表象理论 (作业: 20230430)

1. 希尔伯特空间: 一个量子体系的所有的可能状态构成的空间, 是由全部状态集合构成的线性空间;
   (a) 内积: $<\Psi|\Psi>=\int|\Psi|^2 d\tau<\infty$;
   (b) 施瓦兹不等式: $<\Psi_1|\Psi_2>^2\leq<\Psi_1|\Psi_1><\Psi_2|\Psi_2>$;
2. 算符的矩阵表示: 设算符 $\hat{F}(x,\hat{p_x})$ 作用于波函数 $\Psi(x,t)$ 后得到另一个函数 $\Phi(x,t)$, 在坐标表象中记为 $\Phi(x,t)=\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\Psi(x,t)$, 设 $\begin{cases}\Psi(x,t)=\sum\limits_m a_m(t)u_m(x)\\ \Phi(x,t)=\sum\limits_m b_m(t)u_m(x)\end{cases}$,定义 $F_{nm}=\int u_m^*(x)\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})u_m(x)dx$, 则 $b_n(t)=\sum\limits_m F_{nm}a_m(t), n=1,2,...$, 其中 F_{nm} 是算符 $\hat{F}$ 在 Q 表象中的表示;
   (a) 可用矩阵表示: $\begin{pmatrix}b_1(t)\\ b_2(t)\\ \vdots\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}F_{11}&F_{12}&...\\ F_{21}&F_{22}&\vdots\\ \vdots&\vdots&\ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1(t)\\ a_2(t)\\ \vdots\end{pmatrix}$, 其中用 F 表示矩阵 F_{ij}, 即 $\Phi=F\Psi$;
      i. 连续谱的矩阵表示: $F_{q'q''}=\int u_{q'}^*(x)\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})u_{q''}(x)dx$, 矩阵元为 $F_{xx'}=\int\delta(x''-x)\hat{F}(x'',-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\delta(x''-x')dx''=\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\delta(x-x')$;
   (b) 厄米矩阵: $F_{nm}^*=F_{nm}$, 厄米算符的矩阵都是厄米矩阵;
   (c) 自身表象中的矩阵元: 算符 $\hat{Q}$ 在自身表象中的矩阵元是 $Q_{nm}=\int u_n^*\hat{Q}u_m d\tau=Q_m\delta_{nm}$, 是一个对角矩阵, 它的对角元就是本征值;
3. 公式的矩阵表达:
   (a) 期望: $<F>=\Psi^\dagger F\Psi$;
   (b) 本征方程: $F\Psi=\lambda\Psi$, 即 $(F-\lambda I)\Psi=0$;
      i. 非零解条件: $\det|F-\lambda I|=0$, 或 $\det|F_{mn}-\lambda\delta_{mn}|=0$, 称其为久期方程;
   (c) 薛定谔方程: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=H\Psi$;
4. 狄拉克符号: 把态和波函数分开, 且让物理量不依赖于表象;

(a) 刃矢: 对波函数 Ψ 表示的量子状态, 以 $|\Psi>$ 表示, 称 $|>$ 为刃矢 (或右矢);

  i. 刁矢: 左矢 $<|=|>^\dagger$, 波函数 Ψ 的复共轭 Ψ^* 可以用 $<\Psi|$ 表示;

(b) 内积: 左右矢表示不同空间的矢量, 不能进行加法运算, 但可以进行内积 $<\Phi|\Psi>=(\Phi,\Psi)=\int\Phi^*\Psi d\tau$;

  i. $<\phi|\Psi>^*=<\Psi|\phi>=(\phi,\Psi)^*$;

  ii. 正交: $<\phi|\Psi>=0$;

  iii. 归一性: $<\Psi|\Psi>=1$;

5. 态矢量的狄拉克符号表示: 设 $\hat{F}$ 的本征方程 $\hat{F}|n>=f_n|n>, <n|n'>=\delta_{nn'}$, 则 $|n>$ 构成 $\hat{F}$ 表象的希尔伯特空间. 态矢量 $|\Psi>$ 在基矢 $|n>$ 上的投影集合 $\{a_n\}=\{<n|\Psi>\}$, 其中 $|n>$ 是希尔伯特空间的基矢
$$|n>=\begin{pmatrix}\vdots\\0\\1\\0\\\vdots\end{pmatrix};$$

(a) 微观的量子态用抽象的态矢 $|\Psi>$ 描述, 与表象无关. $|\Psi>$ 在某个表象基矢上的投影就是 $|\Psi>$ 在该表象中的波函数;

(b) 本征矢量的完备性条件 (封闭性): $\sum_n|n><n|=1$, 或混合谱 $\sum_n|n><n|+\int|q>dq<q|=1$;

6. 算符用狄拉克符号表示: 设算符 $\hat{F}$ 作用在右矢 $|A>$ 上得到右矢 $|B>$, 即 $|B>=\hat{F}|A>$, 利用正交归一化条件 $\delta_{mn}=<m|n>$, 得到 $<m|B>=\sum_n<m|\hat{F}|n><n|A>$. 其中 $<m|\hat{F}|n>$ 称为 $\hat{F}$ 在 Q 表象下的矩阵元;

(a) 坐标表象下的矩阵元: $<x'|\hat{F}|x>=|x'><x'|\hat{F}|x><x|=\hat{F}(x',-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'})\delta(x-x')$, 即 $<m|\hat{F}|n>=\iint<m|x'>dx'<x'|\hat{F}|x>dx<x|n>=\int<m|x>\hat{F}(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})dx<x|n>$;

(b) $|B>$ 的共轭: $<B|=<A|\hat{F}^\dagger$, 当 $\hat{F}$ 是厄米算符时 $<B|=<A|\hat{F}$;

7. 常用量子力学公式的狄拉克符号表示: 右矢用于确定态, 左矢用于确定表象;
   (a) 算符: $\hat{F}|\Psi>=|\Phi>$, 张量;
   (b) 薛定谔方程: $i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi>=\hat{H}|\Psi>$, 本征方程;
   (c) 定态薛定谔方程: $\hat{H}|n>=E_n|n>$, 本征方程;
   (d) 态矢量 (波函数): $|\Psi>=\sum\limits_n|n><n|\Psi>$, 矢量;
   (e) 内积: $<n,\Psi>=\int<n|x>dx<x|\Psi>$, 数量;
   (f) 正交: $<n|m>=\delta_{nm}$, 数量;
8. 投影算符: $\hat{P}=|\alpha><\alpha|$, 本征值 $\lambda=1,0$;;
   (a) $\hat{P}^2=\hat{P},\hat{P}(\hat{P}-1)=0$;
   (b) 本征值 $\lambda=1$ 对应的本征态为 $|\alpha>$;
   (c) 本征值 $\lambda=0$ 对应的本征态为一切与 $|\alpha>$ 正交的态 $|\Psi>$;
9. 表象变换:
   (a) 基矢变换: 设 $\{|n>\}$ 和 $\{|\alpha>\}$ 是态空间的两组不同的基矢, 构成两种不同的表象, 分别记为 A 和 B, 则 $|\alpha>=\sum\limits_n|n><n|\alpha>=\sum\limits_n S_{n\alpha}|\alpha>=\sum\limits_n(\tilde{S})_{\alpha n}|\alpha>$(注意两次转置), 它的矩阵表示为 $\begin{pmatrix}\phi_1(x)\\ \vdots\\ \phi_n(x)\end{pmatrix}_B=\begin{pmatrix}S_{11}&\dots&S_{1n}\\ \vdots&\ddots&\vdots\\ S_{n1}&\dots&S_{nn}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1(x)\\ \vdots\\ \psi_n(x)\end{pmatrix}_A$, 称 $S=\begin{pmatrix}S_{11}&\dots&S_{n1}\\ \vdots&\ddots&\vdots\\ S_{1n}&\dots&S_{nn}\end{pmatrix}$(注意下标) 为 A 到 B 的表象变换矩阵, 基矢变换为 $\phi_B=\tilde{S}\phi_A,\phi_A=\tilde{S}^{-1}\phi_B$;
      i. 表象变换矩阵未必是方阵, 因为不同表象的维数可能不同;
      ii. S 的厄米共轭矩阵 $S^\dagger_{n\alpha}=<\alpha|n>$;
      iii. S 是幺正矩阵: $S^\dagger=S^{-1}$ 或 $S^\dagger S^{-1}=I$;
   (b) 态矢变换: 在 A 表象中状态 $|\Psi>$ 是 $\Psi_A=(\{<n|\Psi>\})$, 在表象 B 中 $\Psi_B=(\{<\alpha|\Psi>\})$, 则 $<\alpha|\Psi>=\sum\limits_n(\tilde{S}^*)_{\alpha n}<n|\Psi>$, 对应的矩阵 $\Psi_B=S^\dagger\Psi_A=S^{-1}\Psi_A$;

(c) 算符变换: 在 A 表象中 $F_A = (\{< n|\hat{F}|m >\})$, 在表象 B 中 $F_B = (\{< \alpha|\hat{F}|\beta >\})$, 则 $< \alpha|\hat{F}|\beta >= \sum\limits_n \sum\limits_m S^\dagger_{\alpha n} F_{nm} S_{m\beta}$, 对应的矩阵 $F_B = S^\dagger F_A S$;

10. 表象变换是幺正变换,但表象变换未必是厄米变换;

11. 幺正变换的性质:

    (a) 在幺正变换下,力学量的算符本征值不变;

    (b) 在幺正变换下,矩阵的迹不变;

        i. 矩阵迹的交换性: $tr(AB) = tr(BA)$;

        ii. $trF_B = tr(S^\dagger F_A S) = tr(F_A S S^\dagger) = trF_A$;

    (c) 在幺正变换下,态矢量的模方和内积均不变;

    (d) 在幺正变换下,力学量算符的期望值都保持不变;

    (e) 在幺正变换下,算符的对易关系,算符方程和量子力学公式的形式不变;

12. 坐标表象: 坐标算符 $\hat{x}$, 本征值 x, 本征态 $|x >$, 本征方程 $\hat{x}|x >= x|x >$, 归一完备性条件 $\begin{cases} < x|x' >= \delta(x' - x) \\ \int |x > dx < x| = I \end{cases}$;

    (a) 态矢量: $|\Psi >= \int dx|x >< x|\Psi >= \int dx|x > \Psi(x), < \Psi| = \int < \Psi|x > dx < x| = \int dx\Psi^*(x) < x|$;

    (b) 算符: 设 $|\phi >= \hat{x}|\Psi >$, 则 $< x''|\phi >=< x''|\hat{x}|\Psi >= \int < x''|\hat{x}|x' > dx' < x'|\Psi >= \int x'\delta(x' - x'')dx' < x'|\Psi >$;

        i. 动量算符: $< x''|\hat{p_x}|x' >= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x'' - x')$, 作用在波函数上 $< x|\hat{p_x}|\Psi >= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x)$;

        ii. 动量算符的作用规则: 对本征方程 $\hat{p_x}|p_x >= p_x|p_x >$, 本征态 $|p_x >$ 在坐标表象中的波函数 $< x|p_x >= \frac{e^{i\frac{p_x}{\hbar}x}}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, 坐标表象中的动量 $< x|\hat{p_x}|p_x >= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} < x|p_x >$, 坐标表象中的动量算符 $< x|\hat{p_x} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} < x|$(厄米共轭后 $\hat{p_x}|x >= i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|x >$);

            A. 同理: $\begin{cases} < p_x|\hat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x} < p_x| \\ \hat{x}|p_x >= -i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}|p_x > \end{cases}$;

(c) 期望: $< F >=< \Psi|\hat{F}|\Psi >$;

(d) 力学量矩阵元: $F_{kn} =< k|\hat{F}|n >$;

13. 态矢量在基矢 $|n >$ 上的展开: $|\Psi >= \sum\limits_n c_n|n >$, 其中 $c_n =< n|\Psi >$;

    (a) 或 $< \Psi| = \sum\limits_n c_n^* < n|$;

    (b) 利用投影算符 $\hat{P}_n = |n >< n|$, 则 $c_n^* c_n =< \hat{P}_n >$;

14. 离散谱归一化条件: $1 =< \Psi|\Psi >= \sum\limits_n |c_n|^2$;

15. 态矢量内积: 对于 $|A >= \sum\limits_n a_n|n >, B = \sum\limits_n b_n|n >, < A|B >= \sum\limits_n a_n^* b_n$;

16. 角动量表象: 选 $\hat{L_z}$ 与 $\hat{L}^2$ 的共同本征态 $|lm >$ 为基矢的表象;

    (a) 自身表象: $< l'm'|\hat{L_z}|lm >= m\hbar\delta_{l'l}\delta_{m'm}, < l'm'|\hat{L}^2|lm >= l(l+1)\hbar^2\delta_{l'l}\delta_{m'm}$;

    (b) 角动量算符: $< l'm'|\hat{L}_x|lm >=\frac{\hbar}{2}\left[\sqrt{(l+m+1)(l-m)}\delta_{m',m+1} + \sqrt{(l-m+1)(l+m)}\delta_{m',m-}\right.$
    $< l'm'|\hat{L}_x|lm >=\frac{i\hbar}{2}\left[-\sqrt{(l+m+1)(l-m)}\delta_{m',m+1} + \sqrt{(l-m+1)(l+m)}\delta_{m',m-1}\right]\delta_{l'l}$;

        i. $\hat{L}_x$ 的矩阵元总是 0 和正实数;

        ii. $\hat{L}_y$ 的矩阵元总是 0 和纯虚数;

    (c) 升降阶算符: $\hat{L_+} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\hbar \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \hat{L_-} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}\hbar & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \end{pmatrix}$;

        i. $\hat{L}_x = \frac{1}{2}(\hat{L_+} + \hat{L}_-), \hat{L}_y = \frac{1}{2i}(\hat{L}_+ - \hat{L}_-)$;

17. 占有数 (或粒子数) 表象: 以 $|n >$ 表示 ψ_n 对应的本征态, 即以 $|n >$ 为基矢的表象;

    (a) 波色子对易关系: $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$;

    (b) 产生算符 ($\hat{a}^\dagger$) 和湮灭算符 ($\hat{a}$): 产生湮灭算符满足波色子对易关系, $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$;

        i. 定义: $[\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0$;

        ii. $\hat{a}|n >= \sqrt{n}|n-1 >, \hat{a}^\dagger|n >= \sqrt{n+1}|n+1 >, \hat{a}|0 >= 0$;

(c) 粒子数算符: $N=\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{N}|n>=n|n>$;

i. 粒子数递推表达式: $|n>=\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0>$;

ii. 电子考虑自旋的量子数: $\hat{N}=\hat{a}^\dagger_\uparrow\hat{a}_\uparrow+\hat{a}^\dagger_\downarrow\hat{a}_\downarrow$;

(d) $[\hat{a},(\hat{a}^\dagger)^n]=n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}$ 或 $\hat{a}(\hat{a}^\dagger)^n=(\hat{a}^\dagger)^n\hat{a}+n(\hat{a}^\dagger)^{n-1}$;

i. 推广: $[\hat{a},f(\hat{a}^\dagger)]=\frac{\partial f(\hat{a}^\dagger)}{\partial\hat{a}^\dagger}$;

(e) 占有数表象的性质:

i. 占有数表象的基矢是归一的: $<m|n>=\delta_{mn}$;

ii. 占有数表象的基矢是完备的, $\sum\limits_{n=0}^{\infty}|n><n|=I$;

iii. Fock 空间: 通常将这组基矢张成的空间称为 Fock 空间;

(f) 占有数表象的矩阵表示: 由 $<n|n>=<n-1|n-1>$, 有 $n=<n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n>$;

i. 湮灭算符的矩阵元: $<n-1|\hat{a}|n>=\sqrt{n}, \hat{a}=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\0&0&\sqrt{2}&0\\0&0&0&\ddots\\0&0&0&0\end{pmatrix}$;

ii. 产生算符的矩阵元: $<n+1|\hat{a}^\dagger|n>=\sqrt{n+1}, \hat{a}^\dagger=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\1&0&0&0\\0&\sqrt{2}&0&0\\0&0&\ddots&0\end{pmatrix}$;

iii. 粒子数矩阵: $N=\begin{pmatrix}0&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&2&0\\0&0&0&\ddots\end{pmatrix}$;

iv. 哈密顿量: $\hat{H}=\hbar\omega\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&0&0&0\\0&\frac{3}{2}&0&0\\0&0&\frac{5}{2}&0\\0&0&0&\ddots\end{pmatrix}$;

(g) 占有数表象下的坐标算符: $|x>=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2+\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\hat{a}^\dagger-\frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger)^2}|0>$;

(h) 占有数表象下的动量算符: $|p>=\left(\frac{1}{\pi\hbar m\omega}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{p^2}{2m\hbar\omega}+i\sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}p\hat{a}^\dagger+\frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger)^2}|0>$;

(i) 占有数表象下的波函数: $\psi_n(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}<0|e^{\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x\hat{a}-\frac{1}{2}\hat{a}^2}|0>$;

18. 相干态: 在 Fock 空间中, 相干态定义为 $|z>=e^{z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}}|0>=e^{-\frac{1}{2}|z|^2}e^{z\hat{a}^\dagger}|0>$, 其中 $z=\alpha+i\beta$ 为任意复常数;

    (a) 相干态是湮灭算符 $\hat{a}$ 的本征态;

    (b) 可以利用粒子数本征态 $|n>$ 表示相干态 $|z>$: $|z>=e^{-\frac{1}{2}|z|^2}\sum\limits_{n=0}^{\infty}\frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n>$;

    (c) 相干态 $|z>$ 随时间的演化为: $|z(t)>=e^{-i\frac{\hat{H}t}{\hbar}}|z>$, 其中 $\hat{H}=(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2})\hbar\omega$ 是谐振子的哈密顿量;

    (d) 相干态中的能量平均值: $<z(t)|\hat{H}|z(t)>=\frac{1}{2}m\omega^2x_0^2+\frac{1}{2}\hbar\omega$;

    (e) 相干态具有最小的不确定性: $\Delta x\Delta p=\frac{\hbar}{2}$;

    (f) 因为 $\begin{cases}\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x}+i\hat{p})\\ \hat{a}|z>=z|z>\end{cases}$, 所以 $z=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega<z|\hat{x}|z>+i<z|\hat{p}|z>)$. 即相干态的本征值为 $<\hat{x}>$ 和 $<\hat{p}>$ 的线性叠加;

    (g) 相干态的波函数: $<x|z>=Ne^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2+\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}zx}$, 其中归一化系数 $N=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2}(z^2+|z|^2)}$;

    (h) 不同相干态之间的内积: $<z_1|z_2>=e^{-\frac{1}{2}(|z_1|^2+|z_2|^2-2z_1^*z_2)}$;

19. 相干态表象: 相干态全体 z 是完备的, 完备性条件 $\int\frac{d^2z}{\pi}|z><z|=I$, 其中 $z=\alpha+i\beta, d^2z=d\alpha d\beta$;

    (a) 任何物理态均可用相干态的全体来展开;