac{C_{\pm}}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \int_{x_0}^{x} p(x')\mathrm{d}x'/\hbar}$$

但是，WKB近似有个困难，就是在转变点处，函数发散了，为了解决这个困难，人们假设，在转变点周围势函数是接近线性变化的，

$$\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E) = U_1\left(x-x_2\right)+U_2\left(x-x_2\right)^2+\cdots$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) = U_1\left(x-x_2\right)\psi(x)$$

$$\psi(x) = C_{2A}\,\mathrm{Ai}\left(\sqrt[3]{U_1}\left(x-x_2\right)\right)+C_{2B}\,\mathrm{Bi}\left(\sqrt[3]{U_1}\left(x-x_2\right)\right)$$

经过计算，我们得到：

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{2C_2}{\sqrt{p(x)}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p\left(x'\right)dx' + \frac{\pi}{4}\right) & \text{if } x < x_2 \\ \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\int_{x_2}^{x}\left|p\left(x'\right)\right|dx'/\hbar\right) & \text{if } x_2 < x \end{cases}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}}\exp\left(-\int_x^{x_1}\left|p\left(x'\right)\right|dx'/\hbar\right) & \text{if } x < x_1 \\ \frac{2C_1}{\sqrt{p(x)}}\sin\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p\left(x'\right)dx' + \frac{\pi}{4}\right) & \text{if } x_1 < x \end{cases}$$

以上是连接点处的波函数。

量子化规则：

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)dx = (n-1/2)\pi\hbar, \quad n = 1,2,3,\ldots$$

量子隧穿效应：

毛估C_r对于A_r的比例为

$$\frac{|C_r|}{|A_r|} \approx e^{-\gamma};$$

其中，$\gamma = \int_0^a |p(x')|dx'/\hbar$。

所以，粒子穿透过位势垒的概率为

$$T = e^{-2\gamma}。$$

定态微扰论

非简并微扰

能量修正

$$E_n = E_n^{(0)} + \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle + \sum_{k\neq n} \frac{|\langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

能态修正

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \sum_{k\neq n} |k^{(0)}\rangle \frac{\langle k^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

非简并微扰论

最重要的叠加当属两个简并态的叠加

能态：

$$\begin{pmatrix} W_{aa} & W_{ab} \\ W_{ba} & W_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

能量：

$$E_{\pm}^{(1)} = \frac{1}{2}(W_{aa} + W_{bb} \pm \sqrt{(W_{aa} - W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2})$$

变分法

高斯函数

法的一个很好的例子。我们可以选取高斯函数作为我们的试探波函数，

$$\Psi(x) = Ae^{-bx^2}, \quad [7.2]$$

其中 b 为常数，A 由归一化决定：

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}} \Rightarrow A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4} \quad [7.3]$$

现在

$$\langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle, \quad [7.4]$$

其中，在这种情况下，

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} \frac{d^2}{dx^2}(e^{-bx^2})dx = \frac{\hbar^2 b}{2m} \quad [7.5]$$

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2}m\omega^2 |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2bx^2} x^2 dx = \frac{m\omega^2}{8b},$$

所以

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m\omega^2}{8b} \quad [7.6]$$

轨道角动量与自旋角动量

对易关系

- 三个分量之间的关系

$$\mathbf{j} \times \mathbf{j} = i\hbar \mathbf{j}$$

- 平方算符与三个分量的关系

$$\left[\mathbf{j}^2, j_\alpha\right] = 0, \quad \alpha = x, y, z$$

$$j_+ = j_x + i j_y, j_- = j_x - i j_y$$

- 平方与升降

$$\left[\mathrm{j}^2, j_\pm\right] = 0$$

- 分量与升降

$$[j_z, j_\pm] = \pm\hbar j_\pm$$

- 升降之间相互作用

$$\begin{aligned}
&j_\pm j_\mp = \mathbf{j}^2 - j_z^2 \pm \hbar j_z \\
&[j_+, j_-] = 2\hbar j_z \\
&[j_+, j_-]_+ = 2\left(\mathbf{j}^2 - j_z^2\right)
\end{aligned}$$

升降算符的作用结果

$$j_\pm|jm\rangle = e^{i\delta}\sqrt{\lambda - m(m\pm 1)}|jm\pm 1\rangle$$

$$j_\pm|j,m\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,\hbar\,|j\,m\pm 1\rangle$$

自旋轨道耦合

(a)

$$[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, L_x] = [L_xS_x + L_yS_y + L_zS_z, L_x] = S_x[L_x, L_x] + S_y[L_y, L_x] + S_z[L_z, L_x]$$

$$= S_x(0) + S_y(-i\hbar L_z) + S_z(i\hbar L_y) = i\hbar(L_yS_z - L_zS_y) = i\hbar(\mathbf{L}\times\mathbf{S})_x.$$

Same goes for the other two components, so $\boxed{[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \mathbf{L}] = i\hbar(\mathbf{L}\times\mathbf{S}).}$

(b) $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \mathbf{S}]$ is identical, only with $\mathbf{L}\leftrightarrow\mathbf{S}$: $\boxed{[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \mathbf{S}] = i\hbar(\mathbf{S}\times\mathbf{L}).}$

(c) $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \mathbf{J}] = [\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \mathbf{L}] + [\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \mathbf{S}] = i\hbar(\mathbf{L}\times\mathbf{S} + \mathbf{S}\times\mathbf{L}) = \boxed{0.}$

(d) L^2 commutes with all components of $\mathbf{L}$ (and $\mathbf{S}$) , so $\boxed{[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, L^2] = 0.}$

(e) Likewise, $\boxed{[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, S^2] = 0.}$

(f) $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, J^2] = [\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, L^2] + [\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, S^2] + 2[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, \mathbf{L}\cdot\mathbf{S}] = 0 + 0 + 0 \Longrightarrow \boxed{[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}, J^2] = 0.}$

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)$$

能量表象

升降算符的一般式子：

阶梯算符

维基百科，自由的百科全书

在线性代数中（以及其在量子力学中的运用），**升算符**或**降算符**——集合起来称为**阶梯算符**——为可以将另一算符的本征值分别做增加或减少的算符。在量子力学中，有时候升算符称为创生算符，而降算符称为消灭算符。阶梯算符在量子力学中的著名应用是出现在量子谐振子以及角动量的形式中。

量子光学算符
• **阶梯算符**
• 创生及消灭算符
• 位移算符
• 转动算符 (量子光学)
• 压缩算符
[编辑此模板]

假设一阶梯算符X与一任意算符N有对易关系如下：

$$[N,X] \equiv NX - XN = cX$$

c为某一标量。则算符X的作用会表现为：将算符N的一个本征态$|n\rangle$，其本征值移动了c:

$$\begin{aligned} NX|n\rangle &= (XN + [N,X])|n\rangle \\ &= (XN + cX)|n\rangle \\ &= XN|n\rangle + cX|n\rangle \\ &= Xn|n\rangle + cX|n\rangle \\ &= (n+c)X|n\rangle \end{aligned}$$

换句话说，若$|n\rangle$是算符N的一个本征态，带有本征值n，则$X|n\rangle$也是N的一个本征态，带有本征值$n + c$。对N来说，升算符是一个算符X使得c是正实数，而降算符则是使c是负实数。若N是厄米算符（Hermitian operator），则c必须要是实数，而X的厄米伴算符（Hermitian adjoint）$X^\dagger$遵守如下对易关系：

$[N,X^\dagger] = -cX^\dagger$。特别是若$X$对$N$来说是降算符，则$X^\dagger$对$N$来说会是个升算符，反之亦然。

谐振子里面的升降算符：

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right) \\ a^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{i}{m\omega}p\right) \end{aligned}$$

升降与哈密顿的对易关系：

$$\begin{aligned} [H,a] &= -\hbar\omega a \\ [H,a^\dagger] &= \hbar\omega a^\dagger \end{aligned}$$

求本征态：

给定任何能量本征态，可以拿降算符a作用在其上，产生了另一个能量少了$\hbar\omega$的本征态。重复使用降算符，似乎可以产生能量本征态其能量低到$E = -\infty$。不过这样就就与早先的要求$E \geq \hbar\omega/2$相违背。因此，必须有一最底的能量本征态——基态，标示作$|0\rangle$（勿与零右括矢量混淆），使得

$a\,|0\rangle = 0$（即a对$|0\rangle$作用后产生零右括矢量（zero ket））。

在这情况下，继续使用降算符只会产生零右括矢量，而不是产生额外的能量本征态。此外，还指出了

$H\,|0\rangle = (\hbar\omega/2)\,|0\rangle$。

最后，透过将升算符作用在$|0\rangle$上，并且乘上适当的归一化因子，可以产生出一个能量本征态的无限集合$\{|0\rangle\,,|1\rangle\,,|2\rangle\,,\ldots,|n\rangle\,,\ldots\}$使得

$H\,|n\rangle = \hbar\omega(n+1/2)\,|n\rangle$，这与前段所给的能谱相符合。

这方法也能够用来很快地找到量子谐振子的基态波函数。只要将消灭算符作用于基态，$a\,|0\rangle = 0$变为

$$x\psi_0(x) + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d\psi_0(x)}{dx} = 0。$$

所以，

$$\frac{d\ln\psi_0(x)}{dx} = -\frac{\hbar}{m\omega}x + \text{Constant}。$$

激活 Windows
转到"设置"以激活 Windows

坐标、动量与哈密顿算符的对易关系

$$\begin{cases} [x,H] = \frac{i\hbar}{m}p \\ [p,H] = -i\hbar kx \end{cases}$$

幺正算符：

在泛函分析中，**幺正算符**（英语：**unitary operator**，或称**酉算符**）是定义在希尔伯特空间上的有界线性算符$U: H \to H$，满足如下规律

$$U^*U = UU^* = I$$

对易关系展开公式：

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}], \quad [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}]$$

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

泡利矩阵：

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$
$$\sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$
$$\sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

重要的对易关系：

$$[\hat{x},\ \hat{p}]\psi = (\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})\psi = x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial(x\psi)}{\partial x} = i\hbar\psi\ 。$$

海森堡绘景

时间演化算符：

假设系统的哈密顿量H不含时，则时间演化算符为[2]:69-71[注 3]

$$U(t,0) = e^{-iHt/\hbar},$$

海森堡的力学量算符：

$$A_{\mathcal{H}}(t) \overset{def}{=} U^\dagger(t,0) A_{\mathcal{S}} U(t,0)。$$

海森堡运动方程：

将算符的定义式纳入考量，就可以得到海森堡运动方程：

$$\frac{d}{dt}A_{\mathcal{H}}(t)=\frac{1}{i\hbar}[A_{\mathcal{H}}(t),H]。$$

动量表象与坐标表象

$$\langle p \mid x\rangle=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)$$

$$\langle x \mid p\rangle=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right)$$

含时微扰论

$$\omega_{mn}:=(E_m-E_n)/\hbar$$

$$W_{mn}(t):=\langle m|\hat{W}(t)|n\rangle$$