

5.4 角动量的合成

令 $\hat{K}_1 = (\hat{K}_{1x}, \hat{K}_{1y}, \hat{K}_{1z})$, $\hat{K}_2 = (\hat{K}_{2x}, \hat{K}_{2y}, \hat{K}_{2z})$ 为两个 ~ 0 角动量算符

则合成矢量 $\hat{K} = \hat{K}_1 + \hat{K}_2$ 及其诸分量也满足同样的一对易关系

此外, $[\hat{K}^2, \hat{K}_1^2] = [\hat{K}^2, \hat{K}_2^2] = 0$

已知 $\hat{K}_{1z}, \hat{K}_{2z}$ 的本征值 (分别有 $2k_1+1, 2k_2+1$ 个态)

则 $M_{\max} = k_1 + k_2$, $M_{\min} = -(k_1 + k_2)$. 显然 $k_{\max} = k_1 + k_2$

总量子态数 $(2k_1+1)(2k_2+1) = \sum_{k=k_{\min}}^{k_{\max}} (2k+1) \approx (k_1+k_2+k_{\min}+1)(k_1+k_2-k_{\min}+1)$

易知, $k_{\min} = |k_1 - k_2|$, 则得 $k = k_1 + k_2, k_1 + k_2 - 1, \dots, |k_1 - k_2|$.

注: 量子力学中, 角动量矢量大为 $\sqrt{k(k+1)}$ 而非 k ;

5.5 角动量算符 5.1 对易关系

以 \hbar 为单位, 有 $\begin{cases} [\hat{K}_x, \hat{K}_y] = i\hat{K}_z \\ [\hat{K}_y, \hat{K}_z] = i\hat{K}_x \\ [\hat{K}_z, \hat{K}_x] = i\hat{K}_y \end{cases}$, 也即 $\hat{K} \times \hat{K} = i\hat{K}$, \hat{K} 为矢量算符

def: $\hat{K}^2 \equiv \hat{K}_x^2 + \hat{K}_y^2 + \hat{K}_z^2$, 易得 $[\hat{K}^2, \hat{K}_i] = 0$, $i=x, y, z$

5.2 角动量分量的本征值

def: $\hat{K}_{\pm} = \hat{K}_x \pm i\hat{K}_y$, 有 $[\hat{K}_z, \hat{K}_{\pm}] = \pm \hat{K}_{\pm}$

可知, \hat{K}_{+} 和 \hat{K}_{-} 分别为 \hat{K}_z 本征态 $|m\rangle$ 的升、降算符: $\hat{K}_{\pm}|m\rangle = \sqrt{m \pm 1} |m \pm 1\rangle$

其厄米共轭式为: $\langle m|\hat{K}_{\mp} = \langle m \pm 1|$, 相乘得 $\langle m \pm 1|m \pm 1\rangle = \langle m|\hat{K}_{\mp}\hat{K}_{\pm}|m\rangle$

故归一化的本征矢为 $|m \pm 1\rangle = \frac{\hat{K}_{\pm}|m\rangle}{\sqrt{\langle m|\hat{K}_{\mp}\hat{K}_{\pm}|m\rangle}}$

得知 \hat{K}_z 的本征值构成差值为 1 的 \sim 等间隔序列.

5.3 角动量平方的本征值

$$\hat{K}_- \hat{K}_+ = (\hat{K}_x - i\hat{K}_y)(\hat{K}_x + i\hat{K}_y) = \hat{K}_x^2 + \hat{K}_y^2 + i(\hat{K}_x \hat{K}_y - \hat{K}_y \hat{K}_x) = \hat{K}^2 - \hat{K}_z^2 - \hat{K}_z$$

$$\text{即 } \checkmark, \text{ 同理 } \hat{K}_+ \hat{K}_- = \hat{K}^2 - \hat{K}_z^2 + \hat{K}_z$$

$$\text{由于 } \begin{cases} \hat{K}^2|k, m\rangle = k(k+1)|k, m\rangle \\ \hat{K}_z|k, m\rangle = m|k, m\rangle \end{cases}, \begin{cases} \langle k, m|\hat{K}_- \hat{K}_+|k, m\rangle = k - m^2 - m \geq 0 \\ \langle k, m|\hat{K}_+ \hat{K}_-|k, m\rangle = k - m^2 + m \geq 0 \end{cases}$$

$$\text{即 } k \geq m^2 \pm m, k + \frac{1}{4} \geq (m \pm \frac{1}{2})^2 \geq 0, \text{ 即 } \sqrt{k + \frac{1}{4}} \mp \frac{1}{2} \geq m \geq -(\sqrt{k + \frac{1}{4}} \pm \frac{1}{2})$$

$$\text{令 } \sqrt{k + \frac{1}{4}} - \frac{1}{2} \equiv k, \sqrt{k + \frac{1}{4}} + \frac{1}{2} \equiv k+1, k = \sqrt{k(k+1)}, \text{ 于是有 } \begin{cases} k+1 \geq m \geq -k \\ k \geq m \geq -(k+1) \end{cases}, k \geq 0$$

$$\hat{K}_-|k, m_{\min}\rangle = 0 \text{ 而 } \hat{K}_+|k, m_{\max}\rangle = 0$$

$$\Rightarrow m_{\min} = -k, m_{\max} = k, m = -k, -k+1, \dots, k-1, k$$

称 k 为角量子数, m 为磁量子数. 并以 $|k, m\rangle$ 代替 $|K, M\rangle$ 来表 \hat{K}^2 和 \hat{K}_z

表象, 得以下结论:

1) \hat{K}^2 与 \hat{K}_z 有一组共同本征态 $|k, m\rangle$

2) 在 $|k, m\rangle$ 中 \hat{K}^2 的本征值皆为 $k(k+1)$, k 为(半)整数,

\hat{K}_z 的本征值取下列 $2k+1$ 个数值: $m = -k, \dots, k$

3) 正交归一的 $2k+1$ 个本征矢 $|k, m\rangle$ 架起一个 $2k+1$ 维的态矢空间

§4. 升降算符

· 基本性质: 给定 \hat{A} , 若 $\exists \hat{\eta}$ 和 $\hat{\eta}^\dagger$ (厄米共轭), 满足: $\begin{cases} [\hat{A}, \hat{\eta}^\dagger] = \lambda \hat{\eta}^\dagger \\ [\hat{A}, \hat{\eta}] = -\lambda \hat{\eta} \end{cases}$

则对 \hat{A} 的任一本征值为 a 的本征矢 $|a\rangle$,

将有: $\begin{cases} \text{只要 } \hat{\eta}^\dagger |a\rangle \neq 0, \text{ 它就是 } \hat{A} \text{ 的另一本征值为 } a+\lambda \text{ 的本征矢.} \\ \hat{\eta} |a\rangle \neq 0, \text{ 它就是 } \hat{A} \text{ 的另一本征值为 } a-\lambda \text{ 的本征矢.} \end{cases}$

$\hat{\eta}^\dagger$ 和 $\hat{\eta}$ 分别称为升算符和降算符.

证: 左: $[\hat{A}, \hat{\eta}^\dagger] |a\rangle = \hat{A} \hat{\eta}^\dagger |a\rangle - \hat{\eta}^\dagger \hat{A} |a\rangle = \hat{A} \hat{\eta}^\dagger |a\rangle - \hat{\eta}^\dagger a |a\rangle = \hat{A} \hat{\eta}^\dagger |a\rangle - a \hat{\eta}^\dagger |a\rangle$

右: $\lambda \hat{\eta}^\dagger |a\rangle$. 左=右 $\Rightarrow \hat{A} \hat{\eta}^\dagger |a\rangle = (a+\lambda) \hat{\eta}^\dagger |a\rangle$

同理, $\hat{A} \hat{\eta} |a\rangle = (a-\lambda) \hat{\eta} |a\rangle$. 又假设 $\hat{\eta}^\dagger |a\rangle, \hat{\eta} |a\rangle \neq 0$

· 产生算符 & 消灭算符

已知 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I}$, 则 $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger \hat{a}$ 与其对易关系为 $\begin{cases} [\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a} \\ [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger \end{cases}$

设 \hat{N} 有 T 本征值 n , 相应本征矢 $|n\rangle$

$\Rightarrow \begin{cases} \hat{N} \hat{a} |n\rangle = (n-1) \hat{a} |n\rangle, \text{ 即 } \hat{a} |n\rangle \propto |n-1\rangle \\ \hat{N} \hat{a}^\dagger |n\rangle = (n+1) \hat{a}^\dagger |n\rangle, \text{ 即 } \hat{a}^\dagger |n\rangle \propto |n+1\rangle \end{cases}$

$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \Rightarrow n = \langle n | \hat{a} \hat{a}^\dagger |n\rangle \geq 0$. $\exists n_{\min} \geq 0$, 且 $\hat{a} |n_{\min}\rangle = 0$

通常, $n_{\min} = 0$, $n = 0, 1, 2, \dots$ 对应 $|0\rangle, |1\rangle = \hat{a}^\dagger |0\rangle, |2\rangle = \hat{a}^\dagger |1\rangle$

注: " $\|\cdot\|$ " 的 Dirac 符号表示尚未归一化 $\langle 0 | \langle 1 | = \langle 0 | \hat{a}^\dagger$, $\langle 2 | = \langle 1 | \hat{a}^\dagger$

$\langle 0 | 0 \rangle = 1$, $\langle n | n \rangle = \langle 0 | \hat{a}^n \hat{a}^{\dagger n} | 0 \rangle = n!$

\therefore 归一化的本征矢为 $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \|n\rangle = \frac{\hat{a}^{\dagger n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle$

$\langle n | = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle n | = \langle 0 | \frac{\hat{a}^n}{\sqrt{n!}}$

注: \hat{N} 的本征值 n 常表量子数, \hat{a}^\dagger 称产生算符 ($s \rightarrow s+1$), \hat{a} 称消灭算符

3) 对于厄米算符, 对应不同本征值的本征矢正交

$$\text{设 } \lambda_1, \lambda_2 (\neq), |a_1\rangle, |a_2\rangle \quad \hat{A}|a_1\rangle = \lambda_1|a_1\rangle, \hat{A}|a_2\rangle = \lambda_2|a_2\rangle$$

$$\text{取共轭, } \langle a_2|\hat{A}^\dagger = \langle a_2|\lambda_2^*, \quad \hat{A}^\dagger = \hat{A}, \lambda_2^* = \lambda_2 \Rightarrow \langle a_2|\hat{A} = \langle a_2|\lambda_2, \langle a_2|(\hat{A} - \lambda_2\hat{I}) = 0$$

$$\langle a_2|(\hat{A} - \lambda_2\hat{I})|a_1\rangle = \langle a_2|(\lambda_2 - \lambda_1)\hat{I}|a_1\rangle = (\lambda_2 - \lambda_1)\langle a_2|a_1\rangle = 0 \Rightarrow \langle a_2|a_1\rangle = 0, \text{ 正交}$$

每个算符的本征矢构成一套正交归一基*

4) 以算符自身的正交本征矢为基来表示, 矩阵是对角化, 对角元为其全部本征值

设 $|e^{(i)}\rangle$ 是算符 \hat{A} 全套正交归一本征矢, 相应本征值为 $\lambda_i (i=1, 2, \dots, n)$

$$\text{对角元 } A_{ii} = \langle e^{(i)}|\hat{A}|e^{(i)}\rangle = \lambda_i \langle e^{(i)}|e^{(i)}\rangle = \lambda_i; \text{ 非 } \sim A_{ij} = \lambda_j \langle e^{(i)}|e^{(j)}\rangle = 0$$

* 泡利矩阵是自旋算符 $2\hat{S}_x/\hbar, 2\hat{S}_y/\hbar, 2\hat{S}_z/\hbar$ 的一种表示,

其以 \hat{S}_z 的本征矢 $|z+\rangle \triangleq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 和 $|z-\rangle \triangleq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 为基.

例: 求将泡利矩阵 σ_x 和 σ_y 对角化的么正变换矩阵

$$\begin{cases} |x+\rangle \triangleq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, & |y+\rangle \triangleq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \\ |x-\rangle \triangleq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, & |y-\rangle \triangleq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} \end{cases}$$

$$U(x) = \begin{pmatrix} \langle z+|x+\rangle & \langle z+|x-\rangle \\ \langle z-|x+\rangle & \langle z-|x-\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = U^\dagger(x)$$

$$\text{将 } \sigma_y \text{ 对角化的么正矩阵为 } \begin{cases} U(y) = \begin{pmatrix} \langle z+|y+\rangle & \langle z+|y-\rangle \\ \langle z-|y+\rangle & \langle z-|y-\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} \\ U^\dagger(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \end{cases}$$

对易算符的共同本征矢

设 \hat{A}, \hat{B} 对易: $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ 令 $|\alpha\rangle$ 为 \hat{A} 的本征值为 α 的本征矢,

则 $\hat{A}\hat{B}|\alpha\rangle = \hat{B}\hat{A}|\alpha\rangle = \hat{B}\alpha|\alpha\rangle = \alpha\hat{B}|\alpha\rangle$, 即 $\hat{B}|\alpha\rangle$ 也是 \hat{A} 的 ~.

1° 非简并: $\hat{B}|\alpha\rangle = \beta|\alpha\rangle$, 即 $|\alpha\rangle$ 也是 \hat{B} 的本征态, β 为其本征值

2° 简并: 略.

· 么正变换: 变换矩阵 T 为么正矩阵 U 的变换, 如正交归一基的表示之间的变换

$$|a\rangle = \sum_i a_i |e^{(i)}\rangle, |a'\rangle = \sum_j a'_j |e'^{(j)}\rangle, \text{已知 } |e'^{(j)}\rangle = \sum_i |e^{(i)}\rangle T_{ij}$$

$$\sum_j T_{ij} a'_j = a_i, T \begin{pmatrix} a'_1 \\ \vdots \\ a'_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} a'_1 \\ \vdots \\ a'_n \end{pmatrix} = T^{-1} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \begin{cases} T_{ij} = \langle e^{(i)} | e'^{(j)} \rangle \\ T_{ji}^{-1} = \langle e'^{(j)} | e^{(i)} \rangle \end{cases}$$

由左右互逆时内积取复共轭, 结合~知 $T_{ji}^{-1} = T_{ij}^*$, T 为么正矩阵

多3. 本征值问题

· 算符及其矩阵表示 映射操作: $|y\rangle = \hat{A}|x\rangle$

线性算符, 满足: $\hat{A}k|x\rangle = k\hat{A}|x\rangle$ 与 $\hat{A}(|x_1\rangle + |x_2\rangle) = \hat{A}|x_1\rangle + \hat{A}|x_2\rangle$

选取一定的基, $\sum_j y_j |e^{(j)}\rangle = \sum_j \hat{A}|e^{(j)}\rangle x_j \Rightarrow \sum_j y_j \langle e^{(i)} | e^{(j)} \rangle = \sum_j \langle e^{(i)} | \hat{A} | e^{(j)} \rangle x_j$

由正交归一条件, $y_i = \sum_j A_{ij} x_j$, 式中 $A_{ij} = \langle e^{(i)} | \hat{A} | e^{(j)} \rangle$

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \hat{A} \triangleq A = \begin{pmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix}$$

被动观点: $|e^{(j)}\rangle = \sum_k |e^{(k)}\rangle U_{kj}$, 式中 $U_{kj} = \langle e^{(k)} | e'^{(j)} \rangle$ 二者互为厄米共轭, $\langle e'^{(j)} | = \sum_i U_{ji}^* \langle e^{(i)} |$, $U_{ji}^* = \langle e'^{(j)} | e^{(i)} \rangle$ 矩阵为么正矩阵.

$$A'_{ij} = \langle e'^{(i)} | \hat{A} | e'^{(j)} \rangle = \sum_k \sum_l U_{ik}^* \langle e^{(k)} | \hat{A} | e^{(l)} \rangle U_{lj} = \sum_k \sum_l U_{ik}^* A_{kl} U_{lj}, \text{即 } A' = U^\dagger A U \quad (*)$$

对(*)取厄米共轭, $(A')^\dagger = (U^\dagger A U)^\dagger = U^\dagger A^\dagger U$, 得厄米性在么正变换下保持. 故厄米共轭性不依赖于矩阵表示, 为算符本身的性质, 可以 " \hat{A}^\dagger "

· 对偶变量 $|a\rangle, \langle a|$ 互为厄米共轭, $\langle a | \hat{A}^\dagger \hat{A} | a \rangle = \langle b | b \rangle = |b|^2 \geq 0, \checkmark$

· 本征值与本征矢: $\hat{A}|x\rangle = \lambda|x\rangle$, λ 称本征值, $|x\rangle$ 称本征矢

$$A \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \text{ 或 } \begin{pmatrix} A_{11} - \lambda & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} - \lambda & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = 0, \text{ 有非零解: } \begin{vmatrix} A_{11} - \lambda & \dots & A_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & \dots & A_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0 \text{ (本征方程)}$$

对于 n 阶方阵 A , 有 n 个本征值 $\lambda_i (i=1, \dots, n)$, 对应 n 个本征矢.

性质: 1) 么正变换下, 本征值不变 $A' = U^\dagger A U, U U^\dagger = I$.

$$|A' - \lambda I| = |U^\dagger (A - \lambda I) U| = |U^\dagger| |A - \lambda I| |U| = 0 \Leftrightarrow |A - \lambda I| = 0$$

2) 厄米矩阵的所有本征值都是实数 (复数共轭=自身)

将上述 $|b^{(i)}\rangle$ 换为正交归一基矢 $|e^{(i)}\rangle$: $|a\rangle = \sum_k k_i |e^{(i)}\rangle$ (*)

依次乘以 $\langle e^{(j)}|$, 得 $\langle e^{(j)}|a\rangle = \sum_k k_i \langle e^{(j)}|e^{(i)}\rangle = \sum_k k_i \delta_{ij} = k_j$

即 $k_i = \langle e^{(i)}|a\rangle$ ($i=1, 2, \dots, n$) — $|a\rangle$ 对 ^{正交} 归一基矢展开系数 $k_i =$ 相应基矢与其的内积

代回(*), 得 $|a\rangle = \sum_k |e^{(i)}\rangle \langle e^{(i)}|a\rangle$ (✓)

形式地, 有 $\sum_k |e^{(i)}\rangle \langle e^{(i)}| = 1$, "1" 为单位算符 \rightarrow

乘"1"表示执行某矢量按某正交归一基展开的运算

2. 矩阵与线性变换

矩阵及其运算法则 1) 加法 2) 数乘 3) 乘法

4) 转置和厄米共轭: $(\tilde{A})_{ij} = A_{ji}$, $(A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*$; $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$

· 方阵的运算 eg. 泡利矩阵 $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = 2i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = 2i \sigma_z \neq 0$$

· 对易式 (commutator): $[A, B] \equiv AB - BA$

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i \sigma_z, [\sigma_y, \sigma_z] = 2i \sigma_x, [\sigma_z, \sigma_x] = 2i \sigma_y$$

· 对角元 $\neq 0 \Rightarrow$ 对角矩阵 $\xrightarrow{\text{对角元}=1}$ 单位(矩阵)或幺矩阵: $IA = AI = A$

1) 方阵的行列式: $|AB| = |A||B|$

2) 方阵的逆: 对于 A, 若 $\exists B, B'$ 满足 $BA = AB' = I$, 则 $B = B'$

B, B' 称方阵 A 的逆, 记作 A^{-1} . 即 $A^{-1}A = AA^{-1} = I$

$$\sum_k A_{ij} D_{kj} = |A| \delta_{ij} \quad (i=1, 2, \dots, n). \quad D_{kj} = (-1)^{k+j} M_{kj} \quad (A_{kj} \text{ 的余子式}) \Rightarrow (A^{-1})_{ij} = \frac{D_{ji}}{|A|} \neq 0!$$

3) 厄米矩阵 — $H^\dagger = H$, 泡利矩阵都是厄米矩阵

幺正矩阵 — $U^\dagger = U^{-1}$, 泡利矩阵也是幺正矩阵

· 线性变换及其矩阵表示: $T \begin{pmatrix} x_1' \\ \vdots \\ x_n' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$ 或 $\begin{pmatrix} x_1' \\ \vdots \\ x_n' \end{pmatrix} = T^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$

$$\text{线性变换满足: } T^{-1} k \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = k T^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad \text{且} \quad T^{-1} \left[\begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \right] = T^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} + T^{-1} \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

附录: 线性代数

1. 向量空间

(n维对偶向量: $(a_1^*, a_2^*, \dots, a_n^*) \leftarrow \text{对偶} \rightarrow \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \rightleftharpoons |a\rangle \text{右矢}$
左矢 $\langle a| \rightleftharpoons$

基本运算 1) 加法 $|a\rangle + |b\rangle = |a+b\rangle$ 交换律 \checkmark 结合律 \checkmark

2) 数乘 $k|a\rangle \rightleftharpoons k \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ka_1 \\ ka_2 \\ \vdots \\ ka_n \end{pmatrix}$ 分配律 \checkmark

3) 内积 (inner product) $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}$
 $\langle b|a\rangle = (b_1^*, b_2^*, \dots, b_n^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \equiv b_1^* a_1 + b_2^* a_2 + \dots + b_n^* a_n = \sum b_i^* a_i$
显然: $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^*$ 注: 内积与坐标选则无关

模方: $\langle a|a\rangle \equiv a_1^* a_1 + a_2^* a_2 + \dots + a_n^* a_n = \sum a_i^* a_i \geq 0$

模: $|a| \equiv \sqrt{\langle a|a\rangle}$; 零向量: 0 (简写)

向量的线性相关性

若 $\exists k_1, k_2, \dots, k_m$ 不全为 0, s.t. $\sum k_i |a^{(i)}\rangle = 0$ (零向量)

则称这 m 个 n 维向量是线性相关的。反之, 线性无关。

线性相关性的判断

(1) $m=n$. 若行列式 $\begin{vmatrix} a_1^{(1)} & a_1^{(2)} & \dots & a_1^{(n)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_n^{(1)} & a_n^{(2)} & \dots & a_n^{(n)} \end{vmatrix} = 0$, 则 ~ 无非零解, 线性无关

(2) $m>n$, 必有非零解, 必线性相关 (3) $m<n$, 具体分析

n维向量空间

向量 $|a\rangle, |b\rangle$ 的内积 $\langle a|b\rangle = 0$, 称它们是“正交”的 ; 内积空间

内积空间的积

n 维向量空间中, 最多可取 n 个线性无关的向量组 $|b^{(1)}\rangle, |b^{(2)}\rangle, \dots, |b^{(n)}\rangle$

则 $\forall |a\rangle, |a\rangle = \sum k_i |b^{(i)}\rangle$, 则该组 $|b^{(i)}\rangle$ 称向量空间的基 (或基矢)

正交归一基矢: $|e^{(i)}\rangle (i=1, 2, \dots, n)$

满足 $\langle e^{(i)} | e^{(j)} \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 0 & (i \neq j) \\ 1 & (i = j) \end{cases}$ 正交性
归一性

即: 这些基矢彼此正交, 且具有单位模

高斯函数与高斯积分 $f(x) = Ae^{-ax^2}$ — 高斯函数

$$\Gamma_n = \int_0^{\infty} x^{n-1} e^{-ax^2} dx \quad (a>0, n=1,2,3,\dots) \quad \frac{z=x^2}{x=z^{\frac{1}{2}}} \Gamma_n = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} z^{\frac{n}{2}-1} e^{-az} dz \quad (n=1,2,3,\dots)$$

$$\Gamma_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{2a^{\frac{1}{2}}}, \Gamma_2 = \frac{1}{2a}, \Gamma_3 = \frac{\sqrt{\pi}}{4a^{\frac{3}{2}}}, \Gamma_4 = \frac{1}{2a^2}, \dots$$

推导: $\frac{\partial}{\partial a} \int_0^{\infty} x^n e^{-ax^2} dx = - \int_0^{\infty} x^{n+2} e^{-ax^2} dx$, 即 $\Gamma_n = - \frac{\partial}{\partial a} \Gamma_{n-2}$

$$1) \int x e^{-ax^2} dx = -\frac{1}{2a} e^{-ax^2} + C, \Gamma_2 = \frac{1}{2a} \checkmark$$

$$2) \Gamma = \int_0^{\infty} r dr \int_0^{2\pi} d\theta e^{-ar^2} = 2\pi \Gamma_2$$

$$\Gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy e^{-a(x^2+y^2)} = 4 \int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx \cdot \int_0^{\infty} e^{-ay^2} dy = 4\Gamma_2 \Rightarrow \Gamma_1 = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Gamma_2 \checkmark$$

· 傅里叶变换

为对非周期函数作频谱分解, 进行傅里叶积分变换.

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{正变换: } f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \\ \text{逆变换: } F(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}, F(k) \text{ 是 } f(x) \text{ 的频谱} \end{array} \right.$$

一般说来, 频谱宽度与波列长度成反比

1) 方整型波列 $f(x) = \begin{cases} Ae^{ik_0 x}, & |x| \leq a \\ 0, & |x| > a \end{cases}$

$$F(k) = \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} e^{-i(k-k_0)x} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} = \frac{Aa}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sin \beta}{\beta} \quad [\beta = (k-k_0) \frac{a}{2}]$$

$$\beta = \pm \pi, F(k) = 0. \text{ "主极强" } [-\pi, \pi]. \text{ def 频谱宽度 } \Delta k = \frac{4\pi}{a}$$

$$\text{波列长度 } \Delta x = a, \Delta k \cdot \Delta x = 4\pi.$$

2) 指数型波列 $f(x) = Ae^{-ax} e^{ik_0 x}$

$$F(k) = A \left[\int_0^{\infty} e^{-ax} e^{-i(k-k_0)x} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} + \int_{-\infty}^0 e^{ax} e^{-i(k-k_0)x} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \right]$$

$$= \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \left[\frac{1}{-a-i(k-k_0)} + \frac{1}{a-i(k-k_0)} \right] = \frac{2aA}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(k-k_0)^2 + a^2}$$

频谱为以 $k=k_0$ 为中心的洛伦兹型谱线. $k-k_0 = \pm a \rightarrow$ 峰值的一半

$$\text{def 谱宽 } \Delta k = 2a. \text{ 波列长度 def: } \Delta x = \frac{2}{a}. \quad \Delta k \cdot \Delta x = 2$$

3) 高斯型波列 $f(x) = Ae^{-ax^2} e^{ik_0 x}$

$$F(k) = A \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} e^{-i(k-k_0)x} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} = Ae^{-\frac{(k-k_0)^2}{4a}} \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2 - i(k-k_0)x + \frac{(k-k_0)^2}{4a}} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}$$

$$y = \frac{x+i(k-k_0)}{2a} = Ae^{-\frac{(k-k_0)^2}{4a}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ay^2} \frac{dy}{\sqrt{2\pi}} = \frac{A}{\sqrt{2a}} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{4a}}$$

频谱为以 $k=k_0$ 为中心的高斯型谱线. 以波数的方差定义谱宽:

$$\text{def: } \Delta x = \sqrt{x^2} = \frac{1}{\sqrt{2a}}, \Delta k = \sqrt{(k-k_0)^2} = \sqrt{2a}, \Delta k \Delta x = 1$$