

美国大学生物理联合会中山大学分会 (SPS-SYSU)

新会员入会面试阅读材料

【量子力学】

命题人：余荫锐

1. 请 10 分钟内阅读以下阅读材料。可以上网查资料。
2. 阅读完毕后，以你喜欢的方式，向面试官讲授这些知识并回答提问。时间不超过 10 分钟。

提示：

1. 讲授过程不要求脱稿，您无需纠结于概念或定义，甚至无需掌握严谨地推导或者前因后果，但是您最好能把物理图像讲清楚，即，对材料的定性了解是必要的。
2. 如果您感到阅读时间有限，可以先大致浏览一遍，着重阅读您感兴趣的部分即可。
3. 在讲授过程中如果您感到难以找到讲授的切入点，可以参考以下问题，重点讲清楚以下几点即可（如果要按照这样的思路讲授，您或许不需要仔细阅读材料的第一小节，只需要知道它定义了内积即可，且这个定义和您之前学过的一样）：

a) 什么是基矢量？

b) 如何定义正交归一基？

c) 什么叫做矢量在基矢量上的展开？

当然，这些问题只是作为提示而存在，您不必完全依照这个思路来讲。如果您结合自己的过往所学，对材料的其他部分更感兴趣，或者您有自己的思路或见解，欢迎自由发挥。

阅读材料：

1.4 n 维矢量空间

平常在我们的概念里，“空间”是指该空间里所有点的集合。在空间里取直角坐标后，便赋予各点一个有序数组 (x, y, z) ，以表征它的位置。这有序

数组也看成是由坐标原点引向该点的矢量(位矢)的分量,或者按本节开头所述那样,是位矢的一种表示。所以,“空间”又可看成是所有这些矢量的集合,故有矢量空间之称。从数学上看,只有矢量,空间还没有结构,我们尚须赋予它们一定的运算法则。于是,人们定义了矢量的“加法”和“数积”的运算法则。这些法则对矢量来说是线性的,这样一来,我们就有了线性矢量空间(或简称线性空间)的概念。把所有这些概念从日常我们熟悉的三维推广到 n 维,这就是 n 维线性空间的概念。在许多场合,只有矢量的线性运算还不够,需要引入“内积”运算。有了这种运算,我们才有矢量的大小(模)和矢量之间夹角的概念。在实矢量空间中,矢量 $|a\rangle$ 、 $|b\rangle$ 之间夹角 θ 的余弦定义为:

$$\cos\theta = \frac{\langle a|b\rangle}{|a|\cdot|b|}, \quad (\text{A. 20})$$

在复矢量空间里上述内积可能是复数,这种几何解释是没有意义的。然而,当两个非零矢量的内积等于0时,我们就认为它们互相垂直,或者说它们是正交的(orthogonal)。“正交”的概念也适用于复矢量空间。

赋予“内积”运算的矢量空间,叫做内积空间。

1.5 矢量空间的基

如1.3节所述,在一个 n 维的矢量空间里,最多能找到 n 个线性无关的矢量组。选定这样一个矢量组 $|b^{(1)}\rangle$ 、 $|b^{(2)}\rangle$ 、 \dots 、 $|b^{(n)}\rangle$ 之后,矢量空间里任何其它矢量 $|a\rangle$ 都是与这矢量组线性相关的,或者说,可写做它们的线性组合:

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^n k_i |b^{(i)}\rangle. \quad (\text{A. 21})$$

这样一组线性无关的矢量 $|b^{(i)}\rangle$ ($i=1, 2, \dots, n$)称为矢量空间的基(base)或基矢(base vector)。显然矢量空间的基不是唯一的。同一矢量 $|a\rangle$,按不同的基展开,有不同的系数 k_1 、 k_2 、 \dots 、 k_n 。

在各种基矢中使用起来最方便的是正交归一基矢。用 $|e^{(i)}\rangle$ ($i=1, 2, \dots, n$)代表一组正交归一基矢,它们应满足下列条件:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{正交性} \quad \langle e^{(i)} | e^{(j)} \rangle = 0 \quad (i \neq j; i, j = 1, 2, \dots, n), \end{array} \right. \quad (\text{A. 22})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{归一性} \quad \langle e^{(i)} | e^{(i)} \rangle = 1 \quad (i = 1, 2, \dots, n), \end{array} \right. \quad (\text{A. 23})$$

或简写作

$$\langle e^{(i)} | e^{(j)} \rangle = \delta_{ij} \quad (i, j = 1, 2, \dots, n). \quad (\text{A. 24})$$

即这些基矢彼此正交,且具有单位模。

【命题人注】这里引入了 δ_{ij} ,它的定义是

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

这样的写法只是为了写起来简约。不过顺带一提,它有个简单而奇妙的意义,它恰好是单位

矩阵的第 i 行第 j 列的矩阵元, 您可以自行验证一下这一点。不过这一性质应该与接下来的运算没什么直接关系, 您只需要知道它的定义就好。

将(A. 21)式中的基矢 $|b^{(i)}\rangle$ 换为正交归一基矢 $|e^{(i)}\rangle$:

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^n k_i |e^{(i)}\rangle. \quad (\text{A. 25})$$

依次乘以左基矢 $\langle e^{(j)}|$, 得

$$\langle e^{(j)}|a\rangle = \sum_{i=1}^n k_i \langle e^{(j)}|e^{(i)}\rangle = \sum_{i=1}^n k_i \delta_{ij} = k_j,$$

$$\text{即} \quad k_i = \langle e^{(i)}|a\rangle \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (\text{A. 26})$$

这就是说, 一个矢量对于正交归一基矢展开的系数 k_i 等于相应基矢与它的内积。将此结果代回(A. 25)式, 得

$$|a\rangle = \sum_{i=1}^n |e^{(i)}\rangle \langle e^{(i)}|a\rangle, \quad (\text{A. 27})$$

这是矢量在正交归一基上展开的一个很有用的公式。由于此式适用于任何矢量 $|a\rangle$, 可形式地将它从上式两端消掉, 于是有

$$\sum_{i=1}^n |e^{(i)}\rangle \langle e^{(i)}| = 1, \quad (\text{A. 28})$$

式中右端的 1 其实不是一个数, 而是一个算符, 叫做单位算符。把上式右端“乘”到任何矢量上, 便执行了将该矢量按某个正交归一基展开的运算。