

高等量子力学讲座

孙昌璞

中物院研究生院/北京计算科学研究中心



课程特色与要求

1. 本课程是自成体系的，学过普通物理学中原子物理者，原则上可以学懂本课程的主要内容；
2. 本课程力争深入浅出，从例子和具体问题出发，并尽可能触及量子物理研究的科学前沿；
3. 阐释量子力学的思想起源，倡导科学精神，强调解决具体问题的计算能力和分析能力。

基础知识要求：

初等量子力学或原子物理，线性代数，数学物理方程

学习方法的三点要求：

多动手，善思考，勤提问

问题导向的讨论



来自北大的学生批评：

“量子力学不讲理” “是从天上掉下来的”

曾谨言，《物理》29卷（2000年）436页

现有一些教材的主要问题

没有讲清薛定谔方程、海森堡方程和对易关系由来的科学思想，从教科书到教科书（嚼过的馍无味），失去了原始论文中的基本精神和科学发现逻辑

问题可能起因

在《初等量子力学》和《高等量子力学》之间，有思维逻辑的gap（空隙），随着时间的推移并没弥合

初等量子力学：
只引入方程



学科前沿引介
量子信息应用

仍然有gap



吴大猷（1907-2000）

基本方程形成的逻辑GAP

高等量子力学：
只强调技术技巧



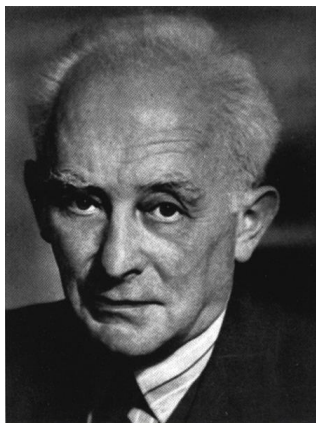
形式理论
范围拓展
多体问题
更多技巧



例外

时间线

要填补这样的间隙、要讲道理



玻恩 (1882-1970)

1. 解决“知其然知其所以然”问题
2. 启发进一步在科学前沿研究工作

从运动方程到对易关系

$$\dot{P} = -\partial V(x)/\partial x$$



$$\frac{d}{dt}[X, P] = 0, \quad [X, P] = \text{常数} C.$$

$$C^* = (XP - PX)^\dagger = -XP + PX = -C$$

$$[X, P] = i\hbar$$



孙昌璞在马克斯·玻恩墓前 (2015)

观点更新：绘景就是表象

Picture $\cong$ Representation

薛定谔固定基矢： $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |m\rangle, \dots\}$

海森堡时变基矢： $\{|1(t)\rangle, |2(t)\rangle, \dots, |m(t)\rangle, \dots\}$ ：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |m(t)\rangle = H_S(t) |m(t)\rangle, \quad |m(0)\rangle = |m\rangle;$$

矩阵表示

$$A_{mn}(t) = \langle m | A_H(t) | n \rangle = \langle m(t) | A_S(t) | n(t) \rangle$$

海森堡方程

$$i\hbar \dot{A}_H(t) = [A_H(t), H(t)] + i\hbar \left(\frac{\partial A_S(t)}{\partial t} \right)_H$$

薛定谔基矢到海森堡时变基矢的表象变换

观点更新：测量问题

举例：被忽略的重要观念

玻恩几率解释 和 期望值假设是等价的

逆命题：若在 $|\psi\rangle$ 上测量 A 结果确定，则 $|\psi\rangle$ 一定是 A 的本征态

证明

测量结果确定 = $|\psi\rangle$ 上测 A 得平均值 $\bar{A}$ 的均方差涨落=0

$$\begin{aligned}\overline{(\Delta A)^2} &= \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - \langle A \rangle^2 \\ &= \langle (A - \langle A \rangle) \psi | (A - \langle A \rangle) \psi \rangle \equiv \langle \Phi | \Phi \rangle,\end{aligned}$$

当且仅当

$$\begin{aligned}(A - \langle A \rangle) |\psi\rangle &= 0 \\ A |\psi\rangle &= \langle A \rangle |\psi\rangle\end{aligned}$$

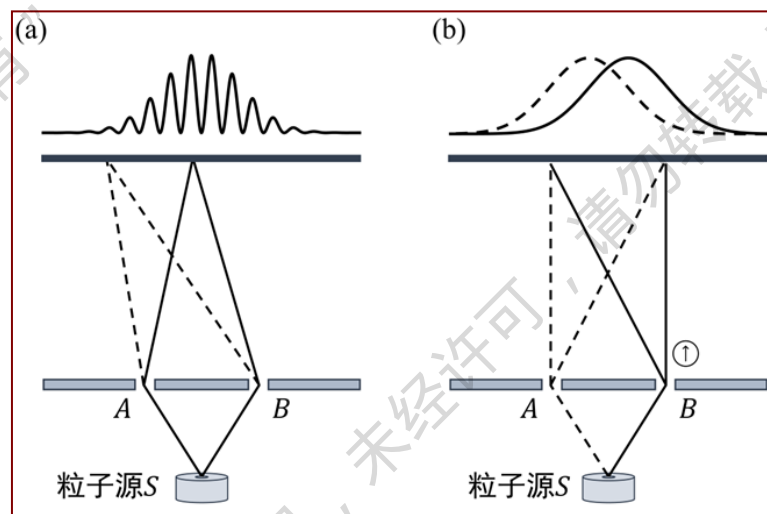
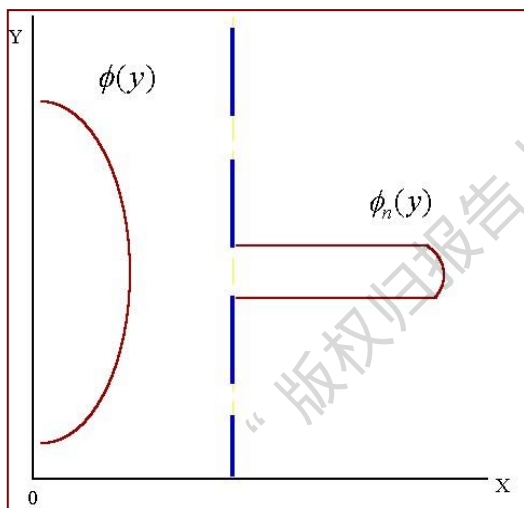
$$\overline{(\Delta A)^2} = 0$$

$$\langle A \rangle = a_n, \quad n = 1, 2, \dots$$

确定的测量结果只能是 A 的本征值

澄清误读：波包塌缩假说与重复测量

“波”到“粒子”的跃变 中子的双缝干涉



$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \rightarrow |n\rangle$$

$$|\psi\rangle\langle\psi| \rightarrow \sum_n |c_n|^2 |n\rangle\langle n|$$

波包塌缩和退相干均导致：重复测量得到相同结果

深入理解：二次量子化是表象变换

实空间到粒子数（对称或反对称）空间的变换

$$|n_1, n_2, \dots\rangle = \sqrt{\frac{n_1! n_2! \dots n_N!}{N!}} \sum_{P'} P' | \underbrace{u_1(1)u_1(2) \dots u_1(n_1)}_{n_1 \uparrow}; \underbrace{u_2(n_1+1) \dots u_2(n_1+n_2)}_{n_2 \uparrow}; \dots \rangle$$

$n_1 + n_2 + \dots + n_N = N$

$$= \left\| \begin{matrix} u_1(1) & u_2(1) & \dots & u_N(1) \\ u_1(2) & u_2(2) & \dots & u_N(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1(N) & u_2(N) & \dots & u_N(N) \end{matrix} \right\| \xrightarrow{a_j} \left\| \begin{matrix} u_1(1) & u_2(1) & \dots & u_{N-1}(1) \\ u_1(2) & u_2(2) & \dots & u_{N-1}(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1(N-1) & u_2(N-1) & \dots & u_{N-1}(N-1) \end{matrix} \right\|$$

玻色子消灭算子的明显形式：对称式减少一行一列

$$a_j = \sum_{N=1}^{\infty} \widetilde{\oplus} a_j \quad a_j(N) = \frac{1}{\sqrt{N}} \langle u_j(N) | \sum_{l=1}^N p_{Nl} : \quad V^{(N)} \rightarrow V^{(N-1)}$$

深入理解：二次量子化是表象变换

基本对易关系和力学量的变换

$$[a_j, a_l^+] = \delta_{jl}, [a_j, a_l] = 0$$

$$\sum_{j=1}^N |m(j)\rangle \langle n(j)| = a_m^+ a_n$$

单体和二体算子 F 二次量子化表示

$$F = \sum_{mn} f_{mn} a_m^+ a_n$$

$$W = \sum_{mnrs} W_{mnrs} a_m^+ a_n^+ a_r a_s$$

$$H = \sum T_{mn} a_m^+ a_n + \sum_{mnrs} W_{mnrs} a_m^+ a_n^+ a_r a_s$$

对已有高等量子力学教材的点评

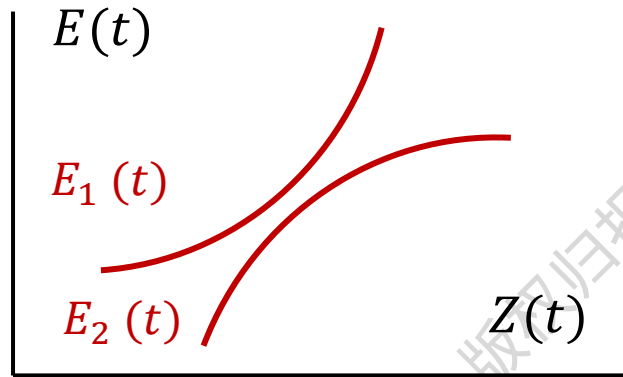
1. 曾谨言《量子力学 II》，科学出版社
系统全面准确，强调计算能力，新版涵盖前沿领域
2. 吴兆颜，《高等量子力学》，吉林大学出版社（2008）
逻辑和数学上严谨，物理概念准确
3. 喀兴林，《高等量子力学》，高等教育出版社（1999）
系统、细致、可读性强，偏重推导
4. Steven Weinberg, Lectures on Quantum Mechanics,
Cambridge University Press（2015）
“一流科学家，一流教材”，同时强调基本概念、思想和逻辑体系
5. J. Sakurai, J. Napolitano: 《Modern Quantum Mechanics》，
Third Edition, World Publishing Co.（2011）
物理图像简洁，例子丰富，习题是生动的物理问题
6. 邹鹏程，《量子力学》，高等教育出版社（2003）
非高等，但有特色，二次量子化、偶然简并

推荐吴大猷先生的量子力学教材



吴大猷先生《量子力学（甲部）》（他的乙部主要是讲量子场论和群论）。这本“教”学贯中西的书，从矩阵力学入手连贯一致地讲授量子力学，在当代教材中是极为少有的。吴先生的书还原了量子力学发展的历史逻辑，读后使大家觉得量子力学是“讲道理”的，并自然地感觉到矩阵力学的引入是旧量子论和爱因斯坦可观察观念结合的自然结果。吴先生书的风格严谨而有深度、它偏于简练，给读者会留下更多的思考空间和触类旁通的发挥余地。

关于朗道《量子力学》的“推导”



Landau—Zener跃迁

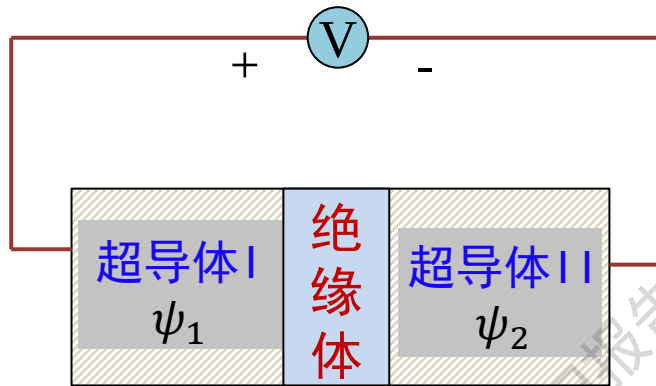
不是通常标准下的好教科书：
推导的逻辑不连贯

Zener (1932)：特殊函数的渐近行为（严谨的数学）

Landau：垒项反射 围道积分（事实上推导不下来）

朗道《量子力学》 53节：P180

关于《费曼讲义》量子力学的“直觉”



物理直觉不能代替“证明”
直觉-严谨悖论！

“表演简约影响了科学的表述”

$$i\hbar \frac{\partial \psi_1}{\partial t} = U_1 \psi_1 + k \psi_2$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi_2}{\partial t} = U_2 \psi_2 + k \psi_1$$

$$U_1 - U_2 = qv$$

严格解

$$\psi_j = A \sin w_j t + B \cos w_j t$$

振荡 $\Rightarrow$ 没有约瑟芬森效应

近似解

$$\psi_j = \rho_j e^{i\theta_j}$$
$$J = J_0 \sin(\theta_0 + qvt)$$

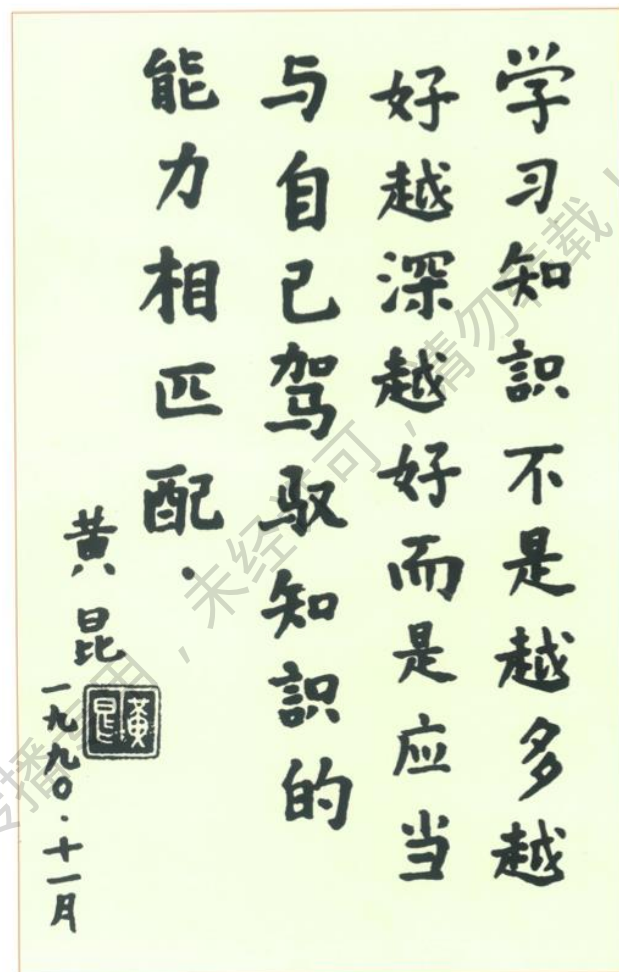
倡导“研究性学习”

学习：掌握已发现的知识

研究：创造和发现新知识

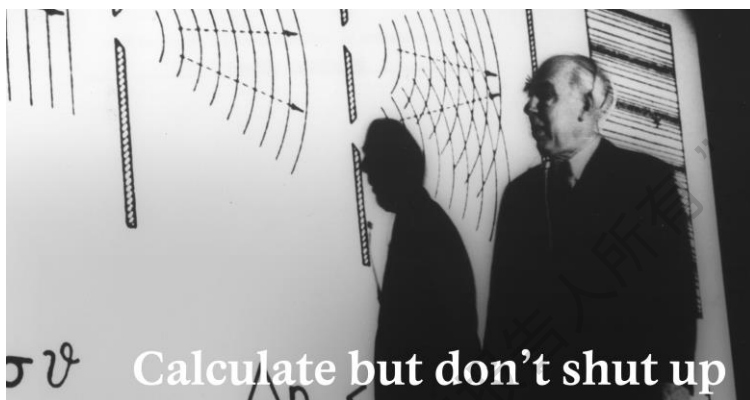
研究性学习：在掌握**必需知识最小集合**的基础上独立地提出问题、发现问题和解决问题，努力发现和建立新知识，哪怕一点点。可以是已有知识的再发现，目的在于培养自己创造知识的能力。

驾驭知识 → 研究性学习

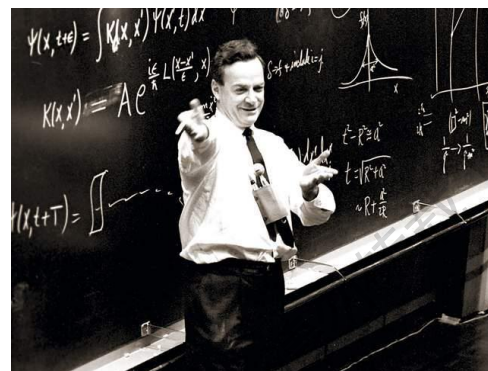


黄昆院士，中国半导体科学奠基人

不理睬对学习量子力学的“科普”误导！



玻尔：“如果谁没对量子力学产生困惑，那他就没有真正搞懂量子力学”



“Shut up and calculate”的误传

“我是感到不舒服的人之一。如果非要一句话来总结哥本哈根诠释，那应当是“闭嘴，去计算！”但是我不会闭嘴。我宁愿庆祝量子理论的奇异性，而不是否认它……”

David-Mermin 2004

Shut up and calculate?

REFERENCE FRAME



WHAT'S WRONG WITH THIS PILLOW?

N. David Mermin

Attitudes toward quantum mechanics differ interestingly from one generation of physicists to the next. The first generation are the founding fathers, who struggled through the welter of confusing and self-contradictory constructions to emerge with the modern theory of the atomic world and supply it with the "Copenhagen interpretation." On the whole they seem to have taken the view that while the theory is extraordinarily strange (Bohr is said to have remarked that if it didn't make you dizzy then you didn't really understand it), the strangeness arises out of some deeply ingrained but invalid modes of thought. Once these are recognized and abandoned the theory makes sense in a perfectly straightforward way. The word "irrational," which appears frequently in Bohr's early writings about the quantum theory, is almost entirely absent from his later essays.

The second generation, those who were students of the founding fathers in the early postrevolutionary period, seem firmly—at times even ferociously—committed to the position that there is really nothing peculiar about the quantum world at all. Far from making *bons mots* about dizziness, or the opposite of deep truths being deep truths, they appear to go out of their way to make quantum mechanics sound as boringly ordinary as possible.

The third generation—mine—were born a decade or so after the revolution and learned about the quantum as kids from popular books like George Gamow's. We seem to be much more relaxed about it than the

other two. Few of us brood about what it all means, any more than we worry about how to define mass or time when we use classical mechanics. In contemplative moments some of us think the theory is wonderfully strange and others think it isn't; but we don't hold these views with great passion. Most of us, in fact, feel irritated, bored or downright uncomfortable when asked to articulate what we *really* think about quantum mechanics.

I'm one of the uncomfortable ones. If I were forced to sum up in one sentence what the Copenhagen interpretation says to me, it would be "Shut up and calculate!" But I won't shut up. I would rather celebrate the strangeness of quantum theory than deny it, because I believe it still has interesting things to teach us about how certain powerful but flawed verbal and mental tools we once took for granted continue to infect our thinking in subtly hidden ways. I don't think anybody, even Bohr, has done an adequate job of extracting these lessons. From this point of view the problem with the second generation's ironfistedly soothing attitude is that by striving to make quantum mechanics appear so ordinary, so sedately practical, so benignly humdrum, they deprive us of the stimulus for exploring some very intriguing questions about the limitations in how we think and how we are capable of apprehending the world.

I would guess that an unvoiced reason for such efforts to render quantum mechanics uninterestingly bland is the desire to counter the kind of dumb postquantum anti-intellectualism that says that even the physicists now know that everything is uncertain, leading to the disastrous corollary: Anything goes. It is indeed important to emphasize to those who would go from quantum mechanics to know-nothingism that the quantum theory, far from filling us with paralyzing (or liberating) uncertainty,

now permits us to make the most accurate quantitative calculations in the history of science. We must certainly speak up against "the general antirationalist atmosphere which has become a major menace of our time, and which to combat is the duty of every thinker who cares for the traditions of our civilization."

On the other hand it's important in combat to shoot at the right target. The above quotation is from Karl Popper and is directed against the writings of Heisenberg and Bohr. Physicists in the second generation certainly have a much better sense of where to direct their fire; but in sanitizing the quantum theory to the point that nothing remarkable sticks out above the surface you run the risk that if you go inside and look around you won't find anything left to make it hang together anymore.

Thus although it is a fact about the quantum theory of paramount importance that it permits us to calculate measurable quantities with unprecedented precision, it does not follow from this that statements that the quantum theory is not deterministic but acausal are vast exaggerations—that the theory has little to do with whether or not nature is a game of probability. Yet it has been argued in this context¹ that even radioactive decay—the very paradigm of acausal discontinuous quantum behavior—appears as probabilistic and abrupt only when an inappropriate question is asked: If a particle is in a state of very well-defined energy, then it is inappropriate to ask for the exact time of its decay, and the answer is probabilistic only because the question is not appropriate to the experimental situation.

Now to be sure I can, at least in principle, produce at noon a particle that will decay as the clock is striking midnight, provided I make it in some tricky superposition of energy eigenstates for which asking when the particle decays is the appropriate

Reference Frame



Could Feynman Have Said This?

N. David Mermin

Fifteen years ago, I mused in a Reference Frame column on how different generations of physicists differed in the degree to which they thought that the interpretation of quantum mechanics remains a serious problem (PHYSICS TODAY, April 1989, page 9). I declared myself to be among those who feel uncomfortable when asked to articulate what we really think about the quantum theory, adding that "If I were forced to sum up in one sentence what the Copenhagen interpretation says to me, it would be 'Shut up and calculate!'"

In the intervening years, I've come to hold a milder and more nuanced opinion of the Copenhagen view, but that should be the subject of another column. The subject of this one is the habit of misquotation or misattribution that afflicts our profession, a rather different example of which I pointed out a few months ago (February 2004, page 10).

Given my capacity for intellectual development ("inconsistency," in the terminology deployed in the current American political season), it's fortunate that I've now reached an age at which I tend to forget about things I've written more than a few years ago. Indeed, I find it downright irritating when somebody asks me questions about papers I wrote a mere half dozen years ago, naively identifying

over me when, browsing the e-print archive earlier this year, I read a characterization of Max Born's probability rule as "the favorite ingredient of what has been nicknamed, after Feynman's famous dictum, the shut up and calculate interpretation of quantum mechanics."

I yield to nobody in my admiration for Richard Feynman's aphorisms on the nature of quantum mechanics. Indeed, long ago I published a poem (PHYSICS TODAY, April 1985, page 47) consisting of nothing more than a re-setting as verse of a paragraph Feynman had written about his own attitude toward the quantum theory, in his now (but not then) famous article that launched the whole field of quantum computation. I like to think I have devoured everything Feynman ever wrote on the character of quantum mechanics.

But while "shut up and calculate" sounded dimly familiar to me as a characterization of a certain interpretive stance, I couldn't recall where Feynman had written it. Mulling this over, a terrible thought began to dawn on me. Could it be that I myself had once used the phrase? If so, then it would appear that I had picked it up from something by Feynman, forgotten the source, and presented it as my own. Devastating!

It was devastating because I have

like this joke, but other physicists seem to: Nonphysicists, of course, are entirely immune to its charms.)

So with growing trepidation, I searched through my past writings on quantum mechanics. I was dismayed when I came upon my 1989 column, which confirmed my worst fears. Not only had I appropriated without proper attribution a Feynman quote, but it appeared to be a famous one. How humiliating! I was afflicted with visions of knowledgeable PHYSICS TODAY readers shaking their heads 15 years ago at what must have struck them as my shameless attempt to ride to literary glory on the unacknowledged shoulders of Feynman.

So I went to the Web to find the source, hoping I could then salvage my reputation by persuading PHYSICS TODAY to print an addendum or erratum. Google gives more than 130 hits containing both "shut up and calculate" and "Feynman." Most of these do not directly link the two, but about a dozen do. Here are a few:

"Shut up and calculate" was a motto of Richard Feynman.

For example, there's Feynman's "shut up and calculate."

My personal philosophy is that of the famous physicist Richard Feynman, who said: "Shut up and calculate."

If I were forced to sum up in one sentence what the Copenhagen interpretation says to me, it would be 'Shut up and calculate!'

(David Mermin)



第一章：量子力学的思想与数学结构

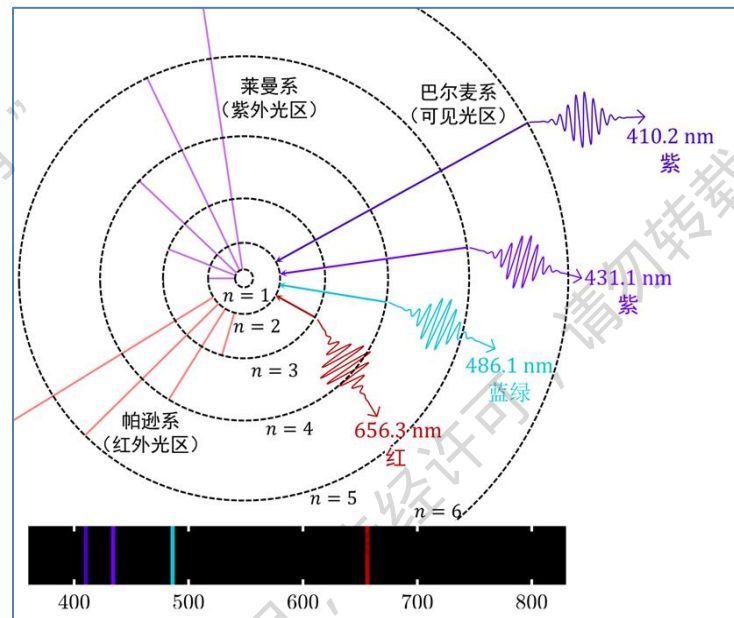
- 1.1 从玻尔模型到矩阵力学
- 1.2 波动力学与玻恩几率诠释
- 1.3 量子力学基本原理的数学表达：
- 1.4 表象及其变换理论：海森堡表象
- 1.5 密度矩阵及其初步应用
- 1.6 谐振子量子化的代数方法

量子力学的理论体系小结

1.1 从玻尔模型到矩阵力学

1.1 从玻尔模型到矩阵力学

1913年，玻尔（Niels Bohr）
针对卢瑟福（Rutherford）的
实验提出：**原子的能量是
量子化的**



1、原子能量取分立值

$$E = E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$$

2、跃迁吸收辐射光子

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

3、角动量量子化

$$mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots$$

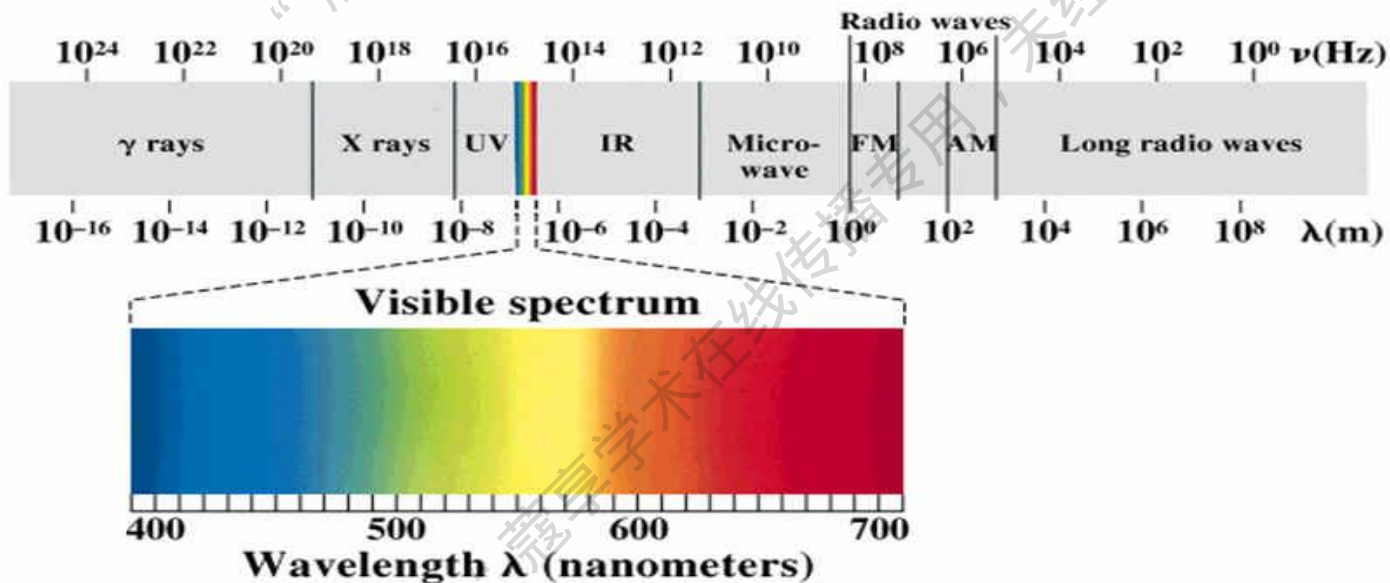
从玻尔模型到矩阵力学

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

复习：
玻尔如何推导出Ritz公式？

Ritz 组合公式

$$\omega_{mn} = \xi \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$



从玻尔模型到矩阵力学

根据经典电动力学，由坐标的傅里叶变换

$$X(t) = \sum_n X_n e^{i\omega_n t}$$

描述的加速带电粒子，其辐射功率由其加速度决定，即

$$W = \frac{4e^2}{3c^3} |\ddot{X}|^2$$

带电粒子加速运动辐射光的特征频率，一定是出现在坐标的傅里叶变换中的振动项的频率。

从玻尔模型到矩阵力学

海森堡 (Werner Heisenberg, 1925年)

原子轨道坐标和动量不是直接的可观察量。能观察到的辐射吸收与两个指标（轨道）有关，对应着确定的跃迁频率；因此，相应的坐标傅里叶变换必须与两个指标 m, n 有关：

$$X = \sum_{m,n} X_{mn} e^{i\omega_{mn}t}, \quad \omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar.$$

电荷 e 做简谐振动时频率 ω_{mn} 辐射的功率为

$$W = \frac{4e^2}{3c^3} |\ddot{X}|^2 \rightarrow W_{(m \rightarrow n)} \propto |X_{mn}|^2 \omega_{mn}^4,$$

即加速电荷辐射光子的功率正比于辐射率的4次方。

从玻尔模型到矩阵力学

谐振子动量和坐标双指标表示：

$$P = \sum P_{mn} e^{i\omega_{mn}t} \quad X = \sum_{mn} X_{mn} e^{i\omega_{mn}t}$$

依据玻恩（1924年《量子力学》）提出差分量子化关系(具体形式略)，海森堡给出能量量子化

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega,$$

海森堡意识到不可对易性，但不知道这是矩阵的特性

$$[X][P] \neq [P][X].$$

海森堡如何意识到不可对易性

计算谐振子系统的能量

$$H = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

涉及到 $\dot{x}^2$ 和 x^2 的计算，海森堡用了以下规则

$$\begin{aligned} (\dot{X}^2)_{mn} &= \sum_l \dot{X}_{ml} \dot{X}_{ln} = \sum_l \omega_{ml} \omega_{ln} X_{ml} X_{ln} \\ (X^2)_{mn} &= \sum_l X_{ml} X_{ln} \end{aligned}$$

涉及到不可对易性，需要注意 X 和 P 前后的次序。当年海森堡工作也隐含假设了它们是实的，对应的矩阵是厄米的。

从玻尔模型到矩阵力学

玻恩认为, X, P 可表示为矩阵

$$X = \begin{bmatrix} X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1n} \\ X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ X_{n1} & X_{n2} & \cdots & X_{nn} \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \cdots & P_{1n} \\ P_{21} & P_{22} & \cdots & P_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ P_{n1} & P_{n2} & \cdots & P_{nn} \end{bmatrix}$$

并推导出了基本对易关系

$$[X, P] \equiv XP - PX = ?$$

玻恩和约当的“两个人文章”第二种方法:

Born, W and P. Jordan 1925. Zur Quantenmechanik. Z. Physik, 34, 858

基本对易关系与运动方程自治

假设 X 和 P 是矩阵, 仍然满足运动方程

$$\dot{P} = -\frac{\partial V(X)}{\partial X}, \dot{X} = \frac{P}{m},$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} [X, P] &= \frac{d}{dt} [XP - PX] = \dot{X}P + X\dot{P} - \dot{P}X - P\dot{X} \\ &= \frac{P}{m}P + X\left[-\frac{\partial V(X)}{\partial X}\right] - \left[-\frac{\partial V(X)}{\partial X}\right]X - \frac{P}{m}P = 0 \end{aligned}$$

矩阵的微分运算法则：计算中注意 X, P 的先后顺序

基本对易关系推导

$$\frac{d}{dt} [X, P] = 0, \longrightarrow [X, P] = \text{常数} C.$$

$$\because C^* = (XP - PX)^\dagger = -XP + PX = -C, \quad \therefore C = i\hbar$$

玻恩-约当对易关系

$$[X, P] = i\hbar$$

常数 $\hbar$ 由谐振子黑体辐射问题确定为普朗克常数 $\hbar = h/2\pi$ ：由对易关系计算得出谐振子能量与普朗克公式对比得到

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \quad E = \left(n + \frac{1}{2}\right) h/2\pi$$

谐振子量子化（海森堡，1925年）

谐振子哈密顿量： $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2,$

$$\ddot{X} + \omega^2 X = 0,$$

傅里叶分量满足：

$$\ddot{X}_{mn} + \omega^2 X_{mn} = 0.$$

令

$$X_{mn}(t) = X_{mn}(0)e^{i\omega_{mn}t}$$

则

$$(\omega_{mn}^2 - \omega^2)X_{mn} = 0$$

谐振子量子化（海森堡，1925年）

$$(\omega_{mn}^2 - \omega^2)X_{mn} = 0$$

仅当 $\omega_{mn} = \pm\omega$, $X_{mn} \neq 0$
对于 $\omega_{mn} \neq \pm\omega$, $X_{mn} = 0$

对所有定态进行编号, 设 $X_{m,m\pm 1}$ 非零, 只有跃迁 $m \rightarrow m \pm 1$ 存在且频率为 ω , 记 $\omega_{m,m\pm 1} = \pm\omega$ 。

$$X_{mn} = X_{m,m+1}\delta_{n,m+1} + X_{m,m-1}\delta_{n,m-1}$$

谐振子量子化：矩阵元计算

由 $\dot{x} = p/m$ 和基本对易关系，

$$\dot{X}X - X\dot{X} = -i\hbar/m$$



$$(\dot{X}X)_{mn} - (X\dot{X})_{mn} = -i(\hbar/m)\delta_{mn}$$

当 $m = n$ 时，利用矩阵乘法规则和对易关系计算矩阵元

$$(AB)_{mn} = \sum_l A_{ml}B_{ln},$$

$$\begin{aligned} \text{左边} &= i \sum_l (\omega_{nl}X_{nl}X_{ln} - X_{nl}\omega_{ln}X_{ln}) \\ &= 2i \sum_l \omega_{nl}X_{nl}X_{ln} = -\frac{i\hbar}{m} = \text{右边} \end{aligned}$$

谐振子量子化：矩阵元计算

只能取 $l = n \pm 1$, $X_{mn} = X_{nm}$ (坐标为实数)



$$(X_{n,n+1})^2 - (X_{n,n-1})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

给出了 $X_{n+1,n}$ 的递推关系: $X_{n+1,n}^2 - X_{n,n-1}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$



$$X_{n=0,n-1=-1} = 0$$

$$X_{n+1,n}^2 = \frac{(n+1)\hbar}{2m\omega}$$

谐振子能量量子化

谐振子能量

$$E_n = H_{nn} = \frac{1}{2}m \left[(\dot{X}^2)_{nn} + \omega^2 (X^2)_{nn} \right] = \frac{1}{2}m \left[\sum_l \dot{X}_{nl} \dot{X}_{ln} + \omega^2 \sum_l X_{nl} X_{ln} \right]$$

$$\dot{X}_{nl}(t) = i\omega_{nl} X_{nl}(0) e^{i\omega_{nl}t} = i\omega_{nl} X_{nl}(t)$$



$$E_n = \frac{1}{2}m \sum_l [-i\omega_{nl} X_{nl} i\omega_{nl} X_{nl} + \omega^2 X_{nl} X_{nl}]$$

$$= \frac{1}{2}m \sum_l (\omega^2 + \omega_{nl}^2) X_{nl}^2 = m\omega^2 (X_{n+1,n}^2 + X_{n,n-1}^2) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

上述给出谐振子量子化。与黑体辐射经验公式比较，得到 $\hbar$ 就是普朗克常量

海森堡量子力学小结

“电子” 坐标与动量：

$$X = \sum X_{mn} e^{i\omega_{mn}t} \longleftrightarrow P = \sum P_{mn} e^{i\omega_{mn}t}$$

可观测量依赖于两个指标

核心假设：

$$[X][P] \neq [P][X], ([A] = [A_{mn}])$$

“不对易”

经典运动方程

$$\frac{d}{dt}[X, P] = 0, \quad [X, P] = \text{常数} C.$$

玻恩量子化条件

$$[X, P] = i\hbar$$

给出x 矩阵元表达

海森堡量子力学小结

由“不对易”运算规则和“玻恩量子化条件”计算

$$E = \sum \frac{1}{2} m \dot{X}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$$

$$\Rightarrow E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

对比黑体辐射的普朗克公式

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{h \nu}{2\pi}$$

得到：

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

量子耗散的唯一象描述（习题1）

1. 考虑一个耗散的谐振子，满足运动方程

$$\ddot{x} = -\gamma\dot{x} - \omega^2 x \quad \gamma > 0$$

(1) $[x, \dot{x}] = ?$

(2) p 与 $\dot{x}$ 的关系是什么？

(3) 系统的（有效）哈密顿量是什么？

提示：由 $\frac{d}{dt}[x, \dot{x}] = -\gamma[x, \dot{x}]$ ，得到

$$[x, \dot{x}] = e^{-\gamma t} i\hbar$$

定义广义动量 $p = e^{\gamma t} \dot{x}$ ，则 $[x, p] = i\hbar$ 不依

赖于时间

1.2 波动力学与玻恩几率诠释

1.2 波动力学与玻恩几率诠释

1924年，德布罗意 (L. de Broglie) 逆向思考爱因斯坦的光量子假说：既然光可以表现出粒子的行为，粒子也可以表现出波动行为，由平面波描述。

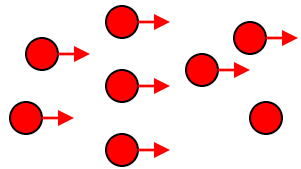
$$\varphi_k(x) \propto e^{ikx - i\omega t}$$

德布罗意关系

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

1927年，C.J.戴维森和L.H.革末以及G.P.汤姆孙分别进行了电子束在晶体上的衍射实验，证实了电子的波动性和德布罗意关系；1989年，殿村实现了电子的“双缝干涉”实验。

波粒二象性



粒子束

“版权归报告人所有”



粒子的双缝实验



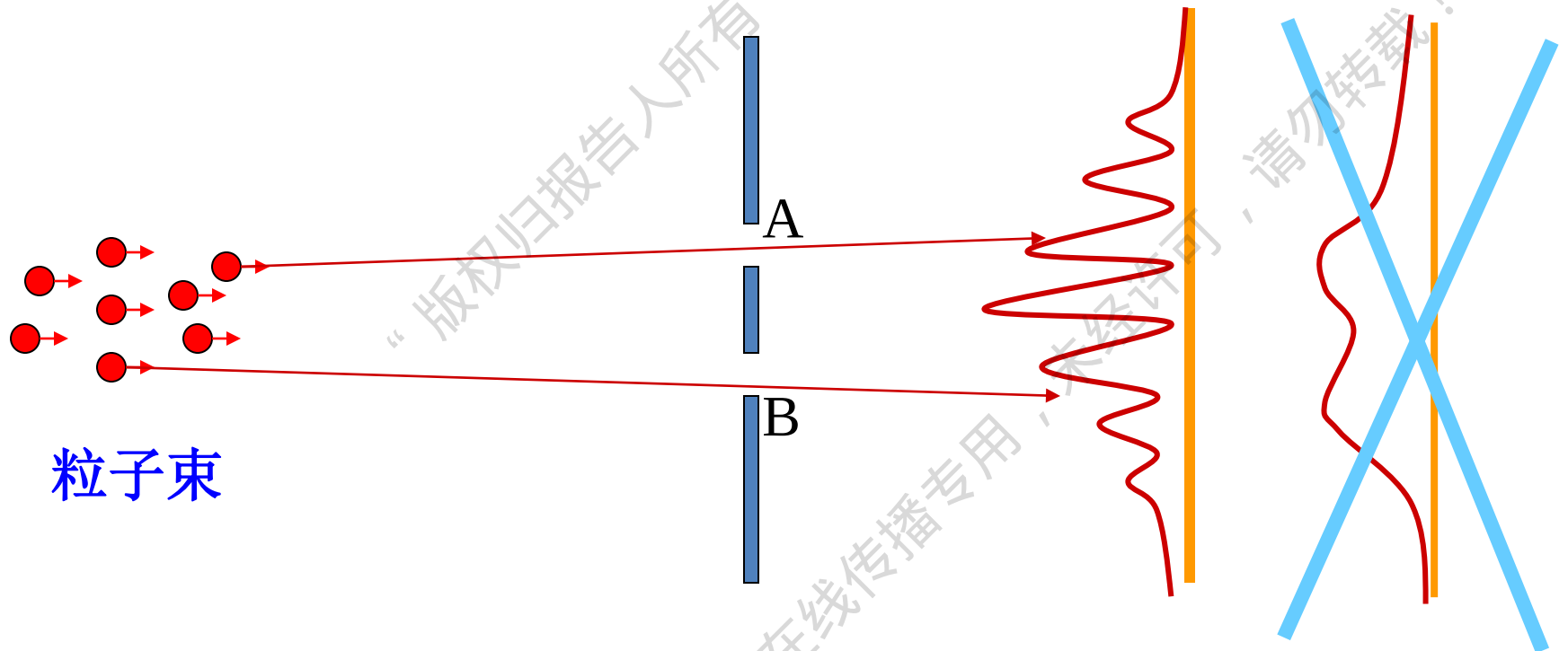
粒子探测器

“未经许可，请勿转载！”

波粒二象性

$|0\rangle$: 缝B关闭时的波函数

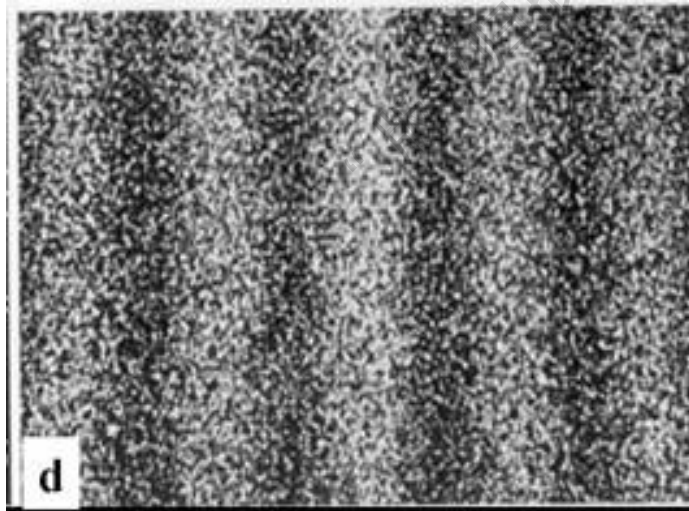
$|1\rangle$: 缝A关闭时的波函数



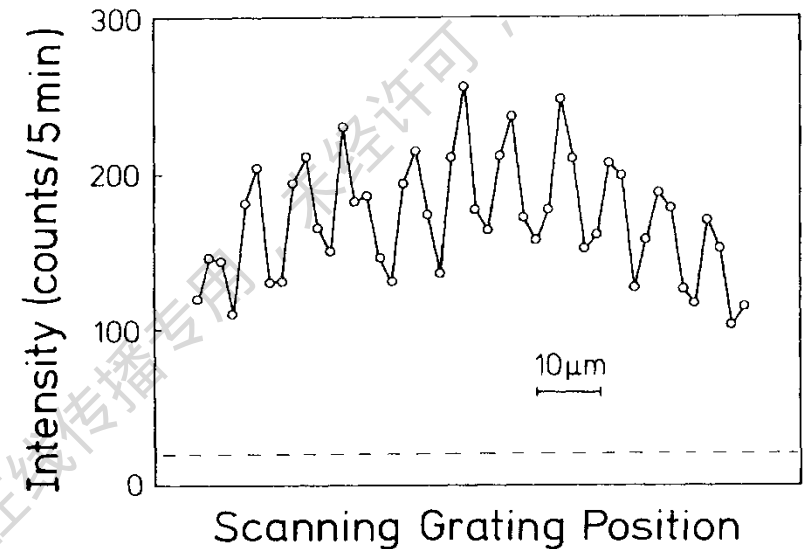
$$|\psi\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$$

实际粒子的双缝实验

电子干涉实验结果



原子干涉实验结果

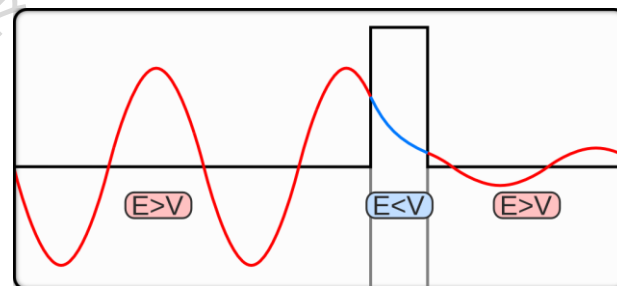
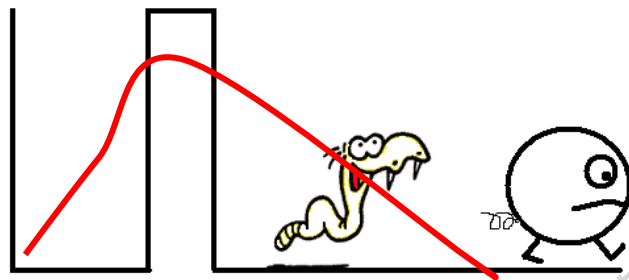
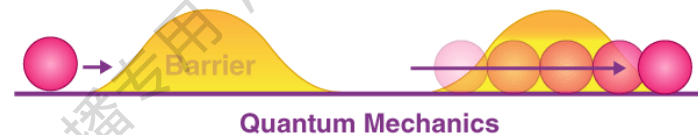
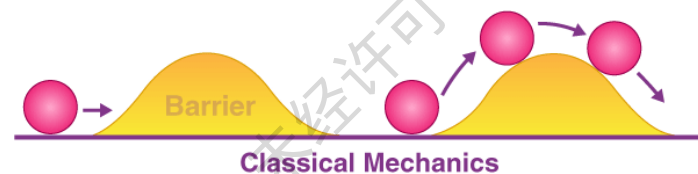
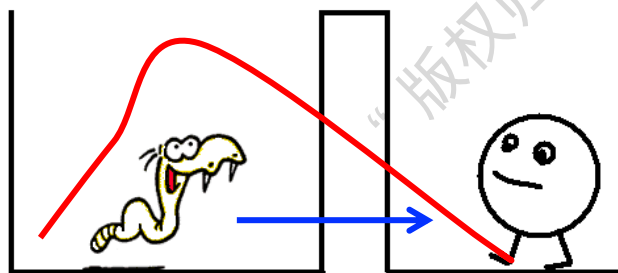


量子隧道效应与“崂山道士”

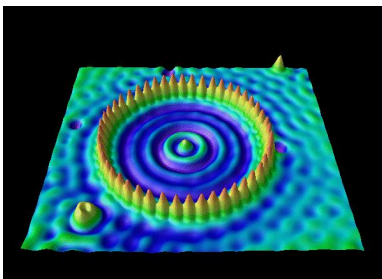
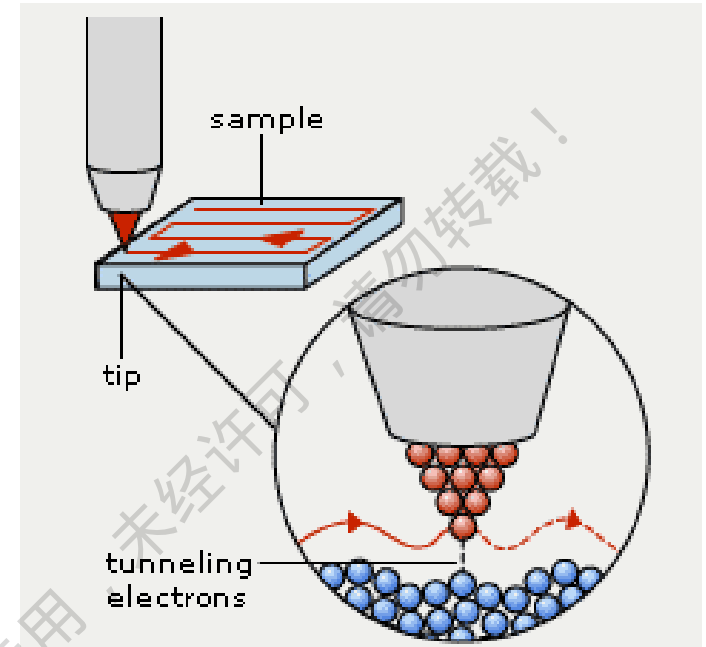
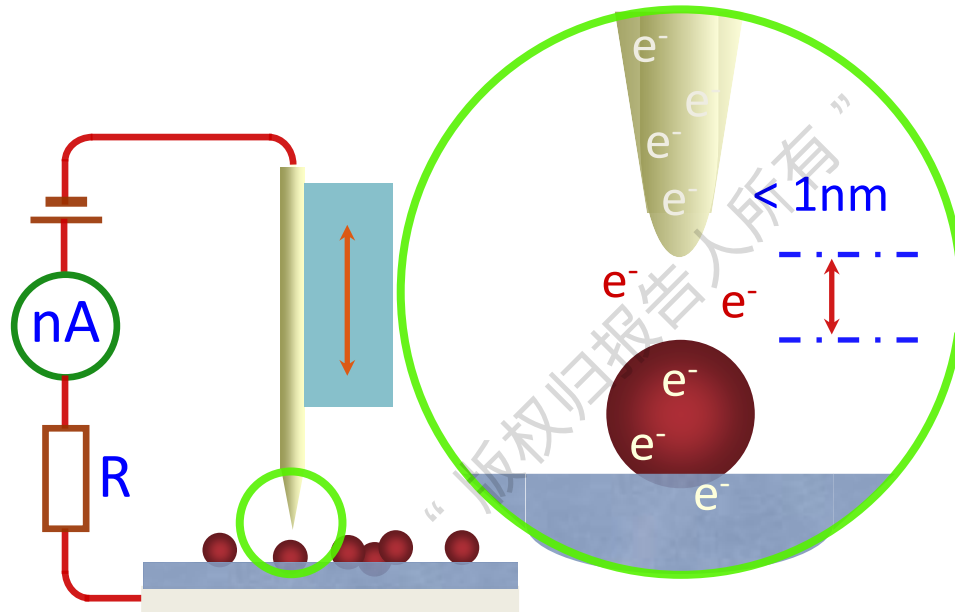


因为粒子
也是波

BYJU'S
The Learning App



扫描隧道显微镜(STM)



Iron atoms on the surface of Cu(111)

波动力学与玻恩几率诠释

	能量	波长	波段
电子	100eV	0.12 nm	硬X射线
冷原子	170nK	$\sim 10^{-6}\text{m}$	
子弹	10g, 300m/s	2×10^{-34}	
崂山道士	50kg, 30m/s	4×10^{-37}	远小于其尺度

思考题：估算一下，一个半径为10 cm，质量为1 kg的球，以30 m/s速度运动，其物质波波长与半径相比如何？由此理解为什么宏观物体不表现量子相干性？

“崂山道士”太重了，隐藏了量子相干性

薛定谔方程

薛定谔回答德拜提出的问题，对任意位势的粒子给出了一般的波动方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \psi(x, t).$$

对于给定能量 E ，定义定态波函数（分离变量）

$$\psi(x, t) = \exp(-iEt/\hbar) \psi(x)$$

$\psi(x)$ 满足定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$



薛定谔方程的由来

“版权归报告人所有”
“寇享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”

哈密顿量和正则方程

拉格朗日量 $L = L(q, \dot{q})$ 是坐标 q 和速度 $\dot{q}$ 的函数。

广义动量

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}$$

哈密顿量

$$H = H(p, q) = p\dot{q} - L(q, \dot{q})$$

动力学由正则方程描述

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

最小作用量和牛顿定律

正则方程等价于作用量

$$S = S(t) = \int_{t_0}^t L dt = \int_{t_0}^t (T - V) dt$$

的变分极值给出的拉格朗日方程：

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$$

$\approx$

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} \end{aligned}$$

$$F = ma$$

$T = p^2/2m$ 和 $V = V(x)$ 分别为粒子的动能和势能

作用量和哈密顿量

显然,

$$L = \frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial S}{\partial q} \dot{q}$$

于是

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial t} &= \frac{dS}{dt} - \frac{\partial S}{\partial q} \dot{q} = L - \frac{\partial S}{\partial q} \dot{q} \\ &= L - p\dot{q} = -H(p, q) \end{aligned}$$



$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(p, q) = 0$$

上面讨论中用到了

$$p = \partial S / \partial q$$

$p = \partial S / \partial q$ 的证明

把真实轨道 $q(t)$ 变为 $q(t) + \delta q(t)$,

$$\delta S = \int_{t_0}^t \left[\frac{d}{d\tau} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} \right] \delta q d\tau + \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_0}^t = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_0}^t$$

因此,

$$\delta S / \delta q = \partial L / \partial \dot{q} = p$$

哈密顿-雅可比方程

哈密顿-雅可比方程

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H\left(\frac{\partial S}{\partial q}, q\right) = 0$$

哈密顿-雅可比方程

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + V(q) = 0$$

三维的哈密顿-雅可比方程

推广到三维情况。在保守位势 $V(\mathbf{r})$ 运动的一个粒子，它的哈密顿-雅可比方程为

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

$S(\mathbf{r}, t)$ 是作用量。

分离变量

位势与时间无关，作用量可以分离成两部分

$$S = W(\mathbf{r}) - Et,$$

函数 $W(\mathbf{r})$ 不含时，叫做哈密顿特征函数， E 是能量。

代入哈密顿-雅可比方程有

$$(\nabla W)^2 = 2m(E - V(r))$$

S的等值曲面

对于S的等值曲面

$$C: \{(\mathbf{r}, t): S(\mathbf{r}, t) = S(x, y, z; t) = C(\text{常数})\}$$

微分之

$$\nabla S \cdot d\mathbf{s} = \frac{\partial S}{\partial x} dx + \frac{\partial S}{\partial y} dy + \frac{\partial S}{\partial z} dz = 0$$

C 上任何一矢量 $d\mathbf{s} = (dx, dy, dz)$, 皆满足以下方程

此方程式表明, S 之梯度 ∇S 与C的切面 $d\mathbf{s}$ 垂直

等值曲面的移动方程

考虑作用量 S 对于时间的全导数

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla S \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt}.$$

而 S 的等值曲面 C 在空间上号移动方程为

$$0 = \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla S \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} = -E + \nabla S \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt}$$

相速度和粒子的移动速度

在设定等值曲面的正负面后， C 朝着沿着 ∇S 定义的法线方向移动，速度 u （作用量 C 上点的速度）是

$$u = \frac{dr}{dt} = \frac{E}{|\nabla S|} = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}}.$$

速度 u 是相速度，而不是粒子的移动速度 v ：

$$v = \frac{p}{m} = \frac{|\nabla S|}{m} = \sqrt{\frac{2(E - V)}{m}}.$$

波函数

想象C是物质波的等相位曲面

(可以与阅读材料1.4中的光波-光线比较)

假设位相与 S 成比例、能量为 E 的物质波波函数：

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{iS/\mu} = e^{i(W(\mathbf{r}) - Et)/\mu}$$

作用量被分解为 $S = W(\mathbf{r}) - Et$ ， μ 是常数， E/μ 必须是频率量纲。

无外场

没有外场时回到自由粒子德布罗意波情况。

利用德布罗意关系 $E = \hbar\omega$ ，而 $\mu = \hbar$ 就是普朗克常量， ω 是角频率。分离变量后

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar)$$

其中

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{iW(\mathbf{r})/\hbar}$$

薛定谔方程的出现

这意味着 $S = i\hbar \ln[\psi(\mathbf{r})] - Et$

$$-\hbar^2 \left(\frac{\nabla \psi(\mathbf{r}, t)}{\psi(\mathbf{r}, t)} \right)^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\nabla \psi(\mathbf{r})}{\psi(\mathbf{r})} \right)^2 = 2m[E - V(r)]$$

由此得到如下方程

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi(\mathbf{r}))^2 + [E - V(r)](\psi(\mathbf{r}))^2 = 0 \quad (*)$$

薛定谔方程的出现

回到一维情况,

$$\frac{\partial \psi}{\partial q} = \frac{i}{\hbar} \psi \frac{\partial S}{\partial q}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial q} \frac{\partial S}{\partial q} + \frac{i\psi}{\hbar} \frac{\partial^2 S}{\partial q^2} = -\frac{1}{\hbar^2} \psi \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + \frac{i}{\hbar} \psi \frac{\partial^2 S}{\partial q^2}$$

考虑物质波波长很短, 即 $\hbar$ 很小

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} \rightarrow -\frac{1}{\hbar^2} \psi \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 = \frac{1}{\psi} \left(\frac{\partial \psi}{\partial q} \right)^2$$

$$\frac{\partial S}{\partial q} = \frac{i}{\hbar \psi} \frac{\partial \psi}{\partial q}$$

薛定谔方程的出现

推广到三维有 $(\nabla\psi(\mathbf{r}, t))^2 \rightarrow \psi\nabla^2\psi$, 方程(*)变为

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + [E - V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = 0$$

相应地, 含时薛定谔方程是

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

薛定谔方程的出现

- 定态和含时薛定谔方程都是新理论中的基本假定。虽然上文追溯薛定谔建立波动力学的思想和思路，**不可认为薛定谔方程可由经典物理导出来。**
- 反过来我们也可以从薛定谔方程出发导出哈密顿雅可比方程，这就是半经典近似。

薛定谔方程到哈密顿-雅可比方程

从薛定谔方程出发，猜测 ψ 的形式为

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{iS(\mathbf{r}, t)/\hbar}.$$

将 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 代入薛定谔方程，得到

$$\frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S.$$

薛定谔方程到哈密顿-雅可比方程

取经典极限， $\hbar \rightarrow 0$ ，则可得到哈密-顿雅可比方程

$$\frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + (V - U) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

其中

$$U = \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S$$

它代表了量子力学效应，被称为量子势

这个概念是在1952年由戴维波姆（David Bohm）首次提出，是德布罗意物质波理论的中心思想。1975年，Bohm和 Basil Hiley 诠释其为作用在粒子上的信息势能。量子势能又可称为 Bohm 势能或量子Bohm势能。

波函数的几率诠释

$|\psi(x, t)|^2$ 代表 t 时刻在 x 附近发现粒子的几率密度

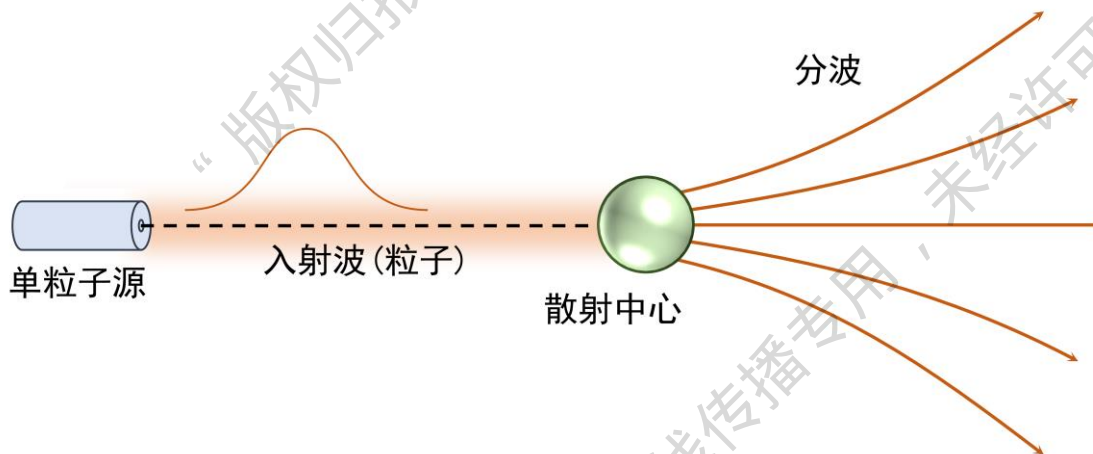
$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

如果简单地代表粒子的空间密度分布，则与粒子散射后还是一个粒子的散射实验事实相矛盾：因为弹性散射实验不假定粒子被打碎了分布在空间

Born, M 1926. The quantum mechanics of the impact process.
Z. Physik, **37**, 863; Quantum mechanics in impact processes **38**, 803.

玻恩诠释是波粒二象性的要求

- 只有波动力学适宜描述粒子间碰撞或散射问题
- 只有几率才能把波粒二象与散射问题等价“和谐”



打散成几个粒子观点与直觉违背，量子几率
被视为波的粒子以特定几率散射到一定的立体角中

小结：波动力学与玻恩诠释

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) = H\psi(x, t)$$

薛定谔方程

波函数

玻恩诠释（规则）

$|\psi(x, t)|^2 = \text{发现粒子的几率密度}$

矩阵力学

不确定性关系

$$\Delta Q \Delta P \geq \hbar/2$$

奇妙的量子效应

互补性原理

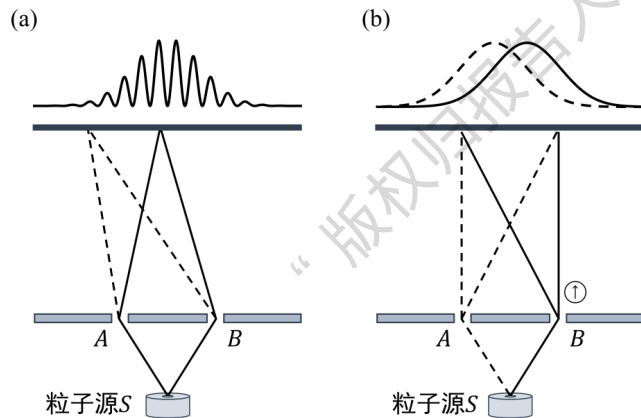
1928年, 玻尔把波粒二象性和不确定性关系进一步提升为**互补性原理**(又称并协性原理)。

对微观现象的描述不能像刻画经典世界那样进行完备的理想描述。构成完备经典描述的某些互相补充的元素, 在微观世界里通常是互相排斥的, 但这些互补元素刻画微观现象的不同侧面, 是微观描述中必不可少的。

1. 微观粒子在同一方向的坐标和动量都是认识微观粒子运动的两个独立的侧面, 但不能同时测量它们;
2. 对微观体系的描述有粒子(以能量和动量为表征)与波动(以频率和波长为表征)互补的两个方面, 但同一个实验中它们不能同时使用。

互补性原理

美国（1995年）Pritchard 研究组和德国Rampe (1998)通过原子干涉实验 “验证了” 互补原理。



共振光照射原子干涉仪中的原子，保证原子在通过光束时能发生散射可能性很大。当相移的幅度增大时，干涉条纹分辨率很快下降。

在量子测量理论中，仪器能够探测粒子是否通过B缝，是因为仪器与粒子相互作用形成了量子纠缠。纠缠越理想，测量结果越准确。

1.3 量子力学基本原理的数学表达

1.3 量子力学基本原理的数学表述

量子力学第一公设：波函数与算符

物理体系的状态可以由其位形上的Hilbert空间上的一个非零向量——态矢量描述，它的每一个力学量可以用一个厄米算子来表示。

坐标和动量算符满足

$$[x, p] = i\hbar$$

复合力学量要注意 x 和 p 的次序 (Weyl序)

$$F(p, x) = \sum_{nm} C_{nm} p^n x^m$$

第一公设的数学：狄拉克(Dirac)符号

定义

V 上的内积： $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in V$,

$$(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) \equiv \langle\varphi|\psi\rangle.$$

V 变成一个内积空间。内积定义是不唯一的。

数学上要从对偶空间的角度理解内积！

厄米算子 A 的本征函数张成了系统的Hilbert空间 V

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |n\rangle$$

狄拉克符号：右矢，左矢与对偶空间

定义

V 上有线性函数 $F: V \rightarrow \mathbb{C}$, F 张成 V 的对偶空间

$$F(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = aF(|\alpha\rangle) + bF(|\beta\rangle);$$

$$\forall F \in V^*, \text{记 } F = \langle F|.$$

V 的基矢: $\{|\nu_1\rangle, |\nu_2\rangle, \dots, |\nu_N\rangle\}$ $\longrightarrow$ 右矢

V^* 的基矢: $\{f_1 = \langle f_1|, f_2 = \langle f_2|, \dots, f_N = \langle f_N|\}$ $\longrightarrow$ 左矢

狄拉克符号：右矢，左矢与对偶空间

V^* 的基矢： $\{f_1 = \langle f_1|, f_2 = \langle f_2|, \dots, f_N = \langle f_N|\}$  左矢

$$f_j(|v_i\rangle) \equiv \langle f_j|v_i\rangle = \delta_{ij};$$

则对于 $\langle F| = \sum_j b_j^* \langle f_j|, |V\rangle = \sum_{j'} a_{j'} |v_{j'}\rangle$

有 $\langle F|V\rangle = \sum_j b_j^* a_j$

A 的厄米性：

若 $A^\dagger = A$ 或 $\langle A\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle$ ，则称 A 是厄米算子

正交性

$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ 厄米算子的本征函数是正交的

证明

先证明：厄米算子的本征值是实的

$$a_n \langle n|n\rangle = \langle n|A|n\rangle \stackrel{\text{厄米性}}{=} \langle An|n\rangle = a_n^* \langle n|n\rangle \Rightarrow a_n = a_n^*$$

$m \neq n$ 时,

$$\langle m|A|n\rangle = a_n \langle m|n\rangle$$

|| 厄米性

$$\langle A^\dagger m|n\rangle = a_m^* \langle m|n\rangle$$

$$\Rightarrow (a_n - a_m) \langle m|n\rangle = 0$$

假设 a_n 是非简并的,

$$a_n \neq a_m \ (n \neq m) \Rightarrow \langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$

完备性

$$|\psi\rangle = \sum_m C_m |m\rangle, \quad \langle n|\psi\rangle = \sum_m C_m \langle n|m\rangle = \sum_m \delta_{nm} C_m,$$

$$C_n = \langle n|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_m |m\rangle \langle m|\psi\rangle = \left(\sum_m |m\rangle \langle m| \right) |\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad \sum_m |m\rangle \langle m| = 1$$

完备性的严格表达：

有上确界或下确界的厄米算子本征态是完备的。

证明可见泛函分析或希尔伯特空间理论，物理学家易理解的证明见李政道先生的《粒子与场》第一卷或《物理学中的数学方法》。

量子力学坐标表象

由基本对易关系证明，动量的算符表示为

$$[x, p] = i\hbar \longrightarrow p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

假大部分情况下以上关于分立态的讨论对连续态也成立。

如对于坐标本征函数 $|x\rangle$ ，将 δ 符号变成 δ 函数：

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \quad \int |x\rangle\langle x|dx = 1$$

在坐标表象下

$$|\psi\rangle = \int \varphi(x)|x\rangle dx,$$

坐标表象 p 的矩阵元

对基本对易关系取 x 表象下的矩阵元

$$\langle x' | [x, p] | x \rangle = i\hbar \delta(x' - x)$$

$$(x' - x) \langle x' | p | x \rangle = i\hbar \delta(x' - x)$$

$$\langle x' | p | x \rangle = \frac{i\hbar \delta(x' - x)}{x' - x}$$

$$\begin{aligned} x \frac{d}{dx} \delta(x) &= -\delta(x) \\ \frac{d}{dx} \delta(x) &= -\frac{\delta(x)}{x} \end{aligned}$$



$$\langle x' | p | x \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \delta(x' - x)$$

坐标表象 $\delta(x)$ -函数

因为

$$\begin{aligned} \int x \frac{d}{dx} \delta(x) \psi(x) dx &= \\ \delta(x) \psi(x) x \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \psi(x) dx &= -\psi(0) \\ \langle x | p | \psi \rangle \equiv \hat{p} \langle x | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x | p | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx' \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(x - x')}{x - x'} \psi(x') dx' = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \psi(x') dx' \end{aligned}$$

注：由于 δ 函数是广义函数，相当于某种分布，所以对其性质的证明必须将它作用在函数上。

1. 证明在动量表象下，位置算符表示为

$$X = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$$

并且

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

2. 定义算子

$$\hat{A} = \int |x\rangle\langle\mu x|dx,$$

该算子对波函数的作用效果是什么？给出 $\hat{A}$ 在坐标表象下的表达式（用 x, ∂_x 等元素表达）

习题2提示

将 $\hat{A} = \int |x\rangle\langle\mu x|dx$ 作用在 $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ 上，考察 $\hat{A}|\psi\rangle = ?$

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{A}|\psi\rangle &= \psi(\mu x) \\ &= \psi(x + (\mu - 1)x) \\ &= ? \text{（泰勒展开）}\end{aligned}$$

变换理论：态的变换

用力学量 A 和 B 的本征态 $\{|n\rangle\}$ 和 $\{|\bar{n}\rangle\}$ 表达同一量子态 $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_n A_n |n\rangle = \sum_n B_n |\bar{n}\rangle \quad (\text{称作} A \text{表象和} B \text{表象})$$

$$A_n = \langle n|\psi\rangle = \sum_m \langle n|\bar{m}\rangle \langle \bar{m}|\psi\rangle$$
$$B_m = \langle \bar{m}|\psi\rangle$$



$$A_n = \sum_m \langle n|\bar{m}\rangle B_m$$
$$A = SB$$

或

$$A = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_N \end{pmatrix}$$

$$S = \begin{bmatrix} \langle 1|\bar{1}\rangle, & \langle 1|\bar{2}\rangle, & \cdots & \langle 1|\bar{N}\rangle \\ \langle 2|\bar{1}\rangle, & \langle 2|\bar{2}\rangle, & \cdots & \langle 2|\bar{N}\rangle \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \langle N|\bar{1}\rangle, & \langle N|\bar{2}\rangle, & \cdots & \langle N|\bar{N}\rangle \end{bmatrix}$$

变换理论：算符的变换

在A表象下

$$W = \sum_{m,n} \langle m|W|n\rangle |m\rangle\langle n| \equiv \sum_{m,n} W_{mn} |m\rangle\langle n|$$

在B表象下

$$W = \sum_{m',n'} \langle \bar{m}'|W|\bar{n}'\rangle |\bar{m}'\rangle\langle \bar{n}'| \equiv \sum_{m',n'} W'_{m'n'} |\bar{m}'\rangle\langle \bar{n}'|$$

$$W'_{m'n'} = \langle \bar{m}'|W|\bar{n}'\rangle = \sum_{mn} \langle \bar{m}'|m\rangle\langle m|W|n\rangle\langle n|\bar{n}'\rangle \equiv (S^\dagger W S)_{m'n'}$$

$$W' = S^\dagger W S$$

计算物理可观测量时，算符和态的表象一定要统一！

玻恩几率诠释与坐标平均值

在坐标表象中 $|\psi\rangle = \int \psi(x)|x\rangle dx$

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = x \text{ 点附近发现粒子的几率幅}$$

$$P(x) = |\psi(x)|^2 = x \text{ 点附近发现粒子的几率密度}$$

$$\int P(x)dx = \int \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \text{ 或 } \langle\psi|\psi\rangle=1$$

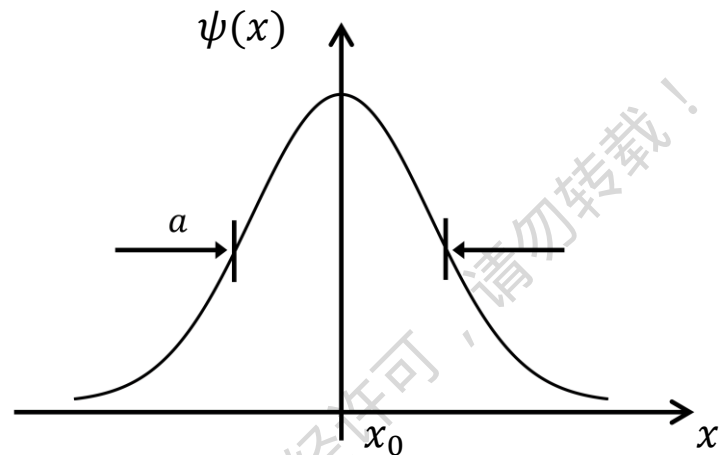
$$\bar{x} = \int xP(x)dx = \int \psi^*(x)x\psi(x)dx$$

$$\overline{x^2} = \int x^2P(x)dx = \int \psi^*(x)x^2\psi(x)dx$$

玻恩几率诠释与坐标平均值

取高斯波包 $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2}}$$



Δx 均方根涨落就是波包宽度

$$\bar{x} = x_0, \quad \Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2} = a$$

$a \rightarrow 0, \quad \psi(x) \rightarrow \delta(x - x_0)$ 坐标本征函数

* 测量与玻恩几率诠释

模仿位置平均值定义期望值

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

任意表象中 $|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle$

$$\begin{aligned}\bar{A} &= \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi | A \sum_n |n\rangle \langle n| | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | A | n \rangle \langle n | \psi \rangle \\ &= \sum |\langle n | \psi \rangle|^2 a_n = \sum P_n a_n \quad \sum P_n = 1\end{aligned}$$

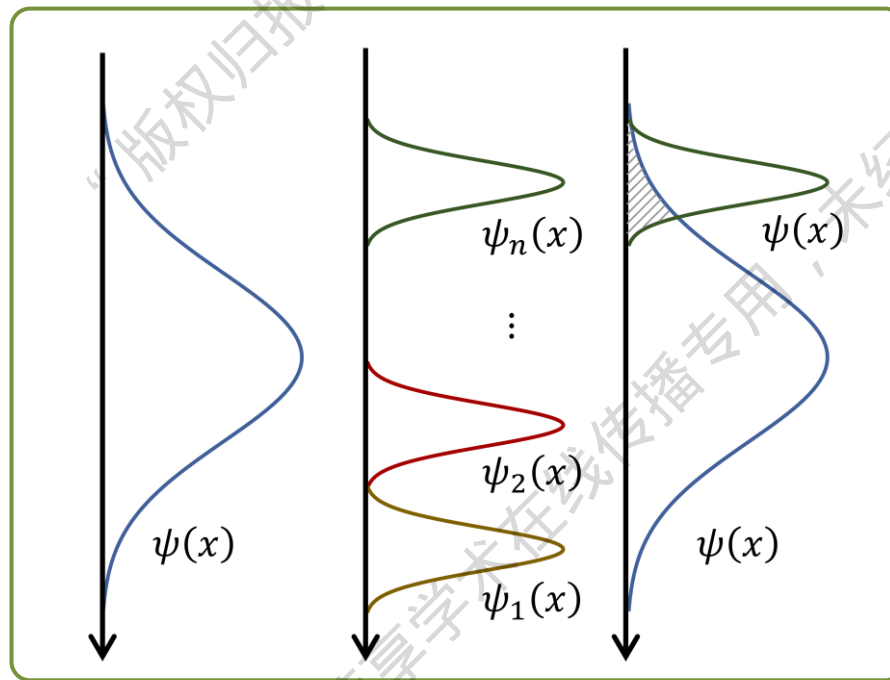
一般玻恩诠释： P_n = 力学量本征值 a_n 在 $|\psi\rangle$ 上的分布几率

* 坐标表象的一般玻恩几率诠释

$$C_n = \langle n|\psi \rangle = \int \langle n|x \rangle \langle x|\psi \rangle dx = \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx$$

$\psi_n(x) = \langle x|n \rangle$, 是A的本征函数 $|n\rangle$ 的坐标表示

$$P_n = |C_n|^2 = |\langle n|\psi \rangle|^2 = \left| \int \psi_n^*(x) \psi(x) dx \right|^2$$



C_n 是 $\psi_n(x)$ 和 $\psi(x)$ 的波包重叠积分

1.3 量子力学基本原理的数学表述

量子力学第二公设：玻恩几率诠释

设 $|n\rangle$ 是厄米算符 $\hat{A}$ 对应于本征值 a_n 的本征态,

$$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle.$$

在任意波函数 $|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle$ 上测量 $\hat{A}$,

$$P_n = |C_n|^2$$

代表在 $|\psi\rangle$ 态上测得 a_n 的几率。

玻恩量子测量定理（公设）

量子力学第二公设等价表述

力学量期望值公设

在任意波函数 $|\psi\rangle$ 测量 $\hat{A}$, 得到的期望值为

$$\bar{A} \equiv \langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \xrightarrow[\sum P_n = 1]{\langle \psi | \psi \rangle = 1} \bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

力学量的平均值 = 期望值

玻恩几率诠释



力学量期望值公设

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n p_n \equiv \sum_n a_n |\langle n | \psi \rangle|^2$$

玻恩量子测量定理

玻恩几率诠释



力学量期望值公设

在波函数 $|\psi\rangle$ 测量 $\hat{A}$, 得到的期望值为

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

需要证明

玻恩几率诠释



力学量期望值公设

力学量期望值公设



玻恩几率诠释

量子力学第二公设等价表述

证明

力学量期望值公设



玻恩几率诠释

力学量的平均值

$$\bar{A} = \sum_n a_n |\langle n | \psi \rangle|^2 = \sum_n a_n p_n$$

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle$$

力学量的涨落

$$p_n = |\langle n | \psi \rangle|^2 \geq 0$$
$$\sum_n p_n = 1$$

$$\Delta A \equiv A - \bar{A}$$



p_n 是 a_n 的几率分布

从力学量期望值公设到玻恩几率诠释

已经证明

在 $|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle$ 上测得的结果是A的本征值之一 a_n 相应的几率为 $P_n = |C_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2$

需要进一步证明：当且仅当在本征态 $|n\rangle$ 上，测量的结果是确定的 a_n

$C_n = \langle n|\psi\rangle$ = 在特定 $|n\rangle$ 发现粒子的几率幅

“结果是确定的” = 涨落为零

玻恩量子测量定理的证明

逆命题:如果在 $|\psi\rangle$ 上测量 A 得到的结果是确定的, 那么 $|\psi\rangle$ 一定是 A 的本征态

证明

在 $|\psi\rangle$ 上测 A 得到平均值 $\bar{A}$ 的均方差涨落

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta A)^2} &= \langle \psi | (A - \bar{A})^2 | \psi \rangle \\ &= \langle (A - \bar{A})\psi | (A - \bar{A})\psi \rangle \equiv \langle \Phi | \Phi \rangle \end{aligned}$$

其中 $|\Phi\rangle = |(A - \bar{A})\psi\rangle$

当且仅当

$$\begin{aligned} (A - \bar{A})|\psi\rangle &= 0 \\ A|\psi\rangle &= \bar{A}|\psi\rangle \end{aligned}$$

$$\overline{(\Delta A)^2} = 0$$

$$\bar{A} = a_n, \quad n = 1, 2, \dots$$

不确定性关系只是玻恩诠释的一个推论

定义

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle \quad \Delta A \equiv A - \bar{A}$$

$$\overline{(\Delta A)^2} = \overline{A^2} - \bar{A}^2$$

$$\overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{2} [A, B]^2 \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

证明

见曾谨言《量子力学 卷 I》（第五版）P140-141.

不确定性关系的一般性证明

更严格的不确定性关系：

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4} |\langle[A, B]\rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle\{\Delta A, \Delta B\}\rangle|^2$$



$$\Delta A \equiv A - \bar{A}$$

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4} |\langle[A, B]\rangle|^2$$

证明：

设系统的态矢为 $|\psi\rangle$ ，并记

$$|\alpha\rangle = \Delta A|\psi\rangle, \quad |\beta\rangle = \Delta B|\psi\rangle,$$

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle = \langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle,$$

不确定性关系的一般性证明

施瓦茨不等式

$$\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2,$$

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq |\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2,$$

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2} \{\Delta A, \Delta B\},$$

$$|\langle \Delta A \Delta B \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle [\Delta A, \Delta B] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \{\Delta A, \Delta B\} \rangle|^2,$$

$$[\Delta A, \Delta B] = [A, B]$$

量子力学的基本原理

- A、系统的量子态用满足薛定谔方程的波函数来表述（薛定谔）。
可观察量用服从对易关系的厄米算符表示
（海森堡、玻恩、约当，狄拉克）
- B、量子系统的描述是概率性的。一个事件的发生概率是波函数的
绝对值平方（玻恩），由此推导出不确定性原理（海森堡）

~~C、物质具有波粒二象性：根据互补原理（Complementarity principle），
同一个实验可以展示出物质的粒子行为或波动行为，但不能同时展示
（玻尔，海森堡）~~

~~D、测量仪器必须是经典的，它的数学描述是波包塌缩（玻尔\冯·诺依曼）~~

1.4 时变表象变换理论： 海森堡表象

1.3 量子力学基本原理的数学表述

量子力学第三公设：力学量演化

力学量 $\hat{A}$ 满足的算符方程：

$$\dot{\hat{A}} = \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}]$$

海森堡方程,

$$i\hbar \dot{A}_H(t) = [A_H(t), H(t)] + i\hbar \left(\frac{\partial A_S(t)}{\partial t} \right)_H$$

时变系统的海森堡表象

一般的情况下在薛定谔表象中，哈密顿量含时： $H = H_S(t)$

定义两种基矢

薛定谔基 (S-) 基矢： $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |m\rangle, \dots\}$

海森堡基 (H-) 基矢： $\{|1(t)\rangle, |2(t)\rangle, \dots, |m(t)\rangle, \dots\};$

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |m(t)\rangle = H_S(t) |m(t)\rangle; \\ |m(0)\rangle = |m\rangle; \end{cases}$$

1、证明：若， $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ ，

则 $\langle m(t)|n(t)\rangle = \delta_{mn}$

时变系统的海森堡表象

证明

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |m(t)\rangle = H_S(t) |m(t)\rangle$$

取复共轭 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle m(t)| = \langle m(t)| H_S(t)$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \langle m(t)|n(t)\rangle = \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle m(t)| \right) |n(t)\rangle + \langle m(t)| \left(\frac{\partial}{\partial t} |n(t)\rangle \right)$$

$$= \frac{1}{i\hbar} (-\langle m(t)| H_S(t) |n(t)\rangle + \langle m(t)| H_S(t) |n(t)\rangle) = 0$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle m(t)|n(t)\rangle &= \langle m(0)|n(0)\rangle \\ &= \delta_{mn} \end{aligned}$$

时变系统的海森堡表象的波函数

t 时刻波函数 $|\psi(t)\rangle$ 也满足薛定谔方程

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H_S(t) |\psi(t)\rangle \\ |\psi(t=0)\rangle = |\psi(0)\rangle \end{cases}$$

在H-基矢下展开, $|\psi(t)\rangle = \sum C_n(t) |n(t)\rangle$, 同理可证

$$C_n(t) = \langle n(t) | \psi(t) \rangle = \langle n(0) | \psi(0) \rangle = C_n(0)$$

波函数在H-基矢下的展开系数与初态在S-基矢下的展开系数相同

时变系统的海森堡表象：时变力学量

两种表象下的时变力学量矩阵元定义为

$$A_{mn}(t) = \langle m(t) | A_S(t) | n(t) \rangle \equiv \langle m | A_H(t) | n \rangle$$

满足矩阵形式的运动方程

$$i\hbar \dot{A}_H(t) = [A_H(t), H(t)] + i\hbar \left(\frac{\partial A_S(t)}{\partial t} \right)_H$$

海森堡方程的严格意义

下面我们采用记号 $f(t) = f$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle m | \hat{A}_S | n \rangle &= i\hbar \left\langle \frac{\partial}{\partial t} m | \hat{A}_S | n \right\rangle + i\hbar \left\langle m | \hat{A}_S \frac{\partial}{\partial t} | n \right\rangle + i\hbar \left\langle m | \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S \right) | n \right\rangle \\ &= \langle m | -\hat{H}_S \hat{A}_S + \hat{A}_S \hat{H}_S | n \rangle + i\hbar \left\langle m | \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S \right) | n \right\rangle \\ &= \sum_l (\langle m | \hat{A}_S | l \rangle \langle l | \hat{H}_S | n \rangle - \langle m | \hat{H}_S | l \rangle \langle l | \hat{A}_S | n \rangle) + i\hbar \left\langle m | \left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{A}_S \right) | n \right\rangle \end{aligned}$$

海森堡方程最后一项 $i\hbar \partial_t \hat{A}_S(t)$ 的定义是 $\partial \hat{A}_S(t) / \partial t$ 在时变基矢 $\{|n(t)\rangle\}$ 下的矩阵元，和运动方程都没有任何关系

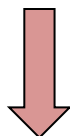
从海森堡运动方程到薛定谔方程

$$\hat{A}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}(0) \hat{U}(t)$$
$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}(t)],$$



$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) = H \hat{U}(t)$$

薛定谔方程



$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

经典对应
牛顿运动方程

从海森堡运动方程到薛定谔方程

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) &= i\hbar \left[\left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}^\dagger(t) \right) \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}(0) \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{A}(0) \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t) \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) \right] \\ &= i\hbar \left[-\hat{U}^\dagger(t) \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) \hat{A}(t) + \hat{A}(t) \hat{U}^\dagger(t) \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) \right] \end{aligned}$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}^\dagger(t) \right) \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) = 0,$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}(t)] = \hat{A}(t) \hat{H}(t) - \hat{H}(t) \hat{A}(t)$$

$$\hat{H} = i\hbar \hat{U}^\dagger(t) \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) = -i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}^\dagger(t) \right] \hat{U}(t).$$

$$-i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}^\dagger(t) \right] = \hat{H} \hat{U}^\dagger(t)$$

2.3 表象理论：矩阵力学与波动力学的统一

区分中文“绘景”和“表象”，分别对应于英文Picture和Representation

两种方式描述量子力学

海森堡表象	薛定谔表象
波函数 $ \Psi_H\rangle = \Psi_S(0)\rangle$ 不随时间变	波函数 $ \Psi_S(t)\rangle$ 随时间变
算子 $A_H(t)$ 随时间变	算子 A_S 不随时间变（动力学意义上）
矩阵方程： $\dot{A}(t) = \frac{1}{i\hbar} [A(t), H(t)]$	波动方程： $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t)\rangle = H \Psi(t)\rangle$
初值条件： $A_H(0) = A_S$	初值条件： $ \Psi_S(0)\rangle = \Psi_H\rangle$
等价性： $ \Psi(t)\rangle = U \Psi(0)\rangle$ $A(t) = U^\dagger(t) A U(t)$ $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H U(t)$	

波恩几率诠释决定了两种表象是等价的

薛定谔表象下，量子体系在 $t = 0$ 时处于以下状态

$$|\Psi(0)\rangle = \sum C_n |n\rangle \quad A|n\rangle = a_n |n\rangle$$

t 时刻波函数为

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle = \sum C_n U(t)|n\rangle = \sum_m \sum_n C_n \langle m|U(t)|n\rangle |m\rangle$$

此时测得 A 的本征值为 a_m 的几率为

$$P_m^S = \left| \sum_n C_n \langle m|U(t)|n\rangle \right|^2 = |\langle m|U(t)|\Psi(0)\rangle|^2$$

A 的平均值为

$$\overline{A}_S = \sum P_m^S a_m = \langle \Psi(0) | U^\dagger(t) A U(t) | \Psi(0) \rangle$$

波恩几率诠释决定了两种表象是等价的

在海森堡表象下测量

$A(t)$ 的本征函数

$$A(t) = U^\dagger(t) A U(t)$$

$$|m(t)\rangle = U^\dagger(t) |m\rangle$$

$$A_H = \langle \Psi(0) | A(t) | \Psi(0) \rangle = \overline{A_S}$$

在

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_m \langle m(t) | \Psi(0) \rangle |m(t)\rangle$$

测得 a_m 的几率为

$$P_m^H = |\langle m(t) | \Psi(0) \rangle|^2 = |\langle m | U(t) | \Psi(0) \rangle|^2 = P_m^S$$

波恩几率诠释决定了两种表象是等价的

以上分析表明，基于量子力学的标准诠释—波恩解释，在两种表象进行力学量的测量。不仅得到期望值是一样的而且测得每一个随机结果，事件发生的概率也是一样，从这个意义上讲，矩阵力学和波动力学对微观世界的描述是等价的。

历史上，薛定谔和Eckart曾经在波恩几率诠释提出前证明了两种表示的等价，且并未声称使用了几率诠释。怎么理解这件事情是一个未解之谜，也与玻尔对玻恩几率诠释重要性的评价有关。

1.5 密度矩阵及其初步应用

1.5 量子态的密度矩阵

纯态密度矩阵

$|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle$ 上 A 的期望可以写为

$$\begin{aligned}\bar{A} &= \sum |C_n|^2 a_n = \sum_n \langle n|\psi\rangle \langle\psi|n\rangle a_n \\ &= \sum_n \langle n|\psi\rangle \langle\psi|A|n\rangle = \text{tr}(A\rho_\psi)\end{aligned}$$

定义纯态密度矩阵为

$$\rho_\psi = |\psi\rangle \langle\psi|,$$

对矩阵的求迹

$$\text{tr}(W) = \sum_n \langle n|W|n\rangle.$$

量子态的密度矩阵：量子比特

考虑一个简单的叠加态

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \langle\psi| = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \quad 1);$$

纯态 $|\psi\rangle$ 对应的密度矩阵为

$$\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

纯态密度矩阵描述量子干涉

两个缝同时打开时的波函数

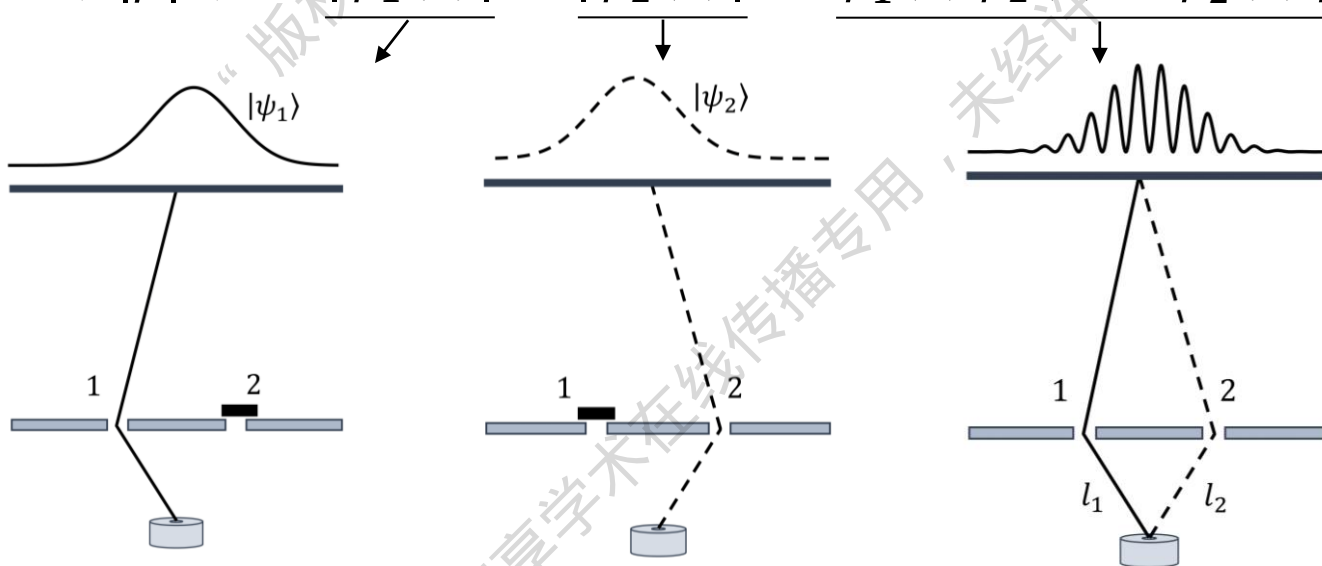
$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$$

纯态密度矩阵

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + |\psi_1\rangle\langle\psi_2| + \text{h.c.}$$

密度矩阵的对角元

$$\rho(x) = \langle x|\rho|x\rangle = \underbrace{|\psi_1(x)|^2}_{\text{缝1}} + \underbrace{|\psi_2(x)|^2}_{\text{缝2}} + \underbrace{\psi_1^*(x)\psi_2(x) + \psi_2^*(x)\psi_1(x)}_{\text{干涉项}}$$



$\psi(x) = \langle x|\psi_\alpha\rangle =$ 仅单缝开放时的几率幅 $(\alpha = 1,2)$

纯态密度矩阵

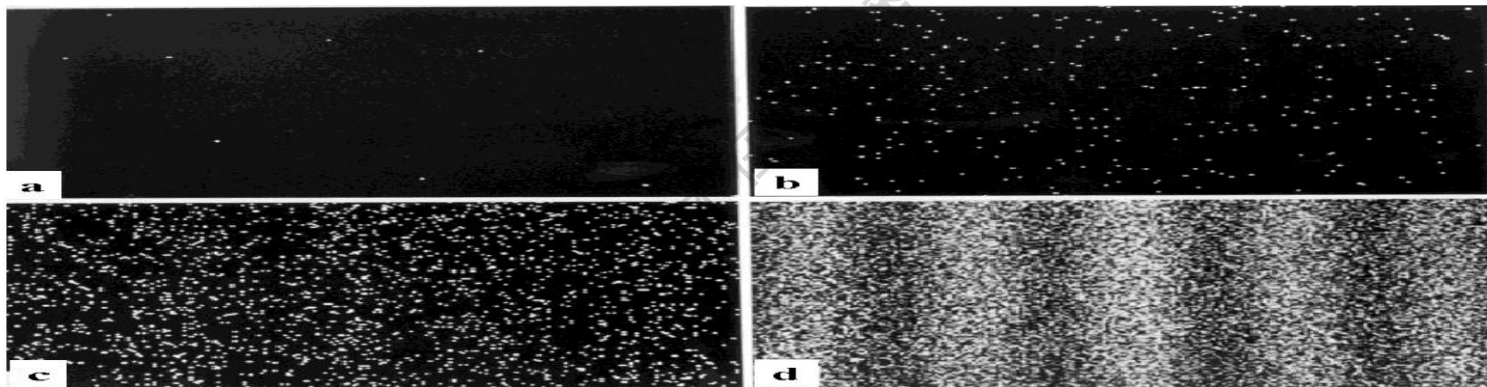
假设源远离双缝, $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 近似为平面波

$$\psi_1(x) \sim e^{ikx}, \psi_2(x) \sim e^{ik(x+d)}$$

d 代表在屏上物质波的“光程”差

$$\rho(d) = 2 + e^{ikd} + e^{-ikd} = 2(1 + \cos kd)$$

描述了出现在屏上的干涉条纹, d 与屏上位置有关



纯态密度矩阵的性质

纯态密度矩阵性质：

$$\text{tr}(\rho) = 1, \quad \rho^2 = \rho$$

坐标空间的对角元

$$\rho(x) \equiv \langle x | \rho | x \rangle = \langle x | \psi \rangle \langle \psi | x \rangle = |\psi(x)|^2 \equiv |\langle x | \psi \rangle|^2$$

代表空间上的几率密度分布，非对角项

$$\langle x | \rho | x' \rangle = \psi^*(x) \psi(x') \text{代表相干项}$$

纯态密度矩阵的性质

$\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$ 满足

1. 归一性 $\text{tr}(\rho) = 1$
2. 投影性 $\rho^2 = \rho$
3. 厄米性 $\rho^\dagger = \rho$
4. 半正定性 $\rho \geq 0$

仅证明(4)： ρ 半正定，当且仅当 $\forall |\psi\rangle, \langle\psi|\rho|\psi\rangle \geq 0$;

而对于 $\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$,

$$\langle\psi|\rho|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle = |\langle\psi|\phi\rangle|^2 \geq 0$$

混合态密度矩阵

由 N 个体系所组成的系统，处在 A 的本征态 $|n\rangle$ 上的经典几率为 P_n ，即系统中有 $n' = P_n N$ 个系统处于 $|n\rangle$ 态上。相对于系统而言，测量 A 得到平均值是

$$\langle A \rangle = \sum_n P_n a_n = \sum_n P_n \langle n | A | n \rangle = \text{tr}(\rho A)$$

“经典”平均

“量子”平均

混合平均

定义混态的密度矩阵

$$\rho = \sum_n P_n |n\rangle \langle n|$$

混态密度矩阵是否为非对角依赖于基矢的选择

混合态密度矩阵的性质

与 A 不对易的算子 B , $[A, B] \neq 0$

测 B 的平均值为 $\langle B \rangle = \sum_n P_n \bar{B}_n = \sum_n P_n \langle n|B|n \rangle = \text{tr}(\rho B)$

混态上平均包含两次平均:

(1) 先在 $|n\rangle$ 上做量子力学平均:

$$\bar{B}_n = \langle n|B|n \rangle$$

(2) 再做经典统计平均。

对于混合态而言, 任何力学量期望值与其非对角元无关。
对纯态或混合系统, 以上求平均值公式是普适的。

混态密度矩阵性质

1. 归一性 $\text{tr}(\rho) = 1$
2. $\rho^2 \neq \rho$
3. 厄米性 $\rho^\dagger = \rho$
4. $\text{tr}(\rho^2) < 1$

仅证明(4)

$$\text{tr}(\rho^2) = \text{tr} \sum_n p_n^2 |n\rangle\langle n| = \sum_n p_n^2 < \sum_n p_n = 1$$

密度矩阵的一般表示

作为一个 N 维 ($\dim(V) = N$) ,态矢量, 右矢 $|\psi\rangle \in V$ 可以表示成列矢量 $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_N \end{pmatrix},$

左矢 $\langle\psi|$ 就表示成行矢量

$$\langle\psi| = (\phi_1^* \quad \phi_2^* \quad \cdots \quad \phi_N^*)$$

纯态密度矩阵可表示为

$$\rho = \begin{bmatrix} |\phi_1|^2 & \phi_1\phi_2^* & \cdots & \phi_1\phi_N^* \\ \phi_2\phi_1^* & |\phi_2|^2 & \cdots & \phi_2\phi_N^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N\phi_1^* & \phi_N\phi_2^* & \cdots & |\phi_N|^2 \end{bmatrix}$$

密度矩阵的一般表示

对于一个由 N 个系统组成的系统，事先知道系统状态：

$$\begin{array}{ccccccc} |\psi_1\rangle & |\psi_2\rangle & \cdots & |\psi_\alpha\rangle & \cdots & |\psi_M\rangle \\ N_1 \uparrow & N_2 \uparrow & \cdots & N_\alpha \uparrow & \cdots & N_M \uparrow \end{array}$$

则这个系统对应的混态密度矩阵可表示为

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{\alpha} \frac{N_{\alpha}}{N} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}| \\ &\stackrel{N \rightarrow \infty}{=} \sum_{\alpha} P_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}| = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \rho_{\alpha} \end{aligned}$$

ρ_{α} 是纯态 $|\psi_{\alpha}\rangle$ 对应的密度矩阵

量子比特：自旋1/2粒子的密度矩阵

自旋1/2的任意密度矩阵可以用Pauli矩阵刻画

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & 1 - a_3 \end{pmatrix},$$

其中Pauli矩阵

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

向量 $\vec{a}$ 被称为Bloch矢量，可以通过密度矩阵计算：

$$\vec{a} = \text{tr}(\rho \vec{\sigma})$$

$\vec{a}$ 的长度表示了“混度”：纯态时 $|\vec{a}| = 1$ ，自旋完全极化；完全混合态时 $|\vec{a}| = 0$ ，自旋完全非极化。

自旋1/2的密度矩阵—Bloch球

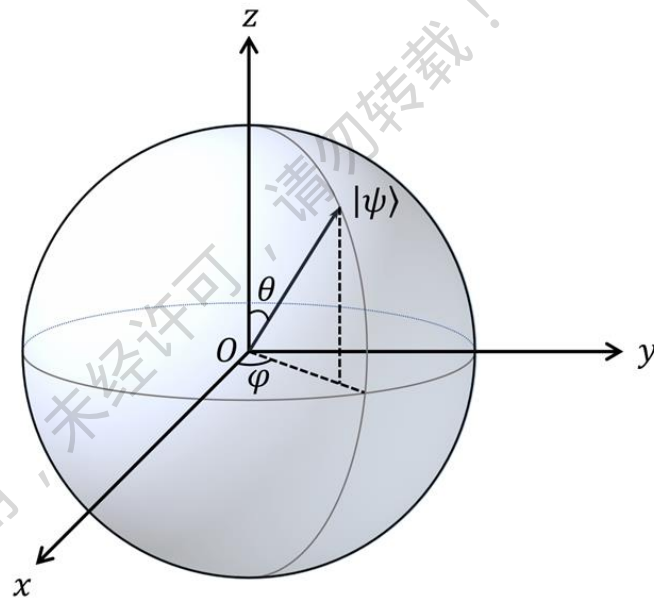
用球面上点 (θ, ϕ) 表示自旋1/2纯态

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

$$\alpha = \cos\frac{\theta}{2}e^{i\delta}, \beta = \sin\frac{\theta}{2}e^{i(\delta+\phi)}$$

x, y, z 轴恰好对应 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 的本征态！

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= e^{i\delta} \left(\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|1\rangle \right) \\ &= \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi}|1\rangle \end{aligned}$$



思考

如何用微分几何描述Bloch球？

自旋1/2的密度矩阵

定理

对于自旋1/2纯态, Bloch矢量 $|\vec{a}| = 1$; 对混合态, $|\vec{a}| < 1$.

证明

由

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & 1 - a_3 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} \text{tr}(\rho^2) &= \frac{1}{4} \text{tr} \begin{pmatrix} (1 + a_3)^2 + a_1^2 + a_2^2 & \text{whatever} \\ \text{whatever} & (1 - a_3)^2 + a_1^2 + a_2^2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (1 + |\vec{a}|^2) = 1 \end{aligned}$$

对于纯态, $\text{tr}(\rho^2) = \text{tr}(\rho) = 1 \Rightarrow |\vec{a}|^2 = 1$, 对应球面上的点

而对混态, $\text{tr}(\rho^2) < 1 \Rightarrow |\vec{a}|^2 < 1$, 对应Bloch球内部的点

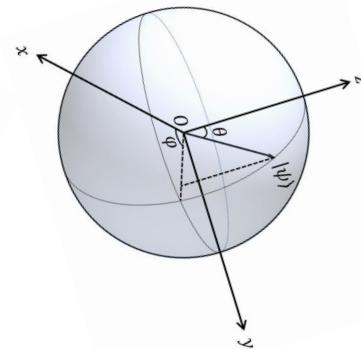
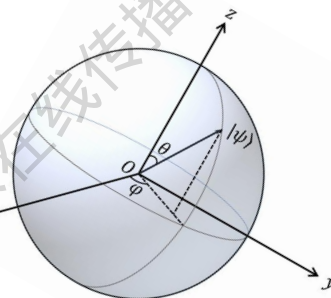
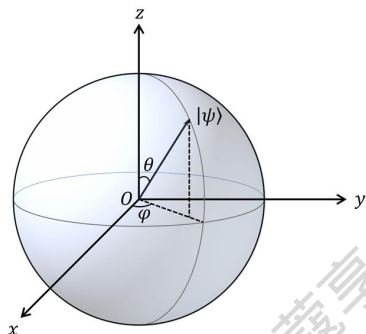
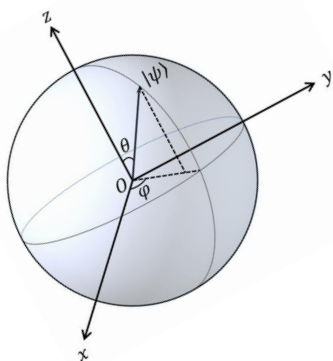
自旋1/2的密度矩阵

说明

完全混合态为 $\vec{a} = 0$

$$\rho_{\text{mix}} = \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) = \frac{1}{2} I$$

不依赖于上态和下态的选取，在任意基矢下都为单位矩阵。



混合态的密度矩阵：应用举例

热平衡态

$\{|n\rangle \mid n = 1, 2, \dots\}$ 是系统的能量本征态，处于热平衡态的系统在 $|n\rangle$: $H|n\rangle = E_n|n\rangle$ 上的几率为

$$P_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$$

其中 $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$, $\beta = \frac{1}{kT}$, T 为温度, k 为玻尔兹曼常数, 能量平均值

$$\bar{H} = \sum_n P_n E_n = \sum_n \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} E_n = \text{tr}(H \rho_T),$$

热平衡态的密度矩阵

$$\rho_T = \sum_n \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n| = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$$

密度矩阵的时间演化

对于纯态

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi| = \langle\psi|H$$

计算密度矩阵的时间导数

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = i\hbar \sum_n p_n (|\dot{\psi}_n\rangle\langle\psi_n| + |\psi_n\rangle\langle\dot{\psi}_n|) = [H, \rho]$$

由此得到了密度矩阵演化的von Neumann方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = [H, \rho]$$

这对应着经典力学中的Liouville方程

考虑一个自旋1/2系统处于方向沿 z 方向的磁场中，场强为 B

$$H = -\mu \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$$

- (1) 系统处于温度为 T 的热态，写下其密度矩阵 ρ_T ，并计算自旋沿 x 方向的极化矢量——沿 x 方向自旋的平均值。
- (2) 在Bloch球上表征(1)中热平衡态随温度的变化（计算Bloch矢量随温度的变化）
- (3) 若加入量子相干性，即

$$\rho_T \rightarrow \rho_{T'} = \rho_T + \begin{bmatrix} 0 & \Delta \\ \Delta & 0 \end{bmatrix},$$

计算系统的有效温度 T' (提示：将 $\rho_{T'}$ 对角化，重新整理成 $\exp(-\beta' H)/Z'$ 的形式，进而得到 T')，并给出系统在什么条件下出现粒子数反转？

混合态密度矩阵刻画量子退相干

实物粒子的双缝实验：如果在双缝后面有一个探测器，可以准确探知粒子是通过哪一条缝，则相干条纹消逝-量子退相干。

量子退相干及其3个解释

玻尔互补原理：

对位置的探测决定了粒子性，波动性消逝了

海森堡不确定性关系：

位置探测得越准对动量扰动越大，波矢变得不确定，干涉条纹消逝。

随机位相描述：测量使得叠加

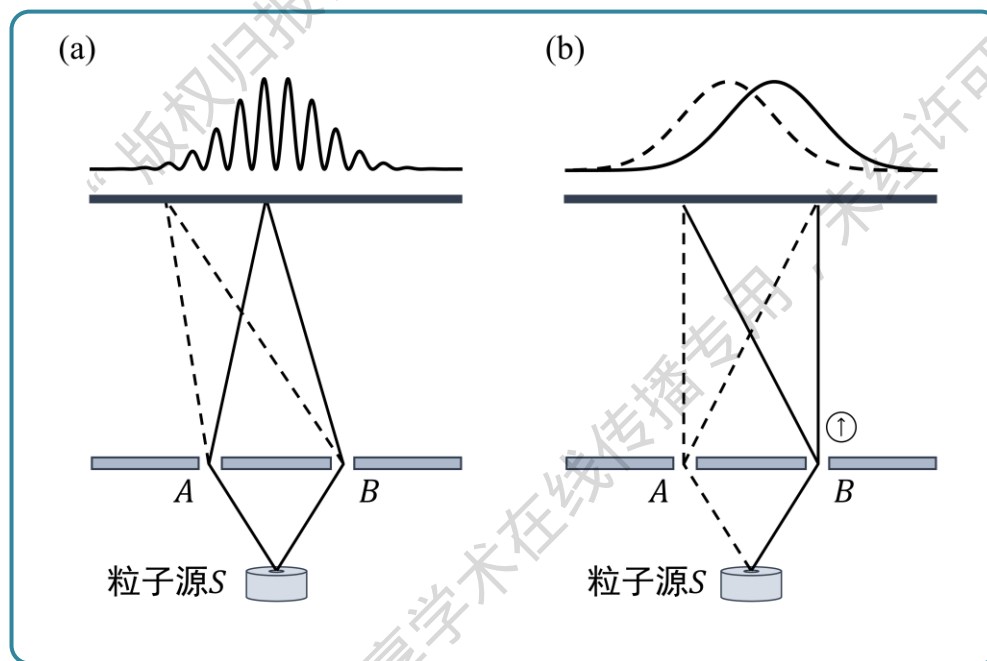
$$|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle \Rightarrow |\psi'\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta e^{i\theta}|\psi_2\rangle$$

θ 为随机位相，其位相因子平均值为零，即 $\langle e^{i\theta} \rangle = 0$

混合态密度矩阵刻画量子退相干

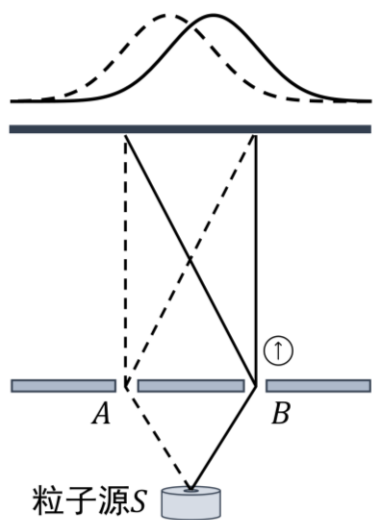
量子退相干的玻尔互补原理诠释

对位置的探测决定了粒子性，波动性消逝了



玻尔量子互补原理：诠释退相干

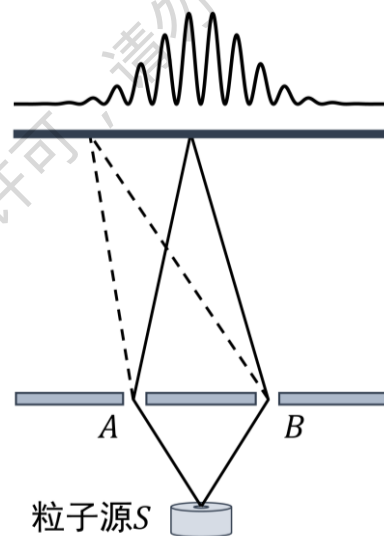
物质具有波动粒子二重属性, 但在同一个实验中二者互相排斥 (一个 ad hoc 解释)



粒子性：确定的
位置和动量

波动性：弥散
于整个空间

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$$



“粒子在测量中产生”



“粒子属性在位置测量中产生”

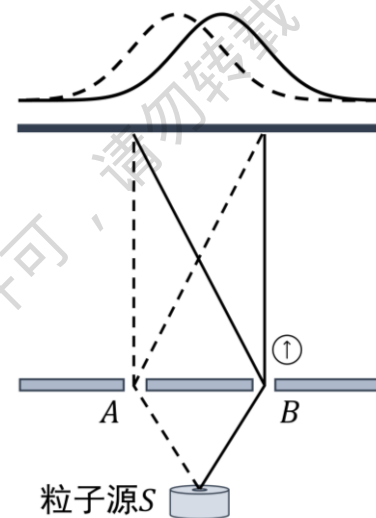
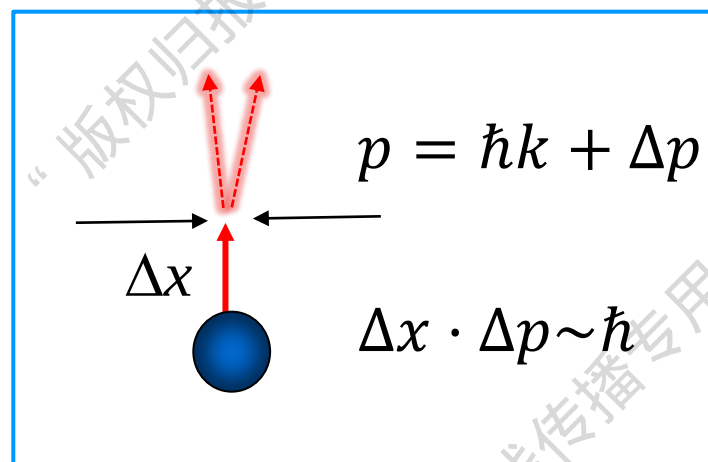
海森堡不确定性关系解释量子退相干



$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$$

位置不确定

动量不确定



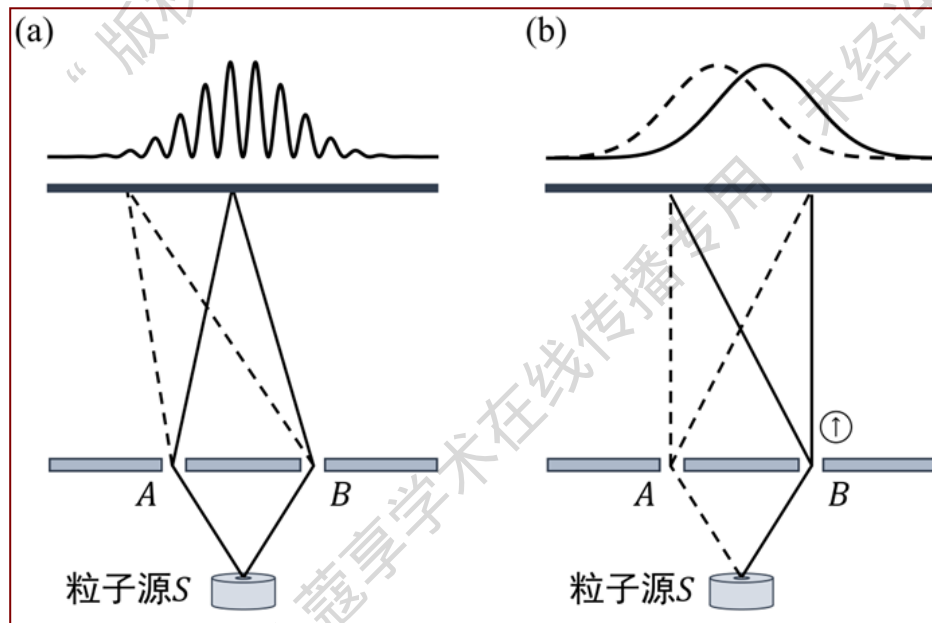
海森堡不确定性关系：位置探测得越准，则对动量扰动越大。从而波矢变得不确定，则干涉条纹消逝。

量子退相干随机位相诠释

随机位相描述：测量使得叠加态

$$|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle \Rightarrow |\psi'\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta e^{i\theta}|\psi_2\rangle$$

θ 为随机位相，其位相因子平均值为零，即 $\langle e^{i\theta} \rangle = 0$



量子退相干随机位相密度矩阵描述

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \rightarrow \rho' = |\psi'\rangle\langle\psi'|$$

$$\rho' = |\alpha|^2 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\beta|^2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \beta^* \alpha |\psi_1\rangle\langle\psi_2| e^{-i\theta} + \text{h. c.}$$

对A求平均:

$$\begin{aligned} \bar{A}' = \text{tr}(\rho' A) &= |\alpha|^2 \langle\psi_1| A |\psi_1\rangle + |\beta|^2 \langle\psi_2| A |\psi_2\rangle \\ &+ \beta^* \alpha e^{-i\theta} \langle\psi_2| A |\psi_1\rangle + \text{c. c.} \end{aligned}$$

显然在纯态上, A 非对角元对期望值有贡献。平均值 $\bar{A}$ 还包含 A 的非对角元。

混合态的密度矩阵计算期望值

整体期望值包含对 $\bar{A}'$ 中随机变量进一步求平均

$$\begin{aligned}\langle \bar{A}' \rangle &= |\alpha|^2 \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle + |\beta|^2 \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle + \beta^* \alpha \langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle \langle e^{i\theta} \rangle + \text{c. c.} \\ &= |\alpha|^2 \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle + |\beta|^2 \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle\end{aligned}$$

对密度矩阵直接平均

$$\bar{\rho}' = \langle \rho' \rangle = |\alpha|^2 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + |\beta|^2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2|$$

然后计算 A 的平均值

$$\text{tr}(\bar{\rho}' A) = |\alpha|^2 \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle + |\beta|^2 \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle$$

密度矩阵非对角元消逝的现象对应量子退相干
它是今天研究的量子计算物理实现的主要障碍

1.6 谐振子量子化的代数方法

谐振子量子化的代数方法

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad [x, p] = i\hbar$$

定义产生、消灭算子

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right), \quad a^\dagger = (a)^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right)$$

$$[a, a^\dagger] = 1.$$

坐标和动量可以反过来由产生消灭算子表达

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger), \quad p = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a - a^\dagger).$$

谐振子量子化的代数方法

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{m\hbar\omega}{2} (a - a^\dagger)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} (a + a^\dagger)^2$$
$$= \frac{1}{2} \hbar\omega (a^\dagger a + a a^\dagger)$$

再定义粒子数激发算子： $\hat{n} = a^\dagger a$

$$H = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right)$$

谐振子本征态

先设存在一个状态 $|0\rangle$ 是 a 的零值本征态，后面证明之

$$a|0\rangle = 0$$

定义Fock态

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{\dagger n} |0\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

证明谐振子有Fock表示：

$$\begin{cases} a^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle & (1) \\ a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle & (2) \\ \hat{n}|n\rangle = n|n\rangle & (3) \end{cases}$$

谐振子本征态

证明

利用 $[a, a^\dagger] = 1$ 和归纳法证明

$$[\hat{n}, a^{\dagger n}] = n a^{\dagger n}$$

当 $n = 1$, $[\hat{n}, a^\dagger] = a^\dagger$

假设 n 时成立, $n + 1$ 时

$$\begin{aligned} [\hat{n}, a^{\dagger n+1}] &= [\hat{n}, a^{\dagger n} \cdot a^\dagger] \\ &= [\hat{n}, a^{\dagger n}] a^\dagger + a^{\dagger n} [\hat{n}, a^\dagger] \\ &= (n + 1) a^{\dagger n+1} \end{aligned}$$

故 $n + 1$ 时也成立。

谐振子本征态

由 $[\hat{n}, a^{\dagger n}] = na^{\dagger n}, \hat{n}a^{\dagger n} = na^{\dagger n} + a^{\dagger n}\hat{n}$

$$\hat{n}|n\rangle = \frac{\hat{n}a^{\dagger n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle = n|n\rangle + \frac{a^{\dagger n}\hat{n}|0\rangle}{\sqrt{n!}} = n|n\rangle$$

其中用到了： $\hat{n}|0\rangle = a^{\dagger}a|0\rangle = 0$

谐振子的本征方程

量子化能量

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

谐振子本征态

练习题

① 根据Fock态定义证明：

$$a^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

② 用归纳法证明：

$$[a, a^{\dagger n}] = na^{\dagger n-1}$$

从而证明：

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

证明谐振子基态的存在

在坐标表象中 $a|0\rangle = 0$ 可表达为 $(a \propto x + \frac{ip}{m\omega})$

$$\langle x | x + \frac{ip}{m\omega} | 0 \rangle = 0 \quad \longrightarrow$$

$\psi_0(x) = \langle x | 0 \rangle$ = 基态波函数

归一化的波函数:

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

$$\frac{d}{dx} \psi_0(x) = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0(x)$$

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} x dx$$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

谐振子本征函数的坐标表示

第 n 个激发态可以表示为

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|a^{\dagger n}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2} \langle x|\left(x - \frac{ip}{m\omega}\right)^n|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2} \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx}\right)^n \psi_0(x)\end{aligned}$$

定义

$$\xi = (m\omega/\hbar)^{1/2} x$$

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!} 2^n} \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)^n \left[\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2}\right] \\ &= \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!} 2^n} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left[e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2/2}\right]^n e^{-\xi^2/2}\end{aligned}$$

谐振子本征函数的坐标表示

考虑对任意函数 $\psi(x)$

$$e^{\xi^2/2} \left[\frac{d}{d\xi} (e^{-\xi^2/2}) \psi(x) \right] = \left(\frac{d}{d\xi} - \xi \right) \psi(x)$$

从而

$$\begin{aligned} \psi_n(\xi) &= \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!} 2^n} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{\xi^2/2} \left[\frac{d}{d\xi} \right]^n e^{-\xi^2/2} \\ &\equiv \frac{1}{\sqrt{n!} 2^n} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \end{aligned}$$

其中 $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2/2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2}$ 是厄米多项式。

相干态 (Coherent State)

相干态 $|\alpha\rangle$ 定义为消灭算子的本征态

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

设 $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle$

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha C_n |n\rangle$$

$$\Rightarrow C_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} C_n$$

$$\Rightarrow C_n = \frac{(\alpha)^n}{\sqrt{n!}} C_0 \left\{ \begin{array}{l} \Rightarrow C_0 = \exp(-|\alpha|^2/2) \\ \langle \alpha | \alpha \rangle = 1 \end{array} \right.$$

相干态 (Coherent State)

相干态的Fock表示

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

定义

相干态的生成算子

$$D(\alpha) = \exp(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)$$

$$|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle$$

相干态 (Coherent State)

利用Baker-Hausdoff公式 (当 $[A, B] = C, [C, A] = 0 = [C, B]$)

$$e^{A+B} = e^{-[A,B]/2} e^A e^B$$

$$D(\alpha) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a} = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^\dagger} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha^*)^n}{n!} a^n$$

利用

$$e^{-A} B e^A = B - [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots,$$

得到

$$D^{-1}(\alpha) a D(\alpha) = a + \alpha$$

相干态的坐标表示

当 α 为实数，相干态的生成算子 $D(\alpha)$ 是坐标表示给出坐标空间上的平移算子

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right), \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right)$$

$$\alpha a^\dagger - \alpha^* a = -\sqrt{\frac{2}{\hbar m\omega}} \alpha ip$$

$$D(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} qp} \quad q = \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$$

可以证明： $D(\alpha)\psi(x) = \psi(x - q)$

相干态的坐标表示

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}qp} |x\rangle &= \int |p\rangle \langle p| e^{-\frac{i}{\hbar}qp} |x\rangle dp = \int |p\rangle \langle p|x\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}qp} dp \\ &= \int |p\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(x+q)p} dp = \int |p\rangle \langle p|x+q\rangle dp \\ &= |x+q\rangle \\ \langle p|x\rangle &= (\langle x|p\rangle)^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \end{aligned}$$

$$D(\alpha)\varphi(x) = \langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}qp}|\varphi\rangle = \varphi(x-q).$$

$D(\alpha)$ 代表坐标空间上波函数的平移算符

平移的距离: $q = \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$

谐振子相干态的物理意义 (1)

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle \propto e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

代表一个中心在原点的高斯波包:

当 α 为实数时, 相干态 $|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle$ 代表一个中心被移动了距离 q 的高斯波包

$$\langle x|\alpha\rangle = \langle x|D(\alpha)|0\rangle$$

$$= \psi_0(x - q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega(x-q)^2}{2\hbar}}$$

$$q = \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$$

谐振子相干态的物理意义 (2)

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$$

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha + \alpha^*),$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(\alpha^2 + \alpha^{*2} + 2\alpha\alpha^* + 1),$$

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}.$$

$$p = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a - a^\dagger)$$

$$\langle p \rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\alpha - \alpha^*),$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}(1 + 2\alpha\alpha^* - \alpha^2 - \alpha^{*2}),$$

$$(\Delta p)^2 = \frac{\hbar m\omega}{2}.$$

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2},$$

即相干态满足最小的不确定性关系

谐振子相干态的物理意义 (2)

思考题

是否不确定关系最小态都是相干态？

这个问题的思考导致了压缩态概念的诞生。

参考文献：H. P. Yuen, Phys. Rev. A 13, 2226 (1976)

薛定谔的相干态

1926年薛定谔提出了波动力学的基本方程，但它可否描述一个质点的运动？如果用一个波包来描述它，但波包的扩散行为（见下页习题）与直观物理现象相矛盾，因为一个质点是不会扩散的。薛定谔发现，在谐振子势中，一个特殊叠加出来波包——相干态是不扩散的。这样一个波包的不确定性最小，其中心运动代表了谐振子的经典运动。1960年代，Glauber等人在寻求相干性最好的光场状态，使得原子探测器的效率最高，这样状态正好也是相干态，它正好描述了刚刚发现的激光现象。

波包的扩散行为

练习题

对于自由粒子 $H = p^2/2m$ ，取其初态为高斯波包

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4}} e^{ip_0(x-x_0)} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2}},$$

计算波包宽度随时间的变化，说明波包的扩散行为.

相干态的物理意义：时间演化

对于哈密顿量为 $H = \hbar\omega a^\dagger a$ 的谐振子

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(0)\rangle$$

若 $|\psi(0)\rangle = |\alpha\rangle$ ，则 $|\psi(t)\rangle = e^{-ia^\dagger a \omega t} |\alpha\rangle = |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$

$$e^{-i\omega t a^\dagger a} |\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t \hat{n}} |n\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

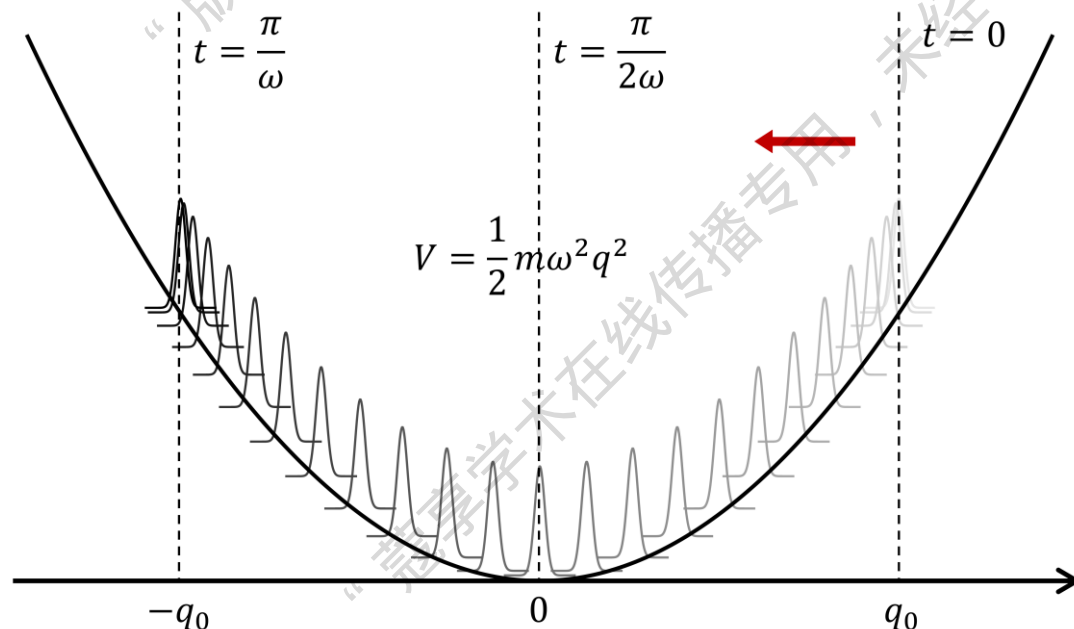
$$|\psi(t)\rangle = e^{-ia^\dagger a \omega t} |\alpha\rangle = |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$$

相干态的物理意义：时间演化

α 为实数时

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \langle x | e^{-i\omega t a^\dagger a} | \alpha \rangle \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{\omega m}{\hbar} (q - q_0 \cos \omega t)^2 \right],\end{aligned}$$

它正好代表一个质心做简谐振动的波包，而波包不扩散。



思考题

相干态对应的高斯波包不随时间扩散，且在阱里做简谐振动。对于一个任意宽度的高斯波包，思考其在谐振子势中是如何运动的。

补充学习材料：量子耗散系统

第 29 卷 第 8 期
1980 年 8 月

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 29, No. 8
Aug., 1980



阻尼谐振子的量子力学处理

彭 桓 武

(中国科学院理论物理研究所)

1979 年 11 月 28 日收到

提 要

本文假设量子力学中也允许引入阻尼力的描述, 给出对与速度成正比的阻尼系统用正则化变换的处理方法, 以一维谐振子为例作了具体计算. 结果与经典力学比较表明是合理的.

用经典力学处理多自由度系统时, 常唯象地引入阻尼力以描述能量从某特定自由度向其它多个自由度的耗散. 未知在量子力学中是否根本不允许这种描述. 至少在用单自由度近似处理多自由度问题时, 类似的描述似乎值得注意. 姑且允许这种描述并设阻尼

彭桓武先生关于量子开系统的研究

布朗运动：
随机力驱动的耗散系统或量子开系统，

$$M\ddot{q}(t) = -\gamma\dot{q}(t) - \frac{\partial V(q)}{\partial q} + f(t)$$

$$[q(t), \dot{q}(t)] = \frac{i\hbar}{M} e^{-\gamma t/M} \equiv i\eta(t)$$



$$[x, p] = i\hbar$$

彭桓武先生关于量子开系统的研究

在 $[x, \dot{x}] = i\eta(t)$ 中定义正则坐标和动量的方式并不唯一。一般地, 对于

$$\begin{aligned} q(t) &= xf(t), \\ p(t) &= i\dot{x}g(t)/\hbar, \end{aligned}$$

只要 $f(t)g(t) = \eta(t)$, 就有 $[q, p] = i\hbar$.

这样的 $\{f(t), g(t)\}$ 的选取称作一个“规范”。

“彭桓武规范” :

$$\begin{cases} x(t) = q(t) e^{\gamma t/2M} \\ p(t) = \left[M\dot{q}(t) + \frac{1}{2}\gamma q(t) \right] e^{\gamma t/2M} \end{cases}$$

彭氏哈密顿量的优点与适用条件

彭桓武有效哈密顿量

$$H_e(t) = \frac{p^2}{2M} + e^{\gamma t/M} V(x e^{-\gamma t/2M}) - \frac{\gamma^2}{8M} x^2 - f(t) x \cdot e^{\gamma t/2M}$$

不考虑布朗运动，谐振子的彭氏哈密顿量是时间无关的，而Caldira-Kani (CK)时间相关哈密顿量

适用条件：外场不能是布朗随机力

布朗随机力 $[f(t), x] \neq 0$

彭先生当时并没有意识到这个适用条件，别人指出后，他非常重视。对此，他有精辟的评价，折射出他高尚严谨的学术品格。

思考题

- 1、当 $f(t)$ 与 x 不对易时，如何量子化布朗运动方程
- 2、对布朗运动的随机性描述主要体现在耗散-涨落定理

$$\langle f(t) \rangle = 0, \langle f(t)f(t') \rangle \propto \gamma \delta(t - t')$$

有耗散时 $\gamma \neq 0$ ，则随机关联 $\langle f(t)f(t') \rangle \neq 0$

如何用量子力学描述这个定理？

进一步阅读：

1. Evolution of the wave-function in a dissipative system
L.H. Yu and C. P. Sun, Phys. Rev. A 49, 592 (1994)
2. Exact dynamics of a quantum dissipative system in a constant external-field
C. P. Sun and L.H. Yu, Phys. Rev. A 51, 1845 (1995)

补充学习材料：量子测量问题

量子测量假设-量子力学哥本哈根诠释



冯·诺依曼，1929

被测量系统处于量子态

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad (A|n\rangle = a_n|n\rangle)$$

测量力学量 A 一次, 得到结果 a_n

一次测量确切得到 a_n 后态变为:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \rightarrow |n\rangle$$

波包塌缩

wave packet collapse ,
measurement projection

量子力学中的演化: 么正 (U过程)
投影测量 $|\psi\rangle \rightarrow |n\rangle$: 非么正 (R过程)

波包塌缩的单粒子图象

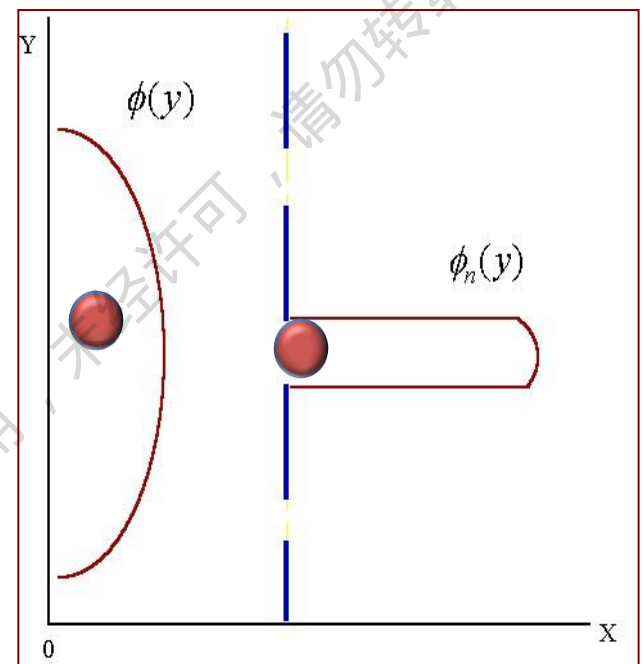
例子：测量位置

$$\phi(y) = \langle y | \psi \rangle$$

测量后波包变窄为

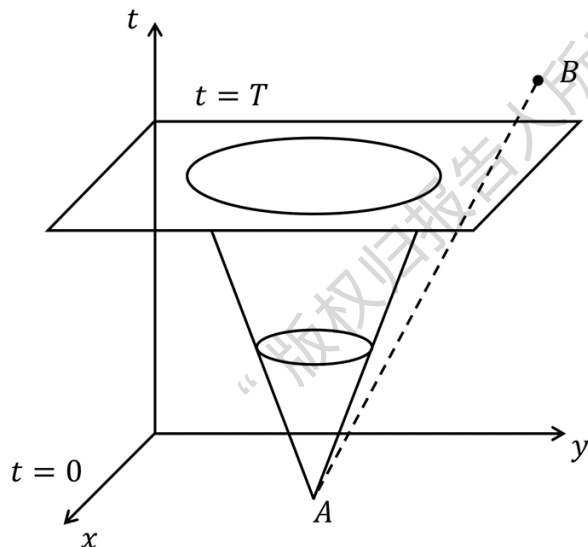
$$\phi_n(y) = \begin{cases} N_n \phi(y), & na \leq y < (n+1)a \\ 0, & na \geq y \text{ or } y \geq (n+1)a \end{cases}$$

$$N_n^{-1} = \sqrt{\int_{na}^{(n+1)a} |\psi(y)|^2 dy}$$



波包塌缩与狭义相对论有表观矛盾

“非定域性违背狭义相对论”暗含了投影假设



$$\phi(0) = \delta(x) \approx \sum_p \exp(ipx)$$

上测量动量，“塌缩”到

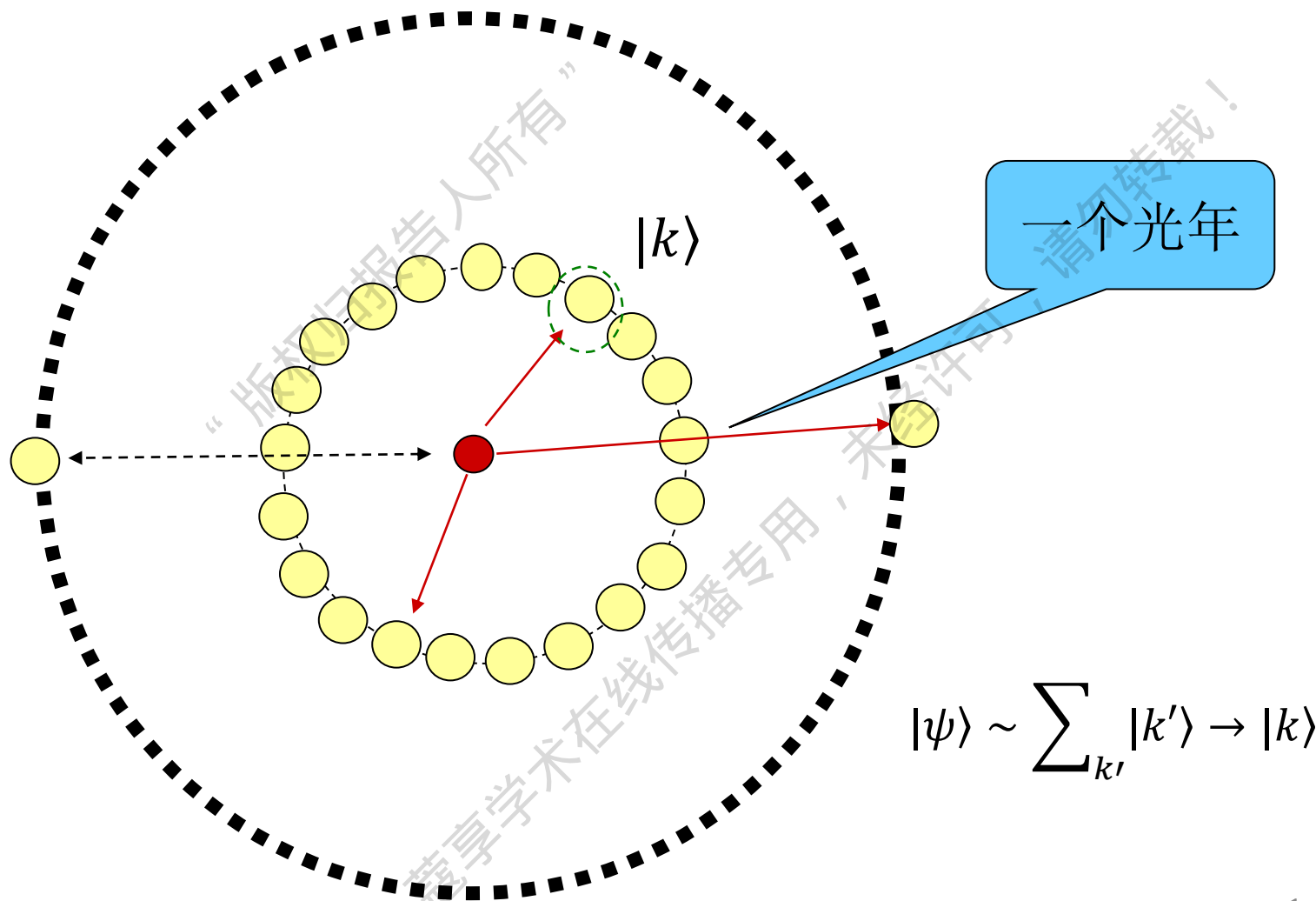
$$\phi(t) = \exp(ipx)$$

上使得类空关联出现

$$G^{(1)}(A, B) = \rho(A, B) = \langle \psi^+(A) \psi(B) \rangle \neq 0, \quad |A - B| > ct$$

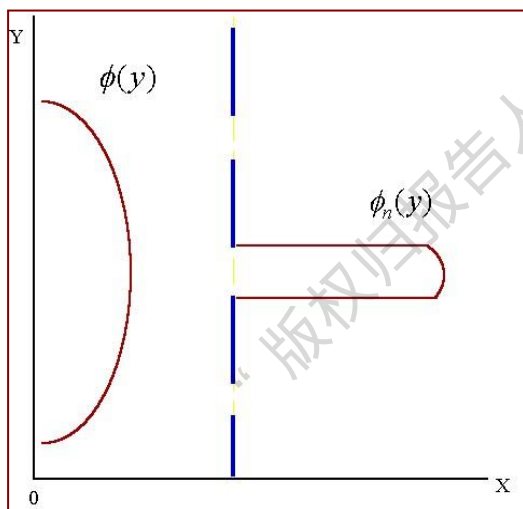
事实上，“Bell不等式违背”意味着非定域性存在，但没有超光速！

波包塌缩：爱因斯坦“光子球”

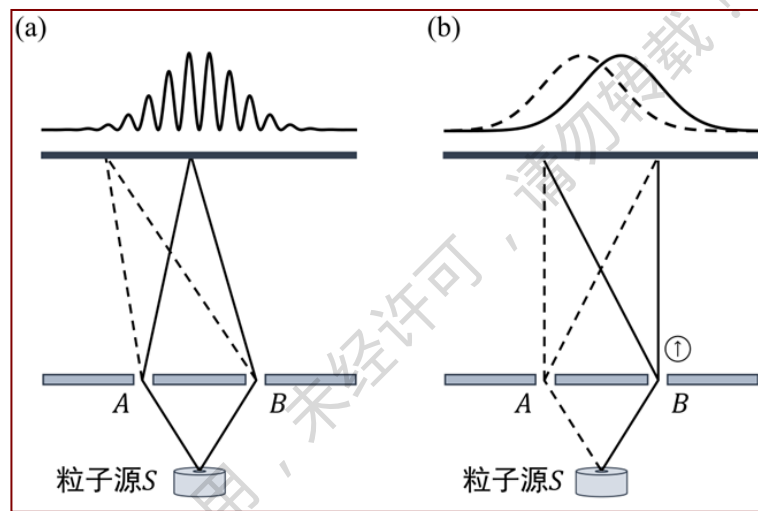


实验：无法区分波包塌缩和退相干

“波”到“粒子”的跃变



中子的双缝干涉



$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \rightarrow |n\rangle$$

$$|\psi\rangle\langle\psi| \rightarrow \sum_n |c_n|^2 |n\rangle\langle n|$$

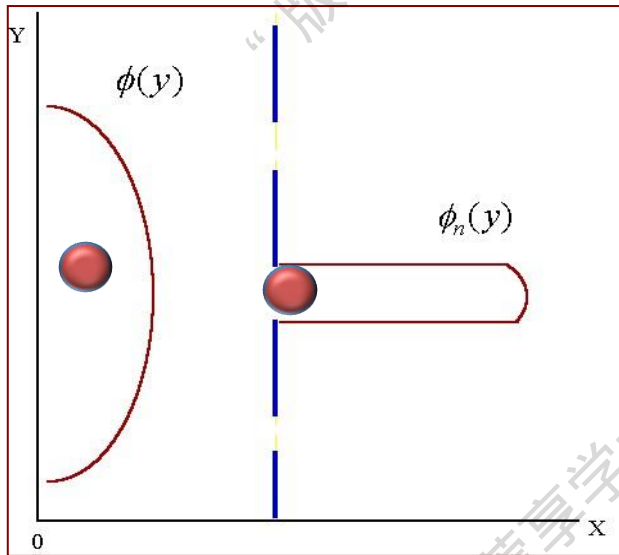
波包塌缩和退相干均导致相同重复测量结果

波包塌缩起因：重复测量给出相同结果

玻恩几率定义的测量：波包塌缩 (WPC)

$$|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle \rightarrow |n\rangle, A|n\rangle = a_n |n\rangle$$

紧接着A的第二次测量得到相同结果



重复测量是否给出
相同结果依赖于量
子测量的定义！！

退相干导致重复测量结果相同

期望值假设定义的测量：退相干 (Decoherence)

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \rightarrow \rho_d = \sum |c_m|^2 |m\rangle\langle m|$$

第一次测量：

$$\bar{A} = \text{tr}(\rho A) = \sum_m \langle m | \rho A | m \rangle = \sum_m a_m |c_m|^2$$

第二次重复测A也得到相同结果

$$\bar{A}' = \text{tr}(\rho_d A) = \text{tr} \left(\sum_m |c_m|^2 |m\rangle\langle m| A \right) = \sum_m a_m |c_m|^2$$

两种量子测量定义的等价性与重复测量结果趋同

玻恩几率定义的单粒子测量：
在 $|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle$ 上，一旦测得的结果是 A 的本征值之一 a_n 的几率为 $P_n = |C_n|^2$

重复测量得到结果仍然确定是 a_n
对应概率不变

期望值假设定义的系综测量
 $\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_n a_n |C_n|^2$

重复测 A 得到相同结果 $\sum_m a_m |c_m|^2$ ：
 $\bar{A}' = \text{tr}(\rho_d A) = \bar{A}$

逻辑图的可交换，意味着波包塌缩和退相干都可以无差别地诠释实验，从而证明可实验观察重复性，无法保证波包塌缩的唯一正确性！！

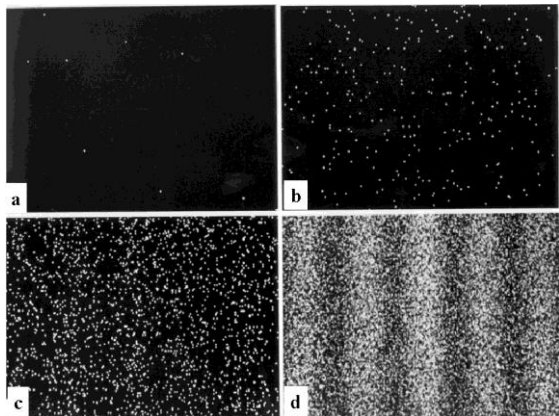
量子测量的物理：系统诠释或几率诠释？

爱因斯坦的“第一观点”：“预言的是事件出现的频率”

“函数无论如何也不能描述单个粒子的状态，它涉及了多个系统，从统计力学角度就是系统”

《爱因斯坦文集》第一集

“玻恩假说”：“预言的是单个体系测量结果的几率”



玻恩观点的演变：

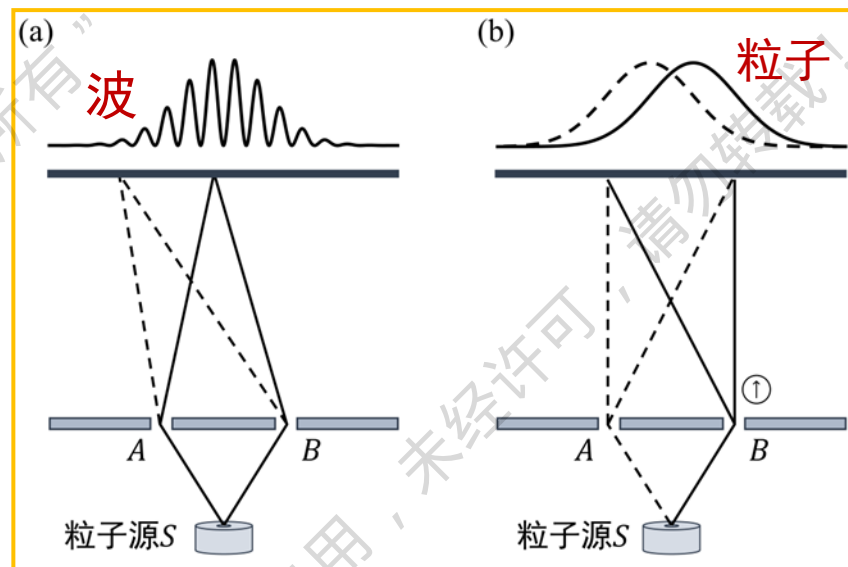
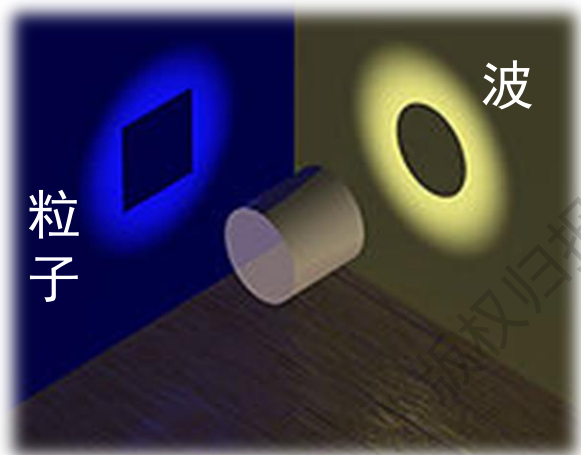
“量子描述...并不回答...某个粒子在特定时刻的位置...回答的只是提出的统计问题” “分歧不是实质性的，只是语言上的”

电子衍射实验涉及到稳定的系统：
时间平均=系统平均，因而不能区分二者

量子力学重启老生常谈的哲学问题讨论

波粒二象性

Wave-Particle Duality



有人认为，量子力学的基础是“物质世界和意识不可分开” “客观世界很有可能并不存在！”

<https://www.23yy.com/4830000/4829790.shtml>

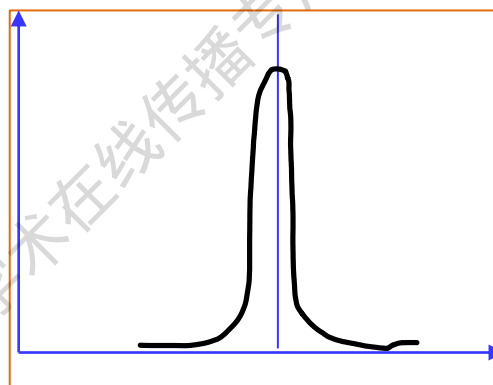
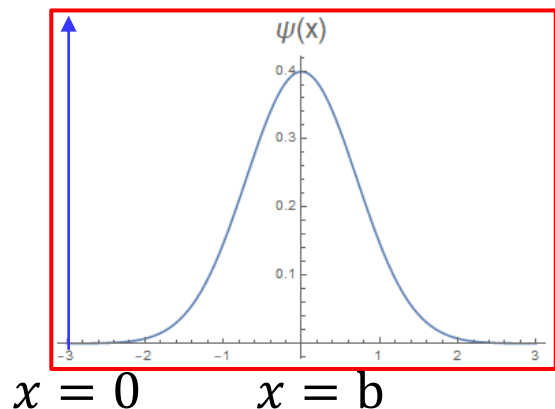
基于哥本哈根诠释一波包塌缩假设的误解

有人说：“在量子物理中，这种没有确定的状态，一被观测，也就是人的意识一参与，基本粒子的波函数就开始塌缩了，电子就会出现在个确定的位置，就出现某种**客观实在**，所以客观实在产生于意识参与的测量”。

$$x|x\rangle = x|x\rangle \quad |\psi\rangle = \sum \psi(x)|x\rangle \rightarrow |x=b\rangle$$

测量坐标“塌缩”到

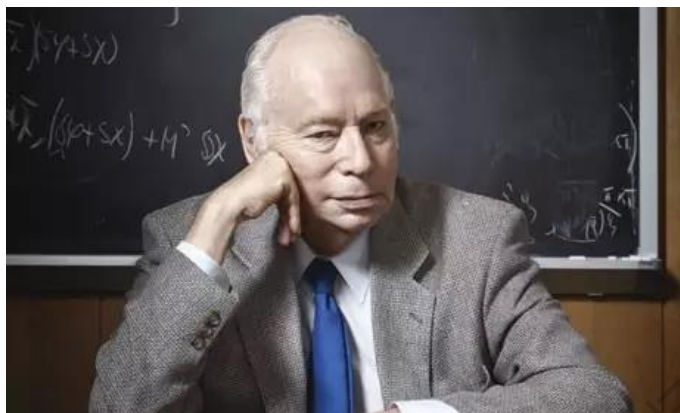
$$\varphi(x) = \delta(x-b)$$



客观实在
Objective Reality

粒子性：确定
的位置和动量

薛定谔、温伯格、盖尔曼对哥本哈根诠释的批评



Steven Weinberg, *Physics Today*, Nov. 2005, p. 31

“量子经典诠释的玻尔版本有很大的瑕疵。…哥本哈根诠释经典地处理观察者与测量这些操作。这种处理方法肯定的不对：观察者与他们的仪器也得遵守同样的量子力学规则…”

温伯格：我为什么对量子力学不满意 2016年11月23日：《科学美国人》



我确实需要给你彻底洗脑……你轻率地常常宣称哥本哈根解释实际上已经被普遍接受，毫无保留地这样宣称，甚至是在一群外行人面前——他们完全在你的掌握之中。这已经是道德底线了……你真的如此确信人类很快就会屈从于你的愚蠢吗？

作为一位在仅仅几年后就接受了哥本哈根解释的教导，并且直到很久之后才意识到这种愚蠢的人，我发现薛定谔在1960年的这些话直击我心！

M. Gell-Mann有完全类似的批评：见第11章和他的传记

我的观点：量子力学诠释问题



孙昌璞：“对待量子力学诠释严肃的科学态度应该是首先厘清量子力学诠释中哪一部分观念导致了基本应用方面的“高歌猛进”，哪一部分观念导致了理解诠释方面的“莫衷一是”。对量子力学诠释不分清楚彼此、逻辑上倒因为果的情绪化评价，会在概念上混淆是非，误导量子理论与技术的真正创新。无怪乎，有人以“量子”的名义为认识论中“意识可以脱离物质”的明显错误而张目，其根源就是每个人心目中有不同的量子力学诠释”。

哥本哈根诠释前后的量子力学

- 1、系统的量子态用满足薛定谔方程的波函数来表述（薛定谔）。
可观察量用服从对易关系的厄米算符表示
（海森堡、玻恩、约当，狄拉克）
- 2、量子系统的描述是概率性的。一个事件的发生概率是波函数的绝对值平方（玻恩），由此推导出不确定性原理（海森堡）

~~3、物质具有波粒二象性：根据互补原理（Complementarity principle），同一个实验可以展示出物质的粒子行为或波动行为，但不能同时展示（玻尔，海森堡）~~

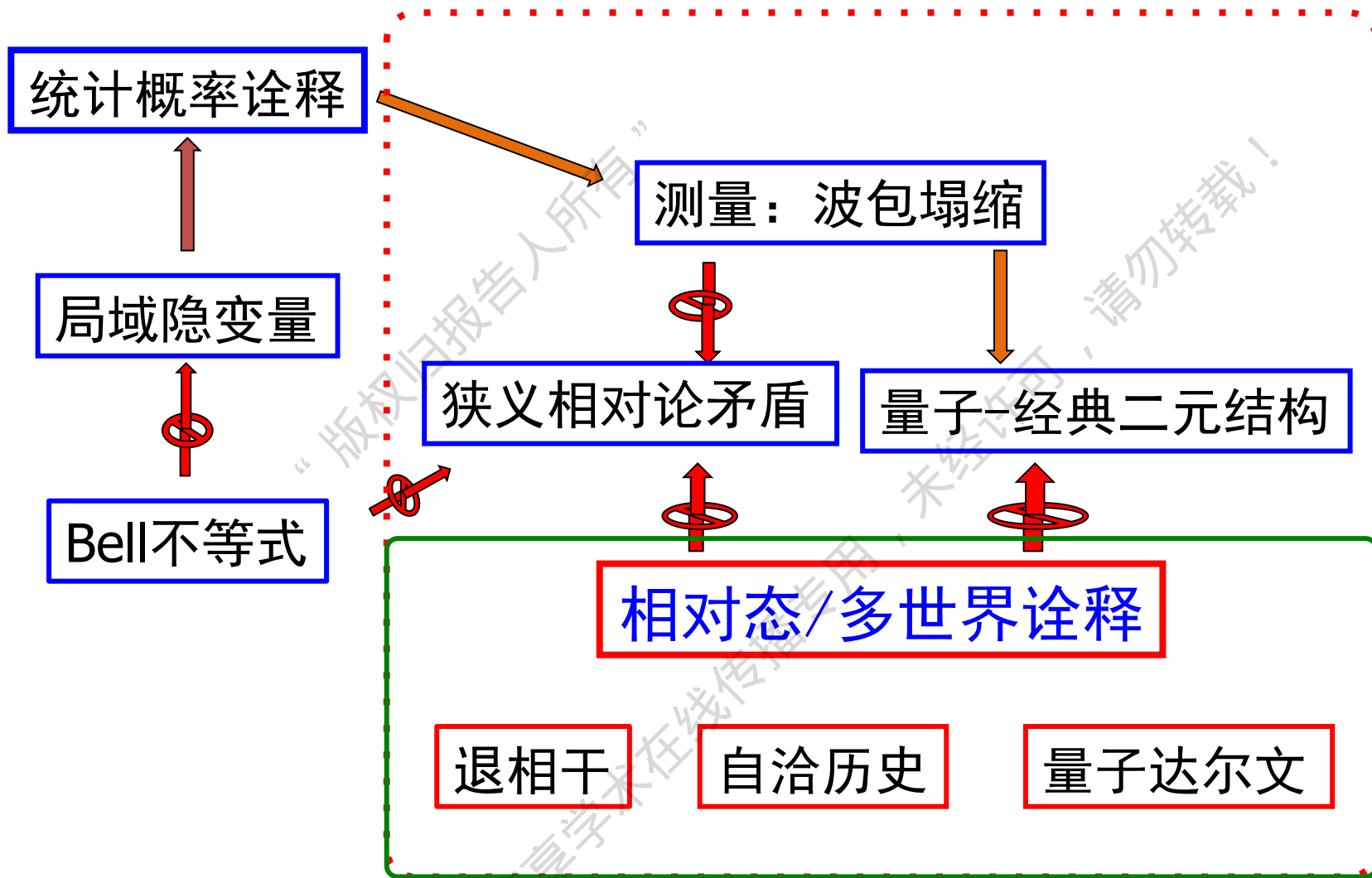
~~4、测量仪器必须是经典的，它的数学描述是波包塌缩（玻尔\冯·诺依曼）~~

哥本哈根诠释前后的量子力学

- 1、系统的量子态用满足薛定谔方程的波函数来表述（薛定谔）。
可观察量用服从对易关系的厄米算符表示
（海森堡、玻恩、约当，狄拉克）
- 2、量子系统的描述是概率性的。一个事件的发生概率是波函数的绝对值平方（玻恩），由此推导出不确定性原理（海森堡）

无需“投影测量”或哥本哈根诠释的量子力学
量子力学的最小概念框架
预言BELL不等式描述的非定域现实

哥本哈根诠释引发所谓的“量子测量问题”



补充学习材料：
从索末菲量子化条件到基本对易关系

索末菲量子化条件

$$J = \oint p dq = \int_0^T p \dot{q} dt = nh$$

按傅里叶积分，

$$q(t) = \sum_{-\infty}^{+\infty} q_n e^{in\omega t}$$

$$p = \sum_{-\infty}^{+\infty} p_n e^{in\omega t}, \quad \dot{q} = i\omega \sum_{-\infty}^{+\infty} m q_m e^{im\omega t}$$

作用量积分重新写为

$$J = i\omega \sum_n \sum_m \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} p_n q_m m e^{i(n+m)\omega t} dt$$

$$= i\omega \sum_n \sum_k \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} p_n q_{k-n} (k-n) e^{ik\omega t} dt = -2\pi i \sum_{\tau} \tau p_{\tau} q_{-\tau}$$

量子化：基本对易关系

$$1 = \frac{\partial J}{\partial J} = -2\pi i \sum_{\tau} \tau \frac{\partial}{\partial J} (p_{\tau} q_{-\tau}) \quad J = nh$$

$$\frac{\partial}{\partial J} (p_{\tau} q_{-\tau}) = \frac{\Delta}{\tau h} (p_{n,n-\tau} q_{n-\tau,n})$$

$$= \frac{1}{\tau h} (p_{n+\tau,n} q_{n,n+\tau} - p_{n,n-\tau} q_{n-\tau,n})$$

$$\sum_{\tau} (p_{n,n-\tau} q_{n-\tau,n} - q_{n,n+\tau} p_{n+\tau,n}) = i\hbar$$

$$(pq - qp)_{nm} = i\hbar$$

阅读材料1.4 从物理光学光波到几何光学光线

波动方程：波长、频率与波矢量

在物理光学中，介质中的电磁波的方程为

$$\left(\nabla^2 - \epsilon \mu \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) u(r, t) = 0$$

电磁场 u 为坐标 $\mathbf{r} = (x, y, z)$ 及时间 t 之函数， ϵ 及 μ 为坐标 r 的函数

用波速（相速） v ，波矢 k ，波长 λ 及频率 ω 描述电磁波，它们的关系为

$$v^2 = \frac{1}{\mu\epsilon}, \quad k^2 = \left(\frac{2\pi}{\lambda} \right)^2 = \left(\frac{\omega}{v} \right)^2$$

波的相位函数

设电磁波为

$$u(r, t) = u(r)e^{-i\omega t}$$

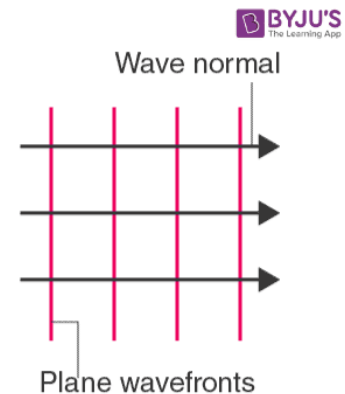
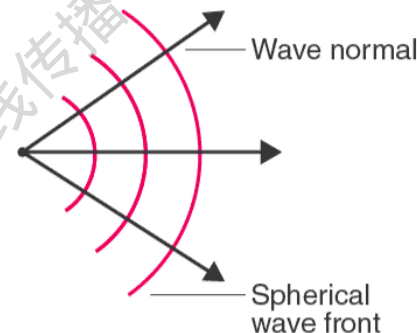
拉普拉斯方程

$$(\nabla^2 + k^2)u(r) = 0$$

设实函数 $S(r)$ 正比于波相位

$$u(r) = A(r)e^{ik_0 S(r)}$$

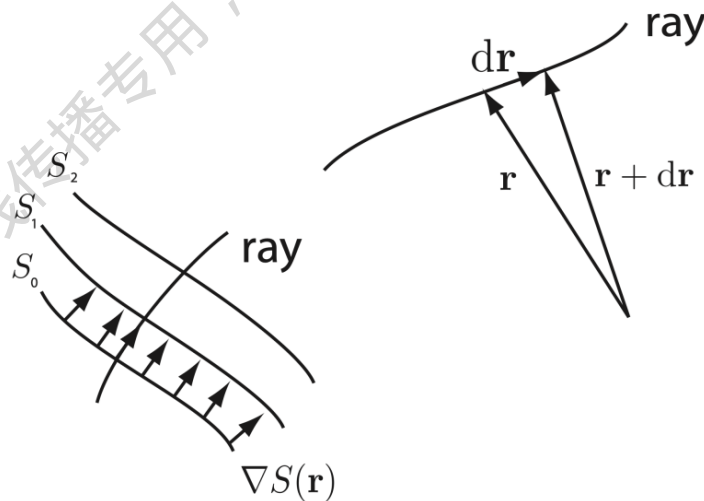
$$\text{其中 } k_0 = \frac{2\pi}{\lambda} = \omega\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$$



波的程函方程

$$\begin{aligned} & -k_0^2 \left\{ (\nabla S)^2 - \left(\frac{k}{k_0} \right)^2 \right\} u(r) \\ & + 2ik_0 \left\{ \frac{1}{2} \nabla^2 S + (\nabla \ln A) \cdot (\nabla S) \right\} u(r) \\ & + \{ (\nabla \ln A)^2 + \nabla^2 \ln A \} u(r) = 0 \end{aligned}$$

$S(r)$ 亦称光程函数—Eikonal



波的程函方程

波长 λ_0 趋近于零, $k_0 \rightarrow \infty$, 则实数及虚数部分, 分别满足

Eikonal 方程

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2 - n^2(r) = 0$$
$$(\nabla \ln A) \cdot (\nabla S) + \frac{1}{2} \nabla^2 S = 0$$

其中已经定义折射率

$$n(r) = \frac{k}{k_0} = \sqrt{\frac{\mu\epsilon}{\mu_0\epsilon_0}}$$

物理光学中的光线

考虑由下式定义的等相位面—所谓波面 (**wave front**)

$$S(x, y, z) = S_1 = \text{常数}$$

面 $S = S_1$ 上任何一矢量 $d\mathbf{s} = (dx, dy, dz)$, 皆符合下方程式

$$\nabla S \cdot d\mathbf{s} = \frac{\partial S}{\partial x} dx + \frac{\partial S}{\partial y} dy + \frac{\partial S}{\partial z} dz = 0$$

此方程式表明, S 之梯度 ∇S 与 $S = S_1$ 垂直;
由于 $S = S_1$ 为波面, ∇S 则是光线 (**ray**)。

物理光学中的光线

- 如果介质是均匀的，即 $n(r) = \text{常数}$ ，则波面为平行的平面，光线是与波面垂直的直线，即

$$S = n(\alpha, \beta, \lambda)$$

α, β, λ 为 $S = S_1$ 面的法线的方向余弦。

- 一奇点（singular point）的最简单解为

$$S = nr,$$

$$\nabla^2 S = \frac{2n}{r} \mathbf{r}$$

- 且 $A(r) = a/r$, $a = \text{常数}$ 。因 $u(r)$ 代表一球面波

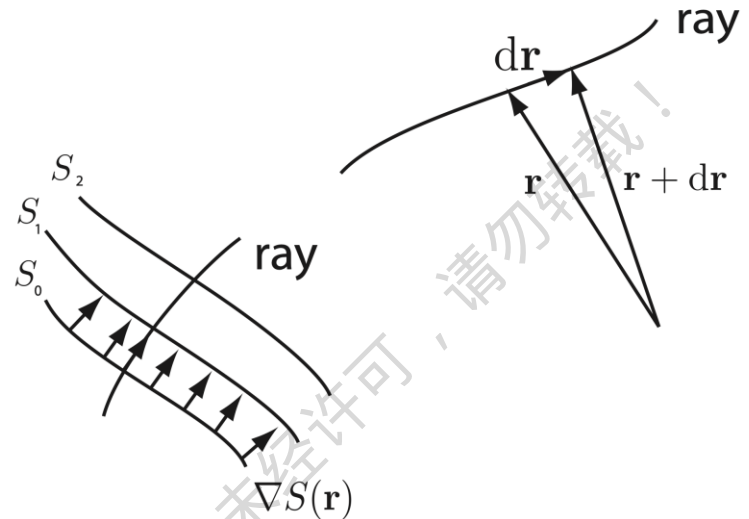
$$u(r) = \frac{a}{r} e^{ikr}$$

- 如果介质是不均匀的，则光线是弯曲的。

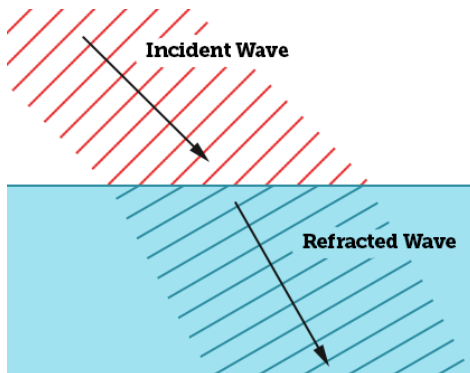
从波动光学到几何光学

非均匀介质的波动光学

$$(\nabla^2 + k(r)^2)u(r) = 0$$



当波长极短时的几何光学



$$u(r) = A(r)e^{ik_0 S(r)}$$

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z}\right)^2 - n^2(r) = 0$$

从量子力学到牛顿力学

外场中的波动力学

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

半经典近似下的牛顿力学

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{iS(\mathbf{r}, t)/\hbar}$$

$$\frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S$$

$\hbar \rightarrow 0$
 $\longrightarrow$

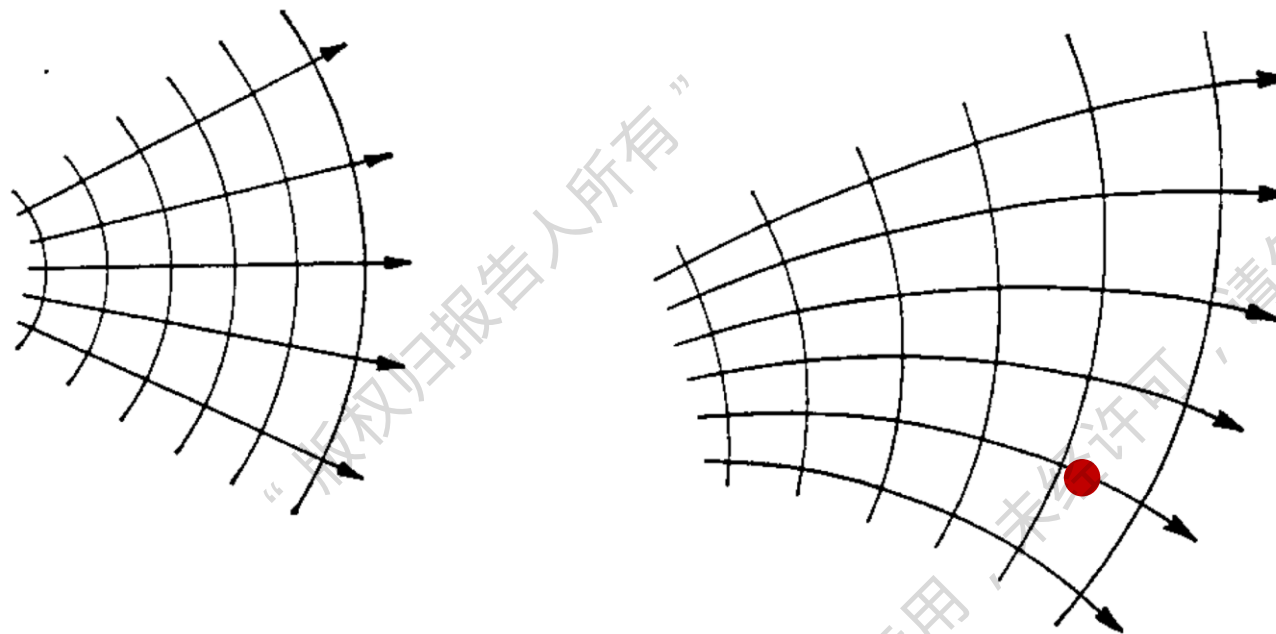
$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0$$



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

$$S(t) = \int_{t_0}^t L dt = \int_{t_0}^t (T - V) dt$$

物质波的几何光学—质点牛顿力学



$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{iS(\mathbf{r}, t)/\hbar}$$

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial V(r)}{\partial r}$$

量子力学到经典力学VS波动光学到几何光学

	量子力学	电动力学
波的方程	薛定谔方程	电磁场波动方程
表达式	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H\psi$	$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u - \frac{1}{\mu\epsilon} \nabla^2 u = 0$
	$\left(\frac{\hbar^2 p^2}{2m} + V \right) \phi = E\phi$	$(\nabla^2 + k^2)u = 0$
作用量波阵面	$\phi \propto \exp[iS(r)/\hbar]$	$u \propto \exp[ik_0 S(r)]$
极限	半经典近似 $\hbar \rightarrow 0$	短波近似 $\lambda = 2\pi/k_0 \rightarrow 0$
近似结果	$(\nabla S)^2/(2m) + V = 0$ 牛顿方程	$(\nabla S)^2 + n^2(r) = 0$ 程函方程