从分析力学到量子力学

Jake
量子力学补习班(1)
集智俱乐部

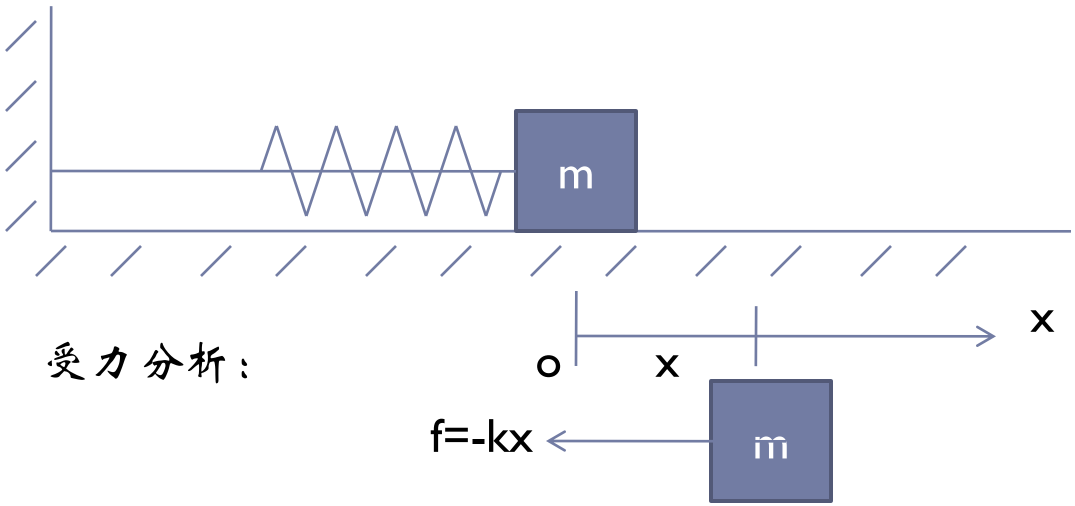
整体规划

- 从分析力学到量子力学
  - 牛顿力学、拉格朗日力学与哈密顿力学
  - 简谐振子：从经典到量子
- 产生湮灭算符与二次量子化
  - 产生湮灭算符的引入
  - 多粒子系统与二次量子化
- 量子场论初步1——Klein Gordon场
  - 正则量子化
  - 路径积分量子化
  - 费曼图
- 量子场论初步2——Dirac场
  - 李群初步
  - 相对论初步
  - 狄拉克场
  - 其它量子场
- 重正化群
  - 重正化简介：渗流模型
  - ISING模型
  - 标量场的重正化
  - 统计场论和共形场论

本次内容

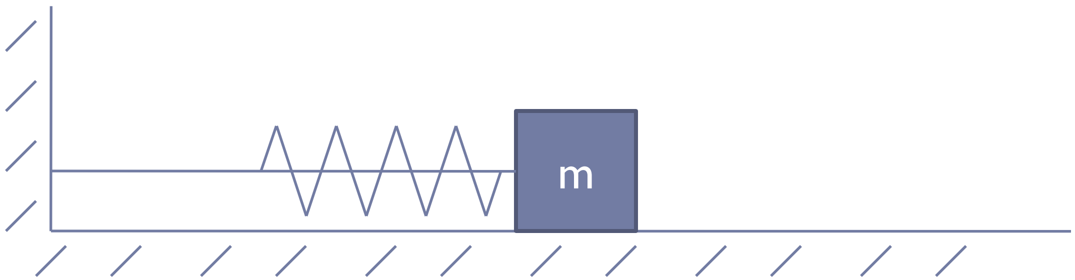
- 一个实例——简谐振子
- 牛顿力学求解——微分方程
- 拉格朗日力学
  - 历史渊源
  - 最速降线问题与变分法
  - 拉氏力学求解——欧拉-拉格朗日方程
  - 拉氏力学与牛氏力学的关系
  - 最美力学定理——Noether定理
- 哈密顿力学
  - 从拉格朗日量到哈密顿量
  - 哈密顿力学求解
  - 哈密顿方程的直观解释
- 量子力学
  - 线性代数复习
  - 量子力学基本原理
  - 量子力学求解
  - 量子力学解的意义

简谐振子

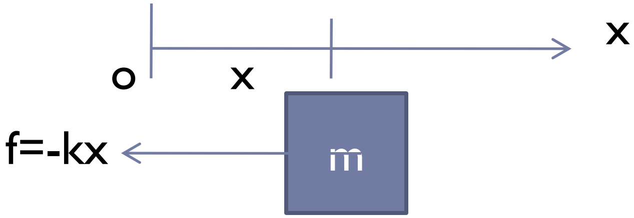


- 胡克定律：f=-kx
- 弹簧的势能：
- $V=kx^2/2$

牛顿力学分析



受力分析：



- **牛顿第二定律：**

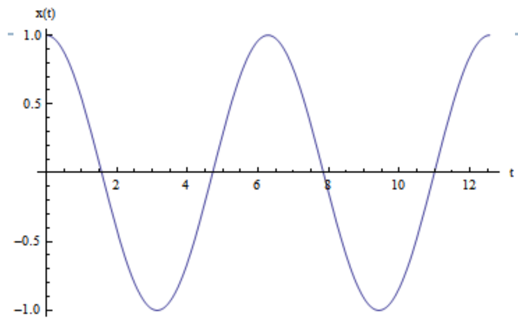
$$m\frac{dx^2(t)}{dt^2}=-kx(t)\Rightarrow m\frac{dx^2(t)}{dt^2}+kx(t)=0$$

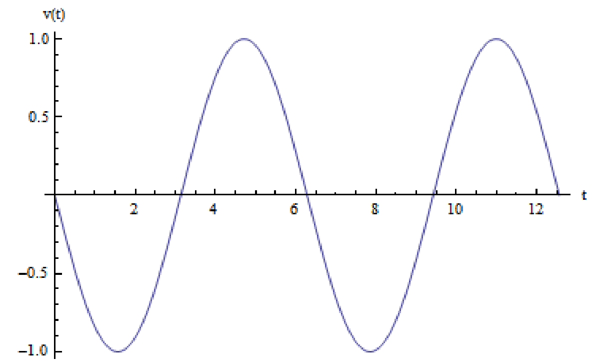
$$\begin{cases} m\dfrac{dx^2(t)}{dt^2}+kx(t)=0 \\ x(t)=x_0, \left.\dfrac{dx(t)}{dt}\right|_{t=0}=0 \end{cases} \overset{Mathematica}{\Rightarrow} x(t)=x_0\cos(\omega t), \quad where: \omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$$

解曲线

- **任意一时刻的位置**

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t), \quad where: \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

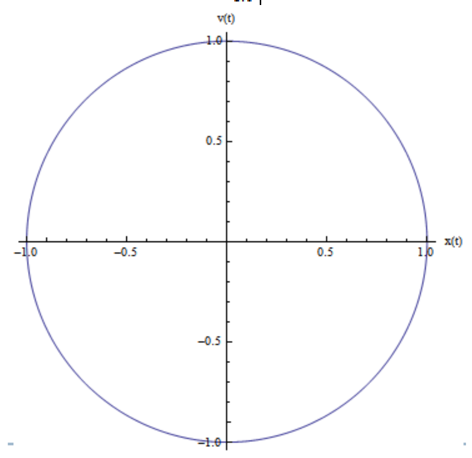




- **任意时刻的速度**

$$v(t) = -\omega x_0 \sin(\omega t), \quad where: \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

- **消去t，x-v平面内的轨迹：**

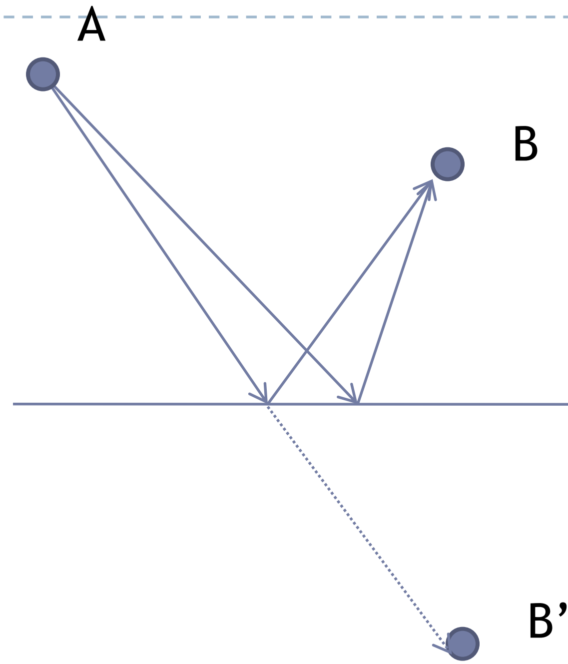


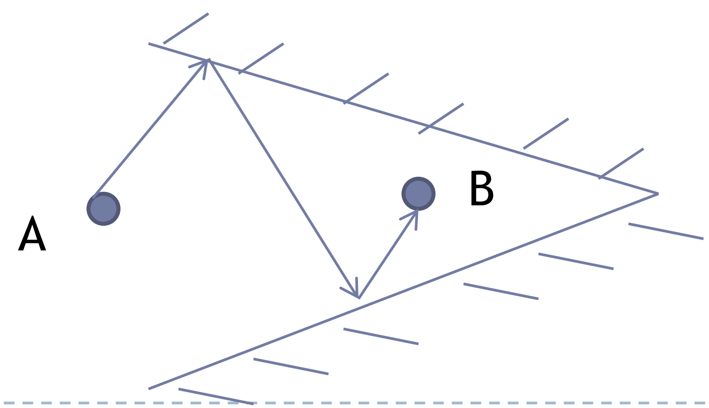
拉格朗日力学

历史渊源

- 费马的光行最速原理

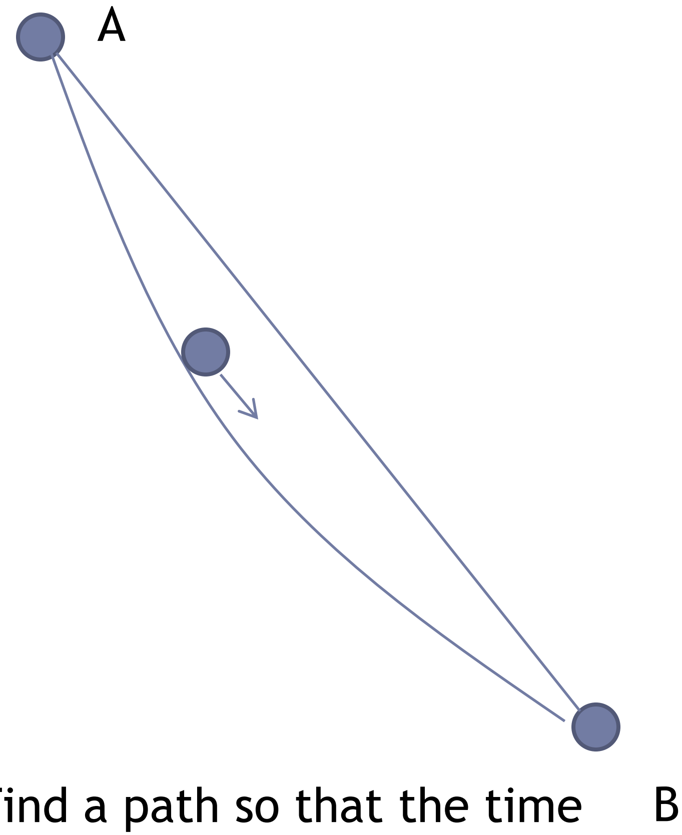
1601~1665

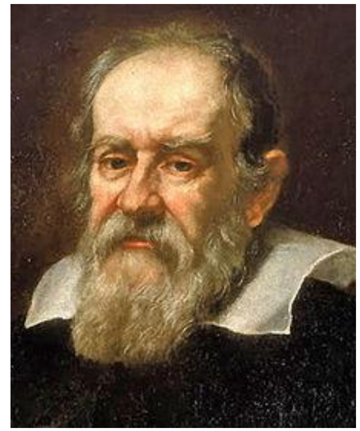




- 特德.将：《你一生的故事》

Brachistochrone (最速降线问题)





Galileo Galilei

« Discourse on two new sciences »

Johann Bernoulli Challenged mathematicians in the world (1696)

Find a path so that the time of a ball rolling along it can be minimized

从微积分到变分学

- 微积分求函数极值的一般步骤：

$$\min f(x)$$

$$set \quad \frac{df(x)}{dx} = 0 \Rightarrow x^*$$

$$\min \ f(x,y)$$

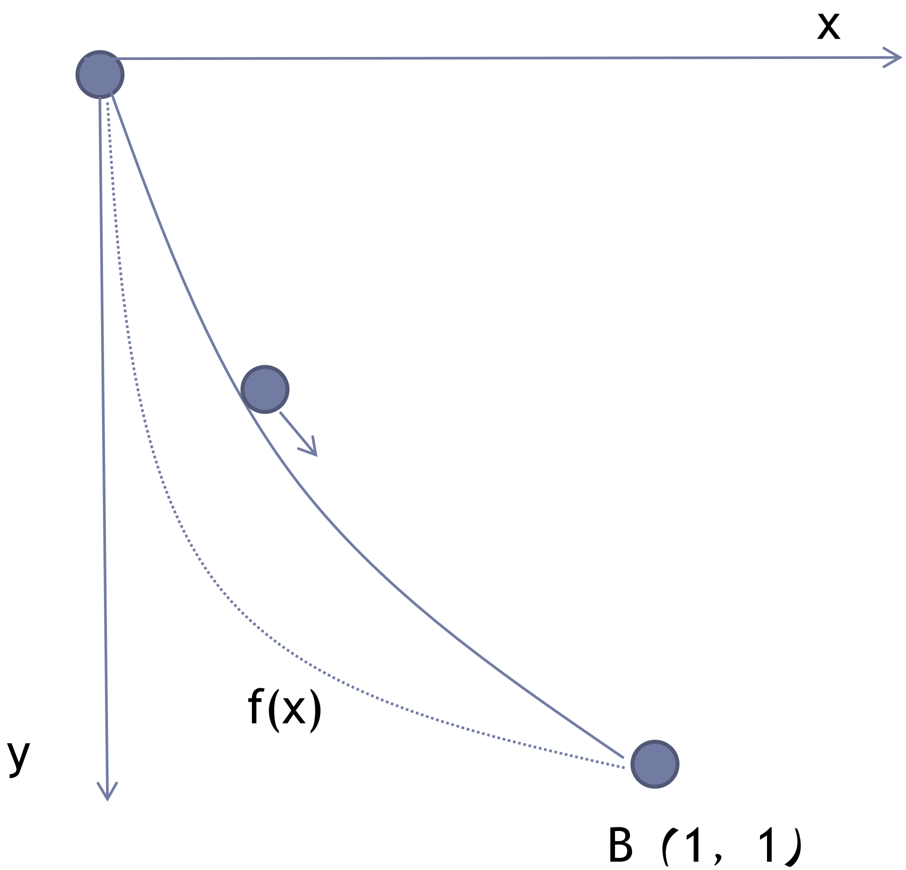
$$set \quad \begin{cases} \dfrac{\partial f(x,y)}{\partial x} = 0 \\ \dfrac{\partial f(x,y)}{\partial y} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x^* \\ y^* \end{cases}$$

- 同样道理，求解最优曲线，需要对整个曲线进行微小的改变（变分），然后求函数的极值

$$\min F(y(x))$$

$$set \quad \frac{\delta F(y(x))}{\delta y(x)} = 0$$

Brachistochrone (最速降线问题)



$$v=\sqrt{2gy}=\sqrt{2gf}$$

$$dl=\sqrt{(dx)^2+(dy)^2}=\sqrt{1+f'^2}\,dx$$

$$dt=dl/v=\frac{\sqrt{1+f'^2}\,dx}{\sqrt{2gf}}$$

$$T=\int_0^1\frac{\sqrt{1+f'^2}\,dx}{\sqrt{2gf}}$$

$$\min_{f(x)} T(f(x))=\int_0^1\sqrt{\frac{1+(f'(x))^2}{2gf(x)}}\,dx$$

$$s.t.\quad f(0)=0,\ f(1)=1$$

泛函极值与欧拉-拉格朗日方程

$$T=\int_0^1 F(x,f,f')dx,\ F(x,f,f')=\sqrt{\frac{1+(f')^2}{2gf}}$$

$$\delta T=\int_0^1 \delta F(x,f,f')dx=\int_0^1\left(\frac{\partial F}{\partial f}\delta f+\frac{\partial F}{\partial f'}\delta f'\right)dx$$

$$=\int_0^1\left(\frac{\partial F}{\partial f}\delta f+\frac{\partial F}{\partial f'}\delta\frac{df}{dx}\right)dx=\int_0^1\left(\frac{\partial F}{\partial f}\delta f+\left(\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial f'}\delta f\right)-\delta f\frac{d}{dx}\frac{\partial F}{\partial f'}\right)dx\right.$$

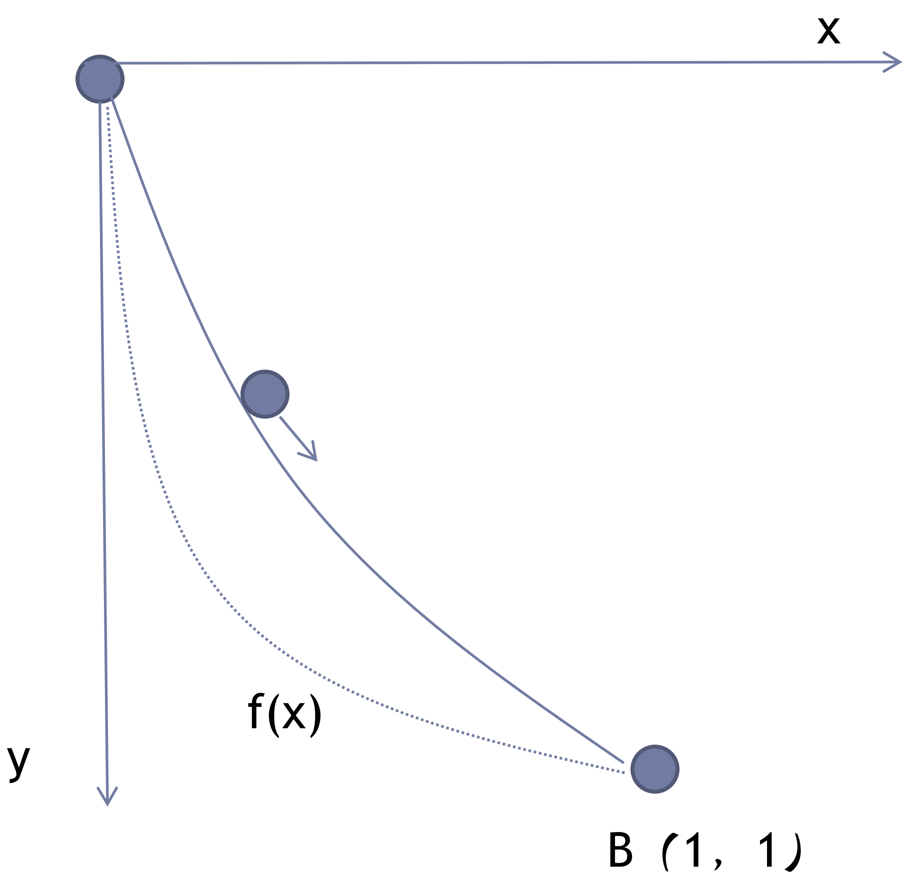
$$=\int_0^1\left(\frac{\partial F}{\partial f}-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial f'}\right)\right)\delta f dx+\left(\delta f\cdot\frac{\partial F}{\partial f'}\right)\Big|_0^1$$

$$=\int_0^1\left(\frac{\partial F}{\partial f}-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial f'}\right)\right)\delta f dx$$

$$\Rightarrow\frac{\partial F}{\partial f}-\frac{d}{dx}\left(\frac{\partial F}{\partial f'}\right)=0$$

欧拉方程

Brachistochrone (最速降线问题)



$$\min_{f(x)} T(f(x)) = \int_0^1 \sqrt{\frac{1+(f'(x))^2}{2gf(x)}}dx$$

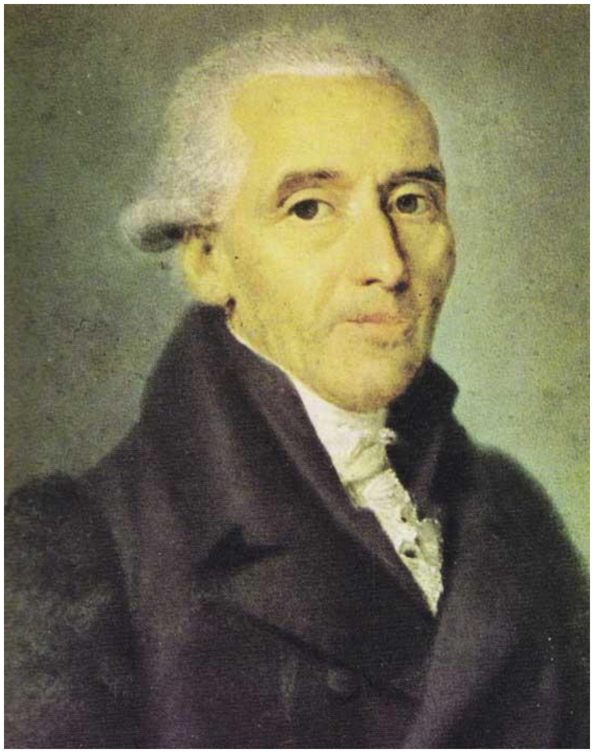
$$s.t. \quad f(0)=0,\ f(1)=1$$

欧拉-拉格朗日方程：

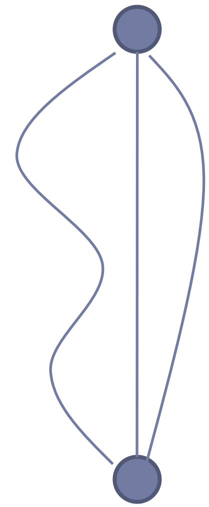
$$2f(x)f''(x)+(f'(x))^2+1=0$$

$$\Rightarrow \begin{cases} x = \dfrac{C}{2}(\theta - \sin\theta) \\ f = \dfrac{C}{2}(1-\cos\theta) \end{cases}$$

拉格朗日力学——最小作用量原理



Joseph-Louis Lagrange
1736~1813



粒子走的真实路径是一条最偷懒路径

路径：x(t),v(t)

最偷懒：作用量最小

作用量：拉格朗日量沿路径的积分

Lagrangian

- Lagrangian： $L(x,\dot{x},t)=T(x,\dot{x},t)-V(x,\dot{x},t)$
- 作用量(Action)： $S(x,\dot{x},t)=\int_a^b L(x,\dot{x},t)dt$
- 最小作用量原理：

$$\min_{x,\dot{x}} S(x,\dot{x},t)=\int_a^b L(x,\dot{x},t)dt$$

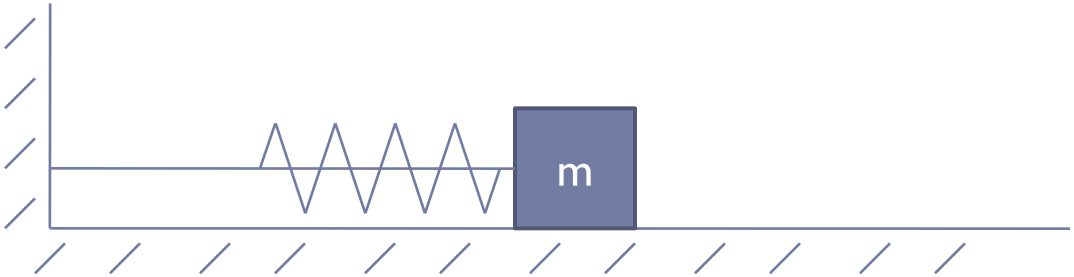
$$s.t.\ \ \delta x\big|_{a,b}=0$$

- 变分：

$$\delta S(x,\dot{x},t)=\int_a^b \delta L(x,\dot{x},t)dt=0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial L}{\partial x}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)=0 \quad \Longleftarrow \quad \text{欧拉-拉格朗日方程}$$

用拉格朗日力学求解谐振子



- 谐振子的运动路径：x(t),v(t)=dx(t)/dt
- 谐振子在任意路径、任意时刻的拉格朗日量：

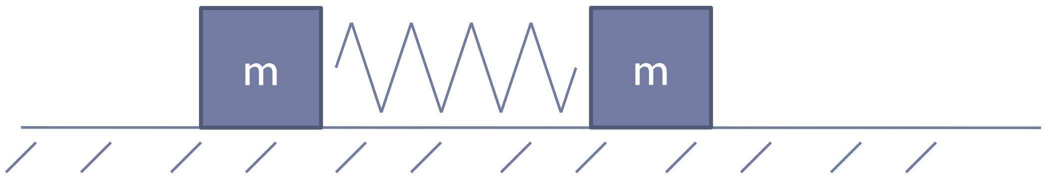
$$L(x,\dot{x},t)=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-\frac{1}{2}kx^2$$

- 代入欧拉-拉格朗日方程：

$$\frac{\partial L}{\partial x}-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right)=0\Rightarrow -kx-\frac{d}{dt}\left(m\dot{x}\right)=0$$

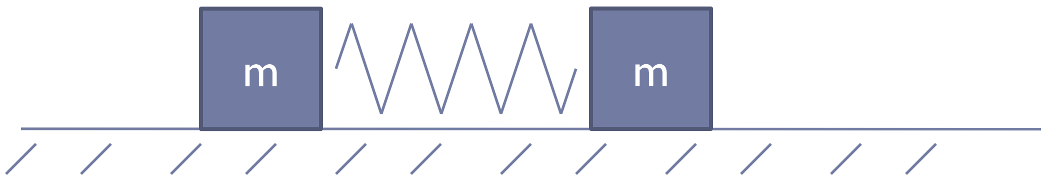
$$m\ddot{x}+kx=0$$

思考题



- 光滑平面上的相互连接的两个弹簧振子
- 弹簧的自然长度为0

思考题



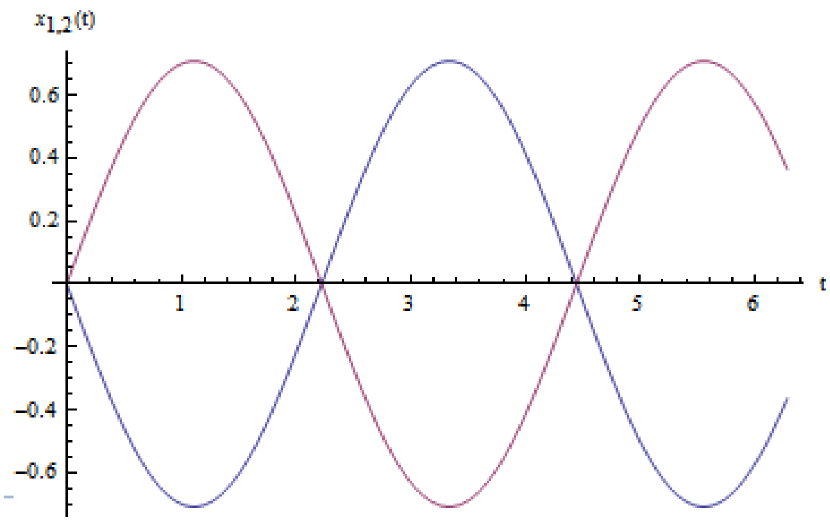
- 谐振子的运动路径：$x_{1,2}(t), v_{1,2}(t)$
- 谐振子在任意路径、任意时刻的拉格朗日量：

$$L(x_{1,2}, \dot{x}_{1,2}, t) = \frac{1}{2}m(\dot{x}_1{}^2 + \dot{x}_2{}^2) - \frac{1}{2}k(x_1 - x_2)^2$$

- 代入欧拉-拉格朗日方程：

$$\frac{\partial L}{\partial x_{1,2}} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\delta L}{\delta \ddot{x}_{1,2}}\right) = 0 \Rightarrow \begin{cases} -m\ddot{x}_1 - k(x_1 - x_2) = 0 \\ -m\ddot{x}_2 + k(x_1 - x_2) = 0 \end{cases}$$

$$\dot{x}_1(0) = -1, \dot{x}_2(0) = 1$$



从拉格朗日最小作用量原理到牛顿力学

- 假设n个粒子组成的保守系统的拉格朗日为：

$$L(x_i, \dot{x}_i, t) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2 - V(x_1, \cdots x_i, \cdots x_n)$$

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\right) = 0 \Rightarrow -m_i \ddot{x}_i - \frac{\partial V}{\partial x_i} = 0$$

F_i

$$\Rightarrow m_i \ddot{x}_i = F_i$$

- 拉格朗日成立的条件：保守力学系统，即外力可以写成势函数对位置的一阶导数

最美力学定理——Noether定理

- 在物理学中，物理规律的对称性是指：物理系统经过了某种变换之后，物理规律仍然保持不变。
- 例如：
  - 时间平移对称性
  - 空间平移对称性
  - 角度旋转对称性
  - 时间反演对称性
  - 宇称对称性
- 著名的Noether定理：
- 物理系统中的对称性与守恒量一一对应

Emmy Noether
(1882-1935)

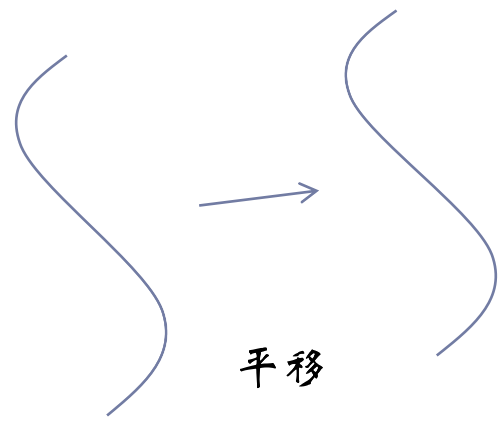
拉格朗日框架下的证明

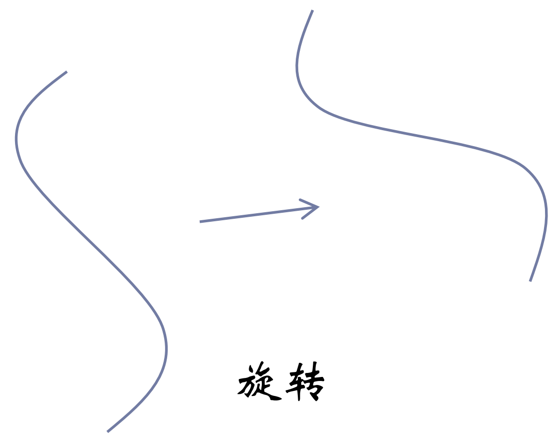
- 从不同的参数的角度看系统
- 用一组小参数θ来刻画变换
- 相应地，拉格朗日量的自变量会发生变化：

$$x \to x' + \frac{\partial x}{\partial \theta} d\theta$$

$$\dot{x} \to \dot{x}' + \frac{\partial \dot{x}}{\partial \theta} d\theta$$

- 例如平移： $\frac{\partial x}{\partial \theta} = 1, \frac{\partial \dot{x}}{\partial \theta} = 0$
- 平面旋转： $\frac{\partial x}{\partial \theta} = -y, \frac{\partial y}{\partial \theta} = x, \frac{\partial \dot{x}}{\partial \theta} = -\dot{y}, \frac{\partial \dot{y}}{\partial \theta} = \dot{x}$
- 由于L刻画了系统的全部特性，所以对称性意味着相应的L不变





$$dL = \sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial \theta} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial \theta} \right) d\theta = 0$$

推导Noether定理

- 系统对称的条件：

$$\sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial x_i}\frac{\partial x_i}{\partial \theta} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\frac{\partial \dot{x}_i}{\partial \theta} \right)\Bigg|_{\theta=0} = 0$$

- 拉格朗日欧拉方程： $\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\right) = 0 \Rightarrow \frac{\partial L}{\partial x_i} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\right)$
- 从而： $\frac{d}{dt}\left(\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\frac{\partial x_i}{\partial \theta}\right) = 0$
- 因此 $\sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\frac{\partial x_i}{\partial \theta}$ 为一个守恒的物理量
- 例如如果L平移对称，即$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = p$ 守恒
- 如果L旋转对称，即角动量守恒

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\frac{\partial x}{\partial \theta} + \frac{\partial L}{\partial \dot{y}}\frac{\partial y}{\partial \theta} = -y\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} + x\frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = -yp_x + xp_y = J$$

哈密顿力学

哈密顿

- 作用量是一个全局的信息
- 欧拉拉格朗日方程是二阶方程
- 哈密顿给出了一种一阶方程的描述
- 哈密顿量是系统的状态量
- 哈密顿使得牛顿力学便成为一个动力系统

William Rowan Hamilton (1805–1865)

从拉格朗日方程导出哈密顿方程

- 动量：

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}$$

- 哈密顿量：

$$H(x_i, p_i, t) = \sum_i \dot{x}_i p_i - L \overset{\text{如果}V\text{与}\dot{x}\text{无关}}{=} T + V$$

- 由欧拉拉格朗日方程

$$\dot{p} = \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) = \frac{\partial L}{\partial x} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

- 由哈密顿量定义：

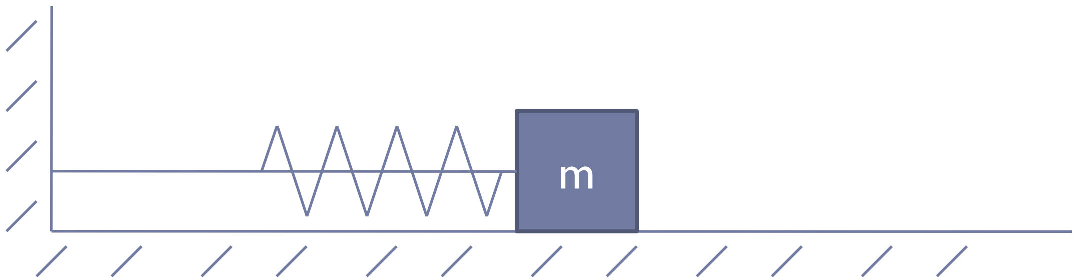
$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}$$

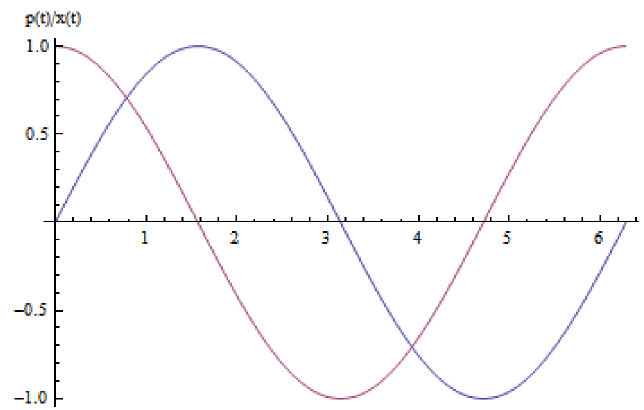
- 综合：

$$\begin{cases} \dot{q} = \dfrac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} = -\dfrac{\partial H}{\partial q} \end{cases}$$

哈密顿方程

由哈密顿方程求解谐振子





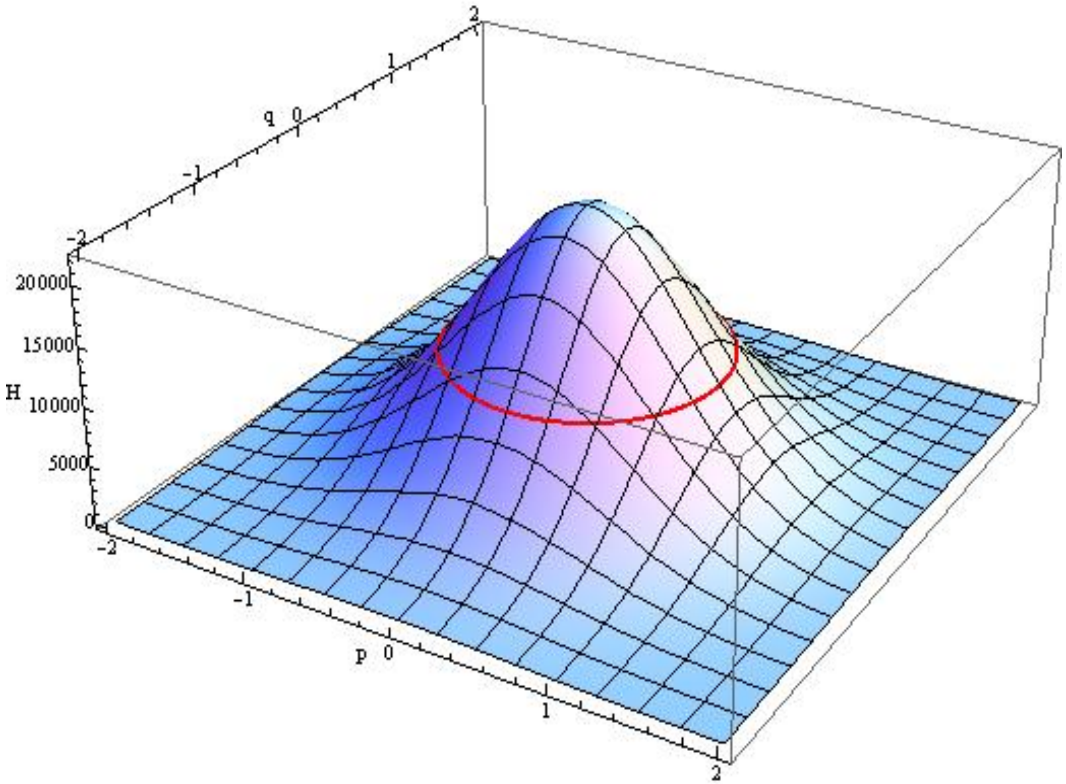
- 系统的哈密顿量：

$$H=\frac{p^2}{2m}+k\frac{q^2}{2}$$

- 哈密顿方程：

$$\begin{cases}\dot{q}=\dfrac{\partial H}{\partial p}\\[2ex] \dot{p}=-\dfrac{\partial H}{\partial q}\end{cases} \Rightarrow \begin{cases}\dot{q}=\dfrac{p}{m}\\[2ex] \dot{p}=-kq\end{cases} \Rightarrow \begin{cases}q=\dfrac{\sin\left(\sqrt{\dfrac{k}{m}}t\right)}{\sqrt{km}}\\[4ex] p=\cos\left(\sqrt{\dfrac{k}{m}}t\right)\end{cases}$$

如何理解哈密顿方程



- 如果将粒子运动的轨迹画在(p,q,H(p,q))三维空间中。
- 则哈密顿方程刚好是的运动轨迹沿着H曲面的等高线运动
- 这也就是意味着哈密顿的守恒性导出了哈密顿方程

量子力学

线性代数基础

- 向量

$$|x\rangle = (x_1, x_2, \cdots x_n)^T, |y\rangle$$

- 思考：一个函数f(x)可以看作是无穷维空间中的向量
- 向量内积：

$$\langle x|y\rangle = (x_1^*, x_2^*, \cdots x_n^*)\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

- 赋予了内积的向量空间为希尔伯特空间
- 设线性空间为S（向量的集合），如果任意一个向量|x>都可以展开为一组向量($|a_1>, |a_2>, \ldots,$)的线性组合，则该向量组为该空间的一组基，且$x_1, x_2, \ldots, x_n$为向量|x>在该组基下的坐标

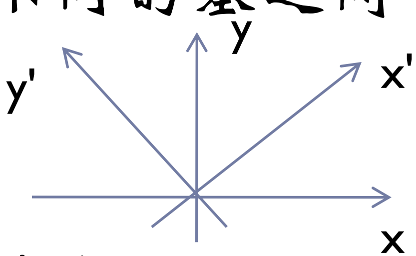
$$|x\rangle = x_1|a_1\rangle + x_2|a_2\rangle + \cdots x_n|a_n\rangle$$

线性代数基础

- 算符（矩阵）：A, B
- 算符作用到向量上可以得到新的向量，例如旋转算符

$$T\cdot\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\cos\theta-y\sin\theta\\ x\sin\theta+y\cos\theta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x'\\y'\end{pmatrix}$$

- 不同的基之间可以通过算符进行坐标变换。例如：



$$\begin{pmatrix}x'\\y'\end{pmatrix}=T\cdot\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}x\\y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}x\cos\theta-y\sin\theta\\ x\sin\theta+y\cos\theta\end{pmatrix}$$

- 基变换：设两组基：$(|x_1>,|x_2>,\ldots),(|y_1>,|y_2>,\ldots)$，那么从第一组基到第二组基的变换矩阵为：

$$T_{ij}=\langle x_i|y_j\rangle$$

线性代数基础

- 算符A的本征值(eigen value)方程：

$$AX = \lambda X$$

- 其中满足该方程的λ为本征值。一般的，A的阶是n的话，A就会有λ个本征值。
- 对于任意一个本征值λi，满足如下方程的向量为本征向量

$$A\left|\lambda_i\right\rangle = \lambda_i\left|\lambda_i\right\rangle$$

- 例如：

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}, \lambda_1 = 1/2\,(5 + \sqrt{33}), \lambda_2 1/2\,(5 - \sqrt{33})$$

$$\left|\lambda_1\right\rangle = (\text{-}4/3 + 1/6\,(5 + \sqrt{33}),1), \left|\lambda_2\right\rangle = (\text{-}4/3 + 1/6\,(5 - \sqrt{33}),1)$$

- 算符A的本征向量构成了一组基。

量子力学基本原理（简化版）

- P1: 微观物理系统的状态可以表示为希尔伯特空间中的向量。
- P2: 物理量都用厄米算符表示（特征根为实数的算符）来表示。其中算符的本征值对应着可得到的物理量数值，本征向量|v>与状态向量|s>的内积平方|<v|s>|^{2}为测到物理量为v的概率！其中<v|s>为概率幅。
- P3: 设粒子的位置对应算符X，动量对应算符P，则对于任何一个状态|s>，它在X算符的本征向量空间下的概率幅分布f(x)与它在P算符本征向量概率幅分布g(p)构成了傅立叶变换对。

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi h}}\int_{-\infty}^{+\infty}g(p)e^{i\frac{xp}{h}}dp$$

- 在位置表象下：

$$X\rightarrow x, P\rightarrow -ih\frac{\partial}{\partial x}$$

$$Xf(x)\rightarrow xf(x), Pf(x)\rightarrow -ih\frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

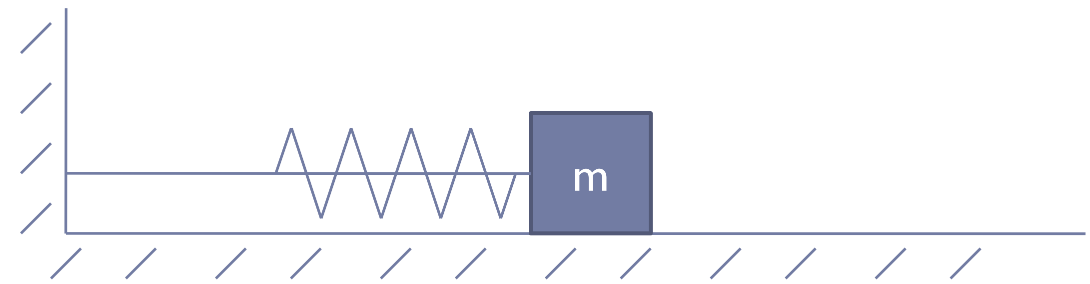
薛定谔方程

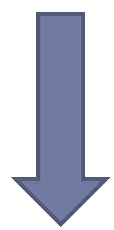
- P4：物理系统态向量的演化遵循薛定谔方程，其中H为哈密顿算符

$$i h \frac{\partial \left| s \right\rangle}{\partial t} = H \left| s \right\rangle$$

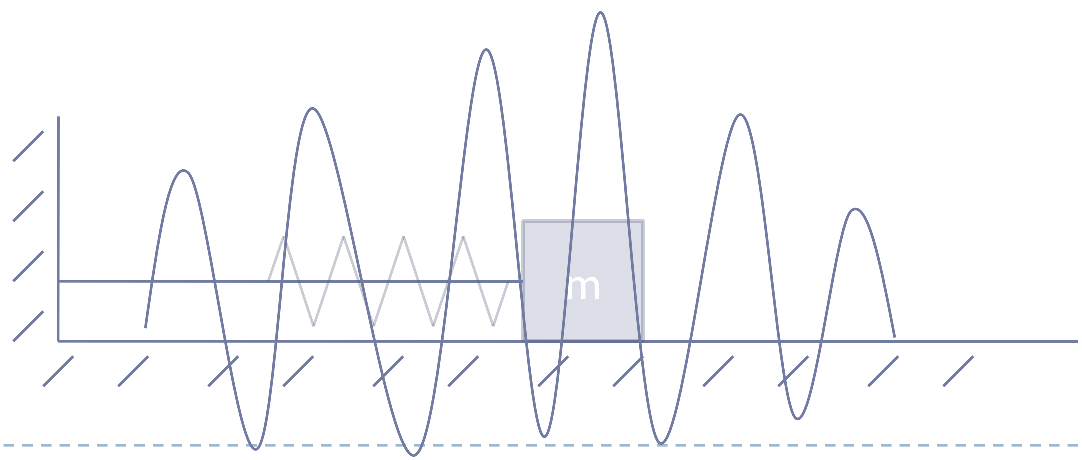
$$\Rightarrow \begin{cases} i h \dfrac{\partial s_1}{\partial t} = H s_1 \\ \qquad \vdots \\ i h \dfrac{\partial s_i}{\partial t} = H s_i \end{cases}$$

量子版本的谐振子





实体变成了概率浮云



薛定谔方程

$$H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{k}{2}X^2$$

在X的表象下：

$$H = -\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k}{2}x^2$$

薛定谔方程：

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\psi(x,t)$$

$$\Rightarrow ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = (-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k}{2}x^2)\psi(x,t)$$

二阶偏微分方程

薛定谔方程求解

求解二阶偏微分方程

$$ih\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=(-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{k}{2}x^2)\psi(x,t)$$

假设：$\psi(x,t)=f(x)g(t)$

$$ihf(x)\frac{dg(t)}{dt}=g(t)\left(-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}+\frac{k}{2}x^2 f(x)\right)$$

$$\Rightarrow ih\frac{dg(t)}{g(t)dt}=-\frac{1}{2mf(x)}\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}+\frac{k}{2}x^2$$

观察发现，左边仅仅与时间有关，右边仅仅与空间有关，左=右意味着：
它们都等于某个常数E

$$ih\frac{dg(t)}{g(t)dt}=E\Rightarrow g(t)=Ce^{-i\frac{E}{h}}$$

问题归结为H的本征值问题

$$-\frac{1}{2mf(x)}\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}+\frac{k}{2}x^2=E\Rightarrow Hf(x)=Ef(x)$$

谐振子薛定谔方程的解

- 要使得上述方程成立，首先E必须取分立的值，即哈密顿算符的本征值（n为任意>=0的整数）：

$$E_n = (n+\frac{1}{2})h\sqrt{\frac{k}{m}}$$

- 其次，对于任意一个本征值，H的本征向量（波函数）为：

$$|E_n\rangle = f_n(x) = \left(\frac{\sqrt{m\omega/h}}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\omega}{2h}x^2\right)L_n(\sqrt{m\omega/h}x)$$

- 其中 $L_n(\sqrt{m\omega/h}x)$ 是一个很复杂的函数，被称为厄米多项式。
- 最终薛定谔方程的解为：

$$\psi_n(x,t) = g(t)f_n(x) = \left(\frac{\sqrt{m\omega/h}}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m\omega}{2h}x^2\right)L_n(\sqrt{m\omega/h}x)\exp(-itE_n/h)$$

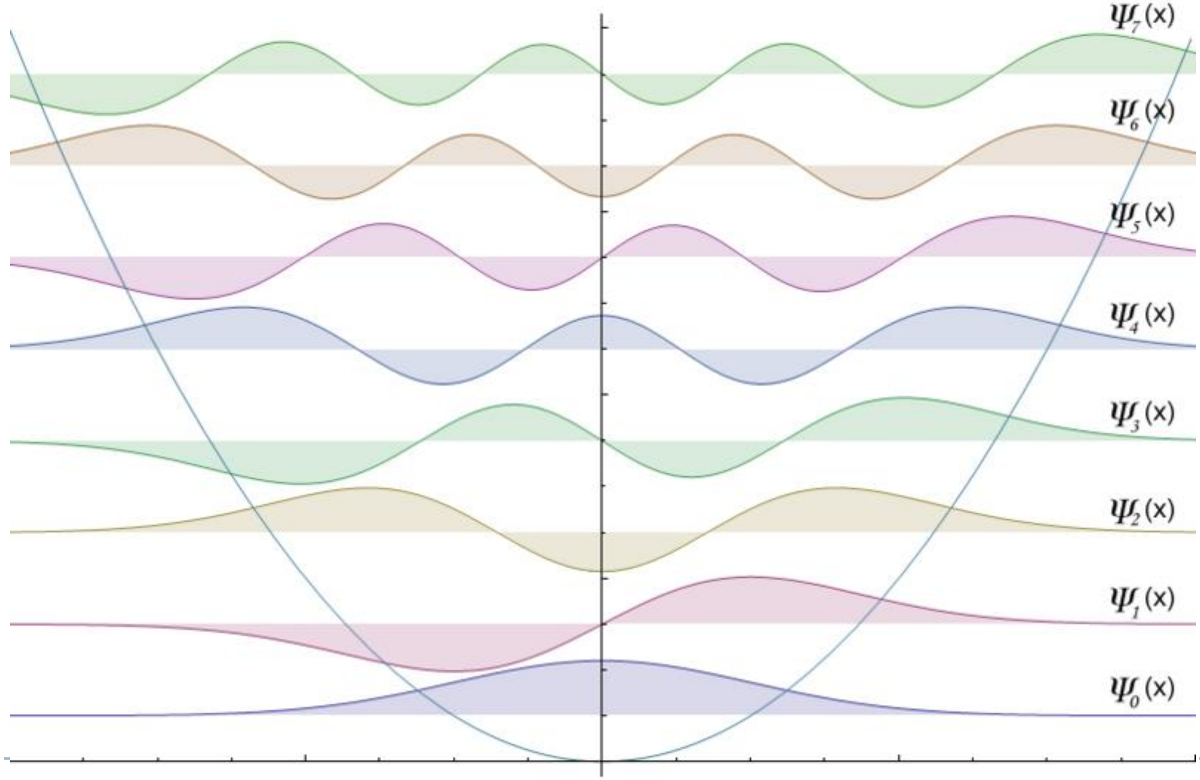
- 其中，n由初始条件确定

几率解释

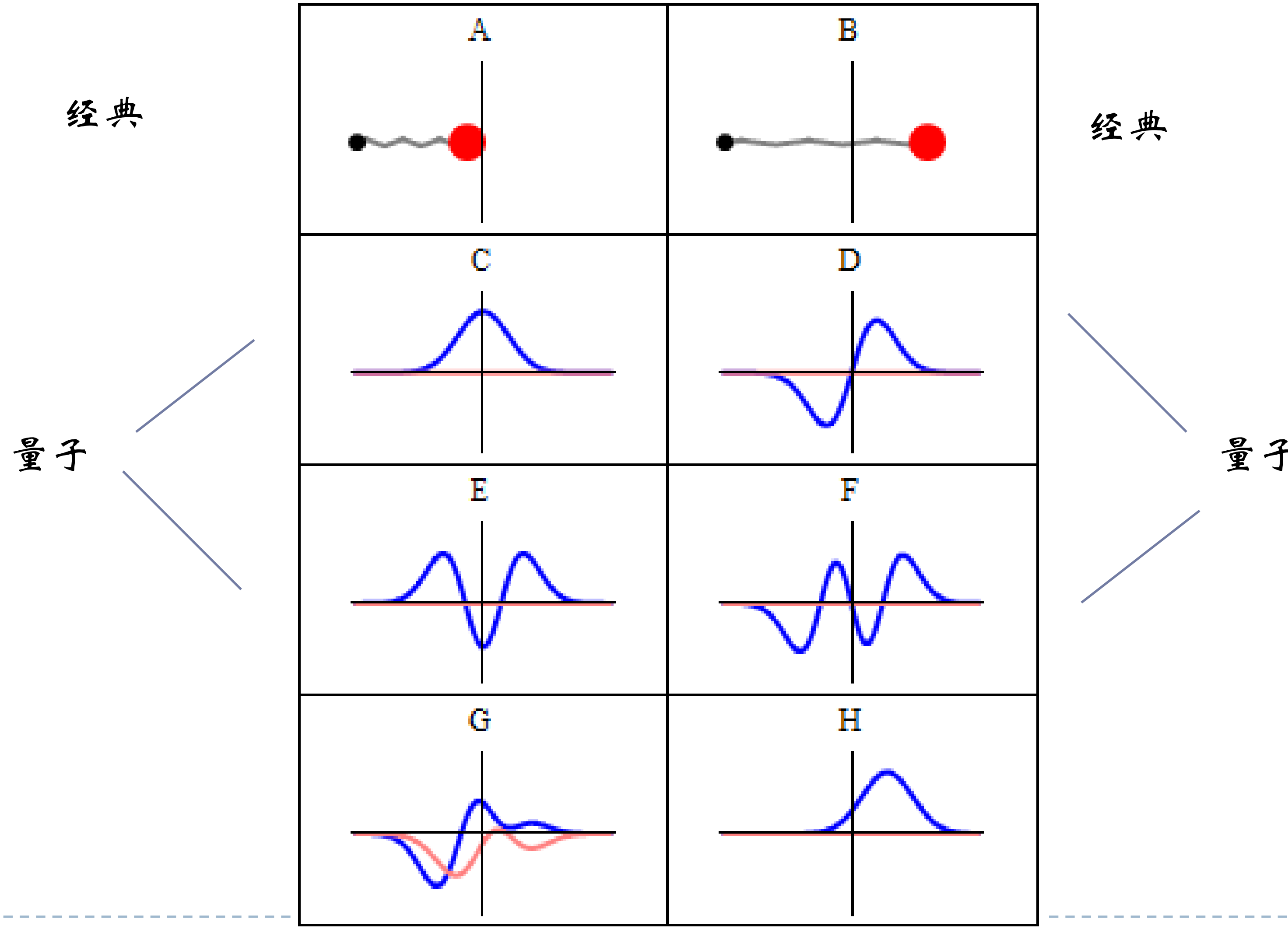
- 在任意时刻，振子的位置为x的概率为：

$$p_n(x,t) = \left|\langle x|\psi_n\rangle\right|^2 = |\psi_n(x,t)|^2 = \left(f_n(x)\right)^2$$

- 所以概率分布是稳定的。



总体图景



参考文献

- 有关量子概率、不确定性原理等内容
  - 《当概率变成复数》
  - “量子决策”读书会1,2,3
  - 一本从信息论角度讨论量子概率等问题的好书：《宇宙极问》
- 有关分析力学：《理论物理学》
- 有关量子力学的进一步阅读：《高等量子力学》