# 《高等量子力学》第 1 讲

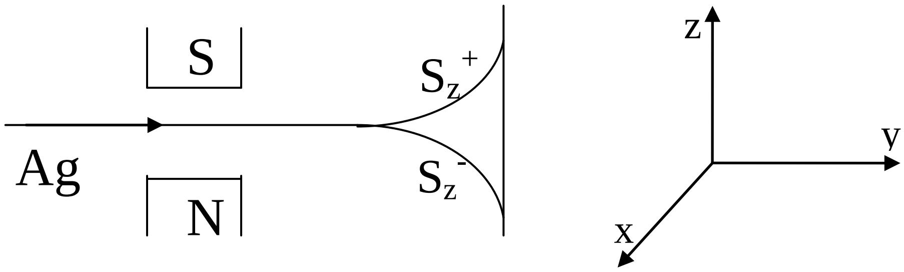
## 第一章：基本概念

### 1. 级联 Stern－Gerlach 实验

●自旋最容易体现与经典力学的根本差别；

●最容易体现量子力学的核心—测量问题；

●二能级系统是最量子的体系。




#### 1）实验结果

加热的银原子束通过不均匀磁场后分裂为两束。

#### 2）物理分析

● 原子与磁场的相互作用导致分裂，必是原子的磁矩 $\vec{M}$ 引起的，相互作用势 $V=-\vec{M}\cdot\vec{B}$。

● 磁矩与角动量 $\vec{J}$ 成正比，$\vec{M}\propto\vec{J}$。

● 原子感受到的力 $\vec{F}=-\vec{\nabla}V=M_z\dfrac{\partial B}{\partial z}\vec{e}_z\propto J_z\dfrac{\partial B}{\partial z}\vec{e}_z$（均匀磁场中 F=0）

在 z 方向分裂成对称的上下两束→角动量在磁场方向（Z）只有大小相等方向相反的两个分量。如果这个角动量是由于原子本身转动引起的，热原子的角动量方向是随机分布的，大量原子通过磁场后在屏上会有一个对称的连续分布，而不是一个分离的两分量分布。因此力不是由轨道角动量产生的，这个角动量是与空间无关的。

银原子有 47 个电子，其中 46 个是满壳分布，球对称，整体不显示角动量。

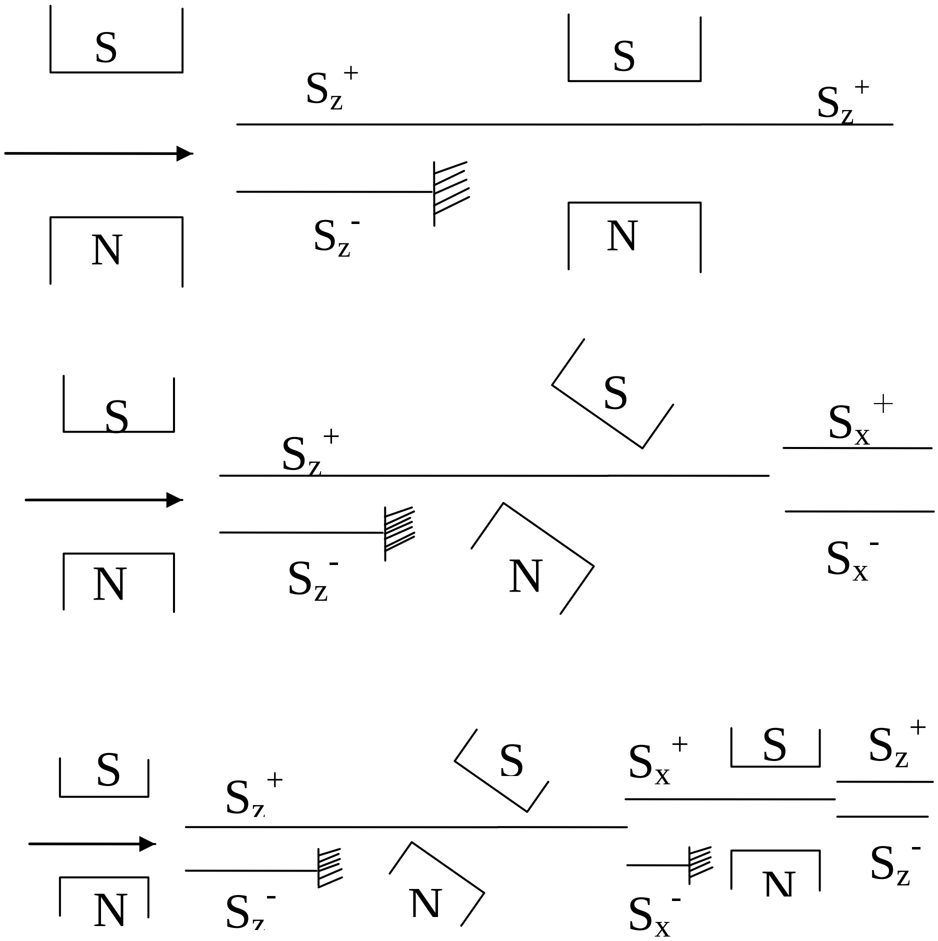
银原子的角动量完全是由那个价电子引起的。分离的二分量分布说明是由价电子的内禀角动量引起的，记为$\vec{s}$，$s_z$有两个可能的大小相等方向相反的值$s_z^+$和$s_z^-$。这就是 Stern-Gerlach 实验引入自旋。

**3）量子性质**

●存在自旋角动量，是内禀物理量（与时空无关）；

●自旋角动量的取值不连续。

**4）级联 Stern－Gerlach 实验**




让入射原子束经过两个 Z 方向的磁场，见图上部。在第二个磁场之前挡住一束原子，这样$S_z$有确定值$S_z^+$，在磁场中原子感受的力$\vec{F} \propto J_z \dfrac{\partial B}{\partial z}\vec{e}_z$是确定的，故在第二个磁场之后不会分为两束。

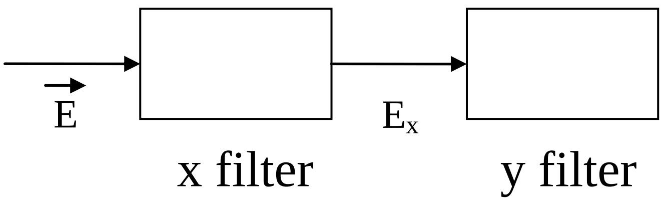
再让入射原子束先后经过 **Z** 和 **X** 方向的两个磁场，见图中部。在第二个磁场中原子感受的力 $\vec{F} \propto J_x \dfrac{\partial B}{\partial x}\vec{e}_x$。在第二个磁场之后观察到原子束分裂，说明在第二个磁场之前 $S_x$ 有两个可能的值 $s_x^+$ 和 $s_x^-$ 两个分量（虽然 $s_z$ 有确定值 $s_z^+$）。

●量子性质：当 $s_z$ 有确定值时，$s_x$ 没有确定值。$s_z$ 和 $s_x$ 不能同时有确定值！

现在让入射原子束先后经过 **Z**，**X** 和 **Z** 方向的三个磁场，见图下部。最后观察到 $S_z$ 有 $s_z^+$ 和 $s_z^-$ 两个分量，说明在第三个磁场之前 $s_z$ 有两个可能的值 $s_z^+$ 和 $s_z^-$ 两个分量（虽然 $s_x$ 有确定值 $s_x^+$）。

●量子性质：当 $s_x$ 有确定值时，$s_z$ 也没有确定值。$s_x$ 和 $s_z$ 不能同时有确定值！

**5）与经典电磁波的类似性（实物粒子与光波的类似性）**

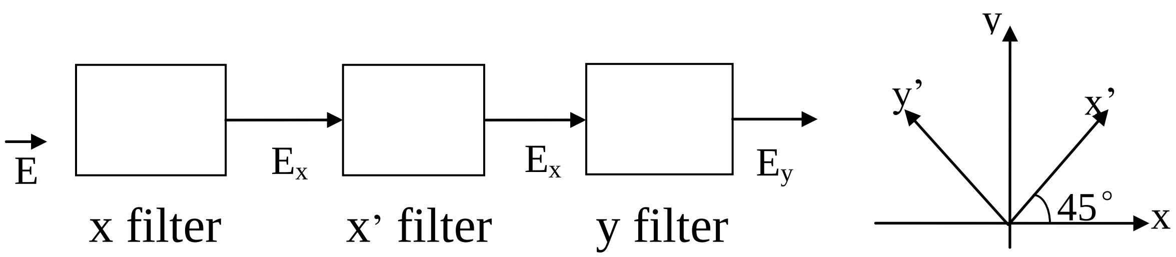



沿 **Z** 方向传播的电磁波先后经过只允许 **X** 方向的波通过的滤波器（**X filter**）和只允许 **Y** 方向的波通过的滤波器（**Y filter**）后全部消失。

$$\vec{E}(\vec{r},t) = E_0(\vec{e}_x + \vec{e}_y)\cos(kz - \omega t)$$

$$\xrightarrow{X\ \ filter} E_0\vec{e}_x\cos(kz - \omega t)$$

$$\xrightarrow{Y\ \ filter} 0$$



在 X filter 和 Y filter 之间放一个 X’ filter，X’与 X，Y 都是 45 度角，则最后仍然有 Y 方向的电磁波观察到。

$$\vec{E}(\vec{r},t)=E_0(\vec{e}_x+\vec{e}_y)\cos(kz-\omega t)$$

$$\xrightarrow{X\ filter}\ E_0\vec{e}_x\cos(kz-\omega t)=\frac{E_0}{\sqrt{2}}(\vec{e}_{x'}-\vec{e}_{y'})\cos(kz-\omega t)$$

$$\xrightarrow{X'\ filter}\ \frac{E_0}{\sqrt{2}}\vec{e}_{x'}\cos(kz-\omega t)=\frac{E_0}{2}(\vec{e}_x+\vec{e}_y)\cos(kz-\omega t)$$

$$\xrightarrow{Y\ filter}\ \frac{E_0}{2}\vec{e}_y\cos(kz-\omega t)$$

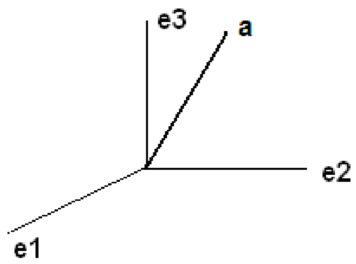
类似性：$S_x,S_y,S_z$ 和 $E_x,E_y$ 都可看成二分量矢量

不同：$\vec{S}$ 是内禀角动量，量子力学量；$\vec{E}$ 是空间相关力学量，经典力学量。

## 2. 线性矢量空间

量子力学与经典力学完全不同，力学量一般没有确定的值。怎样在数学上描述这种性质？为了建立量子力学的数学描述方式，先讨论线性矢量空间。

### 1）3 维线性矢量空间




任意矢量： $\vec{a}$

基矢： $\vec{e}_n,\quad n=1,2,3$

展开（基矢完备性）： $$\vec{a}=\sum_{n=1}^{3}a_n\vec{e}_n$$

矢量的分量（基矢的正交归一化 $\vec{e}_n\cdot\vec{e}_m=\delta_{nm}$）： $a_n=\vec{e}_n\cdot\vec{a}$

内积（标积）：$\vec{a}\cdot\vec{b}=\sum_{n,\,m}a_n b_m \vec{e}_n\cdot\vec{e}_m=\sum_{n}a_n b_n$，

其中列矩阵 $b=\begin{pmatrix}b_1\\b_2\\b_3\end{pmatrix}$，行矩阵 $\tilde{a}=(a_1,a_2,a_3)$ 是 $a=\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\a_3\end{pmatrix}$ 的转置矩阵。

矢量模方：$\vec{a}\cdot\vec{a}\ \geq\ 0$

$\vec{a}$ 是矢量的抽象形式或一般形式，矩阵 $a$ 是矢量 $\vec{a}$ 在某个具体坐标系（表象）的表示，与基矢的选取有关。例如直角坐标与球坐标中的表示是不同的。

对矢量的线性运算（算符）$\hat{T}$，例如平移，旋转等，

$$\hat{T}\vec{a}=\vec{b}\,,$$

仍然是 3 维空间中的一个矢量。

以上我们引入了矢量、表示、表象、算符等概念。

## 2）Hilbert 空间

将 3 维实常矢量空间扩展到任意维数的复变矢量空间：

3 维 $\rightarrow$ 任意有限维，无限维，连续维

实常矢量 $\rightarrow$ 复变函数矢量

用 Dirac 符号（右矢）表示任意矢量：$|a\rangle$

由于矢量 $|a\rangle$ 是一个复矢量，引入左矢 $\langle a|$ 表示 $|a\rangle$ 的复共轭矢量。左矢与右矢并不互相独立，而是互为复共轭：

$$|a\rangle \quad \leftrightarrow \quad \langle a|\text{。}$$

一个矢量既可以用右矢 $|a\rangle$，也可以用左矢 $\langle a|$ 表示。

在复变函数矢量空间，常数一般也是复数，矢量 $\alpha|a\rangle$ 的复共轭为

$$\alpha|a\rangle \quad \leftrightarrow \quad \langle a|\alpha^{*}\ \text{。}$$

对于复空间中的线性运算（算符）$\hat{T}$，其复共轭定义为$\hat{T}^{+}$，是右算符$\hat{T}$（从右边作用矢量$|a\rangle$）的对应左算符（从左边作用矢量$\langle a|$）。

$$\hat{T}|a\rangle \quad \leftrightarrow \quad \langle a|\hat{T}^{+} \quad 。$$

注意

$$\hat{T}\hat{F}|a\rangle=\hat{T}(\hat{F}|a\rangle) \quad \leftrightarrow \quad \langle a|\hat{F}^{+}\hat{T}^{+},$$

都是$\hat{F}$先作用，$\hat{T}$后作用。

进入具体表象，以 N 维离散空间为例。

基矢： $|n\rangle, \qquad n=1,2,.....$

展开： $|a\rangle=\sum_{n} a_{n}|n\rangle, \quad \langle a|=\sum_{n}\langle n| a_{n}^{*}$

基矢正交归一： $\langle n|m\rangle=\delta_{nm}$

分量： 将$|a\rangle=\sum_{n} a_{n}|n\rangle$两边左乘左矢$\langle m|$，有 $a_{m}=\langle m|a\rangle$

基矢完备性： $|a\rangle=\sum_{n} a_{n}|n\rangle=\sum_{n}\langle n|a\rangle|n\rangle=\sum_{n}|n\rangle\langle n|a\rangle=\left(\sum_{n}|n\rangle\langle n|\right)|a\rangle$

由于$|a\rangle$是任意矢量，有

$\sum_{n}|n\rangle\langle n|=\mathrm{I}$（单位矩阵）。

内积： $\langle a|b\rangle=\sum_{n,m} a_{n}^{*} b_{m}\langle n|m\rangle=\sum_{n} a_{n}^{*} b_{n}=a^{+} b$，

其中列矩阵$b=\begin{pmatrix} b_{1} \\ b_{2} \\ \vdots \\ b_{N} \end{pmatrix}$，行矩阵$a^{+}=\begin{pmatrix} a_{1}^{*} & a_{2}^{*} & \cdots & a_{N}^{*} \end{pmatrix}$是$a=\begin{pmatrix} a_{1} \\ a_{2} \\ \vdots \\ a_{N} \end{pmatrix}$

的厄米共厄（转置复共轭）矩阵。显然

$$\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle^* 。$$

矢量模方：$\langle a|a\rangle = \sum_n a_n^* a_n \geq 0$（只有定义$\langle a|$与$|a\rangle$互为复共轭，才能保证矢量模方大于零）

归一化矢量：　如果定义$|\tilde{a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle a|a\rangle}}|a\rangle$，有 $\langle \tilde{a}|a\rangle = 1$，称为归一化。

设
$$|b\rangle = \hat{F}|a\rangle$$

$$\langle m|b\rangle = \langle m|\hat{F}|a\rangle = \sum_n \langle m|\hat{F}|n\rangle\langle n|a\rangle \ , \qquad F_{mn} = \langle m|\hat{F}|n\rangle$$

$$b_m = \sum_n F_{mn} a_n$$

对于矢量的线性运算

$$|b\rangle = \hat{F}|a\rangle ,$$

其矩阵形式

$$b = Fa \, , \quad b_m = \sum_n F_{mn} a_n$$

$F$ 是算符 $\hat{F}$ 的表示，是一个方阵，矩阵元是 $F_{mn}$。

左算符 $\hat{F}^+$ 的表示：

由
$$\langle b| = \langle a|\hat{F}^+$$

插入完备性条件
$$\langle b|m\rangle = \langle a|\hat{F}^+|m\rangle = \sum_n \langle a|n\rangle\langle n|\hat{F}^+|m\rangle$$

$$b_m^* = \sum_n F_{nm}^+ a_n^* , \qquad b_m = \sum_n \left(F_{nm}^+\right)^* a_n$$

比较有 $\left(F_{nm}^+\right)^* = F_{mn}$， $F_{nm}^+ = \tilde{F}_{nm}^*$， $F^+ = \tilde{F}^*$， 即 $F^+$ 是 $F$ 的

厄米共轭矩阵，$\hat{F}^{+}$是$\hat{F}$的厄米共轭算符。

容易证明：　　$\langle a|\hat{T}|b\rangle=\langle b|\hat{T}^{+}|a\rangle^{*}$。

外积：　　$|a\rangle\langle b|$

其表示是一个方阵（$|a\rangle$的表示是一列矩阵，$\langle b|$的表示是一行矩阵)，故外积是一算符。实际上，由于$\left(|a\rangle\langle b|\right)|c\rangle=\left(\langle b||c\rangle\right)|a\rangle$的作用是把矢量$|c\rangle$变成了另一个平行于$|a\rangle$的矢量，故外积$|a\rangle\langle b|$确实是一个算符。它的具体表示是一个方阵，矩阵元是

$$\left(|a\rangle\langle b|\right)_{mn}=\langle m|a\rangle\langle b|n\rangle=\langle m|a\rangle\langle n|b\rangle^{*}=a_{m}b_{n}^{*}.$$