Day 1. 量子力学的基本思想与数学表述.

→ 矩阵力学的起源: "粗糙"的谐振子量子化.

矩阵力学在玻尔模型基础上建立起来. 玻尔假设 a). $E=E_1,\cdots E_n$. b). $\omega_{mn}=\frac{(E_m-E_n)}{\hbar}$ c). $mvr=n\hbar$ $\Rightarrow \omega_{mn}=g(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{m^2})$.

由经典电动力学, 辐射频率应出现在 x 的 fourier 变换中. $x=\sum_{m,n} X_{mn}\exp(i\omega_{mn}t)$. $p=\sum_{m,n} P_{mn}\exp(i\omega_{mn}t)$.

算能量: $E=m(\dot{x}^2+\omega^2x^2)/2$ 中有 $[x^2]_{mn}$ 的计算. 它必须符合计算规则 $[x^2]_{mn}=\sum_l X_{ml}X_{ln}$ 于是 x 可表为矩阵.

用这套粗糙/简单的表述已可给出基本对易子. 假定 $\hat{p}$, $\hat{x}$ 仍满足(半)经典的演化, $\dot{\hat{p}}=-\frac{\partial U(\hat{x})}{\partial\hat{x}}$ $\dot{\hat{x}}=\frac{\hat{p}}{m}$. 从而可作以下推导:

*虽然没明说, 但在这种"简单量力学"中 X, P 被视为对称

↑ 设 $x^\dagger=x$, $p^\dagger=p$.

$$\frac{d}{dt}[\hat{x},\hat{p}]=\frac{d}{dt}(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})$$
$$=\dot{\hat{x}}\hat{p}+\hat{x}\dot{\hat{p}}-\dot{\hat{p}}\hat{x}-\hat{p}\dot{\hat{x}}$$
$$=\frac{\hat{p}}{m}\cdot\hat{p}+\hat{x}\left(-\frac{\partial U(\hat{x})}{\partial\hat{x}}\right)-\left(-\frac{\partial U(\hat{x})}{\partial\hat{x}}\right)\hat{x}-\hat{p}\cdot\frac{\hat{p}}{m}$$
$$=0$$

*由于 $\frac{\partial U(\hat{x})}{\partial\hat{x}}$ 只与 $\hat{x}$ 有关, 换言之, 我们可以将其打开成 $\hat{x}$ 的级数. 所以 $\hat{x}\frac{\partial U(\hat{x})}{\partial\hat{x}}$ 与 $\frac{\partial U(\hat{x})}{\partial\hat{x}}\hat{x}$ 一样.

从而 $[\hat{x},\hat{p}]=c$. 又由于 $c^\dagger=(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})^\dagger=\hat{p}^\dagger\hat{x}^\dagger-\hat{x}^\dagger\hat{p}^\dagger = -\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x}=-c$.

从而 c 纯虚矩阵. $\Rightarrow c=i\hbar\cdot I$ 于是得到 $\hat{x}$, $\hat{p}$ 的基本对易子 $[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$

以上这一套东西还可以把谐振子做量子化. 考虑一个 S.H.O. 它的 $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$. 按经典力学, 运动方程 $\ddot{\hat{x}}+\omega^2\hat{x}=0$.

而 $\hat{x}$ 是个矩阵, 要使上面矩阵方程满足, 则分量都应满足 $\ddot{X}_{mn}+\omega^2X_{mn}=0$. 设 X_{mn} 中带有从 $m\to n$ 跃迁的频率, 换言之, 解为 $X_{mn}=X_{mn}(0)\cdot\exp(i\omega_{mn}t)$.

$\Rightarrow (\omega_{mn}^2-\omega^2)X_{mn}(0)=0$ $\Rightarrow$ 只有 $\omega_{mn}=\pm\omega$. 才有 $X_{mn}\neq0$. 换言之, 矩阵中只有两斜线非0. 设它们为 $X_{m,m+1}$ 与 $X_{m,m-1}$.

$\Rightarrow X_{mn}=X_{m,m+1}\delta_{n,m+1}+X_{m,m-1}\delta_{n,m-1}$. 利用前文"粗糙"的对易子, $(\hat{p}=m\dot{\hat{x}})$ $\Rightarrow [\hat{x}, m\dot{\hat{x}}]=i\hbar I \Rightarrow (\hat{x}\dot{\hat{x}})_{mn}-(\dot{\hat{x}}\hat{x})_{mn}=-i\frac{\hbar}{m}\cdot\delta_{mn}$

在 $m=n$ 时, 上面的对易子具体写出来是: $i\sum_l(\omega_{nl}X_{nl}X_{ln}-X_{nl}\omega_{ln}X_{ln}) = 2i\sum_l \omega_{nl}X_{nl}X_{ln}=-i\frac{\hbar}{m}$ $[\omega_{mn}=-\omega_{nm}]$

由于只有 $X_{n,n+1}$ 和 $X_{n,n-1}$ 非0. $\Rightarrow -\omega\cdot X_{n,n+1}X_{n+1,n}+\omega\cdot X_{n,n-1}X_{n-1,n}=\frac{\hbar}{2m}$ $\Rightarrow (X_{n,n+1})^2-(X_{n,n-1})^2=\frac{\hbar}{2m\omega}$. 这给出了 $X_{n+1,n}$ 的递推式. 取首项 $X_{21}^2=\frac{\hbar}{2m\omega}$ $\Rightarrow X_{n+1,n}^2=\frac{\hbar}{2m\omega}$

从而 $E_n=H_{nn}$
$$=\frac{1}{2}m[(\dot{\hat{x}}^2)_{nn}+\omega^2(\hat{x}^2)_{nn}]$$
$$=\frac{1}{2}m[\sum_l\dot{x}_{nl}\dot{x}_{ln}+\omega^2\sum_l x_{nl}x_{ln}]$$
$$=\frac{1}{2}m\sum_l(-i\omega_{nl}X_{nl}\cdot i\omega_{nl}X_{nl}+\omega^2X_{nl}X_{nl})$$
$$=m\omega^2(X_{n+1,n}^2+X_{n,n-1}^2) = (n-\frac{1}{2})\hbar\omega$$

若定义 E 最低时 $n=0$, 则有 $E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega$.

→ 波动力学的起源：将HJB中的S看作粒子波函数的相位.

德布罗意：猜 $\varphi_a(\vec{x}) \propto \exp(i\vec{k}\cdot\vec{x} - i\omega t)$. $k = \frac{p}{\hbar}$, $\omega = \frac{E}{\hbar}$. ⇒ 自然的问题：粒子的波动方程是什么?

我们熟知所谓HJB方程. $\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial q}\right)^2 + V(q) = 0$. 推广到3D为 $\frac{\partial S}{\partial t} + V + \frac{1}{2m}(\nabla S)^2 = 0$. 由于这里讨论的系统H不含时 ⇒ 作分离变量 $S = W(\vec{r}) - Et$.

⇒ $(\nabla S)^2 = 2m(E - V(r))$. 考虑 $\frac{dS}{dt} = \frac{\partial S}{\partial t} + \nabla S \cdot \frac{dr}{dt}$. 从而给出S的等值面的移动速度. $0 = -E + \nabla S \cdot \frac{dr}{dt}$ ⇒ $u = \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{E}{|\nabla S|} = \frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}}$. 是所谓相速度.

由于S正是相位 ⇒ $\psi(\vec{r}, t) = \exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}[W(\vec{r}) - Et]\right)$. 由于在无外场时应退回自由粒子. 可推出 $p = \hbar k$. ⇒ $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot \exp\left(\frac{iE}{\hbar}t\right)$.

⇒ $S = -i\hbar \ln[\psi(r)] - Et$. 回代HJB. $-\hbar^2\left(\frac{\nabla\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})}\right)^2 = 2m[E - V(r)]$ ⇒ $\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\psi(\vec{r}))^2 + [E - V(\vec{r})](\psi(\vec{r}))^2 = 0$.

这个方程非线性,可以在短波极限(物质波波长短)、做线性化. 利用

$$\begin{cases} \frac{\partial\psi}{\partial q} = \frac{i\psi}{\hbar} \cdot \frac{\partial W}{\partial q} \\ \frac{\partial^2\psi}{\partial q^2} = \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial q} \cdot \frac{\partial W}{\partial q} + \frac{i\psi}{\hbar} \cdot \frac{\partial^2 W}{\partial q^2} = -\frac{1}{\hbar^2}\psi\left(\frac{\partial W}{\partial q}\right)^2 + \frac{i}{\hbar}\psi \cdot \left(\frac{\partial W}{\partial q}\right) \end{cases}$$

在 $\hbar \to 0$. 有 $\frac{\partial^2\psi}{\partial q^2} \to -\frac{1}{\hbar^2}\psi\left(\frac{\partial W}{\partial q}\right)^2 = -\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial\psi}{\partial q}\right)^2$

推广三维. $(\nabla\psi)^2 \to \psi\nabla^2\psi$.

从而方程变为 $\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + [E - V(\vec{r})]\psi(\vec{r}) = 0$. 这个是定态Sch.方程.

玻恩. 统计诠释 —— $|\psi(x,t)|^2$ 是概率密度. 要归一.

玻尔："互补原理" —— "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"

→ 量子力学的正式数学表述.

微观系统的状态用Hilbert Space中的矢量 ψ 描述. 每个力学量A由其对应的厄米算符 $\hat{A}$ e.g. 坐标表象下 $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ $F(p, x) \to \hat{F}\left(\hat{x}, i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)$. $|\psi\rangle = c_n|n\rangle$.

物理状态 → "ket" $|\psi\rangle$. 内积 $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi\rangle$. 算符的厄米共轭 $\langle\varphi|\hat{A}\psi\rangle = \langle A^\dagger\varphi|\psi\rangle$. 厄米—厄米共轭为自身. 本征方程：$\hat{A}|n\rangle = a_n|n\rangle$. $\{|n\rangle\}$ 是否张成了Hilbert Space

可证明：厄米算符本征矢正交. $a_n\langle n|n\rangle = \langle n|\hat{A}|n\rangle = \langle\hat{A}^\dagger n|n\rangle = a_n^*\langle n|n\rangle$. 由于 $\langle n|n\rangle = 1$ ⇒ $a_n = a_n^*$ (所有本征值均实).

取 $m \neq n$. $\langle m|\hat{A}|n\rangle = a_n\langle m|n\rangle$. 由厄米共轭定义 $a_n\langle m|n\rangle = a_m\langle m|n\rangle$. ⇒ $(a_n - a_m)\langle m|n\rangle = 0$. 设 a_n 非简并, 必有 $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$.

$\langle\hat{A}^\dagger m|n\rangle = a_m^*\langle m|n\rangle = a_m\langle m|n\rangle$.

本征矢集合 $\{|n\rangle\}$ 的完备性. 指V上任一矢量可由 $\{|n\rangle\}$ 展开：即对于 $|\psi\rangle = \sum_m C_m|m\rangle$. $\langle n|\psi\rangle = \sum_m C_m\langle n|m\rangle = \sum_m \delta_{nm} \cdot C_m = C_n$. ⇒ $|\psi\rangle = \sum_m |m\rangle\langle m|\psi\rangle$ ⇒ $\sum_m |m\rangle\langle m| = 1$.

在不进行严格证明的情况下. 将离散之结论推至连续则(取 $\hat{x}$ 本征态为例). $\langle x|x'\rangle = \delta(x - x')$. $\int |x\rangle\langle x|\,dx = 1$.

由基本对易关系 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$. 有 $\langle x'|[\hat{x}, \hat{p}]|x\rangle = i\hbar\delta(x - x')$.

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

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

⇒ 动量算符在坐标表象下的矩阵元为 $\langle x'|\hat{p}|x\rangle = \frac{i\hbar\delta(x' - x)}{x - x'}$

利用 $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \cdot x \cdot \frac{d}{dx}\delta(x) = x\cdot\delta(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx\cdot\delta(x) = -1$. 从而 $\delta(x)$ 有如下性质： $x\cdot\frac{d}{dx}\cdot\delta(x) = -\delta(x)$.

从而 $\langle x'|p|x\rangle = -i\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial x}\delta(x'-x) = -i\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial x}\delta(\underline{x}-x')$. $\Rightarrow p = -i\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial x}$. → 注意求偏导这个位置.

一个很"邪门"的理解为， $\hat{p}|x\rangle$ 是 $-i\hbar\cdot\underline{\frac{\partial}{\partial x}|x\rangle}$ 对以 x 为参的向量值函数求导 从而 $\langle x'|p|x\rangle = -i\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial x}\langle x'|x\rangle = -i\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')$.

可计算 $\hat{p}$ 的本征矢 $|p\rangle$ 在 $|x\rangle$ 中展开: $\varphi_p(x) = \langle x|p\rangle$ 本征方程为 $\langle x|\hat{p}|p\rangle = p\langle x|p\rangle$ 通过向其中插入完备性关系. $\int dx' \langle x|p|x'\rangle\langle x'|p\rangle = p\cdot\varphi_p(x)$.

$\int dx' \langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|p\rangle = \int dx' -i\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x')\cdot\varphi_p(x') = \frac{-i\hbar\partial}{\partial x}\left[\int dx'\, \delta(x'-x)\cdot\varphi_p(x')\right] = -i\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial x}\varphi_p(x) = p\cdot\varphi_p(x)$. 从而有 $\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\frac{i}{\hbar}\cdot p\cdot x)$.

我们可以使用不同算符的本征态来表示同一个量子态. 即 $|\psi\rangle = \sum_n A_n|n\rangle = \sum_{\bar{n}} B_n|\bar{n}\rangle$.

$$\begin{cases} A_n = \langle n|\psi\rangle = \sum_m \langle n|\bar{m}\rangle\langle\bar{m}|\psi\rangle \\ B_n = \langle\bar{m}|\psi\rangle \end{cases}$$

⇒ 表象变换. $A_n = \sum_m \langle n|\bar{m}\rangle B_m$. 或写成 $A = \hat{S}B$.

力学量变换.

$$\begin{cases} \hat{W} = \sum_{m,n} \langle m|\hat{W}|n\rangle\, |m\rangle\langle n| \text{ (通过插入两个不同的完备性关系证明)} = \sum_{m,n} W_{mn}\, |m\rangle\langle n| \\ \hat{W} = \sum_{m',n'} \langle\bar{m}'|\hat{W}|\bar{n}'\rangle\, |\bar{m}'\rangle\langle\bar{n}'| = \sum_{m',n'} W'_{m'n'}\, |\bar{m}'\rangle\langle\bar{n}'| \end{cases}$$

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

$$= \sum_{m',n'}\sum_{m,n} \underline{|\bar{m}'\rangle\langle\bar{m}'|m\rangle}\langle m|\hat{W}|n\rangle\langle n|\underline{\bar{n}'\rangle}\langle\bar{n}'|$$

$S_{ij} = \langle i|\bar{j}\rangle$ $\quad S = \begin{bmatrix} \langle 1|\bar{1}\rangle & \langle 1|\bar{2}\rangle & \cdots \\ & & \langle N|\bar{N}\rangle \end{bmatrix}$

$$= \sum_{m'n'}\sum_{mn} S_{m'm} W_{mn} S_{nn'}\, |\bar{m}'\rangle\langle\bar{n}'| \Rightarrow W'_{m'n'} = \sum_{m,n} S_{m'm}W_{mn}S_{nn'} = [\hat{S}^{+}W\hat{S}]_{m',n'}$$ 从而 $W' = \hat{S}^{+}W\hat{S}$. (力学量本身是线性映射不变, 但其展开形式会发生变化).

在坐标表象有 $|\psi\rangle = \int\psi(x)\,|x\rangle\cdot dx$. 对于任意力学量的本征态 $|n\rangle$ 都可以在坐标系下做展开. $C_n = \langle n|\psi\rangle = \int\langle n|x\rangle\langle x|\psi\rangle\, dx = \int n^*(x)\,\psi(x)\, dx$.

根据波恩概率诠释. $\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \int \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle\, |x\rangle\langle x|\, dx = \int\langle\psi|\hat{x}|x\rangle\langle x|\psi\rangle\, dx = \int\langle\psi|x\rangle\cdot x\cdot\langle x|\psi\rangle dx = \int x\cdot\psi^*(x)\,\psi(x)\, dx = \mathbb{E}[x]$

所谓均方根涨落则为 $\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2}$

我们还可计算任意力学量 (e.g. 动量) 均值. 从而 $\bar{p} = \int|\psi(p)|^2\cdot p\cdot dp = \int\langle\psi|\hat{p}|p\rangle\langle p|\psi\rangle\cdot dp$ 从而任何力学量期望 $\mathbb{E}[\hat{A}] = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$.

若要在坐标表象下计算. $\mathbb{E}[A] = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int\langle\psi|x\rangle\langle x|\hat{A}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle\, dx\cdot dx'$.

将态矢 $|\psi\rangle$ 在 A 的表象下展开. $|\psi\rangle = \sum_n \underbrace{\langle n|\psi\rangle}_{C_n}|n\rangle$. $\Rightarrow \langle x|\psi\rangle = \sum_n\langle n|\psi\rangle\langle x|n\rangle$.

$\langle\psi|\psi\rangle = \left(\sum_{n_1}\langle\psi|n_1\rangle\langle n_1|\right)\left(\sum_{n_2}\langle n_2|\psi\rangle|n_2\rangle\right) = \sum_{n_1,n_2}\langle\psi|n_1\rangle\langle n_2|\psi\rangle\langle n_1|n_2\rangle = \sum_n\langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n\|C_n\|^2$.

又 $\langle\psi|\psi\rangle = \int\langle\psi|x\rangle\langle x|\psi\rangle\, dx = \int\psi^*(x)\psi(x)dx = 1$. $\Rightarrow \sum_n\|C_n\|^2 = 1$. 记 $P_n = \|C_n\|^2$ → 利用 $\int\psi^*(x)\psi(x)dx = 1$. 推出 $\langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle$ 取和归一, 因此这可以是概率解释.

考虑上面的"期望". $\mathbb{E}[A] = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \left(\sum_{n_1}\langle\psi|n_1\rangle\langle n_1|\right)\hat{A}\left(\sum_{n_2}\langle n_2|\psi\rangle|n_2\rangle\right) = \left(\sum_{n_1}\langle\psi|n_1\rangle\langle n_1|\right)\left(\sum_{n_2} n_2\langle n_2|\psi\rangle|n_2\rangle\right) = \sum_n n\langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle = \sum_n P_n\cdot n$.

从而 我们有完整的波恩诠释: 若态 $|\psi\rangle = \sum_n\langle a_n|\psi\rangle|a_n\rangle$ 上测 A 所得的值来自 $\{a_n\}$. 且测出 a_n 的概率为 $\langle\psi|a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle$.

目前，我们遇到的QM公设：①. 量子态与波函数. ②. 玻恩诠释 ③. 动力学演化公设. ④. 全同粒子：全同多粒子体系的波函数在粒子交换下对称或反对称.

玻恩诠释的推论：不确定关系. 定义涨落算子. $\Delta A = \hat{A} - \bar{A}$, $\Delta B = \hat{B} - B$.

$$\mathbb{E}[(\Delta A)^2] = \mathbb{E}[(A - \mathbb{E}[A])^2] = \mathbb{E}[A^2] + \mathbb{E}^2[A] - 2\mathbb{E}[A]\,\mathbb{E}[\mathbb{E}[A]] = \mathbb{E}[A^2] - \mathbb{E}^2[A]$$

↓ 这个东西具体是什么? 以位移为例.

$\langle\psi|A|\psi\rangle = \mathbb{E}[A]$ 是个数. 这个东西整体是算符.

$$\langle\psi|(\hat{x} - \mathbb{E}[x])^2|\psi\rangle = \int \langle\psi|\,\hat{x}^2 - 2\,\mathbb{E}[x]\cdot\hat{x} + \mathbb{E}^2[x]\,|x\rangle\langle x|\psi\rangle\,dx = \int \langle\psi|x\rangle\langle x|\psi\rangle\left(x^2 - 2\mathbb{E}[x] + \mathbb{E}^2[x]\right)dx = \int p(x)\,(x - \mathbb{E}[x])^2\,dx$$

这个东西为测量方差.

不确定关系严格写为：$\mathbb{E}[(\Delta A)^2]\,\mathbb{E}[(\Delta B)^2] \geq \frac{1}{4}\mathbb{E}[[\hat{A},\hat{B}]]^2$ 或 $\sigma_A \cdot \sigma_B \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|$.

证明：设体系的态为 $|\psi\rangle$ 记 $|\alpha\rangle = \Delta A|\psi\rangle$. $|\beta\rangle = \Delta B|\psi\rangle$. 则 $\mathbb{E}[(\Delta A)^2] = \langle\alpha|\alpha\rangle$. $\mathbb{E}[(\Delta B)^2] = \langle\beta|\beta\rangle$ $\mathbb{E}[\Delta A\Delta B] = \langle\alpha|\beta\rangle$.

由Schwarz不等式有：$\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2$ 从而 $\mathbb{E}[(\Delta A)^2]\,\mathbb{E}[(\Delta B)^2] \geq \mathbb{E}[\Delta A\Delta B]^2$. 利用分解 $\Delta A\Delta B = \frac{1}{2}[\Delta A,\Delta B] + \frac{1}{2}\{\Delta A,\Delta B\}$.

并且有 $[\Delta A, \Delta B] = [A,B]$. $\Rightarrow \mathbb{E}[\Delta A\Delta B]^2 = \frac{1}{4}\mathbb{E}[[\hat{A},\hat{B}]]^2 + \frac{1}{4}\mathbb{E}[\{\Delta A,\Delta B\}]^2$.

从而令 $\sigma_A = \sqrt{\langle(\Delta A)^2\rangle}$, $\sigma_B = \sqrt{\langle(\Delta B)^2\rangle}$ $\Rightarrow \sigma_A\cdot\sigma_B \geq \frac{1}{2}|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle|$

→ 绘景 (picture) 理论.

考虑S绘景：态矢演化，算符可以含时，但不演化(没有演化方程). $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}_S(t)|\psi(t)\rangle$.

在H绘景下，算符演化，而态矢不演化. 为了给出算符的演化方程，我们考虑力学量的期望：在任何一个绘景下，力学量期望演化应相同.

S绘景：
$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S|\psi(t)\rangle \\ \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(t)| = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}_S \end{cases}$$
(简单起见，只考虑不含时的算符).

期望的演化：
$$\frac{\partial\langle\psi(t)|\hat{A}_S|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{A}_S|\psi(t)\rangle\cdot\frac{\partial\langle\psi(t)|}{\partial t} + \langle\psi(t)|A_S\cdot\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t}$$
$$= \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|H_S A_S|\psi(t)\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|A_S H_S|\psi(t)\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\psi_S|[H, A_S]|\psi_S\rangle.$$

H绘景：
$$\frac{\partial\langle\psi_H|\hat{A}_H|\psi_H\rangle}{\partial t} = \langle\psi_H|\frac{\partial\hat{A}_H}{\partial t}|\psi_H\rangle$$
若使得以上两式一致，则应有 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}_H = [\hat{A}_H, \hat{H}(t)]$.

→ 量子态的密度矩阵

考虑所谓"纯态"。 $|\psi\rangle=\sum_n c_n|\psi\rangle$. 则在$|\psi\rangle$下，测量$\hat A$的均值.

即 $[A]=\sum_n|c_n|^2 a_n=\sum_n\langle n|\psi\rangle\langle\psi|n\rangle=\sum_n\langle n|\psi\rangle\langle\psi|A|n\rangle$ 若引入密度算符 $\hat\rho_\psi=|\psi\rangle\langle\psi|$. 则 $\langle A\rangle=Tr(\hat A\cdot\hat\rho_\psi)$.

不难验证 ρ_ψ 的本征矢为$|\psi\rangle$. 本征值为1. 其矩阵元 $(\hat\rho_\psi)_{mn}=\langle m|\hat\rho_\psi|n\rangle=\psi_m\psi_n^*$.

纯态：可由量子态$|\psi\rangle$描述. 而混合态无法由单一态矢描述.

例1：$|\psi\rangle=\frac{1}{\sqrt2}(|\psi_1\rangle+|\psi_2\rangle)$.

写成密度矩阵形式 $\rho_\psi=\langle\psi|\psi\rangle=\frac12(\langle\psi_1|+\langle\psi_2|)(|\psi_1\rangle+|\psi_2\rangle)$. 在$\{|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle\}$上展开成 $\rho_\psi=\frac12\begin{bmatrix}1&1\\1&1\end{bmatrix}$.

$\hat\rho_\psi$在坐标基下的对角元恰好是粒子在空间上的概率密度分布. $p(x)=\langle x|\hat\rho|x\rangle=\langle x|\psi\rangle\langle\psi|x\rangle=\frac12[\|\psi_1(x)\|^2+\|\psi_2(x)\|^2+\psi_1^*(x)\psi_2(x)+\psi_2^*(x)\psi_1(x)]$.

纯态的 $\rho_\psi=|\psi\rangle\langle\psi|$ 有性质：1) $\hat\rho_\psi=\hat\rho_\psi^\dagger$ 2). $Tr(\rho)=\sum_n\langle n|\hat\rho_\psi|n\rangle=\sum_n\langle n|\psi\rangle\langle\psi|n\rangle=1$, 3). $\hat\rho_\psi\hat\rho_\psi=\hat\rho_\psi$ 4). 正定.

非纯态：系综内的粒子并非位于一个态上，它们可位于可以测量$\hat A$的各个本征矢$|n\rangle$上. 混合态密度矩阵定义为 $\hat\rho=\sum_n p_n|n\rangle\langle n|$. 其中$p_n$为系综中粒子处在第n个本征态上比例

则测量得到的平均值. $\langle\hat A\rangle=\sum_n p_n a_n=\sum_n p_n\langle n|\hat A|n\rangle=\sum_{n,n'}p_n\langle n'|n\rangle\langle n|\hat A|n'\rangle=\sum_{n,n'}p_n\delta_{nn'}\langle n|\hat A|n'\rangle=Tr(\hat\rho\hat A)$. $\hat\rho=\sum_n p_n|n\rangle\langle n|$.

现在考虑一个与$\hat A$不对易的$\hat B$. 其系综平均为 $\langle\hat B\rangle_{esem}=\sum_n p_n\langle\hat B_n\rangle=\sum_n p_n\langle n|\hat B|n\rangle=\sum_{n,n'}\langle n'|n\rangle\langle n|\hat B|n'\rangle=Tr(\hat\rho\hat B)$. $Tr(\hat\rho\hat B)$这个操作能解两件事 < $\langle n|\hat B|n\rangle$(量子) $p_n\langle n|\hat B|n\rangle$(经典).

对于由$\hat A$的基矢定义的密度矩阵. $\hat\rho=\sum_{m,n}\rho_{m,n}|m\rangle\langle n|$. 由厄米性，应有$\rho_{m,n}=\rho_{n,m}^*$.

则$\hat A$的平均. $\langle\hat A\rangle=Tr(\hat\rho\hat A)=\sum_{m,n,p}\rho_{m,n}\langle p|m\rangle\langle n|\hat A|p\rangle$ 而对与$\hat A$不对易的$\hat B$. $\langle\hat B\rangle=\sum_{m,n,p}\rho_{m,n}\langle p|m\rangle\langle n|\hat B|p\rangle=\sum_{m,n}\rho_{m,n}\langle n|\hat B|m\rangle$.

$=\sum_{m,n}\rho_{m,n}\langle n|\hat A|m\rangle=\sum_n\rho_{n,n}\langle n|\hat A|n\rangle$ ⇒ 只与$\rho_{n,n}$有关. 受对角项和非对角项影响.

一般情形下的 density matrix 有性质：1). $Tr(\hat\rho)=1$ (注意$Tr(\cdot)$不随基底改变)、2). $\hat\rho^\dagger=\hat\rho$ 3). $\hat\rho^2=\hat\rho$ 4). $Tr(\hat\rho^2)<1$. 4). $Tr(\hat\rho^2)<1$.

下证4). 可以找到一组基底将$\hat\rho$对角化，即 $\hat\rho=\sum_n p_n|n\rangle\langle n|$. 从而

$Tr(\hat\rho^2)=Tr(\sum_n p_n|n\rangle\langle n|\cdot\sum_m p_m|m\rangle\langle m|)=Tr(\sum_{n,m}p_n p_m|n\rangle\langle n|m\rangle\langle m|)=Tr(\sum_n p_n^2)<1$.

前面提到，密度矩阵定义为 $\hat\rho=\sum_n p_n|\psi_n\rangle\langle\psi_n|$ 由于$|\psi_n\rangle$随时间演化，故ρ会随时间演化. 我们有：

$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat\rho=i\hbar(\sum_n p_n|\dot\psi_n\rangle\langle\psi_n|+p_n|\psi_n\rangle\langle\dot\psi_n|)$,

$=i\hbar\sum_n p_n(\hat H|\psi_n\rangle\langle\psi_n|-|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\hat H)=[\hat H,\hat\rho]$ ⇒ $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat\rho=[\hat H,\hat\rho]$. 这对应于经典力学中 Liouville Eq.

考虑$\hat\rho$的无穷小时间演化. $\frac{\partial}{\partial t}\hat\rho=\frac{-i}{\hbar}[\hat H,\hat\rho]$.

则在Δt时间内. $\Delta\hat\rho=-\frac{i}{\hbar}[\hat H,\hat\rho]\cdot\Delta t=-\frac{i}{\hbar}[\hat H\hat\rho-\hat\rho\hat H]\cdot\Delta t$.

取无穷小时间演化算符 $\hat U(t)=1-\frac{i}{\hbar}\hat H\cdot\Delta t$.

直接计算 $(1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\Delta t)\cdot\rho\cdot(1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\Delta t)^{+}$

$$= (\rho-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\hat{\rho}\cdot\Delta t)(1+\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\Delta t)$$

$$= (\rho-\frac{i}{\hbar}\hat{\rho}\hat{H}\cdot\Delta t+\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\hat{\rho}\cdot\Delta t) = \rho-\frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{\rho}] = \rho(t+\Delta t).$$

因此将 $\hat{U}(t-t_0) = 1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t_0)$ 称作无穷小演化算符。对于连续演化，只需将无穷小演化加起来。$\lim_{\Delta t\to 0}[1-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot\Delta t]^{\frac{t}{\Delta t}} \to \exp(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\cdot t)$.

易知 $UU^{+}=I$，故 U 是幺正的。$U(t)$ 连续将 t_0 时刻的 $\hat{\rho}$ 和 t 时刻的 $\hat{\rho}$ 联系：$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t,t_0)\cdot\hat{\rho}(t_0)\cdot\hat{U}^{+}(t,t_0)$.

从而有 $Tr(\hat{\rho}^2(t)) = Tr(\hat{U}\rho(t_0)\hat{U}^{+}\hat{U}\rho(t_0)\hat{U}^{+}) = Tr(\hat{\rho}(t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^{+}U) = Tr(\hat{\rho}^2(t_0))$. 从而 $Tr(\hat{\rho}^2(t_0))$ 不随时演化。

下面我们具体针对二能级系统进行讨论。注意到单位阵 I 和三个泡利阵，$\hat{\sigma}_x = \begin{bmatrix} & 1\\ 1 & \end{bmatrix}$，$\hat{\sigma}_y = \begin{bmatrix} & -i\\ i & \end{bmatrix}$，$\hat{\sigma}_z = \begin{bmatrix} 1 & \\ & -1\end{bmatrix}$，构成了 2×2 厄米矩阵空间的一组完备基。从而 $\hat{\rho}$ 二能级密度矩阵可写成：

$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_0+\vec{a}\cdot\vec{\sigma}) = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1+a_3 & a_1-ia_2\\ a_1+ia_2 & 1-a_3\end{bmatrix}$. $\vec{a}$ 称为 Bloch 矢量。[注意上面形式的泡利阵对应的基底为两个自旋 $|0\rangle = |\downarrow\rangle$，$|1\rangle = |\uparrow\rangle$.]

计算可知，$a_i = Tr(\hat{\rho}\hat{\sigma}_i) = \langle\hat{\sigma}_i\rangle$.

⚠ Warning：注意区分叠加态与混合态。叠加态可使用一个态矢量描述，这个态矢是 $\hat{A}$ 的各本征矢的和；而混合态根本不可使用一个态矢描述，只可由密度阵描述。

对于这样的二能级系统，所有纯态均可用 Bloch 球面上点描述，而混合态用球内点描述。

$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_0+\vec{a}\cdot\vec{\sigma}) \Rightarrow \hat{\rho}^2 = \frac{1}{4}(I+\vec{a}\cdot\vec{\sigma})(I+\vec{a}\cdot\vec{\sigma}) = \frac{1}{4}(I+2\vec{a}\cdot\vec{\sigma}+\cdots)$

其中间这一项要用 Pauli 阵的性质，$\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}I+i\varepsilon_{ijk}\sigma_k$.

$$\Rightarrow (\vec{a}\cdot\vec{\sigma})^2 = (\sum_i a_i\sigma_i)(\sum_j a_j\sigma_j) = \sum_{i,j} a_i a_j\sigma_i\sigma_j$$

$$= \sum_{i,j} a_i a_j(\delta_{ij}I+i\varepsilon_{ijk}\sigma_k)$$

$$= \sum_i a_i^2\cdot I + \sum_{i,j}\underbrace{a_i a_j}_{\text{对称}}\underbrace{\varepsilon_{ijk}}_{\text{反对称}}\sigma_k = \|\vec{a}\|^2\cdot I.$$

从而 $\hat{\rho}^2=\rho$ 可导出 $\|\vec{a}\|^2=1$ ⇒ 所有纯态的密度阵可由 Bloch 球面上的点表示。

量子退相干：看在特定基底下非对角项的意义。仍然考虑之前的双缝干涉，开两条缝的时候态为 $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_1\rangle+|\psi_2\rangle)$.

则密度矩阵在坐标本征矢下的对角元，$\rho(x) = \langle x|\hat{\rho}|x\rangle = \frac{1}{2}[\|\psi_1(x)\|^2+\|\psi_2(x)\|^2+\psi_1^*(x)\psi_2(x)+\psi_2^*(x)\psi_1(x)]$.

↳ 这来自于 $|\psi_1\rangle$、$|\psi_2\rangle$ 这套基矢下的非对角项。

退相干 (coherence)，是量子系统与外部系统相互作用导致相干性退化，表现为在特定基矢下密度阵非对角项的消失。

考虑一个叠加态 $|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle+\beta|\psi_2\rangle$，测量的影响是在 $|\psi_1\rangle$、$|\psi_2\rangle$ 之间引入了随机相位强差：$|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle+\beta\cdot\exp(i\theta)|\psi_2\rangle$。但 $\langle\exp(i\theta)\rangle = \langle\cos\theta+i\sin\theta\rangle = 0$.

从而考虑测量后的密度阵，$\hat{\rho}' = |\psi'\rangle\langle\psi'| = (\alpha|\psi_1\rangle+\beta\exp(i\theta)|\psi_2\rangle)(\alpha^*\langle\psi_1|+\beta^*\exp(-i\theta)\langle\psi_2|)$

$$= \|\alpha\|^2|\psi_1\rangle\langle\psi_1|+\|\beta\|^2|\psi_2\rangle\langle\psi_2|+\beta^*\alpha\exp(-i\theta)\langle\psi_2|\psi_1\rangle+\alpha^*\beta\exp(i\theta)\langle\psi_1|\psi_2\rangle.$$

给定θ，对某一力学量$\hat{A}$取条件期望. $\langle \hat{A}\rangle_\theta = \|\alpha\|^2 \langle \psi_1|A|\psi_1\rangle + \|\beta\|^2 \langle \psi_2|\hat{A}|\psi_2\rangle + \beta^*\alpha \exp(-i\theta)\langle \psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle + \alpha^*\beta\exp(i\theta)\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle$.

再对θ积分一次. $\Rightarrow \langle \hat{A}\rangle = \|\alpha\|^2\langle\psi_1|A|\psi_1\rangle + \|\beta\|^2\langle\psi_2|\hat{A}|\psi_2\rangle$. 这个效果使得密度阵非对角项的影响消失了.

如何解释θ的产生? $\Rightarrow$ 系统与环境的作用.

→ 谐振子的量子化.

由于很多系统在平衡点附近的行为可以由谐振子近似表达, 所以研究谐振子的量子化是必要的.

考虑经典振子的 $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. 正则量子化: 直接将 $p \to \hat{p}$, $x \to \hat{x}$.

定义新的产生、湮灭算符. [注意: 它们互为厄米共轭] $\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$. $\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)$.

利用基本对易子 $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ 给出$[\hat{a},\hat{a}^\dagger]$:

$$
\begin{aligned}
[\hat{a},\hat{a}^\dagger] &= \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)\left[\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p},\ \hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right] \\
&= \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)\left([\hat{x},\ \hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}] + [\frac{i}{m\omega}\hat{p},\ \hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}]\right) \\
&= \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)\left([\hat{x},\hat{x}] - \frac{i}{m\omega}[\hat{x},\hat{p}] + \frac{i}{m\omega}[\hat{p},\hat{x}] - \left(\frac{i}{m\omega}\right)^2[\hat{p},\hat{p}]\right) \\
&= \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)\left(-\frac{i}{m\omega}\cdot i\hbar + \frac{i}{m\omega}\cdot(-i\hbar)\right) = 1.
\end{aligned}
$$

反过来, 由$\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$来表示坐标与动量: $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)$. $\hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)$. 从而有 $\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger)$. 又由 $\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$. $\Rightarrow \hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(2\hat{a}^\dagger a + 1) = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2})$.

从而将 $\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{n}$ 称作粒子数算符. 可通过计算给出其对易关系:

$$[\hat{n},\hat{a}] = \hat{n}\hat{a} - \hat{a}\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} = (\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger)\hat{a} = [\hat{a}^\dagger,\hat{a}]\hat{a} = -\hat{a}.$$

$$[\hat{n},\hat{a}^\dagger] = \hat{n}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{a}^\dagger(\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a}) = \hat{a}^\dagger.$$

设有一个态$|0\rangle$是湮灭子$\hat{a}$的0值本征态. 即 $\hat{a}|0\rangle = 0$. 通过不断地将产生子$\hat{a}^\dagger$作用在$|0\rangle$态上 可以给出一系列的Fock态: $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$.

这样定义的谐振子系统有如下性质:

$$
\begin{cases}
\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle. \\
\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \\
\hat{n}\,|n\rangle = \hat{n}|n\rangle.
\end{cases}
$$

→ 由Fock态的定义, 这是显然的.

→.

先给出第3条的证明: 首先, 我们归纳地给出 $[\hat{n},(\hat{a}^\dagger)^n] = n(\hat{a}^\dagger)^n$ 在$n=1$时成立. 设在n时成立并考察$n+1$.

$$[\hat{n},(\hat{a}^\dagger)^{n+1}] = [\hat{n},(\hat{a}^\dagger)^n\hat{a}^\dagger] \ \underline{\underline{\text{莱布尼茨法则}}}\ [\hat{n},(\hat{a}^\dagger)^n]\hat{a} + (\hat{a}^\dagger)^n[\hat{n},\hat{a}^\dagger] = (n+1)(\hat{a}^\dagger)^{n+1}.$$

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

下面证明第2条：$\hat n(\hat a|n\rangle) = (\hat a\hat n - \hat a)|n\rangle = (n-1)(\hat a|n\rangle)$ 从而 $\hat a|n\rangle$ 为 $\hat n$ 对应于本征值 $n-1$ 的本征态. 从而确定出 $\hat a|n\rangle = C_n|n-1\rangle$. C 为待定常数.

由 $\hat n$ 的性质：$\langle n|\hat n|n\rangle = n$. 而代入 $\hat n = \hat a^\dagger\hat a$ 有：$\langle n|\hat a^\dagger\hat a|n\rangle = \langle \hat a n|\hat a n\rangle = C_n^2\langle n-1|n-1\rangle = C_n^2$. 从而 $C_n = \sqrt n$. 于是第2条得证.

可见 $|n\rangle$ 不仅是算符 $\hat n$ 的本征态. 也是 $\hat H$ 的本征态. $\hat H|n\rangle = \hbar\omega(\frac12+n)|n\rangle$.

下面在坐标表象中研究基态. 由于 $\hat a|0\rangle = 0$. 故我们有 $\langle x|\hat x + \frac{i}{m\omega}\hat p|0\rangle = 0$.

⚠ 理解：在坐标表象下有 $\langle x'|\hat p|x\rangle = -i\hbar\,\partial_x(\delta(x'-x))$.

⇒ 坐标表象下的算符被理解成对波函数进行操作.

从而 $(x + \frac{\hbar}{m\omega}\cdot\frac{d}{dx})\psi_0(x) = 0 \Rightarrow \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac14}\exp(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar})$. 通过不断用升算符上升. 可得第n个激发态的波函数.

谐振子有一个特殊的态——相干态. 它定义为湮灭算符的本征值为 α 的本征态 $|\alpha\rangle$. 设 $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n|n\rangle$. 则由本征方程 $\hat a\sum_{n=0} C_n|n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} C_n\sqrt n|n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\alpha\cdot C_n|n\rangle$. ($|0\rangle$ 降一下就没了.)

或者重新写成 $\sum_{n=0} C_{n+1}\sqrt{n+1}\,|n\rangle = \sum_{n=0}\alpha C_n|n\rangle$. 最简单的情况是里面逐项相等. $C_{n+1}\sqrt{n+1} = \alpha\cdot C_n \Rightarrow C_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}}C_n \Rightarrow C_n = \frac{(\alpha)^n}{\sqrt{n!}}C_0$. 从而可以给出 $|\alpha\rangle = \underbrace{\exp(-\frac{|\alpha|^2}{2})}_{\text{归一化因子}}\cdot\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\alpha)^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$

相干态可以通过生成子从 $|0\rangle$ 来生成. $\hat D(\alpha) = \exp(\alpha\hat a^\dagger - \alpha^*\hat a)$. 证明这个需要算符分析. 若 $[[A,B],A] = [[A,B],B] = 0$. 有：$\exp(\hat A+\hat B) = \exp(\hat A)\cdot\exp(\hat B)\cdot\exp(-\frac12[\hat A,\hat B])$.

则 $\frac12[\alpha\hat a^\dagger, \alpha^*\hat a] = \frac12[\alpha\alpha^*\hat a^\dagger\hat a - \alpha^*\alpha\,\hat a\hat a^\dagger] = -\frac12\|\alpha\|^2$.

$\Rightarrow \hat D(\alpha)|0\rangle = \exp(-\frac12\|\alpha\|^2)\cdot\exp(\alpha\hat a^\dagger)\cdot\exp(-\alpha^*\hat a)|0\rangle = \exp(-\frac12\|\alpha\|^2)\cdot\exp(\alpha\hat a^\dagger)\cdot\sum_{n=0}\frac{(-\alpha^*)^n}{n!}\hat a^n|0\rangle = \exp(-\frac12\|\alpha\|^2)\cdot\exp(\alpha\hat a^\dagger)|0\rangle = |\alpha\rangle$.

在 α 为实数时. $\hat D(\alpha)$ 有特殊性质：此时 $\alpha\hat a^\dagger - \alpha^*\hat a = -\sqrt{\frac{2}{m\hbar\omega}}\,\alpha\cdot i\hat p$ 则 $D(\alpha) = \exp(-\frac{iq}{\hbar}\hat p)$. 把它作用到一个态矢上.

$\exp(-\frac{iq}{\hbar}\hat p)|x\rangle = \int|p\rangle\langle p|\exp(-\frac{iq}{\hbar}\hat p)|x\rangle\cdot dp = \int|p\rangle\langle p|x\rangle\cdot\exp(-\frac{iq}{\hbar}p)\,dp$ (互作用)

利用本征方程. $\langle x|\hat p|p\rangle = p\langle x|p\rangle$. 插入一个完备性关系有 $\int dx'\langle x|\hat p|x'\rangle\langle x'|p\rangle = p\langle x|p\rangle$ 从而有 $\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp(\frac{ip}{\hbar}\cdot x)$.

从而继续上面的推导. $\exp(-\frac{iq}{\hbar}\cdot\hat p)|x\rangle = \int|p\rangle\cdot\exp[-\frac{iq}{\hbar}(p+x)]\cdot dp = \int|p\rangle\langle p|x+q\rangle\cdot dp = |x+q\rangle$. 从而它将坐标本征矢 $|x\rangle$ 平移至 $|x+q\rangle$ 处.

从而 $\hat D(\alpha)\psi(x) = \langle x|\exp(-\frac{iq}{\hbar}\cdot\hat p)|\psi\rangle = \psi(x-q)$. ⇒ $D(\alpha)$ 称为空间平移算符. 将 $\psi(x)$ 平移至 $\psi(x-q)$. 可以看出. 空间平移算符的生成元是动量算符.

下面讨论相干态的一些小性质：

1. 相干态是不确定性最小的态.

$\langle x|\alpha\rangle = \langle x|\hat D(\alpha)|0\rangle = \psi_0(x-q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)\cdot\exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-q)^2)$

由于对于相干态. $\langle\alpha|\hat a|\alpha\rangle = \alpha$. $\langle\alpha|\hat a^\dagger|\alpha\rangle = \alpha^*$. 则坐标算符的均值 $\langle\hat x\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha+\alpha^*)$.

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

其中 $\langle\alpha|\hat a^\dagger\hat a|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat a^\dagger\,\hat a|\alpha\rangle = (\hat a|\alpha\rangle)^\dagger\,\hat a|\alpha\rangle = \langle\alpha|\alpha^*\cdot\hat a|\alpha\rangle = \alpha^*\alpha$.

$\langle\alpha|\hat a\hat a^\dagger|\alpha\rangle=\alpha\cdot\alpha^*+1.$　从而有 $\langle\hat x^2\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}(\alpha^2+\alpha^{*2}+2\alpha\alpha^*+1).$　$\Rightarrow(\Delta x)^2=\frac{\hbar}{2m\omega}$　同理计算得 $(\Delta p)^2=\frac{1}{2}m\hbar\omega$ $\Rightarrow(\Delta x)(\Delta p)=\frac{\hbar}{2}.$

2、相干态保持演化过程中波包形态的稳定.

考虑哈密顿量为 $\hat H=\hbar\omega\hat a^\dagger\hat a$ 的粒子. 其演化: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=\hat H|\psi(t)\rangle$. $\Rightarrow|\psi(t)\rangle=\exp(-\frac{i\hat H}{\hbar}t)\cdot|\psi(0)\rangle.$

$\Rightarrow$ 取 $|\psi(0)\rangle=|\alpha\rangle$, $=\exp(-i\hat a^\dagger\hat a\omega t)|\alpha\rangle$

将相干态展开. $|\alpha\rangle=\exp(-\frac{\|\alpha\|^2}{2})\cdot\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle.$

则 $\exp(-i\hat a^\dagger\hat a\omega t)\cdot|n\rangle=\exp(-i\omega t\cdot n)\cdot|n\rangle.$

$\Rightarrow\exp(-i\omega t\,\hat a^\dagger\hat a)=\exp(-\frac{\|\alpha\|^2}{2})\cdot\sum_{n=0}^{\infty}\frac{[\alpha\exp(-i\omega t)]^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle=|\alpha\exp(-i\omega t)\rangle.$　$\Rightarrow$ 相当于加了个相位旋转.

$\psi(x,t)=\langle x|\psi(t)\rangle=\langle x|\alpha\exp(-i\omega t)\rangle\propto\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\cdot\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-q\cos\omega t)^2\right]$　<这里计算相当繁琐>

3、相干态为光场探测效率最高的态.