第一章　　另一个世界中的“小球”

参看文献 [1].

这个“小球”是量子力学这门课的表象, 我们将用这个“小球”叙述量子力学的基本概念和主要内容.

所谓的“另一个”世界, 就是不能通过我们普通的感官触及的微观世界 —— 量子世界. 这个世界就在我们身边, 离我们很近, 却在尺度上有巨大差异, 在尺度上离我们“很远”.

在这个世界中, 一定有些什么“东西”, 发生了一些“事情”. 当我们使用特殊手段, 将我们的触角伸向这个世界的时候, 我们确实看到了很多现象 —— 非经典现象.

依然是**现象**. 在引言中我们说过:

- 谨慎使用描述现象的语言.
- 注意区分现象和现象的载体.

慎用语言. 我们将语言的使用限制在对现象的描述上. 避免妄语.

难免地, 我们希望做一些“透过现象看本质”的事. 但是, 我们不说“本质”, 而是说现象的“载体” —— 根据现象提出的构想或猜测.

也就是说, 我们首先要做的是, 弱化本体论意义上的实在性.

在经典力学中, 现象和现象的载体几乎是不可分离的, 二者处于同一层次. 例如, 波动, 一方面是一种现象, 另一方面也介质振动的体现. 我们可以通过研究介质的性质来理解波的传播. 介质是可触及的, 是经典世界中的事物.

在经典世界中, 对现象的精确而严格的描述近乎对事物的性质或属性的描述. 事物的性质和属性具有本体论意义上的实在性和确定性.

我们身处经典世界中, 又了解了经典力学的理论, 久之, 习惯了用同一套语言描述看到的现象, 刻画承载现象的事物的性质. 也就是说, 我们习惯了语言的混用. 同时, 在经典世界中, 我们也没有遇到这种混用带来的麻烦.

经典力学承认客观世界的实在性. 经典世界中的研究对象具有不依赖于观测的独立存在的各种性质. 观测只不过是彰显这些性质的一个手段. 即便我们不能了解某个事物的所有性质, 也不至于让我们对这个事物的实在性和真实性有所怀疑.

经典世界中的小球

考虑最为简单的模型: 经典世界中的一个小球. 它可以有很多不同的属性, 我们只关心其中的两个: 颜色和硬度.

用 C 表示颜色属性, 用 H 表示硬度属性.

再假设每一个属性只有两个状态, 即两个取值.

C 属性的取值记作 $c = 0, 1$, 其中 0 表示白色, 1 表示黑色. H 属性的取值记作 $h = 0, 1$, 其中 0 表示软, 1 表示硬.

于是, 小球的属性可以用一个二元数组表示, (c, h), $c, h = 0, 1$. 这个二元数组就是小球的经典意义上的 "态".

我们可以说: "这是一个白色的软球", 或者说, 小球处于状态 $(0, 0)$. 在这句话中, 包含了两个表象 —— 颜色表象和硬度表象. 更细致地说, 我们首先在颜色表象中对小球进行观测, 然后在硬度表象中观测.

我们还可以说: "这是一个软的白球". 先是硬度表象, 再是颜色表象.

在经典世界中, 不同的表象是彼此相容的 —— 我们可以先说颜色表象中的观测结果, 然后说硬度表象中的观测结果; 也可以先硬度表象, 再颜色表象. 不论怎样, 对前一种属性的观测都不会影响到后一种属性.

概率. 设想一个大袋子里装了很多球. 对其中的一部分 (样本) 进行观测, 得到频度 (frequency), 然后可以有概率 $p(c, h)$.

概率 $p(c, h)$ 是两个事件同时出现的概率. 例如, $p(c = 0, h = 0)$ 指的是, 得到白色的软球的概率. 我们可以把这一类概率称为联合 (joint) 概率.

可以从联合得到边缘 (marginal), 例如

$$p(c = 0) = p(c = 0, h = 0) + p(c = 0, h = 1)$$

$$p(h = 1) = p(c = 0, h = 1) + p(c = 1, h = 1)$$

量子世界中的 “小球”

测量仪器有两种,

C-box　　H-box

对应于两个不同的表象, C 表象和 H 表象.

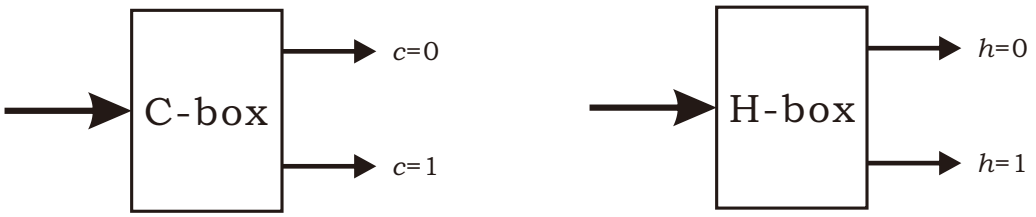


图 1

让被测的小球进入某种盒子, 出口有两个, 分别对应于观测到的两种不同的可以严格区分的现象.

这里的盒子实际上就是测量装置, 它的一端联系着微观世界, 另一端将体现观测结果. 观测结果是宏观的经典层面上的现象.

只有被观测到的事物才能被称作现象.

我们为现象赋予 “真实”、“客观” 这样一类描述, 但也止步于此.

设想, 让某小球通过 C 盒子. 我们可能看到盒子的 0 出口上有响应 (比如 0 端口上出现响声或有灯光闪烁), 那么我们可以说, 进来的小球在颜色检验过程中表现出 0 结果 (即白色). 如果在端口 1 上有响应, 那么就说小球在颜色检验中表现出 1 结果 (即黑色).

如果让很多小球通过 C 盒子, 那么我们可以根据两个出口上的响应次数得到白色现象和黑色现象出现的频度, 以至于几率, 记作 $p_0^C = p(c=0)$ 和 $p_1^C = p(c=1)$.

再设想, 当小球通过 C 盒子之后, 一方面, 我们获得了具体的观测结果, 另一方面小球没有消失, 就是说, 测量过程是非破坏测量, 那么接下去还可以做很多事. 可以设想, 用两个特殊的 “容器” 收集储存从 0 和 1 两个端口出来的小球. 或者, 让从这两个端口出来的小球沿着特定的可以严格区分的路径 (比如说两条路径分得很开))前进. 在这个意义上, 我们可以形象地说, 很多小球通过 C 盒子后分成了两束.

所谓的 “这个意义”, 指的是, 在实验中, 我们获得了具体的体现在宏观层面上的观测结果. 在这两束中的小球分别是白球和黑球. 可以对这样的描述作进一步的检验.

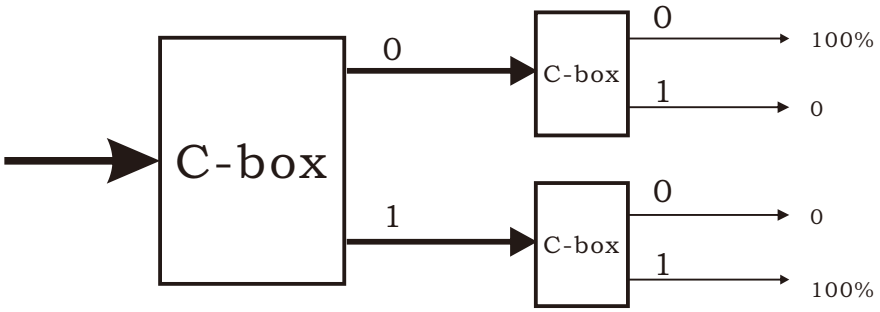


图 2

在图 2 中, 从第一个 C 盒子的两个出口出射的小球继续通过 C 检验, 检验结果是确定的而不是随机的.

如果换成检验硬度的 H 盒子, 有类似的过程和描述.

现在考虑下述情形.

- 挡住从 C 盒子的 1 端口出来的小球, 或者简单地说, 只选择从 C 盒子出来的白球[1]. 然后让这些白球进入 H 盒子. 在渐近情形下 (进入 H 盒子的白球非常多), 得到的观测结果是, H 盒子的 0 端口 (软) 出现响应的几率是 1/2, H 盒子的 1 端口 (硬) 出现响应的几率也是 1/2. 如图 3 所示.
- 类似地, 让黑球经历硬度检验, 让软球经历颜色检验, $\cdots$ $\cdots$. 得到的结果都是等几率分布. 也就是说, 当小球对一种属性的检验表现出确定的现象时, 对另一种属性的检验则表现出完全的不确定性[2].

上述第一个实验 (图 2 所示) 是重复测量过程. 始终在同一个表象中进行, 体现出经典性. 第二个实验 (图 3 所示) 涉及两个不同的表象, 可以体现不确定关系.

仅仅就上述两个实验及其结果而言, 并无特别的奇异之处. 第一个实验无非是对实验结果的验证和确认, 第二个实验 —— 如果用经典物理的观点来说 —— 不过是通过两个不同的观测角度确定小球的 “属性” 或 “性质”. 即便有了所谓的不确定关系的体现, 也是可以用经典模型解释的.

再来做第三个实验. 三个接连放置的盒子, 如图 4 所示, 也可以参看文献 [2] 第 5 页.

[1]这实际上是态的制备过程.

[2]这里说的性质或属性并不具有经典意义上的内涵, 不是固有的, 一成不变的, 不是本体论意义上的先验的存在. 这里说的性质或属性只是操作意义上的表现行为: 如果让这些小球通过 C 盒子, 那么观测到的结果是确定的而不是随机的, 所有的白色小球都将通过 C 盒子的 0 端口.

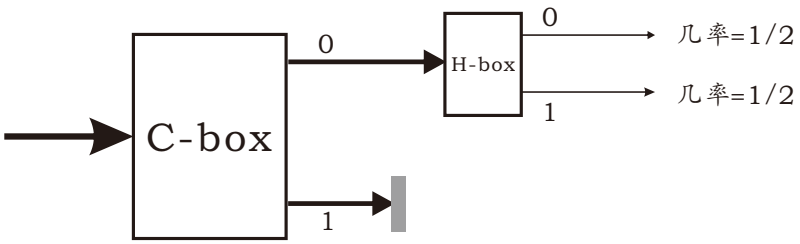


图 3

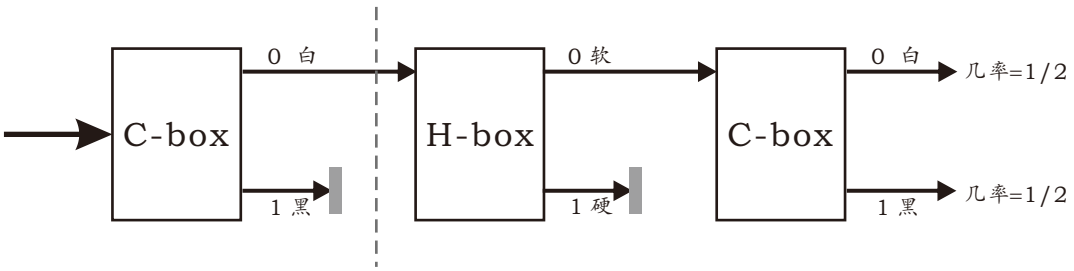


图 4

图 4 中虚线左侧是态的制备过程. 从第一个 C 盒子的 0 端口出来的小球被引入 H 盒子. H 盒子的 0 端口和 1 端口出现等几率的响应. 接着, 选择从 H 盒子的 0 端口出来的小球, 使之进入第二个 C 盒子. 问题是: 在第二个 C 盒子的两个出口上我们能获得什么样的实验结果?

假设制备了 N 个白球, 即第一个 C 盒子的 0 端口中出来 N 个球. N 非常大, 允许我们用几率的语言描述.

经典力学给出的结论是: 第二个 C 盒子的 1 端口上不会出现小球, 而 0 端口上将出现 $N/2$ 个小球. 而且, 基于实在性的经典力学还会进一步指出: 从第二个 C 盒子出去的小球具有性质 $(c = 0, h = 0)$.

实际的实验结果是: 第二个 C 盒子的两个出口上都有响应, 且几率为 1/2. 或者说, 从第二个 C 盒子的两个出口出射的小球的个数约为 $N/4$.

接着, 还可以提问, 对这些小球继续检验, 会怎么样呢?

如果继续进行颜色检验, 即放置两个 C 盒子 (如图 5 所示), 那么实际上就是关于颜色检验的重复测量, 确认从第二个 C 盒子的 0 端口出射的小球是白色的, 从 1 端口出射的小球是黑色的.

如果继续进行硬度检验, 那么又是一个表象的转换. 从第二个 C 盒子的 0 端口出射的小球进入了 H 盒子后, 等几率地分为两束. 从第二个 C 盒子的 1 端口出射的小球进入了 H 盒子后, 也是等几率地分为两束.

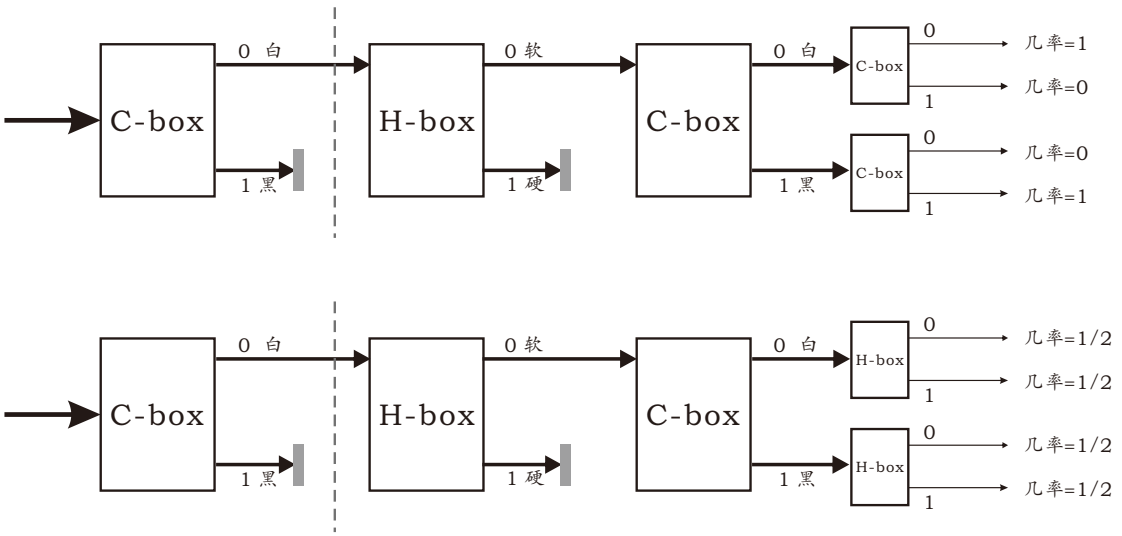


图 5

当遇到表象转换的时候, 出现了与经典观点相悖的实验结果.

- 有确定的结果, 也有随机的结果.
- 立足于同一个表象, 可以得到确定的结果. 跨越不同的表象, 将会出现随机的结果.

如前所述, 图 3 所示的第二个实验并不是难以理解的, 而且可以用经典观点解释 —— 有一半的白球是软的, 另一半是硬的.

但是, 图 5 所示的第三个实验却是非经典的现象. 这似乎在说, 小球的所谓的属性只是暂时, 有条件的, 它取决于具体的特定的观测方式. 小球难以同时具有两种不同的属性.

我们把图 5 中虚线左侧的过程 (即第一个 C 盒子) 视作态的制备过程 —— 制备了大量的白色小球. “白色” 就是这些小球共有的一个性质.

这是在这种特定的场合中, 我们才能看到稍微具有经典意义的性质或属性. 这时无边的随机性的海洋中少有的确定性的岛屿.

但是, 这种经典意义上的确定性随即遭到破坏. 制备好的白色小球通过 H 盒子之后, 我们挑选了 0 出口上的软球. 按照经典观点, 就应该说, 此时小球的颜色和硬度都确定了, 它的性质可以用 $(c = 0, h = 0)$ 表示. 但是, 图 4 中的第二个 C 盒子的检验结果颠覆了这一陈述. 我们重新看到, 颜色检验的结果表现出随机性. 所以, 我们应该为这里谈到的性质或属性赋予明确的用经典语言描述的操作过程, 并强调指出, 性质或属性包含了操作意义, 性质或属性依赖于表象.

Property with respect to specific representation.

当我们用 C 盒子检验小球的时候, 是想观测小球的颜色, 得到的结果当然关于颜色而言的. 如果对这些结果继续颜色检验, 那么实验装置的设置不需要进行任何改变, 话语环境没有改变, 即表象没

有改变. 在这种受限制的场合中, 我们得到了确定的而不是随机的结果.

但是, 如果我们对 C 盒子的出射小球继续进行硬度检验, 那么就需要变更实验设置, 需要在新的话语环境中叙事, 即需要一个新的表象. 量子特性 —— 或者说非经典特性 —— 就体现在, 我们只能制备这样一些小球, 它们面向颜色检验时给出确定的结果, 但是当它们面向硬度检验的时候, 却只能有随机的结果.

这实际上就是不确定关系的体现.

在经典世界中, 小球同时具有两个不同的属性是一件很自然的事情, 我们可以很轻松地说: 这是一个白色的软球. 在这句话中, 包含了来自于两个不同表象的观测结果. 经典理论允许我们将不同的表象中观测结果并置. 经典世界的逻辑是 Boole 逻辑. 以后我们将看到, Boole 逻辑是一个很强的逻辑, 需要很多条件才能构成 Boole 逻辑. 而量子力学对应的逻辑则宽松得多.

从今以后, 在叙述事情的时候, 要时刻注意说话时的立场和看问题的角度, 即表象.

表象不仅仅是一个数学概念, 它对应于具体的物理上的观测环境. 表象也不仅仅是一个数学的或物理的概念, 它还是认识论中要素. 所以我们说, 量子力学关注这样一种解构 (decomposition), 看待事物的立场和视角的解构: 将 “这是一个白色的软球” 这句经典世界中的陈述解构为不同表象中的观测结果, 进而考虑不同的表象是否相容. 这种做法也许显得繁复而冗余, 但也可以说严谨而缜密. 这种做法使得那些被经典力学忽视的环节凸显出来. 就思考问题的方式方法而言, 这种做法并不显得非常突兀.

只有被观测到的才是现象

我们需要对以上图示中每一个盒子的出口处的直线作进一步的强调和分析.

简单而形象地说, 每一条直线表示一条路径, 表示有小球在这条路径上前进. 可是, 我们 “看不到” 量子世界中的小球, 如何能说它们行进在某条路径上呢?

可以说, 盒子的某个出口有响应, 出口上的“响应” 这个现象表示了小球在某个表象 (或者说某个观测过程中) 的表现行为. 而且, 我们假设小球通过盒子之后并没有消失, 随后可以在相同的表象中进行检验和确认. 检验过程得到的结果是确定的而不是随机的.

出口上有明确的可以严格区分的现象

如果在不变的表象中对每个出口的小球进行检验,
那么检验结果是确定的而不是随机的

$\Longrightarrow$ 形象的描述: 路径 (实线)

“确定的而不是随机的” 意味着 “经典的”, 在这里, 是受限的有条件的暂时的经典性.

即便如此, 这种受限的经典性可以保证 “路径” 这一说法的合理性.

然后考虑下面的几个过程.

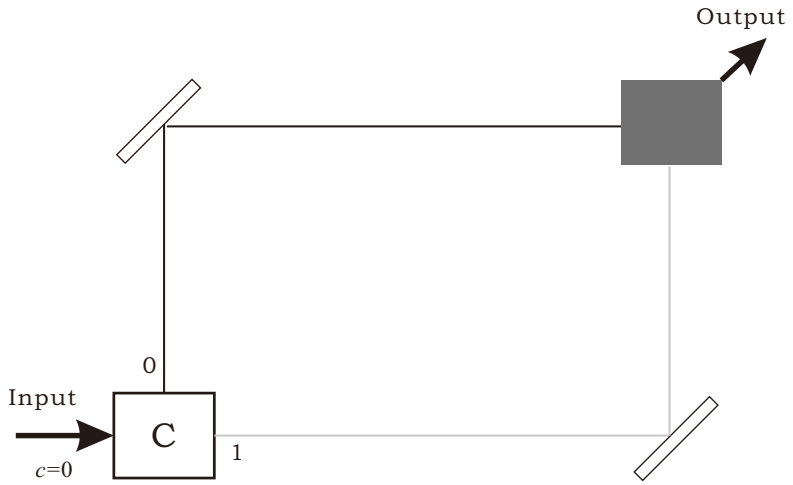


图 6: 输入的白球, 经过 C 盒子 (颜色检验), 从端口 0 出射. 右上角的黑方块表示一个重聚装置. 从重聚装置中导出最后的输出, 然后可以对输出的小球进行不同的检验.

在图 6 中, 输入的是白球, 经历颜色检验, 结果是确定的. 小球只能沿一条路径前进. 从最后的输入端出射以后, 可以再进行颜色检验, 结果只能是 $c = 0$. 这是一个比较平庸的过程.

再看下一个过程. 输入 C 盒子的是软球 (来自未画出的制备过程).

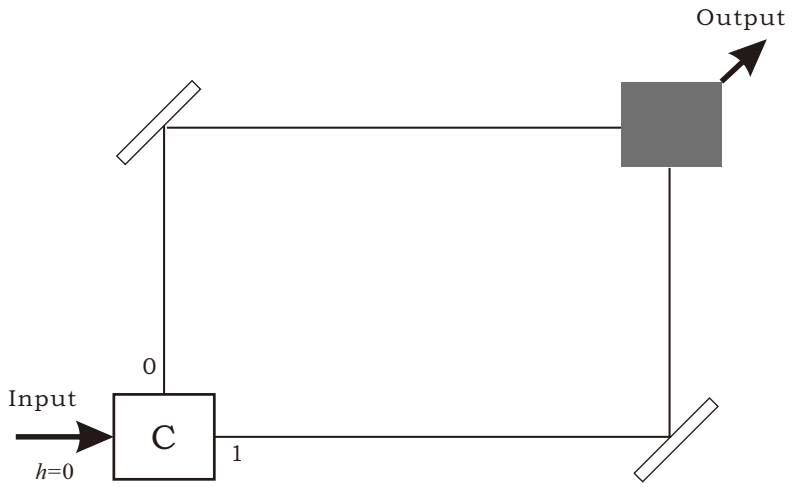


图 7: 输入的是软球, 经过 C 盒子 (颜色检验), 从端口 0 和 1 出射的几率均为 1/2.

在图 7 中, 输入的是软球, $h = 0$. 经历颜色检验, 在 C 的两个端口上可以观测到等几率的分布. 沿两条不同的路径进入重聚装置, 是简单的几率混合.

如果对最终的输出小球进行颜色检验, 那么仍然得到等几率的分布. 如果进行硬度检验, 也是等几率的分布.

在讨论下面的过程之前, 再次强调: 只有那些被观测到的事物才是现象, “路径” 实际上是指示路径的某种现象 (如灯光, 声响等).

现在设想, 盒子的出口处没有设置响应装置, 当然, 我们也得不到任何体现在宏观层面上的现象. 严格地说, 这样的盒子是不能当作测量仪器看待的. 但是, 在我们的习以为常的成见中, 可能会有这样一个反事实 (counterfactual) 的思索过程:

- 如果盒子的出口有响应, 那么可以设想小球沿特定的路径前进.
- 常识 (或者经典观念) 认为, 出口上的响应不过是指示路径的信号, 是观测手段.
- 所以, 即便现在没有设置响应装置, 我们也可以认为小球沿特定的路径前进.

上述思考过程体现在图 8 中.

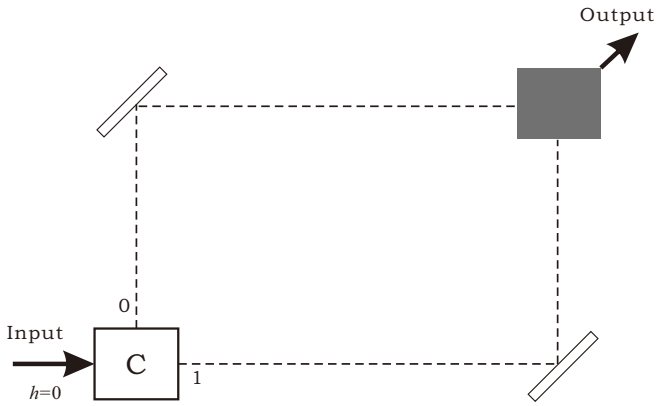


图 8: 输入的是软球, 经过颜色检验, C 盒子的出口处没有安装响应装置.

这里, 图中的虚线提醒我们, 这样的路径是假想的, 这样的路径没有获得宏观现象的支持[3].

如果按照反事实的推断分析图 8 中的过程, 那么结果和图 7 所示的情形是相同的 —— 在输出端进行颜色检验, 得到白球和黑球等几率的分布; 硬度检验给出软球和硬球的等几率分布.

但是, 实际的实验结果是:

- 在输出端进行颜色检验, 得到的等几率的分布;
- 硬度检验得到了确定的结果: 100% 是软球.

这又是一个与经典观念相悖的现象.

现象: 盒子的出口有明确的响应.

[3]如果在 Stern-Gerlach 实验场景中说, 就是没有安置粒子接收屏.

- 如果没有出现闪光或声响, 那么就不能说观测到了现象.
- 跨表象的描述或者表象的并置导致矛盾.
- 追问 “小球” 到底有怎样的性质, 就如同追问幻形怪的本来面目是什么样的.

References

[1] Albert. *Quantum Mechanics and Experience*. Havard University Press, (1992).

[2] Sakurai, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, (1994).

第一章　　另一个世界中的“小球”　Ⅱ

小球-盒子模型的实际对应就是 Stern-Gerlach 实验

Stern-Gerlach 实验.

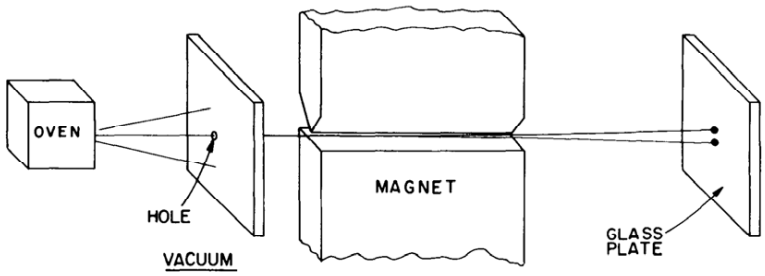


图 1: From *Lectures on physics* Vol 2 by Feynman, Leyton and Sands.

实际的观测结果如下图所示.

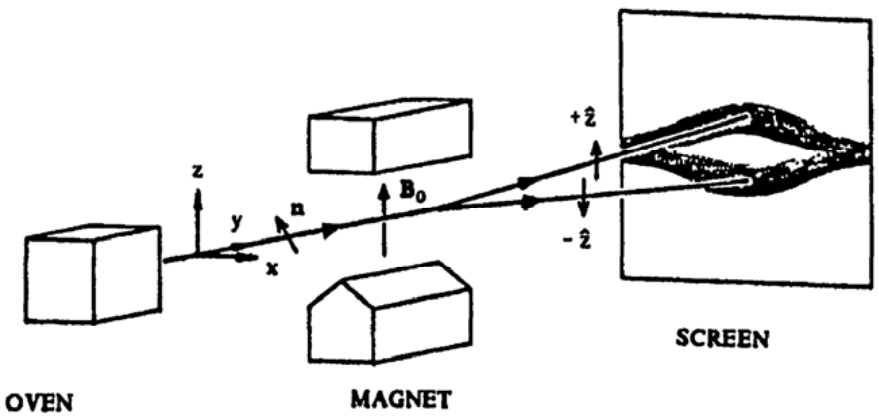


图 2: From P. Busch and F. E. Schroeck, *On the Reality of Spin and Helicity*, Foundations of Physics **19**, 807 (1989).

我们采用简单的叙述: 屏上出现两个彼此分离的斑点. 这两块斑点是明确的可以严格区分的宏观现象. 分别对应于粒子自旋角动量指向 $+z$ 和 $-z$ 方向.

我们看到的不是粒子的 “自旋”, 而是粒子在接收屏上的空间分布. 在粒子到达接收屏之前, 在我们看到具体的斑点之前, 不能对粒子的自旋指向作任何判定.

在粒子落在接收屏之前, 量子态的演化是由 Schrödinger 方程确定的, 没有几率可言.

而且, 这样的分布不能用电磁学中的磁矩 $\boldsymbol{\mu}$ 来解释, 是体现在宏观世界中的非经典现象.

在 SG 实验中, 微观粒子在某些方面的表现行为**像是**一个具有磁矩 $\boldsymbol{\mu}$ 的小磁针. 类比于电磁学中磁矩, 并借用这个称谓, 我们说, 微观粒子具有磁矩 $\hat{\boldsymbol{\mu}}$.

小球-盒子模型与自旋 $1/2$ 粒子之间可以建立这样的对应关系:

$$\text{颜色} \iff \text{自旋角动量的 } z \text{ 分量}$$

$$\text{硬度} \iff \text{自旋角动量的 } x \text{ 分量}$$

$$\cdots\cdots$$

磁场梯度的不同指向用以观测不同方向上的自旋角动量的分量. 不同的 SG 装置对应于不同的表象.

粒子在接收屏上的位置对应于小球-盒子模型中出口上的响应.

考虑一个自旋为 $1/2$ 的粒子, 通过接连放置的 SG 装置, 如图 3 所示.

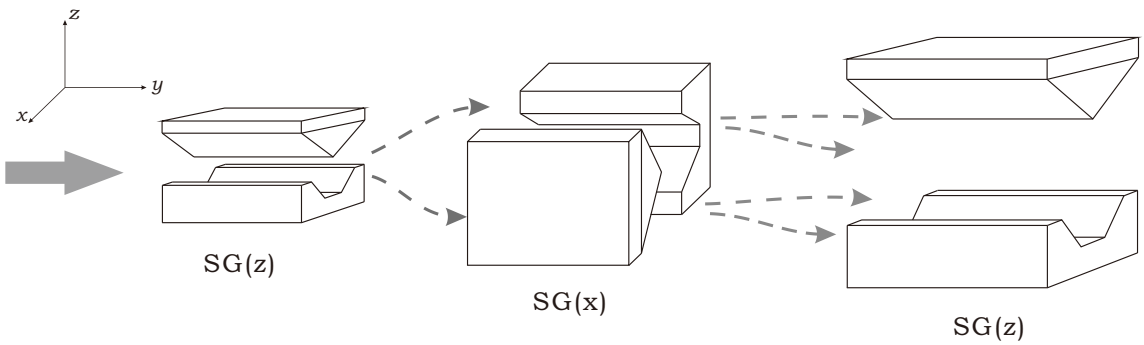


图 3

图中的从左到右的第一个和第三个 SG 装置的梯度磁场的方向为 z 方向, 记作 SG(z).

第二个 SG 装置的梯度磁场方向为 x 方向, 记作 SG(x).

图中的虚线表示假想的反事实的 (counterfactual) 的 “路径”.

图 3 的实验结果如下图所示.

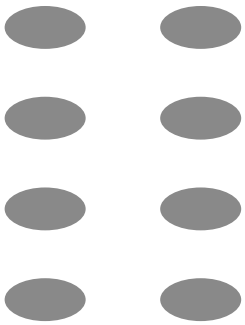


图 4

虽然我们并不能确定粒子在各个 SG 装置之间的路径, 但是图 4 的结果符合通常的直觉.

现在, 逐步减弱 SG(x) 的磁场强度, 直至为零.

如果把假想的路径当作真实的路径, 如果把 counterfactual 的推断当作事实本身, 那么将预言图 5 所示的结果.

实际结果如图 6 所示. 当 SG(x) 中的磁场强度减为零时, 结果是图 7.

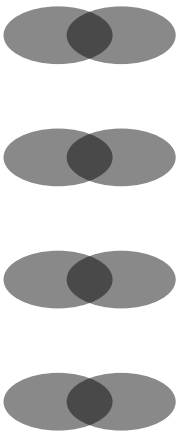


图 5

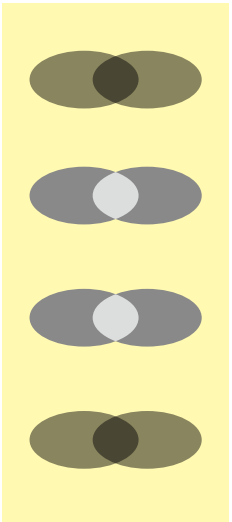


图 6

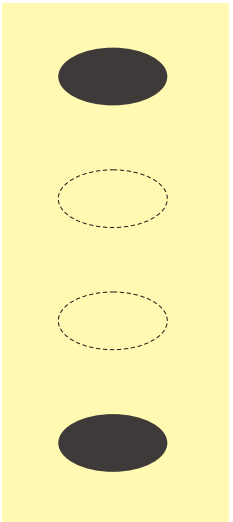


图 7

图 6 和图 7 体现了干涉现象. 图 6 所示的现象是不能用 “粒子通过了某条路径” 这类描述来解释的.

小球-盒子模型还可以对应于光的双折射现象

光在各向异性的介质 (例如方解石晶体) 中传播的时候, 会出现双折射现象.

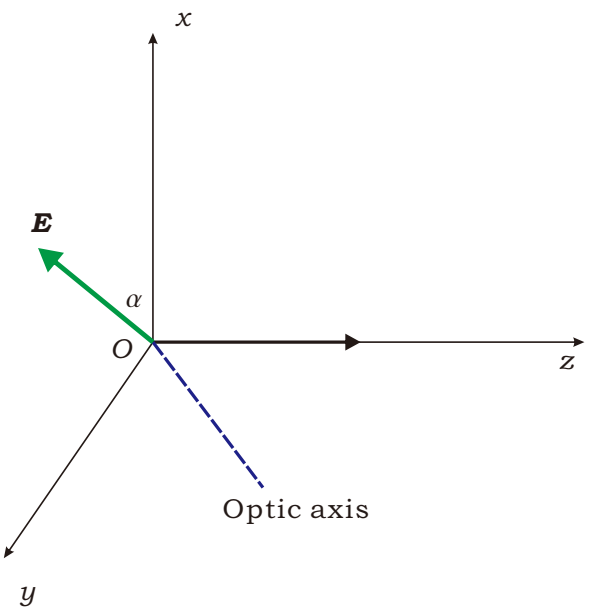


图 8

在 8 中, 极化光沿 z 轴传播, 极化方向, 即电场方向, 位于 xy 平面内, 与 x 的夹角是 α. 光轴方向位于 yz 平面内. 介质的界面是 xy 平面. 主截面是包含光轴和界面法线的平面, 即 yz 平面. 偏振面与主截面之间的夹角是 $\frac{\pi}{2} - \alpha$.

在方解石晶体内,

- x 方向的极化光与 y 方向的极化光具有不同的速度.
- 它们分别是是 ordinary and extraordinary rays, 即 O 光和 E 光.
- O 光和 E 光的电场强度分别是 $E\cos\alpha$ 和 $E\sin\alpha$.
- O 光和 E 光的强度分别 $\propto \cos^2\alpha$ 和 $\propto \sin^2\alpha$.

当然可以用电磁学理论解释双折射现象.

如果用光子的观点, 那么

- 光子是一个量子系统.
- 如果不小心为光子赋予了一些具有经典意义的性质, 比如说, “不可分割的个体” 等等, 那么就会带来理解上的困难, 就会在杨氏双缝实验中提出 “光子到底穿过了哪一条缝” 之类的来自语言的妄用所导致的问题.

考虑下面的实验. 在图 9 中, 从光源发出的光经过了偏振片之后被准直, 再通过双折射晶体, 最后进入探测器.

减弱光源的强度, 让光子 “一个一个” 地从光源出射. 偏振片会挡住一部分光子, 而通过偏振片的光子就具有了确定的极化方向, 设通过准直孔之后的光子数为 N. 这相当于初态的制备.

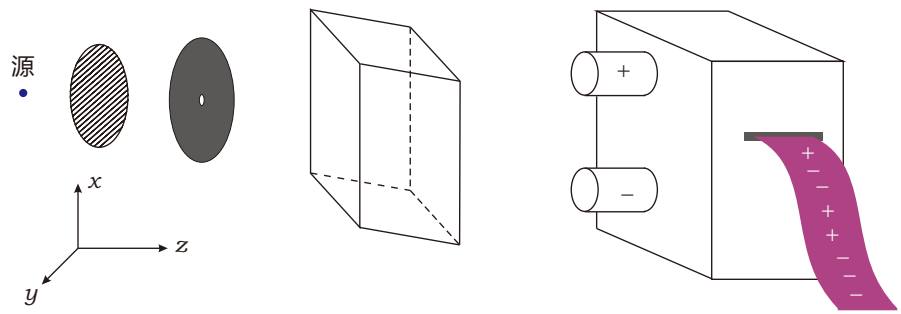


图 9

这些具有确定的极化方向的光子继续通过双折射晶体, 在探测器的两个端口上被记录下来. 假设在理想情况下, 光子不会损失, 我们将观测到这样的现象:

- 每次只有探测器的一个端口出现响应, 不会出现两个端口都有响应的事件.
- 两个端口记录的光子数分别是 N_+ 和 N_-, 它们分别是 O 光光子和 E 光光子, 并且 $N_+ + N_- = N$.

当 N 很大的时候, 我们可以说, 光子被 “+” 端口记录到的几率是 $p_+ = \frac{N_+}{N}$, 被 “−” 端口记录到的几率是 $p_- = \frac{N_-}{N}$.

但是, 我们不能据此认为,

$$\begin{aligned} &\text{在 } N \text{ 个入射到双折射晶体的光子中,} \\ &\text{有 } N_+ \text{ 个 O 光光子, 有 } N_- \text{ 个 E 光光子.} \end{aligned} \tag{2}$$

这种看法难以回答这样的反驳: 在光子经过偏振片和准直孔之后尚未进入双折射晶体之前, 无所谓 O 光和 E 光. 而且, 如果我们把双折射晶体绕 z 轴旋转一个角度, 那么将会记录到 N'_+ 个 O 光, N'_- 个 E 光. 这是与看法 (2) 矛盾.

还可以考虑图 10 所示的过程. 放置两个双折射晶体. 使得从第一个晶体中出射的 O 光和 E 光经过第二个晶体后重新汇聚, 并且有相同的光程. 再放置第二个偏振片, 它的偏振方向与第一个偏振片一致. 记录通过第二个偏振片的光子数, 将发现这个数目就是 N. 上述观点 (2) 不能解释这个现象.

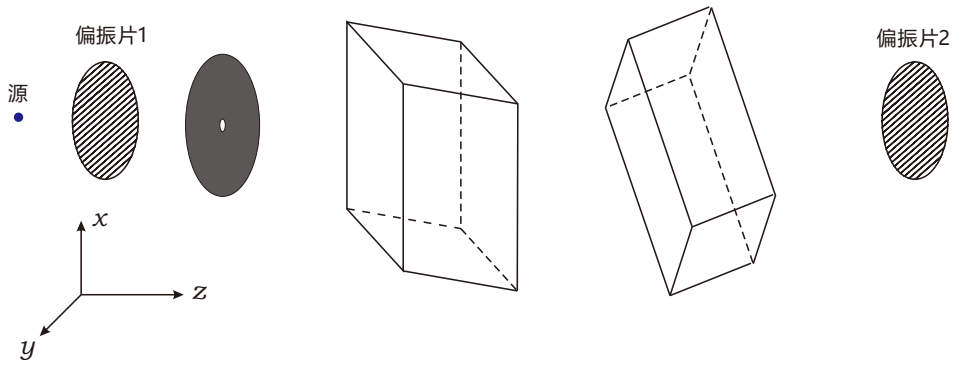


图 10

量子系统

世上本没有量子系统, 看到的现象多了, 就有了量子系统.

- 观测手段多样了, 观测技术提高了, 看到了原来看不到的现象.
- 有些现象不能用经典物理学解释, 是存在于经典世界中的非经典现象.
- 非经典现象怎么来的? 它们的载体是什么? 在我们的普通感官不能感觉到的尺度上, 确实有些 "东西" 体现出了不同寻常的现象, 我们把这些 "东西" 称作量子系统.

量子系统是一个假想的概念, 但是这个概念具有一定的真实性 —— 将要在经典世界中表现出非经典现象,

量子系统是针对特定的观测过程而言的, 或者说针对特定的表象而言的. 例如, SG 实验中, 一种被叫做 "自旋" 的微观存在是我们关心的量子系统. 如果考虑能级跃迁, 那么银原子就是量子系统.

这里说的 "微观存在" 不具有经典意义上的客观实在性.

再次强调: 量子系统和量子现象分属不同的层次.

怎么描述量子系统? 现象和类比.

量子现象的特点是: 具有不确定性, 需要概率率来描述, 在统计意义上有一定的规律, 但是这些规律不服从经典概率论.

关于光的本性的讨论具有启发性.

$$|E|^2 \sim \text{强度 } I$$

$$|?|^2 \sim \text{几率}$$

$$?: \text{几率幅}$$

几率用来度量量子现象. (量子) 几率表现在经典层面, 是可以观测的. 几率幅 (更确切的说, 量子态) 则是属于量子理论的形式系统 (formalism) 中的概念.

量子态本身不能表现出任何可观测的现象 —— 即便是统计意义上的用概率描述的现象. 必须通过测量过程才能揭示来自微观世界的体现在宏观层面的非经典的现象.

- 量子系统是量子现象的载体.
  人们通过测量得到了非经典的量子现象, 由此推知或构想在微观世界中存在量子系统.
- 量子态是量子几率的载体.
  通过测量, 量子态提供了关于量子现象的 (以几率描述的) 定量解释.

量子态承担的任务是, 为量子现象给出定量的描述 —— 几率意义上的定量描述.

面对量子态的时候, 请保持适当的沉默.

最大混合态

这是一个缺乏经典对应的状态.

考虑 SG 实验. 从高温炉子里出射的银原子经过准直后进入 SG(z) 装置, 在屏幕上 z 的上半区域和下半区域分别出现两块亮斑. 现在设想, 我们有办法有两个容器将入射到这两块区域中的银原子收集起来, 那么就可以说, 这两个容器中分别装有自旋指向 $+z$ 方向和自旋指向 $-z$ 方向的银原子. 设进入 SG(z) 的银原子总数为 N, 两个容器中银原子的个数分别为 N_{z+} 和 N_{z-}, 并且 $N_{z+} + N_{z-} = N$. 当 N 很大的时候, 有 $N_{z+} \approx \frac{N}{2}$, $N_{z-} \approx \frac{N}{2}$. 简单地, 我们就说 $N_{z+} = N_{z-} = \frac{N}{2}$.

接着, 我们将这两个容器中的银原子混合在一个容器中, 再将混合后的 N 个银原子导入 $SG(x)$ 装置中, 结果发现, 在屏幕上的 $+x$ 区域和 $-x$ 区域出现两块亮斑, 落在这两个区域中的原子个数为 $N_{x+} \approx N_{x-} \approx \frac{N}{2}$. 如果用 $SG(y)$ 来做检验, 那么同样得到等几率的分布. 如果用 $SG(n)$ —— 这里 n 表示空间任意某个方向 —— 做实验, 那么还是得到等几率的分布. 我们把这种状态称为最大混合态.

一般地, 如果某种类型的测量结果最多有 n 个, 并且每一个测量结果的几率都是 $\frac{1}{n}$, 那么将它们混合在一起之后, 得到的量子系统的状态就是最大混合态.

最大混合态, 以及以后要介绍的一般的混合态, 都不具有经典意义上的对应. 例如, 将黑球和白球等几率地混合, 对混合后的一堆球检验它们的硬度, 不一定会等几率地得到硬球和软球.

第一章　另一个世界中的“小球” Ⅲ

前面说过最大混合态. 其特点是: 在某种类型的测量中, 只要某一个实验的观测结果是等几率分布, 那么测量后的量子态在该类型的其它实验中的观测结果也是等几率分布.

解释一下“某种类型的测量”. 例如, 在 SG 实验中, 梯度磁场的方向可以是 x 方向, 可以是 z 方向, 可以是空间的任意某个方向 $\boldsymbol{n}$. 这些不同的磁场方向对应于不同的表象. 但是它们有共同点, 都是为了测量那个叫做“磁矩”或“自旋角动量”的东西. 我们把这样一些测量归于一个类型.

而位置和动量的测量则是另一个类型.

用量子力学的形式系统中的语言来说, 某种类型的测量就是针对某个自由度 (freedom) 的测量, 或者说某个属性的测量. 有自旋 (内禀) 自由度, 有位置空间运动的自由度等等. 需要用不同的 Hilbert 空间描述这些不同的自由度.

属于同一种类型的不同的测量, 对应的不同的表象之间有酉变换的联系.

最大混合态缺乏经典对应. 等几率地混合黑白两种量子小球, 一定在硬度检验中等几率地给出软硬两种结果. 经典小球则不能总是如此.

互易性原理 (Law of reciprocity)

考虑对自旋为 1 的粒子进行 SG 实验. 在图 1 中, 粒子先通过 SG(z). 如果有接收屏的话, 将会看到接收屏上出现上、中、下三个亮斑. 这里, 我们设想用三个容器代替接收屏. 只要有粒子进入容器, 该容器上就会有明确的响应 (灯光或响声). 这些粒子被记录并储存起来, 然后再让它们通过 SG(x), 同样地, 我们用这种特殊的容器记录并储存从 SG(x) 出射的粒子. 形象地, 在图 1 中我们用实线表示上述过程, 就好像是粒子行进在这些路径上.

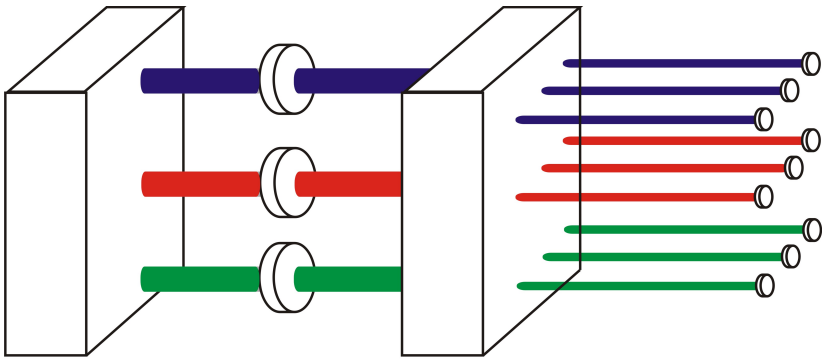


图 1

假设从每一个 SG 装置出射的粒子在空间上没有重叠, 我们在图中的最右端放置一块接收屏, 那么将看到 3×3 的 9 个亮斑. 注意到粒子束的上下分叉是由 SG(z) 引起的, 粒子束的左右分叉是由 SG(x) 引起的.

用拉丁字母表示从上到下的行数, 用希腊字母表示从左到右的列数. 在接受屏上的第 m 行第 μ 列的那个亮斑的强度记作 $I_{\mu m}$. 强度实际上对应于落在该区域的粒子数.

第 m 行中的三块亮斑的总的强度等于这一行上每一列的亮斑的强度的总和, 即

$$I_m = \sum_{\mu} I_{\mu m}$$

接着定义几率

$$p_{\mu|m} = \frac{I_{\mu m}}{I_m}$$

$p_{\mu|m}$ 是条件几率: 从 SG(z) 出射的并被第 m 个容器记录到的粒子随后通过 SG(x) 最终落在 m 行第 μ 列的位置. 自然有

$$\sum_{\mu} p_{\mu|m} = 1$$

定义矩阵

$$P = (p_{\mu|m})$$

矩阵 P 的第 μ 行, 第 m 列的矩阵元是 $p_{\mu|m}$. 注意, 在接受屏上, 第 m 行第 μ 列的亮斑强度是 $I_{\mu m}$, 这与矩阵 P 的行列标记正好相反, 不要弄混了.

矩阵 P 的矩阵元都是非负的, 而且, 每一行元素的和为 1, 这样的矩阵被称为随机矩阵 (Stochastic matrix).

随机矩阵

在经典信息论中, 矩阵 P 又被称作传输矩阵, 用以描述通道的性质. 举一个简单的例子. 某个通道只接受 0 和 1 两个不同状态的输入, 输出也是 0 和 1. 如果输入 0, 那么输出端以几率 p 得到 0, 以几率 $1-p$ 得到 1. 这个通道的传输矩阵就是

$$P = \begin{pmatrix} p & 1-p \\ 1-p & p \end{pmatrix}$$

具体地说, 我们用列向量 $\binom{1}{0}$ 表示状态 0, 用列向量 $\binom{0}{1}$ 表示状态 1. 这两个经典状态可以严格区分, 这体现在相应的两个向量正交. 如果输入 0, 那么有

$$\begin{pmatrix} p & 1-p \\ 1-p & p \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ 1-p \end{pmatrix}$$

右端的结果表明, 以几率 p 处于 0 态, 以几率 $1-p$ 处于 1 态.

回到 $P = (p_{\mu|m})$. 现在我们想继续证明, 矩阵 P 的每一列的元素之和也等于 1, 即

$$\sum_m p_{\mu|m} = 1$$

双随机矩阵

如果随机矩阵的每一列的元素之和也等于 1, 那么这个矩阵就是双随机矩阵 (doubly stochastic matrix, bistochastic matrix).

注意到矩阵 P 的矩阵元是条件几率. 所谓的条件是 SG(z) 输出端的粒子的偏转方向 (上, 中, 下). 不论 SG(z) 的输入粒子的状态是怎样的, 矩阵 P 的形式不会有任何改变 —— 矩阵 P 的工作就是将上、中、下的几率分布转化为左、中、右的几率分布.

为了考察 P 的矩阵元, 我们可以向 SG(z) 输入特殊的状态, 比如, 输入一个最大混合态. 这样一来, 在 SG(z) 的输出端将得到等几率分布的三束粒子, 即

$$p_m = \frac{1}{3}, \quad m = \text{上}, \text{中}, \text{下}$$

根据前面关于最大混合态的讨论, 如果将这三束粒子混合在一起, 仍然构成最大混合态.

接着进行 SG(x) 的实验, 我们只关心 SG(x) 的输出端的向左、中、右三个方向偏转的粒子束.

现在, SG(x) 的输入端接收到的是最大混合态, 故输出端的三束粒子是等几率分布的, 即

$$p_\mu = \frac{1}{3}, \quad \mu = 左, 中, 右$$

p_m 和 p_μ 都是边缘几率, 来自联合几率对某个下标的求和. 联合几率是 $p_{\mu m} = p_{\mu|m} p_m$.

$$\frac{1}{3} = p_\mu = \sum_m p_{\mu|m} p_m = \frac{1}{3} \sum_m p_{\mu|m}$$

所以

$$\sum_m p_{\mu|m} = 1$$

即矩阵 P 的每一列的矩阵元之和为 1, 矩阵 P 是双随机矩阵.

互易性

如果调换 SG(z) 和 SG(x) 的次序, 并且写出相应的矩阵 $\Pi = (\pi_{m|\mu})$, 其中矩阵元 $\pi_{m|\mu}$ 表示条件几率, 那么有

$$P = \Pi$$

- 互易性是实验事实, 是经验规律.
- 互易性没有经典对应. 例如, 对于量子小球, 互易性意味着, 在白球中发现软球的几率总是等于在软球中发现白球的几率.
- 互易性对应于 $|\langle\psi|\varphi\rangle| = |\langle\varphi|\psi\rangle|$.

第二章　　量子态 力学量 I

主要内容

1. 量子系统是现象的载体.
2. 量子态, pre-probability, 几率的载体.
3. 观测量, 或者力学量, 是在特定的观测过程中我们所关心的系统的某些性质.
4. 数学表示.
5. Born-Lüders 规则.

此前已经说过, 量子系统就是我们在经典世界中看到的非经典现象的承载体.

量子系统对应于某一类特定的 (非经典) 现象. 例如, 在 Stern-Gerlach (SG) 实验中, 我们看到了银原子穿过非均匀磁场后分为两束. 通过与经典物理的类比, 就设想银原子具有磁矩 —— 不是经典意义上的磁矩. 于是, 形象地说, 与实验现象对应的量子系统就像是一个个小磁针. 在 SG 实验中, 我们关心的是这些小磁针, 而不是整个银原子. 当然, 说 "小磁针" 仅仅是一个比喻, 而不是经典电磁学中说的小磁针.

量子力学的任务就是描述并预言在特定的实验中出现的现象.

量子态

如果说量子系统的定义显得模糊, 那么量子态的定义则有些繁复.

量子态属于量子理论的形式系统中的概念. 不过, 我们要从实际的观测结果的角度说明量子态, 于是, 对量子态的定义也将涉及对应规则, 涉及量子理论的解释系统.

如前所述, 量子系统是现象的载体. 又注意到, 来自微观世界的现象绝大多数表现出随机性, 只能用几率这类统计学的术语来描述.

$$\text{量子系统} \longrightarrow \text{量子现象} \tag{1}$$

$$\text{量子态} \longrightarrow \text{几率} \tag{2}$$

可以说 (2) 是 (1) 的量化叙述.

量子态

- 是几率的载体.
  量子态本身不是几率, 将要在具体的观测中给出观测结果的几率分布.
- 对所有可能的测量有所响应.
  "所有可能的测量", 这使得量子态的定义显得非常繁复. 当然, 更实际的说法是, 就某种类型而言的所有可能的测量. 例如, 在 SG 实验中, 我们关心的是像是经典的 "磁矩" 一类的性质, 所用的实验装置也是为此服务的, 所以, 在这种场合中, "所有可能的测量" 指的是所有可能的磁场指向, 而不需要考虑关于能级跃迁之类的测量.

这样的叙述赋予了量子态的操作意义. 它不仅仅是一个数学符号, 而且将在具体的实验中体现出真实的现象.

初态的制备

为了使量子态的操作意义更为严格, 需要有量子态的制备过程 (preparation).

最简单的制备过程就是对测量结果作选择, 或者说, 选择性的测量.

例如, 让一束经过准直的银原子通过 SG(z) —— 磁场沿 z 方向的 SG 装置, 然后在出射粒子中选择向 $+z$ 方向偏转的那一束, 我们就说制备了量子态 $|\uparrow\rangle$, 有时我们也把这个量子态标记为 $|0\rangle$, $|z_+\rangle$.

制备过程是用经典的语言描述的. 制备过程的描述实际上就是实验操作流程. 在这个描述中, 你需要告诉别人用到的实验参数是什么, 对结果进行了怎样的选择. 比如在 SG 实验中, 需要指明磁场的指向, 磁场的非均匀度 (梯度), 磁场区域的大小等等.

所谓的 "制备出了大量的处于某个特定状态的粒子", 指的是, 这些粒子来自相同的制备过程 —— 相同的用经典语言描述的实验流程.

因为这个实验流程是可控的, 在理想情形下, 可以认为制备出来的粒子处于相同的状态 —— 关于该制备过程而言的相同的状态. 例如, 在 SG 实验中, 我们可以控制粒子的偏转角度, 又选择了向上偏转的粒子束, 就可以认为, 我们得到了关于自旋自由度的 $|0\rangle$ 态, 甚至还可以说, 得到了粒子的空间位置波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$, 但是, 我们不知道银原子的能级, 不知道电子处于怎样的原子结构中的量子态.

制备过程把一些经典信息植入了量子态, 或者说植入了量子系统.

经典情形下的正交性可以被植入到非正交的量子态中.

量子态的制备过程以及对制备过程的描述为我们提供了量子态的一些经典 "性质". 例如, 如果我们让制备好的处于 $|\uparrow\rangle$ 状态的粒子通过 SG(z), 那么所有的出射粒子都将偏向 $+z$ 方向, 确定地而不是随机地.

制备初态就是在特定的表象中制备确定的结果. 这些制备好的量子系统将面临以后的测量和操作.

量子态的数学表示

复的 Hilbert 空间中的向量, 归一化的向量.

可参考 Sakurai 书 7 — 10 页.

用到的类比是强度和振幅之间的关系. 如今是几率和几率幅. 在第一章中提到的一些素材可以帮助我们建立这样的类比.

波粒二象性 在某些情况下, 微观世界中发生的事情在经典世界中表现出粒子性; 而在另一些情况下, 又可以表现出波动性. 类比于光的电磁理论, 强度 I 与电场 $\boldsymbol{E}$ 之间的关系是 $I \sim |\boldsymbol{E}|^2$. 于是设想几率也有类似的对应, 即几率幅.

相继的 SG 实验 波动性还体现在连续的 SG 实验中. 让粒子束先后经过 SG(z), SG(x), SG(z). 如果出射粒子束分得很开, 我们会在最后的接收屏上看到八个粒子密集堆积的区域. 减小 SG(x) 装置中磁场的强度, 直至为零. 可以看到中间四个区域的强度逐渐降低, 直至为零. 而最上面的两个区域以及最下面的两个区域的强度则增大.

观测量

量子系统和量子态的概念中都不能缺少观测过程. 它们不仅仅是符号, 更是一种载体 —— 承载了将要在具体的实验中表现出来的现象和相应的几率.

观测的对象是什么?

一个自然的回答是: 观测的对象是量子系统.

但是, 这只是一个很模糊的回答. 量子系统只是一个虚构的概念, 只是一个我们关注的或想了解的现象的承载体.

重新回到我们的出发点 —— 现象.

在小球-盒子模型或者 SG 实验中, 我们为看到的不同种类的现象分别命名, 例如: 颜色, 硬度, 磁矩 (或者自旋角动量的分量) 等等. 以后还会谈到位置, 动量, 能量. 之所以有这样一些名称, 是因为

- 一方面, 确实存在来自特定的观测过程的实验结果, 而且是非经典的结果.
- 另一方面, 这些非经典的现象与经典物理学的概念有可类比之处.

所以我们说, 测量的对象是量子系统的性质或属性, 可以借用经典的术语命名这些性质或属性, 但它们的本质是量子的而非经典的. 这些性质或属性在测量过程中将表现出具体的值, 即具体的现象或观测结果.

我们把这样一些性质或属性说成是观测量. 这个词体现了测量过程和观测结果.

现在, 量子理论的形式系统中多了一个元素, 观测量. 虽然观测量属于形式系统的范畴, 但是, 如同量子态一样, 在对观测量的描述中仍然要包含操作上的意义, 仍然要顾及它在对应规则和解释系统

中的作用和角色.

以前说过: 量子态要对所有可能的测量作出响应.

现在, 更具体地说:
在对所有可能的观测量进行检测的时候, 量子态应该给出不同的检测结果出现的几率.

观测量的值

定性地说, "值" 是不同的观测结果的标记. 从标记的意义上说, 观测量的不同的值是可以严格区分的. 这些值通过测量仪器反映出来, 是经典层面的现象.

例如, 在小球-盒子模型中, 我们分别用 $c = 0$ 和 $c = 1$ 标记从 C 盒子的 0 端口和 1 端口出射的小球. 可以说, 小球的观测量 C 有两个值: 0 和 1. 在 SG 实验中, 我们看到的不是磁矩或自旋, 而是粒子朝某个方向的偏转, 落在了接收屏的什么地方. 通过粒子在空间中的落点推断粒子的磁矩或自旋. 在 SG(z) 实验中, 用 $\uparrow$ 和 $\downarrow$ 标记向 $+z$ 和 $-z$ 方向偏转的粒子. 可以说, 粒子的磁矩或自旋角动量在 z 方向上的分量有两个值: $\uparrow$ 和 $\downarrow$.

当观测量的值不参与具体分析的时候, 我们可以随意选用不同的符号标记这些值. 例如, 可以把 $\uparrow, \downarrow$ 换成 0, 1, 或者 $+1, -1$, 或者 $z+, z-$ 等等.

<u>与观测量的值对应的状态</u>

在重复测量中, 测量结果是确定的而不再是随机的. 这是一个具有经典意味的现象. 仅仅在重复测量的情形下, 系统具有经典力学意义上的性质. 重复测量对系统不产生扰动.

于是, 我们可以说, 与观测量的值对应的状态是彼此正交的.

从数学上说正交:

- 内积为零.
- 如果两个向量彼此正交, 那么一个向量在另一个向量上的投影为零.
- 如果两个 (子) 空间正交, 那么彼此没有重叠.

从物理上说, 两个状态彼此正交, 意谓着它们可以严格区分.

在小球-盒子模型中, $c = 0$ 和 $c = 1$ 是观测量 C 的值, 对应的状态可以记作 $|c = 0\rangle$ 和 $|c = 1\rangle$, 它们可以严格区分, 彼此正交.

在 SG 实验中, 观测量磁矩 μ_z 或自旋 S_z 的值标记为 $\uparrow, \downarrow$, 或者 $+1, -1$, 或者 0, 1 等等. 对应的状态记作 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$, 或者 $|+1\rangle, |-1\rangle$, 或者 $|0\rangle, |1\rangle$. 彼此正交.

第二章　　量子态 力学量 Ⅱ

有限维复空间

这里及以后, 我们将有限维和无限维两种情形都统称为 Hilbert 空间. 在以后的位置表象及空间波函数的讨论中叙述无限维 Hilbert 空间, 目前, 仅关注有限维 Hilbert 空间.

数域 F, 空间 V.
这里及以后, $F=\mathbb{C}$, 即, 讨论复数域上的线性空间.

如果数 $a,b\in F$, 向量 $\psi,\varphi,\chi\in V$, 那么有

- $a\psi+b\varphi\in V$,
- $\psi+\varphi=\varphi+\psi$, $\psi+(\varphi+\chi)=(\psi+\varphi)+\chi$,
- $a(b\psi)=(ab)\psi$,
- $a(\psi+\varphi)=a\psi+b\varphi$, $(a+b)\psi=a\psi+b\varphi$,
- 存在零向量 $\mathbf{0}$, 对于任意的 $\psi\in V$, 有 $\mathbf{0}+\psi=\psi$,
- 数域中存在 0 和 1, 对于任意的 $\psi\in V$, 有 $0\cdot\psi=\mathbf{0}$, 以及 $1\cdot\psi=\psi$.

范数 (norm)

对于任意的 $\psi\in V$, 定义相应的一个实数 $\|\psi\|$, 称之为 ψ 的范数, 它满足

- 对于所有的 $\psi\neq\mathbf{0}$, $\|\psi\|>0$.
  当且仅当 $\psi=\mathbf{0}$, $\|\psi\|=0$.
- 用 a 数乘 ψ, 得到 $a\psi$, 它的范数是
$$\|a\psi\|=|a|\|\psi\|$$

内积

对于任意两个向量 $\psi,\varphi\in V$, 定义一个数 $(\psi,\varphi)\in F$, 称为 ψ 和 φ 之间的内积, 须满足如下要求:

- $(\psi,\psi)\geqslant 0$, 其中当且仅当 $\psi=\mathbf{0}$, 等号成立.

- $(\psi, \varphi + \chi) = (\psi, \varphi) + (\psi, \chi)$.
- $(\psi, a\varphi) = a(\psi, \varphi)$.
- $(\psi, \varphi) = (\varphi, \psi)^*$

由最后两个条件可以推出 $(a\psi, \varphi) = a^*(\psi, \varphi)$.

如果两个向量的内积为零, 那么它们彼此正交.

可以通过内积定义范数:

$$\|\psi\| = (\psi, \psi)^{1/2}.$$

不过, 需要知道的是, 范数的定义可以不依赖于内积.

两个向量之间的距离

$$d(\psi, \varphi) = \sqrt{(\psi - \varphi, \psi - \varphi)} = \|\psi - \varphi\|.$$

两个不等式,

$$|(\psi, \varphi)| \leqslant \|\psi\| \, \|\varphi\|, \qquad \text{Cauchy-Schwartz 不等式},$$

$$\|\psi + \varphi\| \leqslant \|\psi\| + \|\varphi\|, \quad \text{三角形不等式}.$$

完备性

内积空间 V 中存在一组正交归一的向量, 记作 $\{e_i\}$, $i = 1, 2, \cdots, N$, N 是空间 V 的维数, 即 V 中线性无关的向量的最大个数.

$\{e_i\}$ 构成了空间 V 的一组基, 基向量的正交归一性表示为

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij}$$

所谓的完备性, 可以这么说: V 中的任意一个向量都可以在给定的基上展开:

$$\psi = \sum_{i=1}^{N} c_i e_i.$$

复数 c_i 是向量 ψ 在基向量 e_i 上的分量,

$$c_i = (e_i, \psi)$$

有限维复空间是完备的内积空间.

直和与直积

两个 Hilbert 空间, $\mathscr{H}_1$ 和 $\mathscr{H}_2$, 它们的维数分别为 M 和 N. 它们的直和 $\mathscr{H} = \mathscr{H}_1 \oplus \mathscr{H}_2$ 是一个 $M + N$ 的空间.

设 $\psi = \sum_i \psi_i e_i \in \mathscr{H}_1$, $\varphi = \sum_j \varphi_j f_j \in \mathscr{H}_2$, $\{e_i\}$ 和 $\{f_j\}$ 分别是 $\mathscr{H}_1$ 和 $\mathscr{H}_2$ 的基.

直和 $\Psi = \psi \oplus \varphi \in \mathscr{H}$,

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_M \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_M \\ \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_N \end{pmatrix}.$$

$\mathscr{H}_1$ 和 $\mathscr{H}_2$ 的直积空间 $\mathscr{H} = \mathscr{H}_1 \otimes \mathscr{H}_2$, 其中的向量是 (以 $\mathbb{C}^3 \otimes \mathbb{C}^2$ 为例):

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1\varphi_1 \\ \psi_1\varphi_2 \\ \psi_2\varphi_1 \\ \psi_2\varphi_2 \\ \psi_3\varphi_1 \\ \psi_3\varphi_2 \end{pmatrix}.$$

子空间, 正交子空间

设 $\mathscr{M}$ 是 $\mathscr{H}$ 的一个子空间, 也就是说, $\mathscr{M}$ 中的向量的任意形式的线性组合都属于 $\mathscr{M}$.

整个空间 $\mathscr{H}$ 可以表示为

$$\mathscr{H} = \mathscr{M} \oplus \mathscr{M}^\perp.$$

这里, $\mathscr{M}^\perp$ 是 $\mathscr{H}$ 的另一个子空间, $\mathscr{M}^\perp$ 中的任意一个向量与 $\mathscr{M}$ 中的任意向量是正交的, 即

$$(\psi, \varphi) = 0, \quad \forall\, \psi \in \mathscr{M},\, \varphi \in \mathscr{M}^\perp.$$

$\mathscr{M}^\perp$ 是 $\mathscr{M}$ 的正交子空间.

$\mathscr{H}$ 的中的任意一个向量 Ψ 可以表示为

$$\Psi = \psi \oplus \varphi, \quad \text{其中 } \psi \in \mathscr{M},\, \varphi \in \mathscr{M}^\perp.$$

有限维复空间上的矩阵, 线性变换

将 N 维 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 中的向量变换为另一个 N' 维的 Hilbert $\mathscr{H}'$ 中的向量, 这些变换具有矩阵的形式, 是 $N' \times N$ 的矩阵. 这些矩阵也构成了一个线性空间, 记作 $\mathcal{L}(\mathscr{H}, \mathscr{H}')$. 对于 $T \in \mathcal{L}(\mathscr{H}, \mathscr{H}')$,

有

$$T(a\psi + b\varphi) = aT(\psi) + bT(\varphi).$$

矩阵 T 的范数有多种定义, 例如,

$$\|T\| = \sup_{\|\psi\|=1} \|T(\psi)\|_{\mathscr{H}'}.$$

上式右端的意思是, 原先属于 $\mathscr{H}$ 的向量 ψ 被变换到 $\mathscr{H}'$ 中, 其范数为 $\|T(\psi)\|_{\mathscr{H}'}$. 考虑所有属于 $\mathscr{H}$ 的单位向量, 最大的 $\|T(\psi)\|_{\mathscr{H}'}$ 即是 T 的范数.

对偶空间

一个特殊的情形: $\mathcal{L}(\mathscr{H}, \mathbb{C})$, 即, $\mathscr{H}$ 中的向量被变成了复数.

$\mathcal{L}(\mathscr{H}, \mathbb{C})$ 构成的空间被称为 $\mathscr{H}$ 对偶空间, 记作 $\mathscr{H}^\dagger$.

Rietz **引理**
对于每一个 $T \in \mathscr{H}^\dagger$, 有唯一的 $\varphi_T \in \mathscr{H}$, 使得对于所有的 $\psi \in \mathscr{H}$, $T(\psi) = (\varphi_T, \psi)$.

一般来说, 将向量变为数的变换有多种形式, 但是 Rietz 引理告诉我们, 不论什么形式的选择, 到后来总能落实为内积的形式.

换一个说法:
对于 $\mathscr{H}$ 中的每一个向量 φ, 总可以定义一个连续的线性泛函 T_φ,

$$T_\varphi(\psi) = (\varphi, \psi).$$

Dirac 符号

将 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 中的向量 ψ 记作 $|\psi\rangle$. 右矢, ket.

右矢 $|\psi\rangle$ 与前面说的 ψ 没有没有本质上的区别, 仅仅是换了一种写法.

为了说明左矢和左矢空间 (bra space), 我们回到内积的定义.

对于 $\psi \in \mathscr{H}$ 和 $\varphi \in \mathscr{H}$, 二者的内积是

$$(\varphi, \psi) \in \mathbb{C}$$

现在, 把内积运算看作一个操作, 一个把向量 ψ 变成一个复数的运算,

$$(\varphi, \psi) \iff T_\varphi(\psi)$$

T_φ 是一个关于 ψ 的线性泛函, 即 $T_\varphi \in \mathcal{L}(\mathscr{H}, \mathbb{C})$. 或者说, T_φ 是对偶空间 $\mathscr{H}^\dagger$ 中的一个 "向量", $T_\varphi \in \mathscr{H}^\dagger$.

而 Rietz 引理告诉我们, $\mathscr{H}$ 中的 φ 与 $\mathscr{H}^\dagger$ 中的 T_φ 是一一对应的, $\mathscr{H}$ 和 $\mathscr{H}^\dagger$ 是同构的 (isomorphic).

用左矢形式 $\langle\varphi|$ 表示 T_φ, 这实际上是泛函 T_φ 的另一种写法.

$$(\varphi,\psi) \iff T_\varphi(\psi) \iff \langle\varphi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$$

仅仅从形式上说, 可以把右矢 $|\psi\rangle$ 看成是列向量, 把左矢 $\langle\psi|$ 看成行向量, 并且行向量 $\langle\psi|$ 中的每一个分量都是列向量 $|\psi\rangle$ 中相应的分量的复共轭.

n 维复 Hilbert 空间存在一组正交归一的基向量, $|e_i\rangle$, $i=1,2,\cdots,n$.

$$\langle e_i|e_j\rangle = \delta_{ij}$$

其中 $\langle e_i|$ 是 $|e_i\rangle$ 的左矢形式.

在基向量 $|e_i\rangle$ 上, 或者说在表象 $\{|e_i\rangle\}$ 中, 任意向量 $|\psi\rangle$ 可以展开为

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \psi_i |e_i\rangle, \quad \psi_i = \langle e_i|\psi\rangle$$

于是将向量 $|\psi\rangle$ 表示为

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

与之对偶的左矢的形式是

$$\langle\psi| = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \cdots & \psi_n^* \end{pmatrix}$$

设另有一个向量 $|\varphi\rangle$ 可以表示为

$$|\varphi\rangle = \begin{pmatrix} \varphi_1 & \varphi_2 & \cdots & \varphi_n \end{pmatrix}^T$$

其中上标 T 表示转置. 两个向量 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 之间的内积是

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \psi_i^* \varphi_i = \langle\varphi|\psi\rangle^*$$

第二章　　量子态 力学量 Ⅲ

一般地, 我们并不建议把基向量展开成某个具体的形式, 这是因为, 必须先有了一组基, 然后才能说展开形式. 基向量本来就是为了展开其它向量而设的. 但是, 在很多具体场合中, 我们还是写出了基向量的具体形式, 使得计算过程更清楚.

$\mathbb{R}^3$ 中的旋转变换

看一个简单的例子, 三维实空间 $\mathbb{R}^3$. 在直角坐标系中, 基向量是三个方向 $(x,\, y,\, z)$ 上的单位向量, 记作 $\boldsymbol{e}_i$, $\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}_3$, 或者 $\hat{\boldsymbol{i}}$, $\hat{\boldsymbol{j}}$, $\hat{\boldsymbol{k}}$.

任意两个向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 可以表示为

$$\boldsymbol{u} = u_1\boldsymbol{e}_1 + u_2\boldsymbol{e}_2 + u_3\boldsymbol{e}_3$$

$$\boldsymbol{v} = v_1\boldsymbol{e}_1 + v_2\boldsymbol{e}_2 + v_3\boldsymbol{e}_3$$

它们的内积就是点乘,

$$\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v} = u_1v_1 + u_2v_2 + u_3v_3$$

当然可以为 $\mathbb{R}^3$ 选择另外一组基向量, $\{\boldsymbol{f}_1, \boldsymbol{f}_2, \boldsymbol{f}_3\}$, 假设新的基与原先一组基向量之间的关系是

$$\boldsymbol{f}_1 = \boldsymbol{e}_1\cos\phi + \boldsymbol{e}_2\sin\phi, \quad \boldsymbol{f}_2 = -\boldsymbol{e}_1\sin\phi + \boldsymbol{e}_2\cos\phi, \quad \boldsymbol{f}_3 = \boldsymbol{e}_3$$

这实际上是 $\mathbb{R}^2$ 中的旋转变换. 这时, 为了更直观地说明新的基向量, 可以将 $\boldsymbol{f}_j$ 表示为

$$\boldsymbol{f}_1 = \begin{pmatrix}\cos\phi\\ \sin\phi\\ 0\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{f}_2 = \begin{pmatrix}-\sin\phi\\ \cos\phi\\ 0\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{f}_3 = \begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix} \tag{1}$$

在上式中, 我们将新的基向量 $\boldsymbol{f}_j$ 表示为列向量的形式, 意味着原先的基向量 $\boldsymbol{e}_i$ 有如下表示

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{pmatrix}1\\ 0\\ 0\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{pmatrix}0\\ 1\\ 0\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_3 = \begin{pmatrix}0\\ 0\\ 1\end{pmatrix}$$

即我们说的自然基向量.

接着讨论两组基之间的变换关系. 可以采用两种形式. 第一种形式是将三个基向量排成一行,

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{f}_1 & \boldsymbol{f}_2 & \boldsymbol{f}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

这里, 不要再将 $\boldsymbol{e}_i$ 或 $\boldsymbol{f}_j$ 表示为列向量了. 在上式的右端作矩阵的相乘, 给出 (以 $\boldsymbol{f}_1$ 为例)

$$\boldsymbol{f}_1 = \boldsymbol{e}_1 \cos\phi + \boldsymbol{e}_2 \sin\phi$$

第二种形式是将 $\boldsymbol{e}_i$ 和 $\boldsymbol{f}_j$ 表示为列向量, 以 $\boldsymbol{f}_1$ 为例, 有

$$\begin{pmatrix} \cos\phi \\ \sin\phi \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3}$$

在这个表达式中, 变换矩阵将列向量形式的 $\boldsymbol{e}_1$ 变换为列向量形式的 $\boldsymbol{f}_1$.

令

$$R(z,\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

即绕 z 轴旋转角度 ϕ 的正交变换.

值得注意的是, 需要明确变换 $R(z,\phi)$ 的作用对象是什么. 在上面的讨论中, 我们考虑的是基向量的变换, 即表象的变换, 这是被动观点. 在不同的表象中, 同一个向量有不同的表示.

设向量 $\boldsymbol{u}$ 在基向量 $\{\boldsymbol{e}_i\}$ 上的表示形式是

$$\boldsymbol{r} = u_1\boldsymbol{e}_1 + u_2\boldsymbol{e}_2 + u_3\boldsymbol{e}_3$$

这里 u_1, u_2 和 u_3 是向量 $\boldsymbol{r}$ 的三个分量.

该向量在基向量 $\{\boldsymbol{f}_j\}$ 上的表示形式是

$$\boldsymbol{r} = v_1\boldsymbol{f}_1 + v_2\boldsymbol{f}_2 + v_3\boldsymbol{f}_3$$

这里 v_1, v_2 和 v_3 是向量 $\boldsymbol{r}$ 在新的基向量上的三个分量.

两组基向量之间的变换由 (2) 或 (3) 给出, 考虑两组分量 (u_i 和 v_j) 之间的联系.

$$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_2 & \boldsymbol{e}_3 \end{pmatrix} R(z,\phi) R^T(z,\phi) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \boldsymbol{f}_1 & \boldsymbol{f}_2 & \boldsymbol{f}_3 \end{pmatrix} R^T(z,\phi) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$$

可见, 矩阵 $R^T(z,\phi)$ 决定了向量 $\boldsymbol{r}$ 在两个不同坐标系中的表示之间的联系, 即

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = R^T(z,\phi) \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{pmatrix}$$

$\mathbb{C}^n$ 上的矩阵

通常, 为 n 维复空间 $\mathbb{C}^n$ 定义一组**自然基向量**, $|e_i\rangle$, 将它们的具体形式理解为

$$|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \cdots |e_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

设 $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^n$, $|\varphi\rangle \in \mathbb{C}^n$, 考虑 $|\psi\rangle\langle\varphi|$. 为此, 考虑 $|e_i\rangle\langle e_j|$.

以 $\mathbb{C}^2$ 为例.

$$|e_1\rangle\langle e_1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |e_1\rangle\langle e_2| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle\langle e_1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad |e_2\rangle\langle e_2| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

容易看到, 一般地, $|e_i\rangle\langle e_j|$ 构成了 $\mathbb{C}^n$ 上的矩阵的基.

$$|\psi\rangle\langle\varphi| = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1^* & \varphi_2^* & \cdots & \varphi_n^* \end{pmatrix} = \sum_{i,j=1}^{n} \psi_i \varphi_j^* |e_i\rangle\langle e_j|$$

给定某个矩阵 $X = (x_{ij})$, 第 i 行第 j 列的矩阵元是 x_{ij}, 可以表示为

$$X = \sum_{i,j=1}^{n} x_{ij} |e_i\rangle\langle e_j|$$

单位阵可以表示为

$$\mathbb{1}_n = \sum_{i=1}^{n} |e_i\rangle\langle e_i|$$

我们将经常利用这个形式.

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}_n |\psi\rangle = \sum_{i}^{n} |e_i\rangle\langle e_i| \ \ |\psi\rangle = \sum_{i}^{n} \psi_i |e_i\rangle$$

$$\langle\varphi| = \langle\varphi| \mathbb{1}_n = \sum_{i}^{n} \langle\varphi|e_i\rangle \langle e_i| = \sum_{i}^{n} \varphi_i^* \langle e_i|$$

$$X = \mathbb{1} X \mathbb{1} = \cdots \ \cdots$$

求迹运算 (trace). 对于 $n \times n$ 的矩阵 X,

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr}(X) &= \sum_{i}^{n} x_{ii} = \sum_{i}^{n} \langle e_i|X|e_i\rangle \\ &= \sum_{i}^{n} \langle e_i| \Big(\sum_{m,n} x_{mn} |e_m\rangle\langle e_n| \Big) |e_i\rangle \end{aligned}$$

转置

$$\begin{aligned} X^T &= \Big(\sum_{ij} x_{ij} |e_i\rangle\langle e_j| \Big)^T \\ &= \sum_{ij} x_{ij} |e_j\rangle\langle e_i| = \sum_{ij} x_{ji} |e_i\rangle\langle e_j| \end{aligned}$$

Self-adjoint, 或者简单地说, **厄密共轭**.

$$\psi, \varphi \in \mathbb{C}^n, \quad X \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^n), \quad X\psi \in \mathbb{C}^n$$

$$\text{内积 } (\varphi, X\psi) \in \mathbb{C}$$

$$\text{存在 } X^\dagger, \text{ 使得 } (X^\dagger\varphi, \psi) = (\varphi, X\psi)$$

用 Dirac 符号表示,

$$\text{内积 } (\varphi, X\psi) = \langle\varphi|X|\psi\rangle$$

$$\text{令 } |\chi\rangle = X^\dagger |\varphi\rangle, \text{ 其中 } X^\dagger \text{ 使得}$$

$$\langle\chi|\psi\rangle = \langle\varphi|X|\psi\rangle$$

$$\therefore \ \langle\chi|\psi\rangle = \langle\psi|\chi\rangle^* = \langle\psi|X^\dagger|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|X|\psi\rangle$$

从对偶空间来看,

$$\langle\psi| \Longleftrightarrow |\psi\rangle$$

$$\langle\psi| X^\dagger \Longleftrightarrow X |\psi\rangle$$

在有限维空间中,

$$X^\dagger = (X^T)^* = (X^*)^T$$

一些性质

$$(cX)^\dagger = c^* X^\dagger$$

$$(X+Y)^\dagger = X^\dagger + Y^\dagger$$

$$(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$$

对于形如 $|\psi\rangle\langle\varphi|$ 的矩阵, 有

$$(|\psi\rangle\langle\varphi|)^\dagger = |\varphi\rangle\langle\psi|$$

如果矩阵 H 满足 $H = H^\dagger$, 那么它是厄密矩阵, 并且

$$\langle\varphi|H|\psi\rangle = \langle\psi|H|\varphi\rangle^*$$

厄密矩阵的本征值和本征向量　厄密矩阵的本征值是实数, 本征向量彼此正交.

简并和无简并两种情况. 以下讨论非简并情形.

将某个厄密矩阵 $A = A^\dagger$ 的彼此正交的本征向量进行归一化, 记作 $|\alpha_i\rangle$,

$$A |\alpha_i\rangle = a_i |\alpha_i\rangle, \quad a_i \in \mathbb{R} \text{ 是 } A \text{ 的本征值}$$

$$\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij}$$

$|\alpha_i\rangle$ 可以作为 Hilbert 空间的基向量[1]. 选择 $\{|\alpha_i\rangle\}$ 作为基, 就是选择了 A 表象.

可以将 A 表示为

$$A = \sum_i a_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \tag{4}$$

厄密矩阵 A 在其自身的表象中具有对角矩阵的形式.

A 可以有自然基向量上的表示, 即

$$A = \sum_{ij} a_{ij} |e_i\rangle\langle e_j|$$

其中 a_{ij} 是矩阵元, 区别于本征值 a_i. 将 A 写成 (4) 式, 就是对角化的过程.

[1]如果存在简并, 则考虑简并子空间中的正交归一化.

在数学上, 表象是基向量的选择方式. 在物理上, 表象对应于为了观测特定的性质而设定的测量方式. 如果量子系统的某个性质可以通过厄密矩阵 A 描述, 那么为了分析 A 性质, 就要置身于 A 表象.

在 A 表象中, 任何一个向量 $|\psi\rangle$ 可以展开为

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |\alpha_i\rangle, \quad \psi_i = \langle\alpha_i|\psi\rangle$$

如果希望讨论另一个性质 —— 用另一个厄密矩阵 B 表示的性质, 那么就要选择 B 表象.

$$B = \sum_j b_j |\beta_j\rangle\langle\beta_j|$$

$$|\psi\rangle = \sum_j \tilde{\psi}_j |\beta_j\rangle, \quad \tilde{\psi}_j = \langle\beta_j|\psi\rangle$$

同一个向量 $|\psi\rangle$ 在不同的表象中的表示是不同的. 涉及到表象的变换, 酉变换, 以后说.

$\mathbb{C}^2$ 上的厄密矩阵

设 A 是 $\mathbb{C}^2$ 上的厄密矩阵, 在自然基 $|e_i\rangle\langle e_j|$ 上可以表示为

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

其中 $a_{11}, a_{22} \in \mathbb{R}$, $a_{12} = a_{21}^*$.

定义

$$\sigma_0 = \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

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

这里, σ_x, σ_y 和 σ_z 被称为 Pauli 矩阵.

可以用这四个矩阵展开 A,

$$A = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{3} r_i \sigma_i$$

其中

$$r_i = \mathrm{Tr}(A\sigma_i)$$

对于厄密矩阵 A, 上述 r_i 是实数.

酉矩阵　$\mathbb{C}^n$ 上的酉矩阵的定义是, 对于 $\psi, \varphi \in \mathbb{C}^n$, 以及 $U \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^n)$, 当且仅当

$$\big(U(\varphi), \psi\big) = \big(\varphi, U^{-1}(\psi)\big) \tag{5}$$

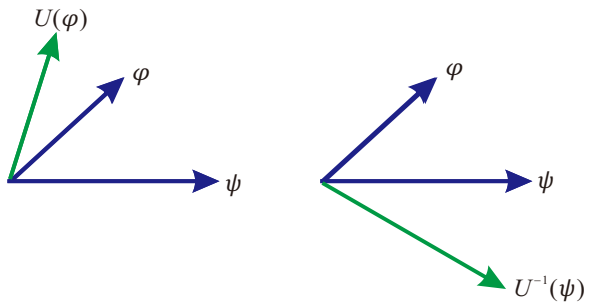


图 1: (5) 式的形象描述.

或者简单地说, 满足 $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$ 的矩阵 U 是酉矩阵.

如果 $\mathcal{U}$ 是有限维空间 $\mathbb{C}^n$ 上的酉矩阵的集合, 那么

- 对于 $c \in \mathbb{C}$, $|c| = 1$ 和 $U \in \mathcal{U}$, 有 $cU \in \mathcal{U}$.
- 如果 $U, V \in \mathcal{U}$, 那么 $UV \in \mathcal{U}$.
- 如果 $U \in \mathcal{U}$, 那么 $U^{-1} \in \mathcal{U}$.
- U 是酉矩阵, 当且仅当它将一组正交归一基向量变为另一组正交归一的基向量.
- 如果 U 是酉矩阵, 那么它的本征值的模为 1.
- 如果 U 是酉矩阵, 那么它的行向量或者列向量是正交归一的.
- 酉矩阵 U 的行列式满足 $|\det(U)| = 1$.

集合 $\mathcal{U}$ 具有群结构, 是 U(n) 群.

$\mathbb{C}^n$ 上的酉矩阵有 n^2 个独立的实参数.

$$n \times n \text{ 矩阵, } n^2 \text{ 个矩阵元, } 2n^2 \text{ 个实数}$$

$$\text{每一行或者每一列归一} \implies n \text{ 个限制条件}$$

$$\text{不同行或不同列正交} \implies \frac{n(n-1)}{2} \times 2 \text{ 个限制条件}$$

$$\therefore\ 2n^2 - n - \frac{n(n-1)}{2} \times 2 = n^2$$

$\mathbb{C}^2$ 上的酉矩阵可以表示为

$$U = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}$$

其中 $\gamma \in \mathbb{R}$, $a, b \in \mathbb{C}$, 且 $|a|^2 + |b|^2 = 1$. 单位复数 $e^{i\gamma}$ 也具有群结构, 是 U(1) 群.

$$\mathrm{U}(2) \simeq \mathrm{U}(1) \times \mathrm{SU}(2)$$

SU(2) 是 special unitary group. 对于 $U \in \mathrm{SU}(2)$, 有 $\det(U) = 1$.

第二章　　量子态 力学量　Ⅳ

SO(2) 旋转变换

设 $\boldsymbol{r}$ 是 xy 平面内的一个向量,

$$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

我们想把这个向量逆时针旋转一个角度 ϕ, 得到 $\boldsymbol{r}'$, 变换矩阵是

$$R(\phi) = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}$$

变换后的向量是

$$\boldsymbol{r}' = R(\phi)\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} x\cos\phi - y\sin\phi \\ x\sin\phi + y\cos\phi \end{pmatrix} \tag{1}$$

变换的生成元是

$$G = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

旋转变换可以表示为

$$R(\phi) = e^{\phi G}$$

再考虑函数的变换, 设 f 是 x 的函数, $f = f(x)$. 对位置坐标 x 进行一个平移变换,

$$x \longrightarrow x' = T(x) = x + a$$

空间平移变换体现在函数形式上, 就是

$$f \xrightarrow{\mathcal{T}} f'$$

下面的关系总是成立的,

$$f(x) = f'(x')$$

于是有

$$f\big(T^{-1}(x)\big) = f'(x)$$

$$f'(x) = f(x-a)$$

考虑无穷小变换, $a \to 0$,

$$f'(x) = f(x-a) \approx f(x) + \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(-a)$$

生成元是

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = -i\left(-i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)$$

从 f 到 f' 的变换可以表示为

$$f'(x) = e^{-a\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}} = e^{-ia\hat{P}/\hbar}$$

其中

$$\hat{P} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

也就是说, 动量是空间平移变换的生成元.

再考虑函数的变换, 设 f 是 x 和 y 的函数, $f = f(x,y)$, 或者 $f = f(\boldsymbol{r})$. 经过变换 (1) 后, $\boldsymbol{r} \longrightarrow \boldsymbol{r}'$, 那么函数 f 变成了什么形式?

不是 $f(\boldsymbol{r}')$, 它是变换后的坐标系中函数形式.

我们想要的是 $f'(\boldsymbol{r})$.

$$f(x,y) \longrightarrow f(x\cos\phi + y\sin\phi,\ -x\sin\phi + y\cos\phi)$$

不同表象之间的变换

在空间的基向量 (或者说表象) 改变的时候量子态和力学量的表示如何变化. 这是被动观点. 相反的主动观点说的是量子态的演化, 或者说, 用某个变换直接作用于量子态. 量子态的演化分为两种类型: 酉演化和非酉演化. 前者是由 Schrödinger 方程决定的, 后者涉及开放量子系统的演化 (典型的例子是量子测量过程).

目前讨论的是被动观点.

先复习线性代数. 向量 v 可以在两组不同的基向量上展开.

$$v = \sum_i v_i e_i = \sum_j v'_j f_j.$$

坐标或者说分量 $\{v_i\}$ 和 $\{v'_j\}$ 之间的关系就是由表象的变换决定的.

两组基向量之间的关系是

$$(f_1, f_2, \cdots, f_N) = (e_1, e_2, \cdots, e_N)\ T$$

$$f_j = \sum_i T_{ij}\, e_i$$

$$\vec{f} = \vec{e}T, \quad \vec{e} = \vec{f}T^{-1}.$$

这里假设线性变换 T 是满秩的, 存在逆变换 T^{-1}.

将上述形式代入 v 的表达式

$$\begin{aligned} v &= \sum_{i,j} v_i\, f_j \big(T^{-1}\big)_{ji} \\ &= \sum_j \Big[\sum_i \big(T^{-1}\big)_{ji} v_i \Big] f_j \\ &= \sum_j v'_j f_j. \end{aligned}$$

$$v'_j = \sum_i \big(T^{-1}\big)_{ji} v_i.$$

这就是在 F 表象中向量 v 的表示.

简单地说,

$$v = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \end{pmatrix} T\, T^{-1} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix}$$

$$= \sum_j v'_j f_j$$

例如, 在 $\mathbb{R}^2$ 中, 坐标架 xy 和 $x'y'$ 之间的关系是

$$e'_x = e_x \cos\varphi + e_y \sin\varphi$$

$$e'_y = -e_x \sin\varphi + e_y \cos\varphi$$

也就是

$$\begin{pmatrix} e'_x & e'_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_x & e_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}$$

在 $x'y'$ 坐标架中, 向量的分量的变换是由矩阵 $\left(\begin{smallmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{smallmatrix}\right)$ 决定的.

用 Dirac 符号叙述. $\{|\alpha_i\rangle\}$ 是一组基向量, 称为 A 表象. $\{|\beta_j\rangle\}$ 是另一组基向量, 称为 B 表象. 从 A 表象变换到 B 表象. 建立两组基向量之间的联系.

$$|\beta_j\rangle = \sum_i u_{ij} \,|\alpha_i\rangle\,, \quad U = (u_{ij}) \tag{2}$$

$$u_{ij} = \langle \alpha_i | \beta_j \rangle \,, \quad U = \sum_i |\beta_i\rangle\langle\alpha_i| \tag{3}$$

基向量的变换矩阵 U 是在 A 表象中书写的. 应该如此, 我们应该知道将要变换到的基向量的具体形式, 而且是在 A 表象中的形式.

容易证明 $UU^\dagger = U^\dagger U = \mathbb{1}$, 变换 U 是酉变换.

形式 $U = \sum_i |\beta_i\rangle\langle\alpha_i|$ 的意思很明确: 将 $|\alpha_i\rangle$ 映射为 $|\beta_i\rangle$.

重申: 这里的 U 是对基向量的变换, 在新的表象中, 向量的分量的变换是由 $U^\dagger$ 决定的.

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle &= \sum_i c_i \, |\alpha_i\rangle \\
&= \sum_{i,j} c_i \;\, |\beta_j\rangle\langle\beta_j| \;\, |\alpha_i\rangle \\
&= \sum_j \Big(\sum_i u^*_{ij} c_i \Big) \, |\beta_j\rangle \\
&= \sum_j \Big[\sum_i \big(U^\dagger\big)_{ji} c_i \Big] \, |\beta_j\rangle
\end{aligned}$$

例如, 在 $\mathbb{C}^2$ 中, σ_z 表象的基向量是 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$. 如果想变换到 σ_x 表象, 首先需要写出 $|x\pm\rangle$ 在 σ_z 表象中的形式. 然后得到矩阵

$$U = |x+\rangle\langle 0| + |x-\rangle\langle 1| = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \text{Hadamard matrix}$$

在 σ_x 表象中向量的分量由 $U^\dagger$ 决定. 例如

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \longrightarrow U^\dagger \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

就是说, 将 σ_x 的一个本征向量变成了在其自身表象中的自然基向量的形式.

再考虑表象变换下力学量的表述形式的变换. 在 A 表象中, 矩阵 X 写为

$$X = \sum_{ij} x_{ij} \, |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j| = X^{(A)}$$

写出在 B 表象中的形式.

$$\begin{aligned}
X &= \sum_{\substack{i,j \\ m,n}} x_{ij} \, |\beta_m\rangle\langle\beta_m| \, |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j| \, |\beta_n\rangle\langle\beta_n| \\
&= \sum_{\substack{i,j \\ m,n}} u^*_{im} \, x_{ij} \, u_{jn} \;\, |\beta_m\rangle\langle\beta_n|
\end{aligned}$$

在 B 表象中的矩阵形式记作 $X^{(B)}$.

$$X^{(B)} = U^\dagger X^{(A)} U.$$

对于力学量, 厄密矩阵, 遵循同样的变换规则.

例如, 将 σ_z 表象中的 σ_x 变换到 σ_x 表象中,

$$\sigma_x^{(X)} = U^\dagger \sigma_x^{(Z)} U = \mathrm{diag}(1,\ -1)$$

在自身的表象中是对角的, 这也就是在线性代数中说的厄密矩阵的对角化.

当然, 对于一般形式的矩阵, 酉变换未必能使其对角化. 介绍下面的两种分解形式.

第一种, polar decomposition. X 是任意的方阵.

$$X = PU \tag{4}$$

其中 P 是 (半) 正定矩阵, U 是酉矩阵. 这可以类比于将复数 z 表示为 $z = re^{i\phi}$. 既然 P 是半正定的厄密矩阵, 总可以通过酉变换将其对角化, 于是有下面的分解形式.

第二种, Singular value decomposition.

$$X = V\Lambda W^\dagger.$$

Λ 是对角的实数矩阵, 对角元非负. V 和 W 是酉的.

量子力学的测量假设

Hilbert 空间的维数 n 等于在一次观测过程中可以严格区分的状态数. 例如, 在小球-盒子模型或者自旋 1/2 的 SG 实验中, 观测结果有两个, 那么描述小球或者自旋 1/2 粒子的状态的 Hilbert 空间的维数等于 2, 即 $\mathbb{C}^2$.

量子力学的测量假设, Born-Lüders **规则**.

观测量 A 被表示为描述量子系统的 Hilbert 上的厄密算子 A. A 的本征分解 (eigen-decomposition) 形式是

$$A = \sum_{i=1}^{n} a_i \left|\alpha_i\right\rangle\!\left\langle\alpha_i\right|, \quad \left\langle\alpha_i|\alpha_j\right\rangle = \delta_{ij} \quad (\text{非简并情形})$$

系统的量子态在基向量 $|\alpha_i\rangle$ 上的展开为

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \psi_i \left|\alpha_i\right\rangle, \quad \psi_i = \left\langle\alpha_i|\psi\right\rangle$$

观测结果是其本征值, 得到某个结果 a_i 的几率等于

$$p_i = |\psi_i|^2 = |\left\langle\alpha_i|\psi\right\rangle|^2$$

如果得到结果 a_i, 测量后系统处于状态 $|\alpha_i\rangle$.

各个现象出现的几率的总和为 1, 所以

$$1 = \sum_i p_i = \sum_i |\psi_i|^2$$

也就是说, 量子态表示为 Hilbert 空间中归一化的向量.

需要注意的是, 我们观测到的不是观测量的本征值, 而是宏观层面上的现象, 是表现在测量仪器上真实而客观的读数或响应. 经过多轮次的实验观测, 发现仪器的读数不是确定的, 而是随机的. 进一步地可以得到某个读数 (记作 m_i) 出现的概率.

至于仪器的读数 m_i 和被测力学量 A 的本征值 a_i 之间的关系, 量子测量理论描述了一个理想的情形: m_i 和 a_i 之间存在一一对应的函数关系, 即 $a_i = f(m_i)$, 通过读数 m_i, 就可以推知本征值 a_i, 通过 m_i 出现的几率, 就可以得知力学量 A 在量子态 $|\psi\rangle$ 取值 a_i 的几率.

不过, 在很多情况下, 为了叙述上的简明, 我们经常说 "测量力学量 A, 得到它的某个本征值 a_i" 之类的话.

可以看到, 通过量子测量假设, 量子态和力学量这两个量子理论形式系统中的概念与实际观测结果建立了联系, 更确切的说, 与实际观测结果的几率分布建立了联系.

特别地, 如果系统的初态 $|\psi\rangle$ 就是力学量 A 的某个本征态, 比如说 $|\psi\rangle = |\alpha_k\rangle$, 那么, 测量结果一定是 a_k, 换句话说, 得到结果 a_k 的几率是 1, 而得到其它结果的几率一律为 0. 只有在这种情况下, 我们才能看到确定的结果. 这就是我们以前说过的, 在不变的表象中可以看到受限制的经典现象.

设量子系统处于A 的本征态 $|\alpha_k\rangle$, 我们希望知道的却是另一个力学量 B 的测量结果的几率分布, 那么

$$|\alpha_k\rangle = \sum_i \langle\beta_i|\alpha_k\rangle\, |\beta_i\rangle$$

$$p_i^B = |\, \langle\beta_i|\alpha_k\rangle\, |^2$$

如果 $[A, B] \neq 0$, 那么一般情况下 $|\beta_i\rangle$ 不会是 A 的本征态 [1]. 对 B 的测量结果不是确定的, 体现了不确定关系.

从数学形式上说, 在非简并情形下, 可以定义一组一维投影算符 $\Pi_i = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$, 这些一维投影算符具有如下性质,

$$\Pi_i = \Pi_i^\dagger, \quad \Pi_i\Pi_j = \Pi_i\delta_{ij}, \quad \sum_{i=1}^n \Pi_i = \mathbb{1}$$

$\sum_{i=1}^n \Pi_i = \mathbb{1}$ 实际上就是空间的完备性的体现. 对于自然基向量 $|e_i\rangle$, 容易验证 $\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = \mathbb{1}$. 对于基 $\{|\alpha_i\rangle\}$, 可以有酉变换 V 将自然基向量 $|e_i\rangle$ 变换为 $|\alpha_i\rangle$, 即 $V\,|e_i\rangle = |\alpha_i\rangle$, 于是

$$\sum_i \Pi_i = \sum_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| = V\Big(\sum_i |e_i\rangle\langle e_i|\Big)V^\dagger = VV^\dagger = \mathbb{1}$$

[1] 可能有这样的情况, 虽然 A 和 B 不对易, 但是存在某个 $|\psi\rangle$, 满足 $A\,|\psi\rangle = B\,|\psi\rangle = 0$.

用 Π_j 作用于 $|\psi\rangle$, 有

$$\Pi_j |\psi\rangle = |\alpha_j\rangle \langle\alpha_j|\psi\rangle = \psi_j |\alpha_j\rangle .$$

于是几率 p_j 可以表示为

$$p_j = |\psi_j|^2 = \langle\psi| \Pi_j |\psi\rangle = \mathrm{Tr}\left[\Pi_j \left(|\psi\rangle\langle\psi|\right)\right] \tag{5}$$

即投影算符 Π_j 在 $|\psi\rangle$ 中的期望值. 还要注意到

$$\sum_i p_i = 1 \iff \sum_i \Pi_i = \mathbb{1}$$

关于量子力学的测量假设, 我们有如下评述.

- 用投影算子 $\Pi_i = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ 作用于 $|\psi\rangle$, 结果是 $\psi_i |\alpha_i\rangle$. 这并不是量子测量的完整过程. 与本征值 a_i 对应的 $\psi_i |\alpha_i\rangle$ 是一个未归一化的态矢量, 仍然属于 Hilbert 空间, 尚没有表现出经典层面上的现象以及相应的几率. 需注意 ψ_i 是几率幅, 而几率是 $|\psi_i|^2$.

- 测量结果是要体现在仪器上的. 测量仪器一方面要能够与被测的量子系统产生相互作用, 另一方面还要能够展现经典层面上的客观现象.

- 当某个结果 (用 a_i 标记) 被观测到的时候, 被测量子系统从测量前的状态 $|\psi\rangle$ 变化为测量后的状态 $|\alpha_i\rangle$, 这个过程通常被简单地称为 “塌缩”. 听起来这似乎是瞬间完成的. 但是, 任何物理过程都需要一定的时间. 以后将对量子测量理论进行初步讨论.

第二章　　量子态 力学量　V

投影算子 $\Pi_i = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ 的性质:

- 投影算子是厄米算子, $\Pi_i = \Pi_1^\dagger$.
- 彼此正交, $\Pi_i\Pi_j = \delta_{i,j}$.
- $\Pi_i^2 = \Pi_i$, 本征值为 1 和 0.
- 完备, $\sum_i \Pi_i = \mathbb{1}$.

还可以定义某个子空间上的投影算子. 设 $\mathbb{C}^n$ 中的一个子空间 $\mathcal{S}$ 的基向量是 $|\alpha_{i_j}\rangle$, $j = 1, \cdots, m$, 这个子空间上的投影算子是

$$\Pi^{\mathcal{S}} = \sum_{j=1}^{m} |\alpha_{i_j}\rangle\langle\alpha_{i_j}|$$

正交子空间上的投影算子也是彼此正交的.

如果两个力学量对易, 那么它们可以有相同的本征向量.

$$A|\alpha_i\rangle = a_i|\alpha_i\rangle, \quad B|\beta_j\rangle = b_j|\beta_j\rangle, \quad [A,B] = 0$$

$$0 = [A,B]|\alpha_i\rangle = (AB - BA)|\alpha_i\rangle$$

$$A(B|\alpha_i\rangle) = BA|\alpha_i\rangle = a_i(B|\alpha_i\rangle)$$

暂不考虑简并情形

$$B|\alpha_i\rangle \propto |\alpha_i\rangle$$

$$\Downarrow$$

$|\alpha_i\rangle$ 是 B 的本征态

因此, 当 $[A,B] = 0$ 时, 可以在同一个表象中描述这两个力学量, 可以在相同的实验环境中测量它们, 这两个力学量是相容的.

观测量的期望值

观测量获得本征值 a_i 的几率是 $p_i = |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$, 期望值是

$$\begin{aligned}\langle A\rangle_\psi &= \sum_i a_i p_i \\ &= \sum_i a_i |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2 \\ &= \sum_i a_i \langle\alpha_i|\psi\rangle\langle\psi|\alpha_i\rangle \\ &= \sum_i \langle\psi|\alpha_i\rangle a_i \langle\alpha_i|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|A|\psi\rangle = \mathrm{Tr}(A\ |\psi\rangle\langle\psi|)\end{aligned}$$

力学量的本征值对应于测量结果, 期望值对应于测量结果的加权平均, 它们都是需要借助测量才能体现. 不能轻易地说力学量具有先验的不变的值.

回到 $\mathbb{C}^2$, 讨论 SG 实验

以 SG 实验为例.

- 对于任意的输入, 以及任意的磁场指向, 观察到的结果只有两个, $n = 2$.
- 考虑 x, y, z 三个方向. 从 SG(x) 出来的粒子在接收屏幕上集中分布于两个区域, 分别位于 x 轴的正方向和负方向. 设法选择落在 x 正半轴的粒子, 用 $|x+\rangle$ 标记这些粒子的状态. 这个过程可以视作初态制备. 类似地, 可以制备处于状态 $|x-\rangle$ 的粒子. 这两个状态是彼此正交的, 分别处于这两个状态的粒子不会在同一个出射端口出现, $\langle x+|x-\rangle = 0$.
- 让处于 $|x+\rangle$ 的粒子通过 SG(z). 观测到出射粒子等几率地分布在接收屏上的 z 轴的正方向和负方向, 将这些粒子的状态分别记作 $|z+\rangle$ 和 $|z-\rangle$, 将 $|x+\rangle$ 表示为
$$|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|z+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|z-\rangle$$
让处于 $|x-\rangle$ 的粒子通过 SG(z), 有同样的现象. 但是, $|x+\rangle$ 与 $|x-\rangle$ 正交, 所以
$$|x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|z+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|z-\rangle$$
- 类似地, 制备处于状态 $|y+\rangle$ 或 $|y-\rangle$ 的粒子, 再进行 SG(z) 检验, 同样看到等几率分布的现象, 所以有
$$\left.\begin{aligned}|y+\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}|z+\rangle + \tfrac{i}{\sqrt{2}}|z-\rangle \\ |y-\rangle &= \tfrac{i}{\sqrt{2}}|z+\rangle + \tfrac{1}{\sqrt{2}}|z-\rangle\end{aligned}\right\} \tag{1}$$

显然, $|y+\rangle$ 和 $|y-\rangle$ 是彼此正交的.

- 制备处于 $|x+\rangle$ (或者 $|x-\rangle$) 的粒子, 然后进行 SG(y) 检验. 需要用 $|y\pm\rangle$ 表示 $|x\pm\rangle$. 可以先由 (1) 式得到

$$|z+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|y+\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}}|y-\rangle$$

$$|z-\rangle = \frac{-i}{\sqrt{2}}|y+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|y-\rangle$$

然后写出

$$|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|z+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|z-\rangle = e^{-i\frac{\pi}{4}}\Big(\frac{1}{\sqrt{2}}|y+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|y-\rangle\Big)$$

$$|x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|z+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|z-\rangle = e^{i\frac{\pi}{4}}\Big(\frac{1}{\sqrt{2}}|y+\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|y-\rangle\Big)$$

上述数学表达式是一个构造过程, 根据 SG 实验的结果构造量子态的表示形式. 在 SG 实验中, 可以严格区分的现象有且只有两个, 所以需要两维复空间表示量子态. 之所以需要复数形式, 是因为实空间不能胜任: 当把 $|x\pm\rangle$ 表示为 $|z\pm\rangle$ 的实系数的叠加之后, $|y\pm\rangle$ 不可能再被表示为关于 $|z\pm\rangle$ 的以实系数 $\pm\frac{1}{\sqrt{2}}$ 叠加的形式.

构造观测量. 将观测结果的值记作 $+1$ 和 -1, 有

$$Z = (+1)\,|z+\rangle\langle z-| + (-1)\,|+1\rangle\langle -1| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \sigma_z$$

$$Y = \sigma_y$$

$$X = \sigma_x$$

投影算子. σ_z 的本征向量是 $|z+\rangle$ 和 $|z-\rangle$, 或者记作 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$,

$$\Pi_+^Z = |z+\rangle\langle z+| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \Pi_-^Z = |z-\rangle\langle z-| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

显然 $\Pi_+^Z + \Pi_-^Z = \mathbb{1}$.

σ_x 的本征值和本征向量是

$$+1, \quad |x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$-1, \quad |x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

投影算子

$$\Pi_+^X = |x+\rangle\langle x+| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Pi_-^X = |x-\rangle\langle x-| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

对于 σ_y,

$$|y+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad |y-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

$$\Pi_+^Y = |y+\rangle\langle y+| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}, \quad \Pi_-^Y = |y-\rangle\langle y-| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

以上投影算子又可以表示为

$$\Pi_\pm^X = \frac{\mathbb{1} \pm \sigma_x}{2}, \ \cdots \cdots$$

Gleason 定理

作为 Born-Lüders 规则的重要补充说明, 我们提一下 Gleason 定理. 首先注意到一维子空间上的投影算子 Π_i 的本征值是唯一一个 1 和可能不止一个的 0. 可以将投影算子视作命题, 用以向量子系统提问 (即测量). 我们也可以把 Π_i 看作是一个事件, 用 0 表示该事件没有出现, 用 1 表示该事件出现. 对于不同的观测量, 有不同的表象, 或者说不同的提问的出发点. 例如, 对于观测量 A, 我们可以使用的命题的集合是 $\left\{\Pi_i^A\right\}$, 对于观测量 B, 我们可以使用的命题的集合是 $\left\{\Pi_j^B\right\}$, 如此等等. 这些命题形成了 Hilbert 空间上的格结构 (Lattice).

给定某个观测量 (比如 A), 与此相关的事件的集合是 $\left\{\Pi_i^A\right\}$, 这些事件出现的几率为 p_i^A, 并且满足

$$\sum_i p_i^A = 1$$

Gleason 定理指出: 如果 Hilbert 空间的维数 $\geqslant 3$, 那么一定存在唯一的非负的厄密算子 ρ 且 $\mathrm{Tr}\,\rho = 1$, 使得

$$p_i^A = \mathrm{Tr}(\rho\Pi_i^A)$$

Gleason 定理考虑的是 Hilbert 空间中一维子空间上投影算子的几率测度, 该定理建立了 Hilbert 空间上的投影算子与相应的几率之间的联系. 这实际上就是量子力学的形式系统中的量子态和观测量与出现在经典层面上的现象的几率分布之间的联系, 因此, Gleason 定理可以被视作量子测量假设的数学支撑.

当 Hilbert 空间的维数等于 2 时, Gleason 定理中的唯一性是不成立的, 但这并不妨碍我们在 $\mathbb{C}^2$ 使用 Gleason 定理.

测量后量子系统的状态

测量前, 系统的状态处于叠加态

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle$$

强调: 这是几率幅的叠加, 而不是几率的混合.

如果作选择, 比如选择 $|\alpha_1\rangle$, 从操作上说, 当仪器的端口 1 上出现响应的时候, 将该端口上的出射粒子保存起来 (假设测量过程是非破坏的), 那么这些粒子的状态就是 $|\alpha_1\rangle$. 做成这件事的概率是 $p_1 = |c_1|^2$. 这可以看作是量子态的制备过程.

如果想选择端口 1 或端口 2 上的出射粒子, 那么还是要在观测到端口 1 或端口 2 有响应的时候设法保存出射粒子. 选择成功的几率是

$$p_{\text{success}} = p_1 + p_2 = |c_1|^2 + |c_2|^2 = |\langle\alpha_1|\psi\rangle|^2 + |\langle\alpha_2|\psi\rangle|^2$$

成功选择后, 所获得的量子系统的状态是 $|\alpha_1\rangle$ 和 $|\alpha_2\rangle$ 的混合 (而不是叠加), 量子态 $|\alpha_1\rangle$ 出现的几率是 $\frac{p_1}{p_1+p_1}$, 量子态 $|\alpha_2\rangle$ 出现的几率是 $\frac{p_2}{p_1+p_1}$.

可能有这样的想法: 用两维子空间上的投影算子 $|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|$ 作用于 $|\psi\rangle$,

$$(|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|)|\psi\rangle = c_1|\alpha_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$$

得到的是两维子空间中的一个向量, 归一化, 给出几率

$$p_{1,2} = |c_1|^2 + |c_2|^2$$

归一化的量子态是

$$|\psi_{1,2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_{1,2}}}(c_1|\alpha_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) \tag{2}$$

虽然几率 $p_{1,2}$ 等于上面的 p_{success}, 但是, 以这种方式得到的 $|\psi_{1,2}\rangle$ 不是 $|\alpha_1\rangle$ 和 $|\alpha_2\rangle$ 以不同几率的混合, 而是 $|\alpha_1\rangle$ 和 $|\alpha_2\rangle$ 以几率幅形式的叠加, 二者有本质上的区别.

以两维投影算子 $|\alpha_1\rangle\langle\alpha_1| + |\alpha_2\rangle\langle\alpha_2|$ 作用于 $|\psi\rangle$ 并得到 (2) 的过程实际上是在简并情形下进行选择性量子测量的结果.

设想观测量 A 的两个本征向量 $|\alpha_1\rangle$ 和 $|\alpha_2\rangle$ 对应于同一个本征值 a_1, 那么, 当得到观测结果 a_1 的时候, 系统的测量后的状态就是由 (2) 式给出的 $|\psi_{1,2}\rangle$.

非选择的测量过程完成后, 系统的每一个测量后 (post-measurement) 的状态 $|\alpha_i\rangle$ 以一定的几率一

一对应于可以严格区分的宏观现象 m_i, 这时, 系统的状态**不能**写为

$$\sum_i p_i |\alpha_i\rangle$$

我们要表示的不是以几率幅的叠加, 而是以几率的混合. 暂且把这种混合状态记作 $\mathcal{E} = \{p_i, \alpha_i\}$,

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\text{非选择测量}} \mathcal{E} = \{p_i, \alpha_i\}, \tag{3}$$

其中 $i = 1, \cdots, n$, $p_i = |c_i|^2 = |\langle \alpha_i|\psi\rangle|^2$. 它的意思是, 系统以几率 p_i 处于被测力学量 A 的某一个本征态 $|\alpha_i\rangle$. 这是混合态 (mixed state).

混合态

前面讨论了测量后系统的状态, 一般情况下, 测量后的状态不能表示为若干个右矢的线性叠加, 因此需要有一个数学形式描述测量后的量子态. 这涉及混合态的概念.

系综

为了介绍混合态, 我们首先需要叙述系综的概念. 系综是一个想象中的假想的概念, 为了说假想的东西, 先得说与此相关的真实的事情. 以自旋 1/2 粒子的 SG 实验为例.

设想我们制备了 100 个处于状态 $|0\rangle = |\uparrow\rangle$ 的自旋 1/2 的粒子. 接着, 让这 100 个粒子通过 SG(x) 装置. 根据量子力学的预言, 即 Born 规则, 每一个粒子偏向 $+x$ 方向和或偏向 $-x$ 方向的几率都是 1/2.

但是, 在实际的实验结果中, 我们未必能看到 50 个粒子偏向 $+x$ 方向或 $-x$ 方向. 说不定只有 45 个粒子偏向 $+x$ 方向, 55 个偏向 $-x$ 方向. 甚至还可能根本没有任何粒子偏向 $+x$ 方向, 所有的 100 个粒子都偏向了 $-x$ 方向. 当然, 这件事情发生的可能性很小. 实际上, 当进入 SG(x) 的粒子数 N 越来越多, 以至于 $N \to \infty$ 的时候, 事件 "偏向 $+x$ 和 $-x$ 方向的粒子数接近各占一半" 发生的可能性变得越来越大, 以至于在极限情形下体现概率 1/2. 这时, 我们才可以说偏向 $\pm x$ 方向的几率各为 1/2, 才能说量子理论的预言有了操作意义上的对应.

但是, 极限情形下已经是假想中的描述了, 我们没有无穷多个样本, 也不可能对无穷多个粒子进行测量. 于是, 在想象中, 我们拥有无穷多个处于 $|0\rangle$ 的粒子, 这些粒子经过了 SG(x) 之后的结果对应于由玻恩规则给出的理论预言.

这想象中的无穷多个处于相同状态的粒子就组成了所谓的纯态系综. 引入系综的概念是为了叙述几率, 因为我们需要无穷多的样本、无穷多个事件才能使频度趋近于几率.

想象中的系综还有一个有别于实际情况的特点: 系综并不对应于多体量子系统. 在施特恩-格拉赫实验中, 为了描述 100 个自旋 1/2 的入射粒子, 需要的空间是 100 个 $\mathbb{C}^2$ 的直积, 即

$$\mathscr{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \cdots \otimes \mathbb{C}^2.$$

如果粒子数更多, 则 $\mathscr{H}$ 的维数更大. 对于 N 个粒子, 我们需要 2^N 维的复空间. 而对于系综则不然. 构成系综的量子系统是想象中的, 不是真实的. 不需要利用更多更大的复空间描述这些想象中的系统. 我们用系综描述自旋 1/2 粒子的量子态, 所在空间仍然是二维的.

系综是基于真实的多体系统的抽象的想象的概念, 反过来, 真实的多体系统可以为我们提供关于系综的形象的具有操作意义的理解. 而且, 在具体的实验中, 比如对量子系统的操控, 需要从系统的特定的初态开始, 对之进行一些列的操作, 这实际上就是量子态的制备过程.

还是以自旋 1/2 粒子为例. 如果希望得到自旋角动量 S_z 的取值为 $+\hbar/2$ 的量子态, 或者说 Pauli 矩阵 σ_z 取值 $+1$ 的本征态, 即 $|z+\rangle$ 态, 或者记作 $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$. 可以让粒子通过 SG(z) 装置, 并在出射粒子中选择向 $+z$ 方向偏转的那一部分. 在理想情形下, 这些被选择的粒子都处于 $|0\rangle$ 态. 可以让它们继续通过第二个 SG(z) 装置, 其结果是, 所有的出射粒子都偏向 $+z$ 方向. 于是, 通过对某个测量结果的选择, 可以制备出若干个以至大量的处于相同量子态的粒子. 一方面, 从具体的实际的角度说, 制备过程得到的结果是由处于相同状态的子系统构成的多体量子系统; 另一方面, 从抽象的想象的角度说, 我们建立了**纯态系综**的概念: 在想象中的构成系综的无穷多个系统具有相同的量子态, 比如 $|\psi\rangle$, 我们称之为纯态, 系综的状态可以用 $|\psi\rangle$ 描述, 是为纯态系综. 此前, 我们接触的量子态基本上都是纯态. 纯态 $|\psi\rangle$ 的特性是, 在原则上存在具有确定结果的测量方式, 即, 测量处于量子态 $|\psi\rangle$ 的量子系统的某个特定的力学量, 得到的结果是确定的而不是随机的.

现在考虑量子态制备的另一种方式及结果. 设想有两个 SG 实验装置, 它们都是 SG(z). 通过第一个 SG(z) 制备了 N_+ 个处于 $|z+\rangle$ 态的粒子, 通过第二个 SG(z) 制备了 N_- 个处于 $|z-\rangle$ 态的粒子, 然后, 将它们混合在一起, 构成总数为 $N = N_+ + N_-$ 的多体系统. 为了描述这个多体系统的状态, 让这 N 个粒子通过第三个 SG(z) 装置. 显然, 出射粒子中将会有 N_+ 个偏向 $+z$ 方向, 有 N_- 个偏向 $-z$ 方向.

换成几率的语言来描述. 设想某人通过以下过程制备量子态: 首先, 制备大量处于 $|z+\rangle$ 态 (以下记作 $|0\rangle$) 的粒子, 把它们储存在某个容器中; 再制备大量处于 $|z-\rangle$ 态 (以下记作 $|1\rangle$) 的粒子, 也把它们储存在另一个容器中. 然后, 制备者根据一个经典随机变量 X 的值决定从哪一个容器中选取粒子. 随机变量 X 有两个值, $x = 0$ 和 $x = 1$, 它们出现的几率分别是 p_0 和 p_1. 当 $x = 0$ 时, 选择处于 $|0\rangle$ 的粒子; 当 $x = 1$ 时, 选择处于 $|1\rangle$ 的粒子. 这就有了**混合系综**的概念: 系综 $\mathcal{E}$ 中每一个想象中的系统以几率 p_0 处于 $|0\rangle$ 态, 以几率 p_1 处于 $|1\rangle$ 态; 或者说, 系综 $\mathcal{E}$ 是两个纯态系综 $\mathcal{E}_0$ 和 $\mathcal{E}_1$ 分别以几率 p_0 和 p_1 混合的结果, 这里 $\mathcal{E}_0$ 是以 $|0\rangle$ 描述的系综, $\mathcal{E}_1$ 是以 $|1\rangle$ 描述的系综. 可以把这个说法形式地表示为

$$\mathcal{E} = p_0\mathcal{E}_0 + p_1\mathcal{E}_1. \tag{4}$$

更一般地, 可以让若干个纯态系综 $\mathcal{E}_i$ 以相应的几率 p_i 混合, 得到混合系综 $\mathcal{E}$,

$$\mathcal{E} = \sum_i p_i \mathcal{E}_i, \quad p_i \geqslant 0, \quad \sum_i p_i = 1 \tag{5}$$

其中的求和没有设定上限, 原则上可以用任意多个纯态系综进行混合. 而且, 描述 $\mathcal{E}_i$ 的量子态 $|\psi_i\rangle$ 也未必是彼此正交的. 例如, 我们可以使用两个不同的 SG 实验装置, 一个是 SG(z), 另一个是 SG(x). 通过 SG(z) 制备出处于 $|z+\rangle$ 的粒子; 通过 SG(x) 制备出处于 $|x+\rangle$ 的粒子, 然后将它们混合在一起. 用几率和系综的语言来说, 得到了混合系综 $p_{z+}\mathcal{E}_{z+} + p_{x_+}\mathcal{E}_{x+}$. 描述其中的两个纯态系综的态矢量不是正交的, 即 $\langle z+|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

我们用 (5) 式示意性地表示了通过特定的制备过程得到的混合系综 $\mathcal{E}$, 或者, 可以把 $\mathcal{E}$ 写为

$$\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\}. \tag{6}$$

需要注意的是, 混合系综 $\mathcal{E}$ 描述的是不同的量子态 $|\psi_i\rangle$ 以几率 p_i 混合, 而不是以几率幅叠加. 对此需要稍加说明.

以 (4) 式表示的系综为例. 再重复说一遍它的意思: 自旋 1/2 粒子以几率 p_0 处于 $|0\rangle$ 态, 以几率 p_1 处于 $|1\rangle$ 态. 如果让处于该状态的粒子通过 SG(z) 装置, 那么观测结果将体现这样的几率分布.

现在, 构造如下形式的量子态

$$|\psi\rangle = \sqrt{p_0}\,|0\rangle + \sqrt{p_1}e^{i\delta}\,|1\rangle\,. \tag{7}$$

让处于状态 $|\psi\rangle$ 的自旋 1/2 粒子通过 SG(z) 装置, Born 规则给出的预言是, 出射粒子偏向 $+z$ 方向的几率是 p_0, 偏向 $-z$ 方向的几率是 p_1.

在这种情况下, (7) 式描述的量子纯态与 (4) 式描述的混合系综在 SG(z) 测量过程中给出同样的几率分布.

但这只是一个偶然的结果, 只要换一种观测方式, 我们就能看到它们的不同. 让 (4) 式描述的粒子通过 SG(x). 不论粒子处于 $|0\rangle$ 态或是 $|1\rangle$ 态, 穿过 SG(x) 之后偏向 $\pm x$ 方向的几率都是 1/2. 因此, 不论 p_0 和 p_1 取怎样的值, 最终的实验结果都是, 出射粒子等几率地偏向 $\pm x$ 方向. 然而, 对于 (7) 式描述的自旋 1/2 粒子, 通过 SG(x) 之后偏向 $\pm x$ 方向的几率分别是

$$p(\pm x) = |\,\langle x_\pm|\psi\rangle\,|^2 = \frac{1}{2}\left|\sqrt{p_0} \pm \sqrt{p_1}e^{i\delta}\right|^2.$$

简单地, 令 $\delta = 0$, 将上式简化为 $p(\pm x) = \frac{1}{2}(1 \pm 2\sqrt{p_0 p_1})$. 显然, 一般情况下纯态系综 $|\psi\rangle$ 的实验结果是不同于混合系综的实验结果的. 总之, 混合系综 $\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\}$ 的数学形式不可能表示为 Hilbert 空间的态矢量.

密度算子

混合态的数学表示是密度算子, 在有限维空间的情形下, 可以说密度矩阵. 下面通过力学量的期望值引入密度矩阵.

对于纯态系综, 可以用态矢量 $|\psi\rangle$ 描述. 力学量 A 在 $|\psi\rangle$ 上的期望值记作 $\langle A\rangle_\psi$. 它的意思是:

$$\text{力学量 } A \text{ 的观测结果} \in \{a_i\}$$

$$\text{量子系统处于 } |\psi\rangle$$

$$\text{观测到某个结果 } a_i \text{ 的几率 } p_i = |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$$

$$\langle A\rangle_\psi = \sum_i p_i a_i = \sum_i \langle\psi|\alpha_i\rangle a_i \langle\alpha_i|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

可以继续计算下去, 设空间的基向量是 $|\varphi_i\rangle$, 有

$$\begin{aligned}\langle A\rangle_\psi &= \langle\psi| A |\psi\rangle \\ &= \sum_i \langle\psi|\varphi_i\rangle \langle\varphi_i| A |\psi\rangle \\ &= \sum_i \langle\varphi_i| A |\psi\rangle \langle\psi|\varphi_i\rangle \\ &= \mathrm{Tr}\big(|\psi\rangle\langle\psi| A\big) = \mathrm{Tr}\big(\psi A\big).\end{aligned}$$

这里 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$.

对于混合系综 $\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\}$, 力学量 A 的期望值是它在每一个 $|\psi_i\rangle$ 上的期望值的加权平均, 权重即是 p_i,

$$\langle A\rangle_\mathcal{E} = \sum_i p_i \langle\psi_i| A |\psi_i\rangle = \sum_i p_i \,\mathrm{Tr}\big(\psi_i A\big) = \mathrm{Tr}\Big(\sum_i p_i \psi_i A\Big). \tag{8}$$

这里 $\psi_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ 是关于 $|\psi_i\rangle$ 的投影算符. 上式最后的形式表明, 可以把混合系综 $\{p_i, \psi_i\}$ 表示为

$$\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\} \longrightarrow \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| .$$

这种形式就是**密度算符** (Density Operator), 在有限维空间中也称为密度矩阵.

对于给定的混合系综, 其密度算符有如下定义.

定义 (密度算符) 对于混合系综 $\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\}$, 用 ρ 表示它的密度算符, 其数学形式是

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| , \quad p_i \geqslant 0, \quad \sum_i p_i = 1. \tag{9}$$

□

密度算符有如下性质.

性质 1 密度算符的迹为 1, 即 $\mathrm{Tr}(\rho) = 1$.

性质 2 密度算符是厄米的, $\rho = \rho^\dagger$.

性质 3 密度算符是半正定的[1], 即对于任意的向量 $|\phi\rangle \in \mathscr{H}$, 总有 $\langle\phi|\,\rho\,|\phi\rangle \geqslant 0$.

根据密度算符的定义, 上述性质容易证明. 设 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 的是有限维的, 基向量为 $\{|\varphi_i\rangle\}$.

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(\rho) &= \sum_i \langle\varphi_i|\,\rho\,|\varphi_i\rangle \\ &= \sum_{i,k} p_k \langle\varphi_i|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\varphi_i\rangle \\ &= \sum_k p_k \sum_i |\langle\varphi_i|\psi_k\rangle|^2 \\ &= \sum_k p_k = 1.\end{aligned}$$

这里用到了 $|\psi_k\rangle$ 的归一化条件, $\sum_i |\langle\varphi_i|\psi_k\rangle|^2 = 1$. 这是性质 1.

因为 (9) 式的求和表达式中的每一项都是厄米的, 故 ρ 是厄米的. 这是性质 2.

对于任意的 $|\varphi\rangle \in \mathscr{H}$, 有

$$\langle\varphi|\,\rho\,|\varphi\rangle = \sum_k p_k \langle\varphi|\psi_k\rangle = \sum_k p_k |\langle\varphi|\psi_k\rangle|^2 \geqslant 0.$$

即性质 3.

从性质 3 可知, 密度算符的所有的本征值是非负的; 从性质 1 和性质 3 可知, 密度算符的本征值属于区间 $[0,1]$, 且所有本征值的和为 1.

关于密度算符的理解, 有两点需要说明.

1. 重申密度算符的数学形式中的求和涉及到的是几率, 量子力学的叠加原理也表现为求和的形式, 但涉及到是几率幅, 二者有本质上的不同. 与几率有关的相加不会带来干涉效应, 而与几率幅有关的相加则导致干涉效应. 故可将密度算符视为量子态的非相干叠加, 而叠加原理描述的是量子态的相干叠加.

2. 密度算符提供的是关于量子系综的数学形式上的描述, 但是不能说明系综的具体的构成. 系综的具体形式, 即 $\mathcal{E} = \{p_i, \psi_i\}$, 来自量子态的制备过程. 如果混合系综 $\mathcal{E}$ 的制备者并不把具体的制备过程告知随后的观测者, 那么观测者面对的只能是用密度算符 ρ 表示的量子态. 而对于给定的 ρ, 却有很多的甚至是无穷多的系综与此对应. 以自旋 1/2 粒子的系综 $\left\{\frac{1}{2}, |0\rangle\langle 0|\,; \frac{1}{2}, |1\rangle\langle 1|\right\}$ 为例. 从制备过程来说, 该系综是两个纯态系综 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的等几率的混合. 它的密度算符是,

$$\rho = \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| + \frac{1}{2}|1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

[1]有些时候, 为了叙述上的省事, 我们会简单地说 ρ 是正定的.

有无穷多中不同的系综与此对应,

$$\begin{aligned}\rho =& \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ =& \frac{1}{2} |x+\rangle\langle x+| + \frac{1}{2} |x-\rangle\langle x-| \\ =& \frac{1}{2} |y+\rangle\langle y+| + \frac{1}{2} |y-\rangle\langle y-| \\ =& \frac{1}{2} |z+\rangle\langle z+| + \frac{1}{2} |z-\rangle\langle z-| \\ =& \frac{1}{2} |n+\rangle\langle n+| + \frac{1}{2} |n-\rangle\langle n-| .\end{aligned}$$

其中 $|n\pm\rangle$ 表示在空间任意某个方向 $\boldsymbol{n}$ 上的 Pauli 矩阵的两个本征向量. 上式表明了同一种数学形式对应于无穷多种物理上的可能的实现方式.

第二章　　量子态 力学量　VI

如前所述, 如果系综里的每个系统处于相同的态, 那么系综的态可以用右矢符号 $|\psi\rangle$ 表示, 相应的密度算符为 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, 等价于投影算符, 这种情形称为**纯态**. 在这种表示中, 态的整体相位消失了, 有时候, 把 ψ 称为 ray space 中的向量.

需要用混合系综表示的状态则称为**混合态**, 其密度算符是若干个投影算符的凸和. 更一般地, 可以用若干个混合系综 $\mathcal{E}_i$ 以一定的几率混合成更大的混合系综 $\mathcal{E}$. 这样, 可以将混合系统 $\mathcal{E}$ 描述为 $\{p_i, \rho_i\}$, 其中的 ρ_i 是混合系综 $\mathcal{E}_i$ 的密度算符, 系综 $\mathcal{E}$ 相应的密度算符就是

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i, \quad p_i \geqslant 0, \quad \sum_i p_i = 1.$$

对于纯态或纯态系综, 显然有 $\rho^2 = \rho$, 而且 $\mathrm{Tr}(\rho^2) = 1$. 纯态的矩阵算符有且只有一个非零的本征值, 且为 1. 对于混合态, $\rho^2 \neq \rho$, 而且 $\mathrm{Tr}(\rho^2) < 1$. 实际上, 设 ρ 的对角化的形式为 $\mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$, 其中 λ_i 为 ρ 的本征值, Hilbert 空间的维数设为 n.

$$\mathrm{Tr}(\rho^2) = \sum_i \lambda_i^2 < \sum_i \lambda_i = 1.$$

可见 $\mathrm{Tr}(\rho^2)$ 等于 1 还是小于 1 可作为纯态或混合态的一个判据.

设系统的初态是 ρ_{in}, 测量系统的力学量 $A = \sum_i a_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$. 得到结果 a_i 的几率是

$$p_i = \langle\alpha_i|\rho_{in}|\alpha_i\rangle$$

也就是说, 在 A 表象中写出的密度矩阵 ρ_{in} 的对角矩阵元就是测量结果的几率. 密度矩阵的迹为 1, 当且仅当几率守恒. 对几率求和

$$\sum_i p_i = \sum_i \langle\alpha_i|\rho_{in}|\alpha_i\rangle = \sum_i \mathrm{Tr}\left(\rho_{in} \ |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|\right)$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\rho_{in} \sum_i \Pi_i\right) = \mathrm{Tr}(\rho_{in}) = 1$$

测量后的状态记作 ρ_{out}

$$\rho_{out} = \sum_i p_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

$$= \sum_i \langle\alpha_i|\rho_{in}|\alpha_i\rangle \ |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

$$= \sum_i |\alpha_i\rangle \langle\alpha_i|\rho_{in}|\alpha_i\rangle \langle\alpha_i| = \sum_i \Pi_i \rho_{in} \Pi_i$$

注意上式与下面的恒等式的区别,

$$\rho = \sum_{i,j} \Pi_i \rho \Pi_j$$

以纯态 $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle$ 为例,

$$|\psi\rangle\langle\psi| \longrightarrow \rho_{out} = \sum_i |c_i|^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

开放量子系统演化的一般形式

$$\rho_{in} \ \longrightarrow \ \rho_{out} = \sum_i K_i \rho_{in} K_i^\dagger$$

其中 K_i 称为 Kraus 算子, 满足如下条件

$$\sum_i K_i^\dagger K_i \leqslant \mathbb{1}$$

上式的意思是, $\sum_i K_i^\dagger K_i - \mathbb{1}$ 是 (半) 负定的. 对于保迹 (trace-preserving) 的演化过程, 上式取等号.

在选择性测量过程中, 量子态的变化不是保迹的. 对于非选择性测量, 量子态的变化是保迹的.

当然, 酉变换是保迹的.

系统和仪器

量子测量假设, 或者 Born 规则, 就是将关于力学量 A 的投影算子 $\Pi_i^A = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ 作用于量子态 $|\psi\rangle$ (或者混合态 ρ), 然后通过内积或求迹得到结果 a_i 出现的几率.

$$|\psi\rangle \longrightarrow \Pi_i^A |\psi\rangle$$

$$p_i = \langle\psi|(\Pi_i^A)^\dagger \ \Pi_i^A|\psi\rangle = \langle\psi|\Pi_i^A|\psi\rangle$$

$$\rho \longrightarrow \Pi_i^A \rho \Pi_i^A$$

$$p_i = \mathrm{Tr}(\Pi_i^A \rho \Pi_i^A) = \mathrm{Tr}(\rho \Pi_i^A)$$

这个计算过程缺乏适当的物理描述, 显得有些突兀.

测量需要借助仪器, 测量结果应该反映在仪器上. 在这里, 我们简要描述测量过程, 以后再给出更为详细的讨论.

量子系统 Q, 测量仪器 M. 系统的初态是 $|\psi\rangle$, 未知. 仪器的初态是 $|\varphi\rangle$, 这是可以制备的. 二者间有相互作用, 是可控的.

系统的被测力学量是 A, 本征值和对应点本征向量分别是 a_i 和 $|\alpha_i\rangle$.

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle, \quad c_i = \langle\alpha_i|\psi\rangle$$

在一个理想测量过程中, 首先使系统和仪器经历如下形式的演化,

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \longrightarrow \sum_i c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle, \quad \langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij} \tag{1}$$

这个过程有时被称为 pre-measurement. 测量过程尚未完成.

接下去仪器的状态 $|\varphi_i\rangle$ 在经典层面上表现为可以严格区分的现象,

$$|\varphi_i\rangle \longrightarrow \text{Event}_i \tag{2}$$

每一个事件发生的概率是 $p_i = |c_i|^2$. 当第 i 个事件发生的时候, 可以推知系统的力学量 A 的值是 a_i.

由 (1) 式描述的测量过程的第一个阶段容易理解, 甚至无需理解 —— 只是两体系统量子态的演化过程, 没有出现任何现象. 而 (2) 式所示的过程则不易解释. 这两个过程反映了测量仪器的两个特点: 小的一面 —— 能够和被测量子系统发生相互作用; 大的一面 —— 能够将微观尺度上的过程放大在经典层面.

SG 实验. SG(z) 装置.

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \longrightarrow c_0 |0\rangle \otimes |\varphi_0\rangle + c_1 |1\rangle \otimes |\varphi_1\rangle$$

其中 $|\varphi\rangle$, $|\varphi_0\rangle$ 和 $|\varphi_1\rangle$ 表示粒子的空间量子态, 而且 $\langle\varphi_0|\varphi_1\rangle = 0$.

如果重聚, 那么系统的状态仍然是 $|\psi\rangle$. 如果落在屏幕上, 那么 $|\varphi_0\rangle$ 和 $|\varphi_1\rangle$ 转变为可区分的经典现象, 系统的状态变为混合态,

$$\text{以几率 } p_0 = |c_0|^2 \text{ 处于 } |0\rangle, \text{ 以几率 } p_1 = |c_1|^2 \text{ 处于 } |1\rangle$$

分析 Mach-Zehnder (MZ) 干涉仪. 在图 1 中, 入射粒子的量子态用直积形式 $|H\rangle \otimes |\psi\rangle$ 表示, 其中 $|\psi\rangle$ 描述粒子的内禀量子态 (如自旋, 极化等), $|H\rangle$ 描述粒子的位置空间量子态, 具体形式就是波函数. ket 符号中的 H 表示粒子沿水平方向传播. 用 $|V\rangle$ 表示粒子沿竖直方向传播.

这里并没有完全采用光学上的描述.

图中的分束器 (beam splitter) 的作用对象是位置空间的量子态, 它的作用效果用矩阵 U_{BS} 表示,

$$U_{BS} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

具体地, 将 $|H\rangle$ 变为 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle)$, 将 $|V\rangle$ 变为 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle - |V\rangle)$.

图中镜子将 $|H\rangle$ 和 $|V\rangle$ 互换, 可以用 σ_x 表示其变换矩阵.

在图 1 中只有一个分束器.

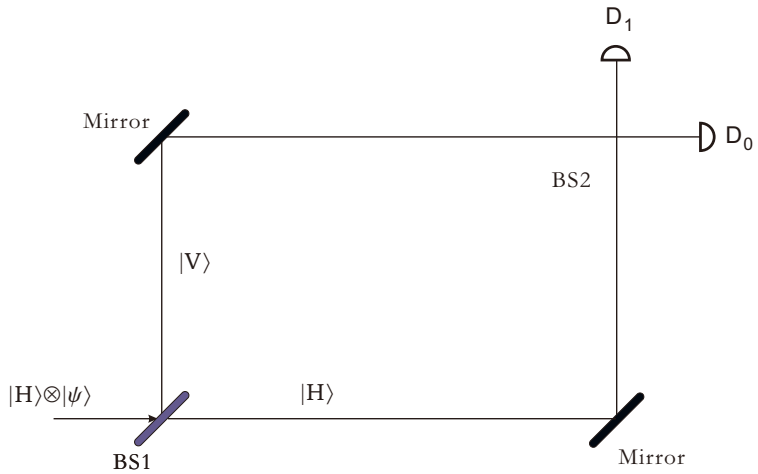


图 1

$$|H\rangle \otimes |\psi\rangle \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle) \otimes |\psi\rangle$$

如果探测器 D_0 有响应, 可以推知粒子来自上方 “路径”. 如果探测器 D_1 有响应, 可以推知粒子来自下方 “路径”. 两个探测器出现响应的几率各为 $1/2$, 但不会同时有响应. 该装置用来探测路径.

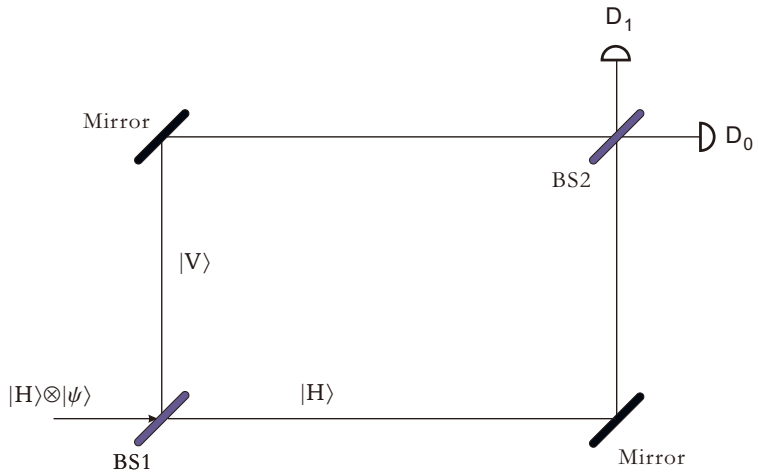


图 2

$$|H\rangle \otimes |\psi\rangle \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle) \otimes |\psi\rangle$$

$$\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|V\rangle + |H\rangle) \otimes |\psi\rangle$$

$$\longrightarrow \frac{1}{2}(|H\rangle + |V\rangle + |H\rangle - |V\rangle) \otimes |\psi\rangle$$

$$= |H\rangle \otimes |\psi\rangle$$

只有探测器 D_0 有响应, 几率为 1. 探测器 D_1 一定不会有响应. 表现出波动现象.

BS_2 使得路径不可区分.

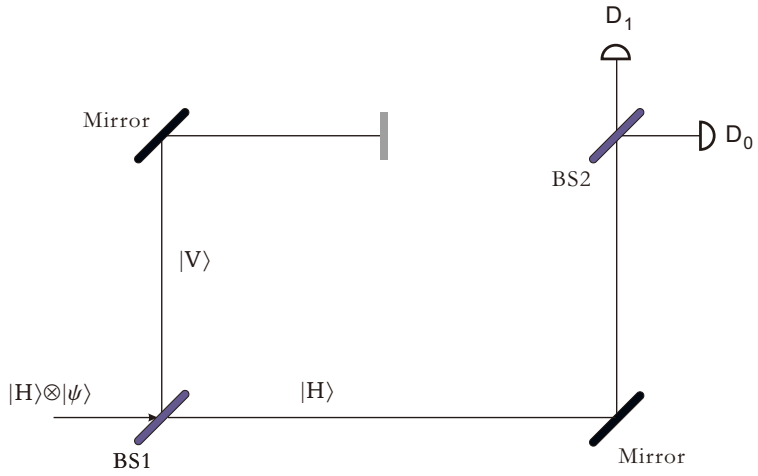


图 3

对于图 3 所示情形, 能有什么结论, 能做什么事情?

进一步的讨论可以查看有关 interaction-free measurement, 以及 delayed choice experiment 的主题词.

第三章　双值量子系统　I

凡是可以用两维复空间描述的量子系统都称为双值量子系统. 包括自旋 1/2 的粒子, 两能级系统等等. 双值指的是, 对这一类量子系统进行测量, 得到的结果有且仅有两个.

双值量子系统的量子态所在的空间是 $\mathbb{C}^2$. 纯态被表示为 $\mathbb{C}^2$ 中的归一的向量, 混合态被表示为 $\mathbb{C}^2$ 上的密度矩阵.

$\mathbb{C}^2$ 中的纯态　纯态 $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^2$, 且 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. 可以在自然基向量上表示为

$$|\psi\rangle = c_0\,|0\rangle + c_1\,|1\rangle\,, \quad c_0, c_1 \in \mathbb{C}, \quad |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$$

有三个独立的实参数.

$|\psi\rangle$ 又可以写为

$$|\psi\rangle = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\ e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2}\ e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix}$$

把 $|\psi\rangle$ 表示为密度矩阵的形式,

$$\psi = |\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\ e^{-i\phi} \\ \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\ e^{i\phi} & \cos^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

进而用 $\sigma_0 = \mathbb{1}$, $\sigma_1 = \sigma_x$, $\sigma_2 = \sigma_y$, $\sigma_3 = \sigma_z$ 展开, 有

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \sigma_x \sin\theta\cos\phi + \sigma_y \sin\theta\sin\phi + \sigma_z\cos\theta) \\ &= \frac{\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}}{2} = \frac{\mathbb{1} + \sigma_n}{2} \end{aligned}$$

其中

$$\boldsymbol{n} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \sigma_n = \sigma_x\sin\theta\cos\phi + \sigma_y\sin\theta\sin\phi + \sigma_z\cos\theta$$

- $|\psi\rangle$ 是 σ_n 的本征向量, 记作 $|n+\rangle$, 本征值为 $+1$. σ_n 的另一个本征值为 -1 的本征向量是

$$|n-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}\ e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \cos\frac{\theta}{2}\ e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix}, \quad \langle n + |n-\rangle = 0$$

- σ_n 可以表示为

$$\sigma_n = |n+\rangle\langle n+| - |n-\rangle\langle n-|$$

$|n+\rangle\langle n+|$ 和 $|n-\rangle\langle n-|$ 可以表示为

$$|n\pm\rangle\langle n\pm| = \frac{\mathbb{1} \pm \sigma_n}{2}$$

- 形象地说, $|n+\rangle\langle n+|$ 对应于 $\mathbb{R}^3$ 中的向量 $\boldsymbol{n}$, $|n-\rangle\langle n-|$ 对应于 $\mathbb{R}^3$ 中的向量 $-\boldsymbol{n}$.
  在 $\mathbb{C}^2$ 空间中两个正交的向量对应于 $\mathbb{R}^3$ 中两个方向相反的单位向量.

稍后继续讨论 $\mathbb{C}^2$ 中向量的几何性质, 下面先说混合态. 考虑两个纯态 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 分别以几率 p_1 和 p_2 混合, $p_1 + p_2 = 1$.

$$\psi_1 = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_1), \quad \psi_2 = |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_2)$$

$$\rho = p_1\psi_1 + p_2\psi_2 = \frac{1}{2}\big[\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma}\cdot(p_1\boldsymbol{n}_1 + p_2\boldsymbol{n}_2)\big] = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}), \quad |\boldsymbol{r}| < 1$$

进而可以知道, 任意的混合态都可以表示为

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}), \quad \boldsymbol{r}\in\mathbb{R}^3, \ \ |\boldsymbol{r}| \leqslant 1$$

上式中的 $\boldsymbol{r}$ 称为 Bloch 向量. Bloch 向量分布在 $\mathbb{R}^3$ 中的单位球的表面及内部. 这个单位球称为 Bloch 球. 球面上的点对应于 $\mathbb{C}^2$ 中的纯态, 球内部的点对应于混合态. 球心对应于最大混合态 $\frac{1}{2}$. 球面上相对的两个点对应于两个正交的纯态.

凸集合 不论是经典力学还是量子力学, 系统的状态都构成 "凸 (convex) 集合". 简单地说, 凸结构是这样一种集合, 可以将其中的任意两个点 "混合" 为该集合中的另一个点.

从几何的观点来说, 两个态对应于态空间中的两个点, 两个态的混合对应于连接这两个点的线段上的某个点. 换句话说, 如果有两个点属于凸结构的集合, 那么连接这两点的线段也属于这个凸结构.

给定两个纯态 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$, 它们的密度矩阵分别是 $\psi_1 = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$ 和 $\psi_2 = |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$, 它们的凸和 (convex sum) 是

$$p_1\psi_1 + p_2\psi_2, \quad p_1, p_2 > 0, \ p_1 + p_2 = 1$$

凸和的结果仍然是一个量子态, 是混合态.

一般地, 任意个量子态的凸和也是一个量子态. 设 ρ_i 是 $\mathbb{C}^n$ 上的密度矩阵, 有

$$\rho = \sum_i p_i\rho_i, \quad \sum_i p_i = 1$$

ρ 是 $\mathbb{C}^n$ 上的密度矩阵.

反过来, 上述形式也可以视作混合态 ρ 的一种解构, $\{p_i, \rho_i\}$.

对于 $\mathbb{C}^2$ 上的混合态 ρ, 它的 Bloch 向量位于单位球内, 有无穷多种分解形式. 可以分解为纯态的凸和, 也可以分解为混合态的凸和. 本征分解是沿着 Bloch 向量 $\boldsymbol{r}$ 的直径的分解.

图 1 画出了 Bloch 球在 xz 平面上的截面. 混合态对应于单位圆中的 P 点, Bloch 向量为 $\boldsymbol{r}$. 通过 Bloch 向量的直径是 P_+P_-, 这条直径对应于 ρ 的本征分解, 点 P_+ 和 P_- 分别表示 ρ 的两个本征值为 $+1$ 和 -1 的本征向量. 另外, 可以通过点 P 任意画一条弦 CD. 点 C 和点 D 虽然表示两个纯态, 但是它们不是 ρ 的本征向量. 又可以画一个凸多边形 (比如图中的 $\triangle EFG$), P 点在其内部, 这个凸多边形的各个顶点以一定的权重进行平均之后, 得到点 P.

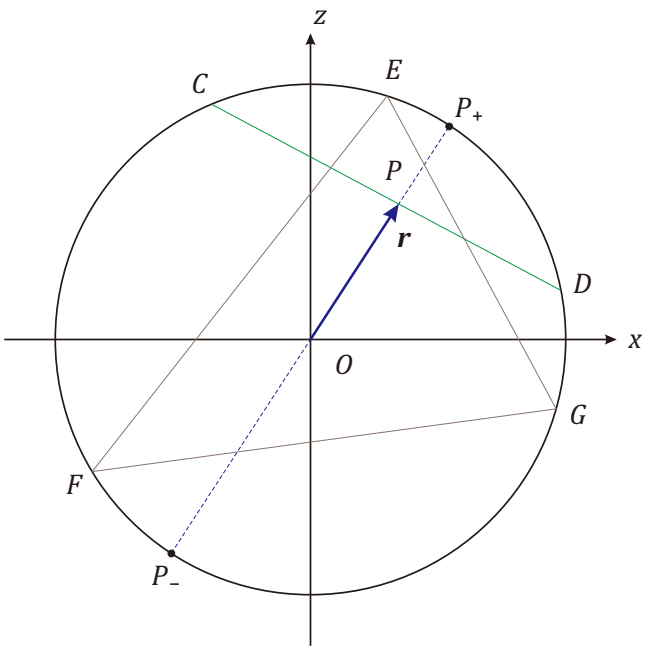


图 1

Bloch **向量**　前面说过, 双值系统的量子态 ρ 可以用 Bloch 向量表示, $\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\sigma})$. Bloch 向量的三个分量

$$r_x = \mathrm{Tr}(\rho\sigma_x), \quad r_y = \mathrm{Tr}(\rho\sigma_y), \quad r_z = \mathrm{Tr}(\rho\sigma_z)$$

它们是 Pauli 矩阵在给定量子态 ρ 上的期望值, 在实验上是可测的.

由 ρ 的表示 $\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r})$, 可以算出它的本征值和本征向量,

$$\rho = \frac{1}{2}\mathbb{1} + \frac{1}{2}r\sigma_n, \quad \boldsymbol{r} = r\boldsymbol{n},\ \sigma_n = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$$

σ_n 的本征分解形式 $\sigma_n = |n+\rangle\langle n+| - |n-\rangle\langle n-|$

$$\therefore\ \rho \text{ 的本征值是 } \frac{1+r}{2},\ \ \frac{1-r}{2},$$

相应的本征向量是 $|n+\rangle$, $|n-\rangle$

$$\rho = \frac{1+r}{2}\,|n+\rangle\langle n+| - \frac{1-r}{2}\,|n-\rangle\langle n-|$$

还可以看到, 当 $r=1$ 时, 本征值为 1 和 0, 对应于纯态, 当 $r=0$ 时, 本征值是两个 $1/2$, 是最大混合态. Bloch 向量的长度可以表征量子态的混合程度, 或者说混乱度, 或者说纯度 (purity).

对于 $\mathbb{C}^2$ 上的两个纯态 ψ_1 和 ψ_2, 二者的内积的模方是

$$\begin{aligned}
|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 &= \mathrm{Tr}(\psi_1\psi_2) \\
&= \mathrm{Tr}\left[\frac{1}{2}(\mathbb{1}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_1)\ \frac{1}{2}(\mathbb{1}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_2)\right] \\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\,\mathrm{Tr}\left[(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_1)\ (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_2)\right] \\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2
\end{aligned}$$

其中最后一步用到

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_1)\ (\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_2) = \mathbb{1}\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2 + i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{n}_1\times\boldsymbol{n}_2)$$

对于两个混合态 ρ_1 和 ρ_2, 有

$$\mathrm{Tr}(\rho_1\rho_2) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2 \tag{1}$$

这对应于两个矩阵的 Hilbert-Schmidt (HS) 范数 (亦称为 Frobenius 范数) 以及相应的内积.

$$\|A\|_2 = \|A\|_{\mathrm{HS}} = \sqrt{\mathrm{Tr}(A^\dagger A)}$$

$$(A,B) = \mathrm{Tr}(A^\dagger B)$$

注 $\|A\|_2$ 中下标 2 的意思是这样的. 对于 $\mathbb{C}^n$ 上的某个矩阵 X (未必是厄密的), 矩阵 $X^\dagger X$ 一定是厄密的, 而且 $X^\dagger X \geqslant 0$. 将 $X^\dagger X$ 的本征值记作 λ_i, 它们都是非负的. 定义矩阵 X 的 singular values s_i

$$s_i = \sqrt{\lambda_i}$$

以此定义矩阵 X 的不同类型的范数

$$\|X\|_p = \Big(\sum_j s_j^p\Big)^{1/p}$$

例如 $\|X\|_1 = \sum_j s_j$, 又被称为 trace norm. 而 $\|X\|_2 = \big(\sum_j s_j^2\big)^{1/2}$ 就是上面说的 HS norm. □

对于两个纯态 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$, 它们的内积的模方 $|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2$ 表示这两个态之间的重叠程度: 如果二者相同 (可以有整体相因子的差别), 那么 $|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 = 1$, 它们的重叠程度最大; 如果二者正交, 那么 $|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 = 0$, 二者没有重叠. 这种看法亦可用于混合态 ρ_1 和 ρ_2, 不过需要稍作修正: 当它们对应的 Bloch 向量的长度给定的时候, 如果两个 Bloch 向量平行, 那么重叠最大, 如果反平行, 则重叠最

小. 对于后者, 不能说 ρ_1 和 ρ_2 正交, 因为两个正交的混合态应该满足 $\mathrm{Tr}(\rho_1\rho_2)=0$. 从 (1) 式可以看出, 双值系统的混合态不可能正交 —— 当 r_1 和 r_2 都小于 1 时, 不可能有 $\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2=-1$.

双值系统量子态的演化可以用 Bloch 向量形象地表示, $\boldsymbol{r}(t)$. 需要注意的是, Bloch 向量只是量子态的一种表示形式, 虽然 $\boldsymbol{r}\in\mathbb{R}^3$, 但是这个 $\mathbb{R}^3$ 与通常的三维欧氏空间 $\mathbb{E}^3$ 有区别. 考虑正交向量的不同描述就可以感受到二者的不同 —— 对于 Bloch 向量而言, 方向彼此相反的两个单位向量对应于两个正交的量子纯态, 而在 $\mathbb{E}^3$ 中, 正交的两个向量就是通常说的垂直, 夹角为 90°. 因此, Bloch 向量只是 $\mathbb{C}^2$ 中的量子态的密度矩阵形式的形象描述. 而且, 还要指出的是, 在采用 Bloch 向量描述 $|\psi\rangle\in\mathbb{C}^2$ 的时候, 我们是不能知晓这个量子态的整体相位的. 在谈论测量结果的几率分布或者 Born 规则的时候, 量子态的整体相位不会对结果产生影响, 但是, 以后我们将会看到, 在量子态的演化过程中, 会出现一类不能用动力学过程解释的相位, 是为几何相 (或者说拓扑相), 在讨论这一类问题的时候, 整体相位不但是有意义的, 而且是很重要的.

$\mathbb{C}^2$ 上的矩阵 先讨论厄密矩阵 $A=A^\dagger$, 假设它对应于某个力学量.

力学量 A 被表示为 2×2 厄米矩阵, 可以在 $\mathbb{1}$, σ_i $(i=1,2,3)$ 上展开, 且展开系数均为实数.

$$A=a_0\mathbb{1}+a_1\sigma_1+a_2\sigma_2+a_3\sigma_3,$$

$$a_0=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(A),\quad a_i=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}(A\sigma_i)$$

其中的单位矩阵意义不大, 可以略去, 从而

$$A=a_1\sigma_1+a_2\sigma_2+a_3\sigma_3=a\sigma_n \tag{2}$$

这里 $a=\sqrt{a_1^2+a_2^2+a_3^2}$, σ_n 是 $\boldsymbol{n}$ 方向上的泡利矩阵, 即 $\sigma_n=\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$, 而方向 $\boldsymbol{n}$ 是

$$\boldsymbol{n}=\left(\frac{a_1}{a},\frac{a_2}{a},\frac{a_3}{a}\right)$$

或者用球坐标中的角度 θ 和 ϕ 表示,

$$\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\phi,\ \sin\theta\sin\phi,\ \cos\theta)$$

于是被测力学量 A 的两个本征值是 $+a$ 和 $-a$, 相应的本征向量是 $|n+\rangle$ 和 $|n-\rangle$,

$$|n+\rangle=\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\phi}{2}}\end{pmatrix},\quad |n-\rangle=\begin{pmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\frac{\phi}{2}}\\ \cos\frac{\theta}{2}e^{i\frac{\phi}{2}}\end{pmatrix}$$

(2) 式的被测力学量又可以写为

$$A=a\,|n+\rangle\langle n+|-a\,|n-\rangle\langle n-|$$

这里看到这样一个事实, $\mathbb{C}^2$ 中的任何一个向量都是某个厄密矩阵的本征向量.

通过上面的过程可以看到, σ_n 是 $\mathbb{C}^2$ 上的厄密矩阵 (或者说观测量) 的典型代表.

A 的本征向量可以作为 $\mathbb{C}^2$ 的基向量, 就是 A 表象. 可以另有 B 表象, C 表象等等. 在不同的表象中量子态有不同的表示形式.

接着从酉变换的角度讨论酉矩阵. 复空间上的酉变换可以类比于实空间上的正交变换, 共同的特点是保证向量的长度和两个向量的内积不变. 在量子力学中, 我们关心的不仅仅是两个态矢量的内积, 而且更注重它们的内积的模方 —— 这对应于几率或者两个量子态之间的重叠程度.

定理 (Wigner 定理) 对于变换 $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$, $|\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle$, 如果 $|\langle\psi|\varphi\rangle| = |\langle\psi'|\varphi'\rangle|$, 那么 U 是酉的 (线性的)或者反酉的 (反线性的). □

如果 U 是反酉变换, 那么对于复数 c 和向量 $|\psi\rangle$, 有 $U(c|\psi\rangle) = c^*U|\psi\rangle$, 并且 $\langle\psi'|\varphi'\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*$

酉变换用来描述连续的变换, 例如空间的平移和旋转, 时间的演化. 反酉变换用来描述离散的变换, 例如空间反射, 时间反演, 电荷共轭.

酉变换的生成元 讨论生成元的目的是: 将酉变换的生成元对应于厄米算子; 生成元之间的对易关系构成了 Lie 代数.

简单地, 设酉算子 U 的参数是 s, 即 $U(s)$, 构成单参数 Lie 群. 有单位元, 满足乘法规则, 有逆元, 即 $U(0) = \mathbb{1}$, $U(s_1)U(s_2) = U(s_1 + s_2)$, $U^{-1}(s) = U(-s) = U^\dagger(s)$.

分析生成元就是考虑无穷小变换. 设 $s \to 0$,

$$
\begin{aligned}
U(s) &= \mathbb{1} + \left.\frac{dU}{ds}\right|_{s=0} s + \cdots . \\
UU^\dagger &= \mathbb{1} + \left.\left[\frac{dU}{ds} + \frac{dU^\dagger}{ds}\right]\right|_{s=0} s + \cdots . \\
\therefore\ & \left.\frac{dU}{ds}\right|_{s=0} \text{是反厄密的.} \\
& \left.\frac{dU}{ds}\right|_{s=0} = iK, \quad K = K^\dagger.
\end{aligned}
\tag{3}
$$

K 是 $U(s)$ 的生成元. 有限大小的酉变换 $U(s)$ 可以表示为

$$\boxed{U(s) = e^{isK}}$$

在以后的讨论中, K 可以是 Hamiltonian, 动量, 角动量.

酉变换的参数可以不只一个.

回顾理论力学中的正交变换. 最简单的变换是 $\mathbb{R}^2$ 中的旋转变换. 向量 $\boldsymbol{r} = x\hat{\boldsymbol{i}} + y\hat{\boldsymbol{j}}$. 逆时针方向旋转角度 ϕ, 得到向量 $\boldsymbol{r}'$,

$$\boldsymbol{r}' = \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi \\ \sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = R(z,\phi)\boldsymbol{r}$$

考虑无穷小变换, 令 $\phi \to 0$, 可以得到生成元

$$G = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

而变换矩阵 $R(z,\phi)$ 则可以表示为

$$R(z,\phi) = e^{\phi G}$$

注意到 G 是反对称的, 或者说反厄密的, 令 $K = iG$, 则矩阵 K 是厄密的, $K = \sigma_y$, 变换矩阵可以表示为 $R(z,\phi) = e^{-i\phi\sigma_y}$.

可以继续考虑 $\mathbb{R}^3$ 中旋转变换, 写出旋转变换的矩阵 $R(x,\alpha)$, $R(y,\beta)$, $R(z,\gamma)$, 它们分别是绕三个坐标轴转动一定的角度. 再考虑无穷小过程, 可以从中得到生成元 G_x, G_y, G_z. 计算它们之间的对易关系, 有

$$[G_x, G_y] = G_z, \quad \cdots\cdots$$

令 $L_j = iG_j$, 其中 $i = \sqrt{-1}$, $j = x, y, z$, 则 L_j 是厄密的, 而且有

$$[L_x, L_y] = iL_z, \quad \cdots\cdots$$

这种对易关系就是我们以后要讨论的角动量的三个分量应该满足的 Lie 代数关系.

以前说过, $\mathbb{C}^2$ 上的 SU(2) 变换可以表示为

$$U = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1 \tag{4}$$

而 U(2) 变换多了一个相因子 $e^{i\gamma}$. 以下我们主要讨论 SU(2) 变换 (4). 将它重新表示为

$$U = \begin{pmatrix} \cos\alpha e^{i\xi} & \sin\alpha e^{i\eta} \\ -\sin\alpha e^{-i\eta} & \cos\alpha e^{-i\xi} \end{pmatrix}, \quad \alpha \in \left[0, \frac{\pi}{2}\right] \tag{5}$$

接着, 如果将 (3) 式所示过程用于上述形式的 U 推导出生成元, 那么只能得到两个生成元 (自己算一下). 原因在于, 在参数空间的某些区域, (5) 式的参数化形式与群操作不是一一对应的. 单位变换对应于 $\alpha = 0, \xi = 0, 0 \leqslant \eta \leqslant 2\pi$. 因此, 这个形式虽然好用, 但不能从中得到变换的生成元.

为了得到 SU(2) 变换的生成元, 采用如下形式的参数表示. 在 (4) 式中, $a = a_1 + ia_2$, $b = b_1 + ib_2$, 其中 a_1, a_2, b_1, b_2 都是实数, 并且 $a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 = 1$, 令

$$a_2 = \frac{1}{2}x_3, \quad b_1 = \frac{1}{2}x_2, \quad b_2 = \frac{1}{2}x_1$$

$$a_1 = \sqrt{1 - \frac{1}{4}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}$$

当然, 这些 x_i 需满足 $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leqslant 4$. 单位变换唯一地对应于 $x_1 = x_2 = x_3 = 0$.

接着可以得到如下三个生成元,

$$G_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad G_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad G_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix},$$

这几个生成元是反厄密的, 乘以 $-i$, 变为厄密的, 对应于 Pauli 矩阵, 对易关系是

$$\left[\frac{\sigma_x}{2}, \frac{\sigma_y}{2}\right] = i\frac{\sigma_z}{2}, \quad \cdots\cdots$$

满足前面说过的旋转变换生成元之间的对易关系.

Pauli 矩阵是 $\mathbb{C}^2$ 空间中旋转变换的生成元. σ_x 是绕 x 方向旋转变换的生成元, σ_y 是绕 y 方向旋转变换的生成元, σ_z 是绕 z 方向旋转变换的生成元, σ_n 是绕 $\boldsymbol{n}$ 方向旋转变换的生成元.

所以, $\mathbb{C}^2$ 上的酉变换都可以视为旋转变换, 与此相关的另一个事实是, $\mathbb{C}^2$ 上的任意一个厄密矩阵都可以可以在本质上视作 σ_n.

第三章　双值量子系统　Ⅱ

$\mathbb{C}^2$ 上酉变换的矩阵形式与指数算子形式

前面说过, $\mathbb{C}^2$ 上的酉变换可以表示为

$$U=\begin{pmatrix}\cos\alpha e^{i\xi} & \sin\alpha e^{i\eta}\\ -\sin\alpha e^{-i\eta} & \cos\alpha e^{-i\xi}\end{pmatrix},\quad \alpha\in\left[0,\frac{\pi}{2}\right]$$

这是 SU(2) 变换, 如果再添上一个整体相因子, 就构成了 U(2) 变换.

前面还说过, 在 $\mathbb{C}^2$ 空间中, 任意的厄密矩阵本质上都对应于某个 σ_n, 因此, $\mathbb{C}^2$ 上的酉变换都可以视为旋转变换, 变换的生成元是 $\frac{1}{2}\sigma_n$.

首先考虑一个相对简单的变换, 绕 z 轴转动角度 ϕ, 这句话的数学表示是 $U(z,\phi)=e^{-i\phi\frac{\sigma_z}{2}}$, 我们希望将它写为容易计算的矩阵形式

$$\begin{aligned}U(z,\phi)&=e^{-i\frac{\phi}{2}\sigma_z}\\ &=\mathbb{1}+(-i)\frac{\phi}{2}\sigma_z+\frac{(-i)^2}{2!}\left(\frac{\phi}{2}\right)^2\sigma_z^2+\frac{(-i)^3}{3!}\left(\frac{\phi}{2}\right)^3\sigma_z^3+\cdots\\ &=\mathbb{1}\cos\frac{\phi}{2}-i\sigma_z\sin\frac{\phi}{2}\end{aligned}$$

然后, 一般地, 绕 $\boldsymbol{n}$ 方向旋转角度 β,

$$U(\boldsymbol{n},\beta)=e^{-i\frac{\beta}{2}\sigma_n}=\mathbb{1}\cos\frac{\beta}{2}-i\sigma_n\sin\frac{\beta}{2}$$

这里, 注意到这样一个事实, 旋转角度 4π 才是单位变换,

$$U(\boldsymbol{n},4\pi)=\mathbb{1}\cos\frac{4\pi}{2}-i\sigma_n\sin\frac{4\pi}{2}=\mathbb{1}$$

而旋转 2π 的结果是 $-\mathbb{1}$, 会对量子态带来 π 的相位差. 这不同于刚体在 $\mathbb{R}^3$ 空间中的旋转 —— 2π 的旋转使其位置形态回到原初.

对量子态的变换　先是一个简单的例子. 让 $U(z,\phi)$ 作用于 $|0\rangle$,

$$U(z,\phi)|0\rangle=\begin{pmatrix}e^{-i\frac{\phi}{2}} & 0\\ 0 & e^{i\frac{\phi}{2}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}e^{-i\frac{\phi}{2}}\\0\end{pmatrix}=e^{-i\frac{\phi}{2}}|0\rangle$$

变换前后, 有整体的相因子的差别. 如果写出密度矩阵的形式, 则看不出任何变化. 在密度矩阵的表示中, $|0\rangle$ 的 Bloch 向量是 z 方向上的单位向量, 绕 z 轴旋转, 不会有任何变化. 这也说明, Bloch 向量不能反映一个纯态的全貌.

接着让 $U(z,\phi)$ 作用于 $|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$, 结果是

$$U(z,\phi)\,|x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix}$$

写出结果的密度矩阵的形式, 容易看到, 它的 Bloch 向量位于 xy 平面内, 且与 x 轴的夹角是 ϕ. 所以, $\mathbb{C}^2$ 上的酉变换可以形象地用 Bloch 向量在 $\mathbb{R}^3$ 上的 SO(3) 变换来描述. 不过提请注意的是, 后者不能体现整体相位的变化.

对矩阵的变换 在我们的叙述中, 矩阵的身份是算子, 对矩阵的变换应该就是超算子. 设 x 是 $\mathbb{C}^n$ 上的一个矩阵, 那么对它的酉变换是

$$X \longrightarrow UXU^\dagger$$

看一个简单的例子, 用 $U(z,\phi)$ 作用于 σ_x,

$$\begin{aligned} & U(z,\phi)\sigma_x U^\dagger(z,\phi) \\ = & \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\frac{\phi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} \\ = & \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x \cos\phi + \sigma_y \sin\phi \end{aligned} \tag{2}$$

就像是将 x 方向上的向量绕 z 轴转动了角度 ϕ.

设 $\boldsymbol{m}$ 是 $\mathbb{R}^3$ 中的单位向量, 位于 xy 平面内,

$$\boldsymbol{m} = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \end{pmatrix}$$

在 $\boldsymbol{m}$ 方向上的 Pauli 矩阵是

$$\sigma_m = \sigma_x \cos\phi + \sigma_y \sin\phi$$

又可以写为

$$\sigma_m = \sigma_x(\mathbb{1}\cos\phi + i\sigma_z \sin\phi) = (\mathbb{1}\cos\phi - i\sigma_z \sin\phi)\sigma_x$$

注意到

$$\mathbb{1}\cos\phi \pm i\sigma_z \sin\phi = e^{\pm i\phi\sigma_z}$$

于是有

$$\sigma_m = \sigma_x e^{i\phi\sigma_z} = e^{-i\phi\sigma_z}\sigma_x$$

再利用 σ_x 和 σ_z 之间的反对易关系, 有

$$\sigma_x e^{i\phi\sigma_z} = e^{-i\phi\sigma_z}\sigma_x = e^{-i\frac{\phi}{2}\sigma_z}\sigma_x e^{i\frac{\phi}{2}\sigma_z}$$

σ_m 可以表示为

$$\sigma_m = e^{-i\frac{\phi}{2}\sigma_z}\sigma_x e^{i\frac{\phi}{2}\sigma_z}$$

其中酉变换 $e^{-i\frac{\phi}{2}\sigma_z}$ 的意思很明确: 绕 z 轴转动角度 ϕ. 从 σ_x 到 σ_m 的变换就像是把 x 方向上的单位向量转到 $\boldsymbol{m}$.

更一般地, 考虑 $\sigma_n = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$, 其中方向矢量 $\boldsymbol{n}$ 的球坐标是 θ 和 ϕ.

$$\sigma_n = e^{-\frac{i}{2}\phi\sigma_z}e^{-\frac{i}{2}\theta\sigma_y}\,\sigma_z\,e^{\frac{i}{2}\theta\sigma_y}e^{\frac{i}{2}\phi\sigma_z} \tag{3}$$

酉变换 $e^{-\frac{i}{2}\phi\sigma_z}e^{-\frac{i}{2}\theta\sigma_y}$ 的操作过程也是很形象的: 先绕 y 轴转动 θ, 然后绕 z 轴转动 ϕ. 如果在 $\mathbb{R}^3$ 空间中, 这个变换将 $\boldsymbol{e}_z$ 旋转到 $\boldsymbol{n}$.

(3) 式当然可以通过矩阵的相乘直接验证.

酉变换 U 以超算子的身份作用于矩阵 X, 形式是

$$X \longrightarrow UXU^\dagger$$

如果换着向量的形式, 则是

$$|X\rangle \longrightarrow (U\otimes U^*)\,|X\rangle$$

$$\big(U(z,\phi)\otimes U^*(z,\phi)\big)\,|\sigma_x\rangle$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i\phi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

将最后结果还原为矩阵形式, 就是 (2) 式给出的结果.

前面已经看到, 对于 $\mathbb{C}^2$ 的厄密算子的典型代表 σ_n, 在酉矩阵的作用下, 变换过程有形象的几何描述: 就像是与 σ_n 相关的单位向量 $\boldsymbol{n}$ 在 $\mathbb{R}^3$ 空间上的旋转变换. 由此可以给出 $\mathbb{C}^2$ 中的量子态的密度矩阵形式在酉变换下的几何描述, 即 Bloch 向量的旋转变换.

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

$$\to U(\boldsymbol{n},\beta)\rho U^\dagger(\boldsymbol{n},\beta)$$

$$\sim \mathrm{SO}(3)\,\text{rotation},\ R(\boldsymbol{n},\beta)\boldsymbol{r}$$

一般地, Baker-Hausdorff 公式

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!}[A, [A, B]] + \frac{1}{3!}[A, [A, [A, B]]] + \cdots$$

注意 e^{A+B} 一般不等于 $e^A e^B$.
如果 $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$, 那么有

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

最后强调指出, 虽然在 $\mathbb{C}^2$ 上的酉变换可以当作旋转变换来考虑, 但是, 在更高维的空间中, 这种看法是不成立的. 以 $\mathbb{C}^3$ 空间为例. 特殊酉变换构成 SU(3) 群, 它有 9 个生成元, 可以表示为 3×3 的厄密矩阵. 其中一种表示形式是 Gell-Mann 矩阵, 形成 su(3) 代数. 在这九个生成元中, 有三个构成了其中的子代数, 它们之间的对易关系就是我们说的旋转变换的生成元应该满足的代数关系. 显然, 在这种情形下, 酉变换是更为一般的变换, 旋转变换虽然是酉变换, 但只是其中的一个子群.

在以后讨论自旋为 1 的粒子的时候, 会说到它的自旋角动量的表示. 三个分量的矩阵形式是

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

如果采用 Gell-Mann 矩阵, 则是

$$S_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{5}$$

它们的形式不同, 原因是采用了不同的表象, 而且, 不论是 (4) 式还是 (5) 式的表示, 都满足

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad \cdots\cdots$$

$\mathbb{C}^2$ 空间中的量子测量

这一节的内容是 Born 规则在对双值量子系统测量中的具体应用. 这里仍然不讨论量子测量的物理过程, 只是提供数学形式上的计算.

双值量子系统的观测量可以表示为 $\mathbb{C}^2$ 空间上的厄密矩阵, 这些厄密矩阵与 σ_n 并无本质上的差别, 所以我们只需要讨论对 σ_n 的测量.

设双值量子系统的状态为

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle$$

这里的 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 是自然基向量, 也是 σ_z 的本征向量.

如果被测力学量是 σ_z, 那么得到结果 ±1 (记作 $\sigma_z = \pm1$) 的几率是

$$p(\sigma_z = +1) = |\langle 0|\psi\rangle|^2 = |c_0|^2, \quad p(\sigma_z = -1) = |\langle 1|\psi\rangle|^2 = |c_1|^2$$

非选择测量后, 系统的状态是混合态

$$|c_0|^2 |0\rangle\langle 0| + |c_1|^2 |1\rangle\langle 1|$$

用密度矩阵的形式表示测量前后系统状态的变化,

$$\begin{pmatrix} |c_0|^2 & c_0 c_1^* \\ c_0^* c_1 & |c_1|^2 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} |c_0|^2 & 0 \\ 0 & |c_1|^2 \end{pmatrix}$$

测量后系统量子态的密度矩阵的非对角项变为零, 即所谓的退相干过程.

如果测量 σ_x, 那么有

$$p(\sigma_x = +1) = |\langle x+|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}|c_0 + c_1|^2, \quad p(\sigma_x = +1) = |\langle x-|\psi\rangle|^2 = \frac{1}{2}|c_0 - c_1|^2$$

也可以在 σ_x 表象中表示 $|\psi\rangle$,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= (|x+\rangle\langle x+| + |x-\rangle\langle x-|)(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle) \\ &= \frac{c_0}{\sqrt{2}}|x+\rangle + \frac{c_1}{\sqrt{2}}|x+\rangle + \frac{c_0}{\sqrt{2}}|x-\rangle - \frac{c_1}{\sqrt{2}}|x-\rangle \\ &= \frac{c_0 + c_1}{\sqrt{2}}|x+\rangle + \frac{c_0 - c_1}{\sqrt{2}}|x-\rangle \end{aligned}$$

展开系数的模方给出几率 $p(\sigma_x = \pm1)$.

测量后的状态是

$$p(\sigma_x = +1)|x+\rangle\langle x+| + p(\sigma_x = -1)|x-\rangle\langle x-|$$

在 σ_x 表象中是对角的, 但是在 σ_z 表象中则不是对角的.

再让我们用密度矩阵和投影算子的形式重新表示 $p(\sigma_x = \pm1)$.

$$\begin{aligned} p(\sigma_x = +1) &= |\langle x+|\psi\rangle|^2 \\ &= \langle x+|\psi\rangle\langle\psi|x+\rangle \\ &= \mathrm{Tr}\left(|\psi\rangle\langle\psi| \ |x+\rangle\langle x+|\right) \\ &= \mathrm{Tr}(\psi\Pi_+^{\sigma_x}) \end{aligned}$$

其中 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, $\Pi_+^{\sigma_x} = |x+\rangle\langle x+|$.

设 ψ 的 Bloch 向量为 $\boldsymbol{n}$, 而 $\Pi_+^{\sigma_x}$ 的 Bloch 向量是简单的 $(1,0,0)$, 将几率 $p(\sigma_x=+1)$ 用 Bloch 向量表示, 结果是

$$p(\sigma_x=+1)=\mathrm{Tr}\left[\frac{1}{2}(\mathbb{1}+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})\cdot\frac{1}{2}(\mathbb{1}+\sigma_x)\right]=\frac{1}{2}(1+n_x)$$

这里 n_x 是 $\boldsymbol{n}$ 的 x 分量.

一般地, 设量子态 ρ 的 Bloch 向量是 $\boldsymbol{r}$, 系统的被测力学量是 $\sigma_m=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{m}$, 其中 $\boldsymbol{m}$ 是 $\mathbb{R}^3$ 中的单位向量, 测量结果为 ±1 的几率是

$$p(\sigma_m=\pm1)=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{m})$$

再来看看 Bloch 向量的意义. 三个分量可以表示为

$$r_x=\mathrm{Tr}(\rho\sigma_x)=p(\sigma_x=+1)-p(\sigma_x=-1)$$

$$r_y=\mathrm{Tr}(\rho\sigma_y)=p(\sigma_y=+1)-p(\sigma_y=-1)$$

$$r_z=\mathrm{Tr}(\rho\sigma_z)=p(\sigma_z=+1)-p(\sigma_z=-1)$$

这表明 Bloch 向量的本质是测量结果的几率分布.

在实际的 SG 实验中, 不论梯度磁场指向什么方向, 观测到的实验现象都是沿磁场梯度的正反方向分为两束, 据此可以认为, 银原子的内禀状态可以用最大混合态 $\frac{1}{2}\mathbb{1}$ 描述.

分析一个实验序列. 实验过程如图 1 所示. 自旋为 1/2 的粒子的初态是 $\psi=|\psi\rangle\langle\psi|$, 先后经过 SG(z), SG(n) 和 SG(x) 测量仪器, 每一次测量都给出了明确的实验现象.

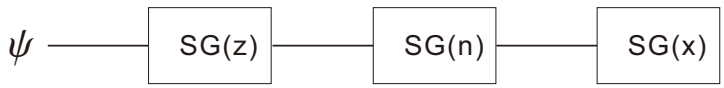


图 1

将纯态形式的初态表示为

$$|\psi\rangle=\alpha\,|z+\rangle+\beta\,|z-\rangle=\alpha\,|0\rangle+\beta\,|1\rangle$$

将三次测量的观测量分别记作 $A=\sigma_z$, $B=\sigma_n$, $C=\sigma_x$. 将它们的测量结果分别记作 a, b, c, 它们的可能取值均为 ±1.

粒子经过了 SG(z) 装置后, 得到结果 a 的几率是

$$p(a)=\langle\psi|\Pi_a^A|\psi\rangle=\mathrm{Tr}(\psi\Pi_a^A)$$

这里 $\Pi_a^A = |a\rangle\langle a|$, 而 $|a\rangle$ 是 A 的对应于本征值 a 的本征向量.

第一次测量得到结果 a, 第二次测量得到结果 b, 这两件事情的联合几率是

$$p(a,b) = \|\Pi_b^B \Pi_a^A |\psi\rangle\|^2$$

这里 $\Pi_b^B = |b\rangle\langle b|$ 是对应于测量结果 b 的投影算子. 或者将上式写为更易懂的形式,

$$p(a,b) = \langle\psi|\Pi_a^A \Pi_b^B \Pi_a^A|\psi\rangle \tag{6}$$

下面我们来解释并推导这个结果.

联合几率 $p(a,b)$ 可以表示

$$p(a,b) = p(b|a)p(a)$$

其中 $p(b|a)$ 是条件几率: 在第一次测量得到结果 a 的条件下, 第二次测量得到结果 b 的几率. 这相对于将对应于第一次测量结果 a 的量子态作为初态输入到测量仪器 SG(n) 中, 并计算测量结果 b 出现的几率.

对应于结果 a 的量子态是 $|a\rangle$, 又可以写作 $|z\pm\rangle$, 或者写作 $|0\rangle$, $|1\rangle$. 但是, 我们不想采用这些形式, 而是用初态和投影算子表示, 其目的是为了使推导过程具有一般性.

未归一的态矢量是 $\Pi_a^A |\psi\rangle$, 归一化之后的态矢量是

$$\frac{1}{\sqrt{p(a)}}\Pi_a^A |\psi\rangle$$

然后, 对如此形式的量子态测量力学量 B, 得到结果 b 的几率就是条件几率

$$\begin{aligned}
p(b|a) &= \left|\left\langle b \left| \frac{1}{\sqrt{p(a)}}\Pi_a^A \right| \psi \right\rangle\right|^2 \\
&= \frac{1}{p(a)} \left| \langle b|\Pi_a^A|\psi\rangle \right|^2 \\
&= \frac{1}{p(a)} \langle\psi|\Pi_a^A|b\rangle \langle b|\Pi_a^A|\psi\rangle \\
&= \frac{1}{p(a)} \langle\psi|\Pi_a^A \Pi_b^B \Pi_a^A|\psi\rangle
\end{aligned}$$

于是联合事件 (a,b) 发生的几率是

$$p(a,b) = p(b|a)p(a) = \langle\psi|\Pi_a^A \Pi_b^B \Pi_a^A|\psi\rangle$$

从操作的角度说, 系统的初态 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ 经历了如下演化过程,

$$\psi \longrightarrow \Pi_a^A \psi \Pi_a^A \longrightarrow \Pi_b^B \Pi_a^A \psi \Pi_a^A \Pi_b^B$$

对最后结果求迹得到 (6) 式.

类似地, 考虑最后一次测量得到结果 c, 联合事件 (a,b,c) 发生的几率是

$$p(a,b,c)=\langle\psi|\Pi_a^A\Pi_b^B\Pi_c^C\Pi_b^B\Pi_a^A|\psi\rangle$$

从联合几率可以到边缘几率

$$\begin{aligned}\sum_c p(a,b,c)&=\mathrm{Tr}\left(\psi\Pi_a^A\Pi_b^B\sum_c\Pi_c^C\Pi_b^B\Pi_a^A\right)\\&=\mathrm{Tr}\left(\psi\Pi_a^A\Pi_b^B\Pi_b^B\Pi_a^A\right)\\&=p(a,b)\end{aligned}$$

类似地, 有

$$\sum_{b,c}p(a,b,c)=p(a)$$

以上过程给出的计算结果不仅仅局限于两维复空间, 可以用于一般情况下的有限维复空间. 现在回到 $\mathbb{C}^2$ 情形. 第一次测量给出 ±1 的几率是

$$p(a)=\langle\psi|\Pi_a^A|\psi\rangle=\begin{cases}|a|^2 & a=+1\\ |\beta|^2 & a=-1\end{cases}$$

接着考虑第二次测量. 当 $a=+1$ 时, 系统的测量后的状态是 $|z+\rangle$, 或者说 $|0\rangle$. 测量 $B=\sigma_n$, 这里假设 $\boldsymbol{n}$ 的方向是 $\boldsymbol{n}=(\sin\theta,0,\cos\theta)$. 得到结果 $b=+1$ 的几率是

$$p(b=+1|a=+1)=|\langle n+|z+\rangle|^2=\cos^2\frac{\theta}{2}$$

联合事件 $(a=+1,b=+1)$ 的几率是

$$p(a=+1,b=+1)=|\alpha|^2\cos^2\frac{\theta}{2}$$

这个结果来自于 $p(a,b)=p(b|a)p(a)$. 如果直接利用 (6) 式, 有

$$\begin{aligned}p(a=+1,b=+1)&=\langle\psi|\Pi_+^A\Pi_+^B\Pi_a^A|\psi\rangle\\&=\langle\psi|z+\rangle\langle z+|n+\rangle\langle n+|z+\rangle\langle z+|\psi\rangle\\&=|\alpha|^2\cos^2\frac{\theta}{2}\end{aligned}$$

结论是一样的.

考虑最后测量 $C=\sigma_x$, 得到结果 $c=+1$ 的几率. 需要注意的是, 这个结果有四个来源, 如图 2 所示.

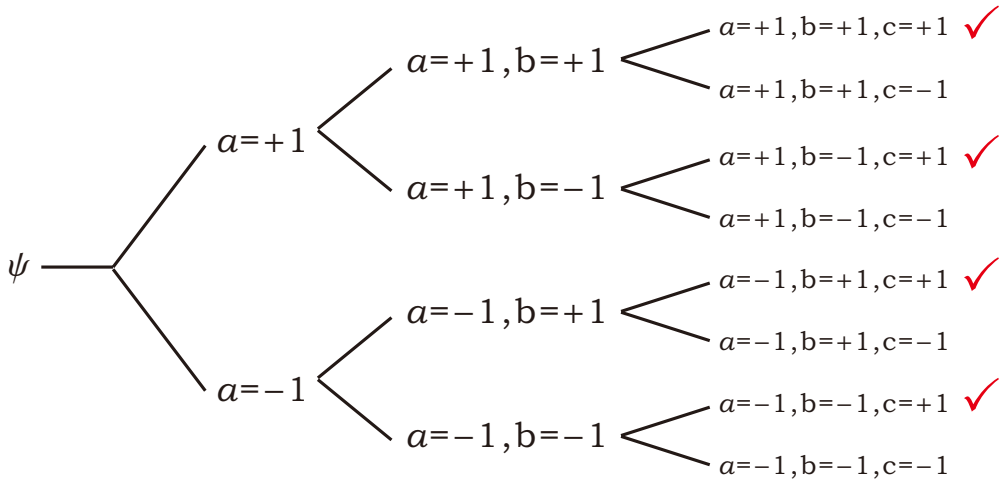


图 2

分别计算上图中的四个几率.

$$p(+1,+1,+1)=\frac{1}{2}|\alpha|^2(1+\sin\theta)\cos^2\frac{\theta}{2}$$

$$p(+1,-1,+1)=\frac{1}{2}|\alpha|^2(1-\sin\theta)\sin^2\frac{\theta}{2}$$

$$p(-1,+1,+1)=\frac{1}{2}|\beta|^2(1+\sin\theta)\sin^2\frac{\theta}{2}$$

$$p(-1,-1,+1)=\frac{1}{2}|\beta|^2(1-\sin\theta)\cos^2\frac{\theta}{2}$$

将上面四个几率相加, 得到

$$p(c=+1)=\frac{1}{2}\left[1+(|\alpha|^2-|\beta|^2)\sin\theta\cos\theta\right] \tag{7}$$

如果没有前两次测量, 而是直接对 $|\psi\rangle$ 测量 C, 那么得到 $c=+1$ 的几率是

$$|\langle x+|\,\psi\rangle|^2=\frac{1}{2}|\alpha+\beta|^2$$

这与 (7) 有大不同.

分析以前提到过的 SG 测量序列, 如图 3. 正如图中虚线所示, 前两个 SG 装置并没有实现真正意义上的测量, 只有最后的 SG(z) 给出了明确的实验结果: 粒子在屏上的落点集中分布在 4 行 2 列共 8 个区域中. 下面来解释这个现象. 计算过程涉及两体量子系统.

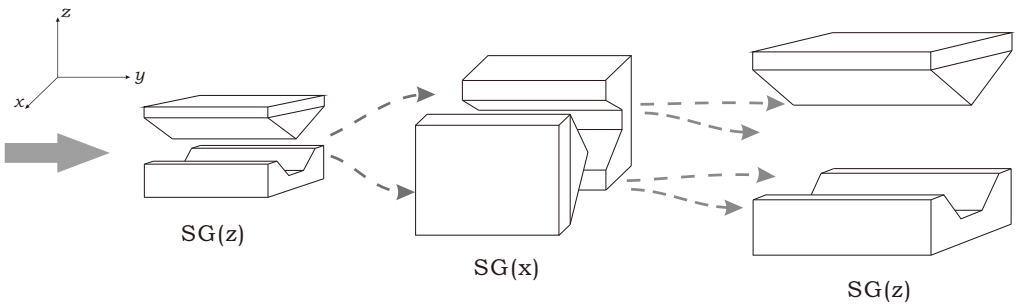


图 3

设粒子的内禀量子态是 $|\psi\rangle = \alpha\,|z+\rangle + \beta\,|z-\rangle$, 粒子的空间位置量子态是 $|\varphi\rangle$. 前者是被测对象, 视作系统; 后者是测量仪器. 经过 SG(z) 装置之后, 系统和仪器需要达到如下状态,

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \longrightarrow \alpha\,|z+\rangle \otimes |\mathrm{up}\rangle + \beta\,|z-\rangle \otimes |\mathrm{down}\rangle$$

这里的 $|\mathrm{up}\rangle$ 和 $|\mathrm{down}\rangle$ 描述在位置空间中粒子的运动. 用波函数来说, $|\mathrm{up}\rangle$ 对应的波函数分布在 z 的正半轴, $|\mathrm{down}\rangle$ 对应的波函数分布在 z 的负半轴. 理想情形下, 它们彼此正交. 类似地, 粒子经过 SG(x) 之后, 我们分别用 $|\mathrm{left}\rangle$ 和 $|\mathrm{right}\rangle$ 表示分布在 x 的负半轴和正半轴的量子态. 粒子依次经过三个 SG 装置, 其间过程如下.

$$\begin{aligned}
|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \longrightarrow & \alpha\,|z+\rangle \otimes |\mathrm{up}\rangle + \beta\,|z-\rangle \otimes |\mathrm{down}\rangle \\
= & \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(|x+\rangle + |x-\rangle)\,|\mathrm{up}\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{2}}(|x+\rangle - |x-\rangle)\,|\mathrm{down}\rangle \\
\longrightarrow & \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\,|x+\rangle\,|\mathrm{up},\mathrm{right}\rangle + \frac{\alpha}{\sqrt{2}}\,|x-\rangle\,|\mathrm{up},\mathrm{left}\rangle \\
& + \frac{\beta}{\sqrt{2}}\,|x+\rangle\,|\mathrm{down},\mathrm{right}\rangle - \frac{\beta}{\sqrt{2}}\,|x-\rangle\,|\mathrm{down},\mathrm{right}\rangle \\
= & \frac{\alpha}{2}(|z+\rangle + |z-\rangle)\,|\mathrm{up},\mathrm{right}\rangle + \frac{\alpha}{2}(|z+\rangle - |z-\rangle)\,|\mathrm{up},\mathrm{left}\rangle \\
& + \frac{\beta}{2}(|z+\rangle + |z-\rangle)\,|\mathrm{down},\mathrm{right}\rangle + \frac{\beta}{2}(|z+\rangle - |z-\rangle)\,|\mathrm{down},\mathrm{left}\rangle \\
\longrightarrow & \frac{\alpha}{2}\,|z+\rangle\,|\mathrm{up},\mathrm{right},\mathrm{up}\rangle + \frac{\alpha}{2}\,|z-\rangle\,|\mathrm{up},\mathrm{right},\mathrm{down}\rangle \\
& + \frac{\alpha}{2}\,|z+\rangle\,|\mathrm{up},\mathrm{left},\mathrm{up}\rangle - \frac{\alpha}{2}\,|z-\rangle\,|\mathrm{up},\mathrm{left},\mathrm{down}\rangle \\
& + \frac{\beta}{2}\,|z+\rangle\,|\mathrm{down},\mathrm{right},\mathrm{up}\rangle + \frac{\beta}{2}\,|z-\rangle\,|\mathrm{down},\mathrm{right},\mathrm{down}\rangle \\
& - \frac{\beta}{2}\,|z+\rangle\,|\mathrm{down},\mathrm{left},\mathrm{up}\rangle + \frac{\beta}{2}\,|z-\rangle\,|\mathrm{down},\mathrm{left},\mathrm{down}\rangle
\end{aligned} \tag{8}$$

理想情况下, 上述描述空间位置的量子态 (如 $|\mathrm{up},\mathrm{right},\mathrm{up}\rangle$ 等等) 是彼此正交的, 这导致了 8 个可以严格区分的现象, 即屏上有 8 个互不重叠的落点集中的区域.

如果没有 SG(x) 装置, 那么在表示粒子的空间位置的量子态中就不会出现 right 和 left, 因此 (8) 简化为

$$\alpha\,|z+\rangle\,|\mathrm{up},\mathrm{up}\rangle + \beta\,|z-\rangle\,|\mathrm{down},\mathrm{down}\rangle$$

这不过就是粒子经过了两个 SG(z) 装置后的量子态.

如果逐渐减弱 SG(x) 装置中的磁场强度, 那么两列落点集中的区域将相互靠近, 直至重叠, 并且看到, 第一行和第四行的重叠部分是加强的, 而第二行和第三行的重叠部分是减弱的. 实际上, 在 SG(x) 的磁场减弱的过程中, 粒子的空间位置量子态中的 right 和 left 不再是彼此正交的, 而是有重叠的, $|\mathrm{right}\rangle + |\mathrm{left}\rangle$ 和 $|\mathrm{right}\rangle - |\mathrm{left}\rangle$ 将给出不同的空间位置的几率分布, 于是观测到重叠部分有加强, 有减弱.

第四章　　两体量子系统　I

两体量子系统是一个复合系统, 由子系统 A 和另一个子系统 B 构成. 可以把两个子系统形象地想象为两个微观粒子, 也可以把它们视作同一个粒子的两个不同性质的自由度. 例如, 在 SG 实验中, 需要考虑银原子的磁矩和空间位置, 这是两种不同性质的自由度, 需要在不同的 Hilbert 空间中分别描述它们, 于是在分析该实验的时候, 可以说我们面对的是一个两体量子系统.

直积空间

设 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 分别是描述子系统 A 和子系统 B 的 Hilbert 空间. 这里仍然考虑有限维的情形. 设其维数分别是 $\dim(\mathscr{H}^A) = d^A$ 和 $\dim(\mathscr{H}^B) = d^B$, 并且分别为它们赋予自然基向量组 $\{|i\rangle\}$ 和 $\{|\mu\rangle\}$, 其中 $i = 0, 1\cdots, d^A - 1$, $\mu = 0, 1\cdots, d^B - 1$, 这里我们分别用拉丁字母和希腊字母表示 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 的基向量. 所谓自然基向量 $|i\rangle$ 是这样的: 在它的列向量表示形式中, 第 $i+1$ 行的分量是 1, 其余各行均为 0, 即

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \cdots, \quad |d^A - 1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

$\mathscr{H}^B$ 的基向量组 $\{|\mu\rangle\}$ 与此类似.

描述两体量子系统 AB 的量子态的 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 是 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 的直积, 即 $\mathscr{H} = \mathscr{H}^A \otimes \mathscr{H}^B$, 它是一个 $d^A \times d^B$ 维的复空间, 自然基向量组记作 $\{|i\rangle \otimes |\mu\rangle\}$, 简写为 $\{|i\rangle\,|\mu\rangle\}$, 或者 $\{|i\mu\rangle\}$. 这里, 符号 $\otimes$ 表示直积 (direct product), 它的运算规则是这样的. 设 X 是一个 $m \times n$ 的矩阵, Y 是另一个矩阵. X 的第 i 行第 j 列的矩阵元记作 x_{ij}. X 和 Y 的直积就是

$$X \otimes Y = \begin{pmatrix} x_{11}Y & x_{12}Y & \cdots & x_{1n}Y \\ x_{21}Y & x_{22}Y & \cdots & x_{2n}Y \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{m1}Y & x_{m2}Y & \cdots & x_{mn}Y \end{pmatrix}.$$

简单地说, 把 $X \otimes Y$ 看成是一个由 mn 个小矩阵拼成的大矩阵, 每一个小矩阵是 $x_{ij}Y$. 于是, $\mathscr{H}$ 的某个基向量, 比如 $|0\rangle|1\rangle$, 它的列向量形式可以表示为

$$|0\rangle|1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\\0\\\vdots\\\vdots\\0\end{pmatrix}.$$

Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 中任意一个态矢量 $|\Psi\rangle$ 可以在 $\{|i\mu\rangle\}$ 上展开,

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=0}^{d^A-1}\sum_{\mu=0}^{d^B-1} c_{i\mu}|i\rangle|\mu\rangle \tag{1}$$

其中系数 $c_{i\mu} = \langle i\mu|\Psi\rangle$, 并且满足 $\sum_{i,\mu}|c_{i\mu}|^2 = 1$. 以后, 在不会引起歧义的情况下, 我们将略去求和的上下限. 另外, 我们把这样的两体系统简称为 $d^A \otimes d^B$ 系统.

例如, $2\otimes 2$ 量子系统的纯态可以表示为 $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ 中的归一化的向量,

$$|\Psi\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle$$

其中 $|c_{00}|^2 + |c_{01}|^2 + |c_{10}|^2 + |c_{11}|^2 = 1$.

虽然 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 是 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 的直积, 但是 $\mathscr{H}$ 中的量子态却并不是总能表示为 $\mathscr{H}^A$ 中的量子态和 $\mathscr{H}^B$ 中的量子态的直积. 如果 $|\Psi\rangle \in \mathscr{H}$ 可以表示为 $|\psi^A\rangle \otimes |\psi^B\rangle$, 其中 $|\psi^A\rangle \in \mathscr{H}^A$, $|\psi^B\rangle \in \mathscr{H}^B$, 那么 $|\Psi\rangle$ 被称为直积态 (product state).

可以选择 $\mathscr{H}^A$ 或 $\mathscr{H}^B$ 的其它形式的基向量, 将 $|\Psi\rangle$ 表示成其它形式. 下面的定理给出了最简单的表示形式.

定理 (施密特 (Schmidt) 分解) 对于给定的某个量子态 $|\Psi\rangle \in \mathscr{H}$, 总能找到 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 的特定的基向量, 记作 $\{|e_i\rangle\}$ 和 $\{|f_\mu\rangle\}$, 使得 $|\psi\rangle$ 在 $\{|e_i\rangle|f_\mu\rangle\}$ 上的展开形式为

$$|\Psi\rangle = \sum_{j=0}^{d} c_j|e_j\rangle|f_j\rangle, \tag{2}$$

其中 $d = \min\{d^A, d^B\} - 1$, 并且每一个 c_j 都是正的. □

稍后证明这个结论.

考虑 d^Ad^B 维的空间 $\mathscr{H}$ 上的的算符 X, 它可以表示为矩阵形式[1], 在自然基向量 $|i\rangle|\mu\rangle$ 上

$$X = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu}|i\mu\rangle\langle j\nu| \tag{3}$$

[1]若非特别指明, 所说的矩阵是 $d^Ad^B \times d^Ad^B$ 的方阵.

其中矩阵元 $x_{i\mu,j\nu}$ 就是

$$x_{i\mu,j\nu} = \langle i\mu| X |j\nu\rangle = \mathrm{Tr}(X\ |j\nu\rangle\langle i\mu|).$$

这里, 用双指标标记矩阵的行和列, 对行的标记是 $i\mu$, 对列的标记是 $j\nu$. 还可以把矩阵 X 表示为

$$X = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |i\rangle\langle j| \otimes |\mu\rangle\langle\nu|$$

一般地, Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 上任意一个矩阵不一定总能表示为 $\mathscr{H}^A$ 上的矩阵和 $\mathscr{H}^B$ 上的矩阵的直积.

常见的对 Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 上的矩阵的操作有转置、厄密共轭和求迹. 矩阵 X 的转置记作 X^T,

$$X^T = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |j\nu\rangle\langle i\mu|$$

也可以等价地写为 $X^T = \sum_{ij\mu\nu} x_{j\nu,i\mu} |i\mu\rangle\langle j\nu|$. 厄密共轭是

$$X^\dagger = \sum_{ij\mu\nu} x^*_{i\mu,j\nu} |j\nu\rangle\langle i\mu|$$

可以等价地写为 $X^\dagger = \sum_{ij\mu\nu} x^*_{j\nu,i\mu} |i\mu\rangle\langle j\nu|$. 对矩阵 X 在整个空间上求迹, 结果是

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}(X) &= \sum_{i'\mu'} \langle i'\mu'| X |i'\mu'\rangle \\
&= \sum_{i'\mu'} \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} \langle i'\mu'|i\mu\rangle \langle j\nu|i'\mu'\rangle \\
&= \sum_{i\mu} x_{i\mu,i\mu}
\end{aligned}$$

除了上述常见的操作以外, 还有一些仅仅涉及子空间 $\mathscr{H}^A$ 或 $\mathscr{H}^B$ 的操作, 即部分转置 (partial transpose) 和部分迹 (partial trace).

定义 (部分转置) Hilbert 空间 $\mathscr{H} = \mathscr{H}^A \otimes \mathscr{H}^B$ 上的矩阵 X 表示为 (3) 式, 在 $\mathscr{H}^A$ 空间中的转置记作 X^{T_A}, 其形式是

$$X^{T_A} = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |j\mu\rangle\langle i\nu| = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |j\rangle\langle i| \otimes |\mu\rangle\langle\nu| . \tag{4}$$

在 $\mathscr{H}^B$ 空间中的转置记作 X^{T_B}, 其形式是

$$X^{T_B} = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |i\nu\rangle\langle j\mu| = \sum_{ij\mu\nu} x_{i\mu,j\nu} |i\rangle\langle j| \otimes |\nu\rangle\langle\mu| . \tag{5}$$

□

定义 (部分迹) 对形如 (3) 式的矩阵 X 在空间 $\mathscr{H}^B$ 中求迹, 得到一个 $\mathscr{H}^A$ 上的矩阵, 记作 X^A,

$$X^A = \mathrm{Tr}_B(X) = \sum_{ij\mu} x_{i\mu,j\mu} |i\rangle\langle j| . \tag{6}$$

类似地, 对 X 在空间 $\mathscr{H}^A$ 中求迹, 得到一个 $\mathscr{H}^B$ 上的矩阵, 记作 X^B,

$$X^B = \mathrm{Tr}_A(X) = \sum_{i\mu\nu} x_{i\mu,i\nu} \left|\mu\right\rangle\!\left\langle\nu\right| . \tag{7}$$

X^A 和 X^B 分别称为 X 在 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 上的约化矩阵. □

例如, 对于 $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ 上的矩阵 X, 下面两个图描述了部分转置和部分迹.

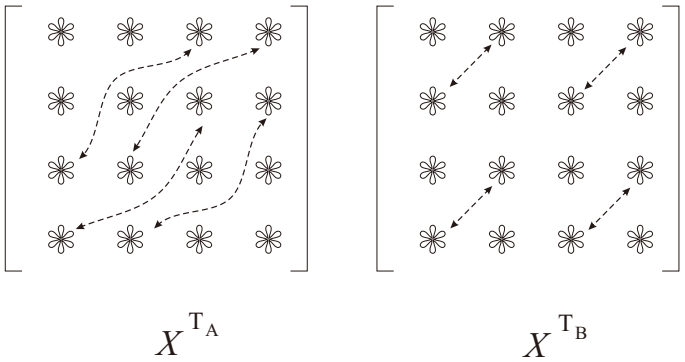


图 1: 将图中用虚线连接的矩阵元对调, 得到关于矩阵 X 的部分转置.

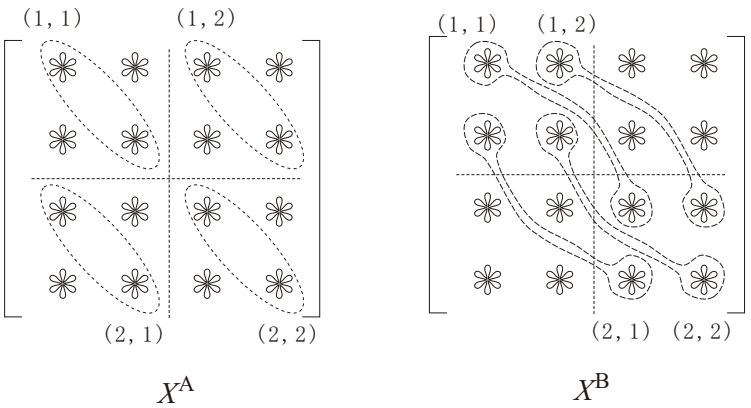


图 2: 将图中用虚线圈起来的矩阵元相加, 再将相加的结果放在 2×2 矩阵的相应的位置, 得到关于矩阵 X 的部分迹.

一般地, $X \neq X^A \otimes X^B$. 还可以看到, 在整个空间 $\mathscr{H}$ 上求迹等于先在 $\mathscr{H}^{A(B)}$ 上求迹, 然后继续在 $\mathscr{H}^{B(A)}$ 上求迹,

$$\mathrm{Tr}(X) = \mathrm{Tr}_A\left[\mathrm{Tr}_B(X)\right] = \mathrm{Tr}_B\left[\mathrm{Tr}_A(X)\right]$$

其它一些性质:

- 设 $A \in \mathcal{L}(\mathscr{H}^A)$, $C \in \mathcal{L}(\mathscr{H}^A \otimes \mathscr{H}^B)$,

$$\mathrm{Tr}(A \,\mathrm{Tr}_B\, C) = \mathrm{Tr}\left((A \otimes \mathbb{1})C\right) \tag{8}$$

将 C 表示为

$$C = \sum_{\mu,\nu} \mathscr{C}_{\mu\nu} \otimes |\mu\rangle\langle\nu|$$

其中 $\mathscr{C}_{\mu\nu}$ 是 $\mathscr{H}^A$ 上的矩阵 (不是 C 的矩阵元). 容易看出

$$\mathrm{Tr}_B\, C = \sum_{\mu} \mathscr{C}_{\mu\mu}$$

计算 (8) 式的左端, 这是在 $\mathscr{H}^A$ 中的求迹,

$$(8)\text{ 式左端} = \mathrm{Tr}\left(A \sum_{\mu} \mathscr{C}_{\mu\mu}\right)$$

再看 (8) 式的右端, 先求 Tr_B, 有

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}_B\left((A \otimes \mathbb{1})C\right) \\
=&\sum_{\mu,\nu} \mathrm{Tr}_B\left[\left(A \otimes \mathbb{1}\right)\left(\mathscr{C}_{\mu\nu} \otimes |\mu\rangle\langle\nu|\right)\right] \\
=&\sum_{\mu,\nu} \mathrm{Tr}_B\left[A\mathscr{C}_{\mu\nu} \otimes |\mu\rangle\langle\nu|\right] \\
=&\sum_{\mu} A\mathscr{C}_{\mu\mu}
\end{aligned}$$

再计算 Tr_A, 得到 (8) 式的左端.

- 设 $|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathscr{H}^A$, $C \in \mathcal{L}(\mathscr{H}^A \otimes \mathscr{H}^B)$,

$$\langle\psi|C|\varphi\rangle \in \mathcal{L}(\mathscr{H}^B)$$

$$\langle\psi|C|\varphi\rangle = \mathrm{Tr}_A\left((|\varphi\rangle\langle\psi| \otimes \mathbb{1})C\right)$$

计算过程如下.

$$|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |i\rangle, \quad |\varphi\rangle = \sum_j \varphi_j |j\rangle$$

$$C = \sum_{m,\mu,n,\nu} c_{m\mu,n\nu} |m\rangle\langle n| \otimes |\mu\rangle\langle\nu|$$

$$\langle\psi|C|\varphi\rangle = \sum_{m,\mu,n,\nu} \psi_m^* c_{m\mu,n\nu} \varphi_n |\mu\rangle\langle\nu| \tag{9}$$

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}_A\left((|\varphi\rangle\langle\psi|\otimes\mathbb{1})C\right)\\
=&\sum_{i,j,m,\mu,n,\nu}\mathrm{Tr}_A\left[\left(\varphi_j\psi_i^*\,|j\rangle\langle i|\otimes\mathbb{1}\right)\left(c_{m\mu,n\nu}\,|m\rangle\langle n|\otimes|\mu\rangle\langle\nu|\right)\right]\\
=&\sum_{k,i,j,m,\mu,n,\nu}\varphi_j\psi_i^*c_{m\mu,n\nu}\ \langle k|j\rangle\,\langle i|m\rangle\,\langle n|k\rangle\ \ |\mu\rangle\langle\nu|
\end{aligned}
$$

考虑基向量的正交归一性之后, 得到 (9) 式

在讨论两体问题的时候, 对于某个子空间上的矩阵, 比如说, A 是 $\mathscr{H}^A$ 上的矩阵, 更严格的写法是 $A\otimes\mathbb{1}^B$, 这里, $\mathbb{1}^B$ 是 $\mathscr{H}^B$ 上的单位算符. 类似地, $\mathscr{H}^B$ 上的矩阵 B 应该理解为 $\mathbb{1}^A\otimes B$. 添加的单位算符意谓着对相应的子空间中的向量不作任何操作. 如果矩阵 A 和 B 分属不同的 Hilbert 空间, 它们一定是对易的, 即

$$[A,B]=[A\otimes\mathbb{1}^B,\mathbb{1}^A\otimes B]=0$$

在讨论两体量子系统作为一个整体随时间演化的时候, 需要给出整个系统的哈密顿量, 例如

$$H=H^A+H^B+H^{\mathrm{int}},$$

其中 H^A 和 H^B 分别是是子系统 A 和 B 的局部的定域的哈密顿量, 它们分别是 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 上的厄米算符, H^{int} 则表示二者间的相互作用, 它是 $\mathscr{H}$ 上的厄米算符, 所以, 上式应该写为

$$H=H^A\otimes\mathbb{1}^B+\mathbb{1}^A\otimes H^B+H^{\mathrm{int}}. \tag{10}$$

以后, 在不致混淆的情况下, 我们有时会省略表明子系统的上标.

考虑测量问题

联合测量

设两体系统 AB 的整体的量子态是 $|\Psi\rangle$. 再设想 X 是 AB 的整体力学量, 即 X 是 $\mathscr{H}$ 上的厄密算符, 本征值和相应的本征向量分别用 x_i 和 $|\xi_i\rangle$ 表示, $i=0,1,\cdots,\dim\mathscr{H}-1$, 即 $X\,|\xi_i\rangle=x_i\,|\xi_i\rangle$. 在 $|\Psi\rangle$ 中测量 X 得到结果 x_i 的几率是 $p(x_i)=|\,\langle\xi_i|\Psi\rangle\,|^2$. 这种对于两体系统整体的测量被称为**联合测量**. 不过, 在很多时候 (尤其是讨论子系统之间的关联行为的时候), 同时测量两个子系统的局部的 (local) 力学量也被看成是联合测量. 设 A 和 B 分别是子系统 A 和子系统 B 的力学量, 它们的本征方程分别是 $A=\sum_i a_i\,|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ 和 $B=\sum_j b_i\,|\beta_j\rangle\langle\beta_j|$, $i=0,1,\cdots,\dim\mathscr{H}^A-1$, $j=0,1,\cdots,\dim\mathscr{H}^B-1$. 测量 A 得到结果 a_i, 同时测量 B 得到结果 b_j 的几率是

$$p(a_i,b_j)=\left|\left(\langle\alpha_i|\otimes\langle\beta_j|\right)|\Psi\rangle\right|^2$$

有时候, 我们也把上述几率写为 $p(a_i, b_j|A, B)$, 在竖线右边标明了每个子系统的被测力学量, 它们的观测结果写在竖线的左边. 这个形式看起来像是条件几率, 我们也确实可以把竖线右边的内容视作条件. 定义投影算符 $\Pi_i^A = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ 和 $\Pi_j^B = |\beta_j\rangle\langle\beta_j|$, 几率 $p(a_i, b_j)$ 又可以写为

$$p(a_i, b_j) = \langle\Psi| \left(\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B\right) |\Psi\rangle = \mathrm{Tr}\left[(\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B)(|\Psi\rangle\langle\Psi|)\right] \tag{11}$$

这是观测到结果 a_i 和 b_j 这两个事件同时出现的几率, 是联合几率. 对此有以下两点需要说明.

1. 可以从联合几率得到边缘 (marginal) 几率. 若联合几率 $p(a_i, b_j)$ 是已知的, 那么可以有

$$p(a_i) = \sum_j p(a_i, b_j), \quad p(b_j) = \sum_i p(a_i, b_j)$$

$p(a_i)$ 和 $p(b_j)$ 就是边缘几率, 它们分别是在 $|\Psi\rangle$ 中仅仅测量 A 并得到结果 a_i 和仅仅测量 B 并得到结果 b_j 的几率. 这种从整体到部分, 从联合到边缘的过渡是经典概率论的内容, 但也符合 Born 规则给出的结论.

注意到与结果 a_i 对应的投影算符是 Π_i^A, 根据 Born 规则, 有

$$p(a_i) = \langle\Psi| \left(\Pi_i^A \otimes \mathbb{1}^B\right) |\Psi\rangle$$

上式的意思是, 对 B 系统不作任何操作, 所以有 $\mathbb{1}^B$. 而且, 利用性质 (8), 可以将上式表示为

$$p(a_i) = \mathrm{Tr}\left[\Pi_i^A \,\mathrm{Tr}_B(\Psi)\right], \quad \Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

这里的 $\mathrm{Tr}_B(\Psi)$ 就是稍后要讨论的约化密度算子.

将 $\mathbb{1}^B$ 表示为 $\sum_j \Pi_j^B$, 几率 $p(a_i)$ 可以继续写为

$$p(a_i) = \sum_j \langle\Psi| \left(\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B\right) |\Psi\rangle = \sum_j p(a_i, b_j)$$

类似地可以得到 $p(b_j) = \sum_i p(a_i, b_j)$.

2. 这里说的同时并不一定必须是严格的时间上的同步, 实际上可以分两步进行. 例如, 我们可以先测量 B, 以一定的几率 $p(b_j)$ 得到结果 b_j, 在此基础上再测量 A, 以条件几率 $p(a_i|b_j)$ 得到结果 a_i, 于是联合几率 $p(a_i, b_j) = p(a_i|b_j)p(b_j)$. 这种叙述同样也是经典概率论的内容, 而在量子力学中也有同样的结论. 选择 $\mathscr{H}^B$ 的基向量为 $\{|\beta_j\rangle\}$, 总可以将 $|\Psi\rangle$ 表示为

$$|\Psi\rangle = \sum_j |\tilde{\psi}_j\rangle \otimes |\beta_j\rangle$$

这里 $|\tilde{\psi}_j\rangle$ 未归一, 彼此也不一定正交. 从这个表达式可以看出, 测量 B 得到结果 b_j 的几率就是 $\langle\tilde{\psi}_j|\tilde{\psi}_j\rangle$. 计算过程是

$$p(b_j) = \langle\Psi|\mathbb{1}^A \otimes \Pi_j^B|\Psi\rangle$$

$$= \Big(\sum_m \langle \tilde{\psi}_m | \otimes \langle \beta_m | \Big) \left(\mathbb{1}^A \otimes \Pi_j^B \right) \Big(\sum_{m'} | \tilde{\psi}_{m'} \rangle \otimes | \beta_{m'} \rangle \Big)$$

$$= \sum_{m,m'} \langle \tilde{\psi}_m | \tilde{\psi}_{m'} \rangle \ \langle \beta_m | \Pi_j^B | \psi_{m'} \rangle = \langle \tilde{\psi}_j | \tilde{\psi}_j \rangle$$

将 $|\tilde{\psi}_j\rangle$ 归一化, 令

$$|\psi_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{p(b_j)}} |\tilde{\psi}_j\rangle$$

结果 b_j 出现之后, 两体系统的状态是 $|\psi_j\rangle \otimes |\beta_j\rangle$. 继续测量 A, 得到结果 a_i 的几率就是条件几率 $p(a_i|b_j)$,

$$p(a_i|b_j) = (\langle \psi_i | \otimes \langle \beta_j |)(\Pi_i^A \otimes \mathbb{1}^B)(|\psi_i\rangle \otimes |\beta_j\rangle) = \langle \psi_j | \, \Pi_i^A \, | \psi_j \rangle$$

如果根据 $p(a_i, b_j) = p(a_i|b_j)p(b_j)$ 计算联合几率, 那么结果是

$$p(a_i, b_j) = p(a_i|b_j)p(b_j) = \langle \psi_j | \, \Pi_i^A \, | \psi_j \rangle \, p(b_j) = \langle \tilde{\psi}_j | \, \Pi_i^A \, | \tilde{\psi}_j \rangle$$

如果直接计算投影算符 $\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B$ 在 $|\Psi\rangle$ 的期望值, 那么有

$$\begin{aligned} p(a_i, b_j) &= \langle \Psi | \, (\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B) \, | \Psi \rangle \\ &= \sum_{m,m'} (\langle \tilde{\psi}_m | \otimes \langle \beta_m |)(\Pi_i^A \otimes \Pi_j^B)(|\tilde{\psi}_{m'}\rangle \otimes |\beta_{m'}\rangle) \\ &= \langle \tilde{\psi}_j | \, \Pi_i^A \, | \tilde{\psi}_j \rangle \end{aligned}$$

所以, 两种看法给出了相同的结果.

第四章　　两体量子系统　Ⅱ

约化密度算子

空间 $\mathscr{H}=\mathscr{H}^A\otimes\mathscr{H}^B$ 中的任意一个混合态的密度矩阵 ρ 可以在自然基上表示为

$$\rho=\sum_{ij\mu\nu}\rho_{i\mu,j\nu}\left|i\mu\right\rangle\left\langle j\nu\right|=\sum_{ij\mu\nu}\rho_{i\mu,j\nu}\left|i\right\rangle\!\left\langle j\right|\otimes\left|\mu\right\rangle\!\left\langle\nu\right| \tag{1}$$

当然, 矩阵元 $\rho_{i\mu,j\nu}$ 须满足密度矩阵的要求.

我们先来考虑力学量在混合态 ρ 中的期望值. 设 X 是两体系统整体的力学量, 那么它的期望值是

$$\langle X\rangle_\rho=\mathrm{Tr}(X\rho)=\sum_{ij\mu\nu}\left\langle i\mu\right|\rho\left|j\nu\right\rangle\left\langle j\nu\right|X\left|i\mu\right\rangle \tag{2}$$

如果我们仅仅考虑属于子系统 A 的某个力学量 A, 那么应该如何求得它在 ρ 上的期望值呢?

考虑两体系统的时候, 子系统的力学量 A 应该写为 $A\otimes\mathbb{1}^B$. 因此 A 的期望值就是

$$\begin{aligned}\langle A\rangle_\rho&=\mathrm{Tr}[(A\otimes\mathbb{1}^B)\rho]\\&=\mathrm{Tr}\left[(A\otimes\mathbb{1}^B)\sum_{ij\mu\nu}\rho_{i\mu,j\nu}\left|i\right\rangle\!\left\langle j\right|\otimes\left|\mu\right\rangle\!\left\langle\nu\right|\right]\\&=\sum_{ij\mu\nu}\rho_{i\mu,j\nu}\,\mathrm{Tr}\left[A\left|i\right\rangle\!\left\langle j\right|\otimes\left|\mu\right\rangle\!\left\langle\nu\right|\right]\end{aligned} \tag{3}$$

上述求迹是对整个空间 $\mathscr{H}$ 而言的, 等价于先后在两个子空间上求迹, 即 $\mathrm{Tr}=\mathrm{Tr}_A\,\mathrm{Tr}_B=\mathrm{Tr}_B\,\mathrm{Tr}_A$. 对 (3) 式求 Tr_B, 导致 $\mu=\nu$, 求和指标中不再出现 ν, 接着还要计算 Tr_A, 即

$$\langle A\rangle_\rho=\mathrm{Tr}_A\left[A\sum_{ij\mu}\rho_{i\mu,j\mu}\left|i\right\rangle\!\left\langle j\right|\right]=\mathrm{Tr}_A\left[A\rho^A\right] \tag{4}$$

这里, ρ^A 是 ρ 在 $\mathscr{H}^A$ 上的约化密度矩阵, 即

$$\rho^A=\mathrm{Tr}_B(\rho)=\sum_{ij\mu}\rho_{i\mu,j\mu}\left|i\right\rangle\!\left\langle j\right| \tag{5}$$

需要检验 ρ^A 是否满足密度矩阵的三个性质. 容易看出 $\mathrm{Tr}(\rho^A)=1$ 以及 $\rho^A=(\rho^A)^\dagger$. 以下过程可以说明它的正定性. 对于任意的 $|\chi\rangle\in\mathscr{H}^A$, 有

$$\begin{aligned}\langle\chi|\,\rho^A\,|\chi\rangle &= \mathrm{Tr}_A(\rho^A\ |\chi\rangle\langle\chi|) = \mathrm{Tr}\left[\rho\left(|\chi\rangle\langle\chi|\otimes\mathbb{1}^B\right)\right] \\ &= \mathrm{Tr}\left[\rho\left(|\chi\rangle\langle\chi|\otimes\sum_\mu|\mu\rangle\langle\mu|\right)\right] \\ &= \sum_\mu \mathrm{Tr}\left[\rho\left(|\chi\rangle\otimes|\mu\rangle\right)\left(\langle\chi|\otimes\langle\mu|\right)\right] \\ &= \sum_\mu(\langle\chi|\otimes\langle\mu|)\rho(|\chi\rangle\otimes|\mu\rangle)\geqslant 0\end{aligned} \tag{6}$$

其中 (6) 式的第二个等式可以通过 (1) 得到, 也是以前提到过的关于部分迹的一个性质.

这里不带下标的求迹运算 Tr 是在整个空间 $\mathscr{H}$ 上进行的. 上式的结果表明, 对于任意的 $|\chi\rangle$, $\langle\chi|\,\rho^A\,|\chi\rangle\geqslant 0$, 即 ρ^A 是正定的. 于是 ρ^A 满足密度矩阵的要求, 描述了子系统 A 的局部的定域的量子态. 同理, 约化密度矩阵 $\rho^B=\mathrm{Tr}_A(\rho)$ 描述了子系统 B 的局部的量子态. 一般情况下, $\rho\neq\rho^A\otimes\rho^B$, 即整体的量子态不一定具有局部量子态的直积形式.

特别地, 考虑 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 上的投影算符 (不一定是一维的) Π_a^A 和 Π_b^B, 把它们视作测量算符, 对应的观测结果记作 a 和 b, 那么得到结果 a 和 b 的几率分别是 Π^A 和 Π^B 的期望值,

$$p(a)=\mathrm{Tr}[\rho(\Pi_a^A\otimes\mathbb{1}^B)]=\mathrm{Tr}_A[\rho^A\Pi_a^A]$$

$$p(b)=\mathrm{Tr}[\rho(\mathbb{1}^A\otimes\Pi_b^B)]=\mathrm{Tr}_B[\rho^B\Pi_b^B]$$

这意味着局部测量结果的几率分布取决于相应的约化密度算符. 另一方面, 联合测量结果 (a,b) 的几率等于 $p(a,b)=\mathrm{Tr}[\rho(\Pi^A\otimes\Pi^B)]$. 虽然我们可以从联合测量结果的几率分布得到边缘几率分布, 但是, 在一般情形下, $p(a,b)\neq p(a)p(b)$. 即便在经典几率中, 这也是很自然的事情, 表明二者之间有关联.

再对约化密度矩阵作一些补充说明. 如果两体系统处于不可分离的纯态, 即纠缠态, 那么局部看来, 每一个子系统的状态都是用约化密度矩阵表示的混合态, 而得到约化密度矩阵的过程是数学上的求部分迹. 需要一个物理过程对应于求部分迹的运算. 所以, 简单地、直接地说约化密度矩阵或局部量子态缺乏物理上的支持. 但是, 把几率 $p(a)$ 表示为 $\mathrm{Tr}_A\left(\rho^A\Pi_a^A\right)$ 则是可以接受的, 因为这个几率实际上是 $\mathrm{Tr}[\rho(\Pi_a^A\otimes\mathbb{1}^B)]$.

系统 Q 和仪器 M

考虑理想的量子测量. 设系统的初态是

$$|\psi\rangle=\sum_i c_i\,|\alpha_i\rangle$$

仪器的初态是 $|\varphi\rangle$. Pre-measurement 过程得到的两体量子态是

$$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \longrightarrow |\Psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$$

其中的 $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$. 这是测量仪器的量子性的一面.

然后, 仪器的量子态 $|\varphi_i\rangle$ 表现出经典现象, 从而有系统和仪器的末态

$$\sum_i |c_i|^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \otimes [m_i]$$

这是仪器的经典性的一面.

仪器的状态从 $|\varphi_i\rangle$ 到 $[m_i]$, 这个过程不甚清楚. 但是有一个简单的可以类比的描述: 用投影算子 $\Pi_i^M = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ 作用于仪器. 为此, 先将 $\sum_i c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$ 表示为密度算子的形式,

$$\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{i,j} c_i c_j^* |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|$$

用投影算子 Π_i^M 作用于上述量子态,

$$\left(\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M\right) \left[\sum_{i,j} c_i c_j^* |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_j|\right] \left(\mathbb{1} \otimes \Pi_i^M\right)$$

得到一个未归一的直积形式的两体量子态,

$$|c_i|^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

从中可以看出几率 $|c_i|^2$. 当然, 这个几率也就是前面讲过的局部测量得到的几率, 即 $\mathrm{Tr}\left[\Psi(\mathbb{1}\otimes\Pi_i^M)\right]$, 其中 $\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$.

对仪器测量非选择测量导致如下结果,

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle\langle\Psi| \ \longrightarrow \ \rho_{\mathrm{PM}} &= \sum_i \Pi_i^M |\Psi\rangle\langle\Psi| \Pi_i^M \\ &= \sum_i |c_i|^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \otimes |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| \end{aligned} \tag{7}$$

其中下标 PM 表示 post-measurement. 测量前 (或者说 pre-measurement) 系统和仪器处于两体纯态, 测量后, 系统和仪器的整体状态是混合态.

如果仪器的状态 $|\varphi_i\rangle$ 对应于并进一步演化为经典结果 m_i, 那么得到

$$\sum_i |c_i|^2 |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \otimes [m_i]$$

经典状态 $[m_i]$ 对应于系统的力学量 A 取值 a_i, 几率为 $|c_i|^2$.

用系综的形式表示测量后系统的的状态

$$\mathcal{E}^Q = \{p_i = |c_i|^2, \alpha_i\}$$

用密度矩阵表示,

$$\rho^Q = \sum_i p_i \, |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| = \mathrm{Tr}_M \, \rho_{\mathrm{PM}}$$

几点说明.

- 在 Born 规则的叙述中, 只有系统, 没有涉及测量仪器, 与得到结果 a_i 对应的过程是, 用投影算子 $\Pi_i^Q = |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$ 作用于系统的初态 $|\psi\rangle$,

  $$\Pi_i^Q \, |\psi\rangle = |\alpha_i\rangle \, \langle\alpha_i|\psi\rangle = c_i \, |\alpha_i\rangle$$

  几率是 $p_i = |c_i|^2$, 得到结果 a_i 时, 系统的状态变为 $|\alpha_i\rangle$.
  或者, 在不作选择的情形下,

  $$|\psi\rangle\langle\psi| \;\longrightarrow\; \rho^Q = \sum_i \Pi_i^Q \, |\psi\rangle\langle\psi| \, \Pi_i^Q = \sum_i p_i \, |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

- 引入测量仪器后, 测量过程是间接的而不是直接的, 测量结果体现在仪器上. 仪器的状态 $|\varphi_i\rangle$ (以及相应的经典状态 $[m_i]$) 对于系统的力学量 A 的本征值 a_i, 过程是

  $$|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \xrightarrow{\text{unitary evolution}} \text{pre-measurement state } \; |\Psi\rangle$$

  $$\xrightarrow{\text{decoherence}} \text{post-measurement state } \rho_{\mathrm{PM}}$$

  在系统和仪器的测量后的量子态 (即 ρ_{PM}) 中去除仪器部分, 得到系统的测量后的量子态 $\rho^Q = \mathrm{Tr}_M \, \rho_{\mathrm{PM}}$. 还可以注意到, $\mathrm{Tr}_M \, \Psi = \rho^Q$, 就是说, 对于系统和仪器的 pre-measurement state $\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ 求关于仪器的部分迹, 同样得到了系统的测量后的量子态. 这说明, 在 pre-(post-)measurement 两体量子态中, 系统的局部量子态没有变化. 这是定域性的体现: 对仪器的保迹操作 (酉变换, 非选择测量等等) 不会影响到系统的局部量子态. 系统状态的改变发生在与仪器建立相互作用并一起演化的过程中, 即从初态 ψ 变为 $\mathrm{Tr}_M \, \Psi$. 这个过程实际上属于开放量子系统的演化. 当然, 如果把系统和仪器当作一个整体, 那么从 $\psi \otimes \varphi$ 到 Ψ 的过程是随时间变化的酉变换.

- 有其它变形, 例如

  $$|\Psi'\rangle = \sum_i c_i \, |\beta_i\rangle \otimes |\mu_i\rangle$$

  这里的 c_i 仍然是展开式 $|\psi\rangle = \sum_i c_i \, |\alpha_i\rangle$ 中的展开系数, 但是, $|\Psi'\rangle$ 中的 $|\beta_i\rangle$ (正交归一) 不再是被测力学量 A 的本征向量. 这一形式不影响 A 取值 a_i 的几率, 但是测量后系统的状态不再是 A 的本征态.

- 存在的问题: 为什么仪器的状态 $|\varphi_i\rangle$ 可以表现出经典现象?
  考虑最简单的 $2\otimes 2$ 情形, 假设系统和仪器达到了如下状态

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle\otimes|0\rangle + |0\rangle\otimes|0\rangle)$$

  其中 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 是 σ_z 的本征态, 本征值分别为 $+1$ 和 -1. 根据这个形式, 可以说, 仪器的 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 对应于系统的力学量 σ_z^Q 的本征值. 但是, $|\Psi\rangle$ 又可以表示为

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x+\rangle\otimes|x+\rangle + |x-\rangle\otimes|x-\rangle)$$

  根据这个形式, 可以说系统的被测力学量是 σ_x^Q, 到底是哪一个呢?

$2\otimes 2$ 量子系统和量子态

两个双值量子系统是最简单的两体量子系统, 记作 $2\otimes 2$ 量子系统. 它可以用来讨论量子力学的基本问题.

两个双值系统的量子态可以在自然基 $\{|i\rangle\otimes|\mu\rangle\}$ $(i,\mu=0,1)$ 上展开.

对于 $\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$ 上厄密矩阵, 我们着重考虑密度矩阵, 其它的厄密矩阵有类似的结果.

采用类似于 $\mathbb{C}^2$ 空间上的做法. 引入如下 16 个矩阵,

$$\mathbb{1}^A\otimes\mathbb{1}^B,\quad ,\mathbb{1}^A\otimes\sigma_j^B,\quad \sigma_i^A\otimes\mathbb{1}^B,\quad \sigma_i^A\otimes\sigma_j^B,\quad i,j=1,2,3$$

计算它们彼此间的对易关系.

$$[\sigma_x\otimes\sigma_x, \sigma_y\otimes\sigma_y] = 0$$

$$[\sigma_x\otimes\sigma_x, \sigma_x\otimes\sigma_y] = 2i\mathbb{1}\otimes\sigma_z$$

$$[\sigma_x\otimes\sigma_x, \sigma_y\otimes\sigma_z] = i\sigma_z\otimes(-i)\sigma_y - (-i)\sigma_z\otimes i\sigma_y = 0$$

验证它们之间的正交.

$$\mathrm{Tr}\left[(\sigma_x\otimes\sigma_x)(\sigma_y\otimes\sigma_y)\right] = 0$$

$$\mathrm{Tr}\left[(\sigma_x\otimes\sigma_x)(\mathbb{1}\otimes\sigma_y)\right] = 0$$

$$\cdots\cdots$$

$2\otimes 2$ 系统的密度矩阵 ρ 可以表示为 (以下略去上标 A 和 B)

$$\rho = \frac{1}{4}\left[\mathbb{1}\otimes\mathbb{1} + \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\sigma}\otimes\mathbb{1} + \mathbb{1}\otimes\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{\sigma} + \sum_{m,n=1}^{3} t_{mn}\sigma_m\otimes\sigma_n\right] \tag{8}$$

上式中 $\boldsymbol{r}=(r_1,\,r_2,\,r_3)\in\mathbb{R}^3$, $\boldsymbol{s}=(s_1,\,s_2,\,s_3)\in\mathbb{R}^3$, $t_{mn}\in\mathbb{R}$. 这些实参数的具体形式是

$$r_i=\mathrm{Tr}[\rho(\sigma_i\otimes\mathbb{1})],\quad s_j=\mathrm{Tr}[\rho(\mathbb{1}\otimes\sigma_j)],\quad i,j=1,2,3 \tag{9}$$

$$t_{mn}=\mathrm{Tr}[\rho(\sigma_m\otimes\sigma_n)],\quad m,n=1,2,3 \tag{10}$$

向量 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{s}$ 是三维实空间中的向量, 且 $|\boldsymbol{r}|\leqslant 1$, $|\boldsymbol{s}|\leqslant 1$. 九个 t_{mn} 可以排成一个 3×3 的实数矩阵, 记作 $T=(t_{mn})$. 矩阵 T 矩阵元与 $\sigma_m\otimes\sigma_n$ 有关, 故被称为关联矩阵. 我们还可以把 16 个实数, 1, r_i, s_j, t_{mn}, 排成一个 4×4 的矩阵, 记作 R_ρ, 其形式是

$$R_\rho=\begin{pmatrix}1 & \vec{s}\\ r^{\downarrow} & T\end{pmatrix} \tag{11}$$

这里, $\vec{s}$ 采用行向量的形式, $r^{\downarrow}$ 采用列向量的形式 (不是前面说的降序排列), 而 T 则是一个 3×3 的矩阵.

考虑 ρ 的约化密度矩阵 ρ^A 和 ρ^B. 直接计算给出

$$\rho^A=\frac{1}{2}(\mathbb{1}+\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

$$\rho^B=\frac{1}{2}(\mathbb{1}+\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{\sigma})$$

表明出现在 (8) 式中的 $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{s}$ 分别是关于子系统 A 和 B 约化密度矩阵的 Bloch 向量.

例如, 纯态 $|\Psi\rangle=\cos\alpha\,|00\rangle+\sin\alpha\,|11\rangle$ 的密度矩阵可以表示为

$$\Psi=|\Psi\rangle\langle\Psi|=\frac{1}{4}\big(\mathbb{1}\otimes\mathbb{1}+\sigma_z\otimes\mathbb{1}\cos 2\alpha+\mathbb{1}\otimes\sigma_z\cos 2\alpha+\sigma_x\otimes\sigma_x\sin 2\alpha-\sigma_y\otimes\sigma_y\sin 2\alpha+\sigma_z\otimes\sigma_z\big)$$

$$R_\Psi=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & \cos 2\alpha\\ 0 & \sin 2\alpha & 0 & 0\\ 0 & 0 & -\sin 2\alpha & 0\\ \cos 2\alpha & 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

而对于直积形式的可分离态 $\rho^A\otimes\rho^B$, 它的 R 矩阵中的 T 矩阵是 $r^{\downarrow}\vec{s}$.

第四章　两体量子系统　Ⅲ

酉变换

两体量子系统的酉变换可以分为局部的和整体的. 以 $2\otimes 2$ 为例讨论两体量子系统的酉变换.

局部酉变换　分别对每个子系统 A 和 B 进行酉变换 U^A 和 U^B, 更严格地写作 $U^A\otimes \mathbb{1}^B$ 和 $\mathbb{1}^A\otimes U^B$. 如果对 A 和 B 都进行局部酉变换, 那么酉变换矩阵是 $U^A\otimes U^B$.

$$\rho \longrightarrow (U^A\otimes U^B)\rho(U^A\otimes U^B)^\dagger$$

以前说过的 Schmidt 分解的形式就是来自局部酉变换的结果.

形如 $\sigma_i\otimes\mathbb{1}$ 或 $\mathbb{1}\otimes\sigma_j$ $(i,j=1,2,3)$ 的生成元生成了局部酉变换, 例如

$$e^{-i\phi(\sigma_z\otimes\mathbb{1})}=\mathbb{1}\otimes\mathbb{1}\cos\phi-i\sigma_z\otimes\mathbb{1}\sin\phi=e^{-i\phi\sigma_z}\otimes\mathbb{1}$$

这实际上就是对第一个子系统的酉变换.

子系统之间的关联行为不会因为局部酉变换而改变.

整体酉变换　整体酉变换不能表示为局部酉变换的直积. 形如 $\sigma_i\otimes\sigma_j$ $(i,j=1,2,3)$ 的生成元生成了整体酉变换. 例如, 以 $\sigma_z\otimes\sigma_z$ 作为变换的生成元, 有

$$U(\tau)=\exp\big\{-i\tau(\sigma_z\otimes\sigma_z)\big\}=\mathbb{1}\otimes\mathbb{1}\cos\tau-i\sigma_z\otimes\sigma_z\sin\tau$$

这个酉变换不能分解为 $U^A\otimes U^B$ 的形式, 它是整体的酉变换.

整体变换将改变子系统之间的关联行为, 而且, 在量子测量, 量子操控的理论和实验研究领域, 整体变换是必不可少的. 一个典型的例子是控制变换, 例如控制非变换, $U_{\rm CNOT}$. 这里, CNOT 的意思是 control not, 即 “控制非” 操作, 矩阵形式是

$$U_{\rm CNOT}=\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix}\tag{1}$$

让 U_{CNOT} 作用于 $2\otimes 2$ 系统的量子态, 其效果是: 如果第一个粒子处于 $|0\rangle$, 那么对第二个粒子不作任何操作, 单位算符 $\mathbb{1}$ 表示恒等变换; 如果第一个粒子处于 $|1\rangle$, 那么对第二个粒子进行 σ_x 操作. 注意到 σ_x 操作就是经典逻辑中的 "非" 运算, 故 U_{CNOT} 就是第一个粒子控制第二个例子的控制非操作. 控制非操作不能表示为两个局部的酉变换的直积的形式, 它是面向两体量子态的整体的酉变换. 可以将控制非操作表示为

$$U_{\mathrm{CNOT}} = |0\rangle\langle 0|\otimes\mathbb{1} + |1\rangle\langle 1|\otimes\sigma_x \tag{2}$$

设系统 A 的初态是 $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$, 系统 B 的初态是 $|\varphi\rangle = |0\rangle$. 对二者施加整体变化 U_{CNOT}, 有

$$\begin{aligned}
&|\psi\rangle\otimes|\varphi\rangle = (c_0|0\rangle + c_1|1\rangle)\otimes|0\rangle \\
\longrightarrow\ &U_{\mathrm{CNOT}}[(c_0|0\rangle + c_1|1\rangle)\otimes|0\rangle] \\
=\ &c_0|0\rangle|0\rangle + c_1|1\rangle|1\rangle
\end{aligned}$$

得到的结果正是理想测量 (测量系统的力学量 σ_z) 所需要的.

定理 (整体酉变换的正则形式) 用 A 和 B 表示 $2\otimes 2$ 量子系统的两个子系统. 任何一个整体酉变换可以表示为

$$U = (V^A\otimes V^B)U_{\mathrm{can}}(W^A\otimes W^B) \tag{3}$$

其中 $V^{A(B)}$ 和 $W^{A(B)}$ 是作用于 $A(B)$ 的局部酉变换, 而 U_{can} 的形式是

$$U_{\mathrm{can}} = \exp\big\{-i(\xi_x\sigma_x^A\otimes\sigma_x^B + \xi_y\sigma_y^A\otimes\sigma_y^B + \xi_z\sigma_z^A\otimes\sigma_z^B)\big\} \tag{4}$$

其中 ξ_x, ξ_y 和 ξ_z 均为实数, 下标 can 表示正则 (canonical) 形式. □

该定理表明, 整体酉变换的核心部分是 U_{can}. 例如, 对于 U_{CONT}, 可以验证如下等式,

$$\begin{aligned}
U_{\mathrm{CNOT}} = &\left[\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\right]\ \exp\Big\{-i\frac{\pi}{4}(\sigma_x\otimes\sigma_x)\Big\} \\
&\times\left[\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right]
\end{aligned} \tag{5}$$

就是说, 控制非操作的核心部分是两个粒子之间形如 $\sigma_x\otimes\sigma_x$ 的相互作用. 实际上, 利用形如 $\sigma_i\otimes\sigma_j$ $(i,j = x,y,z)$ 的相互作用也可以构造出控制非操作, 与上式相比, 仅仅在局部的酉变换上有所不同. 控制非操作是整体酉变换的一种特殊形式, 它不但涉及形如 $\sigma_i\otimes\sigma_j$ 的相互作用, 而且对相互作用的强度和相互作用持续的时间也有要求, 简单地说, 这体现在 U_{can} 的的展开形式中算符 $e^{-i\frac{\pi}{4}(\sigma_x\otimes\sigma_x)}$ 的指数上的因子 $\frac{\pi}{4}$.

设系统 Q 和仪器 M 作为一个两体量子系统以如下方式演化,

$$U(\tau)=\begin{pmatrix}\cos\tau & \sin\tau & 0 & 0\\ -\sin\tau & \cos\tau & 0 & 0\\ 0 & 0 & \cos\tau & -\sin\tau\\ 0 & 0 & \sin\tau & \cos\tau\end{pmatrix} \tag{6}$$

这个演化形式的来源是, 假设 Q 和 M 的相互作用 Hamilton 量是

$$H^{\text{int}}=-\hbar g\sigma_z^Q\otimes\sigma_y^M \tag{7}$$

其中 g 是耦合常数, 设 $g>0$, 它的大小反映了相互作用的强弱. 在不致引起混淆的时候, 上标 Q 和 M 将被省去. 略去系统和仪器自身的哈密顿量, 两体系统的时间演化算符是 $U(t)=e^{-iHt/\hbar}$, 具体形式 (6) 式给出, 其中 $\tau=gt$.

如果把 $U(\tau)$ 中左上角的 2×2 的子矩阵记作 U_0, 把右下角的子矩阵记作 U_1, 那么 $U(\tau)$ 可以写为 $U(\tau)=|0\rangle\langle0|\otimes U_0+|1\rangle\langle1|\otimes U_1$. 显然, 这是一个控制酉操作: 当系统处于 $|0\rangle$ 时, 对仪器的操作是酉变换 U_0; 当系统处于 $|1\rangle$ 时, 对仪器的操作是酉变换 U_1.

现在, 设系统的初态是

$$|\psi\rangle=c_0|0\rangle+c_1|1\rangle$$

这里, 为了计算简单, 设 c_0 和 c_1 为正实数.

M 的初态设为 $|\varphi\rangle=|x+\rangle$. 二者共同的初态是 $|\Psi(0)\rangle=|\psi\rangle\otimes|\varphi\rangle$, 演化的结果是

$$\begin{aligned}|\Psi(\tau)\rangle&=U(\tau)|\Psi(0)\rangle\\ &=c_0|0\rangle\otimes|\tilde{\varphi}_0\rangle+c_1|1\rangle\otimes|\tilde{\varphi}_1\rangle\end{aligned} \tag{8}$$

$$|\tilde{\varphi}_0\rangle=\cos\left(\frac{\pi}{4}-\tau\right)|0\rangle+\sin\left(\frac{\pi}{4}-\tau\right)|1\rangle \tag{9}$$

$$|\tilde{\varphi}_1\rangle=\sin\left(\frac{\pi}{4}-\tau\right)|0\rangle+\cos\left(\frac{\pi}{4}-\tau\right)|1\rangle \tag{10}$$

或者,

$$\begin{aligned}|\Psi(\tau)\rangle=&\left[c_0\cos\left(\frac{\pi}{4}-\tau\right)|0\rangle+c_1\sin\left(\frac{\pi}{4}-\tau\right)|1\rangle\right]\otimes|0\rangle\\ &+\left[c_0\sin\left(\frac{\pi}{4}-\tau\right)|0\rangle+c_1\cos\left(\frac{\pi}{4}-\tau\right)|1\rangle\right]\otimes|1\rangle\end{aligned} \tag{11}$$

在 (11) 中, 如果选择 τ 使得 $\tau=\frac{\pi}{4},\frac{3\pi}{4},\cdots$, 那么在这些时刻, 仪器的力学量 σ_z^M 的期望值可以很好地反映系统的被测力学量在系统的初态中的期望值, 二者至多相差一个负号. 而且, 在这些时刻, 在 (11) 式的叠加形式中 Q 的两个量子态是正交的. 例如, 当 $\tau=\frac{\pi}{4}$ 的时候,

$$|\Psi(\tfrac{\pi}{4})\rangle=c_0|0\rangle|0\rangle+c_1|1\rangle|1\rangle$$

这正是我们希望达到的理想测量的效果.

混合量子态的纯化

在前面的讨论中, 我们看到, 如果两体 (以至于多体) 量子系统处于某个纯态 $\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, 那么某个子系统的局部量子态是用约化密度矩阵描述的, 子系统的量子态是混合态.

现在考虑相反的过程, 设某个量子系统 Q 处于混合态 ρ^Q, 我们可以认为 ρ 是处于纯态的两体量子系统的关于某个子系统的约化密度矩阵.

引入一个辅助量子系统 (通常称作 ancilla), 记作 A. 系统 Q 和辅助系统 A 构成两体量子系统. 描述 Q 和 A 的 Hilbert 空间分别是 $\mathscr{H}^Q$ 和 $\mathscr{H}^A$. 描述两体系统的 Hilbert 空间是 $\mathscr{H} = \mathscr{H}^Q \otimes \mathscr{H}^A$. 我们需要构造一个纯态 $|\Psi\rangle \in \mathscr{H}$, 使得

$$\rho^Q = \mathrm{Tr}_A \Psi, \quad \Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$

从 $\mathscr{H}^Q$ 上的 ρ^Q 到 $\mathscr{H}$ 中的 $|\Psi\rangle$ 就是混合量子态的纯化 (purification).

标准的纯化形式是这样的. 首先写出 ρ^Q 的本征分解形式

$$\rho^Q = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i |\xi_i\rangle\langle\xi_i|$$

这里假设 $\mathscr{H}^Q$ 的维数是 n, 且 ρ^Q 是满秩的. λ_i 是 ρ^Q 的本征值, $\lambda_i > 0$, $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$.

将 $\mathscr{H}^A$ 的维数选定为 n, 即 $\dim \mathscr{H}^Q = \dim \mathscr{H}^A = n$. 将 $\mathscr{H}^A$ 的基向量选择为 $\{|\varphi_i\rangle\}$. 构造 $|\Psi\rangle$ 如下,

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \sqrt{\lambda_i} |\xi_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle \tag{12}$$

容易验证

$$\mathrm{Tr}_A \Psi = \rho^Q$$

考虑一下非标准的纯化. 设想 ρ^Q 是系综 $\{p_i, \psi_i\}_{i=1,\cdots,m}$ 的平均量子态, 这里 ψ_i 是纯态 $|\psi_i\rangle$ 的密度矩阵, 不同的 $|\psi_i\rangle$ 不一定正交, 且 m 也未必等于 Hilbert 空间 $\mathscr{H}^Q$ 的维数. 系统 Q 的密度矩阵是

$$\rho^Q = \sum_{i=1}^{m} p_i \psi_i, \quad \psi_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

引入辅助系统 A, $\dim(\mathscr{H}^A) = m$, $|\varphi_i\rangle \in \mathscr{H}^A$, 且 $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$, 我们可以把 ρ^Q 的纯化形式表示为

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{m} \sqrt{p_i} |\psi_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$$

分析一下 $\mathscr{H}^Q$ 和 $\mathscr{H}^A$ 维数相同情况下的纯化, $\dim(\mathscr{H}^Q) = \dim(\mathscr{H}^A) = n$. 标准的纯化形式由 (12) 给出. 现在考虑在 $\mathscr{H}^A$ 的另一组基向量上表示 $|\Psi\rangle$,

$$\{\, |\varphi_i\rangle \,\} \xrightarrow{V} \{\, |\eta_i\rangle \,\}$$

其中 V 是酉矩阵, 它的矩阵元是 $v_{ij} = \langle\varphi_i|\eta_j\rangle$.

在新的表象中, $|\Psi\rangle$ 写为,

$$
\begin{aligned}
|\Psi\rangle &= \sum_i \sqrt{\lambda_i}\,|\xi_i\rangle \otimes \sum_j |\eta_j\rangle\langle\eta_j|\,\varphi_i\rangle \\
&= \sum_j \left(\sum_i \sqrt{\lambda_i} v_{ij}^* \,|\xi_i\rangle \right) \otimes |\eta_j\rangle
\end{aligned}
$$

这表明, 当 $\dim(\mathscr{H}^Q) = \dim(\mathscr{H}^A)$ 时, 标准纯化形式和非标准纯化形式的差别仅仅是对辅助系统的局部酉变换.

第四章　两体量子系统　Ⅳ

量子熵

对于纯态 $|\psi\rangle$, $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, 有 $\mathrm{Tr}(\psi^2) = 1$; 对于混合态 ρ, 我们知道 $\mathrm{Tr}(\rho^2) < 1$. 所以, 可以用 $\mathrm{Tr}(\rho^2)$ 衡量量子态的纯度, $\mathrm{Tr}(\rho^2)$ 越大, 纯度越大, 反之, 纯度越小.

定义量子态的线性熵

$$S_L(\rho) = 1 - \mathrm{Tr}(\rho^2)$$

纯态的线性熵等于 0, 而 $\mathbb{C}^n$ 上的最大混合态的线性熵等于 $1 - \frac{1}{n}$.

von Neumann 熵

$$S(\rho) = -\mathrm{Tr}(\rho \log \rho) = -\sum_i (\lambda_i \log \lambda_i)$$

其中 λ_i 是 ρ 的本征值, $\lambda_i \geqslant 0$. 纯态的量子熵等于 0. $\mathbb{C}^n$ 上的最大混合态的量子熵等于 $\log n$.

与经典熵 (Shannon 熵) 对比. 随机变量 X 的值 x_i 的几率分布是 p_i, Shannon 熵是

$$H(X) = -\sum_i p_i \log p_i$$

给定 $\mathbb{C}^n$ 上的密度矩阵 ρ, 测量所有可能的观测量, 例如

- 测量观测量 A, 得到测量结果的几率分布

  $$\boldsymbol{p}^A = (p_1^A,\ p_2^A,\ \cdots,\ p_n^A)$$

  并且有相应的经典熵

  $$H(A) = -\sum_i p_i^A \log p_i^A$$

- 测量观测量 B, 得到测量结果的几率分布

  $$\boldsymbol{p}^B = (p_1^B,\ p_2^B,\ \cdots,\ p_n^B)$$

  测量结果的经典熵

  $$H(B) = -\sum_i p_i^B \log p_i^B$$

- 测量 $\cdots$ $\cdots$

这些测量结果的经典熵与量子态的量子熵有怎样的联系? 我们要揭示这样的结论: 对于所有可能的测量, 测量结果的经典熵有一个最小值, 这个最小值就是量子熵, 即

$$S(\rho) \leqslant H(A), \quad S(\rho) \leqslant H(B), \quad \cdots$$

首先需要了解不同观测量的测量结果的几率分布之间的关系. 这一部分内容可参看 [1].

考虑两个 n 维的非负分量的实向量 $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$, 它们的分量 $x_i \geqslant 0$, $y_i \geqslant 0$. 将它们的分量以降序排列. 如果它们满足下列两个条件,

$$\text{(i)} \quad \sum_i^k x_i \leqslant \sum_i^k y_i, \quad k = 1, 2, \cdots, n$$

$$\text{(ii)} \quad \sum_i^n x_i = \sum_i^n y_i$$

那么我们说, 向量 $\boldsymbol{y}$ 优于 $\boldsymbol{x}$ ($\boldsymbol{x}$ is majorized by $\boldsymbol{y}$), 记作 $\boldsymbol{x} \prec \boldsymbol{y}$.

如果我们所考虑的向量是几率向量, 所有分量的和为 1, 那么上述第 (ii) 个条件自然满足.

降序排列后的向量用 $x^{\downarrow}$ 表示.

$$\left.\begin{array}{l} x^{\downarrow} \prec x^{\downarrow} \\ x^{\downarrow} \prec y^{\downarrow},\ y^{\downarrow} \prec z^{\downarrow} \implies x^{\downarrow} \prec z^{\downarrow} \\ x^{\downarrow} \prec y^{\downarrow},\ y^{\downarrow} \prec x^{\downarrow} \implies x^{\downarrow} = y^{\downarrow} \end{array}\right\} \implies \text{partial order}$$

这个偏序结构中的最小和最大:

$$x^{\downarrow}_{(n)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{n} \end{pmatrix} \prec x^{\downarrow} \prec \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} = x^{\downarrow}_{(1)}$$

有一个容易证明的简单关系: 对于 $p \in [0, 1]$,

$$x_1^{\downarrow} \prec y^{\downarrow} \text{ and } x_2^{\downarrow} \prec y^{\downarrow} \implies \left(p x_1^{\downarrow} + (1-p) x_2^{\downarrow}\right) \prec y^{\downarrow}$$

几率向量之间优越关系描述了随机分布的有序性或者混乱程度. $x^{\downarrow}_{(1)}$ 是最为有序的, $x^{\downarrow}_{(n)}$ 是最为混乱的.

Schur-convex function. 对于 $\boldsymbol{x} \prec \boldsymbol{y}$, 如果实函数 f 满足 $f(\boldsymbol{x}) \leqslant f(\boldsymbol{y})$, 那么称之为 Schur-convex 函数. 包括

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_i x_i \log x_i, \quad f(\boldsymbol{x}) = \sum_i x_i^k \text{ (for } k \geqslant 1), \quad f(\boldsymbol{x}) = -\prod_i x_i, \quad \text{etc.}$$

Shannon 熵. 给定几率分布 $\boldsymbol{p} = (p_1,\ p_2,\ \cdots,\ p_n)$,

$$H(\boldsymbol{p}) = -\sum_{i=1}^n p_i \log p_i \tag{1}$$

如果 $\boldsymbol{p}^B \prec \boldsymbol{p}^A$, 那么有

$$H(\boldsymbol{p}^A) \leqslant H(\boldsymbol{p}^B)$$

较混乱的几率分布有更大的熵.

现在来比较以下向量,

$$\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1,\ \lambda_2,\ \cdots,\ \lambda_n)$$

$$\boldsymbol{p}^A = (p_1^A,\ p_2^A,\ \cdots,\ p_n^A)$$

$$\boldsymbol{p}^B = (p_1^B,\ p_2^B,\ \cdots,\ p_n^B)$$

$$\cdots\ \cdots$$

设系统处于某个量子态 ρ, 我们可以将密度矩阵对角化, 写为

$$\rho = \sum_i \lambda_i \left|\xi_i\right\rangle\!\left\langle\xi_i\right|$$

其中 λ_i 是 ρ 的本征值, 相应的的本征向量是 $|\xi_i\rangle$.

设想存在一个力学量 X, 在基向量 $|\xi_i\rangle$ 上可以表示为对角形式, 即

$$X = \sum_i x_i \left|\xi_i\right\rangle\!\left\langle\xi_i\right|$$

也就是说, 密度矩阵 ρ 和力学量 X 是对易的. 测量该力学量, 得到结果 x_i 的几率是

$$p_i^X = \mathrm{Tr}(\rho\Pi_i^X) = \lambda_i, \quad \text{其中 } \Pi_i^X = \left|\xi_i\right\rangle\!\left\langle\xi_i\right|$$

这表明, 对角形式的密度矩阵的对角项就是对 X 进行测量的时候得到某个结果的几率.

然后考虑另一个力学量 $A = \sum_j a_j \left|\alpha_j\right\rangle\!\left\langle\alpha_j\right|$, 并且 A 与 X 不对易, 当然 A 也与 ρ 不对易. 测量 A 得到结果 a_j 的几率记作 p_j^A. 令 $\Pi_j^A = \left|\alpha_j\right\rangle\!\left\langle\alpha_j\right|$, 有

$$p_j^A = \mathrm{Tr}(\rho\Pi_j^A) = \sum_i \left|\left\langle\xi_i|\alpha_j\right\rangle\right|^2 \lambda_i = \sum_i \left|\left\langle\xi_i|\alpha_j\right\rangle\right|^2 p_i^X \tag{2}$$

上式就是两组几率分布之间的联系.

从表象变换的观点来说, (2) 表示的就是在不同表象中测量结果的几率分布之间的联系. 而且, 从 X 表象到 A 表象的变换是由一个酉变换决定的, 将这个酉变换记作 V, 它的矩阵元就是 $v_{ij} = \langle\xi_i|\alpha_j\rangle$. 于是, 定义一个矩阵 D, 它的矩阵元是 $d_{ij} = d_{ji} = |v_{ij}|^2$, 有

$$p_j^A = \sum_i |v_{ij}|^2 p_i^X = \sum_i d_{ji} p_i^X$$

也就是

$$\boldsymbol{p}^A = D\boldsymbol{p}^X \tag{3}$$

随机 (stochastic) 矩阵. 矩阵 B 的矩阵元记作 b_{ij}. 如果 $b_{ij} \geqslant 0$ 并且 $\sum_i b_{ij} = 1$, 即每一列矩阵元之和为 1, 那么 B 是随机矩阵. 如果在此基础上, B 进一步满足 $\sum_j b_{ij} = 1$, 即每一行矩阵元之和亦为 1, 那么 B 是双随机矩阵 (bistochastic) 矩阵. 2×2 的双随机矩阵的一般形式是

$$\begin{pmatrix} t & 1-t \\ 1-t & t \end{pmatrix}, \quad t \in [0,1]$$

对于更高维的空间, 有更多形式的双随机矩阵. 如果 u_{ij} 是某个酉矩阵的矩阵元, 而 $b_{ij} = |u_{ij}|^2$, 那么矩阵 B 是酉随机 (unistochastic) 矩阵. 显然, 酉随机矩阵一定是双随机矩阵, 反过来不一定成立.

随机矩阵将一组几率分布变为另一组几率分布. 双随机矩阵保持均匀分布的几率分布不变.

两个双随机矩阵相乘, 结果仍然是一个双随机矩阵. 双随机矩阵的乘法是封闭的, 但它们不构成一个群.

随机矩阵用于经典信息理论, 描述信号的传输. 如今在量子信息中亦有广泛应用.

下面的定理将几率向量的有序性与双随机矩阵联系在了一起.

定理 (Hardy, Littlewood and Pólya) $x^{\downarrow} \prec y^{\downarrow}$ 的充要条件是, 存在一个双随机矩阵 B, 使得 $x^{\downarrow} = By^{\downarrow}$. □

综合上面的分析, 可以看到, 密度矩阵的本征值构成的几率向量是最为有序的, 相应的经典熵是最小的, 这正好对应于量子熵.

从混合态的纯化来看, 给定系统 Q 的密度矩阵 ρ, 引入辅助系统, 为了避免与前面说到的观测量的符号弄混淆, 这里用 M 表示辅助系统. 随意选择 $\mathscr{H}^M$ 的一组基向量 $\{|\varphi_i\rangle\}$, 有标准纯化形式

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{n} \sqrt{\lambda_i}\, |\xi_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$$

这相当于说, 用投影算子 $\Pi_i^M = |\varphi\rangle\langle\varphi|$ 对辅助粒子作测量, 得到结果 i 的几率正是 λ_i, 与之对应的系统的量子态变为 $|\xi_i\rangle$. 也可以说, 对辅助粒子的测量导致了系统量子态的解构 $\{\lambda_i, |\xi_i\rangle\langle\xi_i|\}$.

为辅助粒子的 Hilbert 空间 $\mathscr{H}^M$ 选择另外一组基向量, 比如说观测量 A 的本征向量 $|\alpha_j\rangle$, 两组基向量之间的关系是

$$|\alpha_j\rangle = \sum_i |\xi_i\rangle\langle\xi_i|\, \alpha_j\rangle = \sum_i v_{ij}\, |\xi_i\rangle$$

$$|\xi_i\rangle = \sum_j |\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|\, \xi_i\rangle = \sum_j v_{ij}^*\, |\alpha_j\rangle$$

将 $|\Psi\rangle$ 改写为

$$|\Psi\rangle = \sum_j |\tilde{\psi}_j\rangle \otimes |\alpha_j\rangle$$

$$= \sum_j \left(\sum_i \sqrt{\lambda_i} v_{ij}^* |\xi_i\rangle \right) \otimes |\alpha_j\rangle$$

用投影算子 $|\alpha_j\rangle\langle\alpha_j|$ 对辅助粒子作测量, 得到结果 j 的几率是

$$p_j^A = \left\| \sum_i \sqrt{\lambda_i} v_{ij}^* |\xi_i\rangle \right\|^2 = \sum_i |v_{ij}|^2 \lambda_i$$

这实际上就是 (2) 式. 对辅助系统测量力学量 A, 导致了系统 Q 的密度矩阵另外一种形式的解构.

现在证明 Schmidt 分解形式

该形式对于任意两体量子系统的纯态都是成立的, 但是对于三体及三体以上的系统则不适用, 对于混合态也不适用. 下面我们给出 $2 \otimes 2$ 情形下的证明, 证明过程可以推广到高维情形.

任意的 $2 \otimes 2$ 的量子纯态可以在自然基向量 $|00\rangle$, $|01\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$ 上展开为

$$|\Psi\rangle = c_{00}|00\rangle + c_{01}|01\rangle + c_{10}|10\rangle + c_{11}|11\rangle, \quad \sum_{i,\mu=0}^{1} |c_{i\mu}|^2 = 1.$$

纯态 $|\Psi\rangle$ 的密度矩阵记作 $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, 粒子 A 的约化密度算符记作 $\rho^A = \mathrm{Tr}_B(\rho)$. 设 ρ^A 的两个正交归一的本征态为 $|e_0\rangle$ 和 $|e_1\rangle$, 相应的本征值为 p_0 和 p_1, 且 $p_0, p_1 > 0$, $p_0 + p_1 = 1$. 考虑对 A 粒子作酉变换

$$|0\rangle \longrightarrow |e_0\rangle, \quad |1\rangle \longrightarrow |e_1\rangle$$

在基向量 $|e_0\rangle$ 和 $|e_1\rangle$ 上, $|\Psi\rangle$ 改写为

$$|\Psi\rangle = |e_0\rangle|\tilde{\phi}_0\rangle + |e_1\rangle|\tilde{\phi}_1\rangle \tag{4}$$

其中 $|\tilde{\phi}_0\rangle$ 和 $|\tilde{\phi}_1\rangle$ 是空间 $\mathscr{H}^B$ 中的向量, 但尚未归一. 现在我们希望证明 $|\tilde{\phi}_0\rangle$ 和 $|\tilde{\phi}_1\rangle$ 是彼此正交的.

以 $|e_0\rangle$ 和 $|e_1\rangle$ 为 $\mathscr{H}^A$ 的基向量, 将 ρ 表示为

$$\rho = |e_0\rangle\langle e_0| \otimes |\tilde{\phi}_0\rangle\langle\tilde{\phi}_0| + |e_0\rangle\langle e_1| \otimes |\tilde{\phi}_0\rangle\langle\tilde{\phi}_1| + |e_1\rangle\langle e_0| \otimes |\tilde{\phi}_1\rangle\langle\tilde{\phi}_0| + |e_1\rangle\langle e_1| \otimes |\tilde{\phi}_1\rangle\langle\tilde{\phi}_1| \tag{5}$$

再来计算关于 A 粒子的约化密度矩阵. 注意到

$$\mathrm{Tr}\left[|\tilde{\phi}_i\rangle\langle\tilde{\phi}_j| \right] = \langle 0|\tilde{\phi}_i\rangle \langle\tilde{\phi}_j|0\rangle + \langle 1|\tilde{\phi}_i\rangle \langle\tilde{\phi}_j|1\rangle = \langle\tilde{\phi}_j|\tilde{\phi}_i\rangle, \quad i, j = 0, 1$$

约化密度矩阵 ρ^A 可以表示为

$$\rho^A = |e_0\rangle\langle e_0| \langle\tilde{\phi}_0|\tilde{\phi}_0\rangle + |e_0\rangle\langle e_1| \langle\tilde{\phi}_1|\tilde{\phi}_0\rangle + |e_1\rangle\langle e_0| \langle\tilde{\phi}_0|\tilde{\phi}_1\rangle + |e_1\rangle\langle e_1| \langle\tilde{\phi}_1|\tilde{\phi}_1\rangle$$

另一方面, 我们知道, 在表象 $\{|e_0\rangle, |e_1\rangle\}$ 中 ρ^A 是对角的, 即

$$\rho^A = p_0 |e_0\rangle\langle e_0| + p_1 |e_1\rangle\langle e_1|$$

将 ρ^A 的上述两种形式对比, 可以得到

$$\langle\tilde{\phi}_i|\tilde{\phi}_j\rangle = \delta_{ij} p_i$$

将 $|\tilde{\phi}_i\rangle$ 归一化, 令

$$|f_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{p_i}} |\tilde{\phi}_i\rangle$$

这相当于将 $\mathscr{H}^B$ 的基向量选择为 $\{|f_0\rangle, |f_1\rangle\}$. 回到 (4), 最终可以将 $|\Psi\rangle$ 写为

$$|\Psi\rangle = \sqrt{p_0} |e_0\rangle |f_0\rangle + \sqrt{p_1} |e_1\rangle |f_1\rangle \tag{6}$$

证明完毕. 另外, 如果两个空间的维数不相同, 设 $\dim(\mathscr{H}^A) < \dim(\mathscr{H}^B)$, 那么 ρ^B 不是满秩的, 有一些 $|f_\mu\rangle$ 不会出现在 Schmidt 分解形式中.

从 Schmidt 分解中, 我们还看到, 两体纯态的两个约化密度矩阵有相同的本征值.

References

[1] Nielsen, M. A. *Phys. Rev. A* **62**, 052308 (2000).

第五章　量子系统随时间的演化　I

Schrödinger 方程

Hamilton 量是时间演化的生成元. 经典力学中关于这方面的讨论见 Goldstein 书, Classical Mechanics, 9.6 节.

在量子力学中, 孤立的系统随时间的演化是一个酉变换过程, 时间演化算子是

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \tag{1}$$

这里, H 是系统的哈密顿量, 暂且假设 H 不显含时间.

量子态随时间的演化.

$$|\psi(0)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle = e^{-iHt/\hbar}\,|\psi(0)\rangle\,.$$

为了得到 $|\psi(t)\rangle$ 满足的方程, 对上式求时间的导数, 有

$$i\hbar\frac{d\,|\psi(t)\rangle}{dt} = H\,|\psi(t)\rangle \tag{2}$$

即 Schrödinger 方程.

几点说明.

- 从量子理论的发展历史来说, Schrödinger 首先提出了描述粒子空间波函数的具有波动形式的方程, 然后 Heisenberg 提出了矩阵形式, 再然后 Dirac 将这两种形式统一在变换理论中. 我们采用的是 Dirac 的从变换理论出发的叙述方式, 这与历史的发展顺序正好相反.
- 在方程 (2) 中, 我们并没有指明描述量子系统的 Hilbert 空间是怎样的, 这是抽象形式的 Schrödinger 方程. 对于具体的问题, 需要赋以相应的空间 —— 有限维的或是无限维的, 并选择特定的表象, 然后才能将 (2) 式表示为明确的形式 —— 关于时间的微分方程组或是关于时间和空间的偏微分方程.
- 在上述讨论中, 我们假设系统的哈密顿量不显含时间, 在这种情况下, 方程 (1) 和方程 (2) 是等价的. 而在一般情况下, 系统的哈密顿量可以显含时间, 那么我们应该求解 Schrödinger 方

程, 而不是直接运用时间演化变换 (1), 实际上, 在这种情况下, $U(t)$ 不易得到. 关于这一点, 以后在讨论含时问题的时候会给出具体的例子, 不过, 可以先看看 Sakurai 书 Modern quantum mechanics 72 页的内容.

(2) 式是右矢形式, 相应的左矢形式是

$$-i\hbar\frac{d\langle\psi(t)|}{dt} = \langle\psi(t)|H$$

用密度矩阵表示 $|\psi(t)\rangle$, 记作 $\rho_\psi(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$, 容易得到,

$$i\hbar\frac{d\rho_\psi(t)}{dt} = [H, \rho_\psi(t)].$$

对于混和态, 有相同的形式. 类似于经典力学中的 Liouville 方程.

能量表象 现在, 在具体的表象中写出方程 (2) 的形式. 设描述某个量子系统的 Hilbert 空间是有限维的 $\mathbb{C}^n$. 该系统的一个观测量是 $A = \sum_i a_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$. 在 A 表象中, $\mathscr{H}$ 的基向量是 $\{|\alpha_i\rangle\}$. 哈密顿量 $H = \sum_{i,j} h_{ij} |\alpha_i\rangle\langle\alpha_j|$. t 时刻的量子态 $|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t)|\alpha_i\rangle$. Schrödinger 方程写为

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_1(t)\\ \dot{c}_2(t)\\ \vdots\\ \dot{c}_N(t)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1N}\\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2N}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\\ h_{N1} & h_{N2} & \cdots & h_{NN}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1(t)\\ c_2(t)\\ \vdots\\ c_N(t)\end{pmatrix}.$$

N 个一阶微分方程组成的方程组. 各个微分方程之间有耦合, 很难解.

考虑选择 H 表象, 即能量表象 (惯用的说法). 在 H 表象中, H 是对角的, 表示为

$$H = \sum_j E_j |e_j\rangle\langle e_j|$$

E_j 是 H 的本征值, 相应的本征向量是 $|e_j\rangle$. 在能量表象中, 量子态在 $|e_j\rangle$ 上展开, 展开系数仍用 c_j 表示. 这时 Schrödinger 方程中的耦合被去除了. 容易求得

$$c_j(t) = c_j(0)e^{-iE_jt/\hbar}$$

实际上, 由于目前我们讨论的是不含时的 H, 求解 Schrödinger 方程等价于计算

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

或者用密度矩阵表示, 系统从初态 (纯态或者混合态) $\rho(0)$ 演化到 t 时刻的 $\rho(t)$,

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t).$$

如果系统的初态 $|\psi(0)\rangle$ 碰巧是 H 的某个本征态, 对应的本征值为 E, 即 $H|\psi(0)\rangle = E|\psi(0)\rangle$, 那么 t 时刻的量子态是

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

容易看到, $H|\psi(t)\rangle = E|\psi(t)\rangle$, 也就是说, 系统在以后任意时刻的量子态都是 H 的本征态, 且本征值仍然是 E, 量子态的变化只是体现在相位上, 这就是所谓的**定态** (stationary state).

如果初态 $|\psi(0)\rangle$ 不是 H 的本征态, 那么, 在 H 表象中, $H = \sum_j E_j |e_j\rangle\langle e_j|$, 时间演化算子是

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} = \sum_j e^{-iE_j t/\hbar} |e_j\rangle\langle e_j| .$$

具有对角形式

$$U(t) = \mathrm{diag}\left(e^{-iE_1 t/\hbar},\ \ e^{-iE_2 t/\hbar},\ \ \cdots,\ \ e^{-iE_N t/\hbar}\right)$$

系统的初态

$$|\psi(0)\rangle = \sum_j c_j(0)|e_j\rangle .$$

在 t 时刻,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j e^{-iE_j t/\hbar} c_j(0)|e_j\rangle .$$

如果在某个时刻 t, 测量系统的哈密顿量, 那么得到结果 E_j 的几率是

$$|c_j(t)|^2 = |e^{-iE_j t/\hbar} c_j(0)|^2 = |c_j(0)|^2$$

系统处于某个能级的几率没有改变. 当然, 系统的哈密顿量的期望值也没有改变.

注 如果看到了 $|\psi\rangle = \sum_j c_j|e_j\rangle$, 很可能说这样的话: 系统以几率 $|c_0|^2$ 处于基态, 以几率 $|c_1|^2$ 处于第一激发态, 如此等等. 如果这么说, 那么就应该把相应的量子态表示为混和态,

$$\rho = \sum_j |c_j|^2 |e_j\rangle\langle e_j| .$$

从 $|\psi\rangle$ 到 ρ 暗含了对哈密顿量的测量过程. □

知道了态的演化, 接下来需要知道力学量的一些事情. 我们能说力学量也随时间变化么?

- 主动观点和被动观点只能选择其一.
- 目前知道的事实是:
  - 量子态随时间的演化, $|\psi(0)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle$.
  - 力学量是用来观测的, 观测结果是力学量的本征值, 以一定的几率出现.

那么, 测量结果的几率是如何随时间变化的?

在时刻 $t = 0$, 测量力学量 A 得到结果 a_i 的几率是

$$p_i(0) = |\langle\alpha_i|\psi(0)\rangle|^2$$

在时刻 t, 得到结果 a_i 的几率

$$p_i(t) = |\langle \alpha_i|\psi(t)\rangle|^2$$

测量结果的几率随时间变化.

$$p_i(t) = \left|\, \langle \alpha_i|U(t)|\psi(0)\rangle \,\right|^2$$

酉变换 $U(t)$ 或者向右作用于 $|\psi(0)\rangle$, 或者向左作用于 $\langle\alpha_i|$. 这也就是说, 或者选择主动观点, 或者选择被动观点. 目前选择了主动观点, 于是, 力学量 A 不随时间变化.

在主动观点下, 可以说力学量的期望值随时间的变化. t 时刻的态 $|\psi(t)\rangle$. 力学量 A 在 t 时刻的期望值 $\langle A\rangle(t) = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle$. 期望值满足的方程是

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle(t) = \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle$$

这里, $\left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle$ 的来源是, 力学量 A 可能显含时间, 它的形式中可能包含随时间变化的参数. 例如, 含时谐振子的势能是 $\frac{1}{2}m\omega(t)^2x^2$, 其中频率 ω 随时间变化.

在 H 表象中,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)\,|e_j\rangle\,, \quad c_j(t) = c_j(0)e^{-iE_jt/\hbar}.$$

可以直接计算 $\langle A\rangle(t)$,

$$\langle A\rangle(t) = \sum_{n,m} c_n(0)c_m^*(0)\,\langle e_m|\,A\,|e_n\rangle\; e^{i(E_m-E_n)t/\hbar}$$

若 A 不显含时间, 矩阵元 $\langle e_m|\,A\,|e_n\rangle$ 不依赖于时间. $\langle A\rangle(t)$ 随时间的变化由一系列振荡项相加组成, 各个振荡项的频率是

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}.$$

频率 ω_{mn} 仅仅与 H 有关, 与力学量 A 无关, 与初态无关. 频率 ω_{mn} 被称为 **Bohr 频率**.

如果矩阵元 $\langle e_m|\,A\,|e_n\rangle$ $(m\neq n)$ 为零, 那么就没有相应的振荡现象. 力学量 A 的期望值不随时间变化, 是守恒量. 实际上, 既然矩阵元 $\langle e_m|\,A\,|e_n\rangle$ $(m\neq n)$ 为零, 表明 A 在能量表象中是对角的, $[A,H]=0$, 这是守恒量应该满足的条件. 所有与哈密顿量对易的力学量在能量表象中具有对角矩阵的形式, 它们的期望值不随时间变化. 量子态的演化在守恒量的期望值的意义上具有 "稳定" 的表现.

如果矩阵元 $\langle e_m|\,A\,|e_n\rangle$ 不为零, 或者说 $[A,H]\neq 0$, 那么 A 的期望值随时间变化. 量子态 $|\psi(t)\rangle$ 的变化相对于力学量 A 而言不是 "稳定" 的. 在 $|\psi(t)\rangle$ 观测 A, 得到某个结果 a_k (对应的本征向量是 $|\alpha_k\rangle$) 的几率是

$$p(a_k) = |\,\langle\alpha_k|\psi(t)\rangle\,|^2 = \left|\sum_j c_j(0)e^{-iE_jt/\hbar}\,\langle\alpha_k|e_j\rangle\,\right|^2$$

这个几率随时间改变. 我们说, 对于力学量 A 而言, 可以观测到**跃迁**现象 —— 不同时刻观测到 a_k 的几率是不同的.

自旋 1/2 粒子在磁场中的运动

本节讨论最简单的量子系统随时间的演化: 自旋 1/2 粒子处于磁场 $\boldsymbol{B}$ 中.

电磁学中, 面积为 A 的电流环产生的磁矩

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{A}I$$

而电流强度可以表示为

$$I = \frac{q}{T} = \frac{qv}{2\pi a}$$

令 $\boldsymbol{s} = \boldsymbol{r} \times m\boldsymbol{v}$, $s = rmv = amv$. 电流强度可以重写为

$$I = \frac{qs}{2Am}, \quad A = \pi a^2$$

磁矩

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q\boldsymbol{s}}{2m}$$

量子情形下, 角动量用算子表示, 记作 $\boldsymbol{S}$.

对于电子, $q = e < 0$. 还要考虑电子的 g 因子 g_e.

$$\boldsymbol{\mu}_e = g_e \frac{e\boldsymbol{S}}{2m_e} = -\frac{g_e \mu_B}{\hbar}\boldsymbol{S}$$

其中 μ_B 是 Bohr 磁子

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e}$$

因子 g_e 的近似值为 2, 代入 $\boldsymbol{\mu}_e$, 并且把角动量 $\boldsymbol{S}$ 写为 $\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$,

$$\boldsymbol{\mu}_e = \frac{e\boldsymbol{S}}{m_e} = \frac{e\hbar}{2m_e}\boldsymbol{\sigma}$$

在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中, 电子的自旋部分的哈密顿量是

$$H = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{B} = -\frac{e\hbar}{2m_e}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B}$$

不含时情形

令 $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{n}$, $\omega_0 = \frac{|e|B}{m_e}$,

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \sigma_n = \omega_0 \, S_n = \omega_0 \, \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{S}.$$

H 的本征值是 $\pm\frac{1}{2}\hbar\omega_0$. 基态是 $|n-\rangle$, 激发态是 $|n+\rangle$. $|n\pm\rangle$ 是 σ_n 的本征向量, 当然也是 H 的本征向量.

设 $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$, $H = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z$. 设系统的初态

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}}\cos\frac{\theta}{2} \\ \\ e^{i\frac{\phi}{2}}\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

$|\psi(0)\rangle$ 的 Bloch 向量是

$$\boldsymbol{r}(0) = (\sin\theta\cos\phi,\ \sin\theta\sin\phi,\ \cos\theta).$$

求解 Schrödinger 方程

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_0(t)\\ \dot{c}_1(t)\end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_0(t)\\ c_1(t)\end{pmatrix}.$$

立即有

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\ e^{-i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2}\ e^{i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}}\end{pmatrix}$$

或者, 直接计算

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle\,.$$

从初态和末态的形式, 可以构造出 $U(t)$ 的矩阵. 实际上,

$$U(t) = e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}\sigma_z} = \mathbb{1}\cos\frac{\omega_0 t}{2} - i\sigma_z\sin\frac{\omega_0 t}{2}$$

又可以用密度矩阵表示,

$$i\hbar\frac{d\rho(t)}{dt} = [H, \rho(t)],$$

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t).$$

$$\rho(0) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{r}(0)\cdot\boldsymbol{\sigma}).$$

考虑 $U(t)\sigma_i U^\dagger(t)$, $i = x, y, z$, 可以得到

$$r_1(0)\sigma_x + r_2(0)\sigma_y + r_3(0)\sigma_z \xrightarrow{U(t)}$$

$$\sigma_x\big[r_1(0)\cos\omega_0 t - r_2(0)\sin\omega_0 t\big]$$

$$+\sigma_y\big[r_1(0)\sin\omega_0 t + r_2(0)\cos\omega_0 t\big]$$

$$+\sigma_z\ r_3(0)$$

于是获得 Bloch 向量的变换,

$$\boldsymbol{r}(0) \longrightarrow \boldsymbol{r}(t) = R(z, \omega_0 t)\boldsymbol{r}(0).$$

力学量的期望值, $\langle \boldsymbol{S} \rangle$,

$$\left.\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \tfrac{\hbar}{2} \sin\theta \cos(\phi + \omega_0 t), \\ \langle S_y \rangle &= \tfrac{\hbar}{2} \sin\theta \sin(\phi + \omega_0 t), \\ \langle S_z \rangle &= \tfrac{\hbar}{2} \cos\theta. \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

与 Bloch 向量一样, 绕 z 轴旋转. 旋转的角速度是 ω_0, 与磁感应强度的大小 B 有关.

还可以注意到, 在 (3) 中, S_z 的期望值不随时间变化, 而 S_x 和 S_y 的期望值是随时间变化的 —— 它们与 H 不对易.

Bloch 向量的三个分量对应于 (实际上是正比于) 自旋角动量的三个分量的期望值. 上述结果可以类比于经典电磁学中的磁矩在匀强磁场中的运动行为, 即 Larmor 进动, 我们可以将 ω_0 称为 Larmor 频率.

含时情形

随时间变化的磁场, 自旋 1/2 粒子的哈密顿量分别是

$$\boldsymbol{B}(t) = B_0 \boldsymbol{e}_z + B_1(\cos\omega t \boldsymbol{e}_x + \sin\omega t \boldsymbol{e}_y)$$

$$H(t) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z + \frac{1}{2}\hbar\omega_1(\sigma_x \cos\omega t + \sigma_y \sin\omega t)$$

$$\omega_0 = \frac{|e|B_0}{m}, \quad \omega_1 = \frac{|e|B_1}{m}.$$

哈密顿量显含时间, 它的瞬时本征向量与时间有关, 不能作为 Hilbert 空间的基向量. 需要直接求解 Schrödinger 方程.

可以直接求解, 不过, 可以考虑一下旋转坐标系. $\boldsymbol{B}(t)$ 绕 z 轴旋转, 在一个绕 z 轴旋转的参考系看来, 磁场的旋转角速度会发生变化. 在绕 z 轴以角速度 ω 旋转的参考系中, 磁场不旋转.

我们用酉矩阵 $V(t)$ 表示绕 z 轴旋转 ωt 的酉变换, 其形式是

$$V(t) = \exp\left\{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z\right\}.$$

参考系的变化, 视作表象的变换. 通过 $V(t)$, 变换到旋转参考系中.

$$\tilde{H}(t) = V^\dagger(t) H(t) V(t) = \frac{1}{2}\hbar\omega_1\sigma_x + \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z,$$

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = V^\dagger(t) \ |\psi(t)\rangle \, .$$

变换后哈密顿量将不再显含时间.

变换前的 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt}=H(t)\left|\psi(t)\right\rangle$$

将 $\left|\psi(t)\right\rangle=V\ \left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle$ 代入, 有

$$i\hbar\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt}=i\hbar V\frac{d\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle}{dt}+\frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_z\left|\psi(t)\right\rangle=H(t)\left|\psi(t)\right\rangle$$

在第二个等号的两端左乘 $V^{\dagger}(t)$, 在最右端将出现 $\tilde{H}(t)$, 再将 $\tilde{H}(t)$ 的形式代入, 得到在旋转参考系中的方程,

$$i\hbar\frac{d\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle}{dt}=\left[\frac{1}{2}\hbar\omega_1\sigma_x+\frac{1}{2}\hbar(\omega_0-\omega)\sigma_z\right]\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle$$

$$\text{令}\quad\Delta=\omega-\omega_0$$

$$H_{\text{eff}}=\frac{1}{2}\hbar\omega_1\sigma_x-\frac{1}{2}\hbar\Delta\sigma_z=\frac{1}{2}\,\hbar\Omega\,\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

$$\Omega=\sqrt{\omega_1^2+\Delta^2},\quad\boldsymbol{n}=(\sin\theta,\ 0,\ \cos\theta)$$

$$\sin\theta=\frac{\omega_1}{\sqrt{\omega_1^2+\Delta^2}},\quad\cos\theta=\frac{-\Delta}{\sqrt{\omega_1^2+\Delta^2}}$$

$$U_{\text{eff}}(t)=\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}H_{\text{eff}}\,t\right\}=\mathbb{1}\cos\frac{\Omega t}{2}-i\sigma_x\frac{\omega_1}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}+i\sigma_z\frac{\Delta}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}$$

最终,

$$\left|\psi(t)\right\rangle=\exp\left\{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z\right\}\ U_{\text{eff}}(t)\ \left|\psi(0)\right\rangle$$

这里, 时间演化算子 $U(t)$ 的形式不能简单地表示为

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t')\,\mathrm{d}t'\right\}$$

这是因为, 不同时刻的 $H(t)$ 不对易. 需要求解 Schrödinger 方程.

第五章　量子系统随时间的演化　Ⅱ

此前计算了在绕 z 轴匀角速度旋转的大小不变的磁场中, 自旋 $1/2$ 的粒子的量子态随时间的演化. 需要注意的是,

- 从 $|\psi(0)\rangle$ 到 $|\psi(t)\rangle$ 的酉变换的形式不再具有简单的形式.
- 最好从 Schrödinger 方程出发求解 t 时刻的态.

下面讨论这样两个问题:

1. 跃迁几率.
2. 绝热过程.

假设粒子的初态是 $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$, 即初始时刻粒子的自旋方向指向 $+z$. 如果在 t 时刻测量 σ_z (或者说自旋角动量的 z 分量), 那么得到 -1 的结果 (或者说得到自旋向下) 的几率是多少? 这个几率就是**跃迁几率**, 记作 $p_{+1\to-1}$.

$$p_{+1\to-1} = |\langle 1|\psi(t)\rangle|^2$$

内积

$$\begin{aligned}\langle 1|\psi(t)\rangle &= \langle 1|\exp\left\{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z\right\} U_{\text{eff}}(t)\ |\psi(0)\rangle \\ &= e^{i\frac{\omega t}{2}}\langle 1|U_{\text{eff}}(t)|0\rangle \\ &= e^{i\frac{\omega t}{2}}\left(-i\frac{\omega_1}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right)\end{aligned}$$

所以, 跃迁几率是

$$p_{+1\to-1} = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2}\sin^2\frac{\Omega t}{2}$$

当 $\frac{\Omega t}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \cdots$ 时, 跃迁几率达到最大, 最大值为

$$\frac{\omega_1^2}{\omega_1^2+\Delta^2} \leqslant 1$$

如果 $\Delta = 0$, 那么跃迁几率为 1. 我们称这种情况为**共振**. 在共振时刻, 粒子的自旋指向发生翻转. 此时 $\Omega = \omega_1$. 注意到 $\omega_1 \propto B_1$. 足够强的横向磁场可以在短时间内实现翻转.

下图显示的是非共振情形, 参数选择为

$$\theta = \frac{\pi}{6}, \quad \omega_0 = 1, \quad \omega = 0.8, \quad \omega_1 = 1, \quad \Delta = -0.2$$

接近共振的时候, Bloch 向量描绘的路径就不是很混乱了. 下图对应的的参数是

$$\theta = \frac{\pi}{6}, \quad \omega_0 = 1, \quad \omega = 0.99, \quad \omega_1 = 1, \quad \Delta = -0.01$$

当初态为 $|0\rangle$ 的时候, Bloch 向量的变化如下图所示.

再考虑绝热过程. 在以后讨论近似方法的时候会对绝热过程进行更详细的分析, 这里只给出一个形象的图像.

逐步减小横向磁场绕 z 转动的频率, 即减小 ω. 而且, 在 $t=0$ 时刻, 我们让粒子初态的 Bloch 方向与磁场 $\boldsymbol{B}(0)$ 一致, 此时它们都位于 xz 平面内, 与 z 轴的夹角为 θ.

选择如下参数

$$\theta=\frac{\pi}{4},\quad \omega_0=1,\quad \omega=0.1,\quad \omega_1=1,\quad B=1.1$$

在下图中可以看出, 磁场绕 z 轴旋转的频率设为 $\omega=0.1$. 我们看到, 随着磁场的进动, Bloch 向量在磁场方向周围晃动, 并大体上跟随进动. 如果把 ω 设置得更小, 那么 Bloch 向量基本上与磁场同步进动.

稍作进一步的说明. 哈密顿量 $H(t)$ 显含时间. 在任意某个时刻 t, 瞬时本征值和本征向量分别记作 $E_j(t)$ 和 $|\varphi_j(t)\rangle$, $j = 0, 1$,

$$H(t)\,|\varphi_j(t)\rangle = E_j(t)\,|\varphi_j(t)\rangle$$

注意, 这里的 $|\varphi_j(t)\rangle$ 并不描述系统量子态随时间的演化, 而只是求解 $H(t)$ 的本征态得到的结果. 量子态随时间的演化是由 Schrödinger 方程 $i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = H(t)\,|\psi(t)\rangle$ 决定的. 我们当然可以把 $|\psi(t)\rangle$ 表示为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)\,|\varphi_j(t)\rangle$$

然后把上述表达式代入 Schrödinger 方程, 接着求解 $c_j(t)$. 这种做法留待讨论绝热近似的时候再说. 在这里我们只是形象地描述一下绝热过程.

当 ω 很小的时候, 如果初态 $|\psi(0)\rangle = |\varphi_0(0)\rangle$, 那么在以后某个时刻 t, 有 $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \simeq |\varphi_0(t)\rangle\langle\varphi_0(t)|$. 这反映在 t 时刻的 Bloch 向量基本上与该时刻的磁场方向重合, 而该时刻的磁场方向就是 $|\varphi_0(t)\rangle$ 的 Bloch 向量的方向.

表象的变换会改变 Schrödinger 方程的形式么?

如果只是形式上的变换, 即数学运算意义上的, 不涉及时间的变换, 那么有

$$i\hbar\frac{d\left|\psi(t)\right\rangle}{dt}=H\left|\psi(t)\right\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\left|\psi(t)\right\rangle=U\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle,\quad H=U\tilde{H}U^{\dagger}$$

$$i\hbar\frac{d\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle}{dt}=\tilde{H}\left|\psi(t)\right\rangle$$

这时, Schrödinger 方程的形式不变. 但是, 上面的含时问题中用到的表象变换与时间有关, 方程的形式因之发生改变.

在主动观点中, 量子态随时间变化, 力学量不随时间变化.

考虑测量力学量 A 得到结果 a_j 的几率随时间的变化,

$$p_j(t)=\left|\left\langle\alpha_j|U(t)|\psi(0)\right\rangle\right|^2 \tag{1}$$

主动观点: 将酉变换 $U(t)$ 作用于初始时刻的态矢量 $|\psi(0)\rangle$, 使之变化到 t 时刻的 $|\psi(t)\rangle$.

Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\left|\psi(t)\right\rangle}{\mathrm{d}t}=H(t)\left|\psi(t)\right\rangle$$

考虑到 $|\psi(t)\rangle=U(t)\,|\psi(0)\rangle$, Schrödinger 方程还可以表示为

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t}=H(t)U(t) \tag{2}$$

在被动观点中, 将酉变换 $U(t)$ 向左作用于 Hilbert 空间的对偶空间的基向量 $\langle\alpha_j|$, 令

$$\left\langle\alpha_j(t)\right|=\left\langle\alpha_j\right|U(t)$$

或者

$$\left|\alpha_j(t)\right\rangle=U^{\dagger}(t)\left|\alpha_j\right\rangle \tag{3}$$

(3) 式描述的是 $|\alpha_j\rangle$ 的变换.

在几率 $p_j(t)$ 的表达式 (1) 中, 对于内积 $\langle\alpha_j|U(t)|\psi(0)\rangle$ 就有了两种看法. 可以说是 $|\psi(t)\rangle$ 和 $|\alpha_j\rangle$ 的内积, 而且 $|\psi(t)\rangle$ 是量子态向着时间的正方向演化的结果; 也可以说是 $|\psi(0)\rangle$ 和 $|\alpha_j(t)\rangle$ 的内积, 不过 $|\alpha_j(t)\rangle$ 是 A 的本征向量 $|\alpha_j\rangle$ 向着时间的负方向演化的结果. 结合在经典力学中对刚体运动的研究方式, 很自然地把后一种看法说成是被动观点.

力学量 A 随时间的变化是

$$A(t)=U^{\dagger}(t)A(0)U(t),\quad A(0)=A \tag{4}$$

仍然认为这是力学量随时间变化的积分形式. 对 $A(t)$ 求时间的导数, 得到 Heisenberg 运动方程,

$$\begin{aligned}\frac{dA(t)}{dt} &= \frac{\mathrm{d}U^\dagger(t)}{\mathrm{d}t}A(0)U(t) + U^\dagger(t)A(0)\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t} + U^\dagger(t)\frac{\partial A(0)}{\partial t}U(t)\\ &= -\frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t)H(t)A(0)U(t) + \frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t)A(0)H(t)U(t) + U^\dagger(t)\frac{\partial A(0)}{\partial t}U(t)\\ &= \frac{1}{i\hbar}[A^H, H^H] + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)^H\end{aligned}$$

其中

$$A^H = U^\dagger(t)AU(t), \quad H^H = U^\dagger(t)HU(t) = H \text{ (当 } H \text{ 不显含时间时)}$$

$$\left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)^H \equiv U^\dagger(t)\frac{\partial A(0)}{\partial t}U(t)$$

Heisenberg 运动方程

$$\frac{dA^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A^H, H^H] + \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)^H \tag{5}$$

可以与力学量的期望值的方程比较.

$$\begin{aligned}&\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\operatorname{Tr}(\rho(t)A)\\ =&\operatorname{Tr}\left(\frac{d\rho(t)}{dt}A + \rho(t)\frac{\partial A}{\partial t}\right)\\ =&\operatorname{Tr}\left(\frac{1}{i\hbar}[H,\rho(t)]A + \rho(t)\frac{\partial A}{\partial t}\right)\\ =&\operatorname{Tr}\left(\frac{1}{i\hbar}\big(H\rho(t)A - \rho(t)HA\big) + \rho(t)\frac{\partial A}{\partial t}\right)\\ =&\operatorname{Tr}\left(\frac{1}{i\hbar}\big(\rho(t)AH - \rho(t)HA\big) + \rho(t)\frac{\partial A}{\partial t}\right)\\ =&\operatorname{Tr}\left(\frac{1}{i\hbar}\rho(t)[A,H] + \rho(t)\frac{\partial A}{\partial t}\right)\\ =&\frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle\end{aligned}$$

第五章　　量子系统随时间的演化　Ⅲ

守恒量, 运动常数

如果 $\frac{dA^H}{dt}=0$, 那么力学量 A 是守恒量.

如果 $\frac{\partial A}{\partial t}=0$, 那么

$$[A^H,H^H]=0 \implies A \text{ 是守恒量}$$

如果 H 不显含时间,

$$\frac{\partial A}{\partial t}=0 \ \& \ [A,H]=0 \implies A \text{ 是守恒量}$$

也可以在主动观点的 Schrödinger 绘景中说守恒量. 如果

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle+\left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle=0$$

那么 A 在任意时刻的期望值都不随时间改变, A 是守恒量.

不论在经典力学还是在量子力学中, 系统的守恒量都具有重要意义. Noether 定理从经典力学一直延伸到量子场论.

Heisenberg 图像, $\mathbb{C}^2$ 空间

以自旋 1/2 粒子在磁场中运动为例. 令

$$U(t)=e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}=\mathbb{1}\cos\frac{\omega t}{2}-i\sigma_z\sin\frac{\omega}{2}=\mathrm{diag}\begin{pmatrix}e^{-i\frac{\omega t}{2}} & e^{i\frac{\omega t}{2}}\end{pmatrix}$$

初态 $|\psi(0)\rangle=e^{-i\frac{\phi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle+e^{i\frac{\phi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$, 在 t 时刻,

$$|\psi(t)\rangle=e^{-i\frac{\phi+\omega t}{2}}\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle+e^{i\frac{\phi+\omega t}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$$

或者, 用密度矩阵和 Bloch 向量表示,

$$\rho(0)=\frac{1}{2}(\mathbb{1}+\sigma_x\sin\theta\cos\phi+\sigma_y\sin\theta\sin\phi+\sigma_z\cos\theta)$$

$$\Downarrow$$

$$\rho(t)=\frac{1}{2}\left[\mathbb{1}+U(t)\sigma_x U^\dagger(t)\sin\theta\cos\phi+U(t)\sigma_y U^\dagger(t)\sin\theta\sin\phi+U(t)\sigma_z U^\dagger(t)\cos\theta\right]$$

$$U(t)\sigma_x U^\dagger(t)=\sigma_x\cos\omega t+\sigma_y\sin\omega t$$

$$U(t)\sigma_y U^\dagger(t)=-\sigma_x\sin\omega t+\sigma_y\cos\omega t$$

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

$$\Downarrow$$

$$\rho(t)=\frac{1}{2}(\mathbb{1}+\sigma_x\sin\theta\cos(\phi+\omega t)+\sigma_y\sin\theta\sin(\phi+\omega t)+\sigma_z\cos\theta)$$

$$\boldsymbol{r}(0)=\begin{pmatrix}\sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{r}(t)=\begin{pmatrix}\sin\theta\cos(\phi+\omega t) & \sin\theta\sin(\phi+\omega t) & \cos\theta\end{pmatrix}$$

在上述计算中, 出现了对 σ_x 的变换, $U(t)\sigma_x U^\dagger(t)$, 以及类似的对 σ_y 的变换. 但这只是数学推导中遇到的一个计算过程, 并不意谓着 σ_x 或 σ_y 作为力学量将随时间发生改变. 实际上, 在用 Bloch 向量表示密度矩阵的时候, 表达式一端的密度矩阵表示的是量子态, 另一端虽然出现了 Pauli 矩阵, 但不能把它们看作力学量 —— 量子态和力学量是全然不同的概念.

在考虑 t 时刻的量子态 ρ 的具体形式的时候, 我们应该将它表示为

$$\rho(t)=\frac{1}{2}[\mathbb{1}+r_x(t)\sigma_x+r_y(t)\sigma_y+r_z(t)\sigma_z] \tag{1}$$

在这种表示中, 三个 Pauli 矩阵前面的系数随时间变化, 可以类比于纯态情形下的演化过程:

$$|\psi(0)\rangle=\sum_j c_j(0)\,|\alpha_j\rangle \;\longrightarrow\; |\psi(t)\rangle=\sum_j c_j(t)\,|\alpha_j\rangle$$

共同点是, 随时间的变化体现在态的展开系数上, 纯态的右矢形式在基向量 $|\alpha_j\rangle$ 展开, 密度矩阵在单位阵和三个 Pauli 矩阵上展开.

在 (1) 中, 随时间变化的展开系数 $r_{x,y,z}(t)$ 是力学量 $\sigma_{x,y,z}$ 在 t 时刻的量子态 $\rho(t)$ 中的期望值, 即 $r_{x,y,z}(t)=\langle\psi(t)|\,\sigma_{x,y,z}\,|\psi(t)\rangle$. 它们与初始时刻的 Bloch 向量的分量之间的关系是

$$\begin{pmatrix}r_x(t)\\ r_y(t)\\ r_z(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\omega t & -\sin\omega t & 0\\ \sin\omega t & \cos\omega t & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}r_x(0)\\ r_y(0)\\ r_z(0)\end{pmatrix}$$

这也就是

$$\boldsymbol{r}(t) = \mathrm{Rotation}(z, \omega t)\boldsymbol{r}(0)$$

另一方面, 期望值又可以写为

$$r_x(t) = \langle\psi(0)|\, U^\dagger(t)\, \sigma_x\, U(t)\, |\psi(0)\rangle = \langle\psi(0)|\sigma_x(t)|\psi(0)\rangle$$

这里, 在 Heisenberg 绘景中, σ_x 变为 $\sigma_x(t) = U^\dagger(t)\, \sigma_x\, U(t)$. 可以看到

$$\begin{pmatrix} \sigma_x(t) \\ \sigma_y(t) \\ \sigma_z(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\omega t & -\sin\omega t & 0 \\ \sin\omega t & \cos\omega t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x(0) \\ \sigma_y(0) \\ \sigma_z(0) \end{pmatrix}$$

表现出与 Bloch 向量相同的变换关系.

量子测量过程, 仪器的初态和观测量的选择

设系统 Q 和仪器 M 之间的相互作用哈密顿量是

$$H^{\mathrm{int}} = -\hbar g \sigma_z^Q \otimes \sigma_y^M \tag{2}$$

其中 g 是耦合常数, 设 $g > 0$, 它的大小反映了相互作用的强弱. 在不致引起混淆的时候, 上标 Q 和 M 将被省去. 略去系统和仪器自身的哈密顿量, 两体系统的时间演化算符是

$$U(t) = e^{-iH^{\mathrm{int}}t/\hbar} = \begin{pmatrix} \cos gt & \sin gt & 0 & 0 \\ -\sin gt & \cos gt & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos gt & -\sin gt \\ 0 & 0 & \sin gt & \cos gt \end{pmatrix} \tag{3}$$

首先, 我们要说明将整体的酉演化设为 (3) 的意义. 为此, 计算系统的被测力学量 σ_z^S 在海森堡图像中随时间的演化. 将 σ_z^S 写作 $\sigma_z \otimes \mathbb{1}$. 在海森堡图像中,

$$(\sigma_z \otimes \mathbb{1})(t) = U^\dagger(t)(\sigma_z \otimes \mathbb{1})U(t) = \sigma_z \otimes \mathbb{1} = (\sigma_z \otimes \mathbb{1})(0)$$

上述结果缘于 $\sigma_z \otimes \mathbb{1}$ 与 H^{int} 对易. 因此, 在 (2) 式的相互作用下, 被测力学量 σ_z^S 不随时间变化. 这是一件好事情, 因为我们不希望在系统和仪器发生相互作用的过程中被测力学量有所改变, 不希望被测力学量受到测量过程的干扰. 至于在 H_{int} 中出现的 σ_y^M, 作如此设定的原因只是为了在计算上的简洁 —— 酉变换 $U(t)$ 是一个实数矩阵. 完全可以把 σ_y^M 替换成任意方向上的泡利矩阵 σ_n^M, 不过这会影响到仪器的初态的选择, 在下面的讨论中将看到这一点.

现在再来计算仪器的一些典型的力学量随时间的变化. 将 σ_i^M 写作 $\mathbb{1} \otimes \sigma_i$, 在海森堡图像中,

$$(\mathbb{1} \otimes \sigma_x)(t) = U^\dagger(t)(\mathbb{1} \otimes \hat{\sigma}_x)U(t) = (\mathbb{1} \otimes \sigma_x)\cos 2gt - (\sigma_z \otimes \sigma_z)\sin 2gt \tag{4}$$

$$(\mathbb{1}\otimes\sigma_y)(t)=U^\dagger(t)(\mathbb{1}\otimes\sigma_y)U(t)=\mathbb{1}\otimes\sigma_y \tag{5}$$

$$(\mathbb{1}\otimes\sigma_z)(t)=U^\dagger(t)(\mathbb{1}\otimes\sigma_z)U(t)=(\mathbb{1}\otimes\sigma_z)\cos 2gt+(\sigma_z\otimes\sigma_x)\sin 2gt \tag{6}$$

上面的三个结果可以帮助我们设定仪器的初态. 例如, 可以分以下三种情况讨论.

1. 设仪器的初态是 $|\phi\rangle=|0\rangle$, 即 σ_z 的本征态. 系统的初态依旧是 $|\psi\rangle=c_0|0\rangle+c_1|1\rangle$. 根据 (4)–(6) 式, 计算 t 时刻仪器力学量的期望值.

$$\langle\mathbb{1}\otimes\sigma_x\rangle(t)=\langle 0|\sigma_x|0\rangle\cos 2gt-\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle\langle 0|\sigma_z|0\rangle\sin 2gt=-\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle\sin 2gt$$

$$\langle\mathbb{1}\otimes\sigma_y\rangle(t)=\langle 0|\sigma_y|0\rangle=0$$

$$\langle\mathbb{1}\otimes\sigma_z\rangle(t)=\langle 0|\sigma_z|0\rangle\cos 2gt+\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle\langle 0|\sigma_x|0\rangle\sin 2gt=\cos 2gt$$

如果在 t 时刻我们得到了仪器的力学量 σ_x^M 的期望值, 那么根据上面的第一个方程就可以知道系统的被测力学量 σ_z^S 在初态 $|\psi\rangle$ 中的期望值, 即

$$\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle=-\frac{\langle\mathbb{1}\otimes\sigma_x\rangle(t)}{\sin 2gt} \tag{7}$$

而仪器的 σ_y^M 和 σ_z^M 在 t 时刻的期望值则不能提供关于 $\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle$ 的任何信息.

2. 设仪器的初态是 $|\phi\rangle=|x_+\rangle$, 即 σ_x 的本征态, 类似的计算给出

$$\langle\mathbb{1}\otimes\sigma_x\rangle(t)=\cos 2gt$$

$$\langle\mathbb{1}\otimes\sigma_y\rangle(t)=0$$

$$\langle\mathbb{1}\otimes\sigma_z\rangle(t)=\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle\sin 2gt$$

只有仪器的 σ_z^M 是有用的,

$$\langle\psi|\sigma_z|\psi\rangle=\frac{\langle\mathbb{1}\otimes\sigma_z\rangle(t)}{\sin 2gt} \tag{8}$$

3. 设仪器的初态是 $|\phi\rangle=|y_+\rangle$, 即 σ_y 的本征态, 对此, 我们有

$$\langle\mathbb{1}\otimes\sigma_x\rangle(t)=\langle\mathbb{1}\otimes\sigma_z\rangle(t)=0,\quad\langle\mathbb{1}\otimes\sigma_y\rangle(t)=1$$

从仪器身上看不到关于被测系统的任何信息.

通过以上讨论, 我们大体上知道了如何设定仪器的初态. 概括地说, 如果系统和仪器的相互作用具有 $\sigma_z\otimes\sigma_y$ 的形式, 那么我们需要将仪器的初态选择为与 σ_y^M 互补的力学量 (比如 σ_x^M 或 σ_z^M) 的本征向量. 然后, 相互作用之后的仪器的第三个互补力学量的期望值可以反映被测力学量在系统的初态中的期望值.

几何相

相对相位的观测

首先讨论量子态的相位.

两个量子态, $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, 二者的相位差定义为[1].

$$\boxed{\Delta\phi = \arg\langle\psi_1|\psi_2\rangle} \tag{9}$$

这是总的相位差, 可以在干涉仪中观察到. 在量子力学中, 相位并不是一个力学量. 即便如此, 也是要借助测量仪器才能反映相位的变化.

图 1 是 MZ 干涉仪的示意图. 入射粒子从左下角进入干涉仪. 粒子的状态由两部分组成: 描述空间自由度的量子态和描述内禀自由度的量子态. 我们要观测的是后者的相位变化.

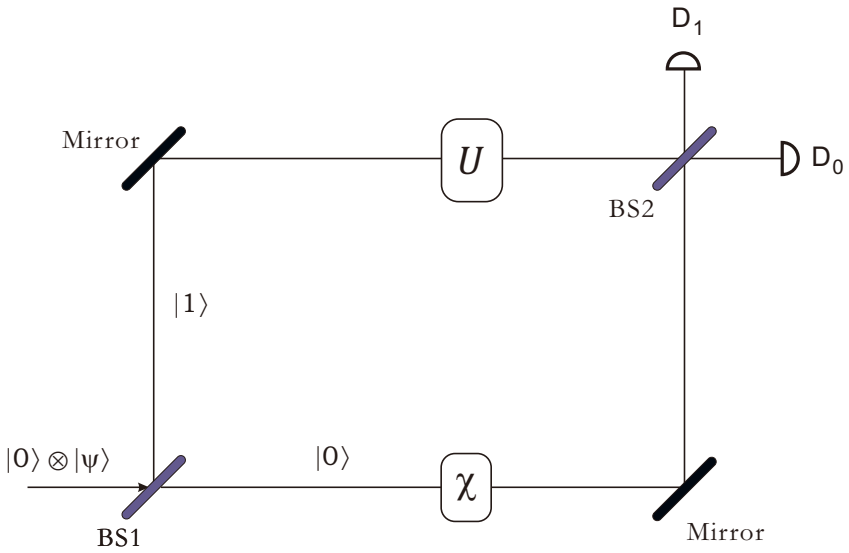


图 1

设想入射粒子沿水平 (horizontal) 方向运动, 我们将它的空间量子态示意性地将它表示为 $|0\rangle$. 于是入射粒子的量子态是

$$|0\rangle \otimes |\psi\rangle$$

其中 $|\psi\rangle$ 是粒子的自旋量子态.

逐步写出演化过程.

$$|0\rangle \otimes |\psi\rangle \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |\psi\rangle$$

[1] S. Pancharatnam, Generalized theory of interference, and its applications. Proc. Indian Acad. Sci. **44**, 247-262 (1956).

$$
\begin{aligned}
&\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\chi} |0\rangle \otimes |\psi\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle \otimes |\psi\rangle \\
&\longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\chi} |1\rangle \otimes |\psi\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle \otimes U |\psi\rangle \\
&\longrightarrow \frac{1}{2} e^{i\chi} (|0\rangle - |1\rangle) \otimes |\psi\rangle + \frac{1}{2} (|0\rangle + |1\rangle) \otimes U |\psi\rangle \\
&= \frac{1}{2} |0\rangle \left(e^{i\chi} \mathbb{1} + U\right) |\psi\rangle + \frac{1}{2} |1\rangle \left(- e^{i\chi} \mathbb{1} + U\right) |\psi\rangle
\end{aligned}
$$

如果在第二个 BS 的水平方向上测量, 将得到几率

$$
\begin{aligned}
p_0 &= \frac{1}{4} \langle\psi| \left(e^{-i\chi} \mathbb{1} + U^\dagger\right) \left(e^{i\chi} \mathbb{1} + U\right) |\psi\rangle \\
&= \frac{1}{4} \big(2 + e^{-i\chi} \langle\psi| U |\psi\rangle + e^{i\chi} \langle\psi| U^\dagger |\psi\rangle \big) \\
&= \frac{1}{2} \left[1 + \mathrm{Re}\big(e^{-i\chi} \langle\psi| U |\psi\rangle \big)\right]
\end{aligned}
$$

令 $\langle\psi|\psi'\rangle = \langle\psi| U |\psi\rangle = we^{i\gamma}$, 相位 γ 就是 $|\psi\rangle$ 和 $U|\psi\rangle$ 之间的相位差.

$$
p_0 = \frac{1}{2} \big[(1 + w\cos(\gamma - \chi)\big]
$$

- 可见度 (visibility) 的定义是
$$
\mathcal{V} = \frac{p_0^{\max} - p_0^{\min}}{p_0^{\max} + p_0^{\min}}
$$
- 调节 χ, 有 $p_0^{\max} = \frac{1}{2}(1+w)$, $p_0^{\min} = \frac{1}{2}(1-w)$, 于是 $\mathcal{V} = w$. 就是 $|\psi\rangle$ 和 $|\psi'\rangle$ 之间的重叠.
- 总的相位差是
$$
\gamma = \arg \langle\psi|\psi'\rangle
$$
调节 χ, 看到 p_0 的峰值, 这个 χ 值就是 $\gamma \mod 2\pi$.

至此, 两个量子态之间的内积有了操作上的意义, 它们的重叠程度 $|\langle\psi|\psi'\rangle|$ 对于干涉现象中的可见度, 相位差 $\arg\langle\psi|\psi'\rangle$ 对应于粒子出现在 MZ 干涉仪的某个输出端的最大几率.

光学中干涉现象指的是在接收屏上看到了明暗相间的条纹, 或者说光子在空间的几率分布呈现周期性的变化. 现在讨论的干涉现象指的是记录到的粒子数随相位 χ 的变化. 可见度的周期性变化确实是通过调节 χ 来体现的, 但是, $\langle\psi|\psi'\rangle$ 对干涉现象有重要影响. 如果 $|\psi'\rangle = e^{i\phi}|\psi\rangle$, 那么虽然 $|\psi\rangle$ 和 $|\psi'\rangle$ 之间存在整体相位差 ϕ, 但是可见度达到最大值 1; 如果二者正交, 那么可见度为零, 而且, 在正交情形下, 缺乏整体相位差的定义.

例 设 $|\psi(0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$, 经历酉变换 $U(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}$, 在 t 时刻的量子态是

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}}\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\frac{\omega t}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle \tag{10}$$

$|\psi(0)\rangle$ 和 $|\psi(t)\rangle$ 的内积是

$$\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\omega t}{2} - i\cos\theta\sin\frac{\omega t}{2} = we^{i\gamma},$$

$$w = \sqrt{\cos^2\frac{\omega t}{2} + \cos^2\theta\sin^2\frac{\omega t}{2}},$$

$$\gamma = -\arctan\Big[\cos\theta\tan\frac{\omega t}{2}\Big].$$

□

MZ 干涉仪有多种变形,

- 分束器 BS 可以是对称的, 也可以不是对称的.
- 输入的量子态可以是纯态, 也可以是混合态.
- 不同路径上粒子的内禀自由度经历的变换可以是酉变换, 也可以是非酉的.

MZ 干涉仪的作用和意义远非观测干涉现象.

- 路径和干涉现象之间的互补性关系.
- 互补性原理和不确定原理之间的联系.
- 体现不同形式的不确定关系.

计算 MZ 干涉仪的一个变例. BS1 **的变换不是** Hadamard **变换**.

$$|H\rangle \longrightarrow c_0|H\rangle + c_1|V\rangle, \quad |V\rangle \longrightarrow -c_1^*|H\rangle + c_0^*|V\rangle$$

而 BS2 仍然是 $50:50$ 的 Hadamard 变换. 在这种情况下, 在探测器 D_0 上得到的几率是

$$\begin{aligned} p_0 &= \frac{1}{2}\big(1 + c_0^*c_1e^{-i\chi}\langle\psi|U|\psi\rangle + c_0c_1^*e^{i\chi}\langle\psi|U^\dagger|\psi\rangle\big) \\ &= \frac{1}{2}\big[1 + 2w|c_0c_1^*|\cos(\gamma+\phi-\chi)\big] \end{aligned}$$

其中 $c_0^*c_1 = |c_0^*c_1|e^{i\phi}$. 这时, 可见度是

$$\mathcal{V} = 2w|c_0^*c_1|$$

如果 $U = \mathbb{1}$, 那么 $w = 1$, 可见度是 $\mathcal{V} = 2|c_0^*c_1|$, 实际上就是 xy 平面内的某个观测量 σ_ϕ 的期望值,

$$\sigma_\phi = \sigma_x\cos\phi + \sigma_y\sin\phi$$

$$\langle\sigma_\phi\rangle = 2|c_0^*c_1|$$

当 $|c_0| = |c_1| = \frac{1}{\sqrt{2}}$ 的时候, $|c_0^* c_1|$ 有最大值 $\frac{1}{2}$. BS1 是对称的时候, 得到最大的可见度.

如果量子系统的内禀自由度处于混合态呢?

在干涉仪中, 量子系统 (空间自由度 $\otimes$ 内禀自由度) 经历的变换是

$$\begin{aligned}\mathbb{U}(t) =& \big(U_{BS2} \otimes \mathbb{1}\big) \\ & \cdot \big(|H\rangle\langle H| \otimes U(t) + |V\rangle\langle V| \otimes \mathbb{1}\big) \\ & \cdot \big(\sigma_x \otimes \mathbb{1}\big) \\ & \cdot \big(|H\rangle\langle H| \otimes e^{i\chi}\mathbb{1} + |V\rangle\langle V| \otimes \mathbb{1}\big) \\ & \cdot \big(U_{\mathrm{BS1}} \otimes \mathbb{1}\big)\end{aligned}$$

几何相

时间演化 $U(t)$ 的过程中, 总的相位改变 $\gamma(t) = \arg\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle$ 等于动力学相位么? 总相位 $\gamma(t)$ 是可积的么?

什么是动力学相? 记作 $\gamma_d(t)$.

先考虑无穷小过程, 从 t 到 $t + dt$. $|\psi(t)\rangle \longrightarrow |\psi(t + dt)\rangle$. 相位的改变是

$$d\gamma_d = \arg\langle\psi(t)|\psi(t + dt)\rangle$$

注意到

$$|\psi(t + dt)\rangle = |\psi(t)\rangle + |\dot{\psi}(t)\rangle\, dt, \tag{11}$$

$$\langle\psi(t)|\psi(t + dt)\rangle = 1 + \langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle\, dt \tag{12}$$

而 $\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle$ 是纯虚数, 这是因为

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1,$$

$$\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle + \langle\dot{\psi}(t)|\psi(t)\rangle = 0.$$

所以

$$d\gamma_d(t) = \arctan\big(- i\,\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle\, dt\big) \approx -i\,\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle\, dt,$$

$$\dot{\gamma}_d = -i\,\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle$$

从 $t=0$ 到 τ 时刻的动力学相就是

$$\gamma_d(\tau) = -i\int_0^\tau \langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle\, dt = -\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau \langle\psi(t)|\, H(t)\,|\psi(t)\rangle\, dt$$

但是, 总相位 $\gamma(\tau)$ 却不一定等于总的动力学相, 二者的差是几何相,

$$\boxed{\gamma_g(\tau) = \gamma(\tau) - \gamma_d(\tau)} \tag{13}$$

例 对于 t 时刻的量子态 (10),

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}}\cos\frac{\theta}{2}\,|0\rangle + e^{i\frac{\omega t}{2}}\sin\frac{\theta}{2}\,|1\rangle$$

动力学相是

$$\gamma_d(\tau) = -i\int_0^\tau \Big(-i\frac{\omega}{2}\Big)\cos\theta dt = -\frac{\omega\tau}{2}\cos\theta$$

几何相 $\gamma_g(\tau)$,

$$\begin{aligned}\gamma_g(\tau) =& \gamma(\tau) - \gamma_d(\tau)\\ =& -\arctan\Big[\cos\theta\tan\frac{\omega t}{2}\Big] + \frac{\omega\tau}{2}\cos\theta\end{aligned}$$

特别地, 对于循环演化 (cyclic evolution), $\omega T = 2\pi$,

$$\psi(0) = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)| = |\psi(T)\rangle\langle\psi(T)| = \psi(T),$$

但是 $|\psi(T)\rangle = -\,|\psi(0)\rangle$, 总的相位差是 $\gamma(T) = \pi$, 动力学相 $\gamma_d(T) = -\pi\cos\theta$,

$$\gamma_g(T) = \pi(1+\cos\theta) \mod 2\pi.$$

形象地说, 几何相等于路径围成的立体角的一半. 对于非循环的演化, 用测地线连接起点和终点, 构成立体角, 仍然有 "立体角的一半" 的结论. □

第五章　量子系统随时间的演化　Ⅳ

几何相的意义

立体角在哪里? 测地线在什么空间中?

Ray space. 简单地说, Bloch 球面.

量子态 (纯态) 被表示为 Hilbert 空间中的归一化的向量.

$$|\psi\rangle \in \mathbb{C}^N, \quad \langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

$|\psi\rangle$ 在球面 $\mathcal{S}^{2N-1}$ 上.

$|\psi\rangle$ 和 $e^{i\phi}|\psi\rangle$ 经常被看作同一个量子态, 经常说, 它们没有物理意义上的差别. 但是, 这是针对测量结果的几率而言的.

在数学上, $|\psi\rangle$ 和 $e^{i\phi}|\psi\rangle$ 对应于同一条 ray, 属于同一个等价类.

Ray space 实际上是投影空间, $\mathbb{C}\mathbf{P}^{N-1}$, 对应于 $N-1$ 维的复空间.

$$\text{Ray space:} \quad \left\{e^{i\phi}|\psi\rangle \,|\phi \in \mathbb{R}\right\}$$

用纤维丛的语言来说, ray space 是纤维丛这种结构中的底空间 (base space), 纯态 $|\psi\rangle$ 是其上的纤维, 具有纤维结构 $U(1)$.

一个形象的理解是, $|\psi\rangle \longrightarrow |\psi\rangle\langle\psi|$. 于是, 众多不同的态 $e^{i\phi}|\psi\rangle$ 具有同一形式的 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$.

在随时间演化的过程中, $|\psi(t)\rangle$ 在 Hilbert 空间中经历了一条路径 $\mathcal{C}$,

$$\mathcal{C} = \{|\psi(t)\rangle \,|t \in [0,\tau]\}$$

路径 $\mathcal{C}$ 在 ray space 中的投影记作 C. 而对于给定的路径 C, 存在无穷多条 $\mathcal{C}$ 与之相对应.

规范变换, $|\psi\rangle \longrightarrow e^{i\phi}|\psi\rangle$ 不会改变 ray space 中对应的点.

几何相的意义就在于

- $\gamma_g(\tau)$ 是规范不变的. 仅仅依赖于 ray space 中的路径.

一些细节

- 如果 $|\psi(0)\rangle$ 和 $|\psi(\tau)\rangle$ 正交, 则几何相没有定义.
- 平行输运, $\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle = 0$.
- 混合态的几何相. 至少两种观点, 尚无统一结论.
- 关于几何相的文献:
  - A. Bohm, A. Mostafazadeh, et.al, The Geometric Phase in Quantum Systems, Springer (2003)
  - D. Chruściński and A. Jamiołkowski, Geometric Phases in Classical and Quantum Mechanics, Birkhäuser (2004)
  - A. Shapere and F. Wilczek, Geometric Phases in Physics, World Scientific (1989)

以自旋 1/2 粒子为例, 设哈密顿量为

$$H(t) = \frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_z + f(t)\mathbb{1}$$

其中 $f(t)$ 是时间的实函数. 这虽然是含时哈密顿量, 但是相应的 Schrödinger 方程却容易求解. 初态 $|\psi(0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$, 则 t 时刻的量子态是

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iF(t)}\left[e^{-i\frac{\omega t}{2}}\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\frac{\omega t}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle\right]$$

其中整体相位

$$F(t) = \int_0^t f(t')\,\mathrm{d}t'$$

在 Bloch 球面上, $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ 的 Bloch 向量仍然沿着纬度运动, 有无穷多条 Hilbert 空间的路径对应于同一条 Bloch 球面上的路径.

假设

$$f(t) = -\frac{\omega}{2}\cos\theta$$

那么 $F(t) = -\frac{\omega t}{2}\cos\theta$, 在 t 时刻,

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega t}{2}(1-\cos\theta)}\cos\frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\omega t}{2}(1+\cos\theta)}\sin\frac{\theta}{2}\end{pmatrix}$$

动力学相随时间的变化率为

$$\dot{\gamma}_d(t) = -i\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle = 0$$

因此, 在这种情况下, 任意两个时刻的量子态之间的动力学相位差始终为零, 这种演化过程被称为平行输运 (parallel transport). 对于平行输运过程, 总的相位差等于几何相 (不考虑初态和末态正交的情形).

对于底空间中给定的一条路径, 在 Hilbert 空间中总是存在唯一一条平行输运的路径.

另外, 考虑增大磁场的强度, 则 ω 增大, 形象地说, 量子态的 Bloch 向量绕 z 轴进动得更快了. 但是, 只要 Bloch 球面上的路径是固定的, 则不论沿这条路径的运动时间是多少, 几何相是相同的. 因此, 几何相是 "几何的", 反映了底空间中路径的几何性质, 与动力学运动无关.

自旋 $1/2$ 粒子与环境相互作用的简单模型

在讨论两体系统的整体酉变换的时候, 我们计算了 $2 \otimes 2$ 两体系统的量子态在酉变换 $e^{i\tau(\sigma_z \otimes \sigma_y)}$ 的作用下的结果, 大致过程是这样的:

$$\text{系统和仪器的初态分别是 } |\psi\rangle \text{ 和 } |\varphi\rangle$$

$$\text{两体系统的变换结果是 } |\Psi(\tau)\rangle = e^{i\tau(\sigma_z \otimes \sigma_y)} \left(|\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle\right)$$

$$\text{系统的量子态是 } \rho^Q(\tau) = \mathrm{Tr}_M \, |\Psi(\tau)\rangle\langle\Psi(\tau)| = \begin{pmatrix} c_0^2 & c_0 c_1 \cos 2\tau \\ c_0 c_1 \cos 2\tau & c_1^2 \end{pmatrix}$$

这是一个双值系统 (系统 Q) 与另一个双值系统 (被视作仪器) 相互作用后系统的状态. 我们还说过, 系统的状态从 $|\psi\rangle$ 到 $\rho^Q(\tau)$ 的演化过程属于开放量子系统的演化. 开放量子系统的演化关注的是系统与环境相互作用后系统的状态. 如果用一个简单的双值系统来模拟环境, 那么这只是一个过于粗糙的模型. 下面考虑稍微复杂, 但还是可以计算的情况.

设想环境是由 N 个两能级系统构成的.

$$N \text{ 个两能级系统 } \sim \text{ 环境}$$

设第 k 个两能级系统的 Hilbert 空间的基向量是 $\{|0_k\rangle, |1_k\rangle\}$, 而且, N 个两能级系统之间没有相互作用.

假设系统 Q 和 第 k 个两能级系统之间的相互作用是

$$H^{QE_k} = -g_k \sigma_z^Q \otimes \sigma_z^{E_k} \tag{1}$$

系统 Q 和环境 E 的整体的 Hamilton 量是

$$H^{QE} = \sum_{k=1}^{N} H^{QE_k} \tag{2}$$

它的具体形式是

$$\begin{aligned} H^{QE} = & - g_1 \sigma_z^Q \otimes \sigma_z^{E_1} \otimes \mathbb{1}^{E_2} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}^{E_N} \\ & - g_2 \sigma_z^Q \otimes \mathbb{1}^{E_1} \otimes \sigma_z^{E_2} \otimes \mathbb{1}^{E_3} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}^{E_N} \end{aligned}$$

$$- g_3\sigma_z^Q \otimes \mathbb{1}^{E_1} \otimes \mathbb{1}^{E_2} \otimes \sigma_z^{E_3} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}^{E_N} + \cdots \tag{3}$$

注意到上式右端中的各项都是彼此对易的.

系统和环境随时间的演化是 (以下令 $\hbar = 1$)

$$U^{QE}(t) = \exp\big\{ - iH^{QE}t\big\}$$

为了得到 $U^{QE}(t)$ 的具体形式, 可以对 (3) 式的右端逐项计算. 例如, 第一项给出如下酉变换,

$$\begin{aligned} U_1(t) &= \exp\big\{ig_1t(\sigma_z^Q \otimes \sigma_z^{E_1})\big\} \otimes \mathbb{1}^{E_2} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}^{E_N} \\ &= \mathbb{1}^Q \otimes \bigotimes_{k=1}^{N} \mathbb{1}^{E_k} \cos g_1t + i\sigma_z^Q \otimes \sigma_z^{E_1} \otimes \mathbb{1}^{E_2} \otimes \cdots \mathbb{1}^{E_N} \sin g_1t \end{aligned}$$

第二项给出的酉变换是

$$U_2(t) = \mathbb{1}^Q \otimes \bigotimes_{k=1}^{N} \mathbb{1}^{E_k} \cos g_2t + i\sigma_z^Q \otimes \mathbb{1}^{E_1} \otimes \sigma_z^{E_2} \otimes \mathbb{1}^{E_3} \otimes \cdots \otimes \mathbb{1}^{E_N} \sin g_2t$$

其它各项给出类似的形式, $U_k(t)$. 它们都是控制酉变换: 当系统的量子态是 $|0\rangle$ 时, 对 E_k 进行酉变换 $\left(\begin{smallmatrix} e^{ig_kt} & 0 \\ 0 & e^{-ig_kt} \end{smallmatrix}\right)$; 当系统的量子态是 $|1\rangle$ 时, 对 E_k 进行酉变换 $\left(\begin{smallmatrix} e^{-ig_kt} & 0 \\ 0 & e^{ig_kt} \end{smallmatrix}\right)$. 根据这个规则, 容易计算系统和环境作为一个整体的演化结果.

系统和环境的整体初态是

$$|\Psi^{QE}(0)\rangle = |\psi^Q\rangle \otimes |\mathcal{E}(0)\rangle$$

其中 $|\psi^Q\rangle = a\,|0\rangle + b\,|1\rangle$, $|\mathcal{E}(0)\rangle$ 是环境的初态, 设为

$$|\mathcal{E}(0)\rangle = \bigotimes_{k=1}^{N} \big(\alpha_k\,|0_k\rangle + \beta_k\,|1_k\rangle\big) \tag{4}$$

这是一个 "大" 的纯的直积态.

计算 Q 与 E_k 的相互作用以及酉变换对初态的影响, 这相当于考虑两体系统的演化.

$$\begin{aligned} & U_k(t)\Big[(a\,|0\rangle + b\,|1\rangle) \otimes (\alpha_k\,|0_k\rangle + \beta_k\,|1_k\rangle)\Big] \\ =& \exp\big\{ig_kt\ \sigma_z^Q \otimes \sigma_z^{E_k}\big\}\Big[a\alpha_k\,|0\rangle \otimes |0_k\rangle + a\beta_k\,|0\rangle \otimes |1_k\rangle \\ & \qquad + b\alpha_k\,|1\rangle \otimes |0_k\rangle + b\beta_k\,|1\rangle \otimes |1_k\rangle\Big] \\ =& a\,|0\rangle \otimes \Big[\alpha_k\ e^{ig_kt}\,|0_k\rangle + \beta_k\ e^{-ig_kt}\,|1_k\rangle\Big] \\ & + b\,|1\rangle \otimes \Big[\alpha_k\ e^{-ig_kt}\,|0_k\rangle + \beta_k\ e^{ig_kt}\,|1_k\rangle\Big] \end{aligned}$$

考虑了 Q 与所有的 E_k 之间的相互作用和时间演化之后, 系统和环境的整体量子态是

$$\begin{aligned}
&|\Psi^{QE}(t)\rangle \\
=&a\,|0\rangle\otimes\bigotimes_{k=1}^{N}\Big[\alpha_k\ e^{ig_kt}\,|0_k\rangle+\beta_k\ e^{-ig_kt}\,|1_k\rangle\Big] \\
&+b\,|1\rangle\otimes\bigotimes_{k=1}^{N}\Big[\alpha_k\ e^{-ig_kt}\,|0_k\rangle+\beta_k\ e^{ig_kt}\,|1_k\rangle\Big]
\end{aligned}$$

定义

$$|\mathcal{E}_0(t)\rangle=\bigotimes_{k=1}^{N}\Big[\alpha_k\ e^{ig_kt}\,|0_k\rangle+\beta_k\ e^{-ig_kt}\,|1_k\rangle\Big], \tag{5}$$

$$|\mathcal{E}_1(t)\rangle=\bigotimes_{k=1}^{N}\Big[\alpha_k\ e^{-ig_kt}\,|0_k\rangle+\beta_k\ e^{ig_kt}\,|1_k\rangle\Big]. \tag{6}$$

将 $|\Psi^{QE}(t)\rangle$ 重新改写为

$$|\Psi^{QE}(t)\rangle=a\,|0^Q\rangle\otimes|\mathcal{E}_0(t)\rangle+b\,|1^Q\rangle\otimes|\mathcal{E}_1(t)\rangle\,. \tag{7}$$

现在, 通过求迹把环境 E 去除, 得到 Q 的状态. 先定义一个函数 $z(t)$,

$$z(t)=\prod_{k=1}^{N}\Big[\cos 2g_kt+i(|\alpha_k|^2-|\beta_k|^2)\sin 2g_kt\Big]$$

它实际上就是 $|\mathcal{E}_0(t)\rangle$ 和 $|\mathcal{E}_1(t)\rangle$ 之间的内积,

$$\begin{aligned}
&\langle\mathcal{E}_1(t)|\mathcal{E}_0t)\rangle \\
=&\prod_{k=1}^{N}\Big[|\alpha_k|^2\ e^{i2g_kt}+|\beta_k|^2\ e^{-i2g_kt}\Big] \\
=&\prod_{k=1}^{N}\Big[\cos 2g_kt+i(|\alpha_k|^2-|\beta_k|^2)\sin 2g_kt\Big] \\
=&z(t).
\end{aligned}$$

系统和环境相互作用后系统的量子态记作 ρ^Q, 具体形式是

$$\rho^Q(t)=\mathrm{Tr}_E\,|\Psi^{QE}(t)\rangle\langle\Psi^{QE}(t)| \tag{8}$$

$$=|a|^2\,|0\rangle\langle 0|+z(t)ab^*\,|0\rangle\langle 1|+z^*(t)a^*b\,|1\rangle\langle 0|+|b|^2\,|1\rangle\langle 1|$$

$$=\begin{pmatrix}|a|^2 & z(t)ab^*\\ z^*(t)a^*b & |b|^2\end{pmatrix}. \tag{9}$$

非对角项随时间变化. 分析 $z(t)$ 的性质.

- 初始时刻 $t=0$, $z(0)=1$.
- $|z(t)|^2=\prod_{k=1}^{N}\left[\cos^2 2g_kt+(|\alpha_k|^2-|\beta_k|^2)^2\sin^2 2g_kt\right]\leqslant 1$.

容易看到, 随着 N 的增大, $|z(t)|$ 更快地衰减到 0. 虽然 $|z(t)|$ 在本质上是一个周期函数, 但是, 如果 g_k 的取值是随机的, 那么 $|z(t)|$ 的周期将会很长, 重新回到初值 1 是一件遥遥无期的事. 见图 1.

在 (9) 式所示的 ρ^Q 中, 非对角项的模在短时间内衰减到零.

$$\rho^Q\longrightarrow|a|^2\,|0\rangle\langle 0|+|b|^2\,|1\rangle\langle 1|\,.$$

这时, 系统的状态变成了对角形式的混合态. 这是环境对系统的量子态的影响所产生的结果. Zurek 曾用这个模型讨论了环境导致的超选择规则[1].

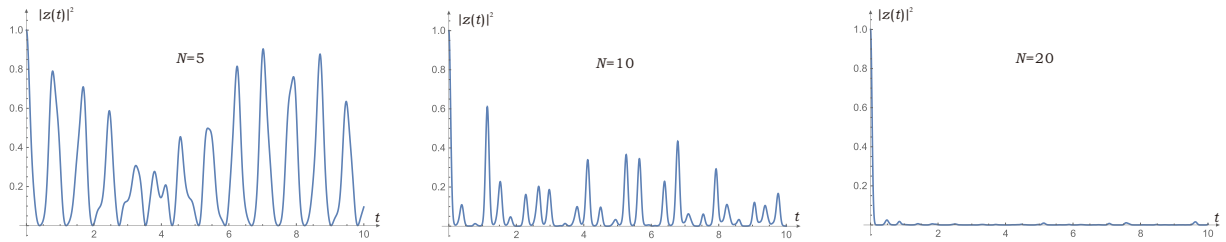


图 1

现在, 我们用上面讨论的模型解释以前的一个问题. 在 Chapter 4-2 中, 我们讨论了最简单的测量模型 —— 被测系统 Q 是一个双值系统, 并且用一个双值系统扮演测量仪器 M. 假设系统和仪器达到如下形式的 pre-measurement state,

$$|\Psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle\otimes|0\rangle+|1\rangle\otimes|1\rangle)=\frac{1}{\sqrt{2}}(|z{+}\rangle\otimes|z{+}\rangle+|z{-}\rangle\otimes|z{-}\rangle)\tag{10}$$

其中直积的次序是 系统 $\otimes$ 仪器. 而上述形式可以等价地表示为

$$|\Psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|x{+}\rangle\otimes|x{+}\rangle+|x{-}\rangle\otimes|x{-}\rangle)\tag{11}$$

然后我们说, 如果观测仪器的力学量 σ_z^M, 那么应该利用 (10) 式. 当看到 σ_z^M 的观测结果为 $+1$ 或 -1 的时候, 就可以推知系统的观测量 σ_z^Q 的值分别为 $+1$ 或 -1, 相应的几率都是 $\frac{1}{2}$.

另一方面, 如果我们观测仪器的力学量 σ_x^M, 那么就应该利用 (11) 式, 获得系统的观测量 σ_x^Q 的取值以及几率.

这样一来,

我们似乎可以随意地选择仪器的观测量, 以实现对系统的不同的观测量的测量. (12)

[1] 参看W. H. Zurek, Pointer basis of quantum apparatus: Into what mixture does the wave packet collapse? Physical Review D **24**, 1516-1525 (1981); Environment-induced superselection rules. Physical Review D **26**, 1862-1880 (1982). 以及综述 W. H. Zurek, Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. Reviews of Modern Physics **75**, 715 (2003).

这个 “似乎” 的说法是会带来很大麻烦的. 我们知道, 对系统的某个观测量作测量的时候, 需要特定的实验过程, 也就是说, 需要在特定的表象中进行, 不能在相同的实验过程中测量不对易的观测量. 可是现在, 当系统和仪器达到 (10) 或 (11) 的形式之后 —— 这是由某个特定的实验过程决定的, 我们竟然可以对仪器的不同的观测量作测量, 进而实现对系统的不同的 (甚至是不对易的) 的观测量的测量, 这岂不是对量子力学基本原理的颠覆? 要反驳这个观点其实并不困难, 注意到, 只是对于形如 (10) 或 (11) 的测量前 (pre-measurement) 的量子态, 我们才可能 (仅仅是可能) 提出这样一个会带来麻烦的问题 (12), 而对于更为一般的测量前的量子态, 则不可能做到对两个不对易的观测量进行严格测量. 例如, 设测量前的量子态为

$$\alpha\,|0\rangle\otimes|0\rangle+\beta\,|1\rangle\otimes|1\rangle$$

其中 $|\alpha|$ 和 $|\beta|$ 都不等于 $\frac{1}{\sqrt{2}}$. 这个形式可以成功地实现对 σ_z^Q 的测量, 但是, 如果企图通过测量 σ_x^M 实现对系统的 σ_x^Q 测量, 那么

$$\begin{aligned}&\alpha\,|0\rangle\otimes|0\rangle+\beta\,|1\rangle\otimes|1\rangle\\=&\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\,|0\rangle+\beta\,|1\rangle)\otimes|x+\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\,|0\rangle-\beta\,|1\rangle)\otimes|x-\rangle\end{aligned}$$

测量 σ_x^M 的结果只是平庸的等几率分布. 量子测量是要面对未知量子态的, 不可能在系统量子态未知的情况下, 经由系统和仪器的相互作用和演化总是得到形如 (10) 或 (11) 的测量前的量子态. 因此, 从测量的角度说, 观点 (12) 是不成立的.

但是, 事情并没有结束 (我们经常会说这句让人有点反感的话). 以上分析和讨论只是在 Hilbert 空间中转悠, 在态矢量的不同表示形式上兜圈子, 而量子测量的结果终究要表现在经典层面上. 也就是说, 仪器必须与环境接触, 受环境的影响, 最终体现出明确的现象. 在下面的讨论中, 我们将看到, 环境的存在和对仪器的影响决定了仪器的哪一个观测量是有用的, 对它的观测是切实可行的. 也就是说, 在有环境影响的情况下, 不是仪器的任意某个观测量都是有用的.

设想系统和仪器达到了如 (10) 所示的量子态, 然后, 仪器 M 和环境 E 之间有相互作用, 但是系统 Q 没有受到环境 E 的影响. 仪器和环境之间的相互作用的形式与 (2) 类似, 不过是把上标 QE 改为 ME.

$$H^{ME}=\sum_{k=1}^{N}H^{ME_k}\tag{13}$$

实际上, 这里考虑的是由 Q, M 和 E 组成三体量子系统. 环境的初态是 $|\mathcal{E}(0)\rangle$, 由 (4) 式给出, 随时间的演化过程是

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{2}}(|0^Q\rangle\otimes|0^M\rangle+|1^Q\rangle\otimes|1^M\rangle)\otimes|\mathcal{E}(0)\rangle\\\longrightarrow&\frac{1}{\sqrt{2}}\,|0^Q\rangle\otimes|0^M\rangle\otimes|\mathcal{E}_0(t)\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}\,|1^Q\rangle\otimes|1^M\rangle\otimes|\mathcal{E}_1(t)\rangle\end{aligned}\tag{14}$$

其中 $|\mathcal{E}_0(t)\rangle$ 和 $\mathcal{E}_1(t)$ 分别由 (5) 和 (6) 给出.

接着考虑对 M 的 σ_z^M 作测量,

测量 σ_z^M 的结果	相应的系统和环境的状态
$+1$	$\|0^Q\rangle \otimes \|\mathcal{E}_0(t)\rangle$
-1	$\|1^Q\rangle \otimes \|\mathcal{E}_1(t)\rangle$

不论测量 σ_z^M 得到什么结果, 系统和环境都是处于毫无关联的直积态, 就是说, 在测量 σ_z^M 的时候, 环境虽在, 却不会与被测系统 Q 产生任何关联, 在这种情况下, 环境就像不存在一样.

再考虑另外一种情况, 测量 σ_x^M. 为此, 将 (14) 改写为

$$\frac{1}{2}\big[\,|0^Q\rangle \otimes |\mathcal{E}_0(t)\rangle + |1^Q\rangle \otimes |\mathcal{E}_1(t)\rangle\,\big] \otimes |x+\rangle + \frac{1}{2}\big[\,|1^Q\rangle \otimes |\mathcal{E}_0(t)\rangle - |1^Q\rangle \otimes |\mathcal{E}_1(t)\rangle\,\big] \otimes |x-\rangle$$

这里, 为了看得更清楚, 在上式中调整了直积的次序, 将仪器放在了最后. 看看测量 σ_x^M 的结果以及相应的系统和环境的状态.

测量 σ_x^M 的结果	相应的系统和环境的状态
$+1$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\big[\,\|0^Q\rangle \otimes \|\mathcal{E}_0(t)\rangle + \|1^Q\rangle \otimes \|\mathcal{E}_1(t)\rangle\,\big]$
-1	$\frac{1}{\sqrt{2}}\big[\,\|1^Q\rangle \otimes \|\mathcal{E}_0(t)\rangle - \|1^Q\rangle \otimes \|\mathcal{E}_1(t)\rangle\,\big]$

这下麻烦了. 在测量 σ_x^M 得到 ± 1 的时候, 系统和环境都处于纠缠态. 我们不可能把这两个纠缠态表示为 $|x\pm\rangle \otimes |$环境的某个状态$\rangle$ 这样的直积形式. 因此, 当仪器和环境有 (13) 所示的相互作用时, 只要仪器的观测量不是 σ_z^M, 都会导致系统和环境处于纠缠态. 这是一个很微妙的现象, 虽然在我们的事先给出的设定中, 系统和环境之间没有发生相互作用, 但是, 借助对仪器的不同的观测方式, 却是可以建立系统和环境之间的量子关联, 即系统和环境处于纠缠态. 而且, 对仪器的不同的观测方式会带来系统和环境之间不同程度的纠缠. 例如, 测量 σ_z^M, 系统和环境之间没有纠缠; 测量 σ_x^M, 系统和环境之间的纠缠达到最大 (不一定是最大纠缠态).

现在可以看到, 在相互作用 (13) 的影响下, 仪器的观测量 σ_x^M 不是一个 "好" 的观测量, 它无法逃脱环境的影响. 如果对这个 "不好" 的观测量进行测量, 那么将间接地导致系统和环境的关联, 也就不能实现对系统的任何观测量的严格测量.

还可以换一个视角看待上述结论. 在三体量子态 (14) 中, 对环境求迹. 注意到环境的量子态 $|\mathcal{E}_0(t)\rangle$ 和 $|\mathcal{E}_1(t)\rangle$ 是基本上正交的. 得到系统和仪器的量子态 ρ^{QM},

$$\rho^{QM} = \frac{1}{2}\big(\,|00\rangle\langle 00| + |11\rangle\langle 11|\,\big)$$

这是一个两体混合态. 在量子测量的意义上, 它不像是以纯态 $c_0\,|0\rangle\,|\varphi_0\rangle + c_1\,|1\rangle\,|\varphi_1\rangle$ 的形式体现仪器的状态与系统的状态之间的一一对应. 但是也可以通过对仪器的 σ_z^M 的观测实现对系统的 σ_z^Q 的

测量. 第一项 $|00\rangle\langle 00| = |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0|$, 它告诉我们, 当仪器的 σ_z^M 表现出结果 $+1$ 的时候, 系统的 σ_z^Q 取值 $+1$. 对于第二项 $|00\rangle\langle 00| = |0\rangle\langle 0| \otimes |0\rangle\langle 0|$ 也有类似的说法.

接下去应该看看对 σ_x^M 的测量, 不过, 为了使讨论的问题稍微具有一些一般性, 我们从头说起. 假设系统的初态是 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, 与仪器建立的适当的相互作用之后, 二者演化为测量前的两体量子态

$$\alpha|0\rangle \otimes |0\rangle + \beta|1\rangle \otimes |1\rangle$$

这里假定 α 和 β 都是实数. 环境和仪器的相互作用导致了下面的三体纯态,

$$\begin{aligned}&(\alpha|0^Q\rangle \otimes |0^M\rangle + \beta|1^Q\rangle \otimes |1^M\rangle) \otimes |\mathcal{E}(0)\rangle \\ \longrightarrow &\alpha|0^Q\rangle \otimes |0^M\rangle \otimes |\mathcal{E}_0(t)\rangle + \beta|1^Q\rangle \otimes |1^M\rangle \otimes |\mathcal{E}_1(t)\rangle \end{aligned} \tag{15}$$

对环境求迹之后, 得到系统和仪器的两体混合态,

$$\text{Eq. (15)} \xrightarrow{\text{Tr}_E} \alpha^2|00\rangle\langle 00| + \beta^2|11\rangle\langle 11|$$

这个形式当然可以帮助我们借助观测 σ_z^M 以实现对系统的 σ_z^Q 的测量. 但是, 如果观测 σ_x^M 呢?

大家应该验证下表中的结果.

在 $\alpha^2|00\rangle\langle 00| + \beta^2|11\rangle\langle 11|$ 中测量 σ_x^M

测量 σ_x^M 的结果及其几率	相应的系统的状态
$+1, \quad \frac{1}{2}$	$\alpha^2|0\rangle\langle 0| + \beta^2|1\rangle\langle 1|$
$-1, \quad \frac{1}{2}$	$\alpha^2|0\rangle\langle 0| + \beta^2|1\rangle\langle 1|$

对以上结果, 可以说:

- 系统与仪器相互作用之后, 以及仪器和环境相互作用之后, 系统的局部量子态没有改变, 都是 $\alpha^2|0\rangle\langle 0| + \beta^2|1\rangle\langle 1|$. 这是应该的, 因为, 当系统和仪器有了相互作用之后, 随便怎么折腾仪器 —— 只要没有发生选择测量之类的事, 都不会改变系统的局部量子态.
- 对 σ_x^M 的观测不能实现对系统的某个观测量的测量. 不论测量 σ_x^M 的结果是 $+1$ 还是 -1, 相应的系统的状态都是相同的混合态.

第六章　无限维 Hilbert 空间 I

尝试说明从有限维空间到连续 Hilbert 空间的过渡. 主要过程是这样的:

1. 在 $\mathscr{H}=\mathbb{C}^n$ 空间中构造两组基向量, 分别记作 $|\mu_k\rangle$ 和 $|\nu_\ell\rangle$, 它们之间是互补的, 即
$$|\langle\mu_k|\nu_\ell\rangle|=\frac{1}{\sqrt{n}},\ \forall\ k,\ell$$
2. 相应的有两个酉变换, U 和 V, 它们的本征向量分别是 $|\mu_k\rangle$ 和 $|\nu_\ell\rangle$, 而 U 和 V 的作用是, U 使得 $|\nu_\ell\rangle$ 循环平移, V 使得 $\langle\nu_k|$ 循环平移.
3. 让 $\mathscr{H}$ 的维数变得很大, 进而过渡到连续情形. 在这个过程中, 考虑酉变换 U 和 V 的生成元, 分别记作 Q 和 P, 它们将在连续情形中对应于位置和动量算子.

n 维复 Hilbert 空间 $\mathscr{H}=\mathbb{C}^n$.

构造一个酉变换 U 以及一组 n 个单位向量 $|\alpha_k\rangle$, $k=1,\cdots,n$, 它们满足如下条件,

- $U^n=\mathbb{1}$,
- $U|\alpha_k\rangle=|\alpha_{k+1}\rangle$, $k=1,\cdots,n-1$,
  $U|\alpha_n\rangle=|\alpha_1\rangle$.
  即, U 的作用效果是传递的, 循环的.

实际上, 在这里, $|\alpha_k\rangle$ 的作用只是体现 U 的循环平移的特点. 我们完全可以将 $U^n=\mathbb{1}$ 作为推导的出发点.

U 的本征值记作 u_k, $k=1,\cdots,n$, 显然, u_k 是单位复数.

$$u_k=e^{i2\pi\frac{k}{n}},\quad u_k^n=e^{2\pi k}=1$$

U 的本征向量记作 $|\mu_k\rangle$, 即 $U|\mu_k\rangle=u_k|\mu_k\rangle$.

用 U 以及本征值 u_k 表示 $|\mu_k\rangle\langle\mu_k|$.

$$U^n=\mathbb{1}$$

$$\left(\frac{U}{u_k}\right)^n-\mathbb{1}=0$$

$$\left(\frac{U}{u_k}-\mathbb{1}\right)\sum_{\ell=0}^{n-1}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}=0$$

$$(U-u_k\mathbb{1})\sum_{\ell=0}^{n-1}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}=0$$

可以改作从 $\ell=1$ 到 $\ell=n$ 求和,

$$(U-u_k)\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}=0$$

这里省去了与 u_k 相乘的单位矩阵. 上式意味着

$$\boxed{|\mu_k\rangle\langle\mu_k|=\frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}} \tag{1}$$

解释 (1) 式. U 在自身的表象中是对角形式,

$$U=\sum_{j=1}^{n}u_j\,|\mu_j\rangle\langle\mu_j|$$

U^ℓ 仍然是对角的

$$U^\ell=\sum_{j=1}^{n}u_j^\ell\,|\mu_j\rangle\langle\mu_j|$$

可以把 $\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}$ 表示为

$$\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}=\sum_{j=1}^{n}c_j\,|u_j\rangle\langle u_j|$$

当然可以把 c_j 写得更具体一些, 但这并不必要.

将 $(U-u_k)\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}=0$ 改写为

$$\left(\sum_{m=1}^{n}u_m\,|\mu_m\rangle\langle\mu_m|-u_k\right)\sum_{j=1}^{n}c_j\,|u_j\rangle\langle u_j|=0$$

由正交归一性得到

$$\sum_{j=1}^{n}u_jc_j\,|\mu_j\rangle\langle\mu_j|-u_k\sum_{j=1}^{n}c_j\,|\mu_j\rangle\langle\mu_j|=0$$

这也就是

$$\sum_{j=1}^{n}(u_jc_j-u_kc_j)\,|\mu_j\rangle\langle\mu_j|=0$$

所以有

$$(u_j-u_k)c_j=0\implies\begin{cases}\text{当 } j\neq k \text{ 时, } c_j=0\\ \text{当 } j=k \text{ 时, } c_j\neq 0\end{cases}$$

如果当 $j=k$ 时, $c_j=0$, 那么 $\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}=0$, 而且对于所有的 $k=1,\cdots,n$ 都成立, 这将导致 $U=0$. 于是我们得到

$$\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^{\ell}=c_k\left|\mu_k\right\rangle\left\langle\mu_k\right|$$

由 $\left(\left|\mu_k\right\rangle\left\langle\mu_k\right|\right)\left|\mu_k\right\rangle=\left|\mu_k\right\rangle$ 可以确定 $c_k=n$. 综上所述, 有 (1) 式.

下一步, 设定 $\left|\alpha_m\right\rangle$, $m=1,\cdots,n$. 用 $\left|\mu_k\right\rangle$ 展开 $\left|\alpha_m\right\rangle$,

$$\left|\alpha_m\right\rangle=\sum_{k=1}^{n}\left\langle\mu_k|\alpha_m\right\rangle\left|\mu_k\right\rangle$$

对于展开系数, 作如下设定.

- 对于 $\left|\alpha_n\right\rangle$, 令

$$\left\langle\mu_k|\alpha_n\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{n}},\quad k=1,\cdots,n \tag{2}$$

- 对于 $\left|\alpha_m\right\rangle$, $m=1,\cdots,n-1$, 令

$$\left\langle\mu_k|\alpha_m\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{n}}e^{i2\pi\frac{km}{n}},\quad k=1,\cdots,n \tag{3}$$

如果在 (3) 中令 $m=n$, 则是 (2) 式的结果.

重写各个 $\left|\alpha_k\right\rangle$:

$$\left|\alpha_n\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{k=1}^{n}\left|\mu_k\right\rangle \tag{4}$$

$$\left|\alpha_m\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{k=1}^{n}e^{i2\pi\frac{km}{n}}\left|\mu_k\right\rangle,\quad m=1,\cdots,n-1 \tag{5}$$

实际上, 这已经表明 $\left|\alpha_k\right\rangle$ 是归一的并且彼此正交的. 而且, 容易验证 $U\left|\alpha_k\right\rangle=\left|\alpha_{k+1}\right\rangle$.

下面, 我们要将 $\left|\alpha_k\right\rangle$ 用作另一个酉变换 V 的本征向量.

设酉变换 V 有如下性质,

$$V^n=\mathbb{1}$$

$$\left\langle\mu_k\right|V=\left\langle\mu_{k+1}\right|$$

$$\left\langle\mu_k\right|V^n=\left\langle\mu_{k+n}\right|=\left\langle\mu_k\right|$$

将 V 的本征值记作 $v_\ell=e^{i2\pi\frac{\ell}{n}}$, 相应的本征向量记作 $\left|\nu_\ell\right\rangle$, 与 (1) 类似, 有

$$\left|\nu_\ell\right\rangle\left\langle\nu_\ell\right|=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(\frac{V}{v_\ell}\right)^k$$

考虑 $\langle\nu_k|$ 和 $\langle\mu_k|$ 之间的关系,

$$\langle\mu_k| = \sum_{\ell=1}^{n} \langle\mu_k|\nu_\ell\rangle \langle\nu_\ell|$$

计算 $\langle\mu_n|\nu_\ell\rangle \langle\nu_\ell|$,

$$\begin{aligned}\langle\mu_n|\nu_\ell\rangle \langle\nu_\ell| =& \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \langle\mu_n| \left(\frac{V}{v_\ell}\right)^k \\ =& \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \langle\mu_{n+k}| v_\ell^{-k} \\ =& \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}} \langle\mu_k| \end{aligned} \tag{6}$$

用 $|\mu_n\rangle$ 右乘上式, 给出

$$|\langle\mu_n|\nu_\ell\rangle|^2 = \frac{1}{n}$$

选择

$$\langle\mu_n|\nu_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}, \quad \ell = 1, \cdots, n \tag{7}$$

将 (7) 代入 (6), 有

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \langle\nu_\ell| = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}} \langle\mu_k|$$

也就是

$$\boxed{|\nu_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{k=1}^{n} e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}} |\mu_k\rangle} \tag{8}$$

与前面的 $|\alpha_k\rangle$ 的形式 (4) 和 (5) 比较,

$$|\nu_\ell\rangle = |\alpha_\ell\rangle, \quad \ell = 1, \cdots, n$$

而且 $|\mu_k\rangle$ $|\nu_\ell\rangle$ 之间的内积也就是由 (3) 式给出的结果,

$$\boxed{\langle\mu_k|\nu_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}}} \tag{9}$$

稍作小结.

- 在 $\mathscr{H} = \mathbb{C}^n$ 空间中构造了两组基向量, $\{|\mu_k\rangle\}$ 和 $\{|\nu_\ell\rangle\}$, 满足

  $$|\langle\mu_k|\nu_\ell\rangle| = \frac{1}{\sqrt{n}}$$

  $\{|\mu_k\rangle\}$ 和 $\{|\nu_\ell\rangle\}$ 被称为两组彼此互补的基向量.

- 酉矩阵 U 使 $|\nu_\ell\rangle$ 循环平移; 酉矩阵 V 使 $\langle\mu_k|$ 循环平移.

接着考虑酉变换 U 和 V 的一些性质.

$$U^\dagger = \sum_k u_k^* \left|\mu_k\right\rangle\!\left\langle\mu_k\right|$$

$$U^\dagger \left|\mu_k\right\rangle = u_k^* \left|\mu_k\right\rangle, \quad \left\langle\mu_k\right| U = \left\langle\mu_k\right| u_k$$

$$\left\langle\mu_k\right| VU = \left\langle\mu_{k+1}\right| U = e^{i2\pi\frac{k+1}{n}} \left\langle\mu_{k+1}\right|$$

类似地, 有

$$\left\langle\mu_k\right| UV = e^{i2\pi\frac{k}{n}} \left\langle\mu_{k+1}\right|$$

所以

$$VU = e^{i2\pi\frac{1}{n}} UV$$

继续推广, 可得

$$V^\ell U^k = e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}} U^k V^\ell \tag{10}$$

至此有这样一个结论: U 和 V 的上述形式的组合 (一共有 n^2 个) 可以作为 $\mathscr{H}$ 上的线性算子的基.

现在来验证这个结论. 选择 $\mathscr{H}$ 的基向量为 $\left|\mu_k\right\rangle$, $k = 1, \cdots, n$. 任意的 $\mathscr{H}$ 上的 $n \times n$ 的矩阵 X 可以写为

$$X = \sum_{jk} x_{jk} \left|\mu_j\right\rangle\!\left\langle\mu_k\right|$$

先考虑对角项. 已有结论 (1),

$$\left|\mu_k\right\rangle\!\left\langle\mu_k\right| = \frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n}\left(\frac{U}{u_k}\right)^\ell = \frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n} e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}} U^\ell$$

对于非对角项, 有

$$\left|\mu_k\right\rangle\!\left\langle\mu_k\right| V^{m-k} = \left|\mu_k\right\rangle\!\left\langle\mu_m\right| = \frac{1}{n}\sum_{\ell=1}^{n} e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}} U^\ell V^{m-k}$$

于是上述结论成立.

对于 $\left|\psi\right\rangle \in \mathscr{H}$, 现在有两种展开方式,

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_k \left|\mu_k\right\rangle \left\langle\mu_k|\psi\right\rangle = \sum_\ell \left|\nu_\ell\right\rangle \left\langle\nu_\ell|\psi\right\rangle$$

实际上就是表象的变换.

$$\left|\psi\right\rangle = \sum_k \left[\sum_\ell \left\langle\mu_k|\nu_\ell\right\rangle \left\langle\nu_\ell|\psi\right\rangle\right] \left|\mu_k\right\rangle$$

$$\left\langle\mu_k|\psi\right\rangle = \sum_\ell \left\langle\mu_k|\nu_\ell\right\rangle \left\langle\nu_\ell|\psi\right\rangle = \sum_{\ell=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}} \left\langle\nu_\ell|\psi\right\rangle$$

量子态在这两个表象之间的联系是**离散 Fourier 变换**.

与连续 Fourier 变换的比较 (令 $\hbar = 1$):

Fourier 变换

连续情形	离散情形
$\langle x\|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ixp}$	$\langle \mu_k\|\nu_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i2\pi \frac{k\ell}{n}}$

可以有这样的类比

$$\sqrt{\frac{2\pi}{n}} k \sim x, \quad \sqrt{\frac{2\pi}{n}} \ell \sim p \tag{11}$$

现在准备过渡到连续情形. 设 n 是一个很大的素数. 令

$$\epsilon^2 = \frac{2\pi}{n}$$

当 n 很大的时候, ϵ 很小. U 的本征值 u_k

$$u_k = e^{i2\pi \frac{k}{n}} = e^{i\epsilon^2 k}, \quad k = 1, 2, \cdots, n$$

设 U 的生成元是 Q, 它是厄密的, $Q = Q^\dagger$.

$$U = e^{i\epsilon Q}$$

考虑 U 的本征方程 $U|\mu_k\rangle = e^{i\epsilon^2 k}|\mu_k\rangle$, 并注意到 ϵ 很小,

$$(\mathbb{1} + i\epsilon Q)|\mu_k\rangle = (1 + i\epsilon^2 k)|\mu_k\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$Q|\mu_k\rangle = k\epsilon|\mu_k\rangle$$

表明 $|\mu_k\rangle$ 是 Q 的本征向量, 本征值是 $k\epsilon = \sqrt{\frac{2\pi}{n}} k$.

再设

$$V = e^{i\epsilon P}, \quad P = P^\dagger$$

类似地有

$$V|\nu_\ell\rangle = e^{i2\pi \frac{\ell}{n}}|\nu_k\rangle = e^{i\epsilon^2 \ell}|\nu_\ell\rangle$$

$$P|\nu_\ell\rangle = \ell\epsilon|\nu_\ell\rangle$$

即 $|\nu_\ell\rangle$ 是 P 的本征向量, 本征值是 $\ell\epsilon = \sqrt{\frac{2\pi}{n}}\ell$.

将 Q 和 P 的本征值与类比关系 (11) 式对照, 可以看出, Q 和 P 将被分别解释为位置算子和动量算子.

可以将 Q 和 P 的本征值画在半径为 $\frac{1}{\epsilon}$ 的圆周上. 以 Q 的本征值为例说明这件事. 首先考虑 Q 的本征值的分布范围. 当 k 的值从 1 取到 n 时, Q 的本征值从 $\epsilon = \sqrt{\frac{2\pi}{n}}$ 增大到 $n\epsilon = \sqrt{2n\pi}$. 显然, 当 n 增大时, Q 的本征值分布的范围也变得越来越大. 不过, 还应该注意到酉变换 U 的特征. 局部看来, 它是平移变换, U 将 $|\nu_\ell\rangle$ "向前平移" 到 $|\nu_{\ell+1}\rangle$, 平移量是 ϵ; U^2 将 $|\nu_\ell\rangle$ "向前平移" 到 $|\nu_{\ell+2}\rangle$, 平移量是 2ϵ; $\cdots\ \cdots$. 但是, 整体看来是一个循环置换, 所谓的 "向前平移" 不可能无止境地走下去, 当平移量达到 $n\epsilon$ 的时候, 酉变换是

$$e^{in\epsilon Q} = \sum_{k=1}^{n} e^{in\epsilon k\epsilon} |\mu_k\rangle\langle\mu_k| = \sum_{k=1}^{n} e^{ink\epsilon^2} |\mu_k\rangle\langle\mu_k| = \sum_{k=1}^{n} e^{i2k\pi} |\mu_k\rangle\langle\mu_k| = \mathbb{1}$$

其中的第一个等式用到了 Q 的本征分解形式 $Q = \sum_{k=1}^{n} k\epsilon\, |\mu_k\rangle\langle\mu_k|$. 上式也就是引入生成元之后重新描述 $U^n = \mathbb{1}$ 这一性质. 实际上, 有限维空间中的酉变换不可能将该空间中的向量 "变出" 这个空间. 我们在这里讨论的 U 或者 U^k 也不可能实现任意大的平移, 当平移量超过 $n\epsilon$ 之后, 就开始了新一轮的循环, 所以, 应该将所有可能的平移量 $k\epsilon$ 描绘在一个周长为 $n\epsilon$ 的圆周上, 这个圆的半径是 $\sqrt{\frac{n}{2\pi}} = \frac{1}{\epsilon}$. 如图 1 所示.

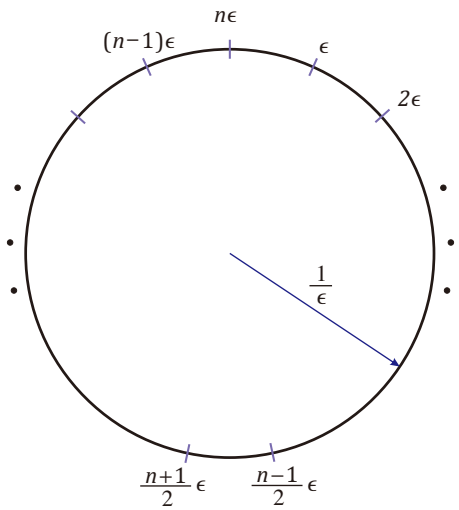


图 1

回顾已知的性质 (10),

$$V^\ell U^k = e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}} U^k V^\ell$$

由此可以推出

$$V^{-\ell} U^k V^\ell = e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}} U^k$$

$$U^k V^\ell U^{-k} = e^{-i2\pi\frac{k\ell}{n}} V^\ell$$

注意到 $\epsilon^2 = 2\pi/n$, 将以上两式改写为

$$e^{-i\ell\epsilon P} e^{ik\epsilon Q} e^{i\ell\epsilon P} = e^{-ik\epsilon\ell\epsilon} e^{ik\epsilon Q} = e^{ik\epsilon(Q-\ell\epsilon\mathbb{1})} \tag{12}$$

$$e^{ik\epsilon Q} e^{i\ell\epsilon P} e^{-ik\epsilon Q} = e^{-ik\epsilon\ell\epsilon} e^{i\ell\epsilon P} = e^{i\ell\epsilon(P-k\epsilon\mathbb{1})} \tag{13}$$

我们将由此得到关于 Q 和 P 的变换规则.

注意到

$$U^{-1}A^kU = (U^{-1}AU)^k$$

$$U^{-1}f(A)U = f(U^{-1}AU)$$

在 (12) 和 (13) 两式中令 $\ell\epsilon = q_\ell$, $k\epsilon = p_k$, 有

$$e^{-iq_\ell P} e^{ip_k Q} e^{iq_\ell P} = e^{ip_k(Q-q_\ell\mathbb{1})}$$

$$e^{ip_k Q} e^{iq_\ell P} e^{-ip_k Q} = e^{iq_\ell(P-p_k\mathbb{1})}$$

上面第一式的左侧可以写为

$$\exp\left\{ip_k\left(e^{-iq_\ell P} Q e^{iq_\ell P}\right)\right\}$$

与其右侧比较后有

$$\boxed{e^{-iq_\ell P} Q e^{iq_\ell P} = Q - q_\ell\mathbb{1}} \tag{14}$$

类似地, 考虑第二式, 可以得到

$$\boxed{e^{ip_k Q} P e^{-ip_k Q} = P - p_k\mathbb{1}} \tag{15}$$

这就像是对位置和动量的平移变换. 但是, 需要注意, 本质上还是循环变换.

前面我们令 $U = e^{i\epsilon Q}$, $V = e^{i\epsilon P}$, 当 ϵ 很小的时候, 这实际上是无穷小变换. 为了实现有限大小的变换, 我们可以让 U 或 V 作用多次, 也就是 $U^k = e^{ip_k Q}$ 或 $V^\ell = e^{iq_\ell P}$. 当空间维数越来越大, ϵ 越来越小, p_k 和 q_ℓ 越来越接近连续分布. 与此同时, 图 1 中的圆也变得越来越大.

为了体现真正的平移而不是循环平移, 我们修改 k 的取值范围. 原先 k 的取值范围是从 1 到 n, 现在将其修改为

$$k = 0, \pm1, \pm2, \cdots, \pm\frac{n-1}{2}$$

这一修改并不影响已有的计算结果, 但是可以更好地体现平移变换的效果. 当 $k = 0, +1, +2, \cdots, +\frac{n-1}{2}$ 时, 向右平移; 当 $k = 0, -1, -2, \cdots, -\frac{n-1}{2}$ 时, 向左平移.

$k\epsilon$ 或 $\ell\epsilon$ 的取值是

$$0, \pm\epsilon, \pm 2\epsilon, \cdots, \pm\frac{n-1}{2}\epsilon$$

$$\frac{n-1}{2}\epsilon = \frac{\epsilon}{2}\left(\frac{2\pi}{\epsilon^2} - 1\right) = \frac{\pi}{\epsilon} - \frac{\epsilon}{2}$$

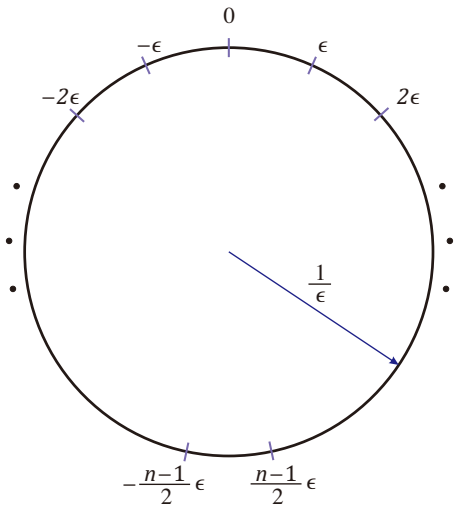


图 2

随着 $\epsilon \to 0$, 图 2 中的圆的半径趋于无穷大. 无穷大的圆上的一段有限长度的圆弧可以近似地当作直线看待. 而且, 就物理问题而言, 平移量不至于无限大. 我们所考虑的波函数也不至于扩展到无限远处. 所以, 我们面临的只是从图 2 中的位置 0 出发向右或向左平移一段有限大小的距离, 这只是无限大的圆周上的有限长度的圆弧, 在这圆弧上的有限大小的平移不会出现循环平移的效果, 因而也就基本上接近真正的平移过程了.

于是将 p_k 记作 p', 将 q_ℓ 记作 q', 并把它们视为连续变量. 将 (14) 和 (15) 表示为真正意义上的平移关系,

$$e^{-iq'P} Q e^{iq'P} = Q - q'\mathbb{1}$$

$$e^{ip'Q} P e^{-ip'Q} = P - p'\mathbb{1}$$

展开, 保留到一级项, 有对易子

$$[Q, P] = i\mathbb{1}$$

再考虑对基向量的改变. 已知

$$\langle \mu_k | V^\ell = \langle \mu_{k+\ell} | \tag{16}$$

$$U^k |\nu_\ell\rangle = |\nu_{\ell+k}\rangle \tag{17}$$

先考虑 (16) 式,

$$u_k = e^{i\epsilon k\epsilon} = e^{i\epsilon q'}, \quad q' = k\epsilon$$

$$u_{k+\ell} = e^{i\epsilon(k+\ell)\epsilon} = e^{i\epsilon(q'+q'')}, \quad q'' = \ell\epsilon$$

$$V^\ell = e^{i\ell\epsilon P} = e^{iq''P}$$

注意到 $\langle\mu_k|$ 对应的本征值是 u_k, 而 u_k 主要依赖于 q', 所以把 $\langle\mu_k|$ 记作 $\langle q'|$, 类似地, 把 $\langle\mu_{k+\ell}|$ 记作 $\langle q'+q''|$. 改写 $\langle\mu_k|V^\ell = \langle\mu_{k+\ell}|$,

$$\langle q'|\, e^{iq''P} = \langle q'+q''| \tag{18}$$

也就是

$$e^{-iq''P}\,|q'\rangle = |q'+q''\rangle$$

类似地从 (17) 式可以得到

$$e^{ip''Q}\,|p'\rangle = |p'+p''\rangle$$

讨论在 Q 表象中 P 的表示. 在 Q 表象中, 基向量是 $|q'\rangle$, 某个 $|\psi\rangle$ 在 $|q'\rangle$ 上的分量是 $\langle q'|\psi\rangle$. 考虑对 $|\psi\rangle$ 作平移变换, 变换后的态是 $e^{iq''P}\,|\psi\rangle$, 它在 $|q'\rangle$ 上的分量是

$$\langle q'|e^{iq''P}|\psi\rangle \overset{\text{cf. (18)}}{=\!=\!=} \langle q'+q''|\psi\rangle = \psi(q'+q'')$$

当 q'' 很小时, 展开至一阶项,

$$\langle q'|\mathbb{1} + iq''P|\psi\rangle = \psi(q') + q''\frac{d\psi(q')}{dq'}$$

$$\Downarrow$$

$$\langle q'|P|\psi\rangle = -i\frac{d\psi(q')}{dq'}$$

这表明 P 在 Q 表象中的表示是

$$P \;\longrightarrow\; -i\frac{d}{dq}$$

类似地可以有

$$\langle p'|Q|\psi\rangle = i\frac{d\psi(p')}{dp'}, \quad \text{其中 } \psi(p') = \langle p'|\psi\rangle$$

表明在 P 表象中 Q 被表示为 $i\frac{d}{dp}$.

讨论完备性和正交归一性. 在有限维空间中, 完备性体现为

$$\sum_{k=1}^{n} |\mu_k\rangle\langle\mu_k| = \mathbb{1}$$

我们曾用 $|q'\rangle$ 表示 $|\mu_k\rangle$, 其中 $q' = q_k = k\epsilon$. 现在想把求和指标换成 q'.

在求和式 $\sum_{k=1}^{n} |\mu_k\rangle\langle\mu_k|$ 中, k 的取值的间隔是 $\Delta k = 1$. 现在改作对 q' 求和, q' 的间隔是

$$\Delta q' = \Delta q_k = \epsilon$$

所以

$$\sum_k |\mu_k\rangle\langle\mu_k| = \mathbb{1} \longrightarrow \sum_{q'} \epsilon\, |q'\rangle\langle q'| = \mathbb{1} \tag{19}$$

这就相当于变换

$$|\mu_k\rangle \longrightarrow \sqrt{\epsilon}\, |q'\rangle \tag{20}$$

当空间维数增大, $\epsilon \to 0$, 而且 q' 呈连续分布, (19) 式过渡到积分形式,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |q'\rangle\langle q'|\, dq' = \mathbb{1}$$

这就是完备性在 Q 表象中的表示. 在 P 表象中的完备性有类似的形式.

至于连续情形下 $|q'\rangle$ 与 $|q''\rangle$ 的正交, 来自如下分析,

$$\langle\mu_{k'}|\mu_{k''}\rangle = \delta_{k'k''}$$

$$q' = k'\epsilon, \quad q'' = k''\epsilon$$

$$|\mu_{k'}\rangle \longrightarrow \sqrt{\epsilon}\, |q'\rangle\,, \quad |\mu_{k''}\rangle \longrightarrow \sqrt{\epsilon}\, |q''\rangle \qquad \text{cf. Eq. (20)}$$

$$\langle q'|q''\rangle = \frac{\langle\mu_{k'}|\mu_{k''}\rangle}{\epsilon} = \frac{\delta_{k'k''}}{\epsilon} \xrightarrow{\epsilon\to 0} \delta(q' - q'')$$

最后, 讨论 Q 表象和 P 表象的基向量之间的内积. 这个内积决定了这两个表象之间的变换关系.

$$\langle\mu_k|\nu_\ell\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} e^{i2\pi\frac{k\ell}{n}}$$

$$\text{Let } q' = k\epsilon,\ p' = \ell\epsilon$$

$$\epsilon\,\langle q'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi/\epsilon^2}} e^{iq'p'}, \quad \langle q'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iq'p'}$$

至此, 完成了从有限维情形到连续情形的过渡.

第六章　无限维 Hilbert 空间 Ⅱ

Hilbert 空间

在以前的章节中, 讨论了量子力学的基本假设在有限维空间中的表示. 有限维的空间用来描述有限个观测结果的量子系统. 但是, 我们一直说的观测结果或者实验现象最终是要体现在我们身处其中的这个三维的欧氏空间 $\mathbb{E}^3$ 中 —— 而不是描述量子态的 Hilbert 空间, 而且, 需要用 "在 $\mathbb{E}^3$ 中某个区域看到某种现象的几率是多少" 这样一类叙述来描述观测结果. 为了实现这样的描述, 必须在与此相关的表象中表示量子态. 这就是位置表象, 将位置 x 看作力学量 X, 它的本征值和对应的本征向量分别是 x 和 $|x\rangle$, 即 $X|x\rangle = x|x\rangle$. 然后, 就像在有限维空间中的做法一样, 将 $|x\rangle$ 当作空间的基向量, 用来展开任意某个量子态 $|\psi\rangle$. 接着就可以利用 Born 规则分析在 $\mathbb{E}^3$ 空间中的某个区域内得到观测结果的几率.

然而, 现在面临的问题是, x 的值是连续的而不是离散的, 是无限的而不是有限的. 对于基向量 $|x\rangle$ 也是如此. 对于有限维情形, 我们可以去除 "量子系统的状态表示为 Hilbert 空间中的向量" 这条基本假设中对于态空间的要求 —— Hilbert 空间. 但是, 在无限维情形中, 我们不能省去这个对态空间的基本要求.

Hilbert 空间它的数学的定义很简单: 具有内积的完备空间.

我们已经讨论过内积的定义和内积的各种形式, 这里不再重复. 如果 H 是一个复的 (或实的) 的线性空间, $(\cdot,\cdot)$ 是 H 上的内积, 那么, $\mathscr{H} = \big(H, (\cdot,\cdot)\big)$ 就是一个 pre-Hilbert 空间. 在 pre-Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 中, 可以根据内积定义范数, 设 $f \in \mathscr{H}$, 范数定义为

$$\|f\| = \sqrt{(f,f)}$$

接着定义空间中两个点之间的距离. 对于 $f, g \in \mathscr{H}$, 二者间的距离是

$$\|f-g\| = \sqrt{(f-g, f-g)}$$

为了从 pre-Hilbert 空间过渡到 Hilbert 空间, 需要考虑 $\mathscr{H}$ 中的序列 (sequence). 序列中的成员是抽象的 "点", 它们可以是向量, 可以是算子, 可以是函数.

关注序列的收敛性. 将某个序列记作 (f_n), 其中 $f_n \in \mathscr{H}$. 如果存在某个 $f \in \mathscr{H}$, 使得当 $n \to \infty$ 时, 有 $\|f_n - f\| \to 0$, 那么序列 (f_n) 是收敛的, 记作 $f_n \to f$.

- 如果 $f_n \to f$, 那么序列 $(\|f_n\|)$ 也是收敛, 且 $\|f_n\| \to \|f\|$.
- 如果两个序列 (f_n) 和 (g_n) 都收敛, $f_n \to f$, $g_n \to g$, 那么 $(f_n, g_n) \to (f, g)$.

存在一些看似收敛序列. 对于 $\mathscr{H}$ 中的一个序列 (f_n), 如果对于任意一个 $\epsilon > 0$, 总存在某个自然数 $n_0 \in \mathbb{N}$, 使得对于任何的 $n, m \geqslant n_0$, $\|f_n - f_m\| \leqslant \epsilon$ 总能成立, 这样的序列就是 Cauchy 序列.

- 如果 (f_n) 是 Cauchy 序列, 那么 $(\|f_n\|)$ 是收敛序列.
- 如果 (f_n) 和 (g_n) 是两个 Cauchy 序列, 那么 $\big((f_n, g_n)\big)$ 是收敛序列.

显然, 收敛的序列一定是 Cauchy 序列, 但反过来不一定成立. 如果 pre-Hilbert 空间 $\mathscr{H}$ 中所有的 Cauchy 序列都收敛, 那么 $\mathscr{H}$ 是 Hilbert 空间.

Hilbert 空间的两个例子:

ℓ_2 空间 这个空间中的元素是一个个序列, $f \in \ell_2$, $f = (f_n)$, $\sum_{n=1}^{\infty} |f_n|^2 < \infty$. 定义了加法和数乘以后构成一个线性空间, 而且是 Hilbert 空间. 这个空间上的内积是

$$(f, g) = \sum_{n=1}^{\infty} f_n^* g_n$$

可以把每一个 f_n 看作向量 f 的一个分量. ℓ_2 上的内积可以类比于有限维空间上的内积, 差别在于求和的上限.

L_2 空间 (模) 平方可积的函数空间. 对于 $f, g \in L_2$, 有

$$(f, g) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) g(x) dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx < \infty$$

这样一类函数构成了 L_2 空间, 它是 Hilbert 空间[1]. 我们将要讨论的波函数属于 L_2 空间.

对于 Hilbert 空间, 存在一组 (可以是无限多个) 可列的 (countable) 基向量. 以下事实有助于理解这一结论:

- 有理数序列未必收敛于有理数, 可能收敛于某个无理数. 有理数集不能构成 Hilbert 空间, 但是实数集构成 Hilbert 空间. 任何一个无理数可以用有理数的无穷序列表示, 这是实数空间完备性的体现.
- 可以用周期函数 (正弦函数或余弦函数) 展开任意某个函数, 即 Fourier 展开. 这些正弦或余弦函数具有不同的周期, 它们构成一组无穷多个离散的可列的基函数.

[1]这里的叙述较为简单, 更详细而严格的讨论见 J. Weidmann, Linear Operators in Hilbert Space. (Springer-Verlag, 1980).

- 还可以用其它类型的更复杂的函数来展开任意给定的函数, 例如, 我们将要遇到的谐振子的哈密顿量的本征函数构成一组无穷多个可列的正交归一的函数集, 可以用作 Hilbert 的空间的基.

将以上的数学内容用于量子系统的描述. 现在, 我们讨论的量子系统不再是像以前那样只有有限个观测结果, 而是有无穷多个观测结果, 需要在无限维 Hilbert 空间中描述. 暂且假设量子系统的某个观测量 H (例如系统的哈密顿量) 的本征值有这无限多个, 而且它们是观分立的、离散的、可列的[2].

$$H\left|u_k\right\rangle = h_k\left|u_k\right\rangle, \quad k = 1, 2, \cdots$$

这无穷多个 $|u_k\rangle$ 是正交归一的,

$$\langle u_j|u_k\rangle = \delta_{jk}$$

空间的完备性体现在

$$\sum_{k=1}^{\infty} |u_k\rangle\langle u_k| = \mathbb{1} \tag{1}$$

其中 $\mathbb{1}$ 表示单位算子, identity, 可以将它想象为一个无穷维的单位阵.

系统的量子态 $|\psi\rangle$ 可以表示为

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} |u_k\rangle \langle u_k|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \left|k\right\rangle, \quad c_k = \langle u_k|\psi\rangle \tag{2}$$

位置表象

至此, 虽然有了无限维 Hilbert 空间的定义, 但是仍然没有回答物理上的问题: 在具体的实验中, 微观粒子在我们周围的空间中的某个地方表现出特定的现象, 这些现象出现的几率是多少? 这也就是本章开始的时候提出的问题. 我们需要在位置表象中回答这个问题, 而前面关于 Hilbert 空间的定义和讨论并没有考虑位置表象.

在位置表象中, Hilbert 空间的基向量是位置算子 X 的本征向量 $|x\rangle$. 这里暂且只考虑一维情形, 就是说, 只关心在 x 轴上的某个区间内观测到量子现象的几率. 如果用 $|x\rangle$ 来展开量子态 $|\psi\rangle$, 那么仿照 (2) 式, 有 $|\psi\rangle = \sum_x \langle x|\psi\rangle\,|x\rangle$. 但是, 需注意到这里的 x 是连续分布的, 于是应该写为

$$\sum_x \longrightarrow \int \mathrm{d}x$$

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\ \langle x|\psi\rangle\,|x\rangle$$

[2]典型的例子是谐振子的能级.

其中 $\langle x|\psi\rangle$ 是关于 x 的复函数, 令 $\psi(x)=\langle x|\psi\rangle$, 这就是通常说的**波函数** (wave function).

$$|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}dx\ \psi(x)\,|x\rangle \tag{3}$$

关于波函数的解释:

- $\langle x|\psi\rangle$ 可类比于以前谈到的 $\langle\alpha_i|\psi\rangle$, 它们是量子态 $|\psi\rangle$ 在特定的某个表象中的表示, 或者更严格地说, 它们是在特定的表象中基向量上的坐标或分量. 不同之处在于, 对于离散的基向量 $|\alpha_i\rangle$, 分量 $\langle\alpha_i|\psi\rangle$ 易于理解. 而对于连续的基向量 $|x\rangle$, 所谓的分量 $\langle x|\psi\rangle$ 暂时缺乏数学上的支持. 这也正是 "不好" 的 δ 函数的由来.

- 现在设想把测量结果标记在横轴上. 对于有限个测量结果 a_i, 它们分布在横轴上的不同位置. 对应于每一个 a_i, 有一个复数 $\langle\alpha_i|\psi\rangle$. 把这个复数画在纵轴上. 当然, 我们不能在一维数轴上表示复数, 但是可以作这样的想象. 于是, 就可以看到一些列离散分布的点, 每一个点的 "坐标" 是 $(a_i,\langle\alpha_i|\psi\rangle)$. 转而在位置表象中做这件事. 横轴上的点表示位置 x, 它是位置算子 X 的本征值, 同时也是测量微观粒子的位置所能得到的结果[3]. 纵轴上是想象中的复数 $\langle x|\psi\rangle$. 由于 x 是连续地从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 变化, 我们将 "看到" 一条关于 x 的连续函数曲线 $\psi(x)$, 也就是波函数的图像. 当然, 如果波函数是实函数 (例如谐振子和氢原子的能量本征函数), 那么确实可以画出它的函数图像.

- 在有限维情形中, $|\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$ 是得到观测结果 a_i 的几率. 在位置表象中, $\langle x|\psi\rangle$ 是几率幅, $|\langle x|\psi\rangle|^2$ 是几率密度, $|\langle x|\psi\rangle|^2dx$ 是在 x 的领域 $(x,x+dx)$ 内观测到微观粒子的几率. 在区间 $[a,b]$ 内观测到粒子的几率是

  $$\int_a^b|\psi(x)|^2dx$$

  在整个空间 (目前我们讨论的只是一维空间) 内观测到粒子的几率应该为 1,

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

  即量子态应该是归一化的. 这便是将 Born 规则应用于位置表象所得到的结论, 即波函数在统计意义上的几率诠释. 很多时候, 人们把波函数称为几率波, 从约定俗成的意义上说并无不可, 但是, 如同我们再三强调的那样, 量子系统不能等同于量子现象, 量子态不能等同于几率, 波函数也不是关于几率的函数. 只有针对表现在经典层面上的观测结果才能说它们的几率分布. 我们说, 波函数无非是量子态在位置表象中的表示, 表示形式是位置坐标的函数, 之所以被冠以 "波" 这个称谓, 仅仅是出于历史原因.

- 波函数 $\psi(x)$ 是平方可积函数, 属于 L_2 空间. 但是, 平方可积这个条件对于波函数而言还显得不够, 我们还希望波函数是连续的, 可导的, 甚至无穷可导的, 而且波函数的支撑 (support) 是

[3]这是粗糙的说法. 观测连续分布的变量, 我们不可能得到某个值, 不可能得到 "点" 事件, 只能观测到某个值的邻域. 不过, 我们不准备再引入有关测度论的讨论, 于是采用了不严格的描述.

有限的. 所以, 我们讨论的波函数实际上属于 L_2 空间的一个子空间[4].

δ 函数

既然 $|x\rangle$ 构成了位置表象中的基, 一个自然的问题是, 它的表示形式是什么?

在有限维空间中, 我们也问过这个问题. 例如, 对于 $\mathbb{C}^2$ 空间, 有两个归一的彼此正交的基向量, 记作 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$. 虽然我们说过, 追问基向量的表示形式有些不妥 —— 基向量就是用来表示向量的, 但是, 这并不妨碍我们在运算和推导过程中用具体的形式表示它们. 实际上, 我们把 $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^2$ 写为 $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$, 并进而表示为列向量 $|\psi\rangle = \binom{c_0}{c_1}$, 这也就意谓着可以把基向量 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 分别表示为 $\binom{1}{0}$ 和 $\binom{0}{1}$.

现在, 考虑位置表象的基向量 $|x\rangle$. 假设我们已经知道了 $|\psi\rangle$ 在位置表象中的表示形式, 即波函数 $\psi(x)$. 对于给定的某个 x', 波函数的函数值是 $\psi(x')$. $\psi(x')$ 来自于 $\langle x'|\psi\rangle$. 这是量子态 $|\psi\rangle$ 在基向量 $|x'\rangle$ 上的分量. 不过, 为了看出 $|x'\rangle$ 的具体形式, 我们从内积的角度来分析: $\langle x'|\psi\rangle$ 是 $|x'\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 的内积, 在位置表象中, $|\psi\rangle$ 的表示形式是波函数 $\psi(x)$, 而 $|x'\rangle$ 的表示形式就是我们希望知道的, 设为 $f_{x'}(x)$. 于是有

$$\langle x'|\psi\rangle = \psi(x') = \int_{-\infty}^{+\infty} f_{x'}(x)\psi(x)dx \tag{4}$$

上式的特点是, 从连续函数 $\psi(x)$ 中挑选出对应于 x' 的函数值 $\psi(x')$. 因此, $f_{x'}(x)$ 的作用就相对于一个筛子, 非常理想的但是实际上不存在的筛子, 竟然能滤出某个点上的函数值. 这样的筛子不可能对应于真实的实验仪器, 而且也不能表示为 Hilbert 空间中的函数, 这就是 δ 函数.

$$f_{x'}(x) = \delta(x - x') \tag{5}$$

(4) 重写为

$$\psi(x') = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\delta(x - x')dx \tag{6}$$

注 关于 δ 函数. 首先, 它不是传统意义上的函数, Dirac 引入 δ 函数是为了在统一框架中 (有限维的或连续的 Hilbert 空间) 表示量子态. 现代数学逐步承认了这样一类 "不好" 的函数, 并把它们成为 distribution. δ 函数的定义也确实体现了 "分布" 的意义, 这就是

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - x_0)dx = f(x_0)$$

δ 函数的性质也是需要借助积分过程才能体现.

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

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x), \quad a \in \mathbb{R}$$

[4]参看 Cohen-Tannoudji 书 Quantum Mechanics 卷 1, 第二章.

$$x\delta(x-x_0)=x_0\delta(x-x_0)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-y)\delta(x-z)=\delta(y-z)$$

$$\delta(x-x_0)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ik(x-x_0)}dk$$

δ 函数可以表示为一些正规函数的渐近形式, 例如, 当 $\epsilon\to 0$ 时, 以下函数渐近地趋于 δ 函数.

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}\epsilon}e^{-x^2/\epsilon^2},\quad \frac{1}{2\epsilon}e^{-|x|/\epsilon},\quad \frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2}$$

$$\frac{1}{\pi}\frac{\sin\frac{x}{\epsilon}}{x},\quad \frac{\epsilon}{\pi}\frac{\sin^2\frac{x}{\epsilon}}{x^2}$$

□

以上讨论说明, 位置表象的基向量 $|x\rangle$ 可以表示为 δ 函数. 基向量的正交归一性可以写为

$$|x'\rangle\longleftrightarrow\delta(x-x'),\quad |x''\rangle\longleftrightarrow\delta(x-x'')$$

$$\langle x'|x''\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-x')\delta(x-x'')dx=\delta(x'-x'')$$

δ 函数不是平方可积的函数, 不属于 L^2 空间.

Hilbert 空间完备性的表示

有两种表示形式.

用可列的基向量表示

$$\sum_k|u_k\rangle\langle u_k|=\mathbb{1}\tag{7}$$

用连续的基向量表示 (位置表象)

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|x\rangle\langle x|\,dx=\mathbb{1}\tag{8}$$

考虑在位置表象中表示 $|u_k\rangle$ 的正交归一性.

$$u_k(x)=\langle x|u_k\rangle$$

$|u_k\rangle$ 的正交归一性写为

$$\langle u_j|u_k\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}u_j^*(x)u_k(x)dx=\delta_{jk}\tag{9}$$

再来在位置表象中表示 (7), 先用 $|u_k\rangle$ 展开 $|\psi\rangle$,

$$|\psi\rangle=\sum_j c_j\,|u_j\rangle\,,\quad c_j=\langle u_j|\psi\rangle$$

在位置表象中, 上式写为

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sum_j c_j u_j(x) \\ &= \sum_j \Big[\int_{-\infty}^{+\infty} u_j^*(x')\psi(x')dx' \Big] u_j(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Big[\sum_j u_j^*(x')u_j(x) \Big] \psi(x')dx'\end{aligned}$$

而我们又知道

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x')\delta(x-x')dx'$$

所以有

$$\sum_j u_j^*(x')u_j(x) = \delta(x-x')$$

这就是在位置表象中 $|u_k\rangle$ 的完备性.

也可以换一种看法. 考虑 $\sum_j |u_k\rangle\langle u_k|$ 的 "第 x' 行第 x'' 列的矩阵元", 这就是

$$\langle x'| \big(\sum_k |u_k\rangle\langle u_k| \big) |x''\rangle = \sum_k u_k^*(x'')u_k(x')$$

而另一方面, 将 $\sum_j |u_k\rangle\langle u_k| = \mathbb{1}$ 在位置表象中表示, 即

$$\langle x'| \big(\sum_k |u_k\rangle\langle u_k| \big) |x''\rangle = \langle x'|\mathbb{1}|x''\rangle = \langle x'|x''\rangle = \delta(x'-x'')$$

于是得到

$$\sum_k u_k^*(x'')u_k(x') = \delta(x'-x'')$$

我们还可以把 (8) 式在离散基向量 $|u_k\rangle$ 上表示, 这就相当于写出 $\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\, dx$ 的第 j 行第 k 列的矩阵元,

$$\langle u_j| \Big(\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|\, dx \Big) |u_k\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} u_j^*(x)u_k(x)dx = \delta_{jk}$$

这就是 (9) 式.

动量表象

动量是平移变换的生成元. 考虑简单的一维情形, 我们要说明, 动量可以表示为微分算子 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.

将某个函数 $f(x)$ 沿 x 方向向右平移一端距离 a. 设平移后的函数是 $g(x)$.

如同在讨论旋转变换的时候说的那样, 首先需要明确变换的对象是什么. 针对不同的对象, 变换有不同的表示. 目前我们希望知道的是空间平移变换如何改变函数的形式, 而容易知道的是平移变换如何改变了一维空间中各个点的坐标, 这就是

$$x \longrightarrow x + a$$

其中 a 是平移量. 把这个变换记作 T, 上面的变换就是

$$x \longrightarrow x' = \mathrm{T}x = x + a$$

一个显然的事实是 $f(x) = g(x')$, 这也就是

$$f(x) = g(\mathrm{T}x)$$

可以将上式中的 x 替换为 $\mathrm{T}^{-1}x$, 这里 T^{-1} 是变换平移变换 T 的逆变换, $T^{-1}x = x - a$.

$$f(\mathrm{T}^{-1}x) = f(x - a) = g(x)$$

简单地说, 将函数 $f(x)$ 中的自变量 x 代之以 $x - a$, 就得到了平移后的函数表达式 $g(x)$.

现在考虑无穷小变换, 令 $a \to 0$, 在某个点 x_0 附近展开 $g(x_0)$,

$$g(x_0) = f(x_0) - a\frac{df}{dx}\Big|_{x_0} + \cdots$$

这表明, 对于函数而言, 平移变换的生成元是 $-\frac{d}{dx}$. 有限大小的针对函数的平移变换可以表示为

$$\mathcal{T}(a) = e^{-a\frac{d}{dx}}$$

$$f(x) \longrightarrow g(x) = \mathcal{T}(a)f(x)$$

稍后会看到, 微分算子 $-\frac{d}{dx}$ 不是厄密算子, 乘以 i 以后成为一个厄密算子, 令

$$P_x = -i\hbar\frac{d}{dx}$$

对函数的平移变换表示为

$$\mathcal{T}(a) = e^{-a\frac{d}{dx}} = e^{-iaP_x/\hbar}$$

$$\left.\begin{array}{l}\text{动量是平移变换的生成元}\\ \text{动量作为力学量, 表示为厄密算子}\end{array}\right\} \Longrightarrow P_x \longleftrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

这时动量算子在位置表象中的表示.

动量的本征方程 (以下暂时省略下标 x)

$$P\,|p\rangle = p\,|p\rangle$$

在动量表象中, 动量的本征态满足正交归一性和完备性,

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp\,|p\rangle\langle p| = \mathbb{1}$$

与位置表象类似, 对于任意的量子态 $|\psi\rangle$, 可以表示为

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\langle p|\psi\rangle\,|p\rangle$$

令 $\varphi(p) = \langle p|\psi\rangle$, 这是量子态在动量表象中的表示, 或者说, 这是动量空间波函数.

对量子态的空间平移变换

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = \mathcal{T}(a)\,|\psi\rangle = e^{-iaP/\hbar}\,|\psi\rangle$$

在位置表象中的表示

$$\langle x|\psi\rangle \longrightarrow \langle x|\psi'\rangle = \langle x|e^{-iaP/\hbar}|\psi\rangle \tag{10}$$

平移后的波函数的具体形式一定是[5]

$$\psi'(x) = \psi(x-a) \tag{11}$$

为了说明这一点, 先考虑 $\langle x|P|\psi\rangle$. 最直接的做法是, 在位置表象中, 量子态表示为波函数 $\psi(x)$, 动量算子表示为 $-i\hbar\frac{d}{dx}$, 所以有

$$\langle x|P|\psi\rangle = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}$$

进而有

$$\langle x|P^n|\psi\rangle = (-i\hbar)^n\frac{d^n\psi(x)}{dx^n}$$

于是

$$\begin{aligned}\langle x|e^{-iaP/\hbar}|\psi\rangle &= \langle x|\left[\mathbb{1} + \frac{-ia}{\hbar}P + \frac{1}{2!}\Big(\frac{-ia}{\hbar}\Big)^2P^2 + \cdots\right]|\psi\rangle \\ &= \psi(x) + (-a)\frac{d\psi(x)}{dx} + \frac{(-a)^2}{2!}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \cdots \\ &= \psi(x-a)\end{aligned}$$

还可以这样考虑 $\langle x|P|\psi\rangle$,

$$\langle x|P|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\,\langle x|P|p\rangle\,\langle p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p\,\langle x|p\rangle\,\varphi(p)dp \tag{12}$$

这涉及位置表象和动量表象之间的变换.

[5]如果考虑以前得到的 $\langle q'|\,e^{iq''P} = \langle q'+q''|$, 那么有 $\langle x|\,e^{-iaP/\hbar} = \langle x-a|$, 立即可以得到 $\langle x|e^{-iaP/\hbar}|\psi\rangle = \psi(x-a)$.

又可以这样,

$$\langle x|P|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|P|x'\rangle \langle x'|\psi\rangle \, dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|P|x'\rangle \, \psi(x')dx'$$

这相当于考虑在位置表象中 P 的 "第 x 行第 x' 列的矩阵元".

$$P = \int p \, |p\rangle\langle p| \, dp$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle x|P|x'\rangle \, \psi(x')dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} p \, \langle x|p\rangle \, \langle p|x'\rangle \, dp \right) \psi(x')dx' \tag{13}$$

还是涉及表象的变换.

位置表象和动量表象之间的变换

考虑动量的本征态在位置表象中的函数形式, 也就是要计算 $\langle x|p\rangle$, 记作 $v_p(x)$.

$$P \, |p'\rangle = p' \, |p'\rangle$$

$$\langle x|P|p'\rangle = p' \, \langle x|p'\rangle$$

$$\because \ \langle x|P|\psi\rangle = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$$

$$\therefore \ \langle x|P|p'\rangle = -i\hbar \frac{dv_{p'}(x)}{dx} = p' v_{p'}(x)$$

$$v_{p'}(x) = Ce^{ip'x/\hbar}$$

其中 C 是归一化尝试, 稍后确定. 对 $v_{p'}(x)$ 的解释:

- 它是 $|p'\rangle$ 在位置表象中的表示.
- 此时 p' 是固定的, $v_{p'}(x)$ 是 x 的函数.
- $v_{p'}(x)$ 的形式是平面波, 波矢 $k' = \frac{p'}{\hbar}$, 是固定的. 平面波不是平方可积的, 与 δ 函数一样, 不属于通常的可分的 Hilbert 空间. 它们的价值体现在分析和计算过程中, 分析和计算的结果应该有明确物理意义.

将 $v_{p'}(x)$ 归一, 计算常数 C. 如果直接写 $|v_{p'}(x)|^2 = |C|^2$ 并做积分, 那么得到分散的结果.

利用 $|x\rangle$ 的正交归一性和 $|p\rangle$ 的完备性,

$$\begin{aligned} \delta(x' - x'') &= \langle x'|x''\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \, \langle x'|p'\rangle \, \langle p'|x''\rangle \end{aligned}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dp' |C|^2 \exp\left[\frac{ip'(x'-x'')}{\hbar}\right]$$

$$= 2\pi\hbar |C|^2 \delta(x-x'')$$

选择 C 为正实数, $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, 有

$$v_{p'}(x) = \langle x|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x/\hbar}$$

复共轭给出 $\langle p'|x\rangle$,

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

现在可以看到, 量子态 $|\psi\rangle$ 在位置表象和动量表象中的两种表示形式 $\psi(x)$ 和 $\varphi(p)$ 之间的联系是 Fourier 变换,

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

$$= \int dx \int dp \; \psi(x) \, |p\rangle \, \langle p|x\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \; \left[\int dx \; \psi(x) e^{-ipx/\hbar}\right] |p\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \; \varphi(p) \, |p\rangle$$

即

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; \psi(x) e^{-ipx/\hbar}$$

反过来, 有

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \; \varphi(p) e^{ipx/\hbar}$$

再回头看 (12) 和 (13) 式. 在 (12) 中,

$$\langle x|P|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p \, \langle x|p\rangle \, \varphi(p) dp$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} p e^{ipx/\hbar} \varphi(p) dp$$

$$= \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p) \; e^{ipx/\hbar} dp$$

$$= -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$$

在 (13) 中, 所谓的 P 的 "矩阵元",

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p \, \langle x|p\rangle \, \langle p|x'\rangle \, dp$$

$$
\begin{aligned}
=&\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} p e^{ip(x-x')/\hbar}\, dp \\
=&\frac{-i\hbar}{2\pi\hbar}\,\frac{d}{dx}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip(x-x')/\hbar}\, dp \\
=&-i\hbar\frac{d}{dx}\delta(x-x')
\end{aligned}
$$

这涉及到对 δ 函数的求导, 不易处理.

一些相关的计算

对易子

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

期望值

$$\langle\psi|X|\psi\rangle = \int x\psi^*(x)\psi(x)dx$$

$$\langle\psi|P_x|\psi\rangle = -i\hbar\int \psi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}$$

$$\langle\psi|P_x^2|\psi\rangle = -\hbar^2\int \psi^*(x)\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$$

厄密性. 证明 $-i\frac{d}{dx}$ 是厄密算子 (令 $\hbar = 1$).

$$\text{证明 } \langle\varphi|P_x|\psi\rangle = \langle\psi|P_x|\varphi\rangle^*$$

$$\langle\varphi|P_x|\psi\rangle = -i\int \varphi^*(x)\frac{d\psi(x)}{dx}dx = i\int \psi(x)\frac{d\varphi^*(x)}{dx}$$

$$\langle\psi|P_x|\varphi\rangle = -i\int \psi^*(x)\frac{d\varphi(x)}{dx}$$

Gauss 波包

$$\psi_G(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\exp\left\{-\frac{x^2}{4\sigma^2}\right\}$$

在 Gauss 波包中的期望值

$$\langle\psi_G|X|\psi_G\rangle = \langle\psi_G|P_x|\psi_G\rangle = 0$$

$$\langle\psi_G|X^2|\psi_G\rangle = \sigma^2$$

$$\langle\psi_G|P_x^2|\psi_G\rangle = \frac{\hbar^2}{4\sigma^2}$$

不确定关系, 谐振子的基态满足最小不确定关系.

平移变换作用于位置算子

$$\begin{aligned} & e^{-iaP_x/\hbar} X e^{iaP_x/\hbar} \\ =& X + \left(\frac{-ia}{\hbar}\right)[P_x, X] \\ =& X - a\mathbb{1} \end{aligned}$$

如果我们不用 Baker-Hausdorff 公式, 那么我们需要用到如下两个事实或条件,

- X 的本征向量 $|x\rangle$ 在空间平移变换下以如下方式变换,

$$|x\rangle \longrightarrow e^{-iaP_x/\hbar}|x\rangle = |x+a\rangle$$

  这是因为 (回顾 (10) 和 (11) 两式),

$$\langle x|e^{iaP_x/\hbar}|\psi\rangle = \psi(x+a) = \langle x+a|\psi\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\langle x|\, e^{iaP_x/\hbar} = \langle x+a|\,, \quad \text{or} \quad e^{-iaP_x/\hbar}|x\rangle = |x+a\rangle$$

- X 的本征值在空间平移变换下是不变的, 即

$$X'|x'\rangle = x|x'\rangle\,.$$

这里, X' 的形式是未知的, 但是 x' 却是知道的, 即 $|x'\rangle = |x+a\rangle$.

$$X'|x+a\rangle = x|x+a\rangle\,.$$

于是问题变为, 怎样形式的向量算子 X' 能够满足上式? 可以直接看出

$$(X-a)|x+a\rangle = (x+a)|x+a\rangle - a|x+a\rangle = x|x+a\rangle\,.$$

也就是说

$$X' = X - a\mathbb{1}$$

推广到三维运动

位置表象中的基

$$|x\rangle \otimes |y\rangle \otimes |z\rangle$$

选择不同的坐标系: 直角坐标系, 柱坐标系, 球坐标系等等.

第七章　粒子在位置空间中的运动 I

位置空间 $\mathbb{R}^3$

描述现象的空间. 通过测量, 得到粒子在经典的现实空间 ($\mathbb{R}^3$) 中的几率分布.

Hilbert 空间

描述粒子的波函数的空间. 量子态在位置表象中的表示.

对于一个一般意义上的量子态 $|\Psi\rangle$, 从 $t=0$ 时刻的 $|\Psi(0)\rangle$ 到 t 时刻的演化由 Schrödinger 方程决定,

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = H\,|\Psi(t)\rangle$$

如今, 我们关心的是粒子在位置空间 $\mathbb{R}^3$ 中的几率分布, 因此需要在位置表象中考虑 $|\Psi(t)\rangle$ 的表示形式, 即波函数 $\Psi(\boldsymbol{r},t)$.

位置算子 $\boldsymbol{R}$ 和动量算子 $\boldsymbol{P}$ 都是向量算子, 在直角坐标系中, $\boldsymbol{R}=(X,Y,Z)$, $\boldsymbol{P}=(P_x,P_y,P_z)$. 在位置表象中, 动量 $\boldsymbol{P}$ 被表示为

$$\boldsymbol{P} \longrightarrow -i\hbar\nabla.$$

或者

$$P_x \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\quad P_y \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\quad P_z \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

Schrödinger 方程在位置表象中的形式

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

当势能 $V(\boldsymbol{r},t)$ 不显含时间的时候, 可以进行变量分离.

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \psi(\boldsymbol{r})T(t).$$

变量分离后, 可以得到这样形式的方程

$$\text{空间部分的方程} = \text{时间部分的方程} = E.$$

这里 E 是常数.

容易解出时间部分的方程,

$$T(t) = e^{-iEt/\hbar}.$$

空间部分的方程实际上就是粒子的 Hamilton 量的本征方程,

$$H\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}). \tag{1}$$

在位置表象中, 方程 (1) 是关于空间位置坐标的二阶偏微分方程. 同时还要注意的是, 能量本征值 E 是未知的, 也是需要求解的.

假设我们求出了 $\psi(\boldsymbol{r})$, 那么就可以写出 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$,

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r})e^{-iEt/\hbar} \tag{2}$$

在很多教科书中, 接下去就开始讨论具体问题. 例如一维势阱、势垒、谐振子等等.

这里我们强调指出, 通过求解 (1) 式得到的 $\psi(\boldsymbol{r})$ 只是 H 的本征函数, 而 (2) 式也只是一个定态, 它不足以反映量子系统从某个初态开始的随时间演化的过程 —— 除非系统的初态是哈密顿量的某个本征态.

或者, 我们可以这样看到 (1) 式和 (2) 式. 设想从 (1) 式得到一系列的本征值, 记作 E_n, 不妨设 E_n 是离散的. 相应的本征函数为 (改换了表示符号) $\varphi_n(x) = \langle x|\varphi\rangle$, 即

$$H\varphi_n(x) = E_n\varphi_n(x)$$

(2) 式相应地写为

$$\Psi_n(x, t) = \varphi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$$

于是, $\Psi_n(x, t)$ 的线性叠加

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n\Psi_n(x, t)$$

也满足 Schrödinger 方程.

于是, 我们按照这样的看法考虑量子态随时间的演化. 这里仍然假设 H 的能级是离散的. 设系统的初态 $|\Psi(0)\rangle$ 可以表示为

$$|\Psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0)\,|\varphi_n\rangle$$

用位置表象中的波函数表示,

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n(0)\varphi_n(x)$$

用如此形式表示初态, 意味着选用了能量表象 —— 用哈密顿量的本征态展开任意某个量子态. 在以后某个任意时刻 t, 粒子的量子态演化为

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|\varphi_n\rangle$$

在位置表象中

$$\Psi(x,t)=\sum_n c_n(t)\varphi_n(x)$$

其中

$$c_n(t)=c_n(0)e^{-iE_nt/\hbar} \tag{3}$$

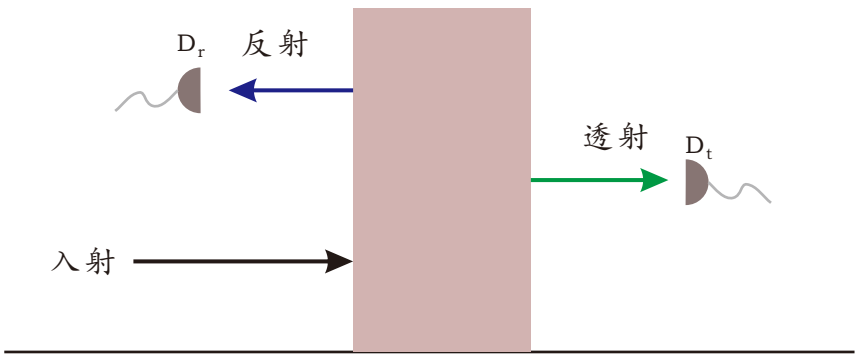
这完全类似于有限维 Hilbert 空间中关于 Schrödinger 方程的讨论. 回顾一下. 在有限维空间中, 如果采用自然基向量, Schrödinger 方程有如下形式,

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_1(t)\\ \dot{c}_2(t)\\ \vdots\\ \dot{c}_N(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}h_{11}&h_{12}&\cdots&h_{1N}\\ h_{21}&h_{22}&\cdots&h_{2N}\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\ h_{N1}&h_{N2}&\cdots&h_{NN}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1(t)\\ c_2(t)\\ \vdots\\ c_N(t)\end{pmatrix}.$$

我们说过, 这样一组 N 个微分方程彼此间有耦合, 很难求解. 于是采用哈密顿量的本征态作为空间的基向量, 即采用能量表象. 在能量表象中, 哈密顿量的形式对对角矩阵, 每一个关于 $c_j(t)$ 的方程彼此独立, 容易求解, 实际上就是 (3) 式.

Schrödinger 方程的形式很像波动方程, 而且, $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ 也被称为波函数, 所以, 很容易有这样的看法: $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ 就像是在三维空间中传播的波, 或者说, 用波场描述一个粒子, 或者说, 粒子就像是一个波包. 但是, 这样的一些看法是不恰当的. 我们看一个例子.

设想一维空间中的势能 $V(x)$ 是一个势垒. 一束粒子从左侧入射 (如下图所示). 有反射束和透射束, 分别用两个探测器 D_r 和 D_t 检测反射粒子和透射粒子.



假设粒子的反射几率和透射几率都是 1/2, 即 $p_r=p_t=\frac{1}{2}$, 那么, 两个探测器同时有响应的几率是多少?

稍后讨论以下几个问题:

- 束缚态.

- 自由粒子的波函数, 波包.
- 一维势阱和势垒, 一维散射.

先讨论一维谐振子, 目的是为第五章和第六章的内容提供一个具体的例证.

一维谐振子

谐振子是一个非常重要的模型, 表现在固体物理、对环境的模拟、量子光学和量子场论等多个领域中. 下面叙述解决谐振子问题的两种途径, 它们分别来自 Lie 代数方法和求解数理方程.

一维谐振子的哈密顿量是

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

我们要求解 H 的本征值和本征态.

计算如下对易子

$$[X^2, P^2] = 2i\hbar(XP + PX), \quad [X^2, XP + PX] = 4i\hbar X^2, \quad [P^2, XP + PX] = -4i\hbar P^2$$

表明三个厄密算子 X^2, P^2 和 $XP + PX$ 构成封闭的代数结构. 谐振子的哈密顿量的这个特性是代数解法的基础.

为了是运算过程更为简洁, 作无量纲化处理, 令

$$X' = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2} X, \quad P' = \left(\frac{1}{\hbar m\omega}\right)^{1/2} P$$

哈密顿量重新写为

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(X'^2 + P'^2)$$

并且 $[X', P'] = i\mathbb{1}$. 以下省略撇号, 讨论如下形式的哈密顿量

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(X^2 + P^2), \quad [X, P] = i\mathbb{1}$$

定义如下两个算子

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iP), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iP) \tag{4}$$

二者的对易子

$$[a, a^\dagger] = \mathbb{1} \tag{5}$$

哈密顿量表示为

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega(aa^\dagger + a^\dagger a) = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)$$

令

$$N = a^\dagger a$$

N 是厄密算子, 而且

$$H \text{ 的本征值} = \hbar\omega \left(N \text{ 的本征值} + \frac{1}{2} \right)$$

于是关注算子 N.

$$[N, a] = -a, \quad [N, a^\dagger] = a^\dagger \tag{6}$$

设 N 的本征值是 λ_ν, 相应的的本征态记作 $|\nu\rangle$, 即

$$N|\nu\rangle = \lambda_\nu |\nu\rangle$$

利用对易关系 (6), 有

$$N(a|\nu\rangle) = (aN - a)|\nu\rangle = a(N - \mathbb{1})|\nu\rangle = (\lambda_\nu - 1)(a|\nu\rangle)$$

这表明 $a|\nu\rangle$ 是 N 的本征态 (未归一), 相应的本征值是 $\lambda_\nu - 1$. 算子 a 对 N 的本征态的作用效果是, 使其对应的本征值减少 1. 所以我们称 a 为**降算子**.

类似地,

$$N(a^\dagger|\nu\rangle) = (a^\dagger N + a^\dagger)|\nu\rangle = a^\dagger(N + \mathbb{1})|\nu\rangle = (\lambda_\nu + 1)(a^\dagger|\nu\rangle)$$

$a^\dagger$ 对 N 的本征态的作用效果是, 使其对应的本征值增大 1, 故称之为**升算子**.

现在来证明 N 的本征值是非负整数. 首先, 由于 $N = a^\dagger a$ 是半正定的, 所以它的本征值满足 $\lambda_\nu \geqslant 0$. 再注意到 $a|\nu\rangle$ 对应的本征值是 $\lambda_\nu - 1$.

用 $|\nu - 1\rangle$ 表示与本征值 $\lambda_\nu - 1$ 对应的本征态. $a|\nu\rangle$ 与 $|\nu - 1\rangle$ 只是相差一个归一化常数, 即

$$a|\nu\rangle \propto |\nu - 1\rangle$$

考虑 a^k 作用于 $|\nu\rangle$, 得到的 $a^k|\nu\rangle$, 它正比于 $|\nu - k\rangle$, 而且, $a^k|\nu\rangle$ 对应的本征值应该是 $\lambda_\mu - k$. 而我们又知道, N 的本征值只能是非负的, $\lambda_\nu - k \geqslant 0$, 所以 k 应该有一个上限, 或者说, $\lambda_\nu - k$ 应该有一个非负的下限. k 的上限与开始的时候给定的 ν 有关, 设为 K_ν, 这意谓着

$$\lambda_\nu - K_\nu \geqslant 0, \quad \lambda_\nu - K_\mu - 1 < 0$$

这同时也意谓着

$$a|\nu - K_\nu\rangle = 0$$

就是说, a 作为降算子, 不能使 $|\nu - K_\nu\rangle$ 降到本征值更低的本征态.

$$N|\nu - K_\nu\rangle = (\lambda_\nu - K_\nu)|\nu - K\rangle = 0$$

因此有

$$\lambda_\nu = K_\nu$$

K_ν 是非负的整数, 所以 N 的本征值是非负整数, 以后记作 n, 取值 $0,1,2,\cdots$, 没有上限. 将 N 的本征态记作 $|n\rangle$.

$$N|n\rangle = n|n\rangle, \quad n = 0,1,2,\cdots$$

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

H 或 N 的本征态 $|n\rangle$ 构成了一组无穷多个可列的基向量. H 或 N 在这组基上可以表示为无穷维的对角矩阵, 这个表象就是谐振子的能量表象. 在第五章中提到过关于 Hilbert 空间的一个定理: L_2 空间存在一组无穷多个可列基向量. 谐振子的能量表象就是一个典型的例子.

升降算子作用于 H 的本征态的效果是

$$a|n\rangle \propto |n-1\rangle, \quad a^\dagger|n\rangle \propto |n+1\rangle$$

将 $a|n\rangle$ 和 $a^\dagger|n\rangle$ 归一化.

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = n, \quad \langle n|aa^\dagger|n\rangle = n+1$$

所以

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

H 的最小本征值是 $\frac{1}{2}\hbar\omega$, 对应于 $n=0$, 相应的本征态 $|0\rangle$ 是谐振子的基态. 用升算子作用于 $|0\rangle$, 得到

$$|n\rangle = (n!)^{-1/2}(a^\dagger)^n|0\rangle$$

这样就得到了谐振子哈密顿量的所有本征态.

基态 $|0\rangle$ 满足方程

$$a|0\rangle = 0,$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(X'+iP') = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}X + i\left(\frac{1}{\hbar m\omega}\right)^{1/2}P\right]$$

令 $\beta = \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$. 在位置表象中, $|0\rangle$ 表示为波函数 $\psi_0(x)$, 满足如下方程

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta x + \frac{1}{\beta}\frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) = 0$$

容易解出

$$\psi_0(x) \propto e^{-\frac{1}{2}\beta^2x^2}$$

确定了归一化常数之后, 有

$$\psi_0(x) = \frac{\beta^{1/2}}{\pi^{1/4}}e^{-\frac{1}{2}\beta^2x^2}$$

稍后我们将看到, $\psi_0(x)$ 是满足最小不确定关系的量子态的波函数.

处于基态的谐振子的能量并不等于零, 这是量子现象. 谐振子的能级是

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

相邻能级之间的间距是相等的, 均为 $\hbar\omega$.

可以写出 a 和 $a^\dagger$ 的矩阵元,

$$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1}, \quad \langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}$$

进而可以将 a 和 $a^\dagger$ 表示为无穷维的矩阵.

$$a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0\cdots & \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0\cdots & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

a 的矩阵形式是上面无穷维矩阵的转置.

用 a 和 $a^\dagger$ 表示 X 和 P, 于是, 在能量表象中, 位置算子和动量算子也就具有了矩阵形式, 当然它们都是无限维的.

力学量在 H 的本征态上的期望值. 用升降算子表示位置 X 和 P, 有

$$\langle X\rangle = \langle P\rangle = 0$$

$$\begin{aligned}\langle X^2\rangle &= \langle n|X^2|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|(a+a^\dagger)(a+a^\dagger)|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega}\langle n|a^2+a^{\dagger 2}+aa^\dagger+a^\dagger a|n\rangle \\ &= \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega}\end{aligned}$$

同理有 $\langle n|P^2|n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar m\omega$

于是 X 的方差与 P 的方差的乘积是

$$(\Delta X)^2(\Delta P)^2 = \left(n+\frac{1}{2}\right)^2\hbar^2$$

或者

$$\Delta X\Delta P = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar$$

当 $n=0$, 即对于谐振子的基态, 不确定关系达到最小值 $\frac{\hbar}{2}$.

小结:

- 谐振子的哈密顿量的本征向量构成无限多个可列的基向量.
- 谐振子处于基态 $|0\rangle$ 时, 能量并不为零, 而是具有零点能 $\frac{1}{2}\hbar\omega$. 而经典谐振子的最低能量是零.
- 谐振子的相邻能级的能量差是固定的, $\hbar\omega$.
- 能级有下限但没有上限.
- 如果希望进一步了解能量本征态在位置表象中的波函数形式, 那么可以在位置表象中求解方程 $a|0\rangle=0$ 得到基态波函数, 然后使用升算子 $a^\dagger$ 得到任意的 $|n\rangle$ 在位置表象中的波函数.

第七章　粒子在位置空间中的运动 Ⅱ

谐振子, 数理方程

求解空间部分的 Schrödinger 方程, 哈密顿量的本征方程是

$$H\left|\varphi\right\rangle = E\left|\varphi\right\rangle$$

这里暂且不知道能量本征值 E 是否为分立的.

在位置表象中,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=E\varphi(x).$$

注意到 Hamilton 量 H 是一个正定算子, 故 $E>0$.

进行无量纲化, 令

$$q=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}x,\quad \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{1}$$

把波函数 $\varphi(x)$ 改写为 $u(q)$,

$$\frac{\mathrm{d}^2u(q)}{\mathrm{d}q^2}+(\lambda-q^2)u(q)=0.$$

分析 $|q|$ 很大的时候 $u(q)$ 的渐近行为[1].

$$|q|\to\infty,\quad \frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}q^2}-q^2u=0, \tag{2}$$

u 的渐近解的形式是 $u\sim e^{\pm\frac{1}{2}q^2}$. 解释如下.

先考虑 $e^{-\frac{1}{2}q^2}$, 对 q 的二阶导数是

$$\frac{\mathrm{d}^2e^{-\frac{1}{2}q^2}}{\mathrm{d}q^2}=(q^2-1)e^{-\frac{1}{2}q^2}$$

可以把这个结果直接代入方程 (2), 得到

$$(q^2-1)e^{-\frac{1}{2}q^2}-q^2e^{-\frac{1}{2}q^2}=-e^{-\frac{1}{2}q^2}\xrightarrow{|q|\longrightarrow\infty}0$$

[1]不可能有真实的 x 可以很大的谐振子, 这里只是数学上的分析.

也可以认为, 在 $(q^2-1)e^{-\frac{1}{2}q^2}$ 中, 当 q^2 很大的时候, $q^2-1\simeq q^2$, 所以

$$(q^2-1)e^{-\frac{1}{2}q^2}-q^2e^{-\frac{1}{2}q^2}\simeq q^2e^{-\frac{1}{2}q^2}-q^2e^{-\frac{1}{2}q^2}=0$$

这说明 $e^{-\frac{1}{2}q^2}$ 满足渐近方程 (2).

再来看 $e^{+\frac{1}{2}q^2}$, 对 q 的二阶导数是

$$\frac{\mathrm{d}e^{\frac{1}{2}q^2}}{\mathrm{d}q^2}=(q^2+1)e^{\frac{1}{2}q^2}\simeq q^2e^{\frac{1}{2}q^2}$$

容易看出, 它同样满足渐近方程 (2).

再考虑对波函数的要求: 在无穷远出应该趋于零, 所以舍去 $e^{\frac{1}{2}q^2}$.

我们只能选择 $u\sim e^{-\frac{1}{2}q^2}$. 设

$$u(q)=H(q)e^{-\frac{1}{2}q^2}.$$

其中 $H(q)$ 是 q 的多项式, 满足方程,

$$\frac{\mathrm{d}^2H}{\mathrm{d}q^2}-2q\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}q}+(\lambda-1)H=0.$$

将 $H(q)$ 展开为

$$H(q)=\sum_{n=0}^{\infty}a_nq^n.$$

可以得到如下递推关系,

$$a_{n+2}=\frac{2n+1-\lambda}{(n+2)(n+1)}a_n,\quad (n\geqslant 0). \tag{3}$$

如果对 n 求和不中断, 不在有限项上终止, 那么有

$$\frac{a_{n+2}}{a_n}\longrightarrow\frac{2}{n}.$$

这种渐近行为如同函数 $q^ke^{q^2}$ 的渐近行为, 这里 $k>0$. 这将导致

$$H(q)e^{-\frac{1}{2}q^2}\xrightarrow{q\to\infty}e^{\frac{1}{2}q^2}.$$

这是不能接受的发散的结果. 所以, $H(q)$ 只能是有限项的多项式.

设 $H(q)$ 的项数是 $n+1$, 即, 第 $n+2$ 项为零, 那么有

$$a_{n+2}=0\implies\lambda=2n+1,\quad n\geqslant 0.$$

这时, $H(q)$ 是一个 n 阶多项式. 由 (1) 式, 有

$$E=E_n=\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega,\quad n=0,1,2,\cdots. \tag{4}$$

这就是谐振子的能量本征值. 相应的本征函数是

$$\varphi_n(x) = \left[\frac{\beta}{\pi^{1/2}2^n n!}\right]^{1/2} H_n(\beta x) e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2}, \tag{5}$$

其中 $\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$. $H_n(z)$ 是 Hermite 多项式,

$$\exp\big(-s^2 + 2sz\big) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(z)}{n!} s^n.$$

至于 Hermite 函数的性质, 查看数学手册或有关数理方程的教科书.

- 波函数 $\varphi_n(x)$ 是以前在 Lie 代数解法中得到的 $|n\rangle$ 在位置表象中的表示, 它们构成无穷维 Hilbert 空间的一组基.
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_m^*(x)\varphi_n(x)\,\mathrm{d}x = \delta_{mn}.$$
- 在 Lie 代数解法中, 考虑降算子的下限得到了能级的分立. 在这里叙述的数理方法中, 级数的中止给出了能级的分立.
- 对于不同的 n, 作图 $|\varphi_n(x)|^2$. 分析经典谐振子出现在某个位置上的几率密度, 考察在 n 很大的时候量子几率分布与经典几率分布之间的对应.

谐振子的基态, 最小不确定关系

谐振子的基态 $|0\rangle$ 满足位置-动量不确定的下限 $\frac{\hbar}{2}$, 即

$$\Delta X\ \Delta P = \frac{\hbar}{2}$$

这里的 ΔX 和ΔP 分别是位置算子和动量算子在基态上的标准方差.

现在, 我们从一般的角度出发推导不确定关系, 然后考虑位置-动量不确定关系, 并寻找满足其下限的量子态.

设 A 和 B 是某个量子系统的力学量, $|\psi\rangle$ 是描述该系统的量子态.

$$\langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle\,, \quad \langle B\rangle = \langle\psi|B|\psi\rangle$$

$$\langle A^2\rangle = \langle\psi|A^2|\psi\rangle\,, \quad \langle B^2\rangle = \langle\psi|B^2|\psi\rangle$$

$$(\Delta A)^2 = \langle\psi|(A - \langle A\rangle)^2|\psi\rangle\,, \quad (\Delta B)^2 = \langle\psi|(B - \langle B\rangle)^2|\psi\rangle$$

令

$$|\varphi_1\rangle = (A - \langle A\rangle)\,|\psi\rangle\,, \quad |\varphi_2\rangle = (B - \langle B\rangle)\,|\psi\rangle$$

二者均未归一.

$$(\Delta A)^2 = \langle\varphi_1|\varphi_1\rangle\,, \quad (\Delta B)^2 = \langle\varphi_2|\varphi_2\rangle$$

由 Schwarz 不等式, 有

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 = \langle\varphi_1|\varphi_1\rangle\ \langle\varphi_2|\varphi_2\rangle \geqslant |\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle|^2 \tag{6}$$

再令

$$\mathcal{A} = A - \langle A\rangle\,\mathbb{1}, \quad \mathcal{B} = B - \langle B\rangle\,\mathbb{1}$$

$\mathcal{A}$ 和 $\mathcal{B}$ 的相乘可以写为

$$\mathcal{A}\mathcal{B} = \frac{1}{2}\{\mathcal{A},\mathcal{B}\} + \frac{1}{2}[\mathcal{A},\mathcal{B}] \tag{7}$$

其中 $\{\mathcal{A},\mathcal{B}\} = \mathcal{A}\mathcal{B} + \mathcal{B}\mathcal{A}$ 是反对易子, 是厄密的. 而 $[\mathcal{A},\mathcal{B}] = \mathcal{A}\mathcal{B} - \mathcal{B}\mathcal{A}$ 是对易子, 是反厄密的.

容易看到如下关系

$$\begin{array}{ccc} (\Delta A)^2(\Delta B)^2 & \geqslant & |\langle\varphi_1|\varphi_2\rangle|^2 \\ \| & & \| \\ \langle\mathcal{A}^2\rangle\langle\mathcal{B}^2\rangle & & |\langle\mathcal{A}\mathcal{B}\rangle|^2 \end{array}$$

所以有

$$\langle\mathcal{A}^2\rangle\langle\mathcal{B}^2\rangle \geqslant |\ \langle\mathcal{A}\mathcal{B}\rangle|^2$$

利用 (7), 并注意到 $\{\mathcal{A},\mathcal{B}\}$ 的期望值是实数, 而 $[\mathcal{A},\mathcal{B}]$ 的期望值是纯虚数.

$$\begin{aligned} \langle\mathcal{A}^2\rangle\langle\mathcal{B}^2\rangle &\geqslant |\langle\mathcal{A}\mathcal{B}\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{4}\big|\langle\{\mathcal{A},\mathcal{B}\}\rangle\big|^2 + \frac{1}{4}\big|\langle[\mathcal{A},\mathcal{B}]\rangle\big|^2 \\ &= \underbrace{\frac{1}{4}\big|\langle\{A-\langle A\rangle, B-\langle B\rangle\}\rangle\big|^2}_{\text{下一步略去此项}} + \frac{1}{4}\big|\langle[A-\langle A\rangle, B-\langle B\rangle]\rangle\big|^2 \qquad (8) \\ &\geqslant \frac{1}{4}\big|\langle[A,B]\rangle\big|^2 \qquad (9) \end{aligned}$$

综合以上过程, 有

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geqslant \frac{1}{4}\big|\langle[A,B]\rangle\big|^2 \tag{10}$$

或者

$$\Delta A\ \Delta B \geqslant \frac{1}{2}\big|\langle[A,B]\rangle\big| \tag{11}$$

这就是关于两个力学量 A 和 B 的不确定关系. (11) 式的推导过程表明, 不确定关系来自于量子力学的基本假设 —— 力学量被表示为 Hilbert 空间中的算子. 而算子的相乘是不能随意交换位置的, 于是就有了对易关系, 由此导致了不确定关系. (11) 式描述的不确定关系不涉及测量过程中的误差和扰动.

现在回到位置-动量不确定关系. 令 $A = X$, $B = P$, 有

$$\Delta X\ \Delta P \geqslant \frac{\hbar}{2} \tag{12}$$

考虑上式的下限, 问这样的问题: 什么形式的量子态可以使 (12) 式取等号?

注意到不确定关系的推导过程中有两个地方出现了不等号. 一处是 (6), 另一处是从 (8) 到 (9). 因此, 为了使 (12) 取等号, 下面两个条件 (13) 和 (14) 须同时成立.

$$(6)\ \text{取等号} \Longleftrightarrow |\varphi_1\rangle \propto |\varphi_2\rangle\,,\ \text{即}$$

$$(P-\langle P\rangle)\,|\psi\rangle = \lambda(X-\langle X\rangle)\,|\psi\rangle\,,\quad \lambda\in\mathbb{C} \tag{13}$$

$$(8)=(9) \Longleftrightarrow \text{反对易子的期望值为零, 即}$$

$$\langle\psi\,|\,\{X-\langle X\rangle\,, P-\langle P\rangle\}\,|\,\psi\rangle = 0 \tag{14}$$

现在的任务就是根据 (13) 和 (14) 求出 $|\psi\rangle$. 将这两个条件结合在一起, 得到

$$\langle\psi|\lambda(X-\langle X\rangle)^2|\psi\rangle + \langle\psi|\lambda^*(X-\langle X\rangle)^2|\psi\rangle = 0$$

即

$$(\lambda+\lambda^*)(\Delta X)^2 = 0$$

这里 ΔX 不能为零.

这是因为, 如果 $\Delta X = 0$, 那么有

$$(P-\langle P\rangle)\,|\psi\rangle = (X-\langle X\rangle)\,|\psi\rangle = 0$$

这个方程只能给出 $|\psi\rangle = 0$.

于是 $\lambda+\lambda^* = 0$, 即 λ 是纯虚数, 令 $\lambda = i\gamma$, 且 $\gamma > 0$.

再次利用 (13) 和 (14), 有

$$\underbrace{\langle\psi|(P-\langle P\rangle)^2|\psi\rangle}_{(\Delta P)^2} = \gamma^2\,\underbrace{\langle\psi|(X-\langle X\rangle)^2|\psi\rangle}_{(\Delta X)^2}$$

可以将 γ 表示为

$$\gamma = \frac{\Delta P}{\Delta X} = \frac{1}{2}\frac{1}{(\Delta X)^2} = 2(\Delta P)^2$$

其中用到了最小不确定关系 $\Delta X\ \Delta P = \frac{1}{2}$, 并且将 $\hbar$ 设为 1.

现在可以确定 $|\psi\rangle$ 的波函数形式. 在位置表象中, (13) 式表示为

$$\left(-i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \langle P\rangle\right)\psi(x) = i\gamma\big(x-\langle X\rangle\big)\psi(x)$$

解出

$$\psi(x) = C\exp\left\{i\langle P\rangle\,(x-\langle X\rangle)\right\}\ \exp\left\{-\frac{\gamma}{2}(x-\langle X\rangle)^2\right\}$$

利用归一化条件确定常数 C.

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \ |\psi(x)|^2 \\ &= |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \ e^{-\gamma(x-\langle X\rangle)^2} \\ &= |C|^2 \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} = |C|^2 \sqrt{2\pi} \ (\Delta X) \end{aligned}$$

将 C 设为正实数, $C = (2\pi)^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{\Delta X}}$.

$$\psi(x) = (2\pi)^{-1/4} \frac{1}{\sqrt{\Delta X}} e^{i\langle P\rangle(x-\langle X\rangle)} e^{-\frac{(x-\langle X\rangle)^2}{4(\Delta X)^2}}$$

可以将 ψ 选择为对称的形式, 令 $\langle X\rangle = \langle P\rangle = 0$, $\Delta X = \Delta P = \frac{1}{\sqrt{2}}$, 有

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

这实际上就是谐振子的基态波函数.

第七章　粒子在位置空间中的运动 Ⅲ

分束器 (Beam splitter)

在讨论谐振子的代数解法的时候, 引入过降算子 a 和升算子 $a^\dagger$. 在量子场论中, 它们有另外的名字, 湮灭算子和产生算子. 简单地说, 让升算子作用于真空态 $|0\rangle$, 得到一个单粒子态, 记作 $|1\rangle$,

$$a^\dagger |0\rangle = |1\rangle$$

用降算子作用于 $|1\rangle$, 回到真空态,

$$a |1\rangle = |0\rangle$$

借此机会, 讨论一下量子光学实验中常用的分束器.

经典情形, 光被视作电磁波. 入射波的复振幅为 E_1, 反射波和透射波的复振幅分别是 E_2 和 E_3. 设分束器是理想的, 没有损耗. 反射率和透射率分别是 r 和 t, 它们可以是复数.

$$E_2 = rE_1, \quad E_3 = tE_1$$

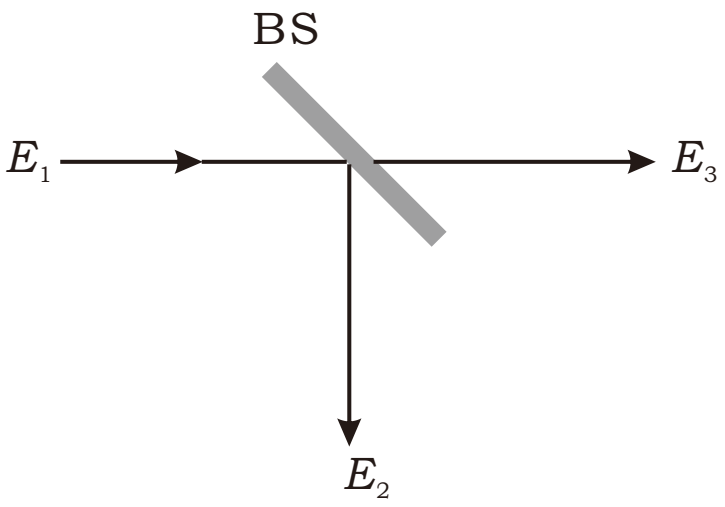


图 1

对于 $50:50$ 分束器, $|r| = |t| = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

入射波的强度应该等于反射波的强度和透射波的强度之和,

$$|E_1|^2 = |E_2|^2 + |E_3|^2$$

也就是说

$$|r|^2 + |t|^2 = 1$$

在量子情形中, 需要将复振幅 E_i 代之以湮灭算子 a_i, $i = 1, 2, 3$. 如果与经典情形类比, 应该有

$$a_2 = ra_1, \quad a_3 = ta_1 \tag{1}$$

由于分束器既不会产生光子, 也不会湮灭光子, 所以上式中的 r 和 t 仍然应该满足

$$|r|^2 + |t|^2 = 1 \tag{2}$$

而我们又知道, 场算子满足对易关系

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0$$

但是, 从 (1), 有

$$[a_2, a_2^\dagger] = |r|^2[a_1, a_1^\dagger] = |r|^2$$

$$[a_3, a_3^\dagger] = |t|^2[a_1, a_1^\dagger] = |t|^2$$

$$[a_3, a_3^\dagger] = rt^* \neq 0$$

这表明, (1) 式所示的变换不能正确描述量子情形下分束器. 原因在于, 在分束器的入射端有一个没有使用的端口, 在经典情形下, 这个未使用的端口不会影响出射端. 但是, 在量子情形中, 这个未使用的端口包含一个处于真空态的量子化的场, 这将影响分束器的出射端. 下图中的 a_0 表示入射端的另一个端口上的湮灭算子. 相应的反射率和透射率分别是 r' 和 t'.

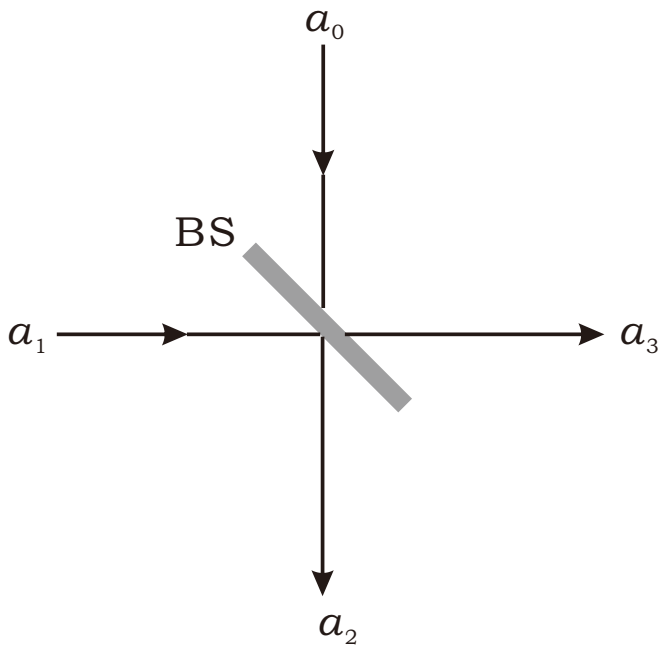


图 2

入射端和出射端之间的联系是

$$a_2 = ra_1 + t'a_0, \quad a_3 = ta_1 + r'a_0 \tag{3}$$

或者用矩阵表示

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t' & r \\ r' & t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \tag{4}$$

根据基本对易关系以及 (2), 有

$$|r| = |r'|, \quad |t| = |t'|, \quad |r|^2 + |t|^2 = 1, \quad r^*t' + r't^* = 0, \quad r^*t + r't'^* = 0$$

表明 (4) 中的矩阵是酉的.

反射束与透射束之间的相位差取决于分束器的构造. 对于 $50:50$ 分束器, 设反射与透射之间有 $\pi/2$ 的相位差, 那么

$$a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_0 + ia_1), \quad a_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_0 + a_1) \tag{5}$$

注意到 (4) 并不能反映算子的变换, 可以将算子的变换写为如下形式

$$a_2 = U^\dagger a_0 U, \quad a_3 = U^\dagger a_1 U \tag{6}$$

其中

$$U = \exp\left[i\frac{\pi}{4}\left(a_0^\dagger a_1 + a_0 a_1^\dagger\right)\right]$$

变换 (6) 可以看作在 Heisenberg 图像中对分束器的描述.

另一方面, 可以在 Schrödinger 图像中考虑量子态经过了分束器中的的变化. 光子数态 n 来自产生算子对真空态的 n 次作用. 如果入射端的两个端口上没有光子, 即 $|0\rangle_0 |0\rangle_1$ (这里, ket 符号里的数字表示光子数, 下标表示端口), 那么在出射端必然没有光子出射, 即 $|0\rangle_2 |0\rangle_3$, 即

$$|0\rangle_0 |0\rangle_1 \xrightarrow{\text{BS}} |0\rangle_2 |0\rangle_3$$

如果在端口 1 上有一个入射光子, 那么入射端的量子态是 $a_1^\dagger |0\rangle_0 |0\rangle_1$. 从 (5) 可以得到算子 a_1 在出射端的表现形式

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-ia_2 + a_3)$$

于是, 从入射端到出射端的变换是

$$|0\rangle_0 |1\rangle_1 = a_1^\dagger |0\rangle_0 |0\rangle_1 \xrightarrow{\text{BS}} \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_2^\dagger + a_3^\dagger) |0\rangle_2 |0\rangle_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(i |1\rangle_2 |0\rangle_3 + |0\rangle_2 |1\rangle_3) \tag{7}$$

这个结果表明, 当入射态是 $|0\rangle_0 |1\rangle_1$ (或者 $|1\rangle_0 |0\rangle_1$), 即只有一个光子, 那么或者反射, 或者透射, 几率均为 1/2, 不会同时观测到反射光子和透射光子, 即不会有符合计数 (coincident count).

接着考虑入射端有两个光子, 一个从端口 0 入射, 另一个从端口 1 入射, 则入射态是

$$|1\rangle_0 |1\rangle_1 = a_0^\dagger a_1^\dagger |0\rangle_0 |0\rangle_1$$

再注意到

$$a_0^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_2^\dagger + ia_3^\dagger), \quad a_1^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(ia_2^\dagger + a_3^\dagger)$$

于是有

$$\begin{aligned} |1\rangle_0 |1\rangle_1 &\xrightarrow{\text{BS}} \frac{1}{2}(a_2^\dagger + ia_3^\dagger)(ia_2^\dagger + a_3^\dagger) |0\rangle_2 |0\rangle_3 \\ &= \frac{i}{2}(a_2^\dagger a_2^\dagger + a_3^\dagger a_3^\dagger) |0\rangle_2 |0\rangle_3 \\ &= \frac{i}{\sqrt{2}}(|2\rangle_2 |0\rangle_3 + |0\rangle_2 |2\rangle_3) \end{aligned} \tag{8}$$

在上面的第一个等式中, 会出现 $a_2^\dagger a_3^\dagger - a_3^\dagger a_2^\dagger$, 相应的态是 $|1\rangle_2 |1\rangle_3 - |1\rangle_3 |1\rangle_2$. 由于全同粒子不可区分, 并且玻色子交换对称, 所以有 $|1\rangle_2 |1\rangle_3 = |1\rangle_3 |1\rangle_2$. 在出射端, 仍然不会出现符合计数. 但是, 这不同于入射端只有一个光子的情形. 在某种意义上, 式 (7) 描述的结果可以用粒子性解释. 而 (8) 的结果则是波动性的体现. 出射态 $|1\rangle_2 |1\rangle_3$ 有两个来源: 一个是两个入射的光子都反射, 另一个是两个入射光子都透射. 而反射光子和透射光子之间有 $\frac{\pi}{2}$ 的相位差, 所以这两个来源叠加的结果是彼此相消, 结果为零.

另外还需注意到, 只有在入射态为 $|1\rangle_0 |1\rangle_1$ 的时候, 出射态才会出现两个光子集中分布在一个端口的情况. 如果在端口 0 和 1 上分别有 n ($n > 1$) 个光子入射, 即 $|n\rangle_0 |n\rangle_1$, 那么出射态不是 $|2n\rangle_2 |0\rangle_3 + e^{i\phi} |0\rangle_2 |2n\rangle_3$.

一维阶梯势, 势垒, 势阱 (Cohen 书第一章的内容)

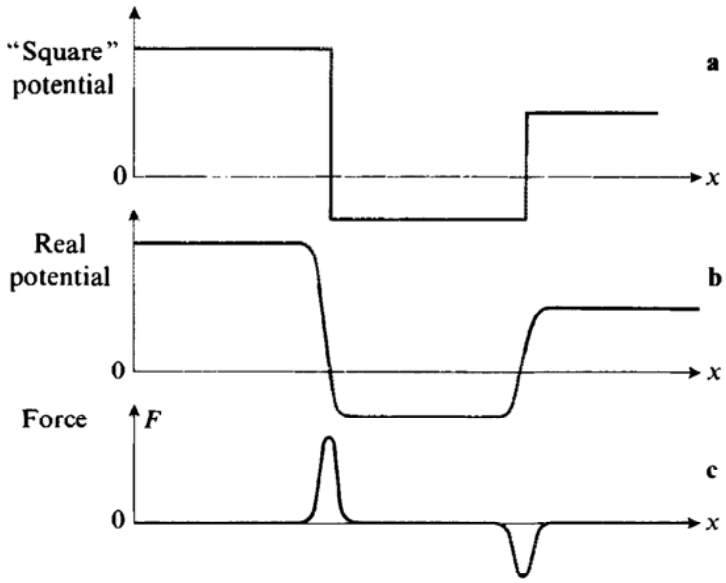


图 3

对于方势阱, 方势垒, 阶梯势这类抽象出来的势能, 在空间的不同区间内, 势能为常数. 在这些区间求解 Schrödinger 方程并不困难, 但是还需要将这些区间内的波函数进行 "组装".

粒子在上述一类势场中运动, 设粒子的能量值为 E, 或者说哈密顿量的本征值为 E. 我们并不能事先知道 E 的值, 而是需要求解哈密顿量的本征方程.

$$H\left|\varphi\right\rangle = E\left|\varphi\right\rangle$$

$$\left[\frac{P^2}{2m} + V(X)\right]\left|\varphi\right\rangle = E\left|\varphi\right\rangle$$

在位置表象中, 有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \tag{9}$$

逐段地、分区间地求解方程 (9).

在势能保持为常数的某个区间内, 无非有三种情况: $E > V$, $E < V$ 和 $E = V$.

- $\underline{E > V}$　令

  $$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}$$

  可以得到方程 (9) 的解

  $$\varphi(x) = Ae^{ikx} + A'e^{-ikx}$$

  这是平面波的叠加.

- $\underline{E<V}$　令

$$\rho=\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V-E)}$$

可以得到

$$\varphi(x)=Be^{\rho x}+B'e^{-\rho x}$$

这时指数增函数和指数减函数的叠加.

- $\underline{E=V}$　这时, $\varphi(x)$ 是 x 的线性函数.

阶梯势

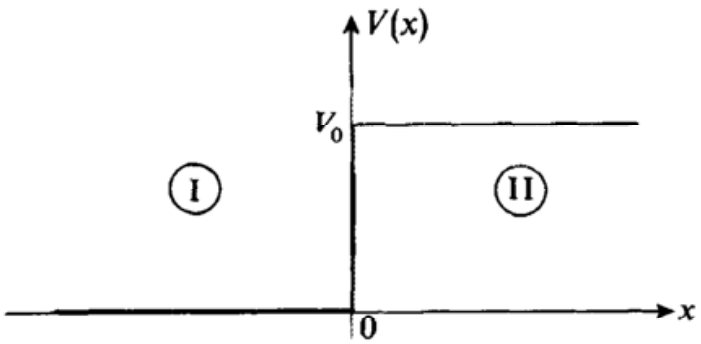


图 4

第一种情形, $E>V_0$

$$\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}=k_1$$

$$\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}=k_2$$

$$\varphi_{\mathrm{I}}(x)=A_1e^{ik_1x}+A_1'e^{-ik_1x}$$

$$\varphi_{\mathrm{II}}(x)=A_2e^{ik_2x}+A_2'e^{-ik_2x}$$

考虑在 $x=0$ 处波函数连续, 波函数的一阶导数连续, 有

$$\begin{cases}A_1+A_1'=A_2+A_2'\\ ik_1A_1-ik_1A_1'=ik_2A_2-ik_2A_2'\end{cases}$$

仅有两个方程, 无法确定四个未知数. 于是考虑稍微实际的情况: 粒子 (以平面波的形式) 从左侧入射, 而右侧没有向左行进的平面波. 故令 $A_2'=0$. 有如下比例关系

$$\frac{A_1'}{A_1}=\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2},\quad \frac{A_2}{A_1}=\frac{2k_1}{k_1+k_2}$$

在 $x<0$ 的左侧区域, 波函数是入射和反射的叠加. 在 $x>0$ 的右侧区域, 仅有透射波函数. 反射几率 R 和透射几率 T 分别是

$$R=\left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2,\quad T=\frac{k_2}{k_1}\left|\frac{A_2}{A_1}\right|^2$$

具体表达式是

$$R=1-\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2},\quad T=\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$$

显然, $R+T=1$.

第二种情形, $E<V_0$　　相比于第一种情形, 右侧的波函数有变化.

$$\sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}=\rho_2$$

$$\varphi_{\mathrm{II}}(x)=B_2e^{\rho_2x}+B_2'e^{-\rho_2x}$$

不允许在 $x\to\infty$ 时波函数发散, 于是 $B_2=0$. 进而得到

$$\frac{A_1'}{A_1}=\frac{k_1-i\rho_2}{k_1+i\rho_2}\quad\frac{B_2'}{A_1}=\frac{2k_1}{k_1+i\rho_2}$$

反射几率

$$R=\left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2=1$$

粒子完全反射, 反射量子态有相位的变化, 因为 A'/A 是复数. 粒子在 $x>0$ 的区域有非零的几率, 呈指数衰减, 表明粒子有一定的透射深度.

势垒

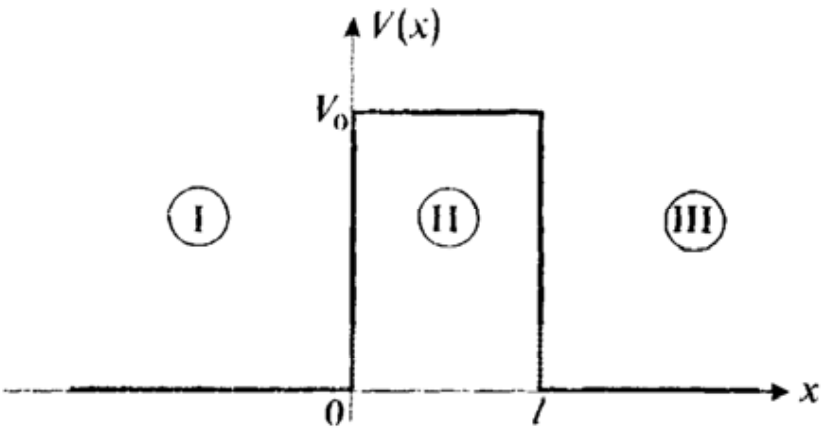


图 5

第一种情形, $E>V_0$　　分区间写出波函数.

$$k_1=k_3=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}},\quad k_2=\sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}}$$

$$\varphi_{\mathrm{I}}(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

$$\varphi_{\mathrm{II}}(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x}$$

$$\varphi_{\mathrm{III}}(x) = A_3 e^{ik_3 x} + A_3' e^{-ik_3 x}$$

与阶梯势的情形类似, 可以令 $A_3' = 0$. 考虑 $x = 0$ 和 $x = l$ 处波函数及其导数的连续性, 给出

$$A_1 = \left[\cos k_2 l - i\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2}\ \sin k_2 l\right] e^{ik_1 l} A_3$$

$$A_1' = i\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1 k_2}\ e^{ik_1 l} \sin k_2 l\ A_3$$

由此得到反射几率和透射几率,

$$R = \left|\frac{A_1'}{A_1}\right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2)^2 \sin^2 k_2 l}$$

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 l}$$

显然有

$$R + T = 1$$

透射系统的具体形式

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2\ \sin^2 \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} l}$$

透射系数随势垒的宽度 l 周期性地变化, 最大值可以达到 1, 此时

$$k_2 l = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} l = n\pi, \quad n \text{ 为整数}$$

这种情况被称为共振散射. 如下图所示.

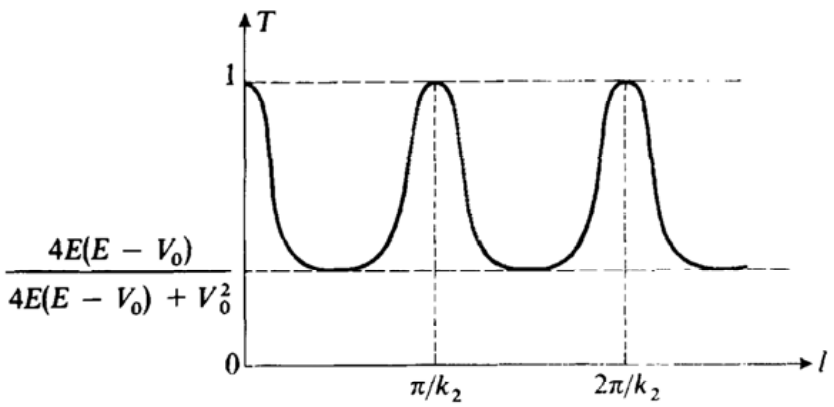


图 6

第二种情形, $E < V_0$　　在第 I 区和第 Ⅲ 区的波函数的形式没有改变, 而第 Ⅱ 区的波函数不再是振荡形式.

$$k_1 = k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \rho_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

$$\varphi_{\mathrm{I}}(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x}$$

$$\varphi_{\mathrm{II}}(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B_2' e^{-\rho_2 x}$$

$$\varphi_{\mathrm{III}}(x) = A_3 e^{ik_3 x} + A_3' e^{-ik_3 x}$$

相对于将 k_2 替换为 $-i\rho_2$. 得到透射几率,

$$T = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 = \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \ \sinh^2 \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}} l}$$

这就是隧道效应.

有限深势阱

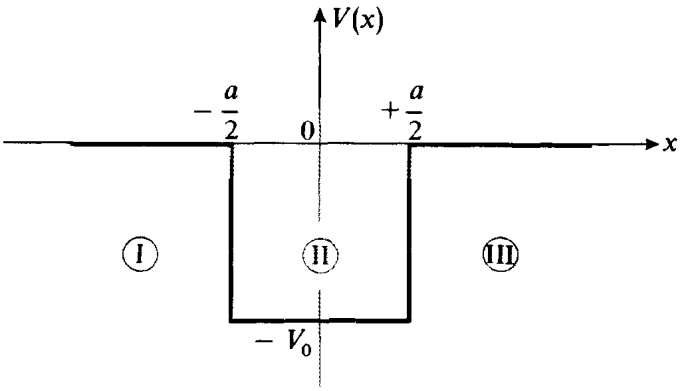


图 7

考虑 $-V_0 < E < 0$ 情形.

$$\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad k = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}}$$

$$\varphi_{\mathrm{I}} = B_1 e^{\rho x} + B_1' e^{-\rho x}$$

$$\varphi_{\mathrm{II}} = A_2 e^{ikx} + A_2' e^{-ikx}$$

$$\varphi_{\mathrm{III}} = B_3 e^{\rho x} + B_3' e^{-\rho x}$$

考虑在 $x \to \pm\infty$ 时波函数的行为, 有

$$B_1' = 0, \quad B_3 = 0$$

于是有下面四个方程,

$$\varphi_{\mathrm{I}}\left(-\frac{a}{2}\right) = \varphi_{\mathrm{II}}\left(-\frac{a}{2}\right) \qquad \Longrightarrow \qquad B_1 e^{-\frac{\rho a}{2}} - A_2 e^{-\frac{1}{2}ika} - A_2' e^{\frac{1}{2}ika} = 0$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{I}}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-\frac{a}{2}} = \left.\frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{II}}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-\frac{a}{2}} \quad \Longrightarrow \quad B_1\rho e^{-\frac{\rho a}{2}} - iA_2 k e^{-\frac{1}{2}ika} + iA_2' k e^{\frac{1}{2}ika} = 0$$

$$\varphi_{\mathrm{II}}\left(\frac{a}{2}\right) = \varphi_{\mathrm{III}}\left(\frac{a}{2}\right) \quad \Longrightarrow \quad A_2 e^{\frac{1}{2}ika} + A_2' e^{-\frac{1}{2}ika} - B_3' e^{-\frac{1}{2}\rho a} = 0$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{II}}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=\frac{a}{2}} = \left.\frac{\mathrm{d}\varphi_{\mathrm{III}}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=\frac{a}{2}} \quad \Longrightarrow \quad iA_2 k e^{\frac{1}{2}ika} - iA_2' k e^{-\frac{1}{2}ika} + B_3'\rho e^{-\frac{1}{2}\rho a} = 0$$

这是关于四个未知数 B_1, A_2, A_2', B_3' 的四个齐次方程, 为了有非零解, 必须有

$$\begin{vmatrix} e^{-\frac{1}{2}\rho a} & -e^{-\frac{1}{2}ika} & -e^{\frac{1}{2}ika} & 0 \\ \rho e^{-\frac{1}{2}\rho a} & -ike^{-\frac{1}{2}ika} & ike^{\frac{1}{2}ika} & 0 \\ 0 & e^{\frac{1}{2}ika} & e^{-\frac{1}{2}ika} & -e^{-\frac{1}{2}\rho a} \\ 0 & ike^{\frac{1}{2}ika} & -ike^{-\frac{1}{2}ika} & \rho e^{-\frac{1}{2}\rho a} \end{vmatrix} = 0$$

具体结果是

$$2ie^{-\rho a}\left[2k\rho\cos ka + (\rho^2 - k^2)\sin ka\right] = 0 \tag{10}$$

从中确定能量 E (注意到 k 和 ρ 都与能量有关).

Cohen 书中提供了另一种做法. 首先令 $B_1' = 0$, 根据 $x = -\frac{a}{2}$ 处的边界条件, 有

$$A_2 = e^{\frac{1}{2}a(-\rho+ik)}\ \frac{\rho + ik}{2ik}\ B_1 \tag{11}$$

$$A_2' = -e^{-\frac{1}{2}a(\rho+ik)}\ \frac{\rho - ik}{2ik}\ B_1 \tag{12}$$

接着, 考虑 $x = \frac{a}{2}$ 处的边界条件, 给出

$$B_3 = \frac{e^{-\rho a}}{2k\rho}\ \left[2k\rho\cos ka + (\rho^2 - k^2)\sin ka\right]\ B_1 \tag{13}$$

$$B_3' = \frac{\rho^2 + k^2}{2k\rho}\ \sin ka\ B_1 \tag{14}$$

这时, 再令 $B_3 = 0$, 给出与 (10) 式等价的关系.

现在要求解方程

$$2k\rho\cos ka + (\rho^2 - k^2)\sin ka = 0$$

注意到 $k, \rho > 0$. 将该方程改写为

$$\frac{2k\rho}{k^2 - \rho^2} = \frac{\sin ka}{\cos ka} \tag{15}$$

令

$$\frac{\rho}{k} = \tan\chi, \quad \tan\chi > 0$$

从 (15) 式得到

$$\tan 2\chi = \tan ka$$

有如下两种情况:

1. $2\chi = 2n\pi + ka$, n 为整数. $\chi = n + \frac{ka}{2}$, 于是

$$\tan\chi = \frac{\rho}{k} = \tan\frac{ka}{2}$$

但是需要添加一个条件 $\tan\frac{ka}{2} > 0$.

2. $2\chi = (2n+1)\pi + ka$, n 为整数. $\chi = n\pi + \frac{\pi}{2} + \frac{ka}{2}$, 于是

$$\tan\chi = \frac{\rho}{k} = -\cot\frac{ka}{2}$$

这时应该有条件 $\tan\frac{ka}{2} < 0$.

再注意到

$$k^2 + \rho^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \equiv k_0^2$$

对于第一种情况, 有

$$\left.\begin{array}{l} 1 + \frac{\rho^2}{k^2} = \frac{k_0^2}{k^2} = 1 + \tan^2\frac{ka}{2} \implies \frac{k}{k_0} = \left|\cos\frac{ka}{2}\right| \\ \tan\frac{ka}{2} > 0 \end{array}\right\} \tag{16}$$

类似地, 对于第二章情况, 有

$$\left.\begin{array}{l} 1 + \frac{\rho^2}{k^2} = \frac{k_0^2}{k^2} = 1 + \cot^2\frac{ka}{2} \implies \frac{k}{k_0} = \left|\sin\frac{ka}{2}\right| \\ \tan\frac{ka}{2} < 0 \end{array}\right\} \tag{17}$$

只能有数值解.

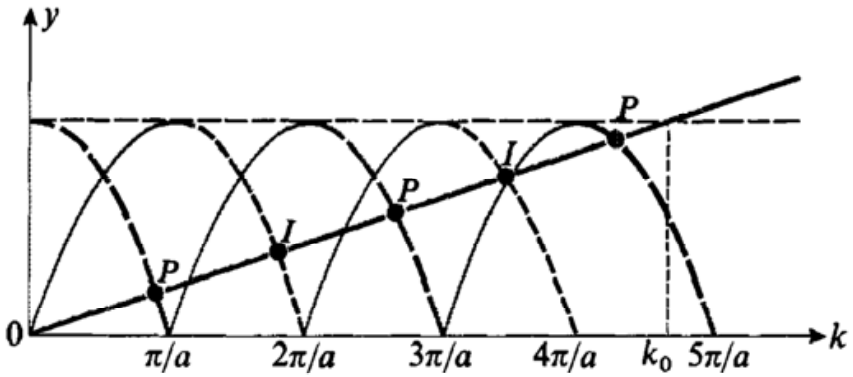


图 8: P 表示偶函数, I 表示奇函数.

将第一种情况下的解 (16) 代入 (11) 和 (12), 得到 $A_2 = A_2'$; 代入 (14), 得到 $B_3' = B_1$. 这表明, 第一种情况中的本征函数是偶函数. 类似地, 可以看出第二种情况中给出的本征函数是奇函数. 而且, 基态是偶函数.

第七章　粒子在位置空间中的运动 Ⅳ

Stern-Gerlach 实验

将 SG 实验过程简化并抽象为如下描述 (图 1). 自旋 1/2 粒子经过了 SG(z) 装置, 其中的磁场是

$$B_x = B_y = 0, \quad B_z = zB' \tag{1}$$

这里, B' 是磁场沿 z 方向的梯度. 当然, 这样的磁场是不存在的, 因为 $\nabla \cdot \boldsymbol{B} \neq 0$. 更严格地, 可以把磁场的分量写为

$$B_x = -xB', \quad B_y = 0, \quad B_z = B_0 + zB'$$

这里, B_0 是一个常数. 在实际情况中, $B_0 \gg B_x$, 这导致磁矩在 xy 平面内的分量以很大的角速度绕 z 轴旋转, 由于非零的 B_x 导致的粒子的受力的平均效果近乎为零. 因此, 我们可以简单地考虑 (1) 式的磁场, 把自旋粒子的哈密顿量表示为 $-\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} = -\mu_z B_z$, 进而写为

$$H = -2gS_z \otimes Z = -g\sigma_z \otimes Z \tag{2}$$

这里我们令 $\hbar = 1$. 常数 g 包含了粒子的质量、电荷、磁场的梯度等物理量, 描述了粒子的自旋自由度和空间自由度之间的耦合强度. 在哈密顿量的表达式 (2) 中, 我们采用了直积符号 $\otimes$ 联系自旋力学量 σ_z 和空间位置力学量 Z, 这是为了提醒我们这两个力学量分属不同的自由度, 需要不同的 Hilbert 空间来描述. 描述 σ_z 的是两维复空间 $\mathbb{C}^2$, 描述 Z 的则是无限维的连续的 Hilbert 空间. 当然, 粒子的量子态也是由这两部分构成的. 我们假设粒子的初态具有直积态的形式, 即

$$|\Psi(0)\rangle = |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle \tag{3}$$

这里 $|\psi\rangle$ 表示粒子的自旋量子态, $|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle$. 而 $|\varphi\rangle$ 表示与空间自由度相关的量子态, 可以在位置表象中写为空间位置的波函数 $\varphi(x, y, z)$, 也可以在动量空间中写为动量波函数 $\varphi(p_x, p_y, p_z)$. 粒子的量子态随时间的演化由酉变换 $U(t)$ 决定,

$$U(t) = e^{-iHt} = e^{igt\,\sigma_z \otimes Z} \tag{4}$$

我们关注的被测力学量是 S_z, 或者说是 σ_z, 希望从粒子的波函数给出几率分布推知被测力学量取值 σ_z 取值 ± 1 的几率以及期望值.

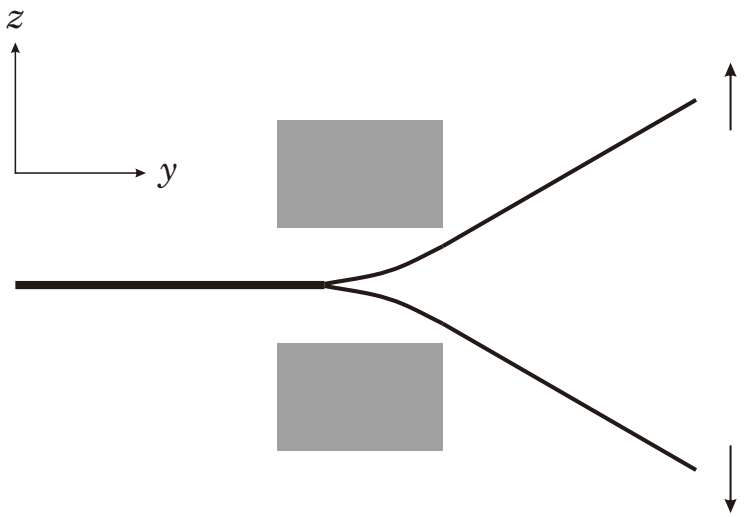


图 1: SG 实验示意图. 非均匀磁场的梯度为 z 方向, 自旋 1/2 粒子穿过磁场区域后分为向上和向下偏转的两束.

在确定 $|\varphi\rangle$ 的具体形式之前, 可以先在 Heisenberg 图像中计算一下粒子的位置算符和动量算符随时间的变化情况. 容易看到, 粒子的位置算符 $\boldsymbol{R} = (X, Y, Z)$ 与 H 对易, 它们是守恒量. 动量算符 P_x 和 P_y 也是守恒量. 故只需要考虑 P_z 随时间的变化, 将 P_z 表示为 $\mathbb{1} \otimes P_z$

$$\begin{aligned}(\mathbb{1} \otimes P_z)(t) &= U^\dagger(t)(\mathbb{1} \otimes P_z)U(t) \\ &= \mathbb{1} \otimes P_z + [-igt\sigma_z \otimes Z, \mathbb{1} \otimes P_z] \\ &\quad + \frac{1}{2!}\big[-igt\hat{o}_z \otimes Z, [-igt\sigma_z \otimes Z, \mathbb{1} \otimes P_z]\big] + \cdots \\ &= \mathbb{1} \otimes P_z + gt(\sigma_z \otimes \mathbb{1}) \end{aligned} \tag{5}$$

式 (5) 建立了 t 时刻动量 P_z 的期望值与测量力学量 σ_z 在初态中的期望值之间的联系, 即

$$\langle P_z\rangle(t) = \langle P_z\rangle(0) + gt\langle\sigma_z\rangle(0)$$

我们希望知道的正是 $\langle\sigma_z\rangle(0)$, 它就是

$$\langle\sigma_z\rangle(0) = \frac{\langle P_z\rangle(t) - \langle P_z\rangle(0)}{gt} \tag{6}$$

上述推导意谓着, 我们需要考虑粒子的动量的期望值的变化, 于是很自然地, 应该选择动量表象描述 $|\varphi\rangle$.

现在选择动量表象, $|\varphi\rangle$ 被表示为动量波函数 $\varphi(\boldsymbol{p}) = \varphi(p_x, p_y, p_z)$, 而酉变换 $U(t)$ 中的位置算符 Z 则要表示为 $i\hbar\frac{\partial}{\partial p_z}$. 我们已经设定 $\hbar = 1$, 故 $Z \to i\frac{\partial}{\partial p_z}$. 在酉变换 $U(t)$ 的作用下, 有

$$\begin{aligned}|\Psi(t)\rangle &= U(t)\,|\Psi(0)\rangle \\ &= e^{igt\,\sigma_z\otimes Z}\big[(c_0\,|0\rangle + c_1\,|1\rangle) \otimes |\varphi\rangle\,\big]\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= (c_0\left|0\right\rangle + c_1\left|1\right\rangle)\varphi(\boldsymbol{p}) + igt(c_0\left|0\right\rangle - c_1\left|1\right\rangle)i\,\frac{\partial\varphi(\boldsymbol{p})}{\partial p_z} \\
&\qquad + \frac{(igt)^2}{2!}(c_0\left|0\right\rangle + c_1\left|1\right\rangle)i^2\,\frac{\partial^2\varphi(\boldsymbol{p})}{\partial p_z^2} + \frac{(igt)^3}{3!}(c_0\left|0\right\rangle - c_1\left|1\right\rangle)i^3\,\frac{\partial^3\varphi(\boldsymbol{p})}{\partial p_z^3} + \cdots \\
&= c_0\left|0\right\rangle\left[\varphi(\boldsymbol{p}) - gt\frac{\partial\varphi(\boldsymbol{p})}{\partial p_z} + \frac{(gt)^2}{2!}\frac{\partial^2\varphi(\boldsymbol{p})}{\partial p_z^2} - \frac{(gt)^3}{3!}\frac{\partial^3\varphi(\boldsymbol{p})}{\partial p_z^3} + \cdots\right] \\
&\qquad + c_1\left|1\right\rangle\left[\varphi(\boldsymbol{p}) + gt\frac{\partial\varphi(\boldsymbol{p})}{\partial p_z} + \frac{(gt)^2}{2!}\frac{\partial^2\varphi(\boldsymbol{p})}{\partial p_z^2} + \frac{(gt)^3}{3!}\frac{\partial^3\varphi(\boldsymbol{p})}{\partial p_z^3} + \cdots\right] \\
&= c_0\left|0\right\rangle\varphi(p_x, p_y, p_z - gt) + c_1\left|1\right\rangle\varphi(p_x, p_y, p_z + gt)
\end{aligned}
$$

至此得到 t 时刻粒子的自旋和动量的整体的量子态

$$
\left|\Psi(t)\right\rangle = c_0\left|0\right\rangle\varphi(p_x, p_y, p_z - gt) + c_1\left|1\right\rangle\varphi(p_x, p_y, p_z + gt) \tag{7}
$$

这个量子态可以类比于最简单的 $2\otimes 2$ 测量模型, 但是还不能说它们达到了最优形式. 在进一步分析之前, 需要说明如下两点.

1. 在开始的时候, 我们说, 通过粒子在空间的位置分布推知被测力学量 σ_z 的性质, 这就需要将 $\left|\Psi(t)\right\rangle$ 中的动量空间的波函数 $\varphi(p_x, p_y, p_z \pm gt)$ 通过傅里叶变换表示为位置空间的波函数, 由此会带来计算上的繁琐. 为了叙述的简明直观, 这里我们仅仅分析了粒子的动量分布而没有计算其位置分布, 换句话说, 我们假设测量仪器对粒子的动量有所响应.

2. 从 (7) 式看到, 酉变换前后的量子态始终是粒子的动量 P_x 和 P_y 的本征态, 这说明粒子的动量波函数与 p_x 和 p_y 的依赖关系是不重要的. 因此我们把初态中的动量空间的波函数简化为 $\varphi(p_z)$, 相应地, $\left|\Psi(t)\right\rangle$ 中的动量波函数简化为 $\varphi(p_z - gt)$ 和 $\varphi(p_z + gt)$, 即

$$
\left|\Psi(t)\right\rangle = c_0\left|0\right\rangle\varphi(p_z - gt) + c_1\left|1\right\rangle\varphi(p_z + gt) \tag{8}
$$

设初态的动量波函数是一个对称的 Gauss 波包,

$$
\varphi(p_z) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\exp\left\{-\frac{p_z^2}{4\sigma^2}\right\} \tag{9}
$$

在 $\varphi(p_z)$ 中动量 P_z 的期望值为零. 上式中的 σ 是 P_z 的标准偏差, 即

$$
\sigma^2 = \langle P_z^2\rangle_\varphi - \langle P_z\rangle_\varphi^2 = \langle P_z^2\rangle_\varphi
$$

几率密度 $|\varphi(p_z)|^2$ 是数理统计中常用的高斯分布. 图 2 描绘了 $\varphi(p_z)$ 和 $\varphi(p_z \pm gt)$ 的函数图像.

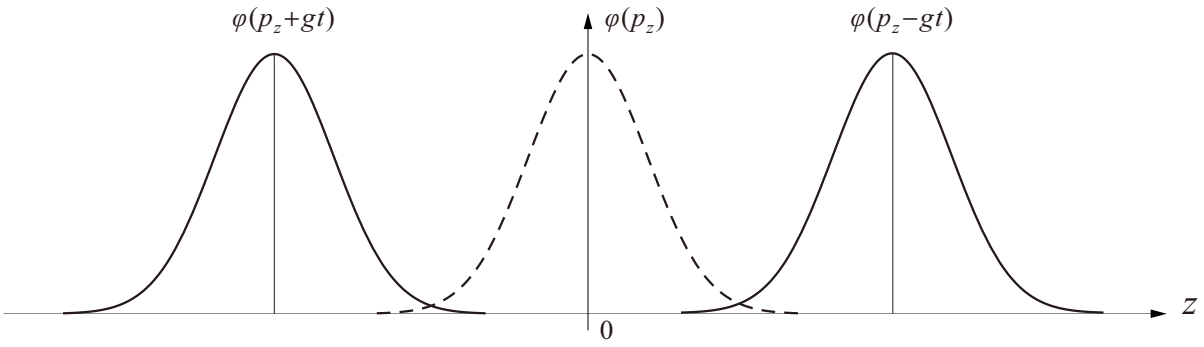


图 2: 自旋与空间位置之间的相互作用导致动量波函数发生平移.

从 (8) 中可以写出粒子的自旋部分的量子态. 将 $|\Psi(t)\rangle$ 改写为

$$|\Psi(t)\rangle = c_0\,|0\rangle\,\varphi_0(p_z,t) + c_1\,|1\rangle\,\varphi_1(p_z,t) \tag{10}$$

其中 $\varphi_0(p_z,t)=\varphi(p_z-gt)$, $\varphi_1(p_z,t)=\varphi(p_z+gt)$.

令 $\Psi(t)=|\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$. 如果我们希望了解在 t 时刻系统的量子态, 那么就要在动量空间中对 $\Psi(t)$ 求迹, 为此, 将 $\varphi_0(p_z,t)$ 和 $\varphi_1(p_z,t)$ 分别视作量子态 $|\varphi_0(t)\rangle$ 和 $|\varphi_1(t)\rangle$ 在动量空间的基向量 $|p_z\rangle$ 上的分量, 即

$$|\varphi_0(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_0(p_z,t)\,|p_z\rangle\,dp_z$$

$$|\varphi_1(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_1(p_z,t)\,|p_z\rangle\,dp_z$$

于是, $\Psi(t)$ 可以写为 (以下省略了积分的上下限)

$$\begin{aligned}\Psi(t) =& |c_0|^2\,|0\rangle\langle 0| \iint \varphi_0(p_z',t)\varphi_0^*(p_z'',t)\,|p_z'\rangle\langle p_z''|\,dp_z'dp_z'' \\ &+ c_0c_1^*\,|0\rangle\langle 1| \iint \varphi_0(p_z',t)\varphi_1^*(p_z'',t)\,|p_z'\rangle\langle p_z''|\,dp_z'dp_z'' \\ &+ c_0^*c_1\,|1\rangle\langle 0| \iint \varphi_0^*(p_z',t)\varphi_1(p_z'',t)\,|p_z'\rangle\langle p_z''|\,dp_z'dp_z'' \\ &+ |c_1|^2\,|1\rangle\langle 1| \iint \varphi_1(p_z',t)\varphi_1^*(p_z'',t)\,|p_z'\rangle\langle p_z''|\,dp_z'dp_z''\end{aligned}$$

然后, 对上式右端第一项中的积分形式在动量空间中求迹. 由于这是无穷维连续的希尔伯特空间, 求迹就是计算如下形式的积分,

$$\begin{aligned}&\int \langle p_z|\left\{\iint \varphi_0(p_z',t)\varphi_0^*(p_z'',t)\,|p_z'\rangle\langle p_z''|\,dp_z'dp_z''\right\}|p_z\rangle\,dp_z \\ =&\iiint \varphi_0(p_z',t)\varphi_0^*(p_z'',t)\delta(p_z-p_z')\delta(p_z-p_z'')dp_z\,dp_z'\,dp_z'' \\ =&\int \varphi_0(p_z,t)\varphi_0^*(p_z,t)dp_z\end{aligned}$$

对其它积分形式进行类似的计算, 令

$$I_{ij}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_i(p_z, t)\varphi_j^*(p_z, t)dp_z, \quad i, j = 0, 1$$

显然, $I_{ij}(t) = I_{ji}^*(t)$. 考虑到 $\varphi_0(p_z, t)$ 和 $\varphi_1(p_z, t)$ 的归一性, 有 $I_{00}(t) = I_{11}(t) = 1$, 故 $\hat{\rho}^S(t)$ 的矩阵形式是

$$\rho^S(t) = \begin{pmatrix} |c_0|^2 & c_0c_1^* I_{01}(t) \\ c_0^* c_1 I_{10}(t) & |c_1|^2 \end{pmatrix} \tag{11}$$

可以看到, 在测量过程中, 系统量子态的变化表现在密度矩阵的非对角元上.

理想情形 理想情形指的是两个波函数 $\varphi(p_z + gt)$ 和 $\varphi(p_z - gt)$ 之间没有重叠. 虽然实际上它们是有重叠的, 但是, 如果我们令 gt 很大, 那么这两个波包距离很远, 其间的重叠就很小, 即

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*(p_z + gt)\varphi(p_z - gt)dp_z = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p_z + gt)\varphi(p_z - gt)dp_z \approx 0$$

可以说它们近乎正交. 这时, $|\Psi(t)\rangle$ 式和以前讨论过的最优形式在本质上是一样的.

如果观测到粒子的动量的值 $p_z > 0$, 那么这个观测结果的来源应该是 $\varphi(p_z - gt)$, 由此可以推知粒子的自旋量子态处于 $|0\rangle$, 且 σ_z 取值 $+1$; 类似地, 如果观测到 $p_z < 0$, 那么其自旋量子态处于 $|1\rangle$, 且 σ_z 取值 -1. 注意到 $\varphi(p_z - gt)$ 基本上完全分布在 p_z 的右半轴, $\varphi(p_z - gt)$ 基本上完全分布在 p_z 的左半轴. 因此在 (8) 中, 粒子的动量大于零的几率是

$$\text{Prob}(p_z > 0) = \int_0^{+\infty} |c_0|^2 |\varphi(p_z - gt)|^2 dp_z = |c_0|^2$$

同样地, 动量小于零的几率是 $\text{Prob}(p_z < 0) = |c_1|^2$. 再次重现了自旋量子态 $|\psi\rangle$ 中 $\hat{\sigma}_z$ 取值 ± 1 的几率. 而且还需注意到, 理想情况下测量后粒子的密度矩阵是对角的, 即 (11) 式中非对角项变为零.

虽然看起来通过增大 gt 以减小动量波函数的重叠这一做法是可行的, 但是也要注意到, 当相互作用强度 g 给定的时候, 延长相互作用的时间 t 会让系统受到更多的来自周围环境的干扰. 在实际情况中, 两个动量波函数难免会有部分重叠, 这将导致模糊测量.

非理想测量 如果在 t 时刻粒子的整体量子态 $|\Psi(t)\rangle$ 中的动量波函数 $\varphi(p_z \pm gt)$ 有明显的重叠, 并且, 在实验中观测到粒子的动量的值 p_z^{exp} 正好处于两个动量波函数的交叠区域 (如图 3 所示), 那么难以断定动量的这个值是来自于 $\varphi(p_z + gt)$ 还是来自于 $\varphi(p_z - gt)$. 这种情况就是非理想的测量.

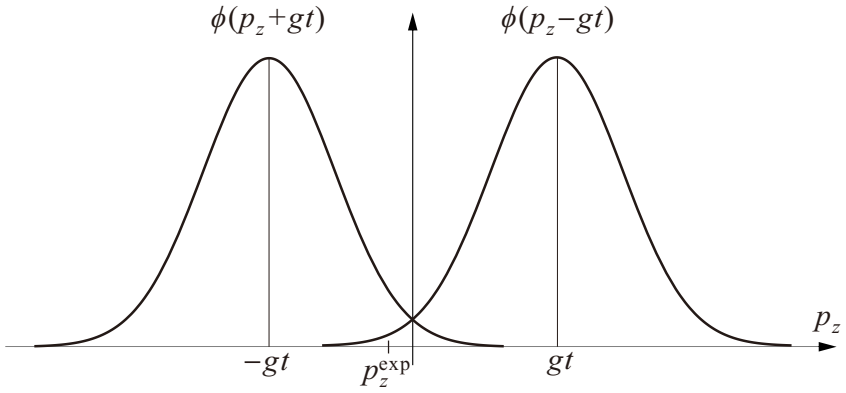


图 3: 非理想测量. 粒子的动量空间中的波函数 $\varphi(p_z+gt)$ 和 $\varphi(p_z-gt)$ 之间有明显的重叠. 如果观测到的动量的值 $p_z^{\exp}$ 处于重叠区域, 则不能断定这是哪一个动量波函数给出的结果.

0.1 非理想测量

Peres, A. and Wootters, W. K. Quantum measurements of finite duration. Physical Review D **32**, 1968-1974 (1985).

设想, 自旋 1/2 粒子哈密顿量有如下形式 (以下令 $\hbar = 1$),

$$H = v(t)\sigma_z \otimes P$$

在 Heisenberg 图像中,

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} = i[H, q] = v(t)\sigma_z$$

这相对于说, 当 σ_z 取值 $+1$ 的时候, 粒子的速度为 $v(t)$; 当 σ_z 取值 -1 的时候, 粒子的速度为 $-v(t)$.

粒子的初态

$$|\Psi(0)\rangle = \begin{pmatrix}\alpha\\ \beta\end{pmatrix} \otimes \varphi(q)$$

考虑 t 时刻的量子态. 注意到在不同的时刻, 哈密顿量是彼此对易的. 于是可以把时间演化算子表示为

$$U(t) = \exp\left\{ -i\int_0^t H(\tau)\,\mathrm{d}\tau \right\} = e^{-iL(t)\sigma_z\otimes P} = \begin{pmatrix} e^{-iL(t)P} & 0\\ 0 & e^{iL(t)P}\end{pmatrix}$$

其中

$$L(t) = \int_0^t v(\tau)\,\mathrm{d}\tau$$

写出 t 时刻的量子态,

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix}\alpha e^{-iL(t)P}\\ \beta e^{iL(t)P}\end{pmatrix}\varphi(q) = \begin{pmatrix}\alpha\varphi(q-L)\\ \beta\varphi(q+L)\end{pmatrix}$$

或者

$$|\Psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \alpha e^{-iL(t)P} \\ \beta e^{iL(t)P} \end{pmatrix} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q\ \varphi(q)\,|q\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q\ \varphi(q-L)\,|q\rangle \\ \beta \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}q\ \varphi(q+L)\,|q\rangle \end{pmatrix}$$

也可以写为

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \alpha\,|0\rangle \otimes \int \mathrm{d}q\ \varphi(q-L)\,|q\rangle + \beta\,|1\rangle \otimes \int \mathrm{d}q\ \varphi(q+L)\,|q\rangle \\ &= \int \mathrm{d}q\ \left[\alpha\varphi(q-L)\,|0\rangle \otimes |q\rangle + \beta\varphi(q+L)\,|1\rangle \otimes |q\rangle\right] \\ &= \int \mathrm{d}q\ \left[\alpha\varphi(q-L)\,|0\rangle + \beta\varphi(q+L)\,|1\rangle\right] \otimes |q\rangle \\ &\quad \boxed{\text{Let } |\eta(q,t)\rangle = \alpha\varphi(q-L)\,|0\rangle + \beta\varphi(q+L)\,|1\rangle} \\ &= \int \mathrm{d}q\,|\eta(q,t)\rangle \otimes |q\rangle \end{aligned}$$

量子态与时间的依赖关系体现在 $L = L(t)$, 这里及以下, 除非特别标明, 积分的上下限分别是 $+\infty$ 和 $-\infty$.

密度矩阵形式

$$\rho(q,q') = \begin{pmatrix} |\alpha|^2\varphi(q-L)\varphi^*(q'-L) & \alpha\beta^*\varphi(q-L)\varphi^*(q'+L) \\ \alpha^*\beta\varphi^*(q'-L)\varphi(q+L) & |\beta|^2\varphi(q+L)\varphi^*(q'+L) \end{pmatrix}$$

或者

$$\rho(t) = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'\varphi(q-L)\varphi^*(q'-L)\,|q\rangle\langle q'| & \alpha\beta^* \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'\varphi(q-L)\varphi^*(q'+L)\,|q\rangle\langle q'| \\ \alpha^*\beta \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'\varphi^*(q'-L)\varphi(q+L)\,|q\rangle\langle q'| & |\beta|^2 \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'\varphi(q+L)\varphi^*(q'+L)\,|q\rangle\langle q'| \end{pmatrix}$$

也可以简单地表示为

$$\rho(t) = \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'\,|\eta(q,t)\rangle\langle\eta(q',t)| \otimes |q\rangle\langle q'| \tag{12}$$

考虑 $\mathbb{C}^2$ 空间中某个力学量 A, 期望值是

$$\begin{aligned} \langle A\rangle(t) &= \langle\Psi(t)|A \otimes \mathbb{1}|\Psi(t)\rangle \\ &= \left[\int \mathrm{d}q\,\langle\eta(q,t)| \otimes \langle q|\right]\,(A \otimes \mathbb{1})\left[\int \mathrm{d}q'\,|\eta(q',t)\rangle \otimes |q'\rangle\right] \\ &= \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'\ \langle\eta(q,t)|A|\eta(q',t)\rangle\,\langle q|q'\rangle \end{aligned}$$

$$= \int \mathrm{d}q \, \langle \eta(q,t)|A|\eta(q,t)\rangle$$

设 $A = \sigma_z$, 有

$$\langle \sigma_z \rangle (t) = \int \left[|\alpha|^2 |\varphi(q-L)|^2 - |\beta|^2 |\varphi(q+L)|^2 \right] \mathrm{d}q$$

$$= |\alpha|^2 - |\beta|^2 = \langle \sigma_z \rangle (0)$$

即 σ_z 的期望值不随时间变化. 应该如此, 因为相互作用哈密顿量的形式是 $\sigma_z \otimes P$.

再来看相互作用之后粒子的自旋量子态. 对 (12) 的空间部分求迹, 有

$$\rho_{\text{spin}} = \int \mathrm{d}q \, |\eta(q,t)\rangle\langle\eta(q,t)|$$

$$= \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* \; I_{01}(t) \\ \alpha^*\beta \; I_{10}(t) & |\beta|^2 \end{pmatrix} \tag{14}$$

其中

$$I_{01}(t) = I_{10}^*(t) = \int \mathrm{d}q \; \varphi(q-L)\varphi^*(q+L)$$

当 $\varphi(q-L)$ 和 $\varphi(q+L)$ 重叠很少甚至没有重叠的情况下, $I_{01} = I_{10} = 0$, 粒子自旋量子态的密度矩阵成为对角形式.

提这样的问题:

> 在区间 $q_1 \leqslant q \leqslant q_2$ 内探测到粒子的几率是多少? 如果在该区间内观测到了粒子, 那么粒子的自旋行为如何?

为此, 考虑从 (12) 中写出粒子的空间量子态形式, 即, 对自旋部分求迹.

$$\begin{aligned}
\rho_{\text{space}}(t) &= \mathrm{Tr}_{\text{spin}} \, \rho(t) \\
&= \iint \mathrm{d}q \, \mathrm{d}q' \;\; \langle 0|\eta(q,t)\rangle \, \langle \eta(q',t)|0\rangle \;\; |q\rangle\langle q'| \\
&\quad + \iint \mathrm{d}q \, \mathrm{d}q' \, \langle 1|\eta(q,t)\rangle \, \langle \eta(q',t)|1\rangle \;\; |q\rangle\langle q'| \\
&= \iint \mathrm{d}q \, \mathrm{d}q' \;\; |\alpha|^2 \varphi(q-L)\varphi^*(q'-L) \;\; |q\rangle\langle q'| \\
&\quad + \iint \mathrm{d}q \, \mathrm{d}q' \;\; |\beta|^2 \varphi(q+L)\varphi^*(q'+L) \;\; |q\rangle\langle q'|
\end{aligned} \tag{15}$$

在区间 $\Delta = [q_1, q_2]$ 内对粒子的位置进行测量, 这一操作对应于投影算子

$$\Pi(\Delta) = \int_{q_1}^{q_2} \mathrm{d}q \;\; |q\rangle\langle q|$$

于是相应的几率为 (在下面的积分中, 没有标明上下限的积分一律从 $-\infty$ 积到 $+\infty$),

$$
\begin{aligned}
p(\Delta) &= \mathrm{Tr}\left[\rho_{\mathrm{space}}\Pi(\Delta)\right] \\
&= \int_{q_1}^{q_2} \mathrm{d}q'' \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'\ |\alpha|^2\varphi(q-L)\varphi^*(q'-L)\ \langle q''|q\rangle\langle q'|q''\rangle \\
&\quad + \int_{q_1}^{q_2} \mathrm{d}q''\ \iint \mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'|\beta|^2\varphi(q+L)\varphi^*(q'+L)\ \langle q''|q\rangle\langle q'|q''\rangle \\
&= \int_{q_1}^{q_2} \mathrm{d}q''\ \left[|\alpha|^2|\varphi(q''-L)|^2 + |\beta|^2|\varphi(q''+L)|^2\right]
\end{aligned}
\tag{16}
$$

第七章　粒子在位置空间中的运动 IV

另一方面, 我们还可以直接用 $\mathbb{1}\otimes\Pi(\Delta)$ 作用于 $\rho(t)$.

$$\Pi(\Delta)=\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q''\ |q''\rangle\langle q''|=\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q'''\ |q'''\rangle\langle q'''|$$

$$\begin{aligned}
&[\mathbb{1}\otimes\Pi(\Delta)]\,\rho(t)\,[\mathbb{1}\otimes\Pi(\Delta)]\\
=&\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q''\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q'''\iint\mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'\,[\mathbb{1}\otimes|q''\rangle\langle q''|]\,[\,|\eta(q)\rangle\langle\eta(q')|\otimes|q\rangle\langle q'|\,]\,[\mathbb{1}\otimes|q'''\rangle\langle q'''|]\\
=&\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q''\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q'''\iint\mathrm{d}q\,\mathrm{d}q'\ |\eta(q)\rangle\langle\eta(q')|\otimes[\,|q''\rangle\ \langle q''|q\rangle\langle q'|q'''\rangle\ \langle q'''|\,]\\
=&\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q''\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q'''\ |\eta(q'')\rangle\langle\eta(q''')|\otimes|q''\rangle\langle q'''|\\
=&\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q'\ |\eta(q)\rangle\langle\eta(q')|\otimes|q\rangle\langle q'|
\end{aligned}\tag{1}$$

上面最后一个表达式是测量后的未归一的量子态, 对它求迹, 得到在区间 Δ 内探测到粒子的几率,

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}\,[\text{Eq. (1)}]\\
=&\int\mathrm{d}q''\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q'\ \sum_{i=0}^{1}\langle i|\eta(q)\rangle\,\langle\eta(q')|i\rangle\ \langle q''|q\rangle\,\langle q'|q''\rangle\\
=&\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q'\ \delta(q-q')\ \sum_{i=0}^{1}\langle i|\eta(q)\rangle\,\langle\eta(q')|i\rangle\\
=&\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q\ \sum_{i=0}^{1}\langle i|\eta(q)\rangle\,\langle\eta(q)|i\rangle=p(\Delta)
\end{aligned}$$

在此前提下 (即在区间 Δ 内探测到粒子), 粒子的未归一的自旋量子态可以在 (1) 式中对空间部分求迹而得到.

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Tr}_{\text{space}}\,[\text{Eq. (1)}]\\
=&\int\mathrm{d}q''\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q\int_{q_1}^{q_2}\mathrm{d}q'\ |\eta(q)\rangle\langle\eta(q')|\ \langle q''|q\rangle\,\langle q'|q''\rangle
\end{aligned}$$

$$= \int_{q_1}^{q_2} \mathrm{d}q \int_{q_1}^{q_2} \mathrm{d}q' \ \delta(q-q') \ |\eta(q)\rangle\langle\eta(q')|$$

$$= \int_{q_1}^{q_2} \mathrm{d}q \ |\eta(q)\rangle\langle\eta(q)|$$

归一化之后, 得到

$$\rho_{\text{spin}}(\Delta, t) = \frac{1}{p(\Delta)} \int_{q_1}^{q_2} \mathrm{d}q \ |\eta(q)\rangle\langle\eta(q)|$$

- 在 $t = 0$ 时, $L = 0$,

$$p(\Delta) = \int_{q_1}^{q_2} \mathrm{d}q \, |\varphi(q)|^2$$

$$|\eta(q, 0)\rangle = (\alpha\,|0\rangle + \beta\,|1\rangle)\,\varphi(q)$$

$$\rho_{\text{spin}}(\Delta, 0) = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \alpha\beta^* \\ \alpha^*\beta & |\beta|^2 \end{pmatrix}$$

- 如果时间足够长, L 很大, 两个波函数 $\varphi(q-L)$ 和 $\varphi(q+L)$ 相距很远, 可视为彼此正交. 而且, $|\varphi(q-L,t)|^2$ 在 q 的正半轴上的积分为 1, 在 q 的负半轴上积分为零, 而 $|\varphi(q+L,t)|^2$ 的积分结果正好相反. 考虑 q 的正半轴, 即 $\Delta = [0, +\infty)$.

$$p(\Delta) = \int_0^{+\infty} \mathrm{d}q[|\alpha|^2|\varphi(q-L)|^2 + |\beta|^2 \underbrace{|\varphi(q+L)|^2}_{\text{积分为零}}] = |\alpha|^2$$

  此时, 粒子的自旋量子态是

$$\rho_{\text{spin}}(\Delta) = \frac{1}{|\alpha|^2} \int_0^{+\infty} |\eta(q)\rangle\langle\eta(q)| \, \mathrm{d}q$$

  逐项计算 $|\eta(q)\rangle\langle\eta(q)|$ 的矩阵元对 q 的积分, 发现只有 $|\alpha|^2$ 是非零的, 其值为 1, 所以

$$\rho_{\text{spin}}(\Delta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = |0\rangle\langle 0|$$

  这个结果正是理想测量的体现 —— 只要在 q 的正半轴上探测到粒子, 那么该粒子的自旋角动量的指向一定是正 z 方向.

现在讨论不那么好的测量过程 —— $\varphi(q \pm L)$ 没有分得很开. 为了易于计算, 作如下假设.

- 粒子初态中的位置波函数采用简单的形式 (虽然有些不合理),

$$\varphi(q) = \begin{cases} \dfrac{1}{\sqrt{2a}}, & q \in [-a, \ a] \\ 0, & \text{其它区域} \end{cases}$$

- 在哈密顿量 $H = v(t)\sigma_z \otimes P$ 中, 将 $v(t)$ 设定为常数, 不随时间变化, 于是 $L = vt$. 当 $L \geqslant a$ 时, $\varphi(q \pm L)$ 彼此没有重叠, 为理想测量. 而现在要考虑 $L < a$ 的情形.

- 粒子初态中的自旋量子态设为

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

先算一下在区间 $\Delta = [0, +\infty)$ 内探测到粒子的几率.

$$p(\Delta) = \int_0^{+\infty} \mathrm{d}q[|\alpha|^2|\varphi(q-L)|^2 + |\beta|^2|\varphi(q+L)|^2]$$

$$= \frac{1}{2}\frac{1}{2a}(a+L) + \frac{1}{2}\frac{1}{2a}(a-L) = \frac{1}{2}$$

在此情况下, 粒子的自旋量子态是

$$\rho_{\text{spin}}(\Delta) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+b & 1-b \\ 1-b & 1-b \end{pmatrix} \tag{2}$$

其中 $b = \frac{L}{a} < 1$. 把 $\rho_{\text{spin}}(\Delta)$ 表示为

$$\rho_{\text{spin}}(\Delta) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + (1-b)\sigma_x + b\sigma_z)$$

Bloch 向量是

$$\boldsymbol{r} = (1-b,\ 0,\ b)$$

还可以考虑由 (2) 式给出的 $\rho_{\text{spin}}(\Delta)$ 的本征值及本征向量. 用 w_1 和 w_2 表示本征值, 用 P_1 和 P_2 表示相应的的本征向量的密度矩阵, 即

$$\rho_{\text{spin}}(\Delta) = w_1 P_1 + w_2 P_2$$

分别用用 $\boldsymbol{r}_1$ 和 $\boldsymbol{r}_2$ 表示密度矩阵 P_1 和 P_2 的 Bloch 向量. 当然应该有 $\boldsymbol{r} = w_1\boldsymbol{r}_1 + w_2\boldsymbol{r}_2$.

图 1 描绘了 $w_1\boldsymbol{r}_1$ 和 $w_2\boldsymbol{r}_2$ 随 b 的变化, 实际上也就是随时间的变化.

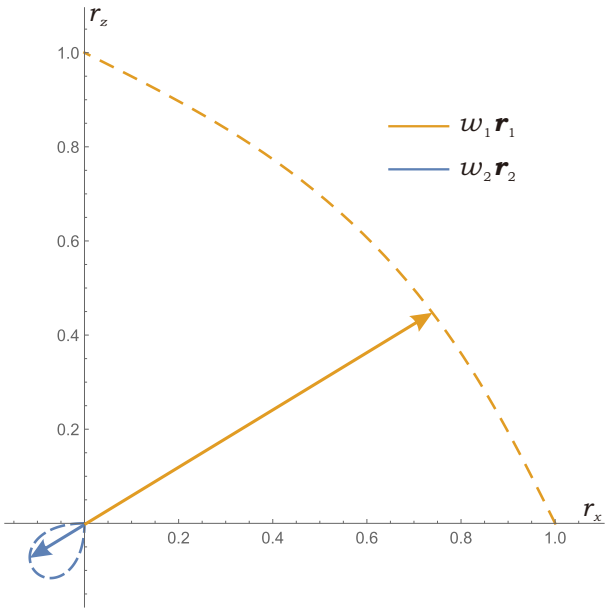


图 1

需要说明的是, 图 1 并没有描绘粒子的自旋量子态随时间演化的过程. 上述计算结果以及这个图像有这样一个前提: 在区间 Δ 内探测到了粒子.

粒子的自旋量子态随时间演化的过程已经由 ρ_{spin} 确定了.

几率流密度矢量

三维位置空间的基向量是 $|\boldsymbol{r}\rangle$, 满足正交归一关系

$$\langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle = \delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$$

以及完备性的表示

$$\int_{\text{全空间}} |\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\,\mathrm{d}^3 r = \mathbb{1}$$

在直角坐标系中, 有

$$|\boldsymbol{r}\rangle = |x,y,z\rangle = |x\rangle\otimes|y\rangle\otimes|z\rangle$$

量子态 $|\psi\rangle$ 在位置表象中被表示为波函数

$$\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle = \psi(\boldsymbol{r}) = \psi(x,y,z)$$

动量算子 $\boldsymbol{P}=(P_x,P_y,P_z)$, 在位置表象中表示为

$$\boldsymbol{P} \longrightarrow -i\hbar\nabla$$

$$P_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x},\quad P_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y},\quad P_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$\boldsymbol{P}$ 的三个分量是彼此对易的. 与位置算子 $\boldsymbol{R}=(X,Y,Z)$ 的对易关系

$$[R_j,P_k] = i\hbar\mathbb{1}\delta_{j,k}$$

Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r},t)\Big]\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

设 t 时刻量子系统的波函数是 $\Psi(\boldsymbol{r},t)$. 几率密度为 $|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2$. 在全空间的积分等于 1,

$$\int |\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2\,\mathrm{d}^3 r = 1$$

即量子态的归一化. 粒子在三维空间 $\mathbb{R}^3$ 中的某个体积 τ 中被观测到的几率是 $\int_\tau |\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2 d^3r$.

假设势能不随时间变化, 考虑这个几率随时间的变化率,

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\int_\tau \Psi^*\Psi d^3r &= \int_\tau\Big(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Big)d^3r\\ &= \frac{i\hbar}{2m}\int_\tau(\Psi^*\nabla^2\psi-\Psi\nabla^2\Psi^*)d^3r\\ &= \frac{i\hbar}{2m}\int_\tau\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)d^3r.\end{aligned}$$

因为体积 τ 是任意的, 于是有

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2+\nabla\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{3}$$

其中

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)=-\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)=\frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}(\Psi^*\nabla\Psi). \tag{4}$$

$\boldsymbol{J}$ 是**几率流矢量**.

体积 τ 的表面记作 σ,

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\tau|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3r=-\oiint_\sigma\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)\cdot d\boldsymbol{s}.$$

即, 粒子在空间区域 τ 中被探测到的几率随时间的减少率等于单位时间内粒子穿过区域的表面 σ 流出该区域的流量.

可以把几率流矢量表示为 “速度” 的形式. 令

$$\boldsymbol{V}=\frac{\boldsymbol{P}}{m}=-\frac{i\hbar}{m}\nabla.$$

$\boldsymbol{J}$ 可以写为

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{Re}[\Psi^*(\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{V}\Psi(\boldsymbol{r},t)] \tag{5}$$

> 在以前 (Chapter 7-3) 讨论过的一维阶梯势中, 粒子的散射几率和透射几率实际上是几率流的比值.
>
> $$\text{入射波函数}\quad \psi_{in}(x)=A_1e^{ik_1x}$$
>
> $$\text{反射波函数}\quad \psi_r(x)=A_1'e^{-ik_1x}$$
>
> $$\text{透射波函数}\quad \psi_t(x)=A_2e^{ik_2x}$$
>
> 相应的几率流密度是
>
> $$J_{in}\sim|A_1|^2k_1,\quad J_r\sim|A_1'|^2k_1,\quad J_t\sim|A_2|^2k_2$$
>
> 反射几率和透射几率分别是
>
> $$R=\frac{|A_1'|^2}{|A_1|^2},\quad T=\frac{k_2|A_2|^2}{k_1|A_1|^2}$$

考虑带电粒子在电磁场中的哈密顿量. 在经典情形下, 哈密顿量是

$$H=\frac{1}{2m}\Big[\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\Big]^2+q\phi(\boldsymbol{r},t)$$

其中 q 是粒子的带电量, ϕ 是电场的电势, $\boldsymbol{A}$ 是磁场的矢量势. $\boldsymbol{p}$ 是正则动量, 机械动量是

$$m\boldsymbol{v}=\boldsymbol{p}-q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$$

在量子情形中, 将各个力学量视作算子, 哈密顿量是

$$H=\frac{1}{2m}\Big[\boldsymbol{P}-q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},\boldsymbol{t})\Big]^2+q\phi(\boldsymbol{R},t)$$

$$=\frac{1}{2m}\Big[P^2+q^2A^2-q\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A}-q\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}\Big]+q\phi(\boldsymbol{R},t)$$

为了化简上式, 注意对易子

$$[\boldsymbol{A},P_x]=i\hbar\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial x},\quad [\boldsymbol{A},P_y]=i\hbar\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial y},\quad [\boldsymbol{A},P_z]=i\hbar\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial z}$$

所以有

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A}$$

$$=[A_x,P_x]+[A_y,P_y]+[A_z,P_z]$$

$$=i\hbar\frac{\partial A_x}{\partial x}+i\hbar\frac{\partial A_y}{\partial y}+i\hbar\frac{\partial A_z}{\partial z}=i\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{A}$$

接着可以把 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}+\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A}$ 表示为

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}+\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A}=2\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}-i\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{A}$$

将它代入哈密顿量的表达式, 并在位置表象中表示, 有

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{i\hbar q}{m}\boldsymbol{A}\cdot\nabla+\frac{i\hbar q}{2m}\nabla\cdot\boldsymbol{A}+\frac{q^2A^2}{2m}+q\phi$$

注意到上式中的 $\nabla\cdot\boldsymbol{A}$ 在位置表象中具有函数的形式, 而不是算子.

重新计算空间区域 τ 内的几率随时间的变化率,

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_\tau|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2d^3r$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\int_\tau\Psi^*\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+\frac{i\hbar q}{m}\boldsymbol{A}\cdot\nabla\Psi+\frac{i\hbar q}{2m}(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\Psi+\frac{q^2A^2}{2m}\Psi+q\phi\Psi\Big]d^3r$$

$$-\frac{1}{i\hbar}\int_\tau\Psi\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi^*-\frac{i\hbar q}{m}\boldsymbol{A}\cdot\nabla\Psi^*-\frac{i\hbar q}{2m}(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\Psi^*+\frac{q^2A^2}{2m}\Psi^*+q\phi\Psi^*\Big]d^3r$$

$$=\frac{1}{i\hbar}\Big(-\frac{\hbar^2}{2m}\Big)\int_\tau(\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*)d^3r$$

$$+\frac{1}{i\hbar}\Big(\frac{i\hbar q}{m}\Big)\int_\tau(\Psi^*\,\boldsymbol{A}\cdot\nabla\Psi+\Psi\,\boldsymbol{A}\cdot\nabla\Psi^*)d^3r+\frac{1}{i\hbar}\Big(\frac{i\hbar q}{2m}\Big)\int_\tau[\Psi^*(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\Psi+\Psi(\nabla\cdot\boldsymbol{A})\Psi^*]d^3r$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\int_\tau\nabla\cdot(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)d^3r+\frac{q}{m}\int_\tau\nabla\cdot(\Psi^*\boldsymbol{A}\Psi)d^3r$$

Let $\boldsymbol{J}=-\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*)-\Psi^*\frac{q\boldsymbol{A}}{m}\Psi$

$$= -\int_\tau \nabla\cdot\boldsymbol{J}d^3r = -\oiint_\sigma \boldsymbol{J}\cdot d\boldsymbol{s}$$

由此得到与 (3) 相同的结果

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2 + \nabla\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) \tag{6}$$

差别在于 $\boldsymbol{J}$ 的定义有所不同. (6) 中的几率流矢量是

$$\boldsymbol{J} = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) - \Psi^*\frac{q\boldsymbol{A}}{m}\Psi \tag{7}$$

与 (3) 相比, 多了一项 $-\Psi^*\frac{q\boldsymbol{A}}{m}\Psi$. 不过, 它们都可以用速度算子表示. 对于在电磁场的带电粒子, 定义它的速度算子

$$\boldsymbol{V} = \frac{\text{机械动量}}{m} = \frac{\boldsymbol{P}-q\boldsymbol{A}}{m}$$

(7) 式可以写为

$$\boldsymbol{J} = \mathrm{Re}[\Psi^*(\boldsymbol{r},t)\boldsymbol{V}\Psi(\boldsymbol{r},t)]$$

与 (5) 式是一致的.

如果在直角坐标系中描述, 那么将动量算子表示为

$$\boldsymbol{P} \longrightarrow -i\hbar\nabla = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\quad\frac{\partial}{\partial y}\quad\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

动能算子

$$\frac{P^2}{2m} \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

如果势能 $V(\boldsymbol{R}) \to V(\boldsymbol{r})$ 碰巧是可以变量分离的, 即

$$V(\boldsymbol{r}) = V(x) + V(y) + V(z)$$

那么哈密顿量可以表示为

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\boldsymbol{R}) = H_x + H_y + H_z$$

$$H_x = \frac{P_x^2}{2m} + V(X), \quad H_y = \frac{P_y^2}{2m} + V(Y), \quad H_z = \frac{P_z^2}{2m} + V(Z)$$

于是三维问题简化为三个一维问题. 定态波函数的形式是

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(x)\psi(y)\psi(z) \tag{8}$$

例如, 三维各向同性谐振子,

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2R^2 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(X^2+Y^2+Z^2)$$

能级

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = n_x+n_y+n_z, \quad n_x,n_y,n_z = 0,1,\cdots$$

H 的本征态需要用三个量子数 n_x, n_y 和 n_z 表示.

$$|n_x, n_y, n_z\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \otimes |n_z\rangle$$

基态没有简并, 激发态有简并. 例如, 第一激发态, $n = 1$, 三重简并.

如果势能 $V(\boldsymbol{r})$ 不可以在三个正交的方向上进行变量分离, 那么哈密顿量的本征函数就不能写为 (8) 式的形式, 定态 Schrödinger 方程未必有解析解.

第七章　粒子在位置空间中的运动 VI

球坐标

用球坐标描述粒子在三维空间中的运动.

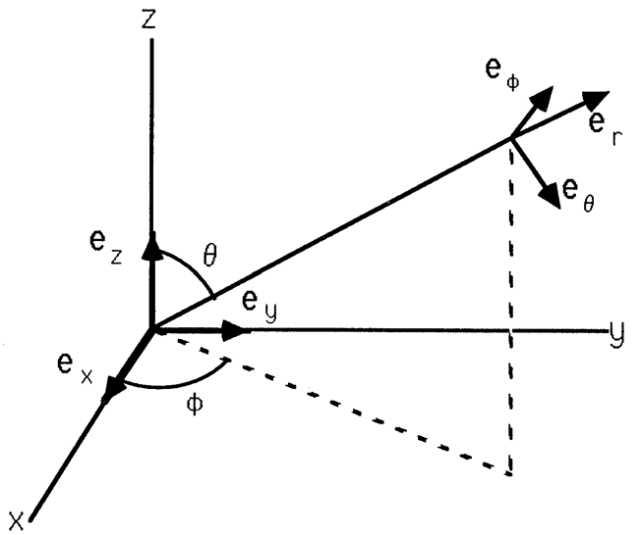


图 1

$$x = r\sin\theta\cos\phi$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi$$

$$z = r\cos\theta$$

在球坐标中,

$$\nabla = \boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\phi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{1}$$

其中球坐标的单位向量可以表示为

$$\boldsymbol{e}_r = \sin\theta\cos\phi\ \boldsymbol{e}_x + \sin\theta\cos\phi\ \boldsymbol{e}_y + \cos\theta\ \boldsymbol{e}_z$$

$$\boldsymbol{e}_\theta = \cos\theta\cos\phi\,\boldsymbol{e}_x + \cos\theta\sin\phi\,\boldsymbol{e}_y - \sin\theta\,\boldsymbol{e}_z$$

$$\boldsymbol{e}_\phi = -\sin\phi\,\boldsymbol{e}_x + \cos\phi\,\boldsymbol{e}_y$$

接着写出 ∇^2 在球坐标中的形式

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{(r\sin\theta)^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}$$

算子 ∇^2 由两部分组成. 径向部分是

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

对于角向部分, 我们令

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{2}$$

于是,

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2}\frac{L^2}{\hbar^2} \tag{3}$$

这里, 并没有立即指出 L 是轨道角动量. 下面, 专门讨论一下轨道角动量, 我们将看到, (2) 式确实是轨道角动量算子 $\boldsymbol{L}$ 的平方在位置表象中的表示.

轨道角动量

直接来自于经典力学的类比,

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P}$$

在直角坐标系中

$$L_x = YP_z - ZP_y, \quad \cdots$$

有对易关系

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z, \cdots$$

简写为

$$\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L} = i\hbar\boldsymbol{L}$$

计算其它对易关系, 如 $[L_i, R_j]$, $[L_i, P_j]$.

注意到

$$[L^2, L_x] = [L^2, L_y] = [L^2, L_z] = 0$$

因此, 可以考虑 (L^2, L_z) 的共同本征函数.

在球坐标中表示 $\boldsymbol{L}$.

$$\boldsymbol{L} = r\boldsymbol{e}_r\times(-i\hbar\nabla) = (-i\hbar)\left[\boldsymbol{e}_\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]$$

继续写出各个分量.

$$L_z = -i\hbar(\boldsymbol{e}_z\cdot\boldsymbol{e}_\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} + i\hbar(\boldsymbol{e}_z\cdot\boldsymbol{e}_\theta)\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}. \tag{4}$$

类似地,

$$L_x = -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right),$$

$$L_y = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right).$$

然后, 根据上述 L_x^2, L_y^2 和 L_z^2 的形式, 给出

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{5}$$

与 (2) 一致, 也就是说, ∇^2 的角向部分与 L^2 有关.

球谐函数 将 L^2 和 L_z 的本征方程表示为

$$L^2|\ell, m\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2|\ell, m\rangle,$$

$$L_z|\ell, m\rangle = m\hbar|\ell, m\rangle.$$

在位置表象中, 采用球坐标, $|\ell, m\rangle$ 被表示为波函数 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$, 称为**球谐函数**.

$$|\ell, m\rangle \longrightarrow Y_{\ell m}(\theta, \phi).$$

由 (4) 式,

$$-i\hbar\frac{\partial Y}{\partial\phi} = \hbar m Y. \tag{6}$$

或者,

$$\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} = -m^2 Y. \tag{7}$$

从中立即可以得到 Y 与 ϕ 的依赖关系, 即 Y 的函数形式中与 ϕ 有关的部分是 $e^{im\phi}$.

将 (7) 是代入 L^2 的表达式中, 有

$$\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)Y + [\ell(\ell+1)\sin^2\theta - m^2]Y = 0. \tag{8}$$

这个方程仅仅与 θ 有关. 该方程的解乘以 ϕ 部分 (即 $e^{im\phi}$), 再进行归一化处理, 就是函数 $Y(\theta, \phi)$.

Y 的 θ 部分满足的方程 (8) 被称为缔合 Legendre 方程 (associated Legendre equation). 它的解记作 $P_{\ell m}(\cos\theta)$, 所以

$$Y(\theta, \phi) = e^{im\phi}P_{\ell m}(\cos\theta) \times \text{归一化因子}.$$

至此, 还没有涉及 ℓ 和 m 的任何限制条件, 下面来讨论这个问题.

如果要求波函数是单值的, 那么, 绕 z 的 2π 角度的旋转应该给出相同形式的波函数,

$$Y(\theta, \phi + 2\pi) = Y(\theta, \phi) \implies m \text{ 一定是整数}.$$

再根据数理方程理论中关于缔合 Legendre 方程的讨论, 当 $\theta = 0$ 或 $\theta = \pi$ 的时候, $Y(\theta, \phi)$ 可能是奇异函数. 如果我们希望 Y 作为波函数不是奇异的, 那么就有条件:

$$\ell \text{ 是非负整数, 并且 } \ell \geqslant |m|.$$

于是 ℓ 和 m 就必须满足

$$\ell \text{ 是非负整数,}$$

$$\text{当 } \ell \text{ 一定的时候, } m = -\ell, -\ell + 1, \cdots, \ell - 1, \ell.$$

$Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ 的最终形式是

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \left[\frac{(2\ell + 1)(\ell - |m|)!}{4\pi(\ell + |m|)!} \right]^{1/2} e^{im\phi} P_{\ell |m|}(\cos\theta). \tag{9}$$

这里出现的 $P_{\ell m}(u)$ ($m \geqslant 0$, $u \in [-1, 1]$) 是缔合 Legendre 函数, 它来自于 Legendre 多项式 $P_\ell(u)$,

$$P_\ell(u) = (2^\ell \ell!)^{-1} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u} \right)^\ell (u^2 - 1)^\ell,$$

$$P_{\ell m}(u) = (1 - u^2)^{m/2} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u} \right)^m P_\ell(u).$$

另外, $Y_{\ell,\pm m}$ 有如下关系,

$$Y_{\ell,-m}(\theta, \phi) = (-1)^m (Y_{\ell,m}(\theta, \phi))^*$$

这个关系满足以后提到用升降算子作用后的结果.

正交归一关系

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (Y_{\ell,m}(\theta, \phi))^* Y_{\ell',m'}(\theta, \phi) \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \, \mathrm{d}\phi = \delta_{\ell,\ell'} \delta_{m,m'}.$$

考虑形如 $\sqrt{\sin\theta}\, e^{i\phi/2}$ (未归一) 的函数. 虽然它满足方程 (6) 和 (8) ($\ell = m = \frac{1}{2}$), 并且在空间的任意点都是有界的, 但是它不能作为轨道角动量的本征函数. 以后我们将讨论关于角动量的升降算子, 会发现在升降算子的作用下, 如此形式的函数是不能作为波函数的.

还可以从另一个角度考虑 L_z 的量子数 m 必须为整数. 在直角坐标系中,

$$L_z = XP_y - YP_x$$

进行如下正则变换 (暂且设 $\hbar = 1$),

$$\mathcal{X}_1 = \frac{X + P_y}{\sqrt{2}}, \quad \mathcal{X}_2 = \frac{X - P_y}{\sqrt{2}}$$

$$\mathcal{P}_1 = \frac{P_x - Y}{\sqrt{2}}, \quad \mathcal{P}_1 = \frac{P_x + Y}{\sqrt{2}}$$

对易关系

$$[\mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2] = [\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2] = 0, \quad [\mathcal{X}_j, \mathcal{P}_k] = i\delta_{j,k}$$

变换后, L_z 表示为

$$L_z = \frac{1}{2}(\mathcal{P}_1^2 + \mathcal{X}_1^2) - \frac{1}{2}(\mathcal{P}_2^2 + \mathcal{X}_2^2)$$

这是两个谐振子的哈密顿量的相减,

$$L_z \sim H_1 - H_2.$$

其中 H_1 和 H_2 是两个不同的谐振子的 Hamilton 量. 而谐振子的 Hamilton 量的本征值是整数, 相减之后仍然是整数. 所以, L_z 的本征值只能是整数 ($\hbar$ 的整数倍).

球谐函数的宇称 空间反射变换, $\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$, 用求坐标表示,

$$r \longrightarrow r, \quad \theta \longrightarrow \pi - \theta, \quad \phi \longrightarrow \pi + \phi$$

在这个变换下,

$$e^{im\phi} \longrightarrow (-1)^m e^{im\phi}, \quad P_{\ell m}(\cos\theta) \longrightarrow (-1)^{\ell+m} P_{\ell m}(\cos\theta)$$

所以

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) \longrightarrow (-1)^\ell Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

也就是说, 球谐函数的宇称是 $(-1)^\ell$.

径向动量 在经典力学中, 我们可以把动能表示为

$$\frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2}, \quad p_r = \frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}}{r}$$

类比到量子情形, 定义

$$P_r = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{R}(\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P}) + (\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R})\frac{1}{R}\right]$$

在位置表象中,

$$\left[\frac{1}{R}(\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P})\right] f(x,y,z) = -i\hbar\left[\frac{1}{r}\left(x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y} + z\frac{\partial}{\partial z}\right)\right] f(x,y,z) = -i\hbar\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\nabla f$$

$$\begin{aligned}\left[(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{R})\frac{1}{R}\right] f(x,y,z) &= -i\hbar\left[\left(\frac{\partial}{\partial x}x + \frac{\partial}{\partial y}y + \frac{\partial}{\partial z}z\right)\frac{1}{r}\right] f(x,y,z) \\ &= -i\hbar\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{xf}{r}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{yf}{r}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{zf}{r}\right)\right] \\ &= -i\hbar\left(\frac{2f}{r} + \frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\nabla f\right)\end{aligned}$$

所以 P_r 可以表示为

$$P_r = -i\hbar\left(\boldsymbol{r}\cdot\nabla + \frac{1}{r}\right) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

注意, 上述 P_r 是厄密的, 但是 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}$ 却不是厄密的.

计算径向动量算子的平方,

$$P_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)^2$$

$$= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

这个结果又可以写为

$$P_r^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

与 (3) 式中的径向部分比较之后, 可以把哈密顿量中的动能项表示为

$$\frac{P^2}{2m} = \frac{P_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2}$$

可以把上式看作径向动能和角向动能的和. 在经典力学中有相同的处理过程.

中心对称势场

只考虑 Schrödinger 方程的空间部分. 回顾 ∇^2 在球坐标中的形式, 写出 Schrödinger 方程的空间部分,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi(\boldsymbol{r}) + \frac{L^2}{2mr^2}\psi(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}). \tag{10}$$

下面, 设势能 $V(\boldsymbol{r})$ 是球对称的势能, 即 $V = V(r)$.

对 (10) 式进行变量分离. 与角度 θ 和 ϕ 的部分由 L^2 的本征方程确定, 就是球谐函数 $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$. 将 $\psi(\boldsymbol{r})$ 的径向部分记作 $R(r)$, 并把它表示为 $R(r) = \frac{u(r)}{r}$, 代入 (10) 式, 有

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2} + \left[\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right]u(r) = Eu(r). \tag{11}$$

变换 $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ 的好处在于, 变换后的径向方程 (11) 就像是描述粒子在一维空间中的运动 (r 从 0 到 $+\infty$), 所处的势能是

$$V_{\text{eff}}(r) = V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}. \tag{12}$$

这被称为有效势能.

因此, 在中心对称势场中, 粒子的波函数有如下形式

$$\psi(\boldsymbol{r}) = R(r)Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = ru(r)Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$$

径向部分波函数 $R(r)$ 由径向方程 (11) 决定. 该方程同时也确定了粒子的能量本征值. 可以看到, 能量本征值是有可能与角动量量子数 ℓ 有关, 虽然在即将讨论的氢原子问题中能量本征值不依赖与 ℓ. 不过, 可以肯定的是, 能量本征值不会与 L_z 的量子数 m 有关, 即关于 m 一定是简并的. 至于能级是离散的还是连续的, 则取决于有效势能 $V_{\text{eff}}(r)$ 的具体形式.

继续关注方程 (11), 需要设定边界条件. $r \to 0$ 时的边界条件,

$$u(0) \xrightarrow{r\to 0} 0. \tag{13}$$

稍后讨论上述边界条件. 归一化条件

$$\int_0^\infty |u(r)|^2 \,\mathrm{d}r = 1.$$

波函数的角分布

球对称势场的本征函数的形式是 $R(r)Y(\theta,\phi)$. 在距离原点 r, 方向 (θ,ϕ) 的点的邻域内探测到粒子的几率等于

$$|\psi(r,\theta,\phi)|^2\ r^2\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\Omega = r^2R(r)^2\,\mathrm{d}r\,|Y(\theta,\phi)|^2\,\mathrm{d}\Omega$$

如果考虑与原点的距离为 r 的非常薄的球壳内粒子的分布几率, 那么就只需要关注 $|Y(\theta,\phi)|^2$, 这就是波函数的角分布.

考虑几个低阶的球谐函数

$$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_{1,1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{i\phi}\sin\theta$$

$$Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}e^{-i\phi}\sin\theta$$

$$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(-1+3\cos^2\theta)$$

$$Y_{2,1} = -\sqrt{\frac{15}{16\pi}}e^{i\phi}\sin\theta\cos\theta$$

$$Y_{2,2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}e^{2i\phi}\sin^2\theta$$

在继续讨论角分布之前, 先注意一下 $Y_{\ell,m}$ 的表达式中出现的 $(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}$, 也就是说, 当 $m>0$ 时, 有正负号的变化 $(-1)^m$, 而当 $m<0$ 时, 只能是正号. 这个相位差存在的合理性将体现在关于角动量理论的一般性讨论中. 另外, 为了以下内容的需要, 定义球谐函数的实函数形式.

$$Y^r_{\ell,m} = \begin{cases} \dfrac{i}{\sqrt{2}}[Y_{\ell,m} - (-1)^m Y_{\ell,-m}] & \text{if } m<0 \\ Y_{\ell,m} & \text{if } m=0 \\ \dfrac{1}{\sqrt{2}}[Y_{\ell,m} + (-1)^m Y_{\ell,-m}] & \text{if } m>0 \end{cases}$$

$$= \begin{cases} \sqrt{2}(-1)^m \mathrm{Im}[Y_{\ell,|m|}] & \text{if } m<0 \\ Y_{\ell,m} & \text{if } m=0 \\ \sqrt{2}(-1)^m \mathrm{Re}[Y_{\ell,m}] & \text{if } m>0 \end{cases}$$

在量子化学中经常用到实形式的球谐函数.

现在可以描绘实形式的 $Y^r_{\ell,m}$ 的函数图像.

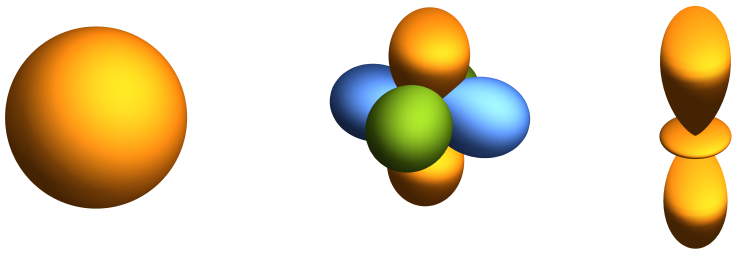


图 2: 左图, $Y^r_{0,0}$. 中图, $Y^r_{1,0}$ 和 $Y^r_{1,\pm1}$. 右图, $Y^r_{2,0}$.

关于 $r \to 0$ 时的边界条件

之所以要分析 $r \to 0$ 时的边界条件, 根本原因在于引入了球坐标.

动能算符或动量算符在位置表象的直角坐标系中的形式是很简单的, 不存在奇点. 而在球坐标中, 微分算子 ∇ 中含有 $\frac{1}{r}$. 于是 $r = 0$ 就是一个奇点. 我们需要分析 $r \to 0$ 时波函数的行为, 即边界条件.

最简单而直观的看法是, 当 $r \to 0$ 时, 波函数的径向部分 $|R(r)|$ 不能趋于无穷大. 但是, 这个要求过于严格了. 只要在原点的邻域内 (记作 τ_0, 简单地把 τ_0 看作一个半径为 r_0 的很小的球), 对波函数的模的平方的积分是有限值即可以了, 即

$$\int_{\tau_0} |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \,\mathrm{d}^3 r = \int_0^{r_0} r^2 |R(r)|^2 \,\mathrm{d}r < +\infty. \tag{14}$$

这里, 我们依然假设势能是球对称的, 波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 的角向部分是球谐函数, 球谐函数的归一性使得对角度的积分 (实际上是对立体角的积分) 为 1, 只剩下对径向坐标 r 的积分.

我们说, 条件 (14) 是球坐标中波函数在原点附近应该满足的基本要求.

然而, 这个基本要求并不具有很好的实用性. 我们并不能一开始就知道 $R(r)$ 的具体的函数形式, $R(r)$ 是求解的对象. 而在求解的过程中, 我们需要用到 $r \to 0$ 时的边界条件, 所以, 我们必须预先设定这个边界条件.

通常有如下设定:

$$r|R(r)| \xrightarrow{r\to0} 0, \quad \text{或者} \quad |u(r)| \xrightarrow{r\to0} 0. \tag{15}$$

这里 $u(r) = rR(r)$.

显然, 条件 (15) 比条件 (14) 更为严格. 稍后讨论有哪些事实支持上述设定. 先来看看条件 (15) 如何限制了 $r \to 0$ 时径向波函数的行为.

当 $r \to 0$ 时, 如果 $r|R(r)|$ 具有 $r^k f(r)$ 的形式, 这里 $f(r)$ 是 r 的多项式函数[1], 并且 $f(0) \neq 0$. 条件 (15) 就是

$$r|R(r)| \xrightarrow{r\to 0} r^k f(r) \xrightarrow{r\to 0} r^k f(0) \longrightarrow 0$$

$$\Downarrow$$

$$k \geqslant 0$$

换一种表示, 设 $R(r) \xrightarrow{r\to 0} \frac{f(r)}{r^\alpha}$, 即 $r|R(r)| \xrightarrow{r\to 0} \frac{|f(r)|}{r^{\alpha-1}}$.

$$\frac{|f(r)|}{r^{\alpha-1}} \xrightarrow{r\to 0} \frac{f(0)}{r^{\alpha-1}} \longrightarrow 0 \tag{16}$$

$$\Downarrow$$

$$\alpha < 1 \tag{17}$$

由于 $f(r)$ 被设为 r 的多项式, 且 $f(0)$ 有非零的有限大小的值, 因此, 当 $\alpha \in (0, 1)$ 时 $\frac{f(r)}{r^\alpha}$ 在 $r \to 0$ 时可以趋于 $\pm\infty$. 但是, 这并不是一个不能接受的结果. 因为在原点附近, 积分

$$\int_0^{r_0} \left|\frac{f(r)}{r^\alpha}\right|^2 r^2 \,\mathrm{d}r$$

仍然保持有限大小. 另外, 如果 $\alpha \leqslant 0$, 那么形如 $\frac{f(r)}{r^\alpha}$ 的径向函数没有奇点, 自然也没有相关问题.

现在我们看看有哪些素材支持 (15) 式所示的边界条件. 实际上, 我们要分析的是条件 (17).

我们把 $r \to 0$ 时波函数的径向部分设为

$$R(r) = \frac{f(r)}{r^\alpha},$$

这里, $f(r)$ 可以是某个复函数, 并且当 $r \to 0$ 时, $|f(r)|$ 取非零的有限值. 考虑 (14), 在原点的邻域内的径向积分是

$$\int_0^{r_0} |R(r)|^2 r^2 \,\mathrm{d}r = \int_0^{r_0} \frac{r^2|f(r)|^2}{r^{2\alpha}} \,\mathrm{d}r \sim \int_0^{r_0} r^{2-2\alpha} \,\mathrm{d}r \sim \left.\frac{1}{r^{2\alpha-3}}\right|_0^{r_0}$$

如果希望这个结果是有限值, 那么必须有

$$\alpha < \frac{3}{2}.$$

这个结论与 (17) 式还是有些差距的, 但也说明条件 (17) 确实满足基本要求 (14)

再考虑以原点为球心的小球 τ_0. 当半径 $r_0 \to 0$ 时, 穿过这个球面的几率流的通量应该趋于零. 不然的话, 在原点处就将存在 “源” 或者 “汇” (source or sink). 我们来计算穿过 τ_0 的表面 σ 的几率流通量.

穿过小球表面 σ 的通量是径向的, 我们只需要考虑径向波函数, 即 $R(r) = \frac{u(r)}{r^\alpha}$.

$$\begin{aligned}
\text{通量} &= \oiint_\sigma \boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}) \cdot d\boldsymbol{s} \\
&= -\frac{i\hbar}{2m} \oiint_\sigma \left(R^*(r)\frac{\partial R(r)}{\partial r} - R(r)\frac{\partial R^*(r)}{\partial r} \right) ds \qquad (\text{Note that } ds = r_0^2 d\Omega) \\
&= r_0^{2-2\alpha} \left(-\frac{i\hbar}{2m}\right) \oiint_\sigma \left(u^*\frac{\partial u}{\partial r} - u\frac{\partial u^*}{\partial r} \right) d\Omega
\end{aligned} \tag{19}$$

[1] 在一些具体问题中, 比如氢原子, 径向波函数被表示为某个多项式与指数函数的相乘.

一般情况下, 在球表面上的积分不一定为零. 为了使得当 $r_0 \to 0$ 时 通量 $\to 0$, 必须有

$$r_0^{2-2\alpha} \xrightarrow{r_0 \to 0} 0 \implies \alpha < 1.$$

这样, 我们得到了更严格的限制条件 $\alpha < 1$.

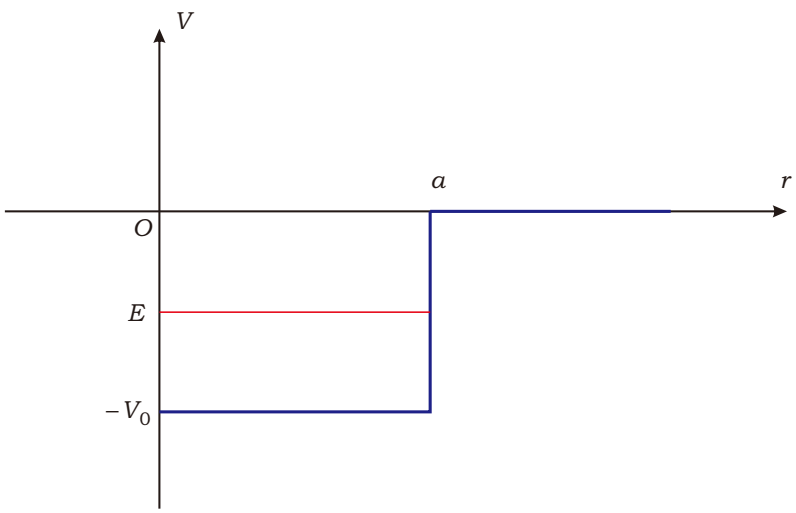
需要说明的是, 在 (19) 的推导过程中, 如果 $u(r)$ 是实函数, 那么在闭合球面上的积分已然是零, 我们不能得到 $\alpha < 1$ 这个条件.

虽然如此, 我们还是采用更严格的同时也能适用于更一般情形的限制条件 (15).

总之, 条件 (14) 是球坐标中波函数在原点附近的基本要求, 条件 (15) 是这个基本要求的具体的但更严格的表示.

球势阱

看一个简单的例子, 球势阱.



$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a, \\ 0, & r \geqslant a. \end{cases}$$

考虑束缚态, 即 $E < 0$. 而且, 在径向方程中, 我们只考虑 $\ell = 0$ 的情形. 径向方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u(r)}{\mathrm{d}r^2} + V(r)u(r) = Eu(r).$$

当 $r < a$ 时, $V(r) = -V_0$, 这里 $V_0 > 0$.

$$\frac{\mathrm{d}^2 u(r)}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0)u(r) = 0.$$

令

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E + V_0) > 0.$$

束缚态的波函数

$$u(r) = c_1 \sin kr + c_2 \cos kr.$$

在 $r = 0$ 处, 边界条件要求 $u(0) = 0$, 于是得到 $c_2 = 0$. 我们把 $r < a$ 区域内的解表示为

$$u(r) = N\frac{\sin kr}{\sin ka}, \quad r < a. \tag{20}$$

这里 N 是某个待定的常数, 显然 $u(a) = N$.

当 $r \geqslant a$ 时, $V(r) = 0$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u(r)}{\mathrm{d}r^2} = Eu(r).$$

令

$$\rho^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}.$$

在 $r \geqslant a$ 区域的解是

$$u(r) = c_3 e^{\rho r} + c_4 e^{-\rho r}.$$

当 $r \to \infty$ 时, $u(r)$ 应该趋于 0, 所以 $c_3 = 0$. 把 $u(r)$ 表示为

$$u(r) = Ne^{-\rho(r-a)}, \quad r \geqslant a. \tag{21}$$

(20) 和 (21) 式已经能够保证波函数在 $r = a$ 处连续. 再考虑 $\frac{du(r)}{dr}$ 的连续性. 可以等价地考虑 $\frac{d\ln u(r)}{dr}$ 的连续性, 这给出

$$\rho = -\frac{k}{\tan ka}. \tag{22}$$

另一方面, ρ^2 和 k^2 显然满足

$$\rho^2 + k^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}. \tag{23}$$

根据上面两个方程, 可以求出 ρ 和 k 的数值解. 需注意 $\rho \geqslant 0, k \geqslant 0$.

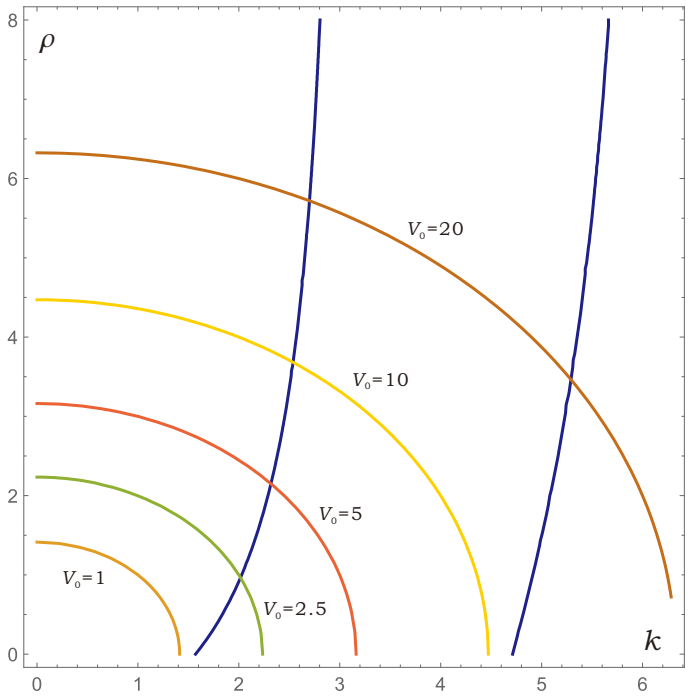


图 3: (22) 和 (23) 的函数图像. 其中, 我们令 $\hbar = m = a = 1$. 蓝色曲线对应于 (22) 式. 其它颜色的曲线是对应于不同 V_0 值的 (23) 式的函数图像.

在图 3 中, 蓝色曲线是 (22) 式的图像. 当 $ka = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \cdots$ 时, $\tan ka \to \infty$, 于是 $\rho = 0$.

(23) 式的图像是一个圆. V_0 越小, 圆的半径越小. 从图 3 中可以看到, 当 $V_0 < \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$ 时, 两条曲线没有交点, 表明没有束缚态 (如图中黑色曲线所示). 随着 V_0 的增大, 会出现一个束缚态或更多的束缚态 (如图中的红色和绿色曲线所示).

> 可以与以前讨论过的一维有限深势阱比较. 对于两侧高度相等的一维势阱,即使阱深很小, 也有至少一个束缚态. 而三维情形下的球势阱的径向波函数 —— 这里指的是 $u(r)$ 而不是 $R(r)$ —— 满足的方程与一维势阱的本征方程是完全相同的. 考虑边界条件, 可以发现二者的联系.

对于不同的 V_0 值, 图 4 描述了相应的 $u(r)$ 和 $R(r)$ 的函数图像. 可以看到, 当 V_0 很大的时候, 即势阱很深的时候, 波函数更集中地分布在 $r < a$ 的区域. 反之, 若 V_0 较小, 波函数有更多的部分分布在 $r > a$ 的区域. 当然, 如果 V_0 很小, 则如前所述, 没有束缚态.

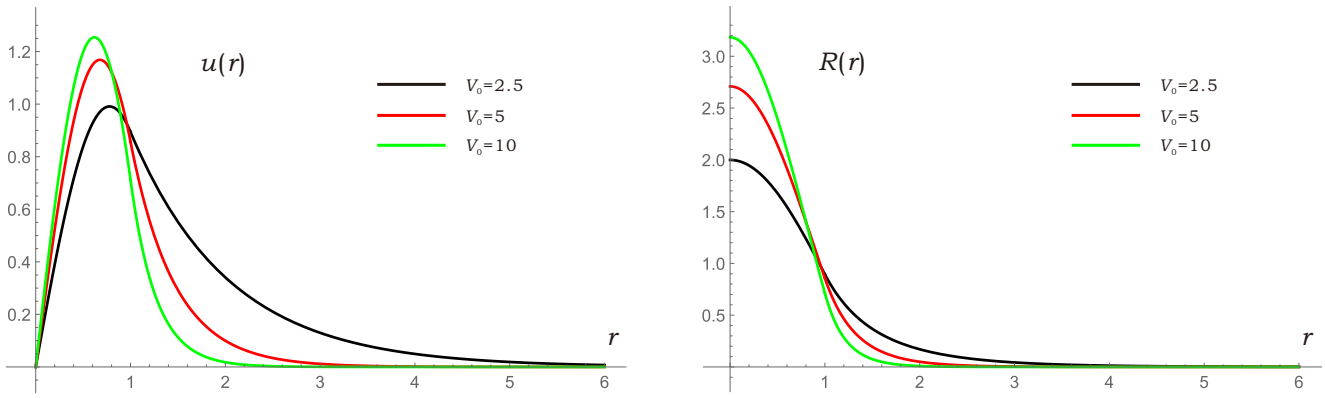


图 4: $\hbar = m = a = 1$

氢原子

- 氢原子是由质子和电子组成的两体系统.
- Coulomb 势是长程势.

Hamilton 量

$$H = \frac{P_p^2}{2m_p} + \frac{P_e^2}{2m_e} - \frac{e^2}{|\boldsymbol{R}_p - \boldsymbol{R}_e|}.$$

下标 p 和 e 分别表示质子和电子.

变换到质心坐标系中. 令

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}_e - \boldsymbol{R}_p, \quad \boldsymbol{R}_c = \frac{m_e\boldsymbol{R}_e + m_p\boldsymbol{R}_p}{m_e + m_p}. \tag{24}$$

$\boldsymbol{R}$ 是电子相对于质子的位置向量算符, $\boldsymbol{R}_c$ 是质子和电子的质心位置算符. 在质心坐标系中, 动量算符是

$$\boldsymbol{P} = \frac{m_p\boldsymbol{P}_e - m_e\boldsymbol{P}_p}{m_e + m_p}, \quad \boldsymbol{P}_c = \boldsymbol{P}_e + \boldsymbol{P}_p. \tag{25}$$

这里, $\boldsymbol{P}$ 描述了质心参考系中电子相对于质子的动量, $\boldsymbol{P}_c$ 是两体系统的质心运动的动量.

为了确定上述变换是正则变换, 需要验证基本对易关系, 例如

$$[R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}\mathbb{1}, \quad i, j = x, y, z, \quad \cdots$$

在质心参考系中重写 Hamilton 量,

$$H = \frac{P_c^2}{2(m_e + m_p)} + \frac{P^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\boldsymbol{R}|}, \tag{26}$$

其中

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

被称为折合质量或约化质量 (reduced mass).

(26) 式所示的 Hamilton 量的第一项和后两项是对易的, 可以让我们进行变量分离: 描述质心运动的部分和描述相对运动的部分. 质心的运动就是质量为 $m_e + m_p$ 的粒子在空间中的自由运动, 可以暂不考虑. 于

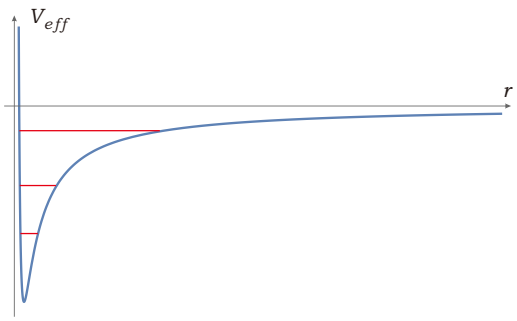


图 5

是关注相对运动的部分, 相应的 Hamilton 量是 $\frac{P^2}{2\mu} - \frac{e^2}{|\boldsymbol{R}|}$, 将它的本征函数记作 $\psi(\boldsymbol{r})$, 定态 Schrödinger 方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(\boldsymbol{r}) - \frac{e^2}{r}\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}).$$

在球坐标中求解此方程. 将 $\psi(\boldsymbol{r})$ 表示为 $\psi(\boldsymbol{r}) = R(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$, 其中 $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ 是球谐函数, 且

$$L^2 Y_{\ell m}(\theta,\phi) = \ell(\ell+1)\hbar^2 Y_{\ell m}(\theta,\phi),$$

$$L_z Y_{\ell m}(\theta,\phi) = m\hbar Y_{\ell m}(\theta,\phi),$$

径向部分 $R(r)$ 满足的方程是

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2}R - \frac{e^2}{r}R = ER. \tag{27}$$

我们只讨论束缚态的波函数和能级, 即 $E < 0$. 为了说明 $E < 0$ 的能级是束缚态能级, 可以考虑有效势能. 对于氢原子而言, 有效势能是

$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{r} + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2}.$$

从左图所示的 V_{eff} 图像看出, 束缚态的能级只能是 $E < 0$.

现在求解方程 (27). 首先, 进行无量纲化处理, 令

$$\rho = \alpha r, \quad \alpha^2 = \frac{8\mu|E|}{\hbar^2}, \quad \lambda = \frac{2\mu e^2}{\alpha\hbar^2} = \sqrt{\frac{\mu e^4}{2\hbar^2|E|}} \tag{28}$$

方程 (27) 变为

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(\rho^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho}\right) + \left[\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]R = 0. \tag{29}$$

考虑 ρ 趋于 $+\infty$ 和 0 时的边界条件. 当 $\rho \to \infty$ 时, 与 1/4 相比, ρ^{-1} 项和 ρ^{-2} 项可以忽略, 于是

$$R(\rho) \xrightarrow{\rho\to\infty} \rho^n e^{\pm\rho/2}.$$

而且, 我们只能选择指数衰减的函数形式.

尝试如下形式的径向波函数

$$R(\rho) = \rho^k L(\rho) e^{-\rho/2}. \tag{30}$$

这里, 我们没有指定 k 是正的或负的, 是整数或分数, 其中的 $L(\rho)$ 是关于 ρ 的多项式.

$$L(\rho) = \sum_{\nu} a_\nu \rho^\nu.$$

再来考虑 $\rho \to 0$ 时波函数的行为. 在关于 $r \to 0$ 时的边界条件的分析中, 我们看到, 在 ρ 趋于零时, 径向波函数 $R(\rho)$ 可以是奇异函数, 只要保证 $\rho|R(\rho)| \to 0$ 就可以了.

将上述尝试形式的径向波函数代入径向方程 (29), 得到

$$\rho^2 L''(\rho) + \rho[2(k+1) - \rho]L'(\rho) + [\rho(\lambda - k - 1) + k(k+1) - \ell(\ell+1)]L(\rho) = 0. \tag{31}$$

其中的撇号表示对 ρ 求导. 当 $\rho \to 0$ 时, 有

$$k(k+1) - \ell(\ell+1) = 0 \implies k = \ell \text{ or } k = -(\ell+1).$$

于是, 当 $r \to 0$ 时, $R(r)$ 的形式有两种可能,

$$R(r) \longrightarrow \begin{cases} \frac{1}{\rho^{-\ell}} L(0) \\ \\ \frac{1}{\rho^{\ell+1}} L(0) \end{cases} \qquad \ell = 0, 1, 2, \cdots$$

根据以前讨论过的边界条件

$$\text{设 } R(r) \xrightarrow{r \to 0} \frac{f(r)}{r^\alpha}, \text{ 则 } \alpha < 1$$

只能选择第一种可能, 即 $k = \ell$. 方程 (31) 改写为

$$\rho L''(\rho) + [2(k+1) - \rho]L'(\rho) + (\lambda - k - 1)L(\rho) = 0. \tag{32}$$

把 $L(\rho)$ 的级数展开形式代入上式, 得到系数 a_ν 的递推关系,

$$a_{\nu+1} = \frac{\nu + \ell + 1 - \lambda}{(\nu+1)(\nu+2\ell+2)} a_\nu.$$

如果 $L(\rho)$ 的级数不中止, 那么当 ν 很大的时候,

$$\frac{a_{\nu+1}}{a_\nu} \longrightarrow \frac{1}{\nu}.$$

这就如同是函数 $\rho^n e^\rho$ 的级数展开形式中相邻系数的比例关系. 如果 $L(\rho) \sim \rho^n e^\rho$, 那么 $R(\rho) \sim \rho^\ell \rho^n e^{\rho/2} \xrightarrow{\rho \to \infty} \infty$. 所以, $L(\rho)$ 的级数形式必须中止.

设级数在第 n' 项中止, 即 $a_{n'+1} = 0$, 那么有

$$\lambda = n' + \ell + 1. \tag{33}$$

表明 λ 一定是自然数 —— n' 和 ℓ 均可为 0, λ 的最小值为 1. 将 λ 改写为 n. 氢原子的能级

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, \cdots. \tag{34}$$

n 被称为氢原子量子态的主量子数 (principal quantum number). n 的取值可以任意大, 有无穷多个束缚态. 束缚态的能级可以任意地接近于 0.

对于给定的某个 n, 由于 $n = n' + \ell + 1$, 而 n' 是非负整数, 故 ℓ 的取值范围是 $0, 1, \cdots, n-1$. 而对于给定的 ℓ, L_z 的本征值 $m\hbar$ 可以有 $2\ell + 1$ 个取值, 即 $m = -\ell, -\ell + 1, \cdots, \ell$. 所以, 能级 E_n 的简并度是

$$\sum_{\ell=0}^{n-1}(2\ell + 1) = n^2.$$

这里只考虑了氢原子的位置空间的自由度, 如果进一步注意到自旋自由度, 那么简并度是 $4n^2$. 这来自于质子和电子的自旋量子态的两重简并.

以上过程中出现的多项式 $L(\rho)$ 与 Laguerre 多项式有关. 援用 Sakurai 书中的符号 (该书附录 A.6), 有如下描述. 第 r 阶 Laguerre 多项式 $L_r(\rho)$ 满足如下方程

$$\rho L_r''(\rho) + (1 - \rho)L_r'(\rho) + rL_r(\rho) = 0 \tag{35}$$

$L_r(\rho)$ 也可以从下面的公式得到

$$L_r(\rho) = e^{\rho}\frac{\mathrm{d}^r}{\mathrm{d}\rho^r}(\rho^r e^{-\rho}) \tag{36}$$

缔合 Laguerre 多项式 $L_r^s(\rho)$ 被定义为

$$L_r^s(\rho) = \frac{\mathrm{d}^s}{\mathrm{d}\rho^s}L_r(\rho) \tag{37}$$

缔合 Laguerre 多项式满足方程

$$\rho L_r^{s\prime\prime}(\rho) + (s + 1 - \rho)L_r^{s\prime}(\rho) + (r - s)L_r^s(\rho) = 0 \tag{38}$$

与 (32) 式比较, 可以发现, 我们希望得到的 $L(\rho)$ 实际上就是 $L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$.

最终, 氢原子的本征函数是

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = -\left[\frac{4(n - \ell - 1)!}{(na_0)^3 n[(n + \ell)!]^3}\right]^{1/2}\rho^{\ell}L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)e^{-\rho/2}Y_{\ell m}(\theta, \phi) \tag{39}$$

其中 $\rho = \alpha r = \frac{2r}{na_0}$, a_0 是 Bohr 半径, $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$.

$$\psi_{1,0,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}},$$

$$\psi_{2,0,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}},$$

$$\psi_{2,1,1}(r, \theta, \phi) = -\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\sin\theta e^{i\phi},$$

$$\psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta,$$

$$\psi_{2,1,-1}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin\theta e^{-i\phi}.$$

Laguerre 多项式

关于 Laguerre 多项式, 不同的参考书中可能有不同的说法, 现在整理一下, 当然, 这里只关心对我们有用的内容.

以下内容主要来自 I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, Table of Integrals, Series, and Products (Elsevier 2007). 书中符号和我们课堂上的叙述略有不同.

首先, 考虑下面的二阶微分方程, Laguerre 方程,

$$xy'' + (1-x)y' + ny = 0, \quad y = y(x)$$

这个方程与 (35) 是一致的, 它的解记作 $y = L_n(x)$, 称为 Laguerre 多项式.

另有广义 Laguerre 方程

$$xy'' + (\alpha + 1 - x)y' + ny = 0, \quad y = y(x) \tag{40}$$

注意这个方程与 (38) 式是有差别的. 这个方程的解记作 $L_n^{(\alpha)}(x)$, 称为广义 Laguerre 多项式, 或者缔合 (associated) Laguerre 多项式. 另外请注意在 Gradshteyn 的书中, 上标没有括号.

$$L_0^{(\alpha)}(x) = 1 \tag{41}$$

$$L_1^{(\alpha)}(x) = 1 + \alpha - x \tag{42}$$

递推关系:

$$(n+1)L_{n+1}^{(\alpha)}(x) = (2n+1+\alpha-x)L_n^{(\alpha)}(x) - (n+\alpha)L_{n-1}^{(\alpha)}(x) \tag{43}$$

Rodrigues 公式:

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{x^{-\alpha}e^x}{n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(e^{-x}x^{n+\alpha}) \tag{44}$$

生成函数:

$$\sum_{n=0}^{\infty} t^n L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{(1-t)^{\alpha+1}} e^{-\frac{tx}{1-t}} \tag{45}$$

考虑对广义 Laguerre 多项式求导, 有

$$\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k} L_n^{(\alpha)}(x) = (-1)^k L_{n-k}^{(\alpha+k)}(x) \tag{46}$$

需要指出表述形式上的差异:

- 这里的 Rodrigues 公式 (44) 与 Sakurai 书中的形式 (36) 式相比有因子 $\frac{1}{n!}$ 的差异. 在 (44) 中令 $\alpha = 0$, 有

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(e^{-x}x^n)$$

而课堂上使用的公式是 (36).

- 这里 $L_n^{(\alpha)}$ 是广义 (或缔合) Laguerre 多项式, 而我们在课堂上说的缔合 Laguerre 多项式实际上是对 $L_n(x)$ (即 $\alpha = 0$ 的广义 Laguerre 多项式 $L_n^{(0)}(x)$) 求导的结果 (见 (37) 式), 即

$$L_n^k(x) = \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}L_n(x)$$

所以, 为了区分这里的广义 Laguerre 多项式和我们课堂上说的形式, 前者用 $L_n^{(\alpha)}(x)$ 表示, 后者用不加括号的上标表示, 即 $L_n^k(x)$.

在(46) 式中令 $\alpha = 0$, 有

$$L_n^k(x) = \frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}L_n(x) = (-1)^k L_{n-k}^{(k)}(x) \tag{47}$$

根据 $L_n^{(\alpha)}$ 满足的方程 (40), 可以写出 $L_n^k(x)$ 满足的方程:

$$xy'' + (k + 1 - x)y' + (n - k)y = 0 \tag{48}$$

现在, 回顾求解氢原子径向波函数的时候涉及的多项式 $L(\rho)$ 以及方程 (32), 与 (48) 式比较, 并注意到 (32) 中的 k 是角动量量子数 ℓ, 而 (32) 中λ 是主量子数 n, 有

$$L(\rho) = L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

这个结果体现在 (39) 中.

接下去我们要考虑 $L_n^k(x)$ 的归一和正交. 广义 Laguerre 多项式的正交归一的表达式是

$$\int_0^\infty x^\alpha e^{-x} L_n^{(\alpha)}(x) L_m^{(\alpha)}(x)\,\mathrm{d}x = \frac{\Gamma(n + \alpha + 1)}{n!}\delta_{n,m} \tag{49}$$

其中 $\Gamma(z)$ 是 Gamma 函数, 满足

$$\Gamma(z + 1) = z\Gamma(z)$$

对于我们说的缔合 Lagurre 多项式 $L_n^k(x)$, 利用 (47) 式, 正交关系是

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty x^k e^{-x} L_n^k(x) L_m^k(x)\,\mathrm{d}x \\
=&\int_0^\infty x^k e^{-x} L_{n-k}^{(k)} L_{m-k}^{(k)}\,\mathrm{d}x \\
=&\frac{\Gamma(n+1)}{(n-k)!}\delta_{n,m} = \frac{n!}{(n-k)!}\delta_{n,m}
\end{aligned}$$

考虑氢原子的径向波函数,

$$R_{n\ell}(\rho) \sim \rho^{\ell} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) e^{-\rho/2} = (-1)^{2\ell+1} \rho^{\ell} e^{-\rho/2} L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho)$$

计算归一化常数,

$$\int_0^{\infty} \left[(-1)^{2\ell+1} \rho^{\ell} e^{-\rho/2} L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho)\right]^2 \rho^2 \,\mathrm{d}\rho$$

$$= \int_0^{\infty} \rho^{2\ell+2} e^{-\rho} \left[L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(\rho)\right]^2 \mathrm{d}\rho$$

这里, 不能直接利用公式 (49), 而是要用

$$\int_0^{\infty} x^{\alpha+1} e^{-x} \left[L_n^{(\alpha)}(x)\right]^2 \mathrm{d}x = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!}(2n+\alpha+1)$$

$$= \frac{2n\Gamma(n+\ell+1)}{(n-\ell-1)!}$$

$$= \frac{2n(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}$$

注意到无量纲化变换 (28) 式, $\rho = \alpha r = \frac{2r}{na_0}$,

$$R_{n\ell}(r) \sim \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{\ell} L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) e^{-\frac{2r}{2na_0}} = (-1)^{2\ell+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{\ell} e^{\frac{2r}{2na_0}} L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

$$\int_0^{\infty} \left\{(-1)^{2\ell+1} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{\ell} e^{\frac{2r}{2na_0}} L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}\left(\frac{2r}{na_0}\right)\right\}^2 r^2 \,\mathrm{d}r = \frac{(na_0)^3 n(n+\ell)!}{4(n-\ell-1)!}$$

再注意到这里使用的 Laguerre 多项式 $L_n(x)$ 与课堂上的形式有因子 $\frac{1}{n!}$ 的差异, 所以, 在 (39) 式的归一化常数中出现了 $[(n+\ell)!]^3$.

如果要进一步考虑 $R_{n\ell}(r)$ 的正交关系, 那么需注意到 ρ 与 r 的关系. 对于不同的 n 和 m, 径向波函数 $R_{n\ell}(\rho) = R_{n\ell}(\frac{2r}{na_0})$, 而 $R_{m\ell}(\rho) = R_{m\ell}(\frac{2r}{ma_0})$. 形如 $\int_0^{\infty} r^2 R_{n\ell}(\frac{2r}{na_0}) R_{m\ell}(\frac{2r}{ma_0}) \,\mathrm{d}r$ 的积分不易计算, 这里不再叙述.

另外需要注意的是, 我们讨论的是氢原子的束缚态, 对应于 $E < 0$, 在这种情况下得到的本征函数虽然正交归一, 但不完备. 完备性需要包括 $E \geqslant 0$ 的情况, 这时的量子态不是束缚态.

- 光谱项, 参看 Cohen 量子力学书卷一 799 页.
- 类氢原子, 注意核电荷数和折合质量, 参看 Cohen 量子力学书卷一 805 页.

第七章　粒子在位置空间中的运动 VII

中心势场中的哈密顿量

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(R)$$

(H, L^2, L_z) 的共同本征态记作 $|n\ell m\rangle$, 本征函数

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = \langle r,\theta,\phi|n\ell m\rangle = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$$

关于本征态 $|n\ell m\rangle$, 需要注意的是,

- 哈密顿量的本征态 $|n\ell m\rangle$ 并不是完备的, 这里离散的本征态是束缚态, 对应的能量本征值小于零. 还存在非束缚态, 它们对应的能量 $E \geqslant 0$, 而且呈连续分布. 因此, H 的本征态的完备性应该包括束缚态和非束缚态两种情形.
- 设 $|\psi\rangle$ 是氢原子的束缚态, 则可以展开为

  $$|\psi\rangle = \sum_{n,\ell,m} c_{n\ell m}\,|n\ell m\rangle$$

  这里, 对量子数 n 的求和是从 $n = 1$ 开始, 没有上限. 但是对 ℓ 和 m 的求和是有限制条件的, 即

  $$\sum_{n,\ell,m} = \sum_{n=1}\sum_{\ell=0}^{n-1}\sum_{m=-\ell}^{\ell}$$

还可以考虑在哈密顿量 H 的支配下束缚态 $|\psi\rangle$ 随时间的演化. 在 t 时刻的量子态是

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n,\ell,m} = c_{n\ell m}\,|n\ell m\rangle\, e^{-iE_n/\hbar}$$

显然, 哈密顿量支配下的时间演化过程不会出现能级的跃迁.

但是, 如果系统与外场或其它量子系统之间有相互作用, 那么就有可能导致能级的跃迁. 例如, 将氢原子放入指向 $+z$ 方向的匀强电场中, 就应该在哈密顿量中添上一项 H',

$$H' = -q\mathcal{E}Z$$

这里 $\mathcal{E}$ 是电场强度的大小. 为了考虑 H' 对氢原子的能级以及本征函数的影响, 需要计算 H' 的矩阵元, 实际上就是计算 Z 的矩阵元. 下面以氢原子的第一激发态为例, 计算 Z 的矩阵元.

第一激发态, $n=2$, 四重简并, 四个简并的本征态是

$$|200\rangle, \quad |211\rangle, \quad |210\rangle, \quad |21-1\rangle$$

上述第一项为偶宇称, 其余三项为奇宇称.

在这个四维子空间中, 计算 Z 的矩阵元 $\langle 2\ell' m'|Z|2\ell m\rangle$. 首先, Z 的对角元为零.

为了得到这个结论, 注意到矩阵元 $\langle 2\ell m|Z|2\ell m\rangle$ 就是积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*_{2\ell m}(r,\theta,\phi)\, z\, \psi_{2\ell m}(r,\theta,\phi)\, \mathrm{d}x\, \mathrm{d}y\, \mathrm{d}z$$

被积函数实际上就是

$$z\left|\psi_{2\ell m}(r,\theta,\phi)\right|^2 \tag{1}$$

波函数 $\psi_{2\ell m}(r,\theta,\phi)$ 具有确定的与轨道角动量量子数 ℓ 有关的宇称 $(-1)^\ell$, 而 $\left|\psi_{2\ell m}(r,\theta,\phi)\right|^2$ 却一定是偶宇称. 在直角坐标系中,

$$\left|\psi_{2\ell m}(x,y,z)\right|^2 = \left|\psi_{2\ell m}(-x,-y,-z)\right|^2$$

因此, 被积函数是关于 z 的奇函数, 从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 的积分为零.

另一方面, 也可以考虑氢原子的本征态 $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)=R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$, 将被积函数 (1) 中的 z 表示为 $r\cos\theta$, 于是被积函数中与角度有关的部分是

$$\cos\theta|Y_{\ell m}(\theta,\phi)|^2 \sim \cos\theta[P_\ell^{|m|}(\cos\theta)]^2$$

这里我们略去了归一化因子. 与角度有关的积分是

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi\ \sin\theta\cos\theta[P_\ell^{|m|}(\cos\theta)]^2$$

$$= -2\pi \int_0^\pi \cos\theta\,[P_\ell^{|m|}(\cos\theta)]^2\, \mathrm{d}(\cos\theta)$$

令 $u=\cos\theta$

$$= 2\pi \int_{-1}^{+1} u[P_\ell^{|m|}(u)]^2\, \mathrm{d}u$$

注意到缔合 Legendre 函数 $P_\ell^m(u)$ 的奇偶性,

$$P_\ell^m(-u) = (-1)^{\ell+m}P_\ell^m(u), \quad u\in[-1,+1]$$

在区间 $[-1,+1]$ 内, P_ℓ^m 的平方总是偶函数, 故上述积分为零.

而且, 对于非对角元, 如果 $m\neq m'$, 那么 $\langle 2\ell m|Z|2\ell' m'\rangle = 0$, 这容易从球谐函数中的 ϕ 部分 $e^{im\phi}$ 看出.

Z 的非零的矩阵元

$$\langle 200|\,Z\,|210\rangle \neq 0, \quad \langle 210|\,Z\,|200\rangle \neq 0$$

实际上它们都是实数, 二者相等. H' 的矩阵形式是

H'	200	211	210	21 − 1
200	0	0	★	0
211	0	0	0	0
210	★	0	0	0
21 − 1	0	0	0	0

这表明, H' 的介入对两维子空间 $\{|211\rangle, |21-1\rangle\}$ 没有影响. 只需要在另一个两维子空间 $\{|200\rangle, |210\rangle\}$ 考虑 H' 带来的修正.

$\boldsymbol{R}$ 的矩阵元　与轨道角动量有关的选择定则

现在考虑一般情形, 从对易关系出发.

$$[L_z, X] = i\hbar Y, \quad [L_z, Y] = -i\hbar X, \quad [L_z, Z] = 0$$

从上述对易子, 有如下推导,

$$0 = \langle n'\ell'm'|[L_z, Z]|n\ell m\rangle = (m'-m)\hbar \langle n'\ell'm'|Z|n\ell m\rangle$$

所以,

$$\boxed{m' \neq m \implies \langle n'\ell'm'|Z|n\ell m\rangle = 0} \tag{2}$$

再从对易子 $[L_z, X]$ 出发,

$$\langle n'\ell'm|[L_z, X]|n\ell m\rangle = (m'-m)\hbar \langle n'\ell'm'|X|n\ell m\rangle = i\hbar \langle n'\ell'm'|Y|n\ell m\rangle$$

类似地, 利用 $[L_z, Y] = -i\hbar X$, 有

$$(m'-m)\hbar \langle n'\ell'm'|Y|n\ell m\rangle = -i\hbar \langle n'\ell'm'|X|n\ell m\rangle$$

接着有

$$(m'-m)^2 \langle n'\ell'm'|X|n\ell m\rangle = \langle n'\ell'm'|X|n\ell m\rangle$$

这意味着

$$\boxed{\langle n'\ell'm'|X|n\ell m\rangle \text{ 或者 } \langle n'\ell'm'|Y|n\ell m\rangle \neq 0 \implies (m'-m)^2 = 1} \tag{3}$$

关于 m 的选择定则:

$$\text{如果 } \boldsymbol{R} \text{ 的矩阵元非零, 那么一定有 } \Delta m = \pm 1, 0 \tag{4}$$

或者换句话说, 如果 $\Delta m \neq \pm 1, 0$, 那么一定不会发生跃迁现象.

为了分析关于 ℓ 的选择定则, 需要考虑如下对易子,

$$[L^2,[L^2,\boldsymbol{R}]]=2\hbar^2(\boldsymbol{R}L^2+L^2\boldsymbol{R})$$

进行如下运算,

$$\begin{aligned}
&\langle n'\ell'm'|[L^2,[L^2,\boldsymbol{R}]]|n\ell m\rangle=2\hbar^2\langle n'\ell'm'|\boldsymbol{R}L^2+L^2\boldsymbol{R}|n\ell m\rangle\\
=&\underline{2\hbar^4[\ell(\ell+1)+\ell'(\ell'+1)]\langle n'\ell'm'|\boldsymbol{R}|n\ell m\rangle}\\
=&\langle n'\ell'm'|(L^2[L^2,\boldsymbol{R}]-[L^2,\boldsymbol{R}])|n\ell m\rangle\\
=&\hbar^2[\ell'(\ell'+1)-\ell(\ell-1)]\langle n'\ell'm'|[L^2,\boldsymbol{R}]|n\ell m\rangle\\
=&\underline{\hbar^4[\ell'(\ell'+1)-\ell(\ell+1)]^2\langle n'\ell'm'|\boldsymbol{R}|n\ell m\rangle}
\end{aligned}$$

如果 $\langle n'\ell'm'|\boldsymbol{R}|n\ell m\rangle\neq 0$, 那么一定有

$$2[\ell(\ell+1)+\ell'(\ell'+1)]=[\ell'(\ell'+1)-\ell(\ell+1)]^2$$

从中解出

$$[(\ell'+\ell+1)^2-1][(\ell'-\ell)^2-1]=0$$

上式的第一个因式不能为零, 因为该式等于零的前提是 $\ell=\ell'=0$, 这会导致 $\langle n'\ell'm'|\boldsymbol{R}|n\ell m\rangle=0$. 只能是 $\Delta\ell=\pm1$. 因此得到关于 ℓ 的选择定则,

$$\text{如果 } \boldsymbol{R} \text{ 的矩阵元非零, 那么一定有 } \Delta\ell=\pm1 \tag{5}$$

换句话说, 如果 $\Delta\ell\neq\pm1$, 那么就没有相应的跃迁.

例如 ψ_{200} 态是亚稳态. $\ell=0$, 没有更低的态具有 $\ell=\pm1$.

期望值 $\langle r^s\rangle$

已经得到了氢原子的本征函数 $\psi_{n\ell m}(\boldsymbol{r})=R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)$, 考虑径向距离 r 的 s 次幂在 $\psi_{n\ell m}(\boldsymbol{r})$ 中的期望值 $\langle r^s\rangle$,

$$\langle r^s\rangle=\int_0^\infty \mathrm{d}r\int \mathrm{d}\Omega\, r^2r^s|R_{n\ell}|^2|Y_{\ell m}|^2=\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^{s+2}|R_{n\ell}|^2=\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^s|u(r)|^2$$

这里 $u(r)=rR(r)$.

首先需要分析一下 s 的下限是多少. 注意到 $R_{n\ell}(r)\sim\rho^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)e^{\rho/2}$, 其中 $\rho=\alpha r=\frac{2r}{na_0}$. 当 $r\to0$ 时, Laguerre 多项式趋于常数, 径向波函数 $R_{n\ell}$ 的行为由 r^ℓ 决定, 所以

$$r^{s+2}|R_{n\ell}(r)|^2\xrightarrow{r\longrightarrow0}r^{s+2+2\ell}$$

这个渐进值不能为 ∞, 因此必须有

$$s \geqslant -2\ell - 2 \tag{6}$$

例如, 对于 $\ell = 0$ 的 $1s$ 态, $2s$ 态等等, 我们最低只能计算 $\langle r^{-2} \rangle$, 而期望值 $\langle r^{-3} \rangle$ 则是发散的结果了. 下面计算满足条件 (6) 的期望值 $\langle r^s \rangle$.

先考虑直接计算. 写出几个低阶的径向波函数.

$$R_{10} = 2a_0^{-3/2} \exp(-r/a_0)$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} a_0^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{a_0}\right) \exp(-r/2a_0)$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}} a_0^{-3/2} \frac{r}{a_0} \exp(-r/2a_0)$$

$$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}} a_0^{-3/2} \left(1 - \frac{2}{3}\frac{r}{a_0} + \frac{2}{27}\frac{r^2}{a_0^2}\right) \exp(-r/3a_0)$$

$$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}} a_0^{-3/2} \left(1 - \frac{1}{6}\frac{r}{a_0}\right) \exp(-r/3a_0)$$

$$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}} a_0^{-3/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 \exp(-r/3a_0)$$

下图描绘了氢原子本征函数径向部分的图像.

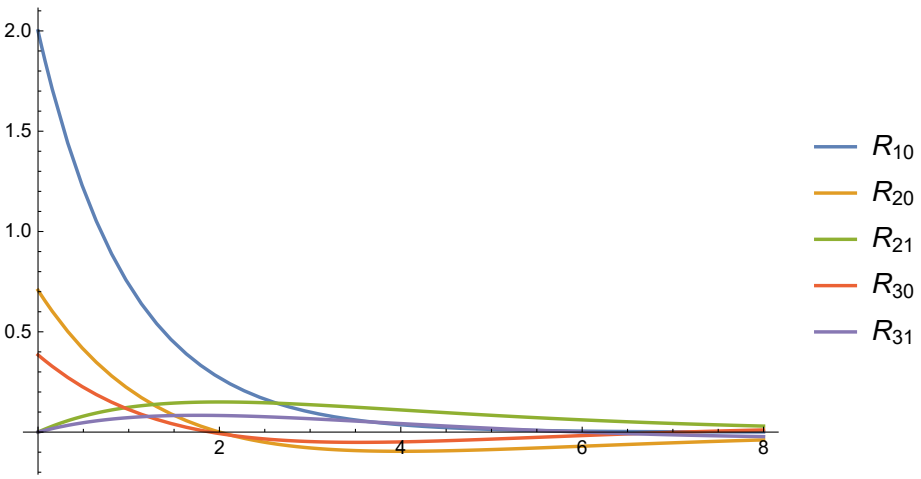


图 1

考虑积分

$$\langle r^s\rangle_{n\ell} = \int_0^\infty r^{s+2}|R_{n\ell}|^2\,\mathrm{d}r$$

令

$$I(k,p) = \int_0^\infty r^k e^{-pr/a_0}\,\mathrm{d}r$$

这里 k 是整数且 $k \geqslant 0$, 以保证积分的结果不会发散. 而 $p \geqslant 0$, 未必是整数. 容易得到递推关系

$$I(k,p) = \frac{ka_0}{p} I(k-1,p)$$

$I(0,p)$ 容易计算,

$$I(0,p) = \int_0^\infty e^{-pr/a_0}dr = \frac{a_0}{p}$$

接着有

$$I(k,p) = k!\left(\frac{a_0}{p}\right)^{k+1}$$

给出一些期望值,

$$\langle r\rangle_{1s} = \frac{4}{a_0^3} I(3,2) = \frac{3}{2}a_0$$

$$\langle r^2\rangle_{2s} = \frac{1}{2a_0^3}\left[I(4,1) - \frac{1}{a_0}I(5,1) + \frac{1}{4a_0^2}I(6,1)\right] = 42a_0^2$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{1s} = \frac{4}{a_0^3} I(1,2) = \frac{1}{a_0}$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{2s} = \frac{1}{2a_0^3}\left[I(1,1) - \frac{1}{a_0}I(2,1) + \frac{1}{4a_0^2}I(3,1)\right] = \frac{1}{4a_0}$$

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_{2p} = \frac{1}{24a_0^5} I(3,1) = \frac{1}{4a_0}$$

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{1s} = \frac{4}{a_0^3} I(0,1) = \frac{2}{a_0^2}$$

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{2s} = \frac{1}{2a_0^3}\left[I(0,1) - \frac{1}{a_0}I(1,1) + \frac{1}{4a_0^2}I(2,1)\right] = \frac{1}{4a_0^2}$$

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle_{2p} = \frac{1}{24a_0^5} I(2,1) = \frac{1}{12a_0^2}$$

上面提供了直接计算的过程, 但是并不能给出 $\langle r^s\rangle$ 的一般形式. 于是我们来证明下面的递推关系.

$$\boxed{\frac{s+1}{n^2}\langle r^s\rangle - (2s+1)a_0\langle r^{s-1}\rangle + \frac{s}{4}[(2\ell+1)^2 - s^2]a_0^2\langle r^{s-2}\rangle = 0, \quad s \geqslant -2\ell} \tag{7}$$

上式中的期望值都是在氢原子的本征波函数 $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi)$ 中计算的, 而 $s \geqslant -2\ell$, 可以保证 $\langle r^{s-2}\rangle$ 为有限值.

为了证明 (7) 式, 回顾 $R(\rho)$ 满足的方程

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\left(\rho^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}\rho}\right)+\left[\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]R=0.$$

可以用 $u(r)=rR(r)$ 表示,

$$\frac{\mathrm{d}^2u(\rho)}{\mathrm{d}\rho^2}-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}u(\rho)+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)u(\rho)=0 \tag{8}$$

期望值表示为

$$\langle\rho^s\rangle=\int_0^\infty\rho^{s+2}R(\rho)^2\,\mathrm{d}\rho=\int_0^\infty\rho^s u(\rho)^2\,\mathrm{d}\rho$$

现在, 用 $\rho^{s+1}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}$ 乘以 (8) 式的左端, 再作积分. 先算关于 (8) 式左端第一项的积分, 注意在计算过程中利用 $u(\rho)$ 的边界条件, $u(0)=u(\infty)=0$, 以及 $\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}$ 在原点和无穷远处为零.

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty\rho^{s+1}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2}\,\mathrm{d}\rho&=\frac{1}{2}\int_0^\infty\rho^{s+1}\,\mathrm{d}\left[\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}\right)^2\right]\\
&=-\frac{s+1}{2}\int_0^\infty\rho^s\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}\right)^2\mathrm{d}\rho\\
&=\frac{s+1}{2}\int_0^\infty u\,\mathrm{d}\left[\rho^s\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}\right)\right]\\
&=\frac{s(s+1)}{2}\int_0^\infty\rho^{s-1}u\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}\,\mathrm{d}\rho+\frac{s+1}{2}\int_0^\infty\rho^s u\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2}\,\mathrm{d}\rho
\end{aligned}$$

在上式第二项中用方程 (8) 替代 $\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2}$

$$\begin{aligned}
&=\frac{s(s+1)}{4}\int_0^\infty\rho^{s-1}\,\mathrm{d}(u^2)+\frac{s+1}{2}\int_0^\infty\rho^s\left[\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}-\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)\right]u^2\,\mathrm{d}\rho\\
&=-\frac{s(s^2-1)}{4}\int_0^\infty\rho^{s-2}u^2\,\mathrm{d}\rho+\frac{s+1}{2}\int_0^\infty\left[\ell(\ell+1)\rho^{s-2}-\lambda\rho^{s-1}+\frac{\rho^s}{4}\right]u^2\,\mathrm{d}\rho\\
&=-\frac{s(s^2-1)}{4}\langle\rho^{s-2}\rangle+\frac{s+1}{2}\left[\ell(\ell+1)\langle\rho^{s-2}\rangle-\lambda\langle\rho^{s-1}\rangle+\frac{1}{4}\langle\rho^s\rangle\right]
\end{aligned}$$

接着计算关于 (8) 式左端第二项和第三项的积分.

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty\rho^{s+1}\left[-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}u(\rho)+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)u(\rho)\right]\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}\,\mathrm{d}\rho\\
=&\frac{1}{2}\ell(\ell+1)(s-1)\langle\rho^{s-2}\rangle-\frac{\lambda s}{2}\langle\rho^{s-1}\rangle+\frac{s+1}{8}\langle\rho^s\rangle
\end{aligned}$$

以上两式相加, 结果为零, 得到递推关系

$$\frac{s+1}{4}\langle\rho^s\rangle-\frac{\lambda}{2}(2s+1)\langle\rho^{s-1}\rangle+\frac{s}{4}[(2\ell+1)^2-s^2]\langle\rho^{s-2}\rangle=0$$

再将 ρ 改写为 $\rho=\frac{2r}{na_0}$, 最终得到关系 (7).

第七章　粒子在位置空间中的运动 VIII

带电粒子在电磁场中的运动

前面讨论过的氢原子可以视作带电粒子在 Coulomb 场中的运动. 还可以考虑以下情况:

1. 带电量为 q 的粒子在匀强电场中的运动, 哈密顿量是

$$H = \frac{P^2}{2m} - q\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{R}$$

$$\boxed{\text{设 } \boldsymbol{E} = E\boldsymbol{e}_z}$$

$$= \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + \frac{P_z^2}{2m} - qEZ$$

   哈密顿量中与 z 方向有关的部分 $\frac{P_z^2}{2m} - qEZ$ 描述的是线性势场中的运动, 在动量表象中容易求解. 在位置表象中的波函数与 Airy 函数有关.

2. 带电谐振子在匀强电场 $\boldsymbol{E} = E\boldsymbol{e}_z$ 中的运动, 哈密顿量为

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 R^2 - qEZ$$

   在 z 方向上的运动相当于平衡位置平移了的谐振子的运动.

3. 具有一定自旋的粒子在磁场中的运动, 典型的问题是 SG 实验. 关于 SG 实验的更细致的讨论, 参看
   - D. E. Platt, American Journal of Physics **60**, 306 (1992).
   - G. Potel, F. Barranco, S. Cruz-Barrios, and J. Gómez-Camacho, Physical Review A **71**, 052106 (2005).

4. 带电量 q 的粒子在匀强磁场中的运动.

下面着重分析无自旋的带电粒子在电磁场中的运动.

微观粒子的质量为 m, 带电量为 q. 电场 $\boldsymbol{E}$, 磁场 $\boldsymbol{B}$. 标量势 ϕ, 矢量势 $\boldsymbol{A}$.

经典情形

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}$$

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$$

对于给定的场强 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{B}$, 可以有多种不同的 ϕ 和 $\boldsymbol{A}$ 与之对应,

$$\boldsymbol{A} \longrightarrow \boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla\chi, \quad \phi \longrightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t},$$

其中 $\chi = \chi(\boldsymbol{r}, t)$. 规范变换不影响场强.

Lagrange 量

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}mv^2 - q\phi(\boldsymbol{r}, t) + q\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t),$$

其中 $\boldsymbol{v} = \frac{d\boldsymbol{r}}{dt}$.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial v_k}\right) - \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial r_k} = 0$$

$$\Downarrow$$

$$m\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = q\left(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}\right)$$

正则 (canonical) 动量

$$\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v} + q\boldsymbol{A}. \tag{1}$$

Hamilton 量

$$H = \boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{p} - \mathcal{L} = \frac{1}{2}Mv^2 + q\phi(\boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A}\right)^2 + q\phi. \tag{2}$$

量子情形

$$H = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{P} - q\boldsymbol{A}\right)^2 + q\phi, \quad \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}, t), \ \ \phi = \phi(\boldsymbol{R}, t) \tag{3}$$

速度算子 $\boldsymbol{V}$,

$$\boldsymbol{V} = \frac{\text{机械动量算子}}{m} = \frac{1}{m}\left(\boldsymbol{P} - q\boldsymbol{A}\right).$$

考虑与速度算子有关的对易关系.

$$[R_j, V_k] = \frac{i\hbar}{m}\delta_{jk}$$

$$\begin{aligned}
[V_x, V_y] &= \frac{1}{m^2}[P_x, P_y] + \left(\frac{q}{m}\right)^2[A_x, A_y] - \frac{q}{m^2}\{[A_x, P_y] + [P_x, A_y]\} \\
&= -\frac{q}{m^2}\{[A_x, P_y] + [P_x, A_y]\} \\
&= -i\frac{\hbar q}{m^2}\left\{\frac{\partial A_x}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial x}\right\} \\
&= \frac{i\hbar q}{m^2}(\nabla \times \boldsymbol{A})_z = \frac{i\hbar q}{m^2}B_z
\end{aligned}$$

$$[V_j, V_k] = \frac{i\hbar q}{m^2}\epsilon_{jk\ell}B_\ell$$

其中 $\epsilon_{jk\ell}$ 是

$$\epsilon_{jk\ell} = \begin{cases} +1 & \text{当 } jk\ell = 123 \text{ 的偶数次置换} \\ -1 & \text{当 } jk\ell = 123 \text{ 的奇数次置换} \\ 0 & \text{当 } j,k,\ell \text{ 中至少两个是相等的} \end{cases}$$

速度算子期望值的运动方程　我们知道, 某个力学量 O 的期望值随时间变化的方程是

$$\frac{d}{dt}\langle O\rangle(t) = \frac{1}{i\hbar}\langle [O,H]\rangle + \left\langle \frac{\partial O}{\partial t}\right\rangle.$$

这里, 期望值是针对 $|\psi(t)\rangle$ 而言的. 考虑 $O = V_k$.

$$V_k = \frac{1}{m}\Big(P_k - qA_k\Big)$$

$$H = \frac{1}{2}mV^2 + q\phi = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{P} - q\boldsymbol{A})^2 + q\phi$$

$$\begin{aligned}
[V_k, H] &= \frac{1}{2}m\sum_j [V_k, V_j^2] + q[V_k,\phi] \\
&= \frac{1}{2}m\sum_j \Big\{V_j[V_k,V_j] + [V_k,V_j]V_j\Big\} + \frac{q}{m}[P_k,\phi] \\
&= \frac{i}{2}\frac{\hbar q}{m}\sum_{j,\ell}(V_j\,\epsilon_{kj\ell}B_\ell + \underline{\epsilon_{kj\ell}B_\ell V_j}) - \frac{q}{m}i\hbar(\nabla\phi)_k \\
&= \frac{i}{2}\frac{\hbar q}{m}\sum_{j,\ell}\epsilon_{kj\ell}(V_jB_\ell \underline{-B_jV_\ell}) - \frac{q}{m}i\hbar(\nabla\phi)_k
\end{aligned}$$

对于上面计算的最后两步, 补充一个步骤:

$$\sum_{j,\ell}\epsilon_{kj\ell}B_\ell V_j = -\sum_{j,\ell}\epsilon_{k\ell j}B_\ell V_j = -\sum_{j,\ell}\epsilon_{kj\ell}B_jV_\ell$$

可以看一个具体的形式.

$$\begin{aligned}
[V_1, H] &= \frac{i}{2}\frac{\hbar q}{m}(V_2B_3 - B_2V_3 - V_3B_2 + B_3V_2) - \frac{q}{m}i\hbar(\nabla\phi)_1 \\
&= \frac{i}{2}\frac{\hbar q}{m}(\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\boldsymbol{V})_1 - \frac{q}{m}i\hbar(\nabla\phi)_1
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{i\hbar}[V_1,H] + \frac{\partial V_1}{\partial t} &= \frac{q}{2m}(\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\boldsymbol{V})_1 - \frac{q}{m}(\nabla\phi)_1 - \frac{q}{m}\frac{\partial A_1}{\partial t} \\
&= \frac{1}{2}\frac{q}{m}(\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\boldsymbol{V})_1 + \frac{q}{m}E_1
\end{aligned}$$

$$\left\langle m\frac{d\boldsymbol{V}}{dt}\right\rangle = q\langle\boldsymbol{E}\rangle + \frac{1}{2}q\langle\boldsymbol{V}\times\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\times\boldsymbol{V}\rangle$$

可以类比于经典情形下的运动方程.

机械角动量算子　定义

$$\boldsymbol{\Lambda} = m\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{V}$$

这是机械角动量算子.

计算对易子

$$\begin{aligned}[\Lambda_x,\Lambda_y] =& m^2[YV_z - ZV_y, ZV_x - XV_z]\\ =& i\hbar(-mYV_x + qYZB_y + qZ^2B_z + qXZB_x + mXV_y)\\ =& i\hbar(\Lambda_z + qZ\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{B})\end{aligned}$$

而正则角动量的对易关系依旧是

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$$

计算机械角动量 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的期望值随时间的变化.

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\boldsymbol{\Lambda}\rangle = \langle[\boldsymbol{\Lambda}, H]\rangle$$

$$[XV_y - YV_x, H] = \frac{i\hbar}{m}(XF_y - YF_x) + i\hbar[V_x, V_y]$$

$$[V_yX - V_xY, H] = \frac{i\hbar}{m}(F_yX - F_xY) - i\hbar[V_x, V_y]$$

注意到 $XV_y = V_yX$, $YV_x = V_xY$, 以上两式相加再除以 2, 有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Lambda_z\rangle = \frac{1}{2}\langle XF_y - YF_x - F_xY + F_yX\rangle$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\boldsymbol{\Lambda}\rangle = \frac{1}{2}\langle\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{F} - \boldsymbol{F}\times\boldsymbol{R}\rangle$$

可类比于经典结论: 角动量的变化率对于力矩.

空间位置表象中的 Hamilton 量

$$H = \frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - q\boldsymbol{A})^2 + q\phi$$

$$H = \frac{1}{2m}\left[P^2 - q(\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}) + q^2A^2\right] + q\phi$$

$$\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P} = -i\hbar\nabla\cdot\boldsymbol{A}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{i\hbar q}{m}\boldsymbol{A}\cdot\nabla + \frac{i\hbar q}{2m}\nabla\cdot\boldsymbol{A} + \frac{q^2}{2m}A^2 + q\phi \tag{4}$$

通常选择 Coulomb 规范

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0. \tag{5}$$

规范变换

如下形式的势的变换不会改变场强,

$$\boldsymbol{A} \longrightarrow \boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla\chi$$

$$\phi \longrightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t},$$

对于 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - q\boldsymbol{A}\right)^2\Psi + q\phi\Psi \tag{6}$$

势的变换不能保证方程的形式不变, 还需要对量子态进行变换, 需满足 $|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2 = |\Psi'(\boldsymbol{r},t)|^2$,

$$\Psi \longrightarrow \Psi' = \Psi\exp\left\{\frac{iq}{\hbar}\chi\right\} \tag{7}$$

于是 Schrödinger 方程的形式保持不变,

$$i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla - q\boldsymbol{A}'\right)^2\Psi' + q\phi'\Psi'$$

规范不变量

- 速度的期望值是规范不变的.
- 速度的本征值也是规范不变的.
- 几率流密度矢量是规范不变的.

速度的期望值

$$\langle\Psi|\,\boldsymbol{V}\,|\Psi\rangle = \left\langle\Psi\middle|\left(\frac{\boldsymbol{P}}{m} - \frac{q\boldsymbol{A}}{m}\right)\middle|\Psi\right\rangle$$

在规范变换下,

$$\begin{aligned}&\left(-i\hbar\nabla - q\boldsymbol{A}'\right)\Psi'\\ =&\left[-i\hbar\nabla - q(\boldsymbol{A} + \nabla\chi)\right]e^{i(q/\hbar)\chi}\Psi\\ =&e^{i(q/\hbar)\chi}\left(-i\hbar\nabla - q\boldsymbol{A}\right)\Psi\end{aligned}$$

所以, 速度的期望值是规范不变的.

但是, 动量的期望值 $\langle\Psi|\,\boldsymbol{P}\,|\Psi\rangle$ 却不是规范不变的.

另外, 速度的本征值也是规范不变的. 设 $\psi(\boldsymbol{r})$ 是 V_z 的本征态.

$$\left(\frac{P_z}{m} - \frac{q}{m}A_z\right)\psi(\boldsymbol{r}) = v_z\psi(\boldsymbol{r})$$

$$\begin{aligned}\left(\frac{P_z}{m} - \frac{q}{m}A_z'\right)e^{i(q/\hbar)\chi}\psi(\boldsymbol{r}) &= e^{i(q/\hbar)\chi}\left(\frac{P_z}{m} - \frac{q}{m}A_z\right)\psi(\boldsymbol{r})\\ &= v_z e^{i(q/\hbar)\chi}\psi(\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

几率流密度矢量

$$\boldsymbol{J} = \mathrm{Re}\left\{\Psi^*(\boldsymbol{r},t)\left[\frac{\boldsymbol{P}}{m} - \frac{q}{m}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right]\Psi(\boldsymbol{r},t)\right\}$$

也是规范不变的.

无自旋粒子在匀强磁场中的运动

重新回到哈密顿量 (3), 现在不考虑电场, 设电势 $\phi = 0$. 粒子质量 m, 带电量 q (以下设 $q > 0$). 磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 恒定, 设矢量势 $\boldsymbol{A}$ 不含时.

$$\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$$

$$[V_z, V_x] = [V_z, V_y] = 0$$

$$H = H_{xy} + H_z$$

$$H_{xy} = \frac{1}{2}m(V_x^2 + V_y^2), \quad H_z = \frac{1}{2}mV_z^2$$

$$[H_{xy}, H_z] = 0$$

$$[V_x, V_y] = \frac{i\hbar q}{m^2}B$$

$$\text{令 } \gamma = \sqrt{\frac{\hbar qB}{m^2}}$$

$$V_x = \gamma Q', \quad V_y = \gamma P'$$

$$[Q', P'] = i$$

$$H_{xy} = \frac{1}{2}\frac{\hbar qB}{m}(P'^2 + Q'^2)$$

$$H_{xy} \text{ 的本征值是 } (n + \tfrac{1}{2})\frac{\hbar qB}{m}, n = 0, 1, 2, \cdots$$

至于 H_z 的本征值, 只需考虑 V_z 的本征值. 而 V_z 的本征值是规范不变的. 可以将 A_z 选择为 0. 于是 V_z 的本征值就相当于 P_z 的本征值, 从 $-\infty$ 到 $+\infty$.

H 的本征值是

$$E_n(v_z) = (n + \tfrac{1}{2})\frac{\hbar qB}{m} + \frac{1}{2}mv_z^2, \quad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{8}$$

讨论一下对求得的能量本征值的理解. 哈密顿量 H 由可分离的两项组成: H_{xy} 和 H_z, 它们彼此对易, 于是 H 的本征值是 H_{xy} 的本征值和 H_z 的本征值之和. 带电粒子在 z 方向的运动如同自由粒子的运动, 相应的能量即是动能 $\frac{1}{2}mv_z^2$. 横向运动, 即在平行于 xy 平面内的运动, 应该可以类比于经典情形中的圆周运动. 而经典电磁学告诉我们, 在匀强磁场 $B\boldsymbol{e}_z$ 中, 如果带电粒子在垂直于磁场的方向上的速度分量是 v_{xy}, 那么圆周运动的频率是 $\frac{qB}{m}$, 这正对应于 (8) 式中右端第一项中的频率.

求解本征波函数.

$$A_x = -yB, \quad A_y = A_z = 0$$

满足 $\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0, \nabla \times \boldsymbol{A} = \boldsymbol{B}$. Hamilton 量

$$H = \frac{1}{2m}[(p_x + yqB)^2 + P_y^2 + P_z^2]$$

显然 $[P_x, H] = [P_z, H] = 0$, 但是 P_y 与 H 不对易. 于是考虑对易力学量的集合 $\{H, P_x, P_z\}$.

在位置表象中,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{i\hbar q}{m}By\frac{\partial}{\partial x}\psi + \frac{q^2B^2}{2m}y^2\psi = E\psi$$

ψ 可以选择为 P_x 和 P_z 的本征函数,

$$\psi(x, y, z) = \exp\{i(k_x x + k_z z)\}\varphi(y)$$

然后得到关于 $\varphi(y)$ 的方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(y)}{\mathrm{d}y^2} + \frac{\hbar qBk_x}{m}y\varphi(y) + \left[\frac{q^2B^2}{2m}y^2 + \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_z^2) - E\right]\varphi(y) = 0$$

y 的线性项可以通过平移变换消除.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\varphi(y)}{\mathrm{d}y^2} + \left[\frac{1}{2}m\omega_c^2(y - y_0)^2 - E'\right]\varphi(y) = 0$$

其中

$$y_0 = -\frac{\hbar k_x}{qB}$$

$$\omega_c = \frac{qB}{m}$$

$$E' = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

而 E' 可以通过谐振子的能级得到,

$$E' = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad \omega = \omega_c$$

所以

$$E = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \tag{9}$$

本征函数的形式

$$\psi = e^{i(k_x x + k_z z)}\, H_n(\alpha(y - y_0))\, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2(y - y_0)^2}$$

其中 $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega_c}{\hbar}} = \sqrt{\frac{qB}{\hbar}}$, H_n 是 Hermite 多项式.

轨道中心坐标 先考虑经典情形. 带电粒子的位置

$$x - x_0 = r\cos(\omega_c t + \theta), \quad y - y_0 = -r\sin(\omega_c t + \theta)$$

粒子运动的速度

$$v_x = -\omega_c r \sin(\omega_c t + \theta), \quad v_y = -\omega_c r \cos(\omega_c t + \theta)$$

所以可以说, 轨道中心的坐标是

$$x_0 = x + \frac{v_y}{\omega_c}, \quad y_0 = y - \frac{v_x}{\omega_c}$$

它们都是运动常数.

类比到量子情形, 有

$$X_0 = X + \frac{V_y}{\omega_c}, \quad Y_0 = Y - \frac{V_x}{\omega_c}$$

它们与哈密顿量对易,

$$[X_0, H] = [Y_0, H] = 0$$

所以它们也是运动常数. 但是, X_0 和 Y_0 不对易,

$$[X_0, Y_0] = \frac{-i\hbar}{qB}$$

因此, 轨道中心算子的 x 分量和 y 分量之间存在不确定关系,

$$\Delta X_0 \, \Delta Y_0 \geqslant \frac{1}{2}\frac{1}{qB}$$

选择其它形式的 $\boldsymbol{A}$, 会对结果产生怎样的影响呢?

$$\boldsymbol{A} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{R} \times \boldsymbol{B} = -\frac{1}{2}BY\boldsymbol{e}_x + \frac{1}{2}BX\boldsymbol{e}_y$$

速度算子

$$V_x = \frac{P_x}{m} + \frac{1}{2}\frac{qB}{m}Y = \frac{P_x}{m} + \frac{1}{2}\omega_c Y$$

$$V_y = \frac{P_y}{m} - \frac{1}{2}\frac{qB}{m}X = \frac{P_y}{m} - \frac{1}{2}\omega_c X$$

$$V_z = \frac{P_z}{m}$$

重新表示哈密顿量

$$H = H_\perp + H_\parallel$$

$$H_\perp = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2) - \frac{\omega_c}{2}L_z + \frac{m\omega_c^2}{8}(X^2 + Y^2)$$

$$H_\parallel = \frac{1}{2m}P_z^2$$

其中 L_z 是轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 的 z 方向上的分量. 注意到 $[H_\perp, H_\parallel] = 0$.

单独考虑 $H_\perp$, 令

$$H_{2\mathrm{D}} = \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2) + \frac{1}{2}m\left(\frac{\omega_c}{2}\right)^2(X^2 + Y^2)$$

这相当于一个频率为 $\frac{\omega_c}{2}$ 的二维谐振子, 而且 $[H_{2\mathrm{D}}, L_z] = 0$. 因此 $H_{2\mathrm{D}}$ 和 L_z 有共同的本征态.

引入升降算子 $a_x, a_x^\dagger, a_y, a_y^\dagger$,

$$a_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta X + i\frac{P_x}{\hbar\beta}\right), \quad a_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta X + i\frac{P_y}{\hbar\beta}\right)$$

其中

$$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad \omega = \frac{\omega_c}{2}$$

对易关系

$$[a_x, a_x^\dagger] = [a_y, a_y^\dagger] = \mathbb{1}$$

下标不相同的对易子为零. $H_{2\mathrm{D}}$ 可以表示为

$$H_{2\mathrm{D}} = (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1)\hbar\omega$$

本征态

$$|\varphi_{n_x,n_y}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x! n_y!}}(a_x^\dagger)^{n_x}(a_y^\dagger)^{n_y}|\varphi_{0,0}\rangle$$

本征值

$$E_{2\mathrm{D}} = (n+1)\hbar\omega, \quad n = n_x + n_y$$

轨道角动量 L_z 可以表示为

$$L_z = i\hbar(a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y)$$

定义

$$a_d = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y), \quad a_d = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y)$$

非零的对易子

$$[a_d, a_d^\dagger] = [a_g, a_g^\dagger] = \mathbb{1}$$

令 $N_d = a_d^\dagger a_d$, $N_g = a_g^\dagger a_g$, 有

$$H_{2\mathrm{D}} = (N_d + N_g + 1)\hbar\omega, \quad \omega = \frac{\omega_c}{2}$$

$$L_z = \hbar(N_d - N_g)$$

$$H_\perp = H_{2\mathrm{D}} - \frac{\omega_c}{2}L_z$$

算子 N_d 和 N_g 的本征值分别记作 n_d 和 n_g, 它们的取值都是 $0, 1, 2, \cdots$. 容易得到 $H_\perp$ 的本征值

$$E_\perp = (n_d + n_g + 1)\frac{\hbar\omega_c}{2} - (n_d - n_g)\frac{\hbar\omega_c}{2} = \left(n_g + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

可以看出, $E_\perp$ 正好等于 (9) 式的第一项, 考虑了 $H_\parallel$ 之后, 哈密顿量的本征值仍然是 (9), 这是应该的, 因为规范变换不会改变能量本征值 (对比前面说过的结论: 速度算子的本征值是规范不变的).

第八章　角动量 I

Galileo 时空变换

非相对论情形下的时空变换是Galileo 变换:

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{r} &\longrightarrow \boldsymbol{r}' = R\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a} + \boldsymbol{v}t \\ t &\longrightarrow t' = t + s \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

其中, R 描述空间旋转变换, 它是一个 3×3 的特殊正交矩阵, $R \in \mathrm{SO}(3)$. $\boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^3$ 表示空间平移向量. $\boldsymbol{v}$ 是一个惯性系相对于另一个惯性系的速度. s 是时间平移量. Galileo 变换构成 Galileo 群.

在量子力学中, 描述微观粒子状态的量不是位置或动量, 而是量子态, 而观测量则要表示为厄密算子的形式, 所以量子力学中讨论时空变换就不仅仅是 (1) 式所示的内容, 而是要关注时空变换对量子态和观测量的影响.

对于空间的变化是空间平移和空间旋转, 这将影响到量子态在位置空间中的形式, 即波函数. 所以, 下面的讨论实际上是关于位置表象中的波函数而言的, 但是, 得到的结论将推广到其它情形, 例如描述粒子的内禀属性的量子态.

在时空变换下, 量子态和力学量变为

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle, \quad A \longrightarrow A'.$$

须满足两个条件:

1. 如果 $A|\alpha_j\rangle = a_j|\alpha_j\rangle$, 那么 $A'|\alpha'_j\rangle = a_j|\alpha'_j\rangle$. 即, 力学量的本征值在 Galileo 变换下是不变的.
2. 如果 $|\psi\rangle = \sum_j c_j|\alpha_j\rangle$ 变为 $|\psi'\rangle = \sum_j c'_j|\alpha'_j\rangle$, 那么 $|c_j|^2 = |c'_j|^2$, 即, 观测到结果 a_j 的几率是不变的.

Wigner 定理与第 2 个条件密切相关.

定理 (Wigner 定理) 设 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 是 Hilbert 空间中的两个向量, 在变换 U 的作用下, $|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = U|\psi\rangle$, $|\varphi\rangle \to |\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle$. 如果 U 能够保证这两个向量的内积的模不变, 那么 U 是酉变换或者是反酉变换. □

酉变换不但保证两个向量的内积的模不变, 而且保证它们的内积是不变的.

反酉变换是反线性变换,

$$U(c|\psi\rangle) = c^* U|\psi\rangle.$$

对于反酉变换 U,

$$\langle\varphi'|\psi'\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^* .$$

反酉变换被用来描述离散变换, 比如时间反演.

对于酉变换或者反酉变换 U, 力学量的变化是

$$A \longrightarrow A' = UAU^{-1}.$$

对于单参数的酉变换 $U = U(s)$ (s 是描述变换的参数), 有生成元

$$\left.\frac{dU(s)}{ds}\right|_{s=0} = -iK, \quad K = K^\dagger.$$

生成元 K 是厄米算子. 而酉变换 $U(s)$ 又可以写为

$$U(s) = e^{-isK}.$$

如果变换的参数多于一个, 就会有更多的生成元, 这些生成元之间的对易关系构成了特定的 Lie 代数. 回顾 Chapter 3-1 中讨论的 SU(2) 变换的生成元.

空间平移变换　回顾空间平移变换.

$$\boldsymbol{r} \longrightarrow \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}. \tag{2}$$

动量 $\boldsymbol{P}$ 是空间平移变换的生成元, 在无限维连续的 Hilbert 空间中, 平移变换的形式是酉变换 (以下令 $\hbar = 1$)

$$U(\boldsymbol{a}) = e^{-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{P}}. \tag{3}$$

对于位置算子 $\boldsymbol{R}$ 的本征向量 $|\boldsymbol{r}\rangle$, 空间平移变换表现为

$$|\boldsymbol{r}\rangle \longrightarrow |\boldsymbol{r}'\rangle = e^{-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{P}}|\boldsymbol{r}\rangle = |\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}\rangle .$$

写在 ket 符号里的量, $\boldsymbol{r}$ 和 $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}$, 实际上是空间位置算子 $\boldsymbol{R}$ 的本征值. 这就是说, 空间平移变换把对应于本征值 $\boldsymbol{r}$ 的本征向量 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 变换为对应于本征值 $\boldsymbol{r}+\boldsymbol{a}$ 的本征向量.

再来看空间位置算子经历的变换. 我们不能仿照 (2) 式直接给出

$$\cancel{\boldsymbol{R} \longrightarrow \boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} + \boldsymbol{a}} \tag{4}$$

下面我们通过两种办法分析 $\boldsymbol{R}$ 的变换结果.

第一种办法. 如果我们知道动量算子和位置算子的对易关系, 那么可以直接计算

$$\boldsymbol{R} \longrightarrow \boldsymbol{R}' = e^{-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{P}}\boldsymbol{R}e^{i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{P}}. \tag{5}$$

例如, 考虑上式的 x 分量形式, 有

$$X' = e^{-ia_xP_x}Xe^{-ia_xP_x}$$

$$= X + (-ia_x)[P_x, X] + \frac{1}{2!}(-ia_x)^2[P_x, [P_x, X]] \cdots$$

$$= X - a_x \mathbb{1}.$$

这里 $\mathbb{1}$ 表示恒等变换算子. 于是, $\boldsymbol{R}'$ 的形式是

$$\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} - \boldsymbol{a}\mathbb{1}. \tag{6}$$

显然不同于 (4) 式的错误结果.

第二种办法. 如果我们不知道 $\boldsymbol{P}$ 与 $\boldsymbol{R}$ 的对易关系, 那么我们需要用到如下两个事实或条件,

- $\boldsymbol{R}$ 的本征向量 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 在空间平移变换下的形式 (3) 式.
- $\boldsymbol{R}$ 的本征值在空间平移变换下是不变的, 即

$$\boldsymbol{R}' |\boldsymbol{r}'\rangle = \boldsymbol{r} |\boldsymbol{r}'\rangle .$$

这里, $\boldsymbol{R}'$ 的形式是未知的, 但是 $\boldsymbol{r}'$ 却是知道的, 即 $|\boldsymbol{r}'\rangle = |\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}\rangle$.

$$\boldsymbol{R}' |\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}\rangle = \boldsymbol{r} |\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}\rangle .$$

于是问题变为, 怎样的函数形式的向量算子 $\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{R})$ 能够满足上式? 可以直接看出

$$(\boldsymbol{R} - \boldsymbol{a}\mathbb{1}) |\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}\rangle = (\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}) |\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}\rangle - \boldsymbol{a} |\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}\rangle = \boldsymbol{r} |\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}\rangle .$$

也就是说

$$\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} - \boldsymbol{a}\mathbb{1}.$$

空间旋转变换　先考虑简单的情形, 绕 z 轴旋转角度 ϕ,

$$\boldsymbol{r} \longrightarrow \boldsymbol{r}' = R(z, \phi)\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{r}.$$

在无穷小变换 $\delta\phi$ 下,

$$\boldsymbol{r} \longrightarrow \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r} + \cdots \tag{7}$$

这是 $\mathbb{R}^3$ 空间中的向量的变换. 我们要考虑的是量子态的变换, 需要写出酉变换的形式 (设 $\hbar = 1$),

$$U(z, \phi) = e^{-i\phi J_z}.$$

这里 J_z 是绕 z 的旋转变换的生成元.

下面我们希望得到不同方向上的旋转变换的生成元 (即 J_x, J_y 和 J_z) 与位置算子 R_j、与动量算子 P_j、以及它们彼此之间的对易关系.

注 在第 7 章我们讨论过轨道角动量. 类比于经典力学, 我们把轨道角动量直接写为 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{P}$. 从这个形式出发, 很容易得到对易关系 $[L_j, R_k]$, $[L_j, P_k]$ 以及 $[L_j, L_k]$. 现在希望从旋转变换生成元的角度出发给出相同的对易关系, 为此, 我们要考虑无自旋 (spinless) 的量子系统的波函数 —— 特别地, 位置算子的本征态 —— 在旋转变换下的行为. 另一方面, 对于自旋自由度, 由于缺乏经典对应, 我们将直接把得到的对易关系类比地应用于有限维 Hilbert 空间中, 即, 粒子的自旋角动量也满足相同的对易关系. 因此, 在这里的讨论中, $\boldsymbol{J} = (J_x, J_y, J_z)$ 可以理解为轨道角动量, 也可以理解为包含了自旋角动量的总角动量. 不过, 后者中的自旋角动量部分不会对粒子的空间波函数的旋转变换带来影响. □

旋转变换 $U(z, \phi)$ 作用于位置算子的本征向量 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 之后, 有

$$|\boldsymbol{r}\rangle \longrightarrow |\boldsymbol{r}'\rangle = e^{-i\phi J_z} |\boldsymbol{r}\rangle .$$

位置算子 $\boldsymbol{R}$ 经历的变换是

$$R_j \longrightarrow R'_j = e^{-i\phi J_z} R_j e^{i\phi J_z}.$$

在无穷小变换下, $\phi \to \delta\phi$,

$$R_j \to R'_j = R_j - i\delta\phi [J_z, R_j] + \cdots \tag{8}$$

我们说过, Galileo 变换不改变力学量的本征值, 于是有

$$R'_j |\boldsymbol{r}'\rangle = r_j |\boldsymbol{r}'\rangle .$$

另一方面, $|\boldsymbol{r}'\rangle$ 总是 R_j 的本征向量, 本征值是 r'_j, 在无穷小变换下, 如 (16) 式所示, $r'_j = (\boldsymbol{r} + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r})_j$, 即

$$R_j |\boldsymbol{r}'\rangle = r'_j |\boldsymbol{r}'\rangle = (\boldsymbol{r} + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r})_j |\boldsymbol{r}'\rangle . \tag{9}$$

考察上式的右端, 注意以下关系,

$$(\boldsymbol{R}' + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{R}')_j |\boldsymbol{r}'\rangle = (\boldsymbol{r} + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r})_j |\boldsymbol{r}'\rangle . \tag{10}$$

这个关系缘于此前说过的条件: 时空变换不改变力学量的本征值.

根据 (18) 和 (19), 有

$$R_j |\boldsymbol{r}'\rangle = (\boldsymbol{R}' + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{R}')_j |\boldsymbol{r}'\rangle .$$

因为 $|\boldsymbol{r}'\rangle$ 构成了 Hilbert 空间的基向量, 所以有

$$R_j = (\boldsymbol{R}' + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{R}')_j .$$

写成向量的形式,

$$\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} - \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{R}'$$

注意到上式右端第二项中虽然包含 $\boldsymbol{R}'$, 但是将 $\boldsymbol{R}'$ 在无穷小变换下展开后, 展开形式中的 $\delta\phi$ 的一阶项还要再乘以 $\delta\phi$, 这就变成了 $\delta\phi$ 的平方项, 是要舍去的. 因此只能保留 $\boldsymbol{R}$, 得到

$$\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} - \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{R} \tag{11}$$

这是绕 z 轴旋转的情况, 如果一般地, 绕 $\boldsymbol{n}$ 方向旋转, 在无穷小变换的情形下, 有

$$\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} - \delta\phi \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{R}. \tag{12}$$

将 (17) 式也推广到绕任意方向 $\boldsymbol{n}$ 的无穷小旋转变换, 有

$$R_j \to R_j' = R_j - i\delta\phi[\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{J}, R_j] \tag{13}$$

比较 (22) 和 (21) 两式, 可以得到

$$[\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{J}, \boldsymbol{R}] = -i\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{R}$$

由此可以得到 J_k 与 R_j 之间的对易关系. 对于 $\mathbb{R}^3$ 中任意某个方向 $\boldsymbol{u}$, 有

$$[\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{J}, \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{R}] = -i(\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{R}) \cdot \boldsymbol{u} = i(\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{R}$$

将方向 $\boldsymbol{u}$ 选择为 x, y 或 z 方向, 得到

$$[J_x, X] = [J_y, Y] = [J_z, Z] = 0 \tag{14}$$

$$[J_x, Y] = iZ, \quad \cdots \tag{15}$$

注 注意 (16) 和 (21) 两式, 即

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \delta\phi \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r},$$

$$\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} - \delta\phi \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{R}.$$

第一个变换关系描述的是 $\mathbb{R}^3$ 空间中的向量绕 $\boldsymbol{n}$ 方向的无穷小变换, 第二个关系描述的是位置算子在相同变换下的结果. 就像我们在讨论空间平移变换的时候说过的那样, 不能简单地类比地写出

$$\cancel{\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} + \delta\phi \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{R}}$$ □

空间旋转变换

先考虑简单的情形, 绕 z 轴旋转角度 ϕ,

$$\boldsymbol{r} \longrightarrow \boldsymbol{r}' = R(z, \phi)\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} \cos\phi & -\sin\phi & 0 \\ \sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \boldsymbol{r}.$$

在无穷小变换 $\delta\phi$ 下,

$$\boldsymbol{r} \longrightarrow \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r} + \cdots \tag{16}$$

这是 $\mathbb{R}^3$ 空间中的向量的变换. 我们要考虑的是量子态的变换, 需要写出酉变换的形式 (设 $\hbar = 1$),

$$U(z, \phi) = e^{-i\phi J_z}.$$

这里 J_z 是绕 z 的旋转变换的生成元.

下面我们希望得到不同方向上的旋转变换的生成元 (即 J_x, J_y 和 J_z) 与位置算子 R_j、与动量算子 P_j、以及它们彼此之间的对易关系.

注 在第 7 章我们讨论过轨道角动量. 类比于经典力学, 我们把轨道角动量直接写为 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{P}$. 从这个形式出发, 很容易得到对易关系 $[L_j, R_k]$, $[L_j, P_k]$ 以及 $[L_j, L_k]$. 现在希望从旋转变换生成元的角度出发给出相同的对易关系, 为此, 我们要考虑无自旋 (spinless) 的量子系统的波函数 —— 特别地, 位置算子的本征态 —— 在旋转变换下的行为. 另一方面, 对于自旋自由度, 由于缺乏经典对应, 我们将直接把得到的对易关系类比地应用于有限维 Hilbert 空间中, 即, 粒子的自旋角动量也满足相同的对易关系. 因此, 在这里的讨论中, $\boldsymbol{J} = (J_x, J_y, J_z)$ 可以理解为轨道角动量, 也可以理解为包含了自旋角动量的总角动量. 不过, 后者中的自旋角动量部分不会对粒子的空间波函数的旋转变换带来影响. □

旋转变换 $U(z, \phi)$ 作用于位置算子的本征向量 $|\boldsymbol{r}\rangle$ 之后, 有

$$|\boldsymbol{r}\rangle \longrightarrow |\boldsymbol{r}'\rangle = e^{-i\phi J_z} |\boldsymbol{r}\rangle .$$

我们要分析角动量算子与位置算子的对易关系.

位置算子 $\boldsymbol{R}$ 经历的变换是

$$R_j \longrightarrow R'_j = e^{-i\phi J_z} R_j e^{i\phi J_z}.$$

在无穷小变换下, $\phi \to \delta\phi$,

$$R_j \to R'_j = R_j - i\delta\phi [J_z, R_j] + \cdots \tag{17}$$

上式中包含了对易子 $[J_z, R_j]$. 我们还需要寻找包含这些对易子的另一个素材.

我们说过, Galileo 变换不改变力学量的本征值, 于是有

$$R'_j |\boldsymbol{r}'\rangle = r_j |\boldsymbol{r}'\rangle .$$

另一方面, $|\boldsymbol{r}'\rangle$ 总是 R_j 的本征向量, 本征值是 r'_j.

在无穷小变换下, 如 (16) 式所示, $r'_j = (\boldsymbol{r} + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r})_j$, 即

$$R_j |\boldsymbol{r}'\rangle = r'_j |\boldsymbol{r}'\rangle = (\boldsymbol{r} + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r})_j |\boldsymbol{r}'\rangle . \tag{18}$$

考察上式的右端, 注意以下关系,

$$(\boldsymbol{R}' + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{R}')_j |\boldsymbol{r}'\rangle = (\boldsymbol{r} + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{r})_j |\boldsymbol{r}'\rangle . \tag{19}$$

这个关系缘于此前说过的条件: 时空变换不改变力学量的本征值.

根据 (18) 和 (19), 有

$$R_j |\boldsymbol{r}'\rangle = (\boldsymbol{R}' + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{R}')_j |\boldsymbol{r}'\rangle .$$

因为 $|\boldsymbol{r}'\rangle$ 构成了 Hilbert 空间的基向量, 所以有

$$R_j = (\boldsymbol{R}' + \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{R}')_j.$$

写成向量的形式,

$$\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} - \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{R}'$$

注意到上式右端第二项中虽然包含 $\boldsymbol{R}'$, 但是将 $\boldsymbol{R}'$ 在无穷小变换下展开后, 展开形式中的 $\delta\phi$ 的一阶项还要再乘以 $\delta\phi$, 这就变成了 $\delta\phi$ 的平方项, 是要舍去的. 因此只能保留 $\boldsymbol{R}$, 得到

$$\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} - \delta\phi \boldsymbol{e}_z \times \boldsymbol{R} \tag{20}$$

这是绕 z 轴旋转的情况, 如果一般地, 绕 $\boldsymbol{n}$ 方向旋转, 在无穷小变换的情形下, 有

$$\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} - \delta\phi \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{R}. \tag{21}$$

将 (17) 式也推广到绕任意方向 $\boldsymbol{n}$ 的无穷小旋转变换, 有

$$R_j \to R'_j = R_j - i\delta\phi[\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{J}, R_j] \tag{22}$$

比较 (22) 和 (21) 两式, 可以得到

$$[\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{J}, \boldsymbol{R}] = -i\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{R}$$

由此可以得到 J_k 与 R_j 之间的对易关系. 对于 $\mathbb{R}^3$ 中任意某个方向 $\boldsymbol{u}$, 有

$$[\boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{J}, \boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{R}] = -i(\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{R}) \cdot \boldsymbol{u} = i(\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{u}) \cdot \boldsymbol{R}$$

将方向 $\boldsymbol{u}$ 选择为 x, y 或 z 方向, 得到

$$[J_x, X] = [J_y, Y] = [J_z, Z] = 0 \tag{23}$$

$$[J_x, Y] = iZ, \quad \cdots \tag{24}$$

注 注意 (16) 和 (21) 两式, 即

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \delta\phi \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r},$$

$$\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} - \delta\phi \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{R}.$$

第一个变换关系描述的是 $\mathbb{R}^3$ 空间中的向量绕 $\boldsymbol{n}$ 方向的无穷小变换, 第二个关系描述的是位置算子在相同变换下的结果. 就像我们在讨论空间平移变换的时候说过的那样, 不能简单地类比地写出

$$\cancel{\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R} + \delta\phi \boldsymbol{n} \times \boldsymbol{R}}$$

□

接下去需要考虑 $\boldsymbol{J}$ 的三个分量之间 J_x, J_y 和 J_z 之间的对易关系. 我们将采用类比的办法. 先写出 $\mathbb{R}^3$ 空间中绕 x, y 和 z 的旋转变换的矩阵,

$$R(x,\theta)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta\\ 0 & \sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix},\quad R(y,\theta)=\begin{pmatrix}\cos\theta & 0 & \sin\theta\\ 0 & 1 & 0\\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta\end{pmatrix},\quad R(z,\theta)=\begin{pmatrix}\cos\theta & -\sin\theta & 0\\ \sin\theta & \cos\theta & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}.$$

分别考虑它们的无穷小变换形式, 得到相应的旋转变换的生成元,

$$G_x=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{pmatrix},\quad G_y=\begin{pmatrix}0 & 0 & i\\ 0 & 0 & 0\\ -i & 0 & 0\end{pmatrix},\quad G_z=\begin{pmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}.$$

有限大小的旋转变换可以表示为 $R(k,\theta)=e^{-i\theta G_k}$, $k=x,y,z$.

容易得到生成元之间的对易关系

$$[G_x,G_y]=iG_z,\ \cdots$$

我们把这个关系以类比的形式直接推广到角动量 $\boldsymbol{J}$ 的分量上,

$$[J_x,J_y]=iJ_z,\quad [J_y,J_z]=iJ_x,\quad [J_z,J_x]=iJ_y. \tag{25}$$

或者以简洁的形式表示为

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=i\hbar\boldsymbol{J}. \tag{26}$$

这里我们添上了常数 $\hbar$.

最后, 为了得到 $\boldsymbol{J}$ 的分量与动量 $\boldsymbol{P}$ 的分量之间的对易关系, 需要考虑平移和旋转两种变换的组合, 并设法构造出对易子 $[J_x,P_y]$. 在 Hilbert 空间中绕着 x 轴的无穷小旋转变换表示为 $e^{-i\epsilon J_x}$, 沿着 y 轴的无穷小平移变换可以表示为 $e^{-i\epsilon P_y}$, 这里暂时令 $\hbar=1$. 先旋转, 再平移, 保留到 ϵ 的平方项, 有

$$e^{-i\epsilon P_y}\,e^{-i\epsilon J_x}=\mathbb{1}-i\epsilon(P_y+J_x)-\epsilon^2\left(\frac{1}{2}P_y^2+\frac{1}{2}J_x^2+P_yJ_x\right)$$

再考虑 $e^{i\epsilon P_y}\,e^{i\epsilon J_x}$, 保留到 ϵ^2 项, 有

$$e^{i\epsilon P_y}\,e^{i\epsilon J_x}=\mathbb{1}+i\epsilon(P_y+J_x)-\epsilon^2\left(\frac{1}{2}P_y^2+\frac{1}{2}J_x^2+P_yJ_x\right)$$

将上面的两个结果相乘,

$$e^{i\epsilon P_y}\,e^{i\epsilon J_x}e^{-i\epsilon P_y}\,e^{-i\epsilon J_x}=\mathbb{1}+\epsilon^2[J_x,P_y] \tag{27}$$

再考虑位置坐标的改变, 下面计算保留到 ϵ 的二次项.

$$\begin{aligned}(x,y,z)&\longrightarrow(x,y\cos\epsilon-z\sin\epsilon,y\sin\epsilon+z\cos\epsilon)\\ &\longrightarrow(x,y\cos\epsilon-z\sin\epsilon+\epsilon,y\sin\epsilon+z\cos\epsilon)\\ &\longrightarrow(x,y+\epsilon\cos\epsilon,z-\epsilon\sin\epsilon)\end{aligned}$$

$$\longrightarrow (x, y + \epsilon\cos\epsilon - \epsilon, z - \epsilon\sin\epsilon)$$

$$\longrightarrow (x, y, z - \epsilon^2)$$

其中最后一步是 ϵ 的二级近似的结果. 上式意味着, 最终的变换效果是沿 $-z$ 方向平移 ϵ^2. 而这个操作在 Hilbert 空间中的表示是 $e^{i\epsilon^2 P_z} = \mathbb{1} + i\epsilon^2 2P_z + \cdots$. 再与 (27) 式比较, 得到

$$[J_x, P_y] = iP_z$$

最终有

$$[J_j, P_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}P_l.$$

实际上, 以前得到的角动量与位置的对易关系也可以通过上述过程得到.

至此, 我们通过分析空间旋转变换得到了角动量与位置算子和动量算子的对易关系.

角动量的本征值和本征向量

角动量的分量之间的对易关系 (26) 是一个特定的 Lie 代数形式, 它是角动量理论的基础, 我们可以根据这些对易关系获得角动量的本征值和本征向量.

首先注意到 $J^2 = \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{J}$ 是一个标量算子.

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2.$$

可以验证

$$[J^2, J_k] = 0, \quad k = x, y, z.$$

或者写为

$$[J^2, \boldsymbol{J}] = 0.$$

我们选择(J^2, J_z) 作为彼此对易的力学量的集合. 它们的共同本征向量记作 $|\beta, m\rangle$.

$$J^2|\beta, m\rangle = \beta\hbar^2|\beta, m\rangle, \quad J_z|\beta, m\rangle = m\hbar|\beta, m\rangle.$$

这里, β 和 m 都是无量纲的实数. 下面我们来分析 β, m =?

最容易确定的是 m 的上下限. 注意到 J_k^2 都是半正定算子,

$$\langle\beta, m|J_x^2|\beta, m\rangle + \langle\beta, m|J_y^2|\beta, m\rangle + \langle\beta, m|J_z^2|\beta, m\rangle = \beta\hbar^2 \geqslant m^2\hbar^2.$$

上面的不等号来自于仅考虑左端的最后一项. 于是有, 对于给定的 β,

$$m^2 \leqslant \beta. \tag{28}$$

再引入升降算子 $J_\pm$,

$$J_+ = J_x + iJ_y, \quad J_- = J_x - iJ_y.$$

有如下性质

$$J_+^\dagger = J_-, \quad J_-^\dagger = J_+,$$

$$[J_z, J_+] = \hbar J_+, \quad [J_z, J_-] = -\hbar J_,$$

$$[J_+, J_-] = 2\hbar J_z.$$

即, J_z, J_+ 和 J_- 构成封闭的对易关系. 而且, 直接计算可以给出

$$J_- J_+ = J^2 - J_z^2 - \hbar J_z, \quad J_+ J_- = J^2 - J_z^2 + \hbar J_z. \tag{29}$$

分析 J_+ 对 $|\beta, m\rangle$ 的作用效果.

$$\begin{aligned} J_z(J_+ |\beta, m\rangle) &= (J_+ J_z + \hbar J_+) |\beta, m\rangle \\ &= m\hbar(J_+ |\beta, m\rangle) + \hbar(J_+ |\beta, m\rangle) \\ &= (m+1)\hbar(J_+ |\beta, m\rangle). \end{aligned}$$

这表明: $J_+ |\beta, m\rangle$ 是 J_z 的本征向量, 相应的本征值是 $(m+1)\hbar$, 或者 $J_+ |\beta, m\rangle = 0$.

又知道, 当 β 一定的时候, m 有上限, 记作 j. 这意谓着

$$J_+ |\beta, j\rangle = 0.$$

为了得到 β 和 j 之间的关系, 利用 (29) 式.

$$J_- J_+ |\beta, j\rangle = (\beta\hbar^2 - j^2\hbar^2 - j\hbar^2) |\beta, j\rangle = 0.$$

由此得到

$$\beta = j(j+1). \tag{30}$$

再考虑用降算子 J_- 作用于 $|\beta, m\rangle$, 可以发现, $J_- |\beta, m\rangle$ 也是 J_z 的本征向量, 相应的本征值是 $(m-1)\hbar$. 当 m 减小达到下限 k 的时候, 有

$$J_- |\beta, k\rangle = 0.$$

再次利用 (29),

$$0 = J_+ J_- |\beta, k\rangle = \hbar^2(\beta^2 - k^2 + k) |\beta, k\rangle .$$

于是有

$$\beta = k(k-1). \tag{31}$$

从 (30) 和 (31) 两式, 有

$$\beta = j(j+1) = k(k-1) \implies k = -j.$$

从此以后, 将 β 写为 $j(j+1)$, 而 m 的取值范围是 $-j \leqslant m \leqslant j$.

因为 m 的上下限是可以达到的, 而且 m 的取值的个数是整数, 所以 $2j$ 必须是一个整数, 或者说, j 是整数或半整数. 对于固定的 j, 粒子数 m 有 $2j+1$ 个取值.

将 (J^2, J_z) 的共同本征态记作 $|j,m\rangle$,

$$J^2 |j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j,m\rangle, \quad J_z |j,m\rangle = m\hbar |j,m\rangle. \tag{32}$$

将前面得到的 $J_\pm |j,m\rangle$ 归一化.

$$\begin{aligned} J_+ |j,m\rangle &= c_+ |j,m+1\rangle, \\ \langle j,m| J_+^\dagger J_+ |j,m\rangle &= \langle j,m| J_- J_+ |j,m\rangle \\ &= \langle j,m| (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z) |j,m\rangle \\ &= j(j+1)\hbar^2 - m^2\hbar^2 - m\hbar^2 = |c_+|^2. \end{aligned}$$

将 c_+ 选为正的实数,

$$c_+ = \hbar[j(j+1) - m(m+1)]^{1/2}. \tag{33}$$

类似地, $J_- |j,m\rangle = c_- |j,m-1\rangle$,

$$c_- = \hbar[j(j+1) - m(m-1)]^{1/2}. \tag{34}$$

至此, $\{|j,m\rangle\}$ 构成了无限维 Hilbert 空间的基向量, 满足正交归一完备关系,

$$\langle j',m'|j,m\rangle = \delta_{j,j'}\delta_{m,m'}, \quad \sum_{j,m} |j,m\rangle\langle j,m| = \mathbb{1}. \tag{35}$$

利用升降算子, 可以写出 $\boldsymbol{J}$ 的各分量的矩阵形式.

首先, 因为 $|j,m\rangle$ 是 J_z 的本征向量, 所以 J_z 的矩阵形式一定是对角矩阵,

$$\langle j',m'| J_z |j,m\rangle = m\hbar\,\delta_{j,j'}\delta_{m,m'}.$$

具体地,

$$J_z = \begin{pmatrix} \boxed{0} & & & \\ & \boxed{\begin{matrix} \frac{1}{2} & \\ & -\frac{1}{2} \end{matrix}} & & \\ & & \boxed{\begin{matrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & -1 \end{matrix}} & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \hbar \tag{36}$$

从左上到右下, 对角线上的每一个块依次对应于 $j=0$, $j=\frac{1}{2}$, $j=1,\cdots$. 在每一个块中, 用 m 的降序取值来标记行和列. 例如, 在 $j=\frac{1}{2}$ 这个块中, 第一行和第二行分别对应于 $m'=\frac{1}{2}$ 和 $m'=-\frac{1}{2}$, 第一列和第二列分别对应于 $m=\frac{1}{2}$ 和 $m=-\frac{1}{2}$.

继续考虑 J_x 和 J_y 的矩阵形式. 注意 $[J^2, \boldsymbol{J}]=0$, 有

$$\begin{aligned}
&\langle j', m'|\, J^2 \boldsymbol{J}\,|j, m\rangle = \langle j', m'|\, \boldsymbol{J} J^2\,|j, m\rangle,\\
&j'(j'+1)\hbar^2 \langle j', m'|\, \boldsymbol{J}\,|j, m\rangle = j(j+1)\hbar^2 \langle j', m'|\, \boldsymbol{J}\,|j, m\rangle,\\
&\text{如果 } j\neq j', \text{那么, 上式成立} \Longrightarrow \langle j', m'|\, \boldsymbol{J}\,|j, m\rangle = 0.
\end{aligned} \tag{37}$$

这表明, J_k 的矩阵形式一定是块对角的 (block-diagonal).

为了有更清楚的直观图像, 我们把 J_k 的矩阵形式写为

$$J_k = \sum_{\substack{j',m'\\ j,m}} (J_k)^{j',m'}_{j,m}\ |j', m'\rangle\langle j, m|\,.$$

即, J_k 的第 (j', m') 行第 (j, m) 列的矩阵元是

$$(J_k)^{j',m'}_{j,m} = \langle j', m'|\, J_k\,|j, m\rangle\,.$$

$|j, m\rangle$ 可以视作 $|j\rangle\otimes|m\rangle$, 当然, 这里的 m 不是完全独立的, 它的取值取决于 j.

$$|j', m'\rangle\langle j, m| = |j'\rangle\langle j|\otimes|m'\rangle\langle m|$$

于是 $|j'\rangle\langle j|$ 标记了 “大” 矩阵中的块.

$$\begin{pmatrix}
\boxed{j'=j=0} & \boxed{j'=0, j=\frac{1}{2}} & \boxed{j'=0, j=1} & \cdots\\
\boxed{j'=\frac{1}{2}, j=0} & \boxed{j'=j=\frac{1}{2}} & \boxed{j'=\frac{1}{2}, j=1} & \cdots\\
\boxed{j'=1, j=0} & \boxed{j'=1, j=\frac{1}{2}} & \boxed{j'=j=1} & \cdots\\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{pmatrix}$$

因此, (37) 说的是, 在 J_k 的矩阵形式中, 非对角块中的矩阵元一律为零.

升降算子 $J_\pm$ 的矩阵元易于求出.

$$\frac{J_+}{\hbar} =$$

		$j=0$	$\frac{1}{2}$		1			$\frac{3}{2}$			
		$m=0$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	0	-1	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$
$j'=0$	$m'=0$	0									
$j'=\frac{1}{2}$	$m'=\frac{1}{2}$		0	1							
	$m'=-\frac{1}{2}$		0	0							
$j'=1$	$m'=1$				0	$\sqrt{2}$	0				
	$m'=0$				0	0	$\sqrt{2}$				
	$m'=-1$				0	0	0				
$j'=\frac{3}{2}$	$m'=\frac{3}{2}$							0	$\sqrt{3}$	0	0
	$m'=\frac{1}{2}$							0	0	$\sqrt{4}$	0
	$m'=-\frac{1}{2}$							0	0	0	$\sqrt{3}$
	$m'=-\frac{3}{2}$							0	0	0	0

$J_- = J_+^\dagger$, 矩阵形式亦可得. 而 $J_x = \frac{1}{2}(J_+ + J_-)$, $J_y = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-)$, 所以 J_x 和 J_y 也是容易写出的.

以上分析得到的对角块的结构告诉我们, 整个 Hilbert 空间是一系列的以 j 标记的子空间的直和.

$$\mathscr{H} = \bigoplus_j \mathscr{H}_j. \tag{38}$$

$\mathscr{H}_0$ 空间 描述角动量为零的量子系统.

$\mathscr{H}_{1/2}$ 空间 描述自旋为 1/2 的量子系统, 还可以更一般地描述所有的两能级系统, 或者说双值系统.

$\mathscr{H}_1$ 空间 描述角动量为 1 的量子系统. 可以是自旋角动量, 也可以是轨道角动量.

第八章　角动量 Ⅱ

自旋角动量

自旋角动量 $\boldsymbol{S}$, 在 z 方向上的分量 S_z, 它们的共同本征函数记作 $|s, m_s\rangle$, 其中 s 的取值是整数或半奇数, 当 s 给定时, m_s 的取值是 $s, s-1, \cdots, -s$.

$$S^2 |s, m_s\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s, m_s\rangle, \quad S_z |s, m_s\rangle = m_s \hbar |s, m_s\rangle .$$

下面, 我们以自旋角动量为例, 讨论量子力学中力学量的 “值” 的问题.

自旋 $1/2$

当 $s = \frac{1}{2}$ 时,

$$S^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 \mathbb{1},$$

$$S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{1}{4}\hbar^2 \mathbb{1},$$

$$\left[S_j^2, S_k^2\right] = 0, \quad j, k = x, y, z.$$

S_x^2, S_y^2, S_z^2 彼此对易, 如果我们说, 它们可以同时取值 $\frac{1}{4}\hbar^2$, 那么看不出任何矛盾.

自旋 1

当 $s = 1$ 时,

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1}$$

$S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ 的本征值是 $2\hbar^2$.

S_x^2, S_y^2, S_z^2 彼此对易, 它们的本征值都是 0 和 $\hbar^2$.

如果我们希望给 S_k^2 赋值, 那么可以说: S_x^2, S_y^2, S_z^2 中有两个取值 $\hbar^2$, 剩下一个取值 0, 三者总和是 $2\hbar^2$. 在这个说法中, 我们不能确定到底是哪两个自旋角动量分量的平方取值 1, 哪一个取值 0.

相比于自旋 1/2 的情形, 确定性有所减弱.

自旋 $3/2$

当 $s = \frac{3}{2}$ 时,

$$S_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad S_x = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar \operatorname{diag}\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right).$$

S^2 的本征值是 $\frac{15}{4}\hbar^2$.

S_x^2, S_y^2, S_z^2 不再彼此对易, 它们的本征值都是 $\frac{9}{4}\hbar^2$ 和 $\frac{1}{4}\hbar^2$.

因此, S_x^2, S_y^2, S_z^2 不可能在相同的实验环境中进行测量, 当然也就不可能同时具有确定的值.

而且, 不论以何种方式将 S_k^2 的本征值 $\left\{\frac{9}{4}\hbar^2, \frac{1}{4}\hbar^2\right\}$ 进行组合相加, 都不能得到 S^2 的本征值 $\frac{15}{4}\hbar^2$.

以上叙述简单直观, 但是涉及对量子力学基本理论的认识和理解. 在面, 我们讨论与此有关的互文性问题.

互文性 (Contextuality)

如果我们将经典力学的约定俗成观点带入量子力学中, 就会产生各种各样的矛盾.

在经典力学中, 力学量的值代表了力学量的性质或属性, 它具有本体论意义上的客观实在性.

但是, 在量子力学中, 具有客观意义的 “值” 指的是具体而真实的测量结果. 来自经典力学的成见诱使我们将观测到的结果归属于力学量本身所具有的性质. 因此就有这样的问题: 量子力学中的力学量是否具有真实而确定的值?

直接回答这个问题是很困难的, 于是以间接的方式提问: 如果量子力学中的力学量具有真实而确定的值, 那么将导致什么结果?

我们不能在量子理论的形式系统中 (或者说在微观层面上) 讨论这个问题. 所谓的 “结果” 只能是宏观的经典层面上观测到的现象. 于是分析过程中的每一步都应该具有操作意义.

在前面的讨论中我们看到, 对于自旋 3/2 的粒子, 它在 x, y, z 方向上的自旋角动量的分量的平方不能彼此对易, 不能在相同的观测过程中对它们进行测量, 因而它们的本征值的相加就不具有操作意义 (更何况相加后也不能得到 S^2 的本征值). 这对应于我们常说的一句话: 不对易的力学量不能同时具有确定的值. 进而涉及不确定关系、互补性原理之类的问题.

既然两个不对易的力学量不能同时测量 (更好的说法是 jointly measurable, 或者 comeasurable), 那么就索性放弃为两个不对易的力学量同时赋值. 转而考虑一个弱化的、但是在操作上可行的问题: 彼此对易的力学量能否同时具有确定值? 由于彼此对易, 我们可以在相同的实验过程中对它们进行观测, 这个问题本身是一个定义得很好的 (well-defined) 的问题.

同样地, 我们以间接的方式审视这个问题: 如果彼此对易的力学量可以同时具有确定的值, 那么会怎么样?

具体地说, 设存在一组彼此对易的观测量的集合, 记作

$$\left\{O, O_1', O_1'', \cdots\right\}$$

我们把这样一组力学量称为与 O 有关的一个文本 (context). 我们可以在相同的实验条件下测量这些力学量, 并得到 O 的测量值, 记作 o_1.

再假设还存在一组彼此对易的观测量,

$$\left\{O, O_2', O_2'', \cdots\right\}$$

即存在另一组与 O 有关的文本. 一般地说, 这两组中的观测量是不能够完全对易的, 例如 O_1' 与 O_2' 可以不对易. 对于后一组力学量的测量需要不同于前者的实验条件. 将 O 在后一种测量中得到的值记作 o_2, 那么 o_1 等于 o_2 么?

从经典力学的客观实在性的角度看, 或者说从隐变量的观点来看, 我们应该认为 $o_1 = o_2$. 因为观测量的测量结果是被隐变量完全决定的, 不应该依赖于其它观测量的测量结果, 也不会依赖于测量仪器的设置.

这种孤立的与它者无关的行为称为**非互文的** (Non-contextual).

在经典力学中, 没有对易或不对易的力学量, 也没有相容的或不相容的测量方式之类的问题. 而在量子力学中, 不对易的力学量或不相容的测量方式涉及量子理论的基本问题.

为了将量子理论与经典的客观实在性进行比较, 我们固然可以说, 如果 A 和 B 不对易, 那么它们不能以相同的方式进行测量, 不能同时为它们赋以确定的值, 从而不能有来自经典力学的类比. 但是, 如前所述, 我们还是有必要考虑弱化的、也是更微妙的说法: 某个力学量处于不同的文本中, 它可以具有相同的不变的值么?

下面, 先来考虑力学量的期望值.

简并情形下的 Born 规则

考虑整体希尔伯特空间 $\mathscr{H}$ 中的一个两维子空间 $\mathscr{G} \subset \mathscr{H}$, 它的基向量是 $|\varsigma_1\rangle$ 和 $|\varsigma_2\rangle$, 相应的投影算符是 $\Pi(\varsigma_i) = |\varsigma_i\rangle\langle\varsigma_i|$, $i = 1, 2$.

子空间 $\mathscr{G}$ 上的投影算符是 $\Pi_{\mathscr{G}} = |\varsigma_1\rangle\langle\varsigma_1| + |\varsigma_2\rangle\langle\varsigma_2|$.

投影算子 $\Pi_{\mathscr{G}}$ 不依赖于子空间 $\mathscr{G}$ 的基向量的选择.

虽然我们定义 $\Pi_{\mathscr{G}} = |\varsigma_1\rangle\langle\varsigma_1| + |\varsigma_2\rangle\langle\varsigma_2|$, 但是, 也可以选择其它形式的基向量, 例如, 令

$$|\psi_1\rangle = c_1 |\varsigma_1\rangle + c_2 |\varsigma_2\rangle , \quad |\psi_2\rangle = -c_2^* |\varsigma_1\rangle + c_1^* |\varsigma_2\rangle$$

这里 $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, 显然 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 也是 $\mathscr{G}$ 的基向量, 并且

$$\begin{aligned} & |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2| \\ =& (c_1 |\varsigma_1\rangle + c_2 |\varsigma_2\rangle)(c_1^* \langle\varsigma_1| + c_2^* \langle\varsigma_2|) + (-c_2^* |\varsigma_1\rangle + c_1^* |\varsigma_2\rangle)(-c_2 \langle\varsigma_1| + c_1 \langle\varsigma_2|) \\ =& |\varsigma_1\rangle\langle\varsigma_1| + |\varsigma_2\rangle\langle\varsigma_2| = \Pi_{\mathscr{G}} \end{aligned}$$

我们在讨论简并情形下的量子测量假设的时候说到, 当被测力学量的某一个本征值是简并的时候, 观测到该本征值的几率不依赖于简并子空间的基向量的选择, 这个几率可以表示为简并子空间上的投影算符在相应量子态中的期望值. 与这里的讨论比较, 可以看到, 它们在数学的本质上是完全一致的.

接着我们来考虑这其中涉及的物理意义. 选择 $\mathscr{G}$ 的基向量就是选择不同的表象, 从物理意义上说, 选择不同的表象就是选择不同的测量环境, 而不同的测量环境却是不相容的.

例如在 SG 实验中, $SG(z)$ 装置和 $SG(x)$ 装置是完全不同的实验设置, 不同的装置关注不同的被测力学量, 不对易的力学量 (例如 σ_z 和 σ_x) 是不相容的.

在 von Neumann 关于不存在无弥散量子态的证明中, 使用了不对易的力学量的和的期望值等于各自的期望值的和这一数学上正确但是物理上存疑的说法. 现在我们把这个在物理上可能存疑的说法换一种形式再叙述一遍.

选择子空间 $\mathscr{G} \subset \mathscr{H}$ 的基向量为 $|\varsigma_1\rangle$ 和 $|\varsigma_2\rangle$, 这个表象记作 ς-表象, 相应的 $\mathscr{G}$ 上的投影算符表示为 $\Pi_{\mathscr{G}}^{\varsigma} = |\varsigma_1\rangle\langle\varsigma_1| + |\varsigma_2\rangle\langle\varsigma_2|$, 这里我们添加了上标 ς, 表明这个投影算符是在 ς-表象中的形式.

如果选择子空间 $\mathscr{G} \subset \mathscr{H}$ 的基向量为 $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$, 就是选择了 ψ-表象, 投影算符记作 $\Pi_{\mathscr{G}}^{\psi} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$.

前面已经证明了, 在数学上 $\Pi_{\mathscr{G}}^{\varsigma} = \Pi_{\mathscr{G}}^{\psi}$. 但是在物理上, 它们却不是等价的. 然后, 我们问的问题是: 如果它们不是等价的, 那么将会带来什么样的物理效应? 换句话说, 我们要通过怎样的物理过程来检验 $\Pi_{\mathscr{G}}^{\varsigma} = \Pi_{\mathscr{G}}^{\psi}$?

考虑自旋为 1 的粒子. 自旋角动量在 x, y, z 方向上的分量是

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

以后我们令 $\hbar = 1$. 描述自旋 1 粒子的希尔伯特空间是 $\mathbb{C}^3$, 将它的基向量选择为 S_z 的本征向量, 即

$$|z_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

它们对应的 S_z 的本征值分别为 $+1$, 0, -1. 基向量 (3) 实际上是 $\mathbb{C}^3$ 的自然基向量.

再考虑另一个力学量, 令 $X = S_x^2 - S_y^2$, 它的矩阵是

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4}$$

而且 $X^2 = (S_x^2 - S_y^2)^2 = S_z^2$. 力学量 X 的本征向量是

$$|x_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |x_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |x_-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

相应的本征值分别是 $+1$, 0, -1. 于是 $\mathbb{C}^3$ 空间有了两组不同的基向量, 也就有了两种不同的表象, 记作 Z-表象和 X-表象,

$$Z\text{-表象}: \quad \{|z_+\rangle, |z_-\rangle, |z_0\rangle\},$$

$$X\text{-表象}: \quad \{|x_+\rangle, |x_-\rangle, |x_0\rangle\}$$

两组基向量中共同的一个是 $|z_0\rangle = |x_0\rangle$, 将它们记作 $|0\rangle$. 相应地, 我们有两组投影算符

$$\Pi_{z_+} = |z_+\rangle\langle z_+|, \quad \Pi_{z_-} = |z_-\rangle\langle z_-|, \quad \Pi_0 = |0\rangle\langle 0|$$

$$\Pi_{x_+} = |x_+\rangle\langle x_+|, \quad \Pi_{x_-} = |x_-\rangle\langle x_-|, \quad \Pi_0 = |0\rangle\langle 0|$$

与 $|0\rangle$ 正交的两维子空间是我们关注的对象, 同样地记作 $\mathscr{G}$.

$\mathscr{G}$ 的基向量可以是 $|z_\pm\rangle$, 也可以是 $|x_\pm\rangle$.

下面我们考虑两个实验过程. 一个是在 Z-表象中进行的, 另一个是在 X-表象中进行的, 如图 1 所示.

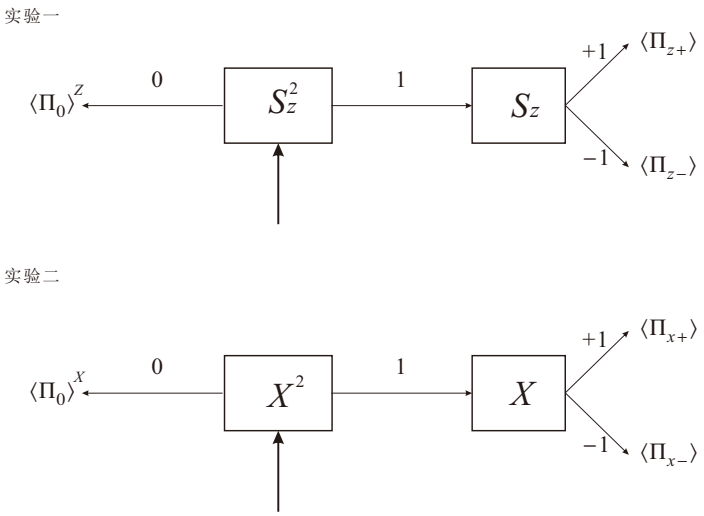


图 1: 自旋 1 粒子的两种不同设置的施特恩-格拉赫实验.

在第一个实验中, 一束自旋 1 的粒子通过一个广义的 SG 装置, 被检测的力学量是 S_z^2, 它的本征值是 0 和 +1.

出射粒子分为两束, 一束对应于本征值 0, 本征态是 $|0\rangle$; 另一束对应于本征值 1, 相应的状态应该是 $|z_+\rangle$ 和 $|z_-\rangle$ 的线性叠加. 然后, 将对应于本征值 0 处于 $|0\rangle$ 的出射粒子引向左方, 将另一束粒子引向右方. 在左方设置探测器, 记录粒子的个数, 最终获得 Π_0 的期望值, 记作 $\langle\Pi_0\rangle^Z$, 这里的上标 Z 表示在 Z-表象中的测量结果. 在右方, 让粒子进入 $SG(z)$ 装置. 这时入射粒子的量子态是 S_z^2 的本征值为 +1 的本征态, 出射后分为两束, 分别是 S_z 的本征值为 +1 和 −1 的本征态 $|z_+\rangle$ 和 $|z_-\rangle$. 对出射粒子进行测量后可以得到期望值 $\langle\Pi_{z_+}\rangle$ 和 $\langle\Pi_{z_-}\rangle$. 在理论上有 $\langle\Pi_0\rangle^Z + \langle\Pi_{z_+}\rangle + \langle\Pi_{z_-}\rangle = 1$, 或者写为

$$\langle\Pi_0\rangle^Z = 1 - \langle\Pi_{z_+}\rangle - \langle\Pi_{z_-}\rangle \tag{5}$$

在第二个实验中, 测量是对 X^2 和 X 进行的, 有类似的过程和描述, 最终有

$$\langle\Pi_0\rangle^X = 1 - \langle\Pi_{x_+}\rangle - \langle\Pi_{x_-}\rangle \tag{6}$$

这里的上标 X 表明期望值 $\langle\Pi_0\rangle$ 是在 X- 表象中得到的结果.

我们要考虑的问题是: 在两个不同的表象中, $\langle\Pi_{\mathscr{G}}^Z\rangle$ 是否等于 $\langle\Pi_{\mathscr{G}}^X\rangle$? 表现在实验结果上就是, $\langle\Pi_{z_+}\rangle + \langle\Pi_{z_-}\rangle$ 能否等于 $\langle\Pi_{x_+}\rangle + \langle\Pi_{x_-}\rangle$? 根据 (5) 和 (6) 两式, 问题被转述为, 两个实验中左方的观测结果 $\langle\Pi_0\rangle^Z$ 和 $\langle\Pi_0\rangle^X$ 会有所不同么?

注意到 $S_z^2 = X^2$, 因此两个实验过程中的第一步实际上是相同的. 在此之后, 向左和向右的粒子可以相隔任意远. 右方的实验者安排了不同的检测装置, $SG(z)$ 和 $SG(X)$, 而左方的观测者无从知晓右方实验者的具体设置. 如果在左方看到了 $\langle\Pi_0\rangle^Z \neq \langle\Pi_0\rangle^X$, 那么就可以推知右方的实验安排, 至少能够知道右方的实验装置发生了改动. 而且, 如果对 S_z^2 (或者 X^2) 的检测装置距离右方实验者更

远, 并且粒子的运动速度足够慢, 那么左方的探测器将提前有所响应, 观测者甚至可以提前知道右方的实验装置. 这将违反基本的因果律. 因此, $\langle \Pi^Z_{\mathscr{g}} \rangle$ 应该等于 $\langle \Pi^X_{\mathscr{g}} \rangle$, 这不仅仅是一个数学的结果, 而且是基本物理定律的要求, 即信号不能超光速传递.

上述讨论的结果似乎表现出非互文性. 我们把投影算符视作观测量, 于是有这样两组观测量的集合,

$$\text{集合 I}: \qquad \Pi_{z_+} \quad \Pi_{z_-}, \quad \Pi_0$$

$$\text{集合 II}: \qquad \Pi_{x_+}, \quad \Pi_{x_-}, \quad \Pi_0$$

Π_0 是两组观测量中共同的一个. 我们看到, Π_0 的期望值不依赖于与此对易的 (或者说相容的) 其它观测量的测量, 即不依赖于具体的实验环境. 但是, 需要注意的是, 互文性问题中关注的是, 观测量 $\hat{O}$ 是否具有非互文的值, 而不是期望值. 在下面的讨论中将看到, 在量子力学中观测量**不具有非互文的值**.

Kochen-Specker 定理　自旋 1 粒子, 不依赖于具体的量子态

1967 年, Kochen 和 Specker 分析了自旋为 1 的量子系统的隐变量问题, 得到的结论是, 自旋 1 粒子的自旋角动量不能具有非互文的确定的值, 这个结论后来被称为 KS 定理. KS 定理的证明中用到了自旋为 1 的粒子的自旋角动量的性质以及隐变量模型为自旋角动量在某个方向上的分量的平方 S_k^2 赋值的时候应该满足的条件, 通过不断构造 $\mathbb{R}^3$ 空间中的直角坐标架, 并在相应的方向上为角动量的平方赋值, 最终得到了自相矛盾的结果. KS 的原始证明中用到了 117 个方向, 在叙述上略显繁琐. 下面我们讨论 Asher Peres 的证明, 仅用到 33 个方向, 参看 [1].

回顾一下自旋 1 的角动量的性质. 考虑一个自旋为 1 的粒子. 自旋角动量 $\boldsymbol{S}$ 的三个分量的矩阵形式已经由 (1) 式给出, 依然设 $\hbar = 1$, 我们知道

$$S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = 2\mathbb{1}$$

这里的 $\mathbb{1}$ 是 3×3 的单位矩阵. 这个关系对于三维实空间 $\mathbb{R}^3$ 上任意一组直角坐标架都是成立的. 设三个单位向量 $\boldsymbol{n}_1, \boldsymbol{n}_2, \boldsymbol{n}_3$ 构成了 $\mathbb{R}^3$ 的一个直角坐标架, $\boldsymbol{S}$ 在这些单位向量上的分量分别是 S_{n_1}, S_{n_2}, S_{n_3} 那么有

$$S_{n_1}^2 + S_{n_2}^2 + S_{n_3}^2 = 2\mathbb{1} \tag{7}$$

对于任意两个彼此垂直的方向上的自旋角动量的分量, 它们的平方形式是对易的, 即

$$\left[S_{n_i}^2, S_{n_j}^2\right] = 0, \quad i, j = 1, 2, 3 \tag{8}$$

另外, $S_{n_i}^2$ 的本征值为 0 和 $+1$.

如果用经典的观点看待力学量 $S^2_{n_i}$, 那么就会有这样的描述: 力学量 $S^2_{n_i}$ 具有确定的值 0 或者 +1, 记作

$$v(S^2_{n_i}) = 0, 1 \tag{9}$$

而且, 三个 $v(S^2_{n_i})$ 应该满足如下关系

$$v(S^2_{n_1}) + v(S^2_{n_2}) + v(S^2_{n_3}) = 2 \tag{10}$$

$$\text{三个 } v(S^2_{n_i}) \text{ 中任意两个不能同时为零} \tag{11}$$

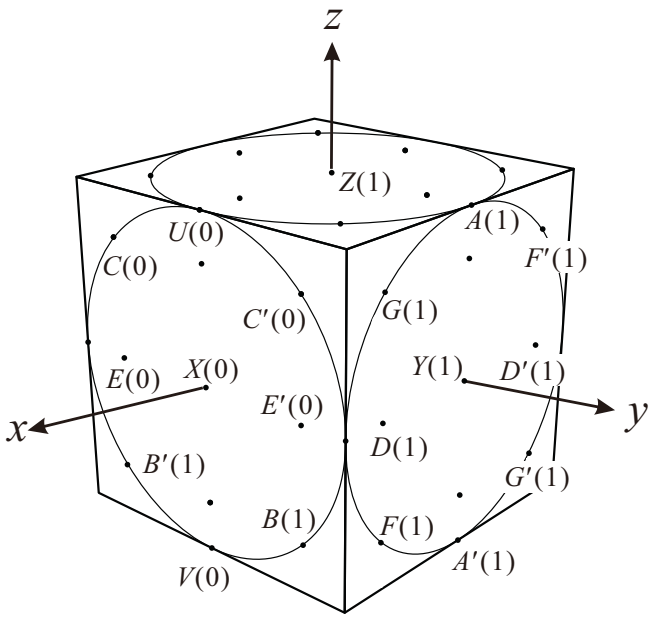


图 2: 图中的圆点表示 $\mathbb{R}^3$ 中的 33 个方向. 括号中的 0 和 1 表示隐变量模型为相应方向上自旋角动量平方的可能的赋值. 注意 U 和 V 表示的两个方向是垂直的, 但是赋值的结果却是 $v(S^2_U) = v(S^2_V) = 0$, 违反了隐变量模型应该遵守的条件 (11).

在图 2 中用圆点标记了 $\mathbb{R}^3$ 中的 33 个方向. 图中的立方体的边长为 2, 下面给出一部分点的坐标.

$$X : (1, 0, 0), \quad Y : (0, 1, 0), \quad Z : (0, 0, 1)$$

$$A : (0, 1, 1), \quad B : (1, \tfrac{1}{\sqrt{2}}, -\tfrac{1}{\sqrt{2}}), \quad C : (1, -\tfrac{1}{\sqrt{2}}, \tfrac{1}{\sqrt{2}})$$

$$D : (\tfrac{1}{\sqrt{2}}, 1, 0), \quad E : (1, -\tfrac{1}{\sqrt{2}}, 0), \quad F : (\tfrac{1}{\sqrt{2}}, 1, -\tfrac{1}{\sqrt{2}})$$

其它点的坐标也容易写出. 这些点代表的向量也用同样的字母表示, 例如 A 同时也表示向量 $(0, 1, 1)$. 为了能有直观形象的表示, 向量不作归一化的处理. 因此 S_A 的意思就是自旋角动量 $\boldsymbol{S}$ 在 A 对应的方向上的分量.

接着分析隐变量模型的赋值过程. 由于 XYZ 构成了直角坐标架, 可以设 $v(S_X^2)=0$, $v(S_Y^2)=v(S_Z^2)=1$, 将这个赋值简写为 $X(0)Y(1)Z(1)$, 图中有相应的的标记. 接着注意到 X 和 A 是垂直的, $v(S_X^2)$ 和 $v(S_A^2)$ 不能同时为零, 故有 $v(S_A^2)=1$, 这个推导关系记作 $X(0)A(1)$. 于是, 我们用这样的标记写下整个推导过程,

$$\begin{gathered}
X(0)Y(1)Z(1)\quad X(0)A(1)\quad X(0)A'(1)\\
A(1)B(1)C(0)\quad A'(1)B'(1)C'(0)\\
C(0)D(1)\quad C'(0)D'(1)\\
Z(1)D(1)E(0)\quad Z(1)D'(1)E'(0)\\
E(0)F(1)\quad E(0)G(1)\quad E'(0)F'(1)\quad E'(0)G'(1)\\
F(1)F'(1)U(0)\quad G(1)G'(1)V(0)
\end{gathered}\tag{12}$$

$$U(0)V(0)\tag{13}$$

最后一步是矛盾所在. 因为 U 和 V 是垂直的, 故根据 (11), 值 $v(S_U^2)$ 和 $v(S_V^2)$ 不能同时为零, 但是上述赋值过程却给出了自相矛盾的结果, 由此说明非互文的隐变量模型是不成立的.

有两点需要说明.

① 在推导过程的第二步, 即 (12) 式, 也可以采用 $A(1)B(0)C(1)$, $A'(1)B'(0)C'(1)$ 的赋值方式, 接下去的过程会有所不同, 但同样能得到矛盾的结果.

② 虽然看起来在推导过程中并没有用到所有 33 个向量, 但是那些没用到的向量依然是作为不可或缺的. 这是因为, 在赋值的第一步有多种选择, 我们可以如前所述选择 $X(0)Y(1)Z(1)$, 可以选择 $X(1)Y(0)Z(1)$, 也可以选择 $A(0)B(1)C(1)$, 如此等等. 不同的赋值过程将用到不同的向量组合.

自旋 1 粒子, 依赖于具体的量子态

现在考虑 $\mathbb{R}^3$ 中五个单位向量 $\boldsymbol{k}_j$ $(j=1,\cdots,5)$, 它们满足如下正交关系 (如图 3 所示),

$$\boldsymbol{k}_1\perp\boldsymbol{k}_2,\quad \boldsymbol{k}_2\perp\boldsymbol{k}_3,\quad \boldsymbol{k}_3\perp\boldsymbol{k}_4,\quad \boldsymbol{k}_4\perp\boldsymbol{k}_5,\quad \boldsymbol{k}_5\perp\boldsymbol{k}_1\tag{14}$$

可以简单地记作 $\boldsymbol{k}_j\perp\boldsymbol{k}_{j+1}$, 并且当 $j+1$ 等于 6 时视作 1. 显然 $[S_{k_j}^2,S_{k_{j+1}}^2]=0$. 按照经典的观点, 即性质 (9) 至 (11), 我们可以得到下面的不等式

$$v\big(S_{k_1}^2\big)+v\big(S_{k_2}^2\big)+v\big(S_{k_3}^2\big)+v\big(S_{k_4}^2\big)+v\big(S_{k_5}^2\big)\geqslant 3\tag{15}$$

这个不等式表明 $\sum_{j=1}^5 v\big(S_{k_j}^2\big)$ 的最小值是 3, 可以直接验证. 不等式左端每一项的可能的取值为 0 或 1, 为了求其最小值, 就希望有尽可能多的项取值 0. 例如, 令 $v\big(S_{k_1}^2\big)=0$. 由于 $\boldsymbol{k}_1\perp\boldsymbol{k}_2$, $\boldsymbol{k}_5\perp\boldsymbol{k}_1$,

则根据性质 (11), $v\big(S^2_{k_2}\big)$ 和 $v\big(S^2_{k_5}\big)$ 不能为零, 故 $v\big(S^2_{k_2}\big)=v\big(S^2_{k_5}\big)=1$. 再注意到 $\boldsymbol{k}_3\perp\boldsymbol{k}_4$, 故 $v\big(S^2_{k_3}\big)$ 和 $v\big(S^2_{k_4}\big)$ 不能同时为零, 可以令其中任何一个为零, 另一个等于 1. 因此, 五项相加的结果等于 3. 考虑所有其它情况, 容易看出 3 是最小值.

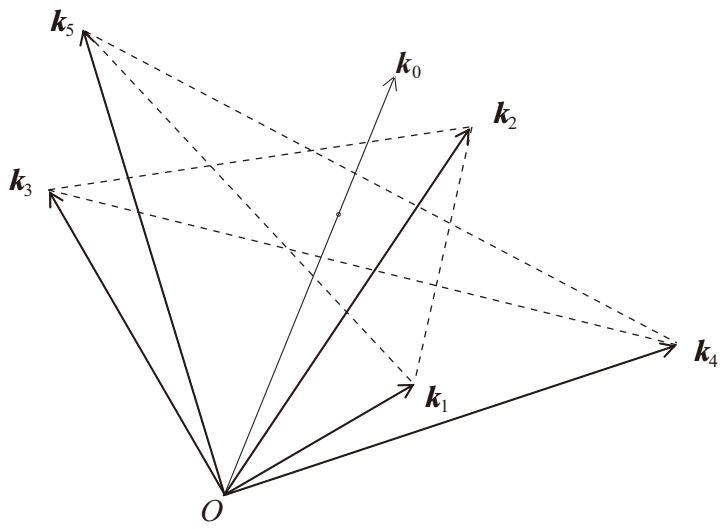


图 3: $\mathbb{R}^3$ 空间中的五个方向矢量, 满足两两正交的关系 (14) 式. 方向 $\boldsymbol{k}_0$ 穿过五角星的中心.

式 (15) 是根据经典观点得到的结论, 更确切地说, 是非互文的隐变量模型给出的预言. 根据非互文的隐变量模型, 隐变量 λ 的某个固定的取值决定了所有力学量的观测结果, 在这里就是 0 或者 1, 而且, 对于某个观测量 (比如 $S^2_{k_1}$) 而言, 观测结果不依赖于与 $S^2_{k_1}$ 对易的力学量 $\hat{S}^2_{k_2}$ 和 $\hat{S}^2_{k_5}$ 的观测结果. 进一步考虑隐变量 λ 的所有可能的取值, 就要在隐变量空间 Λ 上对 (15) 式积分, 得到隐变量模型给出的期望值, 显然, 积分后的结果依然满足相同的不等式, 即

$$\big\langle v\big(S^2_{k_1}\big)\big\rangle+\big\langle v\big(S^2_{k_2}\big)\big\rangle+\big\langle v\big(S^2_{k_3}\big)\big\rangle+\big\langle v\big(S^2_{k_4}\big)\big\rangle+\big\langle v\big(S^2_{k_5}\big)\big\rangle\geqslant 3 \tag{16}$$

接下去的问题是, 在特定的量子态 $|\psi\rangle$ 中, 量子力学关于 $\sum_{j=1}^5\big\langle S^2_{k_j}\big\rangle_\psi$ 的预言结果是多少? 这里 $\big\langle S^2_{k_j}\big\rangle_\psi=\big\langle\psi\big|S^2_{k_j}\big|\psi\big\rangle$. 量子力学给出的结果能否满足不等式 (16)? 为了考虑这个问题, 需要分析 $S^2_{k_j}$ 的一些性质.

对于 $\mathbb{R}^3$ 中的某个任意的方向 $\boldsymbol{n}=(\sin\theta\cos\varphi,\sin\theta\sin\varphi,\cos\theta)$, 自旋角动量的分量 $\hat{S}_n$ 的矩阵是

$$S_n=\begin{pmatrix}\cos\theta & \frac{e^{-i\phi}\sin\theta}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{e^{i\phi}\sin\theta}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{e^{-i\phi}\sin\theta}{\sqrt{2}}\\ 0 & \frac{e^{i\phi}\sin\theta}{\sqrt{2}} & -\cos\theta\end{pmatrix} \tag{17}$$

S_n 的本征值和本征向量是

$$\text{本征值 }+1,\quad \text{本征向量 }\big|n^{(+)}\big\rangle=\begin{pmatrix}e^{-i2\varphi}\cos^2\frac{\theta}{2}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\varphi}\sin\theta\\ \sin^2\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \tag{18}$$

$$\text{本征值 } -1, \quad \text{本征向量 } \left|n^{(-)}\right\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i2\varphi}\sin^2\frac{\theta}{2} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i\varphi}\sin\theta \\ \cos^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{19}$$

$$\text{本征值 } 0, \quad \text{本征向量 } \left|n^{(0)}\right\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i2\varphi}\sin\theta \\ e^{-i\varphi}\cos\theta \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \end{pmatrix} \tag{20}$$

直接计算可以验证下面的等式,

$$S_n^2 + \left|n^{(0)}\right\rangle\left\langle n^{(0)}\right| = \mathbb{1} \tag{21}$$

即, S_n^2 可以表示为 $\mathbb{1} - |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}|$. 类似地, 五个 $S_{k_j}^2$ 可以表示为 $\mathbb{1} - |k_j^{(0)}\rangle\langle k_j^{(0)}|$, 其中 $|k_j^{(0)}\rangle$ 是 S_{k_j} 的本征值为 0 的本征向量. 因此, 对于给定的 $|\psi\rangle$, 有

$$\sum_{j=1}^{5}\left\langle S_{k_j}^2\right\rangle_\psi = 5 - \sum_{j=1}^{5}\left|\left\langle\psi\middle|k_j^{(0)}\right\rangle\right|^2$$

将方向矢量 $\boldsymbol{k}_j$ 写为 $\boldsymbol{k}_j = (\sin\theta_j\cos\varphi_j, \sin\theta_j\sin\varphi_j, \cos\theta_j)$, 则 $|k_j^{(0)}\rangle$ 是

$$|k_j^{(0)}\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-i2\varphi_j}\sin\theta_j \\ e^{-i\varphi_j}\cos\theta_j \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta_j \end{pmatrix}$$

如果 $|\psi\rangle$ 是某个 S_n 的本征值为 0 的本征向量, 即 (20), 那么计算后发现

$$\left|\left\langle\psi\middle|k_j^{(0)}\right\rangle\right|^2 = \left|\left\langle n^{(0)}\middle|k_j^{(0)}\right\rangle\right|^2 = \left[\cos\theta\cos\theta_j + \cos(\varphi-\varphi_j)\sin\theta\sin\theta_j\right]^2 = (\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{k}_j)^2$$

最后的结果被表示为 $\mathbb{R}^3$ 空间中方向矢量的内积的平方[1].

现在, 选择方向 $\boldsymbol{n}$ 为 $\boldsymbol{k}_0$, 方向 $\boldsymbol{k}_0$ 穿过五个 $\boldsymbol{k}_j$ 构成的五角星的中心. 相应的 $|\psi\rangle$ 就是 $|k_0^{(0)}\rangle$. 简单的几何关系表明, 对于所有的 $j = 1, \cdots, 5$, $(\boldsymbol{k_0}\cdot\boldsymbol{k}_j)^2 = \frac{1}{\sqrt{5}}$. 因此我们得到, 当 $|\psi\rangle = |k_0^{(0)}\rangle$ 时

$$\sum_{j=1}^{5}\left\langle S_j^2\right\rangle_\psi = 5 - \sqrt{5} \approx 2.764 < 3 \tag{22}$$

与 (16) 比较, 可以看到, 量子力学给出的结果违反非互文性隐变量模型设定的条件, 两种理论是矛盾的.

References

[1] Mermin, N. D. *Rev. Mod. Phys.* **65**, 803–815 (1993).

[1]可以用更简捷的计算. 把 $\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$, $\hat{S}_z$ 分别表示为 $\hat{S}_x = \hbar\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix}$, $\hat{S}_y = \hbar\begin{pmatrix}0&0&i\\0&0&0\\-i&0&0\end{pmatrix}$, $\hat{S}_z = \hbar\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix}$, 则 $\boldsymbol{n}$ 方向上的分量 $\hat{S}_n$ 的本征值为零的本征向量在形式上直接对应于 $\boldsymbol{n}$.

第八章　角动量 III

两个自旋 1/2 粒子, 态无关 [1]

对于两个自旋 1/2 的粒子 A 和 B, 考虑如下 9 个算符.

$$\begin{array}{lll} \sigma_x^A \otimes \mathbb{1}^B & \mathbb{1}^A \otimes \sigma_x^B & \sigma_x^A \otimes \sigma_x^B \\ \mathbb{1}^A \otimes \sigma_y^B & \sigma_y^A \otimes \mathbb{1}^B & \sigma_y^A \otimes \sigma_y^B \\ \sigma_x^A \otimes \sigma_y^B & \sigma_y^A \otimes \sigma_x^B & \sigma_z^A \otimes \sigma_z^B \end{array} \tag{1}$$

每一行或者每一列的 3 个算符是彼此对易的, 第三列的三个算符相乘的结果是 $-\mathbb{1}^A \otimes \mathbb{1}^B$, 除此以外, 每一行或者每一列的三个算符相乘的结果是 $\mathbb{1}^A \otimes \mathbb{1}^B$.

现在尝试用隐变量模型解释上述事实. 从隐变量理论看来, 每一个力学量 $\sigma_x^{A(B)}$ 或者 $\sigma_y^{A(B)}$ 都具有确定的值 —— 由隐变量决定的不依赖于测量环境的值. 把这些值记作 $v(\sigma_x^{A(B)})$ 或者 $v(\sigma_y^{A(B)})$. 进一步地, 对于形如 $\sigma_x^A\sigma_x^B$ 之类的联合观测量, 隐变量理论认为, 联合观测量的值等于定域观测量的值的乘积, 例如

$$v(\sigma_x^A\sigma_x^A) = v(\sigma_x^A)v(\sigma_x^B)$$

逐行考察 (1) 式, 隐变量模型需要解释每一行的观测量的相乘结果为 $\mathbb{1}^A \otimes \mathbb{1}^B$ 这一事实. 对于第一行和第二行, 可以用隐变量模型很轻松地写出

$$v(\sigma_x^A)\, v(\sigma_x^B)\, v(\sigma_x^A\sigma_x^B) = v(\sigma_x^A)\, v(\sigma_x^B)\, v(\sigma_x^A)\, v(\sigma_x^B) = \left[v(\sigma_x^A)\right]^2\left[v(\sigma_x^B)\right]^2 = 1$$

$$v(\sigma_y^B)\, v(\sigma_y^A)\, v(\sigma_y^A\sigma_y^B) = v(\sigma_y^B)\, v(\sigma_y^A)\, v(\sigma_y^A)\, v(\sigma_y^B) = \left[v(\sigma_y^A)\right]^2\left[v(\sigma_y^B)\right]^2 = 1$$

因此仅从这两行来看, 量子力学和隐变量模型没有冲突.

对第三行, 应该有

$$v(\sigma_x^A\sigma_y^B)\, v(\sigma_y^A\sigma_x^B)\, v(\sigma_z^A\sigma_z^B) = v(\sigma_x^A)v(\sigma_y^B)\, v(\sigma_y^A)v(\sigma_x^B)\, v(\sigma_z^A\sigma_z^B) = 1 \tag{2}$$

类似地, 如果逐列考察 (1) 式, 那么第一列和第二列不能体现量子力学和隐变量模型的矛盾.

对于第三列的力学量, 根据量子理论得到的结果是, 它们相乘的结果为 $-\mathbb{1}^A \otimes \mathbb{1}^B$, 因此, 隐变量模型应该给出

$$v(\sigma_x^A\sigma_x^B)\, v(\sigma_y^A\sigma_y^B)\, v(\sigma_z^A\sigma_z^B) = v(\sigma_x^A)v(\sigma_x^B)\, v(\sigma_y^A)v(\sigma_y^B)\, v(\sigma_z^A\sigma_z^B) = -1 \tag{3}$$

比较 (2) 和 (3), 看到明显的矛盾.

有一点需要注意, 在上面的推导中, 我们没有对 $v(\sigma_z^A\sigma_z^B)$ 进行分解.

两个自旋 1/2 粒子, 态有关 [2]

两个自旋 1/2 粒子 A 和 B 构成了 $2\otimes 2$ 两体量子系统. 描述 A 和 B 的希尔伯特空间分别是 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$. 两个粒子分别有观测量 A 和 B, 它们的本征向量分别是 $|0^A\rangle$, $|1^A\rangle$ 和 $|0^B\rangle$, $|1^B\rangle$, 相应的本征值为 $+1$ 和 -1, 即

$$A\,|0^A\rangle = |0^A\rangle\,,\quad A\,|1^A\rangle = -\,|1^A\rangle$$

$$B\,|0^B\rangle = |0^B\rangle\,,\quad B\,|1^B\rangle = -\,|1^B\rangle$$

实际上 A 和 B 就是泡利算符 σ_z. 设整体的量子态是

$$|\Psi\rangle = \sqrt{ab}\,|0^A\rangle\,|1^B\rangle + \sqrt{ab}\,|1^A\rangle\,|0^B\rangle + (a-b)\,|1^A\rangle\,|1^B\rangle \tag{4}$$

这里设 a 和 b 均为正实数, 且 $a>b$, 归一化条件要求 $a^2+b^2=1$. 注意到 $|\Psi\rangle$ 中不包含 $|0\rangle\,|0\rangle$ 项.

再考虑 A 和 B 的另一组观测量, A' 和 B', 它们的本征方程是

$$A'\,|\alpha_0\rangle = |\alpha_0\rangle\,,\quad A'\,|\alpha_1\rangle = -\,|\alpha_1\rangle$$

$$B'\,|\beta_0\rangle = |\beta_0\rangle\,,\quad B'\,|\beta_1\rangle = -\,|\beta_1\rangle$$

其中 $|\alpha_0\rangle\,,|\alpha_1\rangle$ 和 $|\beta_0\rangle\,,|\beta_1\rangle$ 是

$$|\alpha_0\rangle = c\,|0^A\rangle + d\,|1^A\rangle\,,\quad |\alpha_1\rangle = -d\,|0^A\rangle + c\,|1^A\rangle$$

$$|\beta_0\rangle = c\,|0^B\rangle + d\,|1^B\rangle\,,\quad |\beta_1\rangle = -d\,|0^B\rangle + c\,|1^B\rangle$$

这里

$$c = \frac{\sqrt{ab}}{\sqrt{1-ab}},\quad d = \frac{a-b}{\sqrt{1-ab}}$$

通过选择 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 的不同的基向量, $|\Psi\rangle$ 可以写成不同的形式. 令 $f=\frac{1-ab}{a-b}$, 我们有

$$|\Psi\rangle = f\big[\,|\alpha_0\rangle\,(c\,|0^B\rangle + d\,|1^B\rangle) - c^2(c\,|\alpha_0\rangle - d\,|\alpha_1\rangle)\,|0^B\rangle\,\big] \tag{5}$$

$$|\Psi\rangle = f\big[(c\,|0^A\rangle + d\,|1^A\rangle)\,|\beta_0\rangle - c^2\,|0^A\rangle\,(c\,|\beta_0\rangle - d\,|\beta_1\rangle)\big] \tag{6}$$

$$|\Psi\rangle = f\big[\,|\alpha_0\rangle\,|\beta_0\rangle - c^2(c\,|\alpha_0\rangle - d\,|\alpha_1\rangle)(c\,|\beta_0\rangle - d\,|\beta_1\rangle)\big] \tag{7}$$

量子力学关于 $|\Psi\rangle$ 的不同形式以及不同观测量的测量结果, 有如下结论.

① 根据 (4) 式, 其中不含有 $|0^A\rangle|0^B\rangle$ 项, 所以在 $|\Psi\rangle$ 中测量联合观测量 $A\otimes B$, 不可能得到它们同为 $+1$ 的结果, 即该事件的几率为零,

$$P(A=+1, B=+1)=0$$

② 根据 (5) 式, 其中只有 $|\alpha_1\rangle|0^B\rangle$ 一项含有 $|\alpha_1\rangle$, 所以, 如果观测到 A' 的值是 -1, 则表明两体系统的态变为 $|\alpha_1\rangle|0^B\rangle$, 此时 B 应该处于 $|0^B\rangle$, 即 B 的值是 $+1$, 用条件几率表示就是

$$P(B=+1|A'=-1)=+1$$

③ 根据 (6) 式, 其中只有 $|0^A\rangle|\beta_1\rangle$ 一项含有 $|\beta_1\rangle$, 所以, 如果观测到 B' 的值是 -1, 则表明两体系统的态变为 $|0^A\rangle|\beta_1\rangle$, 此时 A 应该处于 $|0^A\rangle$, 即 A 的值是 $+1$, 用条件几率表示就是

$$P(A=+1|B'=-1)=+1$$

④ 在 $|\Psi\rangle$ 中测量联合观测量 $A'\otimes B'$, 有一定的非零的几率得到它们同为 -1 的结果. 根据 (7) 式, 这个几率等于 $|\alpha_1\rangle|\beta_1\rangle$ 的系数的模的平方, 即

$$P(A'=-1, B'=-1)=f^2c^4d^4\neq 0 \tag{8}$$

现在看看隐变量模型能说些什么. 首先, 隐变量会对上面的各个观测量赋值, 将这些值记作 $v(A)$, $v(A')$, $v(B)$, $v(B')$.

❶ 对应于量子力学的结论 ①, 隐变量的说法是

$$v(A) \text{ 和 } v(B) \text{ 的值不能同时为 } +1$$

❷ 隐变量模型对结论 ② 的描述是: 如果 $v(A')=-1$, 那么 $v(B)=+1$, 用逻辑关系表示为

$$v(A')=-1 \Longrightarrow v(B)=+1$$

❸ 隐变量模型对结论 ③ 的描述是:

$$v(B')=-1 \Longrightarrow v(A)=+1$$

❹ 对于第 ④ 点, 隐变量模型的结论是: $v(A')$ 和 $v(B')$ 有一定的可能性同时为 -1.

把上述推理过程综合在一起, 可以看到, 当第 ❹ 点中的事件发生的时候, 由 ❷ 和 ❸ 可以推出 $v(A)$ 和 $v(B)$ 同时为 1, 但是这个结论与 ❶ 矛盾 (见图 1). 所以, 隐变量理论对观测量赋以确定的值的做法是不成立的. 而在量子理论中, 所谓的 "值" 只是测量结果的体现, 不具备经典意义上或者本体论意义上的实在性, 从 ① 到 ④ 的结论只是观测结果的描述 —— 而且是不同的实验环境中的结果, 因而不存在逻辑上的矛盾和抵触.

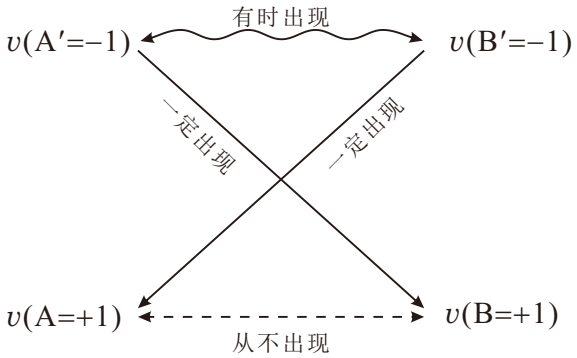


图 1: 隐变量模型中的矛盾

注意到当 (8) 式给出的几率为零的时候不会有矛盾出现. $P(A'=-1,B'=-1)=f^2c^4d^4=0$ 的条件是, a 和 b 有一个为零 (二者不能同时为零, 否则 $|\Psi\rangle=0$), 或者 $a=b\neq 0$. 当 a 和 b 有一个为零时, $|\Psi\rangle$ 是直积态, 不会表现出与隐变量模型的矛盾. 当 $a=b\neq 0$ 时, 由归一化条件 $a^2+b^2=1$ 可得, $a=b=\frac{1}{\sqrt{2}}$, 此时 $|\Psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle+|10\rangle)$, 这不是直积态, 而是最大纠缠态, 但是仍然没有表现出与隐变量模型的矛盾, 这说明, 上述过程不适用于最大纠缠态.

关于 Bell 定理和互文性问题的文献很多, 可以参看 [3–9] 其中 Physics Today 和 American Journal of Physics 上的文章比较浅显易懂.

旋转变换的具体形式

先回顾经典力学中讨论刚体运动的时候涉及到的旋转变换.

Euler 角, 经典情形　采用被动观点, 用 Euler 角描述, 如图 2 所示.

将参考系 (xyz) 进行如下变换:

进动 绕 z 转动角度 α,

$$(xyz)\xrightarrow{R(z,\alpha)}(x'y'z')$$

这里

$$R(z,\alpha)=\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

基向量的变换是

$$\begin{pmatrix}e'_x & e'_y & e'_z\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}e_x & e_y & e_z\end{pmatrix}R(z,\alpha)$$

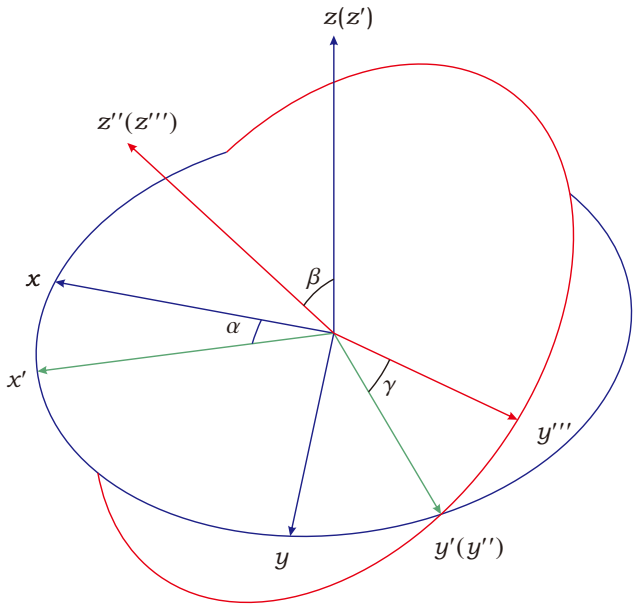


图 2

向量 $\boldsymbol{r}$ 在两个参考系中的表示之间的关系是.

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R^T(z,\alpha) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

对于下面的两个变换, 基向量和向量表示的变化与此类似, 不再详细列出.

章动 绕 y' 轴转动角度 β,

$$(x'y'z') \xrightarrow{R(y',\beta)} (x''y''z'')$$

自转 绕 z'' 轴转动角度 γ,

$$(x''y''z'') \xrightarrow{R(z'',\gamma)} (x'''y'''z''')$$

总的变换是

$$R(z'',\gamma)R(y',\beta)R(z,\alpha)$$

向量 $\boldsymbol{r}$ 在参考系 (xyz) 中的坐标和在参考系 $(x''y''z'')$ 中的坐标之间的关系是

$$\begin{pmatrix} x''' \\ y''' \\ z''' \end{pmatrix} = R^T(z'',\gamma)R^T(y',\beta)R^T(z,\alpha) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

也可以采用主动观点描述. 开始的时候, 实验室参考系 (xyz) 和刚体参考系 (XYZ) 是重合的.

- 首先, 让刚体绕 z 轴转动角度 α, 刚体参考系的 Y 轴在空间的指向记作 $\boldsymbol{n}$. 变换矩阵是 $R(z,\alpha)$.
- 然后, 让刚体绕 $\boldsymbol{n}$ 转动角度 β, 这时刚体的 Z 轴在空间的指向记作 $\boldsymbol{m}$. 变换矩阵是 $R(\boldsymbol{n},\beta)$.
- 最后, 让刚体绕 $\boldsymbol{m}$ 转动角度 γ. 变换矩阵是 $R(\boldsymbol{m},\gamma)$.

总的变换是

$$R(\alpha,\beta,\gamma)=R(\boldsymbol{m},\gamma)R(\boldsymbol{n},\beta)R(z,\alpha)$$

在 R 的形式中, 包含不容易表示的旋转变换: 绕 $\boldsymbol{n}$ 和 $\boldsymbol{m}$ 的旋转.

注意到

$$R(\boldsymbol{n},\beta)=R(z,\alpha)R(y,\beta)R^T(z,\alpha) \tag{9}$$

$$R(\boldsymbol{m},\gamma)=R(\boldsymbol{n},\beta)R(z,\gamma)R^T(\boldsymbol{n},\beta) \tag{10}$$

重新计算 $R(\alpha,\beta,\gamma)$,

$$\begin{aligned}R(\alpha,\beta,\gamma)&=R(\boldsymbol{n},\beta)R(z,\gamma)R^T(\boldsymbol{n},\beta)\ R(\boldsymbol{n},\beta)R(z,\alpha)\\&=R(\boldsymbol{n},\beta)R(z,\alpha)R(z,\gamma)\\&=R(z,\alpha)R(y,\beta)R^T(z,\alpha)\ R(z,\alpha)R(z,\gamma)\\&=R(z,\alpha)R(y,\beta)R(z,\gamma)\end{aligned}$$

最后的形式是绕固定轴旋转变换的相乘.

Euler 角, 量子情形 角动量是旋转变换的生成元, 对于在 Hilbert 空间中量子态, 绕方向 $\boldsymbol{k}$ 旋转角度 ϑ 的变换是酉算子

$$U(\boldsymbol{k},\vartheta)=e^{-i\vartheta\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{J}/\hbar}$$

采用主动观点, 用 Euler 角描述,

$$U(\alpha,\beta,\gamma)=U(\boldsymbol{m},\gamma)U(\boldsymbol{n},\beta)U(z,\alpha) \tag{11}$$

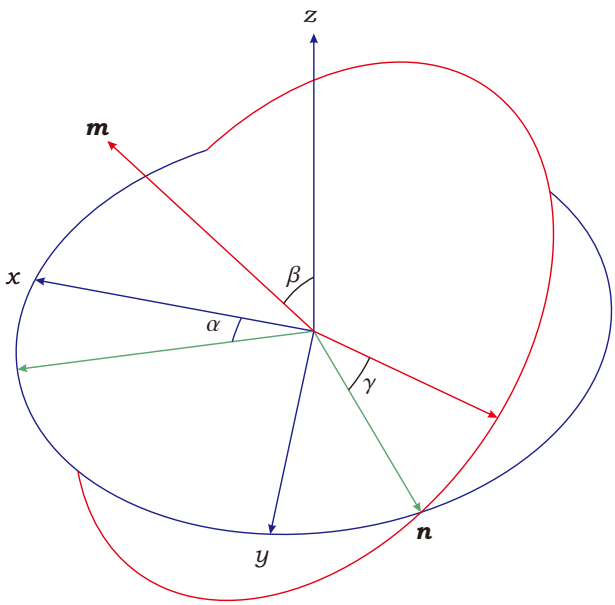


图 3

为了化简上式, 首先来证明可以与 (9) 式类比的关系,

$$U(\boldsymbol{n},\beta) = U(z,\alpha)U(y,\beta)U^{\dagger}(z,\alpha)$$

其中方向 $\boldsymbol{n}$ 是 $\boldsymbol{n} = \begin{pmatrix} -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \end{pmatrix}$.

$$U(y,\beta) = e^{-i\beta J_y/\hbar}, \quad U(z,\alpha) = e^{-i\alpha J_z/\hbar}$$

$$\begin{aligned} & U(z,\alpha)U(y,\beta)U^{\dagger}(z,\alpha) \\ =& e^{-i\alpha J_z/\hbar}\ e^{-i\beta J_y/\hbar}\ e^{i\alpha J_z/\hbar} \end{aligned}$$

将酉变换 $e^{-i\alpha J_z/\hbar}$ 作用于 J_y

$$\begin{aligned} =& \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\beta\ \left[e^{-i\alpha J_z/\hbar}\ J_y\ e^{i\alpha J_z/\hbar}\right]\right\} \\ =& \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\beta\ \left[J_y\cos\alpha - J_x\sin\alpha\right]\right\} \\ =& e^{-i\beta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}/\hbar} = U(\boldsymbol{n},\beta) \end{aligned}$$

再注意方向 $\boldsymbol{m} = \begin{pmatrix} \sin\beta\cos\alpha, & \sin\beta\sin\alpha, & \cos\beta \end{pmatrix}$, 这个方向可以从 $\boldsymbol{e}_z$ 通过如下旋转变换获得,

$$\boldsymbol{e}_z \longrightarrow \boldsymbol{m} = R(\boldsymbol{e}_z,\alpha)R(\boldsymbol{e}_y,\beta)\ \boldsymbol{e}_z$$

通过相应的酉变换可以将 z 方向上的角动量分量 J_z 变换到 $\boldsymbol{m}$ 方向上的角动量分量 J_m, 验证一下:

$$U(z,\alpha)U(y,\beta)J_zU^{\dagger}(y,\beta)U^{\dagger}(z,\alpha)$$

$$
\begin{aligned}
&= U(z,\alpha)\big[J_z\cos\beta + J_x\sin\beta\big]U^\dagger(z,\alpha) \\
&= \big[U(z,\alpha)J_zU^\dagger(z,\alpha)\big]\cos\beta + \big[U(z,\alpha)J_xU^\dagger(z,\alpha)\big]\sin\beta \\
&= J_z\cos\beta + \big(J_x\cos\alpha + J_y\sin\alpha\big)\sin\beta = J_m
\end{aligned}
$$

所以, 绕 $\boldsymbol{m}$ 的旋转变换 $U(\boldsymbol{m},\gamma)$ 可以表示为

$$
\begin{aligned}
&U(\boldsymbol{m},\gamma) = e^{-i\gamma\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{J}/\hbar} = e^{-i\gamma J_m/\hbar} \\
&= \exp\left\{-\frac{i\gamma}{\hbar}U(z,\alpha)U(y,\beta)J_zU^\dagger(y,\beta)U^\dagger(z,\alpha)\right\} \\
&\qquad \text{将酉变换 } U(z,\alpha)U(y,\beta) \text{ 及其厄密共轭移动上式的左右两边} \\
&= U(z,\alpha)U(y,\beta)\ \exp\left\{-\frac{i\gamma}{\hbar}J_z\right\}U^\dagger(y,\beta)U^\dagger(z,\alpha)
\end{aligned}
$$

现在来计算 (11),

$$
\begin{aligned}
&U(\alpha,\beta,\gamma) = U(\boldsymbol{m},\gamma)U(\boldsymbol{n},\beta)U(z,\alpha) \\
&= \underbrace{U(z,\alpha)U(y,\beta)U(z,\gamma)U^\dagger(y,\beta)U^\dagger(z,\alpha)}_{U(\boldsymbol{m},\gamma)}\ \underbrace{U(z,\alpha)U(y,\beta)U^\dagger(z,\alpha)}_{U(\boldsymbol{n},\beta)}\ U(z,\alpha)
\end{aligned}
$$

也就是

$$
U(\alpha,\beta,\gamma) = U(z,\alpha)U(y,\beta)U(z,\gamma) \tag{12}
$$

上式右端的每一个酉矩阵都是绕固定轴的旋转变换.

分析 $U(\alpha,\beta,\gamma)$ 的矩阵元, 空间的基向量是 J^2 和 J_m 的共同本征函数 $|j,m\rangle$,

$$
\langle j',m'|U(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle
$$

首先需要注意的是, 如果 $j\neq j'$, 那么矩阵元为零. 只需要考虑在子空间 $\mathscr{H}(j)$ 中的矩阵元.

$$
\begin{aligned}
D^{(j)}_{m',m} &= \langle j,m'|U(\alpha,\beta,\gamma)|j,m\rangle \\
&= \langle j,m'|e^{-i\alpha J_z/\hbar}\ e^{-i\beta J_y/\hbar}\ e^{-i\gamma J_z/\hbar}|j,m\rangle \\
&= e^{-i(\alpha m'+\gamma m)}\ d^{(j)}_{m',m}(\beta)
\end{aligned} \tag{13}
$$

其中 $d^{(j)}(\beta) = U(y,\beta) = e^{-i\beta J_y/\hbar}$.

以上过程说明, 如果用 Euler 角描述旋转变换, 那么酉矩阵的矩阵元主要是由绕 y 轴的旋转变换决定的.

References

[1] Peres, A. *J. Phys. A* **24**(20), L175–L178 (1991).

[2] Hardy, L. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1665 (1993).

[3] Mermin, N. D. *Physics Today* **43**(6), 9 (1990).

[4] Mermin, N. D. *American Journal of Physics* **58**(8), 731 August (1990).

[5] Mermin, N. D. *Physics Today* **47**(6), 9 June (1994).

[6] Cabello, A. *Phys. Rev. A* **65**, 032108 (2002).

[7] Kwiat, P. G. and Hardy, L. *American Journal of Physics* **68**(1), 33–36 (2000).

[8] Yu, S. and Oh, C. H. *Phys. Rev. Lett.* **108**, 030402 (2012).

[9] Brunner, N., Cavalcanti, D., Pironio, S., Scarani, V., and Wehner, S. *Rev. Mod. Phys.* **86**, 419 (2014).

第八章　角动量 Ⅳ

自旋 1/2　当 $j=\frac{1}{2}$ 时,

$$d^{(1/2)}(\beta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & -\sin\frac{\beta}{2}\\ \sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix}$$

虽然这是一个正交矩阵, 但不属于 SO(2) 变换.

角动量量子数为 1 的系统　当 $j=1$ 时, 我们已经知道角动量的三个分量 J_x, J_y, J_z 的具体的矩阵形式. 注意到这时有 $J_y^3=J_y$ (这里令 $\hbar=1$), 可以将 $d^{(1)}$ 表示为

$$d^{(1)}(\beta)=e^{-i\beta J_y}=\mathbb{1}-J_y^2(1-\cos\beta)-iJ_y\sin\beta$$

一般情况下的 $d^{(j)}(\beta)$ 形式, 参看 Sakurai 书中的推导.

对角动量的本征向量的旋转变换,

$$U(\alpha,\beta,\gamma)\,|j,m\rangle=\sum_{j',m'}|j',m'\rangle\langle j',m'|\,U(\alpha,\beta,\gamma)\,|j,m\rangle=\sum_{m'}|j,m'\rangle\,D^{(j)}_{m',m}(\alpha,\beta,\gamma)\tag{1}$$

对于固定的 j, 由 $\{|j,m\rangle\}$ 张开的 $2j+1$ 的子空间是一个不变子空间, 就是说, 这个子空间中的向量在旋转变换的作用下仍然留在这个子空间中. 从 (1) 中看到, 变换后不会出现其它的 j'. 而且, 它还是一个不可约的子空间, 意思是, 其中不存在更小的不变子空间.

轨道角动量

L^2 和 L_z 的共同本征向量记作 $|\ell,m\rangle$,

$$L^2\,|\ell,m\rangle=\ell(\ell+1)\hbar^2\,|\ell,m\rangle\,,\quad L_z\,|\ell,m\rangle=m\hbar\,|\ell,m\rangle$$

本征向量是正交归一化的,

$$\langle\ell',m'|\ell,m\rangle=\delta_{\ell',\ell}\delta_{m',m}$$

在位置表象中, 选用球坐标, $\langle\boldsymbol{r}|\ell,m\rangle=\langle\theta,\phi|\ell,m\rangle=Y_{\ell m}(\theta,\phi)$. 正交归一性表示为

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\sin\theta Y^*_{\ell'm'}(\theta,\phi)Y_{\ell,m}(\theta,\phi)=\delta_{\ell',\ell}\delta_{m',m}$$

现在考虑升降算子 $L_\pm = L_x \pm iL_y$. 在位置表象中,

$$L_x = -i\hbar\bigg(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\bigg)$$

$$L_y = -i\hbar\bigg(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\bigg)$$

$$L_+ = -i\hbar e^{i\phi}\bigg(i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\bigg)$$

用升算子 L_+ 作用于 $|\ell,\ell\rangle$, 结果应该为零. 在位置表象中, 有一阶偏微分方程,

$$-i\hbar e^{i\phi}\bigg(i\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\bigg)Y_{\ell,\ell}(\theta,\phi) = 0$$

可以解出

$$Y_{\ell,\ell}(\theta,\phi) = c_\ell e^{i\ell\phi}\sin^\ell\theta$$

其中

$$c_\ell = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell\ell!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}$$

这里的归一化常数中包含了 $(-1)^\ell$, 其原因是, 考虑到用降算子 L_- 作用于 $Y_{\ell,\ell}$, 将得到 $Y_{\ell,0}$, 我们希望由此得到的 $Y_{\ell,0}$ 与 Legendre 多项式 $P_\ell(\cos\theta)$ 有相同的符号.

用降算子 L_- 作用 $Y_{\ell,\ell}$ 若干次, 得到球谐函数 $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$, $-\ell \leqslant m \leqslant \ell$.

关于球谐函数的性质, 参看 Cohen 书 Complement $\mathrm{A_{VI}}$.

在上述推导过程中, 似乎没有看到为什么轨道角动量量子数 ℓ 不能为半整数. 以下事实将说明 ℓ 只能取整数.

2π 旋转　波函数的单值性意味着绕任意方向旋转 2π 角度都不会对波函数带来改变. 我们将看到, 只有当角动量量子数为整数的时候才能如此. 下面的方程反映了这一结论.

$$U(\boldsymbol{n},2\pi)\,|j,m\rangle = e^{-i2\pi\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}/\hbar}\,|j,m\rangle = (-1)^{2j}\,|j,m\rangle \tag{2}$$

这个方程说的是, 将角动量的本征态 $|j,m\rangle$ 绕任意方向 $\boldsymbol{n}$ 旋转角度 2π, 当 j 为整数时, 结果仍然是 $|j,m\rangle$; 当 j 为半整数时, 得到 $-|j,m\rangle$. 因此, 既然要求空间波函数在 2π 旋转下不变, 那么轨道角动量量子数必须为整数.

现在来证明 (2) 式. 先考虑绕 z 轴的旋转变换.

$$U(z,2\pi)\,|j,m\rangle = e^{-i2\pi J_z/\hbar} = e^{-i2\pi m}\,|j,m\rangle = (-1)^{2j}\,|j,m\rangle$$

当 j 是整数的时候, m 也是整数, 2π 的旋转变换不改变量子态; 当 j 是半整数的时候, m 也是半整数, 2π 旋转变换后量子态有了相位的改变.

这是绕 z 轴旋转 2π 的结论. 任意的某个方向 $\boldsymbol{n}$ 上角动量的分量 $J_n = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$ 可以从 J_z 经过旋转变换得到,

$$J_n = VJ_zV^\dagger$$

这里 V 的具体形式容易写出. 用球坐标的两个角度坐标 (θ,ϕ) 表示方向 $\boldsymbol{n}$. 从 $\boldsymbol{e}_z$ 到 $\boldsymbol{n}$ 的变换是

$$\boldsymbol{n} = R(z,\phi)R(y,\theta)\boldsymbol{e}_z$$

于是 V 表示为

$$V = e^{-i\phi J_z/\hbar}e^{-i\theta J_y/\hbar}$$

将 V 以超算子的身份作用于 $U(z,\phi)$, 便得到绕 $\boldsymbol{n}$ 方向旋转角度 ϕ 的变换,

$$U(\boldsymbol{n},\phi) = VU(z,\phi)V^\dagger$$

不过, 在下面的计算中我们并不需要用到 V 的具体形式, 只需要关注这样一个事实, 如果将 V 或者 $V^\dagger$ 作用于 $|j,m\rangle$, 那么变换后的结果仍然在以 j 标记的不变子空间 $\mathscr{H}_j$ 中.

不变子空间 $\mathscr{H}_j$ 中任意某个向量可以表示为 $\sum_m c_m|j,m\rangle$. 对这个向量作旋转变换 $U(z,2\pi)$, 有

$$U(z,2\pi)\sum_m c_m|j,m\rangle = \sum_m c_m U(z,2\pi)|j,m\rangle = (-1)^{2j}\sum_m c_m|j,m\rangle$$

因此, 在 $U(z,2\pi)$ 变换下 $V^\dagger|j,m\rangle$ 也满足上式.

$$U(z,2\pi)V^\dagger|j,m\rangle = (-1)^{2j}V^\dagger|j,m\rangle$$

$$VU(z,2\pi)V^\dagger|j,m\rangle = (-1)^{2j}VV^\dagger|j,m\rangle$$

$$U(\boldsymbol{n},2\pi)|j,m\rangle = (-1)^{2j}|j,m\rangle$$

这就是 (2) 式.

另一方面, 我们还可以看到, 将轨道角动量表示为 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P}$, 以 L_z 为生成元的绕 z 轴的 2π 旋转变换不会影响波函数, 即

$$\langle\boldsymbol{r}|e^{-i2\pi L_z/\hbar}|\psi\rangle = \langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle \tag{3}$$

下面通过直接计算证明 (3) 式.

先考虑绕 z 轴旋转任意角度 ϕ, 酉算子是

$$U(z,\phi) = e^{-i\phi L_z/\hbar}$$

对波函数的改变是

$$\langle x,y,z|e^{-i\phi L_z/\hbar}|\psi\rangle = \left\langle x,y,z\left|\,\mathbb{1} - \frac{i\phi}{\hbar}(XP_y - YP_x) + \cdots\right|\psi\right\rangle$$

$$= \psi(x,y,z) - \frac{i\phi}{\hbar}\left[x(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial y} - y(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\right]\psi(x,y,z) + \cdots$$

$$= \psi(x,y,z) + \left(- \phi x\frac{\partial\psi}{\partial y} + \phi y\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) + \frac{1}{2!}\left(\frac{-i\phi}{\hbar}\right)^2\left[x(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial y} - y(-i\hbar)\frac{\partial}{\partial x}\right]^2\psi(x,y,z) + \cdots$$

继续计算, 然后与

$$\psi(x\cos\phi + y\sin\phi, -x\sin\phi + y\cos\phi, z)$$

在 $\phi = 0$ 附近的展开形式比较, 发现二者是相等的, 即

$$\langle x,y,z|e^{-i\phi L_z/\hbar}|\psi\rangle = \psi(x\cos\phi + y\sin\phi, -x\sin\phi + y\cos\phi, z) \tag{4}$$

令 $\phi = 2\pi$, 有

$$\langle x,y,z|e^{-i2\pi L_z/\hbar}|\psi\rangle = \psi(x,y,z)$$

表明绕 z 轴的 2π 旋转变换没有改变波函数, 也就是说, 以 L_z 为生成元的旋转变换可以保证波函数的单值性.

$Y_{1/2,1/2}$ 是不合理的　　假设轨道角动量量子数 ℓ 和 m 可以为半整数, 例如, 设 $\ell = m = \frac{1}{2}$, 那么

$$Y_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(\theta,\phi) = c_{\frac{1}{2}}e^{i\frac{\phi}{2}}\sqrt{\sin\theta}$$

用降算子 L_- 作用, 得到

$$Y_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = L_-Y_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = -c_{-\frac{1}{2}}e^{-i\frac{\phi}{2}}\cot\theta\sqrt{\sin\theta}$$

这是不能接受的, 因为当 $\theta = 0,\pi$ 的时候, $\left|Y_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}\right| \to \infty$. 而且, 直接求解方程 $L_-\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle = 0$, 会得到另一个不同形式的 $Y_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}(\theta,\phi)$.

球谐函数与旋转变换的矩阵元之间的联系

考虑轨道角动量. 用 Euler 角表示的旋转变换操作是酉算子 $U(\alpha,\beta,\gamma)$. 在子空间 $\mathscr{H}_\ell$ 中表示为 $D^{(\ell)}$, 它的矩阵元是

$$D^{(\ell)}_{m',m} = e^{-i(\alpha m+\gamma m)}d^{(\ell)}_{m',m}(\beta)$$

球谐函数 $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$ 是轨道角动量算子 $\{L^2, L_z\}$ 的共同本征函数 $|\ell,m\rangle$ 在位置表象的球坐标中的表示. 二者之间有如下关系,

$$\boxed{Y_{\ell,m}(\theta,\phi) = c_\ell\left\{D^{(\ell)}_{m,0}(\phi,\theta,0)\right\}^*} \tag{5}$$

下面证明 (5) 式.

考虑 $U^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)$ 作用于 $|\ell,m\rangle$,

$$U^\dagger(\alpha,\beta,\gamma)\,|\ell,m\rangle = \left(D^{(\ell)}\right)^\dagger |\ell,m\rangle = \{|\ell,m'\rangle\}\ \text{的线性叠加}$$

类似于 (1) 式, 上述线性叠加形式可以表示为

$$\begin{aligned}\left(D^{(\ell)}\right)^\dagger |\ell,m\rangle &= \sum_{m'=-\ell}^{\ell} |\ell,m'\rangle\,\langle\ell,m'|\left(D^{(\ell)}\right)^\dagger|\ell,m\rangle \\ &= \sum_{m'=-\ell}^{\ell} |\ell,m'\rangle\left[\,\langle\ell,m|D^{(\ell)}|\ell,m'\rangle\,\right]^* \\ &= \sum_{m'=-\ell}^{\ell} \left(D^{(\ell)}_{m,m'}\right)^* |\ell,m'\rangle\end{aligned}$$

在位置表象中, 采用球坐标, 有

$$\left\langle\theta,\phi\,\middle|\,\left(D^{(\ell)}\right)^\dagger\,\middle|\,\ell,m\right\rangle = \left\langle\theta,\phi\,\middle|\,\sum_{m'}\left(D^{(\ell)}_{m,m'}\right)^*\,\middle|\,\ell,m'\right\rangle = \sum_{m'}\left(D^{(\ell)}_{m,m'}\right)^* Y_{\ell,m'}(\theta,\phi) \tag{6}$$

这不过是不变子空间性质的反映: 旋转变换后, $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$ 变为相同的 ℓ, 不同的 m' 的一系列球谐函数 $Y_{\ell,m'}(\theta,\phi)$ 的线性叠加.

函数 $f(x)$, 对 x 的变换是 $x \longrightarrow x' = T(x)$, 这个变换在函数 f 上的体现是

$$f \xrightarrow{\ \mathcal{T}\ } f'$$

变换 $\mathcal{T}$ 改变了函数对变量的依赖关系. 而且, 总有

$$f(x) = f'(x')$$

设坐标的变换 T 是可逆的, 于是有

$$f'(x) = f\left(\mathcal{T}^{-1}x\right)$$

前面讨论的 $\mathbb{R}^3$ 中的旋转变换 (4) 反映了这个事实. 绕 z 轴旋转角度 ϕ 的变换使坐标发生了如下改变

$$x \longrightarrow x\cos\phi - y\sin\phi, \quad y \longrightarrow x\sin\phi + z\cos\phi, \quad z \longrightarrow z$$

但是, 表现在波函数上的变化是

$$\psi(x,y,z) \longrightarrow \psi(x\cos\phi + y\sin\phi, -x\sin\phi + z\cos\phi, z)$$

现在考虑球谐函数 $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)=\langle \boldsymbol{r}|\ell,m\rangle=\langle\theta,\phi|\ell,m\rangle$. 用单位向量 $\boldsymbol{n}$ 表示角度坐标 (θ,ϕ), 即 $\boldsymbol{n}\sim(\theta,\phi)$, 球谐函数写为 $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)=\langle\boldsymbol{n}|\ell,m\rangle$. 用 $\mathcal{R}$ 表示对方向 $\boldsymbol{n}$ 的旋转变换, $\mathcal{R}\in \mathrm{SO}(3)$, $\boldsymbol{n}\to\mathcal{R}(\boldsymbol{n})$. 这个旋转变换对球谐函数带来的变化则是

$$Y_{\ell,m}(\theta,\phi)=Y_{\ell,m}(\boldsymbol{n})\longrightarrow Y_{\ell,m}\big(\mathcal{R}^{(-1)}(\boldsymbol{n})\big)=Y_{\ell,m}(\theta',\phi')$$

其中 (θ',ϕ') 是 $\mathcal{R}^{-1}(\boldsymbol{n})$ 的方位角. 或者用酉算子 $U(\mathcal{R})$ 表示,

$$Y_{\ell,m}(\theta,\phi)=\langle\theta,\phi|\ell,m\rangle=\langle\boldsymbol{n}|\ell,m\rangle\longrightarrow\langle\boldsymbol{n}|U(\mathcal{R})|\ell,m\rangle=\langle\mathcal{R}^{-1}(\boldsymbol{n})|\ell,m\rangle=\langle\theta',\phi'|\ell,m\rangle$$

回到 (6) 式. 设与 $D^{(\ell)}$ 对应的 $\mathbb{R}^3$ 中的旋转变换是 $\mathcal{R}$, 则与 $\big(D^{(\ell)}\big)^\dagger$ 对应的 $\mathbb{R}^3$ 中的旋转变换是 $\mathcal{R}^{-1}=\mathcal{R}^T$, 于是有

$$\left\langle\theta,\phi\,\middle|\,\big(D^{(\ell)}\big)^\dagger\,\middle|\,\ell,m\right\rangle=\langle\mathcal{R}(\boldsymbol{n})\,|\,\ell,m\rangle=\langle\theta',\phi'|\ell,m\rangle=Y_{\ell,m}(\theta',\phi')\tag{7}$$

其中 (θ',ϕ') 是 $\mathcal{R}(\boldsymbol{n})$ 的方位角. 因此, (6) 式改写为

$$Y_{\ell,m}(\theta',\phi')=\sum_{m'}\big(D^{(\ell)}_{m,m'}\big)^*Y_{\ell,m'}(\theta,\phi)\tag{8}$$

至此得到了球谐函数与旋转变换的矩阵元之间关系的初步形式. 接着考虑特殊的变换和特殊的初态.

选择一个特殊的变换, 令 $\beta=\gamma=0$, 只有绕 z 旋转角度 α 的变换, $\phi\to\phi+\alpha$, 而 θ 保持不变. 由 (8) 式,

$$Y_{\ell,m}(\theta,\phi+\alpha)=\sum_{m'}\big(D^{(\ell)}_{m,m'}(\alpha,0,0)\big)^*Y_{\ell,m'}(\theta,\phi)=e^{i\alpha m}Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$$

这里用到了 $D^{(j)}_{m',m}=e^{-i(\alpha m'+\gamma m)}\,d^{(j)}_{m',m}(\beta)$, 并注意到 $d^{(\ell)}_{m',m}(0)=\delta_{m',m}$.

令 $\phi=0$, 给出

$$Y_{\ell,m}(\theta,\alpha)=e^{i\alpha m}Y_{\ell,m}(\theta,0)$$

再考虑 $\theta=0$ 时的情况. $Y_{\ell,m}(0,\alpha)=e^{i\alpha m}Y_{\ell,m}(0,0)$. 注意到 $\theta=0$ 描述的是 z 方向, 因此 $Y_{\ell,m}(0,\alpha)$ 的函数形式应该与 α 无关, 否则将失去单值性. 当 $m=0$ 时, $Y_{\ell,0}(0,\alpha)=Y_{\ell,0}(0,0)$, α 对单值性没有影响. 但是当 $m\neq0$ 时, α 就有可能破坏 $Y_{\ell,m}(0,\alpha)$ 的单值性, 除非 $Y_{\ell,m}(0,0)=0$, 因此得到

$$Y_{\ell,m}(0,0)=c_\ell\delta_{m,0}\tag{9}$$

其中 c_ℓ 是一个仅仅与 ℓ 有关的常数, 回顾球谐函数的具体形式, 有

$$c_\ell=\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}$$

并且

$$Y_{\ell,m}(0,\phi) = e^{im\phi} Y_{\ell,m}(0,0) = e^{im\phi} c_\ell \delta_{m,0} \tag{10}$$

再来考虑一般形式的变换, 针对特殊的初态. 在变换 (8) 中, 令 $\theta = 0$,

$$\begin{aligned} Y_{\ell,m}(\theta',\phi') &= \sum_{m'} \big(D^{(\ell)}_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma)\big)^* Y_{\ell,m'}(0,\phi) \\ &= \sum_{m'} \big(D^{(\ell)}_{m,m'}(\alpha,\beta,\gamma)\big)^* c_\ell e^{im'\phi} \delta_{m'.0} \\ &= c_\ell \big(D^{(\ell)}_{m,0}(\alpha,\beta,\gamma)\big)^* \end{aligned}$$

当然, 这里的 θ' 和 ϕ' 不是任意的, 而是从 z 方向变换而来. 变换参数是 $\alpha = \phi'$, $\beta = \theta'$, γ 则不能确定. 但是, $D^{(\ell)}_{m,0}(\alpha,\beta,\gamma)$ 与 γ 无关, 所以不妨令 $\gamma = 0$,

$$Y_{\ell,m}(\theta,\phi) = c_\ell \big\{D^{(\ell)}_{m,0}(\phi,\theta,0)\big\}^*$$

即 (5) 式.

第八章　角动量 V

角动量的相加

角动量的相加实际上可以看作是两体量子系统中的问题.

两个量子系统 A 和 B, 自身的角动量分别是 $\boldsymbol{J}^A$ 和 $\boldsymbol{J}^B$, 整体的角动量是

$$\boldsymbol{J}^A + \boldsymbol{J}^B = \boldsymbol{J}^A \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes \boldsymbol{J}^B$$

$$\boldsymbol{J}^A \otimes \boldsymbol{J}^B$$

先分析最简单的情况, $2 \otimes 2$ 两体量子系统.

两个自旋 1/2 的粒子

Hilbert 空间 $\mathscr{H} = \mathscr{H}^A \otimes \mathscr{H}^B = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$.

总的自旋角动量及其分量

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}^A + \boldsymbol{S}^B = \boldsymbol{S}^A \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes \boldsymbol{S}^B$$

$$S_j = S_j^A + S_j^B = S_j^A \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes S_j^B, \quad j = x, y, z$$

计算 $\boldsymbol{S}$ 的各个分量之间的对易关系,

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad \boldsymbol{S} \times \boldsymbol{S} = i\hbar \boldsymbol{S}$$

对易关系表明 $\boldsymbol{S}$ 满足角动量分量的基本条件.

计算其它对易子.

$$S^2 = \left(S^A\right)^2 + \left(S^B\right)^2 + 2S_z^A S_z^B + S_+^A S_-^B + S_-^A S_+^B$$

$$[S^2, \boldsymbol{S}] = 0$$

$$\left[\left(S^A\right)^2, \boldsymbol{S}^A\right] = 0, \quad \left[\left(S^B\right)^2, \boldsymbol{S}^B\right] = 0$$

$$\left[\boldsymbol{S}, \left(S^A\right)^2\right] = \left[\boldsymbol{S}, \left(S^B\right)^2\right] = 0$$

$$\left[S^2, \left(S^A\right)^2\right] = \left[S^2, \left(S^B\right)^2\right] = 0$$

$$\left[S_z, S_z^A\right] = \left[S_z, S_z^B\right] = 0$$

不过, S^2 与 S_z^A 不对易, 与 S_z^B 也不对易.

有两种基向量的选择方式,

$$\left\{\left(S^A\right)^2,\ \left(S^B\right)^2,\ S_z^A,\ S_z^B\right\} \Longrightarrow |s_1, s_2; m_1, m_2\rangle \tag{1}$$

$$\left\{\left(S^A\right)^2,\ \left(S^B\right)^2,\ S^2,\ S_z\right\} \Longrightarrow |s_1, s_2; s, m\rangle \tag{2}$$

这里 $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$, $m_1 = \pm\frac{1}{2}$, $m_2 = \pm\frac{1}{2}$.

以上两组基向量有共同的部分, $|s_1, s_2\rangle$, 就此省去. 第一组基向量相当于我们常用的描述 $2 \otimes 2$ 系统的自然基向量

$$\left|+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle,\ \left|+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle,\ \left|-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right\rangle,\ \left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\Updownarrow$$

$$|00\rangle,\ |01\rangle,\ |10\rangle,\ |11\rangle$$

注意到 S_z 与第一组 (1) 中的四个力学量都对易, 因此 $|m_1, m_2\rangle$ 也应该是 S_z 的本征向量, 实际上

$$S_z\,|m_1, m_2\rangle = (S_z^A + S_z^B)\,|m_1, m_2\rangle = (m_1 + m_2)\hbar\,|m_1, m_2\rangle$$

所以, S_z 的本征值是

$$m = m_1 + m_2 = \begin{cases} +1, & m_1 = m_2 = \dfrac{1}{2} \\ 0, & m_1 = \dfrac{1}{2},\ m_2 = -\dfrac{1}{2} \quad \text{或者} \quad m_1 = -\dfrac{1}{2},\ m_2 = \dfrac{1}{2} \\ -1, & m_1 = m_2 = -\dfrac{1}{2} \end{cases}$$

本征值 $m = \pm 1$ 是非简并的, 本征值 $m = 0$ 有两重简并.

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

考虑 S^2 的矩阵形式.

$$S^2 = \left(S^A\right)^2 + \left(S^B\right)^2 + 2S_z^A S_z^B + S_+^A S_-^B + S_-^A S_+^B$$

在基向量 $|m_1, m_2\rangle$ 上 S^2 的矩阵是

$$S^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

继续求出 S^2 的本征值和本征向量, 并考虑到 S_z, 用 $|s, m_s\rangle$ 表示它们的共同本征向量, 有

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

$$\begin{cases} |1,1\rangle = \left| +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \\ |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right) \\ |1,-1\rangle = \left| -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{cases}$$

分别称为自旋单态 (singlet) 和三重态 (triplet), 前者对应的总的自旋角动量为 $s = 0$, 后者对应于 $s = 1$.

一般情形

考虑两体系统, 或者两个不同类型的自由度, 分别记作 A 和 B. 分别具有角动量 $\boldsymbol{J}^A$ 和 $\boldsymbol{J}^B$, 角动量量子数分别是 j_1 和j_2. 整体的角动量是

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}^A + \boldsymbol{J}^B$$

或者写为

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}^A \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes \boldsymbol{J}^B$$

其中 $\mathbb{1}^A$ 和 $\mathbb{1}^B$ 分别是 Hilbert 空间 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$ 上的单位算子.

验证角动量 $\boldsymbol{J}$ 的分量之间的一些对易关系, 例如 $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$.

将J^2 用角动量的 z 分量和升降算子表示.

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

$$J_x = J_x^A + J_x^B, \quad J_y = J_y^A + J_y^B, \quad J_z = J_z^A + J_z^B$$

$$J_x = J_x^A \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes J_x^B, \quad \cdots$$

$$J_x^2 = \left(J_x^A\right)^2 \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes \left(J_x^B\right)^2 + 2J_x^A \otimes J_x^B$$

$$J^2 = \left(J^A\right)^2 \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes \left(J^B\right)^2 + 2\sum_k J_k^A \otimes J_k^B, \quad k = x, y, z$$

用升降算子表示 x 分量和 y 分量,

$$J_x^A = \frac{1}{2}(J_+^A + J_-^A), \quad J_y^A = \frac{1}{2i}(J_+^A - J_-^A)$$

$$J_x^B = \frac{1}{2}(J_+^B + J_-^B), \quad J_y^B = \frac{1}{2i}(J_+^B - J_-^B)$$

接着有下面的关系

$$J_x^A \otimes J_x^B + J_y^A \otimes J_y^B = \frac{1}{2}(J_+^A \otimes J_-^B + J_-^A \otimes J_+^B)$$

J^2 可以表示为

$$J^2 = \left(J^A\right)^2 \otimes \mathbb{1}^B + \mathbb{1}^A \otimes \left(J^B\right)^2 + 2J_z^A \otimes J_z^B + J_+^A \otimes J_-^B + J_-^A \otimes J_+^B$$

基向量的选择

一方面,

- $|j_1, m_1\rangle$ 是 $\left(J^A\right)^2, J_z^A$ 的共同本征向量.
- $|j_2, m_2\rangle$ 是 $\left(J^B\right)^2, J_z^B$ 的共同本征向量.
- $\left(J^A\right)^2, \left(J^B\right)^2, J_z^A, J_z^B$ 构成一组对易力学量的集合. 共同本征向量是

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

另一方面,

- J^2, J_z, $\left(J^A\right)^2$, $\left(J^B\right)^2$ 彼此对易. 它们的共同本征向量

$$|j_1, j_2; j, m\rangle$$

所谓角动量的相加, 就是用 $|m_1, m_2\rangle$ 表示 $|j, m\rangle$. 两个表象之间的联系是酉变换, 这个酉变换的矩阵元就是 Clebsch-Gordan (CG) 系数.

以下将 $\hbar$ 设为 1.

首先考察 m 的取值.

$$J_z = J_z^A + J_z^B$$

$$\left\langle m_1, m_2 \middle| J_z - J_z^A - J_z^B \middle| j, m \right\rangle = 0$$

$$m\langle m_1, m_2|j, m\rangle - m_1\langle m_1, m_2|j, m\rangle - m_2\langle m_1, m_2|j, m\rangle = 0$$

$\langle m_1, m_2|j, m\rangle$ 不能为零.

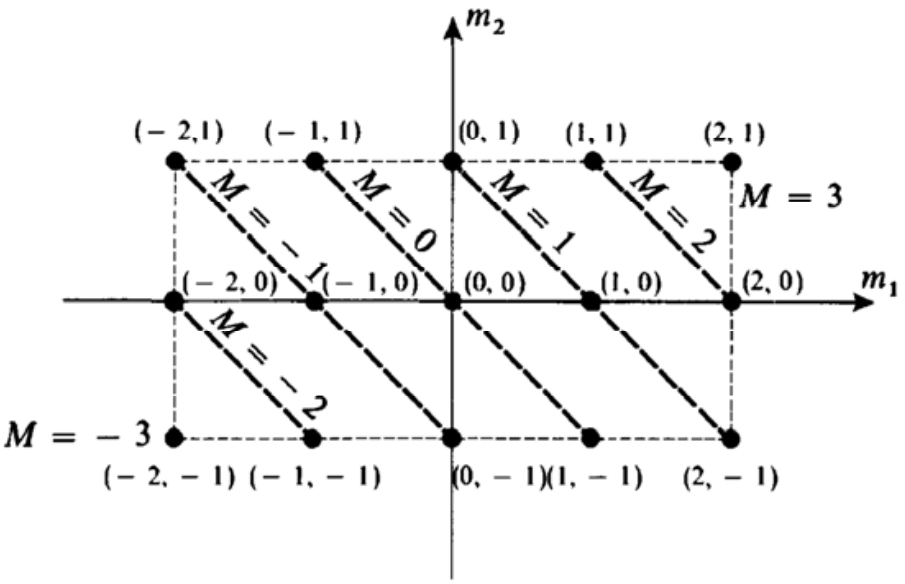
$$\therefore\ m = m_1 + m_2$$

m_1 的取值范围从 $-j_1$ 到 $+j_1$, m_2 的取值范围从 $-j_2$ 到 $+j_2$, 所以 m 的取值范围是

$$m:\quad j_1+j_2,\ j_1+j_2-1,\ j_1+j_2-2,\ \cdots,\ -(j_1+j_2)$$

同一个 m 的值可以来自不同的 m_1 和 m_2 的组合, 于是需要考虑 m 的简并度, 记作 $g_{j_1,j_2}(m)$, 在不至于混淆的情况下, 省略下标 j_1, j_2.

以 $j_1 = 2$, $j_2 = 1$ 为例.



$$g(j_1+j_2) = g(m=3) = 1$$

$$g(j_1+j_2-1) = g(m=2) = 2$$

$$g(j_1+j_2-2) = g(m=1) = 3$$

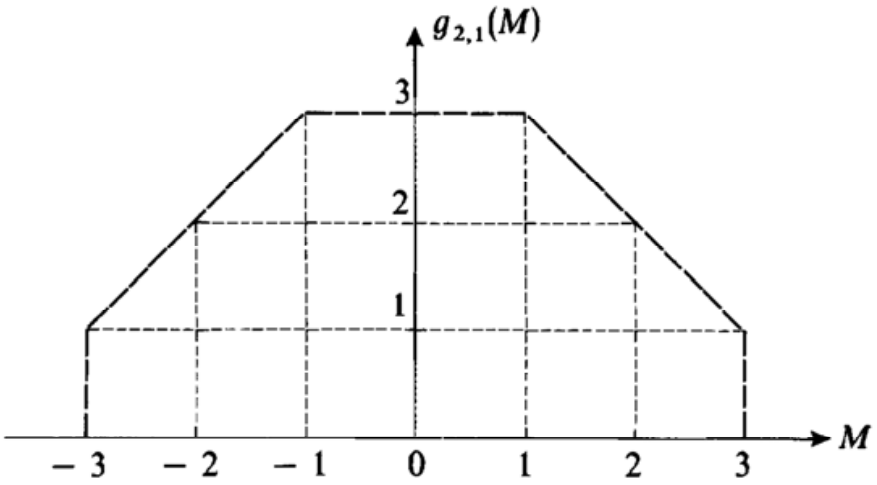
$$g(j_1+j_2-3) = g(m=0) = 3$$

$$g(j_1+j_2-4) = g(m=-1) = 3$$

$$g(-j_1-j_2+1) = g(m=-2) = 2$$

$$g(-j_1-j_2) = g(m=-3) = 1$$

$$g(m) = g(-m)$$



容易得到一般情况下的规律 (不失一般性地设 $j_1 \geqslant j_2$):

$$g(m) = \begin{cases} 0, & \text{如果 } |m| > j_1 + j_2 \\ j_1 + j_2 + 1 - |m|, & \text{如果 } j_1 + j_2 \geqslant |m| \geqslant j_1 - j_2 \\ 2j_2 + 1, & \text{如果 } j_1 - j_2 \geqslant |m| \geqslant 0 \end{cases}$$

当 $m = j_1 + j_2$ 时, 简并度为 1. 存在子空间 $\mathscr{H}(j = j_1 + j_2)$. 在这个子空间中, 有向量 $|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle$, 也有向量 $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$.

当 $m = j_1 + j_2 - 1$ 时, 简并度为 2. 所以, 需要子空间 $\mathscr{H}(j = j_1 + j_2 - 1)$. 两个子空间 $\mathscr{H}(j = j_1 + j_2)$ 和 $\mathscr{H}(j = j_1 + j_2 - 1)$ 分别提供一个向量 $|m = j_1 + j_2 - 1\rangle$, 使得它的简并度等于 2.

对于给定的某个 m, 简并度 $g(m)$ 有哪些来源? 设 $j_1 \geqslant j_2$.

一定来自于那些 $j \geqslant |m|$ 的子空间 $\mathscr{H}(j)$. 子空间 $\mathscr{H}(j)$ 有几个? 个数记作 $N(j)$.

$$g(m) = \sum_{j \geqslant |m|} N(j)$$

可以用 $g(m)$ 表示 $N(j)$,

$$g(m = j) = N(j) + N(j + 1) + N(j + 2) + \cdots$$

$$g(m = j + 1) = N(j + 1) + N(j + 2) + \cdots$$

$$\therefore\ N(j) = g(m = j) - g(m = j + 1) = g(m = -j) - g(m = -j - 1)$$

首先有

$$N(j) = 0, \quad j > j_1 + j_2$$

其次,

$$N(j_1 + j_2) = g(m = j_1 + j_2) = 1$$

接着就有

$$N(j_1+j_2-1)=g(m=j_1+j_2-1)-g(m=j_1+j_2)=1$$

一直到

$$N(j_1-j_2)=g(m=j_1-j_2)-g(m=j_1-j_2+1)=1$$

如果 j 再继续减小, $j<j_1-j_2$, 那么

$$N(j)=g(m=j)-g(m=j+1)=0,\quad \text{for } j<j_1-j_2$$

这是因为, 当 $m=j<j_1-j_2$, 或者 $m=j+1\leqslant j_1-j_2$ 时, 简并度均为 $2j_2+1$, 相减后为零.

所以, 对于给定的 j_1 和 j_2, j 的可能的取值是

$$j=j_1+j_2,j_1+j_2-1,j_1+j_2-2,\cdots,|j_1-j_2|$$

对应于每一个 j 的 Hilbert 空间 $\mathscr{H}(j)$ 只有一个.

在两种不同的表示中, 空间维数都是 $(2j_1+1)(2j_2+1)$.

至此, 有如下结论:

$$m=m_1+m_2$$

$$j=j_1+j_2,j_1+j_2-1,j_1+j_2-2,\cdots,|j_1-j_2|$$

$$\mathscr{H}(j_1,j_2)=\mathscr{H}(j_1+j_2)\oplus\mathscr{H}(j_1+j_2-1)\oplus\cdots\oplus\mathscr{H}(|j_1-j_2|)$$

其中 $\mathscr{H}(j_1,j_2)$ 可以理解为一个直积 Hilbert 空间 $\mathscr{H}(j_1)\otimes\mathscr{H}(j_2)$. $\mathscr{H}(j_1)$ 和 $\mathscr{H}(j_2)$ 分别描述两个角动量量子数为 j_1 和 j_2 的量子系统.

$\mathscr{H}(j_1)$ 和 $\mathscr{H}(j_2)$ 的维数分别是 $2j_1+1$ 和 $2j_2+1$, 但是不能等同于 $\mathbb{C}^{2j_1+1}$ 和 $\mathbb{C}^{2j_2+1}$ [1].

子空间 $\mathscr{H}(j=j_1+j_2)$ 这是 $\mathscr{H}(j_1,j_2)$ 的直和结构中的最大子空间. 在这个子空间中, 含有向量 $|j=j_1+j_2,m=j_1+j_1\rangle$, 它只出现在这个子空间中. 也就是前面讨论中说的简并度 $g(m=j_1+j_2)=1$. 当 m 取值 j_1+j_2 时, 只能对应于 (m_1,m_2) 的一种组合, 即 $m_1=m_2=\frac{1}{2}$. 所以有

$$|j_1+j_2,j_1+j_2\rangle=|j_1,j_2;j_1,j_2\rangle$$

这里, 将整体相因子选为 1.

使用降算子 J_-, 可以得到其它的 $|j_1+j_2,m\rangle$.

$$J_-\,|j_1+j_2,j_1+j_2\rangle=\sqrt{2(j_1+j_2)}\,|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle$$

[1] $\mathscr{H}(j)$ 的每一个向量都是 J^2 的本征向量, 对应的本征值是 $j(j+1)\hbar^2$, 而 $\mathbb{C}^{2j+1}$ 空间中的向量则不一定有此性质.

上式是 $|j,m\rangle$ 表象中的形式, 注意到

$$J_- = J_-^A + J_-^B, \qquad |j_1+j_2, j_1+j_2\rangle = |j_1,j_2;j_1,j_2\rangle$$

$$\begin{aligned}
|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2(j_1+j_2)}} J_- |j_1+j_2, j_1+j_2\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2(j_1+j_2)}} (J_-^A + J_-^B) |j_1+j_2, j_1+j_2\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2(j_1+j_2)}} \left[\sqrt{2j_1}\,|j_1,j_2;j_1-1,j_2\rangle + \sqrt{2j_2}\,|j_1,j_2;j_1,j_2-1\rangle\right]
\end{aligned}$$

于是有

$$|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_+j_2}}\,|j_1,j_2;j_1-1,j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_2;j_1,j_2-1\rangle \tag{3}$$

在最后的叠加形式中, 每一项的 m_1+m_2 都等于 j_1+j_2-1.

接着, 可以对 $|j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle$ 继续使用降算子, 得到 $|j_1+j_2, j_1+j_2-2\rangle$. 于是, 子空间 $\mathscr{H}(j=j_1+j_2)$ 中的 $2(j_1+j_2)+1$ 个基向量有依此类推地表示形式.

其它子空间 考虑 $\mathscr{H}(j_1+j_2-1)$, 即 $j=j_1+j_2-1$. 在这个子空间中, m 的最大值是 j_1+j_2-1.

$$|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = \alpha\,|j_1,j_2;j_1,j_2-1\rangle + \beta\,|j_1,j_2;j_1-1,j_2\rangle, \quad |\alpha|^2+|\beta|^2=1$$

应该与 (3) 正交. 将 α 和 β 设为实数, 有

$$\alpha\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} + \beta\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} = 0$$

解出 α 和 β, 有

$$|j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_2;j_1,j_2-1\rangle - \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\,|j_1,j_2;j_1-1,j_2\rangle$$

接着, 利用降算子得到 $|j=j_1+j_2-1,m\rangle$, $m=j_1+j_2-1, j_1+j_2-2, \cdots, -(j_1+j_2-1)$

对于 $\mathscr{H}(j_1+j_2-2)$, m 的最大值等于 j_1+j_2-2, 于是 $|j_1+j_2-2, j_1+j_2-2\rangle$ 是以下三个向量的叠加:

$$|j_1,j_2;j_1,j_2-2\rangle, \quad |j_1,j_2;j_1-1,j_2-1\rangle, \quad |j_1,j_2;j_1-2,j_2\rangle$$

考虑归一化, 以及与 $|j_1+j_2, j_1+j_2-2\rangle$ 和 $|j_1+j_2-1, j_1+j_2-2\rangle$ 之间的正交, 可以确定叠加形式中的系数.

CG 系数 用 $|m_1,m_2\rangle$ 表示 $|j,m\rangle$,

$$|j,m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1,j_2;m_1,m_2\rangle\,\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j,m\rangle$$

其中展开系数 $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m\rangle$ 被称为 Clebsch-Gordan 系数.

反过来的关系,

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \sum_{j=j_1-j_1}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^{j} |j, m\rangle \langle j, m | j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

所有的 CG 系数被调整设定为实数.

$$\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | j, m\rangle = \langle j, m | j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$$

$j_1 = \ell$, $j_2 = 1/2$ 相加.

$\boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$.

$\mathscr{H}(\ell, 1/2)$ 的维数是 $2(2\ell + 1)$. 基向量 $|\ell, 1/2; m_\ell, m_s\rangle$ 构成 L^2, S^2, L_z, S_z 的共同本征向量.

轨道角动量和自旋角动量相加后,

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$$

当 $\ell = 0$, 只有 $s = 1/2$.

一般情形,

$$j = \ell + \frac{1}{2}, \quad \ell - \frac{1}{2}$$

先考虑子空间 $\mathscr{H}(j = \ell + 1/2)$,

$$\left|\ell + \frac{1}{2}, \ell + \frac{1}{2}\right\rangle = \left|\ell, \frac{1}{2}; \ell, +\frac{1}{2}\right\rangle$$

应用降算子

$$\left|\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2\ell}{2\ell+1}} \left|\ell, \frac{1}{2}; \ell - 1, +\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{2\ell+1}} \left|\ell, \frac{1}{2}; \ell, -\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$\left|\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{3}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2\ell+1}} \left\{\sqrt{2\ell - 1} \left|\ell, \frac{1}{2}; \ell - 2, +\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{2} \left|\ell, \frac{1}{2}; \ell - 1, -\frac{1}{2}\right\rangle\right\}$$

$$\left|\ell + \frac{1}{2}, m\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2\ell+1}} \left\{\sqrt{\ell + m + \frac{1}{2}} \left|\ell, \frac{1}{2}; m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\ell - m + \frac{1}{2}} \left|\ell, \frac{1}{2}; m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\right\} \tag{4}$$

上式中 m 取值 $\ell + \frac{1}{2}, \ell - \frac{1}{2}, \cdots, -\ell - \frac{1}{2}$

可以采用递推方法证明上面的 (4) 式. 用降算子作用,

$$\left|\ell + \frac{1}{2}, m - 1\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{\left(\ell + m + \frac{1}{2}\right)\left(\ell - m + \frac{3}{2}\right)}} J_- \left|\ell + \frac{1}{2}, m\right\rangle$$

利用 (4) 式, 并将 J_- 写为 $J_-^A + J_-^B$

$$= \sqrt{\frac{1}{2\ell+1}} \left\{ \sqrt{\ell+m-\frac{1}{2}} \left| \ell, \frac{1}{2}; m-\frac{3}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{\ell-m+\frac{3}{2}} \left| \ell, \frac{1}{2}; m-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$$

这是将 (4) 式中的 m 改为 $m-1$ 的结果.

类似地, 对于子空间 $\mathscr{H}(j=\ell-1/2)$,

$$\left| \ell-\frac{1}{2}, \ell-\frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2\ell+1}} \left\{ \sqrt{2\ell} \left| \ell, \frac{1}{2}; \ell, -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| \ell, \frac{1}{2}; \ell-1, +\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$$

$$\left| \ell-\frac{1}{2}, m \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{2\ell+1}} \left\{ \sqrt{\ell+m+\frac{1}{2}} \left| \ell, \frac{1}{2}; m+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\ell-m+\frac{1}{2}} \left| \ell, \frac{1}{2}; m-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle \right\}$$

其中 $m = \ell-\frac{1}{2}, \cdots, -\ell+\frac{1}{2}$

量子态的表示. 在 $|m_\ell, m_s\rangle$ 表象中,

$$\psi_{\ell,\frac{1}{2};m_\ell,+\frac{1}{2}}(\boldsymbol{r}) = R_{k,\ell}(r) Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\psi_{\ell,\frac{1}{2};m_\ell,-\frac{1}{2}}(\boldsymbol{r}) = R_{k,\ell}(r) Y_{\ell,m_\ell}(\theta,\phi) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

在 $|j,m\rangle$ 表象中

$$\psi_{\ell+\frac{1}{2},m}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} R_{k,\ell}(r) \begin{pmatrix} \sqrt{\ell+m+\frac{1}{2}} Y_{\ell,m-\frac{1}{2}}(\theta,\phi) \\ \sqrt{\ell-m+\frac{1}{2}} Y_{\ell,m+\frac{1}{2}}(\theta,\phi) \end{pmatrix}$$

$$\psi_{\ell-\frac{1}{2},m}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} R_{k,\ell}(r) \begin{pmatrix} -\sqrt{\ell-m+\frac{1}{2}} Y_{\ell,m-\frac{1}{2}}(\theta,\phi) \\ \sqrt{\ell+m+\frac{1}{2}} Y_{\ell,m+\frac{1}{2}}(\theta,\phi) \end{pmatrix}$$

标量算子和向量算子

在最简单的意义上, 标量是一个数, 在旋转变换下是不变的. 三维实空间 $\mathbb{R}^3$ 中的向量 $\boldsymbol{v}$ 在直角坐标系中有三个分量 v_x, v_y, v_z. 在旋转变换下, 向量 $\boldsymbol{v}$ 变为 $\boldsymbol{v}'$, 二者之间的关系是

$$v'_j = R_{jk} v_k \tag{5}$$

其中 R_{jk} 是变换矩阵 $\mathcal{R} \in \mathrm{SO}(3)$ 的矩阵元.

现在要讨论的是标量算子和向量算子, 从类比的角度来说, 需要考虑旋转变换对算子的影响. 但是, 在主动观点中, 不能说算子的变换, 只能说量子态的变换. 于是, 我们用算子的期望值的变化来定义标量算子和向量算子.

标量算子

对于任意的量子态 $|\psi\rangle$, 在某个旋转变换下变为 $|\psi'\rangle = U(\mathcal{R})\,|\psi\rangle$, 如果算子 A 的期望值在变换前后的期望值保持不变, 即

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi'|A|\psi'\rangle = \langle\psi|U^\dagger(\mathcal{R})AU(\mathcal{R})|\psi\rangle$$

那么, 这个算子就是标量算子. 由于上式对于任意的 $|\psi\rangle$ 都成立, 所以

$$A = U^\dagger(\mathcal{R})AU(\mathcal{R}), \quad [A, U] = 0$$

将变换 $U(\mathcal{R})$ 表示为 $e^{-i\vartheta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}/\hbar}$ 在无穷小变换下, $\vartheta \to \delta\vartheta$,

$$A = \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\delta\vartheta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right) A \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\vartheta\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$[A, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}] = 0, \quad \forall\ \boldsymbol{n}$$

于是, 标量算子与 $\boldsymbol{J}$ 的三个分量均对易,

$$[A, J_k] = 0, \quad k = x, y, z$$

例如, J^2, $R^2 = X^2 + Y^2 + Z^2$, P^2, $\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P}$ 都是标量算子.

第八章　角动量 V

标量算子和向量算子

在最简单的意义上, 标量是一个数, 在旋转变换下是不变的. 三维实空间 $\mathbb{R}^3$ 中的向量 $\boldsymbol{v}$ 在直角坐标系中有三个分量 v_x, v_y, v_z. 在旋转变换下, 向量 $\boldsymbol{v}$ 变为 $\boldsymbol{v}'$, 二者之间的关系是

$$v'_j = R_{jk} v_k \tag{1}$$

其中 R_{jk} 是变换矩阵 $\mathcal{R} \in \mathrm{SO}(3)$ 的矩阵元.

现在要讨论的是标量算子和向量算子, 从类比的角度来说, 需要考虑旋转变换对算子的影响. 但是, 在主动观点中, 不能说算子的变换, 只能说量子态的变换. 于是, 我们用算子的期望值的变化来定义标量算子和向量算子.

标量算子

对于任意的量子态 $|\psi\rangle$, 在某个旋转变换下变为 $|\psi'\rangle = U(\mathcal{R})|\psi\rangle$, 如果算子 A 的期望值在变换前后的期望值保持不变, 即

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi'|A|\psi'\rangle = \langle\psi|U^\dagger(\mathcal{R})AU(\mathcal{R})|\psi\rangle$$

那么, 这个算子就是标量算子. 由于上式对于任意的 $|\psi\rangle$ 都成立, 所以

$$A = U^\dagger(\mathcal{R})AU(\mathcal{R}), \quad [A, U] = 0$$

将变换 $U(\mathcal{R})$ 表示为 $e^{-i\vartheta \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}/\hbar}$ 在无穷小变换下, $\vartheta \to \delta\vartheta$,

$$A = \left(\mathbb{1} + \frac{i}{\hbar}\delta\vartheta \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right) A \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\delta\vartheta \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}\right)$$

$$\Downarrow$$

$$[A, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}] = 0, \quad \forall\, \boldsymbol{n}$$

于是, 标量算子与 $\boldsymbol{J}$ 的三个分量均对易,

$$[A, J_k] = 0, \quad k = x, y, z$$

例如, J^2, $R^2 = X^2 + Y^2 + Z^2$, P^2, $\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P}$ 都是标量算子.

向量算子

参看 Cohen 书卷 Ⅱ $\mathrm{D_X}$.

现在考虑 Hilbert 空间上的算子 $\boldsymbol{V}$, 它具有向量的形式, 三个分量分别是 V_x, V_y, V_z.

向量算子的定义是: 如果对于任意的量子态 $|\psi\rangle$ 和旋转变换 $U(\mathcal{R})$, 算子 $\boldsymbol{V}$ 的三个分量的期望值的变化如同 (1) 式所示的普通向量的变化, 即

$$\langle\psi'|V_j|\psi'\rangle = \sum_k R_{jk} \langle\psi|V_k|\psi\rangle\,, \quad |\psi'\rangle = U(\mathcal{R})\,|\psi\rangle \tag{2}$$

那么 $\boldsymbol{V}$ 就是一个向量算子. 上式又可以表示为

$$\langle\psi|U^\dagger(\mathcal{R})V_jU(\mathcal{R})|\psi\rangle = \sum_k R_{jk} \langle\psi|V_k|\psi\rangle$$

又因为上式对任意的 $|\psi\rangle$ 都成立, 所以有

$$U^\dagger(\mathcal{R})V_jU(\mathcal{R}) = \sum_k R_{jk}V_k \tag{3}$$

如果想知道向量算子的分量 V_j 与角动量的分量 J_k 之间的对易关系, 那么就要考虑无穷小变换.

在无穷小变换 $U(\boldsymbol{n}, \delta\vartheta)$ 下, (3) 式的左端是

$$V_j + \frac{i}{\hbar}\delta\vartheta[\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}, V_j] \tag{4}$$

至于 (3) 式的右端, 先考虑绕 z 轴的无穷小旋转, 结果是

$$\begin{pmatrix} 1 & -\delta\vartheta & 0 \\ \delta\vartheta & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_x \\ V_y \\ V_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_x - \delta\vartheta V_y \\ V_y + \delta\vartheta V_x \\ V_z \end{pmatrix}$$

将 (3) 式左右两端结合在一起, 给出

$$[V_x, J_z] = -i\hbar V_y, \quad [V_y, J_z] = i\hbar V_x, \quad [V_z, J_z] = 0$$

类似地, 可以得到其它对易关系.

考虑向量算子 $\boldsymbol{V} = (V_x, V_y, V_z)$ 的代数结构.

$$[J_x, V_x] = 0, \quad [J_x, V_y] = i\hbar V_z, \quad [J_x, V_z] = -i\hbar V_y$$

定义

$$V_\pm = V_x \pm iV_y, \quad J_\pm = J_x \pm iJ_y$$

可以得到若干对易关系:

$$[J_x, V_\pm] = \mp\hbar V_z, \quad [J_y, V_\pm] = -i\hbar V_z, \quad [J_z, V_\pm] = \pm\hbar V_\pm$$

$$[J_+, V_+] = 0, \quad [J_+, V_-] = 2\hbar V_z, \quad [J_-, V_+] = -2\hbar V_z, \quad [J_-, V_-] = 0$$

考虑 $\boldsymbol{V}$ 的矩阵元. 基向量是 $|j, m\rangle$. 我们将看到, 由于 $\boldsymbol{V}$ 是向量算子, 它的分量算子的矩阵元大多为零.

首先计算 V_z 的矩阵元.

$$\langle j, m|V_z|j', m'\rangle = ?$$

$$[J_z, V_z] = 0$$

$$0 = \langle j, m|[J_z, V_z]|j', m'\rangle = (m - m')\hbar \langle j, m|V_z|j', m'\rangle$$

$$\therefore \text{ 当 } m \neq m' \text{ 时, } \langle j, m|V_z|j', m'\rangle = 0$$

V_z 仅仅涉及量子数 m, 注意, 上式只是表明, 当 $m \neq m'$ 时, V_z 的矩阵元为零, 并未要求 $j \neq j'$. 当然, 对于角动量 J_z, 当 $j \neq j'$ 时, 矩阵元为零. $|j, m\rangle$ 是 J_z 的本征向量, 但不一定是 V_z 的本征向量.

为了得到 V_x 和 V_y 的矩阵元, 考虑 $V_\pm$ 的矩阵元.

$$J_z V_\pm = V_\pm J_z \pm \hbar V_\pm$$

$$J_z V_\pm |j, m\rangle = V_\pm J_z |j, m\rangle \pm \hbar V_\pm |j, m\rangle = (m \pm 1)\hbar V_\pm |j, m\rangle$$

这表明, $V_\pm |j, m\rangle$ 是 J_z 的本征向量, 对应的的本征值是 $(m \pm 1)\hbar$. 但是, 不能由此得到这样的结论: $V_\pm |j', m'\rangle$ 正比于 $|j, m \pm 1\rangle$, 正确的说法是

$$V_\pm |j, m\rangle = \sum_{j'} c_{j'} |j', m \pm 1\rangle$$

只有在 $[V_\pm, J^2] = 0$ 的条件下, 才能不涉及对 j' 的求和, 就像 $J_\pm$ 那样.

$V_\pm$ 的矩阵元

$$\langle j', m'|V_\pm|j, m\rangle = \sum_{j''} c_{j''} \langle j', m'|j'', m \pm 1\rangle = c_{j'} \delta_{m', m\pm1}$$

$$m' \neq m \pm 1 \Longrightarrow \langle j', m'|V_\pm|j, m\rangle = 0$$

换句话说, 如果我们希望 $\langle m'|V_+|m\rangle$ 有非零的值, 那么 $m' - m = +1$; 如果希望 $\langle m'|V_-|m\rangle$ 有非零的值, 那么 $m' - m = -1$.

$m' - m = +1$ 是 $\langle m'|V_+|m\rangle \neq 0$ 的必要但非充分条件. $m' - m = -1$ 是 $\langle m'|V_-|m\rangle \neq 0$ 的必要但非充分条件.

在子空间 $\mathscr{H}_j$ 中

现在知道,

$$[J_+, V_+] = 0, \quad [J_+, V_-] = 2\hbar V_z, \quad [J_-, V_+] = -2\hbar V_z, \quad [J_-, V_-] = 0$$

$$\langle j, m+2 | J_+ V_+ | j, m \rangle = \langle j, m+2 | V_+ J_+ | j, m \rangle$$

$$\left\langle j, m+2 \left| J_+ \left(\sum_{j', m'} |j', m'\rangle\langle j', m'| \right) V_+ \right| j, m \right\rangle = \left\langle j, m+2 \left| V_+ \left(\sum_{j', m'} |j', m'\rangle\langle j', m'| \right) J_+ \right| j, m \right\rangle$$

$$V_+ |j, m\rangle = \sum_{j'} c_{j'} |j', m+1\rangle$$

$$\therefore \quad \langle j, m+2 | J_+ | j, m+1 \rangle \ \langle j, m+1 | V_+ | j, m \rangle = \langle j, m+2 | V_+ | j, m+1 \rangle \ \langle j, m+1 | J_+ | j, m \rangle$$

$$\frac{\langle j, m+1 | V_+ | j, m \rangle}{\langle j, m+1 | J_+ | j, m \rangle} = \frac{\langle j, m+2 | V_+ | j, m+1 \rangle}{\langle j, m+2 | J_+ | j, m+1 \rangle}, \quad -j \leqslant m \leqslant j-2$$

有递推关系

$$\begin{aligned} \frac{\langle j, -j+1 | V_+ | j, -j \rangle}{\langle j, -j+1 | J_+ | j, -j \rangle} &= \frac{\langle j, -j+2 | V_+ | j, -j+1 \rangle}{\langle j, -j+2 | J_+ | j, -j+1 \rangle} = \cdots \\ &= \frac{\langle j, m+1 | V_+ | j, m \rangle}{\langle j, m+1 | J_+ | j, m \rangle} = \cdots \\ &= \frac{\langle j, j | V_+ | j, j-1 \rangle}{\langle j, j | J_+ | j, j-1 \rangle} = \alpha_+(j) \end{aligned}$$

注意到当 $m - m' \neq +1$ 的时候, $\langle j, m | V_+ | j, m' \rangle$ 和 $\langle j, m | J_+ | j, m' \rangle$ 均为零, 可以将 $\langle j, m | V_+ | j, m' \rangle$ 表示为

$$\langle j, m | V_+ | j, m' \rangle = \alpha_+(j) \langle j, m | J_+ | j, m' \rangle \tag{5}$$

这说明, 在 $\mathscr{H}_j$ 中, V_+ 的所有矩阵元都正比于 J_+ 的矩阵元.

类似地, 有

$$\langle j, m | V_- | j, m' \rangle = \alpha_-(j) \langle j, m | J_- | j, m' \rangle$$

下面关注 $\alpha_+(j)$ 和 $\alpha_-(j)$, 将会看到, 它们是相等的. 考虑 V_z 的矩阵元.

$$[J_-, V_+] = -2\hbar V_z$$

$$-2\hbar \langle j, m | V_z | j, m \rangle = \langle j, m | (J_- V_+ - V_+ J_-) | j, m \rangle$$

$$= \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \langle j, m+1 | V_+ | j, m \rangle - \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \langle j, m | V_+ | j, m-1 \rangle$$

利用 (5), 有

$$\langle j, m | V_z | j, m \rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= -\frac{1}{2}\alpha_+(j)\big[\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,\langle j,m+1|J_+|j,m\rangle \\
&\qquad\qquad -\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\,\langle j,m|J_+|j,m-1\rangle\,\big] \\
&= -\frac{\hbar}{2}\alpha_+(j)\big[j(j+1)-m(m+1)-j(j+1)+m(m-1)\big] \\
&= m\hbar\alpha_+(j)
\end{aligned}
$$

类似地, 利用 $[J_+, V_-] = 2\hbar V_z$, 得到

$$\langle j,m|V_z|j,m\rangle = m\hbar\alpha_-(j)$$

所以

$$\alpha_+(j) = \alpha_-(j) = \alpha(j)$$

以上考虑的是 V_z 的对角矩阵元, 而此前已经知道, 它的非对角矩阵元一律为零, 所以

$$\langle j,m|V_z|j,m'\rangle = \alpha(j)\,\langle j,m|J_z|j,m\rangle$$

至此, 得到 $V_{x,y,z}$ 的矩阵元与 $J_{x,y,z}$ 的矩阵元之间的联系, 可以总结为

$$\langle j,m|\boldsymbol{V}|j,m'\rangle = \alpha(j)\,\langle j,m|\boldsymbol{J}|j,m'\rangle \tag{6}$$

这是在子空间 $\mathscr{H}_j$ 中的结论.

用 Π_j 表示子空间 $\mathscr{H}_j$ 上的投影算子,

$$\Pi_j = \sum_m |j,m\rangle\langle j,m|$$

把 (6) 写出更一般的形式,

$$\Pi_j \boldsymbol{V} \Pi_j = \alpha(j)\Pi_j \boldsymbol{J} \Pi_j$$

而 Π_j 与 $\boldsymbol{J}$ 是对易的, 这是因为

$$[J_z, \Pi_j]\,|j,m\rangle = 0, \quad [J_\pm, \Pi_j]\,|j,m\rangle = 0$$

又因为 $\Pi_j^2 = \Pi_j$, 所以

$$\Pi_j \boldsymbol{V} \Pi_j = \alpha(j)\boldsymbol{J}\Pi_j = \alpha(j)\Pi_j\boldsymbol{J}$$

现在来计算 $\alpha(j)$. 考虑 $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}$. 该算子在不变子空间 $\mathscr{H}_j$ 中的部分是 $\Pi_j(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V})\Pi_j$,

$$
\begin{aligned}
\Pi_j(\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V})\Pi_j &= \boldsymbol{J}\cdot\big[\Pi_j\boldsymbol{V}\Pi_j\big] \\
&= \alpha(j)J^2\Pi_j
\end{aligned}
$$

$$= \alpha_j j(j+1)\hbar^2 \Pi_j$$

这表明, 当我们把 $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}$ 限制在子空间 $\mathscr{H}_j$ 上的时候, 标量算子 $\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}$ 就如同是一个单位算子 $\times\alpha(j)j(j+1)\hbar^2$.

设 $|\psi_j\rangle$ 是 $\mathscr{H}_j$ 中的任意向量, 则期望值

$$\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}\rangle = \langle\psi_j|\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}|\psi_j\rangle = \alpha(j)j(j+1)\hbar^2$$

这样就得到了比例常数 $\alpha(j)$, 进而将 $\boldsymbol{V}$ 表示为

$$\boldsymbol{V} = \frac{\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}\rangle_j}{\langle J^2\rangle_j}\boldsymbol{J} = \frac{\langle \boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{V}\rangle_j}{j(j+1)\hbar^2}\boldsymbol{J} \tag{7}$$

再次强调, 这一结论是针对于不变子空间 $\mathscr{H}_j$ 而言的.

关于 (7) 式的应用, 参看 Cohen 书卷 Ⅱ $\mathrm{D_X}$.

第九章　离散对称性

这一章主要讨论两种离散 (不连续的) 变换: 空间反射和时间反演.

$\mathbb{R}^3$ 空间中的空间反射是正交变换的一支, 不能构成群. 另一支是连续的旋转变换, 构成 SO(3) 群.

Wigner 定理

虽然在很早的时候就介绍过 Wigner 定理, 但是有必要再稍作叙述[1].

设 $|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 是 Hilbert 空间中的任意两个向量. 我们用 ψ 表示 $|\psi\rangle$ 的等价类,

$$\psi = \left\{ |\psi'\rangle \,\middle|\, |\psi'\rangle = c\,|\psi\rangle\,,\ c \in \mathbb{C}, |c| = 1 \right\}$$

也就是说, ψ 可以表示所有与 $|\psi\rangle$ 仅相差一个相因子的向量的集合. ψ 实际上是投影空间 (或者说 ray space) 中的向量, 须注意到 ψ 不属于 $|\psi\rangle$ 所在的 Hilbert 空间. 简单地, 我们可以把 ψ 视作密度算子 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$. 类似地, φ 表示 $|\varphi\rangle$ 的等价类, 简单地视作 $\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$.

考虑投影空间中的变换 T,

$$\psi \longrightarrow \psi' = \mathsf{T}\psi, \quad \varphi \longrightarrow \varphi' = \mathsf{T}\varphi$$

对于变换 T 有这样的要求,

$$(\psi, \varphi) = (\psi', \varphi') \tag{1}$$

这里 $(\cdot, \cdot)$ 表示投影空间中的内积 (而不是 Hilbert 空间中的内积). 但是, 我们还没有定义投影空间中的内积. 仍然采用简单的做法, 既然 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$, $\varphi = |\varphi\rangle\langle\varphi|$, 我们就把投影空间中的内积写作

$$(\psi, \varphi) = \mathrm{Tr}(\psi\varphi) = |\,\langle\psi|\varphi\rangle\,|^2$$

于是我们希望把 (1) 改写为

$$|\,\langle\psi|\varphi\rangle\,|^2 = |\,\langle\psi'|\varphi'\rangle\,|^2 \tag{2}$$

[1]参看 Bargmann, V. *Note on Wigner's Theorem on Symmetry Operations*, Journal of Mathematical Physics **5**, 862-868 (1964).

但是, 这里有个问题, 变换 T 是作用于投影空间中的向量的, 我们并不知道相应的 Hilbert 空间中的向量该如何变化, 即

$$|\psi'\rangle =? \quad |\varphi'\rangle =?$$

Wigner 定理的主要内容就是: 对于任何一个满足条件 (1) 的投影空间中的变换 T, 总是存在 Hilbert 空间中的变换 U, 使得

1. 如果 $|\psi\rangle$ 属于等价类 ψ, 那么 $U|\psi\rangle$ 一定属于等价类 $\mathsf{T}\psi$.
2. $U(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = U|\psi\rangle + U|\varphi\rangle$.
3. $U(c|\psi\rangle) = \chi(c)U|\psi\rangle$, 其中 $c \in \mathbb{C}$, $\chi(c) = c$ 或者 $\chi(c) = c^*$.
4. 令 $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$, $|\varphi'\rangle = U|\varphi\rangle$, 有 $\langle\psi'|\varphi'\rangle = \chi\big(\langle\psi|\varphi\rangle\big)$

一些解释:

- 上述第一个条件是对变换 U 的基本要求, 如果变换 U 满足这个条件, 那么就说它是与变换 T 相容的 (compatible with T).
- 仅仅从上述条件 2 不能说明 U 是线性的. Bargmann 将满足 $U(|\psi\rangle + |\varphi\rangle) = U|\psi\rangle + U|\varphi\rangle$ 的 U 称为加法性的 (additive).
- 如果具有加法性的 U 又能满足上述条件 3 和 4, 那么就是酉的或者反酉的.

因此, 投影空间中保持内积不变的变换 (在量子力学中相当于保持几率不变的变换) 体现在态空间 (Hilbert 空间) 中的变换就是酉变换或者反酉变换.

还需要考虑的是 U 变换的唯一性. 按照 Bargmann 文中的话说

> It is of course important to know to what extent U is determined by a ray mapping T which preserves inner products.

关于这个问题, 有下面的定理.

定理 设 T 是保证投影空间的向量的内积不变的变换. 如果 U_1 和 U_2 是 Hilbert 空间上的与 T 相容的并且具有加法性的 (additive) 变换, 那么它们只能相差一个恒定的单位复数, 即, $U_2 = U_1\theta$, $|\theta| = 1$. □

注意这个定理并不要求 U_1 和 U_2 满足 Wigner 定理中的条件 3 或条件 4, 它们只要与 T 相容并且具有加法性就可以了. 因此, 结合 Wigner 定理, 有一般性的结论: 保证量子态的内积的模不变的变换是酉变换或者反酉变换.

空间反射

在三维实空间 $\mathbb{R}^3$ 中, 空间反射变换表现为

$$\boldsymbol{r} \longrightarrow -\boldsymbol{r}$$

当然, 如下形式的变换也属于空间反射变换

$$(x,y,z) \longrightarrow (x,y,-z), \quad (x,y,z) \longrightarrow (x,-y,z), \quad (x,y,z) \longrightarrow (-x,y,z)$$

空间反射变换的矩阵是正交矩阵, 其行列式等于 -1. 在空间反射变换的集合中没有单位变换, 所以空间反射变换不能构成一个群.

现在要讨论的是在量子力学中的空间反射变换. 用 Π 表示空间反射变换. 我们希望变换前后任意两个量子态的内积的模不变, 根据 Wigner 定理, 空间反射变换 Π 一定是酉的, 或是反酉的.

$$|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = \Pi\,|\psi\rangle\,, \quad |\psi\rangle = \Pi^{-1}\,|\psi'\rangle$$

这里, 我们并没有把空间反射变换的逆变换写作 $\Pi^\dagger$, 因为现在还不知道它是酉的还是反酉的.

我们还提到过, 时空变换不应该改变力学量的本征值. 特定地, 对于空间位置算子, 比如 X, 有 $X\,|x\rangle = x\,|x\rangle$, 变换后的位置算子记作 X', 变换后的本征向量记作 $|x'\rangle = \Pi\,|x\rangle$,

$$X'\,|x'\rangle = x\,|x'\rangle\,, \quad X'\Pi\,|x\rangle = x\Pi\,|x\rangle$$

左右两端作用以 Π^{-1}, 有

$$\Pi^{-1}X'\Pi\,|x\rangle = x\,|x\rangle$$

这表明,

$$\Pi^{-1}X'\Pi = X, \quad X' = \Pi X\Pi^{-1} \tag{3}$$

类似地, 有

$$P'_x = \Pi P_x \Pi^{-1}$$

接着需要分析反射变换 Π 的性质, 我们将要得到的结论是

$$\Pi = \Pi^{-1} = \Pi^\dagger \tag{4}$$

可以从以下两种不同的出发点得到上面的结果.

与经典情形类比 认为

$$\Pi\boldsymbol{R}\Pi^{-1} = -\boldsymbol{R}, \quad \Pi\boldsymbol{P}\Pi^{-1} = -\boldsymbol{P}$$

或者说, $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 与 Π 反对易,

$$\boldsymbol{R}\Pi + \Pi\boldsymbol{R} = 0, \quad \boldsymbol{P}\Pi + \Pi\boldsymbol{P} = 0$$

接着考虑基本对易关系是

$$[X, P_x] = i\hbar\mathbb{1}, \quad \cdots\cdots$$

考虑反射变换后的对易子

$$\Pi[X, P_x]\Pi^{-1} = \Pi\ i\hbar\mathbb{1}\ \Pi^{-1}$$

而上式的左端是

$$\Pi[X, P_x]\Pi^{-1} = X'P'_x - P'_xX' = XP_x - P_xX = [X, P_x] = i\hbar\mathbb{1}$$

于是必须有

$$\Pi\ i\ \Pi = i$$

这表明 Π 不可能是反酉的, 只能是酉变换, 因此 $\Pi^{-1} = \Pi^\dagger$. 位置算子的反射变换可以重新表示为

$$X' = \Pi X\Pi^\dagger, \quad P'_x = \Pi P'_x\Pi^\dagger$$

对于 X 的本征向量 $|x\rangle$, 有

$$X\Pi\,|x\rangle + \Pi X\,|x\rangle = X\big(\Pi\,|x\rangle\big) + x\big(\Pi\,|x\rangle\big) = 0$$

$$X\big(\Pi\,|x\rangle\big) = -x\big(\Pi\,|x\rangle\big)$$

这表明 $\Pi\,|x\rangle$ 也是 X 的本征向量, 对应的本征值是 $-x$, 因此可以说 $\Pi\,|x\rangle = c\,|-x\rangle$, 其中 c 是单位复数, 不妨令 $c = 1$,

$$\Pi\,|x\rangle = |-x\rangle$$

于是 $\Pi^2\,|x\rangle = |x\rangle$, 表明 $\Pi^2 = \mathbb{1}$, 或者 $\Pi = \Pi^{-1}$, 综合上述过程, 有

$$\Pi = \Pi^{-1} = \Pi^\dagger$$

空间反射变换既是厄密的, 又是酉的.

首先设定 $\boldsymbol{\Pi^2 = \mathbb{1}}$ 在经典情形下, 接连两次空间反射变换的效果是恒等变换. 类比到量子情形, 可以认为, 两次空间反射变换至多会对量子态带来相位的改变, 所以 $\Pi^2 = c\mathbb{1}$, $|c| = 1$, 可以简单地将 c 设为 1, 得到 $\Pi = \Pi^{-1}$.

接着考虑反射变换前后 X 在任意的量子态 $|\psi\rangle$ 中的期望值 $\langle\psi|X|\psi\rangle$.

$$\langle\psi|X|\psi\rangle = -\langle\psi'|X|\psi'\rangle = -\langle\psi|\Pi^\dagger X\Pi|\psi\rangle \tag{5}$$

这对于任意的量子态都成立, 所以

$$X = -\Pi^\dagger X\Pi$$

但是, 这个结果还是不能帮助我们确定 Π 是否为酉变换. 再考虑来自于被动观点的与 (5) 式等价的说法. 对于给定的量子态 $|\psi\rangle$, 变换后的力学量 X' 的期望值改变了符号, 即

$$\langle\psi|X|\psi\rangle = -\langle\psi|X'|\psi\rangle = -\langle\psi|\Pi X\Pi^{-1}|\psi\rangle$$

这意味着

$$X = -\Pi X\Pi^{-1}$$

把上述结果综合在一起,

$$\left.\begin{aligned} X &= -\Pi^\dagger X\Pi \\ X &= -\Pi X\Pi^{-1} \end{aligned}\right\} \Longrightarrow \Pi^\dagger X\Pi = \Pi X\Pi^{-1} \Longrightarrow X = \Pi^{-1}\Pi^\dagger X\Pi^2$$

由于先前已经设定 $\Pi^2 = \mathbb{1}$, 所以 $X = \Pi^{-1}\Pi^\dagger X$, 这就需要

$$\Pi^{-1}\Pi^\dagger = \mathbb{1} \Longrightarrow \Pi \text{ 是酉算子}$$

最终有

$$\Pi = \Pi^{-1} = \Pi^\dagger$$

随后, 容易得到 $\Pi|x\rangle = |-x\rangle$.

通过上面提到的两种不同的途径, 我们得到了空间反射变换的主要性质, $\Pi = \Pi^{-1} = \Pi^\dagger$, 同时也看到, 由于 $\Pi^2 = \mathbb{1}$, 故 Π 的本征值为 $+1$ 和 -1. 能够满足 $\Pi|\psi\rangle = \pm|\psi\rangle$ 的量子态 $|\psi\rangle$ 是空间反射算子 Π 的本征态, 称为宇称本征态.

注意到第二种途径中 (从 $\Pi^2 = \mathbb{1}$ 出发的讨论) 尚没有涉及动量算子的变换. 现在分析动量算子在空间反射变换下如何改变. 考虑两个过程, 空间平移和空间反射. 如果先平移, 后反射, 整个变换过程是

$$\Pi\, e^{-i\delta x P_x/\hbar} \tag{6}$$

其中 δx 是在 x 方向上的一段很小的平移量. 再考虑另一个过程: 先反射, 后平移. 为了达到和 (6) 相同的效果, 需用下面的过程

$$e^{i\delta x P_x/\hbar}\,\Pi \tag{7}$$

将 (6) 和 (7) 展开至 δx 的一次项, 有下面的等式,

$$\Pi\left(\mathbb{1} - \frac{i\delta x}{\hbar}P_x\right) = \left(\mathbb{1} + \frac{i\delta x}{\hbar}P_x\right)\Pi$$

由此给出

$$\Pi P_x + P_x\Pi = 0, \quad P_x = -\Pi P_x\Pi \tag{8}$$

以上考虑的是一维空间的反射变换, 容易推广到三维空间.

$$\Pi \boldsymbol{R} \Pi = -\boldsymbol{R} \tag{9}$$

$$\Pi \boldsymbol{P} \Pi = -\boldsymbol{P} \tag{10}$$

轨道角动量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{P}$ 在空间反射变换下保持不变, 因为 $\boldsymbol{R} \to -\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{P} \to -\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{L} \to \boldsymbol{L}$. 由 $\Pi \boldsymbol{L} \Pi = \boldsymbol{L}$ 可以得到

$$[\Pi, \boldsymbol{L}] = 0 \tag{11}$$

轨道角动量的各个分量与空间反射变换算子都对易. 参看 Sakurai 书.

至于自旋角动量, 可以类比地说, $\boldsymbol{S}$ 在空间反射变换下不变. 于是, 对于一般的角动量 $\boldsymbol{J}$, 也有

$$[\Pi, \boldsymbol{J}] = 0 \tag{12}$$

在空间反射变换下改变符号的算子称为奇宇称算子, $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 是奇宇称算子; 在空间反射变换下保持不变的算子称为偶宇称算子, $\boldsymbol{J}$ 是偶宇称算子.

如果向量算子 $\boldsymbol{V}$ 是奇宇称算子, 那么也是极矢量算子, 例如 $\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{P}$; 如果向量算子 $\boldsymbol{V}$ 是偶宇称算子, 那么也是赝矢量算子, 例如 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{J}$.

量子态或波函数的宇称

在上面的讨论中, 已经看到 $\Pi |x\rangle = |-x\rangle$. 对于量子态 $|\psi\rangle$, 在位置表象中的波函数是 $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, 在空间反射变换下,

$$\langle x|\psi\rangle \longrightarrow \langle x|\Pi|\psi\rangle = \langle -x|\psi\rangle = \psi(-x)$$

在三维空间中,

$$\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle \longrightarrow \langle \boldsymbol{r}|\Pi|\psi\rangle = \langle -\boldsymbol{r}|\psi\rangle = \psi(-\boldsymbol{r})$$

简单地说, 在空间反射变换下, 波函数中的位置参量改变符号.

如果 $\psi(\boldsymbol{r}) = -\psi(-\boldsymbol{r})$, 那么相应的量子态具有奇宇称; 如果 $\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(-\boldsymbol{r})$, 那么相应的量子态具有偶宇称. 并不是所有的波函数都是奇函数或偶函数, 并不是所有的量子态都是宇称本征态. 下面的定理考虑了力学量的空间反射对称性与宇称本征态的联系.

定理 *设某个力学量 A 的本征值和本征向量分别是 a 和 $|\alpha\rangle$, 并且是非简并的. 如果 A 与空间反射变换算子对易, $[A, \Pi] = 0$, 那么 $|\alpha\rangle$ 是 Π 的本征态.* □

若 $[A, \Pi] = 0$, 则 A 是偶宇称算子, 在空间反射变换下保持不变. 如果从对易子出发, 进行下面的推导,

$$[A, \Pi] = 0$$

$$A\Pi\left|\alpha\right\rangle - \Pi A\left|\alpha\right\rangle = 0$$

$$A(\Pi\left|\alpha\right\rangle) = a(\Pi\left|\alpha\right\rangle)$$

那么只能说明 $\Pi\left|\alpha\right\rangle$ 是 A 的本征态, 从而 $\Pi\left|\alpha\right\rangle \propto \left|\alpha\right\rangle$, 但不一定有 $\Pi\left|\alpha\right\rangle = \pm\left|\alpha\right\rangle$.

转而考虑 $\frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)\left|\alpha\right\rangle$, 它是 Π 的本征态, 因为

$$\Pi\left[\frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)\left|\alpha\right\rangle\right] = \frac{1}{2}(\Pi \pm \mathbb{1})\left|\alpha\right\rangle = \pm\frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)\left|\alpha\right\rangle \tag{13}$$

同时也是 A 的本征态, 因为

$$A\left[\frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)\left|\alpha\right\rangle\right] = a\left[\frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)\left|\alpha\right\rangle\right]$$

而 A 的本征态是非简并的, 故

$$\frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)\left|\alpha\right\rangle = c\left|\alpha\right\rangle$$

(13) 式说明 $\frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \Pi)\left|\alpha\right\rangle$ 有确定的宇称, 所以 $\left|\alpha\right\rangle$ 也是如此.

看几个例子.

谐振子　谐振子的基态波函数是偶函数, 基态 $\left|0\right\rangle$ 是偶宇称态, $\Pi\left|0\right\rangle = \left|0\right\rangle$. 第一激发态 $\left|1\right\rangle = a^\dagger\left|0\right\rangle$, 其中 $a^\dagger$ 是升算子, 是 X 和 P 的线性相加.

$$\Pi\left|1\right\rangle = \Pi a^\dagger \Pi\Pi\left|0\right\rangle = -a^\dagger\left|0\right\rangle = -\left|1\right\rangle$$

因此第一激发态是奇宇称态. 一般地, 第 n 激发态 $\left|n\right\rangle$ 的宇称是 $(-1)^n$.

氢原子　第一激发态, 本征态 $\left|2\ell m\right\rangle$, 它关于能量本征值 E_n 是简并的, 简并度为 4. 能量本征态, 记作 $\left|n=2\right\rangle$, 可以是 $\ell = 0$ 的 2s 态和 $\ell = 1$ 的 2p 态的线性叠加,

$$\left|n=2\right\rangle = c_s\left|2s\right\rangle + c_p\left|2p\right\rangle$$

在氢原子的哈密顿量中, P^2 与 Π 对易, 势能项也与 Π 对易, 故 $[H, \Pi] = 0$. 虽然如此, $\left|n=2\right\rangle$ 并不具有确定的宇称.

动量本征态　动量算子 $\boldsymbol{P}$ 的本征值和本征向量分别是 $\boldsymbol{p}$ 和 $\left|\boldsymbol{p}\right\rangle$. 动量 $\boldsymbol{P}$ 与空间反射算子 Π 是反对易的, $\boldsymbol{P}\Pi + \Pi\boldsymbol{P} = 0$,

$$\boldsymbol{P}(\Pi\left|\boldsymbol{p}\right\rangle) = -\boldsymbol{p}(\Pi\left|\boldsymbol{p}\right\rangle)$$

因此 $\Pi\left|\boldsymbol{p}\right\rangle$ 是 $\boldsymbol{P}$ 的本征向量, 本征值为 $-\boldsymbol{p}$, 从而 $\Pi\left|\boldsymbol{p}\right\rangle$ 和 $\left|-\boldsymbol{p}\right\rangle$ 只是相差一个相因子, 令

$$\Pi\left|\boldsymbol{p}\right\rangle = \left|-\boldsymbol{p}\right\rangle$$

可见动量本征态不是宇称的本征态.

动量空间中的波函数 $\varphi(\boldsymbol{p})=\langle \boldsymbol{p}|\varphi\rangle$, 在空间反射变换下,

$$\varphi(\boldsymbol{p}) \longrightarrow \langle \boldsymbol{p}|\Pi|\varphi\rangle = \langle -\boldsymbol{p}|\varphi\rangle = \varphi(-\boldsymbol{p})$$

类似于位置表象中的波函数的变换.

自由粒子的哈密顿量 $H=\frac{P^2}{2m}$ 与 Π 对易, 但是 H 的本征态没有确定的宇称, 因为 H 的本征态是二重简并的: $|\boldsymbol{p}\rangle$ 和 $|-\boldsymbol{p}\rangle$ 具有相同的能量. 如果将能量本征态表示为动量本征态的线性叠加 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\boldsymbol{p}\rangle \pm |-\boldsymbol{p}\rangle)$, 那么有确定的宇称.

球谐函数的宇称 球谐函数 $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$ 是 L^2 和 L_z 的共同本征态 $|\ell,m\rangle$ 在位置表象中的表示. 轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 及其平方 L^2 均与 Π 对易. 虽然 L^2 的本征态是简并的, 但是 L^2 和 L_z 的共同本征态 $|\ell,m\rangle$ 不存在简并, 因此 $|\ell,m\rangle$ 具有确定的宇称.

空间反射变换在球坐标中的体现是 $r\to r$, $\theta\to\pi-\theta$, $\phi\to\phi+\pi$, 分析球谐函数的性质, 有

$$Y_{\ell,m}(\pi-\theta,\phi+\pi)=(-1)^{\ell}Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$$

这表明 $Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$ 或 $|\ell,m\rangle$ 具有宇称 $(-1)^{\ell}$.

注意上面的结论不适用于轨道角动量的相加. 两个轨道角动量 $\boldsymbol{L}_1$ 和 $\boldsymbol{L}_2$ 合成为总的轨道角动量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1+\boldsymbol{L}_2$. $\{L^2,L_z\}$ 的共同本征态 $|\ell,m\rangle$ 可以表示为

$$|\ell,m\rangle = |m_1,m_2\rangle \text{ 的线性叠加}$$

在空间反射变换下,

$$\Pi\,|\ell,m\rangle = \Pi\big(|m_1,m_2\rangle \text{ 的线性叠加}\big) = (-1)^{\ell_1+\ell_2}\big(|m_1,m_2\rangle \text{ 的线性叠加}\big)$$

但是 $(-1)^{\ell_1+\ell_2}$ 不一定等于 $(-1)^{\ell}$, 因为 $\boldsymbol{L}$ 的量子数 ℓ 的可能有多个不同的取值, $\ell_1+\ell_2,\cdots,|\ell_1-\ell_2|$.

注 这里我们只是针对轨道角动量讨论了相应的宇称, 并没有进一步涉及自旋角动量意义上的宇称. 在量子场论或标准化模型中有内禀宇称 (intrinsic parity) 的概念. □

电偶极矩 考虑一个多电子体系, 设每个电子的位置算子是 $\boldsymbol{R}_1$, $\boldsymbol{R}_2$, $\cdots$. 用算子 $\boldsymbol{D}$ 表示该体系的电偶极子算子

$$\boldsymbol{D}=\sum_j q_j\boldsymbol{R}_j \tag{14}$$

因为每一个 $\boldsymbol{R}_j$ 都是奇宇称算子, 所以电偶极矩算子 $\boldsymbol{D}$ 具有奇宇称,

$$\Pi\boldsymbol{D}\Pi=-\boldsymbol{D}$$

如果在外电场为零的情形下, 电偶极矩算子有非零的期望值, 即 $\langle\psi|\boldsymbol{D}|\psi\rangle\neq 0$, 那么该原子表现出永久的或自发的电偶极矩.

现在来计算一下在特定的量子态中 $\boldsymbol{D}$ 的期望值. 考虑到 $\boldsymbol{D}$ 具有奇宇称,

$$\langle\psi|\boldsymbol{D}|\psi\rangle = \langle\psi|\Pi^\dagger\Pi\boldsymbol{D}\Pi^\dagger\Pi|\psi\rangle = -\langle\psi'|\boldsymbol{D}|\psi'\rangle\,, \quad |\psi'\rangle = \Pi\,|\psi\rangle$$

设 $|\psi\rangle$ 是哈密顿量 H 的本征态, $H\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$, 再进一步假设 H 是空间反射不变的, 即 $H = \Pi H\Pi$.

$$H\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$$

$$\Pi H\Pi^\dagger\Pi\,|\psi\rangle = E\Pi\,|\psi\rangle$$

$$H\,|\psi'\rangle = E\,|\psi'\rangle$$

如果能级 E 不存在简并, 那么 $|\psi'\rangle = \Pi\,|\psi\rangle = c\,|\psi\rangle$, 而且 c 必须是 $+1$ 或 -1. 从而 $\boldsymbol{D}$ 的期望值表示为

$$\langle\psi|\boldsymbol{D}|\psi\rangle = -\langle\psi'|\boldsymbol{D}|\psi'\rangle = -c^2\langle\psi|\boldsymbol{D}|\psi\rangle = -\langle\psi|\boldsymbol{D}|\psi\rangle$$

由此得到

$$\langle\psi|\boldsymbol{D}|\psi\rangle = 0$$

这就是说, 如果原子的哈密顿量在空间反射变换下保持不变, 且我们要考虑的能量本征态没有简并, 那么在该本征态上不会表现出永久电偶极矩.

此前我们讨论过关于轨道角动量量子数 ℓ 的选择定则, 可作对比.

时间反演变换

关于时间反演变换的简单的但是不甚恰当的说法是, 将时间 t 变为 $-t$. 这种说法固然可以得到动量的变换 $\boldsymbol{p} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \to \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}(-t)} = -\boldsymbol{p}$ 以及角动量的变换 $\boldsymbol{\ell} \to -\boldsymbol{\ell}$, 但是缺乏实际的操作意义. 毕竟时间的演化是单方向的.

考虑图 1 所示的经典情形下质点的运动. 当 $t = -t_1 < 0$ 时, 质点处于 A 点, 具有动量 $\boldsymbol{p_1}$, 经过了 t_1 时间后, 质点来到了位置 B, 具有动量 $\boldsymbol{p_0}$. 这个运动过程是由质点的哈密顿量支配的.

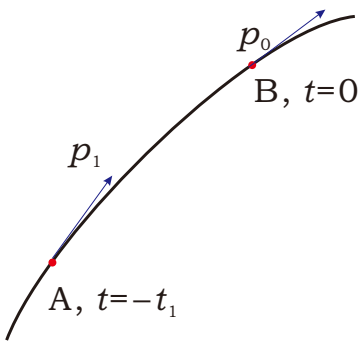


图 1

现在, 我们希望这个运动过程可以颠倒过来. 质点可以从 B 点出发沿着来时的路径回到 A 点, 而且在返回的过程中, 在路径的每一点上的动量都和来时的动量大小相等, 方向相反. 简单地说, 这是运动的反演. 我们还是采用约定俗成的说法, 称之为时间反演.

并不是所有的过程都可以反演的. 如果某个动力学系统可以在理论上实现这种运动反演 (或时间反演) 过程, 那么我们就说, 该系统具有时间反演对称性.

现在来描述一下图 1 所示过程的反演.

1. 以 B 点所在位置 $\boldsymbol{r}_0$ 为出发点, 将 $\boldsymbol{p}_0$ 改为 $-\boldsymbol{p}_0$, 这是时间反演操作. 于是初条件是 $(\boldsymbol{r}_0, -\boldsymbol{p}_0)$.
2. 在相同的哈密顿量的支配下演化, 这是沿时间正方向的演化.
3. 经过 t_1 时间后, 到达 A 点所在位置 $\boldsymbol{r}_1$, 此时的动量为 $-\boldsymbol{p}_1$.

将上述过程示意性地表示为,

$$\boxed{\text{时间演化}}\boxed{\text{时间反演}}\left[t=0\text{ 时刻的状态}\right]=\boxed{\text{时间反演}}\left[t=-t_1\text{ 时刻的状态}\right] \tag{15}$$

现在, 用量子力学的语言转述时间反演变换. 用 Θ 表示时间反演变换算子. 量子态 $|\psi\rangle$ 在时间反演变换下变为 $|\psi'\rangle=\Theta|\psi\rangle$. 我们要求任意两个量子态的内积的模在时间反演变换下是不变的,

$$|\psi\rangle\longrightarrow|\psi'\rangle=\Theta|\psi\rangle\,,\quad |\varphi\rangle\longrightarrow|\varphi'\rangle=\Theta|\varphi\rangle$$

$$|\langle\psi|\varphi\rangle|=|\langle\psi'|\varphi'\rangle|$$

因此, 时间反演变换 Θ 是酉的或反酉的.

另一方面, 类比于前面的经典情形下的讨论, 时间反演体现为运动的反演, 运动的反演意味着

$$\Theta\boldsymbol{R}\Theta^{-1}=\boldsymbol{R},\quad \Theta\boldsymbol{P}\Theta^{-1}=-\boldsymbol{P},\quad \Theta\boldsymbol{J}\Theta^{-1}=-\boldsymbol{J} \tag{16}$$

分析哈密顿量在时间反演变换下的行为. 设系统状态的演化是

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

类比于 (15), 对初态 $|\psi(0)\rangle$ 作时间反演变换, $|\psi(0)\rangle\to\Theta|\psi(0)\rangle$, 然后在哈密顿量的支配下随时间演化, 有

$$e^{-iHt/\hbar}\Theta|\psi(0)\rangle \tag{17}$$

这个结果应该等于 $\Theta|\psi(-t)\rangle$, 而 $|\psi(-t)\rangle=e^{-iH(-t)/\hbar}|\psi(0)\rangle=e^{iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle$, 所以

$$\Theta|\psi(-t)\rangle=\Theta e^{iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle \tag{18}$$

注意, 这里我们并不把 $|\psi(-t)\rangle$ 看作是 $|\psi(0)\rangle$ 沿时间反方向演化的结果, 而是说, $|\psi(-t)\rangle$ 沿时间正方向演化了 t 时间之后变为 $|\psi(0)\rangle$. 不论在经典的 Newton 方程和量子的 Schrödinger 方程中, 都允许对过去作推测, 对未来作预言. 对过去的推测并不是沿时间反方向演化的过程.

考虑 (17) 和 (18) 的中时间演化的无穷小过程, 二者相等, 有

$$\left(\mathbb{1}-\frac{iH\delta t}{\hbar}\right)\Theta=\Theta\left(\mathbb{1}+\frac{iH\delta t}{\hbar}\right)$$

$$-i\ H\ \Theta=\Theta\ i\ H \tag{19}$$

分析 (19). 如果 Θ 是酉变换, 那么有 $\Theta H+H\Theta=0$. 这样一来, 对于 H 的某个本征态 $|\psi_E\rangle$, $H|\psi_E\rangle=E|\psi_E\rangle$, $\Theta|\psi_E\rangle$ 也是 H 的本征态, 对应的能量本征值为 $-E$. 经典情形下, 速度改变了符号, 能量不应该变化. 而且, 如果 $\pm E$ 都是系统的能量本征值, 那么就不存在最低能级. 所以, Θ 不应该是酉算子, 只能是反酉算子.

反线性算子

满足如下条件的算子是反线性算子,

$$A(c_1|\psi_1\rangle+c_2|\psi_2\rangle)=c_1^*A|\psi_1\rangle+c_2^*A|\psi_2\rangle \tag{20}$$

反线性算子包含复共轭的操作. 对于反线性算子 A,

$$Ac=c^*A$$

两个反线性算子的相乘得到一个线性算子.

如果

- A 是反线性算子,
- 存在逆 A^{-1},
- 对于任意的 $|\psi\rangle$, 有 $\||\psi\rangle\|=\|A|\psi\rangle\|$,

那么 A 是反酉算子. 下面证明, 在反酉算子变换前后, 两个量子态之间的内积互为复共轭.

$$|\psi'\rangle=A|\psi\rangle,\quad |\varphi'\rangle=A|\varphi\rangle$$

$$\text{Let } |\xi\rangle=|\psi\rangle+|\varphi\rangle,\quad |\xi'\rangle=A|\xi\rangle=|\psi'\rangle+|\varphi'\rangle$$

$$\||\xi\rangle\|^2=\langle\xi|\xi\rangle=\langle\psi|\psi\rangle+\langle\varphi|\varphi\rangle+\langle\psi|\varphi\rangle+\langle\varphi|\psi\rangle$$

$$\||\xi'\rangle\|^2=\langle\xi'|\xi'\rangle=\langle\psi'|\psi'\rangle+\langle\varphi'|\varphi'\rangle+\langle\psi'|\varphi'\rangle+\langle\varphi'|\psi'\rangle$$

$$\||\xi\rangle\|^2=\||\xi'\rangle\|^2$$

$$\mathrm{Re}\,\langle\psi|\varphi\rangle=\mathrm{Re}\,\langle\psi'|\varphi'\rangle$$

$$|\eta\rangle = |\psi\rangle + i\,|\varphi\rangle\,, \quad |\eta'\rangle = A\,|\eta\rangle = A\,|\psi\rangle - iA\,|\varphi\rangle$$

$$\mathrm{Im}\,\langle\psi|\varphi\rangle = -\mathrm{Im}\,\langle\psi'|\varphi'\rangle$$

$$\therefore \quad \langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi'|\varphi'\rangle^*$$

(20) 式定义了反线性算子右矢的作用结果, 但是没有作用于左矢的定义. 此前, 我们通过考虑线性泛函定义了左矢. 对于任意的线性算子, 可以定义线性泛函. 但是现在我们面临的是反线性算子. 所以, 我们不将反线性算子作用于左矢, 也不能写 $A^\dagger$.

时间反演变换下的 Schrödinger 方程

Schrödinger 方程

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

考虑时间反演变换, 并不是简单地把 t 替换为 $-t$. 注意到 t 只是一个参数, 不会受到算子的影响.

对方程两边作用以时间反演算子 Θ,

$$\Theta H\Theta^{-1}\Theta\,|\psi(t)\rangle = \Theta\; i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Theta\,|\psi(t)\rangle$$

假设系统的哈密顿量在时间反演下是不变的, 即 $H = \Theta H\Theta^{-1}$, 有

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

这时, 可以说, 如果在上述方程中将 t 替换为 $-t$, 那么 $\Theta\,|\psi(-t)\rangle$ 也是 Schrödinger 方程的解.

这里没有出现类似于宇称的守恒量, 有的只是成对出现的 Schrödinger 方程的解.

与空间反射作个比较. 如果系统的力学量 A 在空间反射变换下不变, 那么在非简并情形下, A 的本征态具有确定的宇称. 或者说, 空间反射算子 Π 有本征值 ±1, 也有本征态 —— 与 Π 对易的力学量的非简并的本征态同时也是 Π 的本征态. 而对于时间反演算子 Θ, 却没有本征值和本征态, 有的只是成对出现的 Schrödinger 方程的解, $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ 和 $\Psi^*(\boldsymbol{r},-t)$.

到目前为止, 还不知道量子态经历了时间反演变换后的具体形式. 在不同的表象中, 时间反演算子有不同的表现形式.

位置表象 从 (16) 式得知 Θ 与位置算子是对易的, 因此可以认为

$$\Theta\,|\boldsymbol{r}\rangle = |\boldsymbol{r}\rangle$$

但是, 仅仅从这个变换关系不能得到位置表象中的波函数被时间反演变换作用后的形式, 这是因为, 在 $\langle\boldsymbol{r}|\Theta|\psi\rangle$ 中, Θ 是反线性算子, 我们不能将它作用于左矢 $\langle\boldsymbol{r}|$.

于是我们需要另找素材确定位置表象中的波函数在时间反演后的形式. 设想粒子的哈密顿量是时间反演不变的, 即 $H = \Theta H \Theta^{-1}$. 实际上, 只要粒子的势能是实函数, H 就是时间反演不变的, 因为 P^2 在时间反演下不变. 考察时间反演变换对 Schrödinger 方程的影响. 变换前的方程是

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} = H\Psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{21}$$

用 Θ 作用方程的两端,

$$\Theta i\hbar \frac{\partial \Psi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} = \Theta H \Psi(\boldsymbol{r}, t)$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t}[\Theta\Psi(\boldsymbol{r}, t)] = \Theta H \Theta^{-1} \Theta \Psi(\boldsymbol{r}, t) = H\Theta\Psi(\boldsymbol{r}, t)$$

令 $\Psi'(\boldsymbol{r}, t) = \Theta\Psi(\boldsymbol{r}, t)$, 这是时间反演后的波函数. 容易看出,

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) \text{ 满足 Schrödinger 方程} \Longrightarrow \Psi'(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{-t}) \text{ 满足 Schrödinger 方程} \tag{22}$$

另一方面, 对方程 (21) 取复共轭, 有

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi^*(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} = H\Psi^*(\boldsymbol{r}, t)$$

显然

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) \text{ 满足 Schrödinger 方程} \Longrightarrow \Psi^*(\boldsymbol{r}, -t) \text{ 满足 Schrödinger 方程} \tag{23}$$

从(22), (23) 两式, 可以认为 $\Psi'(\boldsymbol{r}, -t) = \Psi^*(\boldsymbol{r}, -t)$, 也就是

$$\Theta\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \Psi^*(\boldsymbol{r}, t) \tag{24}$$

在位置表象中, 时间反演变换被表示为对波函数的复共轭. 以后, 我们将复共轭变换记作 K. 两次复共轭变换的效果是恒等变换, $K^2 = \mathbb{1}$, 所以 $K^{-1} = K$.

还可以再考虑一下轨道角动量的本征态 $|\ell, m\rangle$, 在位置表象中的表示是球谐函数 $Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$. 我们知道

$$Y^*_{\ell,m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{\ell,-m}(\theta, \phi)$$

因此在时间反演变换下,

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \longrightarrow \Theta Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = Y^*_{\ell,m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{\ell,-m}(\theta, \phi)$$

或者说,

$$|\ell, m\rangle \longrightarrow \Theta\,|\ell, m\rangle = (-1)^m\,|\ell, m\rangle$$

动量表象　在动量表象中, 量子态 $|\psi\rangle$ 表示为

$$|\psi\rangle = \int \mathrm{d}^3 p\ \psi(\boldsymbol{p})\,|\boldsymbol{p}\rangle$$

用 Θ 作用于 $|\psi\rangle$

$$\Theta\,|\psi\rangle = \Theta \int \mathrm{d}^3p\ \psi(\boldsymbol{p})\,|\boldsymbol{p}\rangle = \int \mathrm{d}^3p\ \psi^*(\boldsymbol{p})\Theta\,|\boldsymbol{p}\rangle$$

现在的问题是 $\Theta\,|\boldsymbol{p}\rangle$ =?

可以回到位置表象, 考虑动量的本征向量 $|p_x\rangle$ 在位置表象中的表示, 有

$$\begin{aligned}
\Theta\,|p_x\rangle &= \Theta \int \mathrm{d}x\ \ |x\rangle\,\langle x|p_x\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \mathrm{d}x\ \Theta\big(\,|x\rangle\, e^{ip_x x/\hbar}\big) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \mathrm{d}x\ \ |x\rangle\,\Theta\big(e^{ip_x x/\hbar}\big) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \mathrm{d}x\ \ |x\rangle\, e^{-ip_x x/\hbar} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \mathrm{d}x\ \ |x\rangle\,\langle x| - p_x\rangle = |-p_x\rangle
\end{aligned}$$

所以 $\Theta\,|\boldsymbol{p}\rangle = |-\boldsymbol{p}\rangle$. 量子态在时间反演下的变换是,

$$\Theta\,|\psi\rangle \xlongequal{\text{在动量表象中}} \int \mathrm{d}^3p\ \psi^*(\boldsymbol{p})\,|-\boldsymbol{p}\rangle \tag{25}$$

或者说,

$$\Theta\psi(\boldsymbol{p}) = \psi^*(-\boldsymbol{p}) \tag{26}$$

与位置表象中的变换形式 (24) 相比, 动量空间中的变换不仅要有复共轭, 而且还要改变动量的方向. 正如前面提到的, 时间反演变换实际上是运动的反演. 还需要注意的是, 时间反演变换的具体形式依赖于表象, Θ 在位置表象和动量表象中的形式是不同的.

自旋量子态

对于自旋角动量 $\boldsymbol{S}$, 在时间反演变换下

$$\Theta\boldsymbol{S}\Theta^{-1} = -\boldsymbol{S} \tag{27}$$

因为 Θ 是反酉算子, 所以对 $\boldsymbol{S}$ 的矩阵元有复共轭操作. 注意到 S_x 和 S_z 都是实矩阵, 在复共轭操作下是不变的; 而 S_y 的矩阵元是纯虚数, 复共轭变换后出现一个整体的负号. 但是, 仅仅对 $\boldsymbol{S}$ 进行复共轭变换 K 不能满足 (27),

$$KS_xK = S_x, \quad KS_yK = -S_y, \quad KS_zK = S_z$$

S_y 的变换满足 (27) 式的要求, 但是 S_x 和 S_z 则不满足. 需要在 K 的基础上添加另一个变换, 记作 U. 这个变换应该体现如下结果,

$$US_xU^{-1} = -S_x, \quad US_yU^{-1} = S_y, \quad US_zU^{-1} = -S_z$$

容易想到这样的变换, 绕 y 轴旋转角度 π 可以达到这个目的.

$$U = e^{-i\pi S_y/\hbar}$$

这是一个酉变换, 它的具体形式依赖于自旋角动量量子数 s. 综上, 时间反演变换体现在自旋角动量上的具体形式是

$$\Theta = e^{-i\pi S_y/\hbar}\, K \tag{28}$$

分析 Θ^2 的性质. 直观上说, 连续两次作时间反演变换, 其效果应该是仅仅改变量子态的相位, 即

$$\Theta^2 \left|\psi\right\rangle = c \left|\psi\right\rangle, \quad |c| = 1 \tag{29}$$

下面来确定 c.

$$\Theta^3 \left|\psi\right\rangle = \Theta(\Theta^2 \left|\psi\right\rangle) = \Theta(c \left|\psi\right\rangle) = c^* \Theta \left|\psi\right\rangle$$

再将 Θ^2 作用于 $\left|\psi\right\rangle + \Theta \left|\psi\right\rangle$. 一方面, 把叠加形式 $\left|\psi\right\rangle + \Theta \left|\psi\right\rangle$ 视作某个态矢量, 在 Θ^2 的变换下应该形如 (29) 式,

$$\Theta^2(\left|\psi\right\rangle + \Theta \left|\psi\right\rangle) = c'(\left|\psi\right\rangle + \Theta \left|\psi\right\rangle), \quad |c'| = 1 \tag{30}$$

另一方面, 虽然 Θ 是反线性算子, 但是 Θ^2 是线性算子, 所以

$$\Theta^2(\left|\psi\right\rangle + \Theta \left|\psi\right\rangle) = \Theta^2 \left|\psi\right\rangle + \Theta^3 \left|\psi\right\rangle = c \left|\psi\right\rangle + c^* \Theta \left|\psi\right\rangle \tag{31}$$

(30) 和 (31) 两式对于任意的 $\left|\psi\right\rangle$ 都应该成立, 所以有

$$c = c' = c^* \Longrightarrow c = \pm 1$$

也就是说

$$\Theta^2 \left|\psi\right\rangle = \pm \left|\psi\right\rangle \tag{32}$$

这一结果不同于空间反射变换, $\Pi^2 = \mathbb{1}$. 与 (32) 式类似的是 2π 角度的旋转变换. 实际上,

$$\begin{aligned}
\Theta^2 &= e^{-i\pi S_y/\hbar} K \; e^{-i\pi S_y/\hbar} \; K \\
&= e^{-i\pi S_y/\hbar} e^{+i\pi(-S_y)/\hbar} \\
&= e^{-i2\pi S_y/\hbar} \\
&= \text{绕 } y \text{ 的 } 2\pi \text{ 角度的旋转变换}
\end{aligned}$$

以前我们讨论过绕任意方向的 2π 旋转 $U(\boldsymbol{n}, 2\pi)$, 结论是

$$U(\boldsymbol{n}, 2\pi) = \begin{cases} +1, & s \text{ 为整数} \\ -1, & s \text{ 为半整数} \end{cases}$$

现在, 对于 Θ^2, 同样有

$$\Theta^2 = \begin{cases} +1, & s \text{ 为整数} \\ -1, & s \text{ 为半整数} \end{cases}$$

对自旋 1/2 量子态的时间反演变换 量子态的密度矩阵

$$\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})$$

其中 $\boldsymbol{r}$ 是 Bloch 向量. 时间反演变换使得 $\boldsymbol{\sigma} \to -\boldsymbol{\sigma}$, 于是

$$\rho \longrightarrow \rho' = \frac{1}{2}(\mathbb{1} - \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})$$

因此, 对于自旋 1/2 的量子态, 时间反演变换看起来就像是对 Bloch 向量作空间反射变换.

对密度矩阵的转置变换也是离散变换,

$$\rho \longrightarrow \rho^T = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + r_x\sigma_x - r_y\sigma_y + r_z\sigma_z)$$

转置变换在本质上是对 Bloch 向量的空间反射变换, 或者说, 在本质上是时间反演变换.

正定变换和完全正定变换

与转置变换有关的一个话题是正定变换和完全正定变换.

量子系统的演化过程的数学表示就是量子态的变换. 我们用 $\mathcal{T}$ 表示对量子态的变换. 系统的初态记作 ρ, 变换后的结果结果是 $\mathcal{T}(\rho)$. 由于 ρ 是 Hilbert 空间上的算子, 对算子的变换被称作超算子, $\mathcal{T}$ 就是一个超算子. 让我们看看超算子 $\mathcal{T}$ 应该具有哪些性质.

首先, 变换后的结果 $\mathcal{T}(\rho)$ 应该是厄米的, 而且是正定的, 否则 $\mathcal{T}(\rho)$ 不满足密度算子的基本要求. 在这个意义上, 我们要求变换 $\mathcal{T}$ 是一个**正定变换**, 即, 它把任何正定算子变换为正定算子. 其次, 变换后的结果 $\mathcal{T}(\rho)$ 的迹不能大于 1, 即 $\mathrm{Tr}[\mathcal{T}(\rho)] \leqslant 1$, 否则变化过程不满足几率守恒的要求. 看起来 $\mathrm{Tr}[\mathcal{T}(\rho)] < 1$ 似乎也违反了几率守恒的要求, 但是, 如果允许对不同的变换后的结果进行选择, 那么$\mathrm{Tr}[\mathcal{T}(\rho)] < 1$ 是合理的. 例如, 对 ρ 进行投影测量, 如果对测量后的结果不作任何选择, 那么测量后系统的态是 $\sum_i \Pi_i\rho\Pi_i$, 测量前后的量子态的迹均为 1, 保持不变. 如果我们选择其中某个结果 j, 则相应的过程就是 $\rho \longrightarrow \Pi_j\rho\Pi_j$. 从态的变换角度看, 变换后的结果的迹小于 1, $\mathrm{Tr}(\Pi_j\rho\Pi_j) = \mathrm{Tr}(\Pi_j\rho) < 1$.

但是, 正定变换只是一个很宽泛的要求. 在涉及两体或多体系统的量子态的时候, 经常会遇到局部变换, 即对其中的某个子系统的变换. 例如, 对于由 A 和 B 两个粒子组成的两体系统, 仅仅对 A 粒子进行某个操作, 记作 $\mathcal{T}^A$, 整体的量子态经历的变换是 $\rho^{AB} \longrightarrow (\mathcal{T}^A \otimes \mathbb{1}^B)(\rho^{AB})$, 这里 $\mathbb{1}^B$ 表示对 B 的变换是恒等变换. 在这种情形下, 不是所有的正定变换 $\mathcal{T}^A$ 都能保证 $\mathcal{T}^A \otimes \mathbb{1}^B$ 也是正定变换.

我们用一个具体而简单的例子说明这个现象. 矩阵的转置是正定变换. 考虑一个 $2\otimes 2$ 系统的纯态 $|\Psi\rangle = c_0|00\rangle + c_1|11\rangle$, 这里设 c_0, c_1 为非零实数, 且 $c_0^2 + c_1^2 = 1$. 对其中的第一个粒子进行转置变换, 对于整体而言就是部分转置. 写出 $|\Psi\rangle$ 的密度算子 $\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, 部分转置后的形式是

$$\Psi^{T_A} = \begin{pmatrix} c_0^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_0c_1 & 0 \\ 0 & c_0c_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_1^2 \end{pmatrix}$$

矩阵 Ψ^{T_A} 有一个负的本征值 $-|c_0c_1| < 0$, 故 Ψ^{T_A} 不是一个真正的密度算子. 虽然转置变换 T 是正定变换, 但是部分转置变换 $T\otimes\mathbb{1}$ 不是正定变换, 或者说, 转置变换不是完全正定变换.

定义 (完全正定变换) 设变换 $\mathcal{T}$ 是系统的 Hilbert 空间 $\mathscr{H}^S$ 上的正定变换, $\mathbb{1}^K$ 是任意的 Hilbert 空间 $\mathscr{H}^K$ 上的恒等变换. 当且仅当 $\mathcal{T}\otimes\mathbb{1}^K$ 是正定变换, $\mathcal{T}$ 是完全正定变换. □

对于完全正定变换, 有如下重要定理.

定理 任何完全正定变换可以用 Kraus 算子表示, 即 $\rho \longrightarrow \mathcal{T}(\rho)$ 可以表示为

$$\rho \longrightarrow \sum_i K_i\rho K_i^\dagger, \quad \sum_i K_i^\dagger K_i \leqslant \mathbb{1}^S \tag{33}$$

□

上式中的 $\sum_i K_i^\dagger K_i \leqslant \mathbb{1}^S$ 的意思是, $\sum_i K_i^\dagger K_i - \mathbb{1}^S$ 是负定的. 如果 $\sum_i K_i^\dagger K_i = \mathbb{1}^S$, 则变换是保迹的. 保迹的完全正定变换又被称为**量子通道** (quantum channel).

第十章　微扰论 I

Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial\left|\Psi(t)\right\rangle}{\partial t}=H\left|\Psi(t)\right\rangle \tag{1}$$

能够精确求解的情形很少. 如果 H 显含时间, 则更难求解.

设

$$H=H_0+V \tag{2}$$

H_0 未必是某个 Hamilton 量, 不过, 我们假设 H_0 的本征问题易于得到.

$$H_0\left|n^{(0)}\right\rangle=E_n^{(0)}\left|n^{(0)}\right\rangle \tag{3}$$

这里 n 泛指量子系统的量子数, 可以是一个数, 也可以是若干个数, 比如 n,ℓ,m.

假设 H_0 的本征值是离散的. V "很小", 视作微扰.

不含时微扰, 非简并情形

微扰项 V 与时间无关. 希望得到本征方程的近似解,

$$(H_0+V)\left|n\right\rangle=E_n\left|n\right\rangle$$

考虑如下形式

$$(H_0+\lambda V)\left|n\right\rangle=E_n\left|n\right\rangle \tag{4}$$

其中, λ 可以从 0 连续地变化到 1. 引入 λ 意谓着可以 "控制" 微扰项 V 对量子系统的影响程度.

在详细讨论之前, 我们通过下面的例子说明参数 λ 的作用和意义.

考虑一个两能级系统, 它的 Hamilton 量是

$$H=\begin{pmatrix}E_1^{(0)} & \lambda V_{12}\\ \lambda V_{21} & E_2^{(0)}\end{pmatrix} \tag{5}$$

设 V_{12} 和 V_{21} 都是实数, 而 H 是厄密的, 故 $V_{12}=V_{21}$. 这个 Hamilton 量的本征方程易解, 本征值是

$$\left\{\begin{array}{c} E_1 \\ E_2 \end{array}\right\} = \frac{E_1^{(0)}+E_2^{(0)}}{2} \pm \left[\frac{\left(E_1^{(0)}-E_2^{(0)}\right)^2}{4}+\lambda V_{12}^2\right]^{1/2}$$

设想 $H=H_0+\lambda V$, 其中

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix}, \quad \lambda V = \begin{pmatrix} 0 & \lambda V_{12} \\ \lambda V_{21} & 0 \end{pmatrix}$$

将 λV 当作微扰项, 依据近似的观点, 本征值 E_1 和 E_2 应该按照 λ 的幂次展开. 当 $\lambda \ll |E_1^{(0)}-E_2^{(0)}|$ 时, 有

$$E_1 = E_1^{(0)} + \frac{\lambda^2 V_{12}^2}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}} + \cdots$$

$$E_2 = E_2^{(0)} + \frac{\lambda^2 V_{12}^2}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}} + \cdots$$

可见参数 λ 可作为能量本征值的级数展开的一个标记, 其幂次标志了展开项的阶数, 亦可说是表示了近似解的精确程度. 令 $\lambda=1$, 便可得到关于 Hamilton 量 H_0+V 的本征值的级数展开. 一般来说, 要保证这样的级数展开的有效性, 须有条件

$$|V_{12}| \ll \left|E_1^{(0)}-E_2^{(0)}\right|$$

这个关系也是可以将 V 当作 "微扰" 项来处理的条件.

将 E_n 展开,

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots$$

本征态也作类似的展开,

$$|n\rangle = \left|n^{(0)}\right\rangle + \lambda\left|n^{(1)}\right\rangle + \lambda^2\left|n^{(2)}\right\rangle + \cdots$$

代入 (4), 有

$$\lambda^0 \text{ term: } \left(H_0-E_n^{(0)}\right)\left|n^{(0)}\right\rangle = 0 \tag{6}$$

$$\lambda^1 \text{ term: } \left(H_0-E_n^{(0)}\right)\left|n^{(1)}\right\rangle = \left(E_n^{(1)}-V\right)\left|n^{(0)}\right\rangle \tag{7}$$

$$\lambda^2 \text{ term: } \left(H_0-E_n^{(0)}\right)\left|n^{(2)}\right\rangle = \left(E_n^{(1)}-V\right)\left|n^{(1)}\right\rangle + E_n^{(2)}\left|n^{(0)}\right\rangle \tag{8}$$

$$\cdots\ \cdots \tag{9}$$

$$\lambda^r \text{ term: } \left(H_0-E_n^{(0)}\right)\left|n^{(r)}\right\rangle = \left(E_n^{(1)}-V\right)\left|n^{(r-1)}\right\rangle + E_n^{(2)}\left|n^{(r-2)}\right\rangle + \cdots + E_n^{(r)}\left|n^{(0)}\right\rangle \tag{10}$$

λ^0 项是未受扰情形, 0-级近似. $\{\,|n^{(0)}\rangle\,\}$ 构成一组基, $|n\rangle$ 可以展开为

$$|n\rangle = \sum_{n'} \left|n'^{(0)}\right\rangle \left\langle n'^{(0)}\,\middle|\, n\right\rangle$$

虽然目前尚未得到 $|n\rangle$, 但是, 假设 $|n\rangle$ 满足以下条件

$$\left\langle n^{(0)}\middle|\, n\right\rangle = 1. \tag{11}$$

于是有

$$\left\langle n^{(0)}\middle|\, n\right\rangle = \left\langle n^{(0)}\middle|\, n^{(0)}\right\rangle + \lambda \left\langle n^{(0)}\middle|\, n^{(1)}\right\rangle + \lambda^2 \left\langle n^{(0)}\middle|\, n^{(2)}\right\rangle + \cdots = 1.$$

上式对于任意的 $\lambda \in [0,1]$ 均成立, 所以

$$\left\langle n^{(0)}\middle|\, n^{(r)}\right\rangle = 0, \quad r > 0. \tag{12}$$

这表明高级修正项 —— 即若干个 $|n^{(r)}\rangle$ $(r>0)$ —— 与 0 级项是正交的. 对这一条件的理解是, 对态矢量的 "长度" 的改变不能算作修正, 因为量子态是要归一化的, 合理的修正应该体现在态矢量的 "横向" 变化上.

1 级修正项

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{n'\neq n} a_{n'}^{(1)} \left|n'^{(0)}\right\rangle \tag{13}$$

求和中不包含 $n' = n$ 这一项.

代入 λ^1 项的方程 (7), 并用 $|m^{(0)}\rangle$ 在方程两边作内积,

$$(H_0 - E_n^{(0)})\,|n^{(1)}\rangle = (E_n^{(1)} - V)\,|n^{(0)}\rangle$$

$$\sum_{n'\neq n} a_{n'}^{(1)} \left\langle m^{(0)}\middle|\, (H_0 - E_n^{(0)})\,\middle|n'^{(0)}\right\rangle = \left\langle m^{(0)}\middle|\, (E_n^{(1)} - V)\,\middle|n^{(0)}\right\rangle$$

$$V_{mn} := \left\langle m^{(0)}\middle|\, V\,\middle|n^{(0)}\right\rangle$$

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) a_m^{(1)} = E_n^{(1)}\delta_{mn} - V_{mn}$$

当 $m = n$ 时, 得到能量本征值的一级修正,

$$E_n^{(1)} = \left\langle n^{(0)}\middle|\, V\,\middle|n^{(0)}\right\rangle = V_{nn}. \tag{14}$$

当 $m \neq n$ 时, 得到系数 $a_m^{(1)}$,

$$a_m^{(1)} = \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{15}$$

代入 (13), 有

$$|n^{(1)}\rangle = \sum_{m\neq n} \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\, |m^{(0)}\rangle\,.$$

在一级近似下, 能级的近似值

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)}.$$

本征态的近似形式

$$|n\rangle = \left(|n^{(0)}\rangle + |n^{(1)}\rangle \right) \times \text{归一化因子}$$

2 级近似

有时候一级修正项为零 (例如前面的例子 (5)), 或者一级修正的精确度不够好, 那么必要考虑二级修正. 由 λ^2 项的方程(8), 有

$$(H_0 - E_n^{(0)})\,|n^{(2)}\rangle = (E_n^{(1)} - V)\,|n^{(1)}\rangle + E_n^{(2)}\,|n^{(0)}\rangle$$

$$\langle n^{(0)}|\,(H_0 - E_n^{(0)})\,|n^{(2)}\rangle = \langle n^{(0)}|\,(E_n^{(1)} - V)\,|n^{(1)}\rangle + \langle n^{(0)}|\,E_n^{(2)}\,|n^{(0)}\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)}|\,V\,|n^{(1)}\rangle$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n} \frac{\langle m^{(0)}|\,V\,|n^{(0)}\rangle\,\langle n^{(0)}|\,V\,|m^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m\neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$|n^{(2)}\rangle = \sum_{\ell\neq n}\sum_{m\neq n} \frac{V_{m\ell}V_{\ell n}}{\left(E_n^{(0)} - E_\ell^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)}\,|m^{(0)}\rangle - \sum_{m\neq n} \frac{V_{nn}V_{mm}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)^2}\,|m^{(0)}\rangle$$

能级的一级修正依赖于微扰项的对角矩阵元, 二级修正则取决于微扰项的非对角元.

不含时微扰, 简并情形

非简并情形下的计算表明, 微扰论的主要内容是考虑微扰项 V 的矩阵元.

在有简并的时候, 需要构造简并子空间的基向量, 使 V 在各个简并子空间中是对角的.

$$H_0\,|n^{(0)}, \mu_n\rangle = E_n^{(0)}\,|n^{(0)}, \mu_n\rangle$$

$\mu_n = 1, 2, \cdots, g_n$, g_n 为能级 $E_n^{(0)}$ 的简并度.

$$\langle n^{(0)}, \mu_n|\,n'^{(0)}, \mu_{n'}\rangle = \delta_{nn'}\delta_{\mu_n\mu_{n'}}$$

所有的 $\left\{\,|n^{(0)}, \mu_n\rangle\,\right\}$ 张开了整个 Hilbert 空间.

对于某个给定的 n, 有简并子空间 $\mathscr{H}_n$, 基向量是

$$|n^{(0)},1\rangle\,,|n^{(0)},2\rangle\,,\cdots\,,|n^{(0)},g_n\rangle\,.$$

0 级修正的本征态可以展开为 (省略 μ 的下标 n)

$$|n^{(0)}\rangle=\sum_\mu c_{n,\mu}\,|n^{(0)},\mu\rangle$$

展开系数 $c_{n,\mu}$ 暂且是未知的. 考虑 (7) 式, 并且用 $|n^{(0)},\nu\rangle$ 作内积,

$$(H_0-E_n^{(0)})\,|n^{(1)}\rangle=(E_n^{(1)}-V)\,|n^{(0)}\rangle$$

$$\langle n^{(0)},\nu|\,(H_0-E_n^{(0)})\,|n^{(1)}\rangle=\langle n^{(0)},\nu|\,(E_n^{(1)}-V)\,|n^{(0)}\rangle=\sum_\mu c_{n,\mu}\,\langle n^{(0)},\nu|\,\left(E_n^{(1)}-V\right)|n^{(0)},\mu\rangle$$

$$(E_n^{(0)}-E_n^{(0)})\,\langle n^{(0)},\nu|\,n^{(1)}\rangle=\sum_\mu c_{n,\mu}\Big[E_n^{(1)}\delta_{\nu,\mu}-\langle n^{(0)},\nu|\,V\,|n^{(0)},\mu\rangle\Big]$$

$$\sum_\mu c_{n,\mu}\,\langle n^{(0)},\nu|\,V\,|n^{(0)},\mu\rangle=c_{n,\nu}E_n^{(1)}$$

$$V\sum_\mu c_{n,\mu}\,|n^{(0)},\mu\rangle=E_n^{(1)}\sum_\nu c_{n,\nu}\,|n^{(0)},\nu\rangle \tag{16}$$

注意到 $\sum_\mu c_{n,\mu}\,|n^{(0)},\mu\rangle\in\mathscr{H}_n$. 方程 (16) 实际上就是 V 在子空间 $\mathscr{H}_n$ 中的本征方程. 能量本征值的一级修正 $E_n^{(1)}$ 是由该方程决定的本征值. 方程 (16) 给出的本征值的个数小于或等于 $\mathscr{H}_n$ 的维数, 记作 $E_{n,\lambda}^{(1)}$, 于是, 在一级近似下

$$E_n=E_n^{(0)}+E_{n,\lambda}^{(1)} \tag{17}$$

如果能量的一级修正不为零, 那么原先简并的能级由于微扰的影响将出现分裂, 或者说, 微扰 (部分地) 解除了简并. 如果本征值的个数 (即 λ 的个数) 等于简并子空间 $\mathscr{H}_n$ 的维数, 那么微扰项完全解除了简并.

每一个本征值 $E_{n,\lambda}^{(1)}$ 对应于一个本征向量, 记作 $|n,\lambda\rangle$, 它们都是 $|n^{(0)},\mu\rangle$ 的线性组合, 也都属于 $\mathscr{H}_n$. $|n,\lambda\rangle$ 就是一级近似下的 H 的 n 能级的本征态.

很多情形下, 量子体系的能级出现简并的原因是体系具有某种对称性. 例如, 对于力学量 L^2, 即角动量的平方, 它的本征态可以用角动量量子数 ℓ 来标记, 记作 $|\ell\rangle$, 而角动量的 z 分量 L_z 和 L^2 具有共同的本征态, 于是引入量子数 m 以更全面地描述量子态. 对于 L^2 而言, 具有本征值 $\ell(\ell+1)\hbar$ 的本征态一共有 $2\ell+1$ 个, 它们是简并的. 简并的起因可以解释为绕 z 方向的旋转变换不会改变 L^2 的本征值, 或者更严格地说体系关于 z 方向的旋转变换是对称的. 在以后将要讨论的问题中, 我们会看到, 引入别种形式的力学量或者相互作用, 将破坏这种对称性, 从而导致的本征值的分裂.

第十章　微扰论 Ⅱ

前面讨论了非含时微扰, 分两种情况: 无简并和有简并.

无简并

微扰项 V 的对角项给出了能级大小的一级修正, 非对角项给出二级修正.

有简并

考虑微扰项在简并子空间中的本质问题, 部分或完全地解除简并.

下面讨论具体的应用, 主要关注简并情形.

弱电场中的原子, 线性 Stark 效应

考虑弱电场中的氢原子.

$$H=\frac{P^2}{2M_e}-\frac{e^2}{R}-e\mathcal{E}Z$$

最后一项为微扰项,

$$H'=-e\mathcal{E}Z$$

氢原子的基态是 $|100\rangle$, 偶宇称, 无简并. H' 的期望值为零, 没有能级的一级修正.

考虑第一激发态, $n=2$, 四重简并,

$$|200\rangle\,,\quad |211\rangle\,,\quad |210\rangle\,,\quad |21-1\rangle$$

Z 的非零的矩阵元

$$\langle 200|\,Z\,|210\rangle\neq 0$$

H' 的矩阵形式

H'	200	211	210	$21-1$
200	0	0	$\star$	0
211	0	0	0	0
210	$\star$	0	0	0
$21-1$	0	0	0	0

这表明, H' 的介入对两维子空间 $\{|211\rangle, |21-1\rangle\}$ 没有影响. 只需要在另一个两维子空间 $\{|200\rangle, |210\rangle\}$ 考虑 H' 带来的修正.

H' 的本征值, 由以下方程确定,

$$\begin{vmatrix} -e\mathcal{E}\langle 200|Z|200\rangle - \lambda & -e\mathcal{E}\langle 200|Z|210\rangle \\ -e\mathcal{E}\langle 210|Z|200\rangle & -e\mathcal{E}\langle 210|Z|210\rangle - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\lambda = \pm e\mathcal{E}\langle 200|Z|210\rangle$$

$$\psi_{200}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}}\left(1-\frac{r}{2a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\psi_{210}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}\cos\theta$$

$$\langle 200|Z|210\rangle = -3a_0$$

- Stark 效应导致第一激发态中 $m=0$ 的能级分裂为两条, $m=\pm 1$ 的能级没有改变, 微扰部分地解除了简并.
- 对原先能级的一级修正是 $\pm 3ea_0\mathcal{E}$, 与外加电场的大小呈线性关系, 在这个意义上, 称之为线性 Stark 效应.
- 对本征函数的修正是

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{200} \mp \psi_{210})$$

以上只是讨论了 Stark 效应的线性修正, 关注的也只是简并情形, 更一般的分析较为繁杂, 可以参看 [1].

自旋-轨道耦合

自旋-轨道耦合带来的对能级的修正实际上是相对论效应的一个组成部分, 在下一节中讨论相对论效应, 这里先单独讨论自旋-轨道耦合.

在氢原子中考虑了电子的自旋, Hamilton 量表示为

$$H = \frac{P^2}{2M_e} + V(r) + W(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{1}$$

其中用电子质量 M_e 代替了氢原子的折合质量, $W(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{\sigma}$ 是自旋-轨道耦合项, $\boldsymbol{\sigma}$ 是向量形式的 Pauli 矩阵, $\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$. 严格的做法属于相对论量子力学的内容, 这里的讨论是半经典的处

理方式.

未受扰的 Hamilton 量

$$H_0 = \frac{P^2}{2M_e} + V(R)$$

本征向量 $|n\ell m_\ell\rangle$, 本征值是 $E_n^{(0)}$, $H_0 |n\ell m_\ell\rangle = E_n^{(0)} |n\ell m_\ell\rangle$.

考虑到自旋自由度, 将未受扰的本征函数记作

$$R_{n\ell}Y_{\ell m_\ell}\alpha, \quad R_{n\ell}Y_{\ell m_\ell}\beta$$

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

当 ℓ 给定时, 简并度是 $2(2\ell+1)$.

在位置表象中, 哈密顿量 H 的本征方程写为

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_e}\nabla^2 + V(r) + W(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{\sigma}\right]\begin{pmatrix}\psi_1 \\ \psi_2\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}\psi_1 \\ \psi_2\end{pmatrix}$$

在简并情形下处理微扰问题的主要任务是计算微扰项在简并子空间中的本征值和本征向量.

注意到 $\left\{H_0, L^2, S^2, L_z, S_z\right\}$ 构成彼此对易的力学量的集合, 可以选择如下形式的基向量

$$\left\{H_0, L^2, S^2, L_z, S_z\right\} \text{ 的共同本征向量 } \left|n, \ell, \frac{1}{2}, m_\ell, m_s\right\rangle \tag{2}$$

在这组基向量上, 可以写出 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 的矩阵元, 例如

$$\langle m_\ell, m_s|L_x \otimes S_x|m_\ell, m_s\rangle = \langle m_\ell|L_x|m_\ell\rangle \ \langle m_s|S_x|m_s\rangle$$

对于特定的轨道角动量量子数 ℓ, 利用以前得到的 L_x 的矩阵形式, 不难算出上面的结果, 但是显然有些繁琐.

选择对易力学量的集合 $\left\{H_0, L^2, S^2, J^2, J_z\right\}$

共同本征向量

$$\left|n, \ell, \frac{1}{2}, j, m\right\rangle$$

自旋-轨道耦合项

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$$

具有对角形式, 因此能级的一级修正就是对角项.

能级的一级修正 ΔE:

$$\begin{aligned}
\Delta E &= \left\langle n, \ell, \frac{1}{2}, j, m \middle| W(\boldsymbol{r})\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{\sigma} \middle| n, \ell, \frac{1}{2}, j, m \right\rangle \\
&= \frac{2}{\hbar}\left\langle n, \ell, \frac{1}{2}, j, m \middle| W(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} \middle| n, \ell, \frac{1}{2}, j, m \right\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar}\left\langle n, \ell, \frac{1}{2}, j, m \middle| W(r)(J^2 - L^2 - S^2) \middle| n, \ell, \frac{1}{2}, j, m \right\rangle \\
&= \left\{ \begin{array}{c} \ell\hbar \\ -(\ell+1)\hbar \end{array} \right\} \int_0^\infty |R_{n\ell}(r)|^2 W(r) r^2 dr, \quad \begin{array}{l} j = \ell + \frac{1}{2} \\ j = \ell - \frac{1}{2} \end{array}
\end{aligned}$$

因此, 如果知道了 $W(r)$, 就可以计算自旋-轨道耦合带来的能级的一级修正. 而且, 上述结果表明, 原先的能级 $E_n^{(0)}$ 分裂为两条, 分别对应于不同的总角动量量子数 j. 自旋-轨道耦合的引入只是部分地而不是完全地解除了简并.

考虑 $\boldsymbol{W(r)}$

$W(r)$ 来自于原子核的库仑场与运动中的电子的内禀磁矩的相互作用.
以下是经典电动力学的处理, 参看 J. D. Jackson, Classical electrodynamics (3ed., Wiley, 1999) 第 11 章, 并注意其中使用的单位制是 Gauss 单位制.

选择随电子一起运动的参考系, 电子感受到的外磁场是

$$\boldsymbol{B}' \approx \boldsymbol{B} - \frac{\boldsymbol{v}}{c}\times\boldsymbol{E}, \quad \text{忽略 } v^2/c^2 \text{ 及更高阶的项}$$

目前只有库仑场 $\boldsymbol{E}$, 磁场 $\boldsymbol{B} = 0$,

$$e\boldsymbol{E} = -e\nabla\phi = -\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{dV(r)}{dr}, \quad e < 0$$

由此导致的 Hamilton 量是

$$\begin{aligned}
H_{\text{magn}} &= -\boldsymbol{\mu}\cdot\left(-\frac{\boldsymbol{v}}{c}\times\boldsymbol{E}\right) \\
&= \frac{e}{M_e c^2}\boldsymbol{s}\cdot(\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{E}) \\
&= -\frac{1}{M_e c^2}\boldsymbol{s}\cdot\left(\boldsymbol{v}\times\frac{\boldsymbol{r}}{r}\frac{dV(r)}{dr}\right) \\
&= -\frac{1}{M_e^2 c^2}\boldsymbol{s}\cdot\left(M_e\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{r}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\right) \\
&= \frac{1}{M_e^2 c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{s}
\end{aligned}$$

基于相对论的运动学方面的考虑, 还需要添加 Thomas 进动项,

$$H_{\text{Thomas}} = -\frac{1}{2M_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\boldsymbol{\ell}\cdot\boldsymbol{s}$$

在量子情形下

自旋-轨道相互作用项

$$H_{\text{S-L}} = \frac{1}{2M_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$$

也就是说,

$$W(r) = \frac{\hbar}{4M_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}$$

注意到 $V(r) = -\frac{e^2}{r}$, 所以 $W(r) > 0$, 所以, 对应于 $j = \ell + \frac{1}{2}$ 的能级修正 $\Delta E > 0$; 而对应于 $j = \ell - \frac{1}{2}$ 的能级修正 $\Delta E < 0$.

估算 $W(r)$ 的期望值 严格的结果不过是计算 $\langle r^{-3}\rangle$, 这里作量级估计.

$$\langle W(r)\rangle = \frac{\hbar}{4M_e^2c^2}e^2\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle$$

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle \approx \frac{1}{n^3a_0^3} = \left(\frac{e^2M_e}{\hbar^2 n}\right)^3, \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2M_e}$$

$$\langle\hbar W\rangle \approx \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2\frac{1}{n}|E_n^{(0)}|, \quad E_n^{(0)} = -\frac{e^4M_e}{2\hbar^2n^2}$$

令

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137.037} \tag{3}$$

α 被称为精细结构常数.

$$\frac{\Delta E_{\ell+1/2} - \Delta E_{\ell-1/2}}{E_n^{(0)}} \approx \frac{\alpha^2}{n}$$

表明自旋-轨道耦合导致的能级修正和能级分裂的间距与未受扰能级相比是 α^2 量级.

对于氢原子的本征态 $|n\ell m_\ell\rangle$, 如果 $\ell \neq 0$, 那么自旋-轨道耦合使得总角动量 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$ 的量子数 $j = \ell \pm \frac{1}{2}$, 从而能级的修正分别是 $\Delta E_{\ell\pm1/2}$, 原来的能级 E_n 分裂为两条能级, 分别是 $E_n + \Delta E_{\ell\pm1/2}$.

如果 $\ell = 0$, 即 $|n00\rangle$, 或者说 s 态, 那么不存在简并, 而且

$$\langle n00|\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}|n00\rangle = 0$$

表明自旋-轨道耦合不会对原子的 s 态产生影响. 但是, 属于相对论修正的其它因素 (稍后讨论) 会引起 s 态能级的移动.

在上面的讨论中, 看到了简并的部分解除. 例如, 对于氢原子的 $2p$ 态 $|21m_\ell\rangle$, 当考虑自旋的时候, 本来的简并度是 $2(2\ell+1)=6$. 自旋-轨道耦合项使得能级分裂为 $2P_{1/2}$ 和 $2P_{3/2}$. 对于 $j=\frac{1}{2}$, 仍有 2 重简并, 对于 $j=\frac{3}{2}$, 仍有 4 重简并. 为了能够看到进一步的简并解除, 考虑 Zeeman 效应.

1896 年, Zeeman 发现, 把原子放置在磁场中的时候, 光谱线会发生分裂

无自旋情形

$$H=\frac{1}{2M_e}\left(\boldsymbol{P}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+V(R)$$

然后考虑弱场近似和强场近似.

有自旋情形

$$H=\frac{1}{2M_e}\left(\boldsymbol{P}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+V(R)+\boldsymbol{\mu}_s\cdot\boldsymbol{B}$$

其中 $\boldsymbol{\mu}_s$ 是电子的自旋磁矩. 下面只讨论弱场近似.

上面的表达式仍然使用 Gauss 单位制.

无自旋情形

首先说说无自旋的情形. Hamilton 量是

$$\begin{aligned}
H&=\frac{1}{2M_e}\left(\boldsymbol{P}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+V(R)\\
&=\frac{P^2}{2M_e}-\frac{e}{2M_ec}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}-\frac{e}{2M_ec}\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{A}+\frac{e^2}{2M_ec^2}A^2+V(R)\\
&\xlongequal{\text{Coulomb gauge }\nabla\cdot\boldsymbol{A}=0}\frac{P^2}{2M_e}-\frac{e}{M_ec}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}+\frac{e^2}{2M_ec^2}A^2+V(R)
\end{aligned}$$

选择矢量势为 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})=\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{R})$

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{R})\cdot\boldsymbol{P}=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P})=\frac{1}{2}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}$$

$$H=\frac{P^2}{2M_e}-\frac{e}{2M_ec}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{e^2}{8M_ec^2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{R})^2+V(R)\tag{4}$$

弱场近似　忽略 H 中的 B^2 项.

$$H=H_0-\frac{e}{2M_ec}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}$$

$$H_0=\frac{P^2}{2M_e}+V(R)$$

H_0 的本征态 $|n\ell m_\ell\rangle$

设 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$, 则 $\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}=BL_z$

$$E^{(1)}_{n\ell m_\ell}=-\frac{e\hbar B}{2M_ec}m_\ell$$

磁场解除了 $2\ell+1$ 重简并

- 在 H 中, 被我们忽略的实际上是 A^2 项.
- 而 $\boldsymbol{A}$ 被选择为 $\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})$.
- 接着我们说, 在弱磁场情况下, 忽略 B^2 项.

如果 r 很大, 那么即使 B 很小, $(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})^2$ 也会非常大, 忽略这一项是存有疑问的. 对此的解释是, 波函数 $\psi_{n\ell m_\ell}$ 随径向距离呈指数衰减, 当 r 较大时, 被忽略的项的期望值很小.

强场近似　此时 H 中的 B^2 项不能忽略, 该项是

$$\frac{e^2}{8M_ec}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})^2=\frac{e^2}{8M_ec}(Br\sin\theta)^2$$

它的效果是将电子约束在沿 z 方向伸展的细长空间中.

如果磁场非常强, $V(r)$ 项应该被视作微扰项.

$$H=\underbrace{\frac{1}{2M_e}(P_x^2+P_y^2)-\frac{e}{2M_ec}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{L}+\frac{e^2}{8M_ec^2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{R})}_{H_\perp}+\frac{P_z^2}{2M_e}+V(R)$$

$H_\perp$, L_z, P_z 彼此对易

在柱坐标中求解 $H_\perp$ 和 L_z 的共同本征函数

存在自旋的情形

考虑到电子的自旋, 在外磁场中氢原子的哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2M_e}\left(\boldsymbol{P}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+V(R)-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$$

实际上就是在无自旋的哈密顿量 (4) 式中添上自旋磁矩与磁场的相互作用项.

设磁场沿 z 方向, 即 $\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$. 类似于无自旋情形中的处理过程, 有如下形式的哈密顿量,

$$H=\frac{P^2}{2M_e}-\frac{eB}{2M_ec}L_z+\frac{e^2}{8M_ec^2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{R})^2+V(R)-\frac{eB}{M_ec}S_z$$

考虑弱场近似, 略去上式中的 B^2 项, 另外, 再添上自旋-轨道耦合项, 我们要讨论的哈密顿量是

$$H=\frac{P^2}{2M_e}+V(R)+\frac{2}{\hbar}W(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}-\frac{eB}{2M_ec}(g_LL_z+g_SS_z)\tag{5}$$

其中的微扰项是

$$H'=\frac{2}{\hbar}W(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}-\frac{eB}{2M_ec}(g_LL_z+g_SS_z)\tag{6}$$

自旋-轨道耦合项可以部分地解除简并, 将要看到的是, 由于外磁场的引入, 原先的简并彻底解除.

更一般地, 可以把 (6) 式的 H' 表示为

$$H' = \lambda \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} + \mu L_z + \nu S_z$$

其中 λ, μ 和 ν 是径向坐标 r 的实函数或实常数.

注意到 L^2 和 S^2 均与 H' 对易.

> 总角动量 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$, J^2 与 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 对易, 但是与 L_z 不对易, 与 S_z 也不对易.
>
> 就是说 J^2 与 H' 不对易.

虽然如此, 我们选择 (L^2, S^2, J^2, J_z) 作为对易力学量的集合, 它们的共同本征向量记作 $|\ell s j m\rangle$. 在这个表象中考虑 H' 的矩阵元.

$$H' = \frac{\lambda}{2}(J^2 - L^2 - S^2) + \mu J_z + (\nu - \mu) S_z \tag{7}$$

前两项的矩阵形式容易得到, 它们是对角的. 只需要计算 S_z 的矩阵形式.

$$s = \frac{1}{2}, \quad j = \ell \pm \frac{1}{2}$$

在基向量的表示 $\left|\ell \tfrac{1}{2} j m\right\rangle$ 中省略 ℓ 和 $\frac{1}{2}$

S_z 的矩阵元 $\langle j' m'| S_z |j m\rangle$

$|jm\rangle = |m_\ell m_s\rangle$ 的线性叠加, $m_s = \pm\dfrac{1}{2}$

$$\mathcal{Y}_\ell^{\ell+\frac{1}{2},m} = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{\ell + m + \frac{1}{2}}\, Y_\ell^{m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\ell - m + \frac{1}{2}}\, Y_\ell^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{Y}_\ell^{\ell-\frac{1}{2},m} = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \begin{pmatrix} -\sqrt{\ell - m + \frac{1}{2}}\, Y_\ell^{m-\frac{1}{2}} \\ \sqrt{\ell + m + \frac{1}{2}}\, Y_\ell^{m+\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

上述两个表达式的意思是:

$$\left|j = \ell + \tfrac{1}{2}, m\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \left(\sqrt{\ell + m + \tfrac{1}{2}} \left|m_\ell = m - \tfrac{1}{2}, m_s = \tfrac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\ell - m + \tfrac{1}{2}} \left|m_\ell = m + \tfrac{1}{2}, m_s = -\tfrac{1}{2}\right\rangle \right)$$

$$\left|j = \ell - \tfrac{1}{2}, m\right\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2\ell+1}} \left(-\sqrt{\ell - m + \tfrac{1}{2}} \left|m_\ell = m - \tfrac{1}{2}, m_s = \tfrac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\ell + m + \tfrac{1}{2}} \left|m_\ell = m + \tfrac{1}{2}, m_s = -\tfrac{1}{2}\right\rangle \right)$$

$$\left\langle j = \ell \pm \tfrac{1}{2}, m\right| S_z \left|j = \ell \pm \tfrac{1}{2}, m\right\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}\frac{1}{2\ell+1}\, 2m = \pm\frac{m\hbar}{2\ell+1}$$

$$\left\langle j = \ell \pm \tfrac{1}{2}, m\right| S_z \left|j = \ell \mp \tfrac{1}{2}, m\right\rangle = -\frac{\hbar}{2\ell+1}\sqrt{(\ell + \tfrac{1}{2})^2 - m^2}$$

当 $m \neq m'$ 时, 矩阵元 $\langle j'm'|\, S_z\, |jm\rangle$ 为零 $\qquad (\blacklozenge)$

上面的结论 ($\blacklozenge$) 来自于 $[J_z, S_z] = 0$.

考虑 $2p$ 能级, $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$. S_z 的矩阵形式是

$$S_z = \hbar \left(\begin{array}{cc:cccc} -\frac{1}{6} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{6} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3} & 0 & 0 & -\frac{1}{6} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{array}\right)$$

这里, 行的标记依次对应于 (j, m) 的值

$$\left(\tfrac{1}{2}, \tfrac{1}{2}\right), \quad \left(\tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}\right), \quad \left(\tfrac{3}{2}, \tfrac{3}{2}\right), \quad \left(\tfrac{3}{2}, \tfrac{1}{2}\right), \quad \left(\tfrac{3}{2}, -\tfrac{1}{2}\right), \quad \left(\tfrac{3}{2}, -\tfrac{3}{2}\right),$$

列的标记与此相同.

回到 (7) 式, H' 的矩阵形式是

$$\left(\begin{array}{cc:cccc} -\lambda\hbar^2 + \frac{\hbar}{6}(4\mu - \nu) & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\hbar(\mu - \nu) & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda\hbar^2 - \frac{\hbar}{6}(4\mu - \nu) & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\hbar(\mu - \nu) & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2}\lambda + \frac{\hbar}{2}(2\mu + \nu) & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{3}\hbar(\mu - \nu) & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2}\lambda + \frac{\hbar}{6}(2\mu + \nu) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\hbar(\mu - \nu) & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2}\lambda - \frac{\hbar}{6}(2\mu + \nu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2}\lambda - \frac{\hbar}{2}(2\mu + \nu) \end{array}\right)$$

从 H' 的矩阵形式可以得到能级修正.

首先看看 H' 的矩阵中的蓝色项. 两个蓝色项分别处于矩阵的第三行第三列 (对应于 $j = \frac{3}{2}, m = \frac{3}{2}$) 和最后一行最后一列 (对应于 $j = \frac{3}{2}, m = -\frac{3}{2}$). 在 H' 的作用下, 对这两个量子态的能级修正是

$$\Delta E_{\pm 3/2} = \frac{1}{2}\hbar^2\lambda \pm \frac{1}{2}\hbar(2\mu + \nu)$$

下标 $\pm 3/2$ 表示 $m = \pm 3/2$.

再来看 H' 矩阵中的四个黑色项. 除了有两项位于对角线上, 还有两项是非对角项. 四个黑色项构成了一个 2×2 子矩阵, 所在的空间是由 $\left|j = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2}\right\rangle$ 和 $\left|j = \frac{3}{2}, m = \frac{1}{2}\right\rangle$ 张开的. 这本是一个简并子空间, H' 的介入将解除其简并. 根据简并情形下的微扰计算方法, 我们需要求得这个 2×2 矩阵

的本征值和本征向量, 本征值就是能级的一级修正项, 记作 $\Delta E_{1/2}$. 本征向量就是修正后的能级本征态. 在这里, 本征向量是 $\left|j=\frac{1}{2}, m=\frac{1}{2}\right\rangle$ 和 $\left|j=\frac{3}{2}, m=\frac{1}{2}\right\rangle$ 的线性组合.

类似地, H' 矩阵中的红色项也构成 2×2 的子矩阵, 所在空间是由 $\left|j=\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2}\right\rangle$ 和 $\left|j=\frac{3}{2}, m=-\frac{1}{2}\right\rangle$ 张开的. 在这个子空间中, H' 的本征值记作 $\Delta E_{-1/2}$, 本征向量是这两个基向量的线性组合.

综合上述两种情形, 我们可以求得 $\Delta E_{\pm 1/2}$,

$$\begin{vmatrix} -\hbar^2\lambda \pm \frac{1}{6}\hbar(4\mu-\nu) - \Delta E_{\pm 1/2} & \frac{\sqrt{2}}{3}\hbar(\mu-\nu) \\ \frac{\sqrt{2}}{3}\hbar(\mu-\nu) & \frac{1}{2}\hbar^2\lambda \pm \frac{1}{6}\hbar(2\mu+\nu) - \Delta E_{\pm 1/2} \end{vmatrix} = 0$$

其中 $\Delta E_{+1/2}$ 有两个值, 可以记作 $\Delta E^{(1,2)}_{+1/2}$, 而 $\Delta E_{-1/2}$ 也有两个值, 记作 $\Delta E^{(1,2)}_{-1/2}$.

最终结果是,

- 自旋-轨道耦合项导致了 $2p$ 壳层分裂为 $2P_{1/2}$ 和 $2P_{3/2}$.
- 引入外磁场后, 能级进一步分裂.
  - 需要注意的是, 这进一步的能级分裂并不是对应于 $j=\frac{1}{2}$ 的两维子空间中的分裂以及对应于 $j=\frac{3}{2}$ 的四维子空间中的分裂.
  - 如前所述, 不同的 j 相同的 m 构成了两个两维子空间 (这只能是在 $m=\pm 1/2$ 才可以出现的情形), 在其中的每一个子空间中能级一分为二, 修正量分别是 $\Delta E^{(1)}_{+1/2}$, $\Delta E^{(2)}_{+1/2}$ 以及 $\Delta E^{(1)}_{-1/2}$, $\Delta E^{(2)}_{-1/2}$.
  - 当 $m=3/2$ 或 $m=-3/2$ 时, 只能对应于一维子空间, 此时的修正项是 $\Delta E_{\pm 3/2}$.
- $2p$ 壳层的六重简并被彻底解除.

References

[1] Luc-Koenig, E. and Bachelier, A. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* **13**(9), 1743 (1980).

第十章　微扰论 Ⅲ

相对论修正

相对论情形下, 质能关系是

$$E = c\sqrt{p^2 + M_0^2 c^2}$$

M_0 是粒子的静质量. 以 $p/M_0 c$ 展开

$$E = M_0 c^2 + \frac{p^2}{2M_0} - \frac{p^4}{8M_0^3 c^2} + \cdots$$

在以前讨论过的氢原子的哈密顿量中, 考虑质能关系的近似形式, 加入自旋-轨道耦合, 再加入被称为 Darwin 项的修正,

$$H = M_e c^2 + \underbrace{\frac{P^2}{2M_e} + V(R)}_{H_0} - \underbrace{\frac{P^4}{8M_e^3 c^2}}_{W_{\mathrm{mv}}} + \underbrace{\frac{1}{2M_e^2 c^2}\frac{1}{R}\frac{dV(R)}{dR}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}}_{H_{\mathrm{S-L}}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{8M_e^2 c^2}\Delta V(R)}_{W_D} + \cdots \tag{1}$$

- H_0 就是以前处理过的不考虑相对论效应的氢原子的 Hamilton 量.
- W_{mv} 是质量随速度的变化导致的修正.
- $H_{\mathrm{S-L}}$ 是此前讨论过的自旋-轨道耦合项.
- W_D 被称为Darwin 项.

  在 Dirac 方程中, 电子与核子形成的 Coulomb 场之间的相互作用是定域的 (local), 这个相互作用仅仅取决于电子所在位置 $\boldsymbol{r}$ 附近的电场的强度. 但是, 非相对论近似 (即级数展开) 带给我们这样一种形式的描述电子状态的方程 —— 其中电子与场的相互作用是非定域的 (non-local).

量级大小

相对论修正有三部分组成, 每一部分与未受扰能级相比都是 α^2 量级.

$$\frac{W_{\mathrm{mv}}}{H_0} \simeq \frac{\frac{p^4}{8M_e^3c^2}}{\frac{p^2}{2M_e}} = \frac{p^2}{4M_e^2c^2} = \frac{1}{4}\left(\frac{v}{c}\right)^2 \simeq \alpha^2 \simeq \left(\frac{1}{137}\right)^2$$

量级分别为

$$H_0 \simeq 10\mathrm{eV}, \quad W_{\mathrm{mv}} \simeq 10^{-3}\mathrm{eV}$$

对于自旋-轨道耦合项,

$$\frac{W_{\mathrm{S-L}}}{H_0} = \frac{\frac{e^2\hbar^2}{M_e^2c^2r^3}}{\frac{e^2}{r}} = \frac{\hbar^2}{M_e^2c^2r^2} \simeq \frac{e^4}{\hbar^2c^2} = \alpha^2 = \left(\frac{1}{137}\right)^2$$

Darwin 项. 在势能 $V(r) = -e^2/r$ 中,

$$W_D = -e^2\frac{\hbar^2}{8M_e^2c^2}\,\Delta\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{\pi e^2\hbar^2}{2M_e^2c^2}\delta(\boldsymbol{r})$$

在波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 中, W_D 的期望值有如下形式

$$\langle W_D\rangle_\psi = \frac{\pi e^2\hbar^2}{2M_e^2c^2}|\psi(\mathbf{0})|^2 \tag{2}$$

在原点处, 只有 $\ell = 0$ 的波函数具有非零值, Darwin 项只能影响到 s 态.

$$|\psi(\mathbf{0})|^2 \simeq \frac{1}{a_0^3} = \frac{M_e^3e^6}{\hbar^6}$$

$$W_D \simeq \frac{\pi e^2\hbar^2}{2M_e^2c^2}|\psi(\mathbf{0})|^2 \simeq M_ec^2\frac{e^8}{\hbar^4c^4} = M_ec^2\alpha^4$$

$$H_0 \simeq M_ec^2\alpha^2$$

$$\frac{W_D}{H_0} \simeq \alpha^2 = \left(\frac{1}{137}\right)^2$$

$n = 2$ 能级的精细结构

H_0 的 $n = 2$ 能级的本征能量

$$E_2^{(0)} = -\frac{M_ee^4}{8\hbar^2} = -\frac{1}{8}M_ec^2\alpha^2$$

如果不考虑电子的自旋, $n = 2$ 能级的简并度是 4. 考虑电子的自旋后, 简并度是 8; 如果再考虑质子的自旋, 则简并度是 16.

这里只分析精细结构, 简并度为 8. 我们要在 8 维简并子空间中处理各个微扰项.

来自精细结构的微扰项

$$\boxed{W_{\mathrm{FS}} = W_{\mathrm{mv}} + H_{\mathrm{S-L}} + W_D}$$

$$W_{\mathrm{mv}}=\frac{P^4}{8M_e^3c^2},\quad H_{\mathrm{S-L}}=\frac{1}{2M_e^2c^2}\frac{1}{R}\frac{dV(R)}{dR}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S},\quad W_D=\frac{\hbar^2}{8M_e^2c^2}\Delta V(R)$$

注意到

$$[L^2,W_{\mathrm{FS}}]=0$$

$$\because\quad [L^2,\boldsymbol{L}]=0,\quad [L^2,R]=0,\quad [L^2,P^2]=0,\quad [L^2,\boldsymbol{S}]=0$$

直和空间, $\mathscr{H}_{2\mathrm{s}}\oplus\mathscr{H}_{2\mathrm{p}}$

W_{FS} 是 8×8 的矩阵, L^2 与 W_{FS} 对易, 这使得当 $\ell\neq\ell'$ 时, 矩阵元 $\langle\ell|W_{\mathrm{FS}}|\ell'\rangle$ 一律为零. 因此 W_{FS} 的矩阵形式具有下图的样子.

$(W_{FS})_{n=2}=$

$2s$	0
0	$2p$

其中 $2s$ 块是 2×2 的矩阵, $2p$ 块是 6×6 的矩阵.

2s 壳层, 2 重简并

在 $2s$ 壳层中, W_{mv} 和 W_D 与自旋角动量 $\boldsymbol{S}$ 无关.

$$\left\langle n=2;\ell=0;m_\ell=0\left|-\frac{P^4}{8M_e^3c^2}\right|n=2;\ell=0;m_\ell=0\right\rangle$$

$$\left\langle n=2;\ell=0;m_\ell=0\left|\frac{\hbar^4}{8M_e^2c^2}\Delta V(R)\right|n=2;\ell=0;m_\ell=0\right\rangle$$

计算后给出

$$\langle W_{\mathrm{mv}}\rangle=-\frac{13}{128}M_ec^2\alpha^4$$

$$\langle W_D\rangle=\frac{1}{16}M_ec^2\alpha^4$$

自旋-轨道耦合项 $H_{\mathrm{S-L}}$ 的矩阵元为零. 这是因为,

$$\langle\ell=0,m_\ell=0\,|\,L_{x,y,z}\,|\,\ell=0,m_\ell=0\rangle=0$$

综上, 精细结构对 $2s$ 能级的修正是, 整体变化量

$$-\frac{13}{128}M_ec^2\alpha^4+\frac{1}{16}M_ec^2\alpha^4=-\frac{5}{128}M_ec^2\alpha^4 \tag{3}$$

$2s$ 壳层的简并没有解除, 精细结构的介入只是带来了能级的整体移动.

2p 壳层, 六重简并

微扰项依旧是

$$W_{\mathrm{FS}} = W_{\mathrm{mv}} + H_{\mathrm{S-L}} + W_D$$

$$W_{\mathrm{mv}} = \frac{P^4}{8M_e^3c^2}, \quad H_{\mathrm{S-L}} = \frac{1}{2M_e^2c^2}\frac{1}{R}\frac{dV(R)}{dR}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}, \quad W_D = \frac{\hbar^2}{8M_e^2c^2}\Delta V(R)$$

- $\boldsymbol{L}$ 与 R 对易, 与 P^2 对易, 所以, $\boldsymbol{L}$ 与 W_{mv} 和 W_D 都是对易的. W_{mv} 和 W_D 是标量算子.
- W_{mv} 和 W_D 与自旋角动量无关. 它们给出的修正只是能级的整体的移动, 不会解除简并.

计算这两个算子的期望值

$$\langle W_{\mathrm{mv}}\rangle_{2p} = -\frac{7}{384}M_ec^2\alpha^4 \tag{4}$$

$$(2)\text{ 式} \implies \langle W_D\rangle_{2p} = 0 \tag{5}$$

再考虑 $H_{\mathrm{S-L}}$ 项, 我们将看到, 自旋-轨道耦合的效果是部分地解除简并.

$$H_{\mathrm{S-L}} = \frac{1}{2M_e^2c^2}\frac{1}{R}\frac{dV(R)}{dR}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$$

$$\left\langle n=2,\ell=1,s=\frac{1}{2},m_\ell',m_s'\right|\xi(R)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\left|n=2,\ell=1,s=\frac{1}{2},m_\ell,m_s\right\rangle \tag{6}$$

$$\xi(R) = \frac{e^2}{2M_e^2c^2}\frac{1}{R^3}$$

$$\langle\xi(R)\rangle_{2p}\left\langle n=2,\ell=1,s=\frac{1}{2},m_\ell',m_s'\right|\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\left|n=2,\ell=1,s=\frac{1}{2},m_\ell,m_s\right\rangle \tag{7}$$

$$\langle\xi(R)\rangle_{2p} = \frac{e^2}{2M_e^2c^2}\int_0^\infty\frac{1}{r^3}\left|R_{21}(r)\right|^2r^2dr = \frac{1}{48\hbar^2}M_ec^2\alpha^4 \tag{8}$$

剩下的问题是 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 的矩阵元

我们希望 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ 具有对角形式

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}, \quad j = \ell\pm\frac{1}{2} = \frac{3}{2},\ \frac{1}{2}$$

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(J^2-L^2-S^2)$$

选择基向量 $\left|\ell=1,s=\frac{1}{2},j,m_j\right\rangle$

$$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\left|\ell=1,s=\frac{1}{2},j,m_j\right\rangle = \frac{1}{2}\hbar^2\left[j(j+1)-2-\frac{3}{4}\right]\left|\ell=1,s=\frac{1}{2},j,m_j\right\rangle$$

上面的本征值式与 m_j 无关

$$\frac{1}{2}\hbar^2\left[j(j+1)-2-\frac{3}{4}\right]=\begin{cases}\frac{1}{2}\left[\frac{3}{4}-2-\frac{3}{4}\right]\hbar^2=-\hbar^2, & j=\frac{1}{2}\\ \frac{1}{2}\left[\frac{15}{4}-2-\frac{3}{4}\right]\hbar^2=\frac{1}{2}\hbar^2, & j=\frac{3}{2}\end{cases}$$

至此, 自旋-轨道耦合项 $H_{\mathrm{S-L}}$ 部分地解除了 $2p$ 壳层的六重简并:

- $j=\frac{3}{2}$ 是一个 4 重简并的能级.
- $j=\frac{1}{2}$ 是一个 2 重简并的能级.

与此前在单独讨论自旋-轨道耦合的时候得到的结果是一致的.

回到 (7) 式, 即 $H_{\mathrm{S-L}}$ 的矩阵元, 如今只有对角项.

$$\begin{aligned}&\langle\xi(R)\rangle_{2p}\left\langle \ell=1,s=\frac{1}{2},j=\frac{1}{2},m_j'\middle|\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\middle|\ell=1,s=\frac{1}{2},j=\frac{1}{2},m_j\right\rangle\\ &\qquad=-\langle\xi(R)\rangle_{2p}\hbar^2=-\frac{1}{48}M_ec^2\alpha^4\end{aligned}\tag{9}$$

$$\begin{aligned}&\langle\xi(R)\rangle_{2p}\left\langle \ell=1,s=\frac{1}{2},j=\frac{3}{2},m_j'\middle|\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\middle|\ell=1,s=\frac{1}{2},j=\frac{3}{2},m_j\right\rangle\\ &\qquad=\frac{1}{2}\langle\xi(R)\rangle_{2p}\hbar^2=\frac{1}{96}M_ec^2\alpha^4\end{aligned}\tag{10}$$

最终结果

对量子态的标记是 $n\ell_j$, 例如, 对于 $n=2$, 有

$$2S_{1/2},\quad 2P_{1/2},\quad 2P_{3/2}$$

在不考虑精细结构的情况下

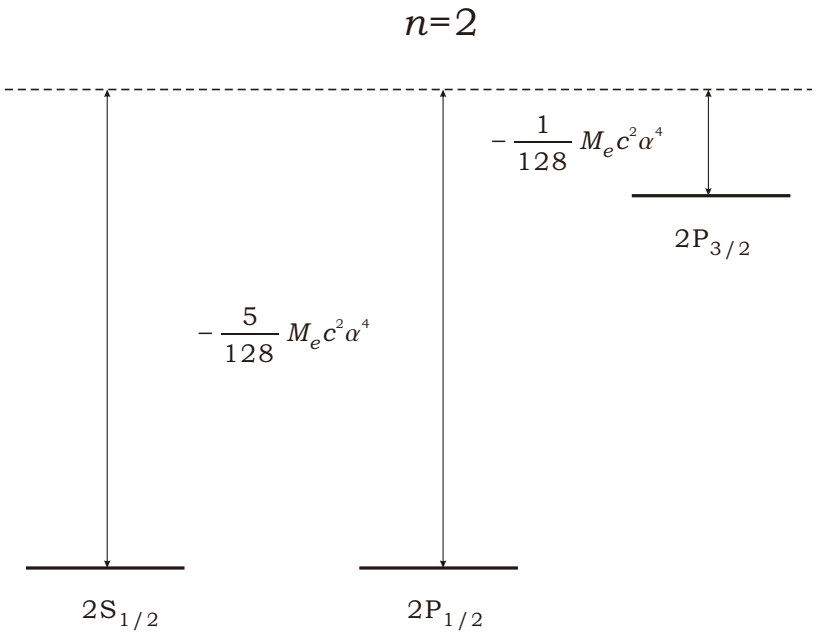
$$\left.\begin{array}{l}2S_{1/2}\\ 2P_{1/2}\\ 2P_{3/2}\end{array}\right\}\text{能量本征值}=-\frac{M_ec^2\alpha^2}{8}$$

考虑精细结构带来的微扰

$$(3)\text{ 式}\implies 2S_{1/2}\text{ 能级的修正是}-\frac{5}{128}M_ec^2\alpha^4$$

$$(4)\text{ 和 }(9)\text{ 式}\implies 2P_{1/2}\text{ 能级的修正是}\left(-\frac{7}{384}-\frac{1}{48}\right)M_ec^2\alpha^4=-\frac{5}{128}M_ec^2\alpha^4$$

$$(4)\text{ 和 }(10)\text{ 式}\implies 2P_{3/2}\text{ 能级的修正是}\left(-\frac{7}{384}+\frac{1}{96}\right)M_ec^2\alpha^4=-\frac{1}{128}M_ec^2\alpha^4$$



- 考虑了微扰修正之后, $2S_{1/2}$ 和 $2P_{1/2}$ 仍然是简并的, 这是偶然简并. 在考虑了超精细结构之后, 这两个能级将分裂开来, 即 Lamb 位移 (Lamb shift).
- $2P$ 壳层原先是 6 重简并的, 分裂后变为两个能级, $2P_{1/2}$ 和 $2P_{3/2}$, 所在的 Hilbert 空间的维数分别是 2 和 4. 能级的分裂来自于自旋-轨道耦合项. W_{mv} 和 W_D 只是导致了 $2p$ 能级的整体的移动.
- 氢原子从 $2p$ 到 $1s$ 的跃迁会放出 Lyman 光子 (波长 $\lambda = 1216$ Å), 考虑了自旋-轨道耦合之后, Lyman 谱线将分裂为两条, 其间的能量差是 $\frac{4}{128}M_e c^2\alpha^4$.

最后, 对于 $1s$ 能级, 精细结构只会带来整体的移动, 不会产生能级的分裂.

$$\langle W_{\mathrm{mv}}\rangle_{1s} = -\frac{5}{8}M_e c^2\alpha^4$$

$$\langle W_D\rangle_{1s} = \frac{1}{2}M_e c^2\alpha^4$$

$$\langle H_{\mathrm{S-L}}\rangle_{1s} = 0$$

计算 $\langle W_{\mathrm{mv}}\rangle$ 以及其它一些量的期望值

参看 Cohen 书 Complement $\mathrm{B}_{\mathrm{XII}}$.

$$H_0 = \frac{P^2}{2M_e} + V$$

$$P^4 = 4M_e^2[H_0 - V]^2, \quad V = -\frac{e^2}{R}$$

$$W_{\text{mv}} = -\frac{1}{2M_e c^2}[H_0 - V]^2$$

$$\langle W_{\text{mv}}\rangle_{n\ell m} = -\frac{1}{2M_e c^2}\left[(E_n)^2 + 2E_n e^2\langle 1/R\rangle_{n\ell} + e^4\langle 1/R^2\rangle_{n\ell}\right]$$

于是需要知道 $\langle 1/R\rangle$ 和 $\langle 1/R^2\rangle$. 另外, 在 (8) 式中, 需要计算 R^{-3} 的期望值. 以前讨论过, 见讲义 Chapter 7-7.

含时微扰

微扰项随时间变化,

$$H(t) = H_0 + V(t)$$

H_0 的本征方程

$$H_0\,|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}\,|n^{(0)}\rangle$$

$t = 0$ 时的初态

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0)\,|n^{(0)}\rangle \tag{11}$$

t 时刻的量子态

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}\,|n^{(0)}\rangle \tag{12}$$

Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle = \big(H_0 + V(t)\big)\,|\psi(t)\rangle \tag{13}$$

将 (12) 代入 (13), 有

$$\sum_n \left[i\hbar\frac{\mathrm{d}c_n(t)}{\mathrm{d}t} + E_n^{(0)}c_n(t)\right] e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}\,|n^{(0)}\rangle = \sum_n \left[E_n^{(0)}c_n(t) + V(t)c_n(t)\right] e^{-iE_n^{(0)}t/\hbar}\,|n^{(0)}\rangle \tag{14}$$

考虑到 $|n^{(0)}\rangle$ 之间的正交归一性, 用 $\langle m^{(0)}|$ 左乘上式两端, 有

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}c_m(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_n \langle m^{(0)}|V(t)|n^{(0)}\rangle\, e^{i\omega_{mn}t}c_n(t) \tag{15}$$

其中

$$\omega_{mn} = \frac{E_m^{(0)} - E_n^{(0)}}{\hbar}$$

方程 (15) 是严格的, 未作任何近似. 它包含了若干个甚至无穷多个一阶微分方程. 一般情况下难以求解, 只能作近似处理.

近似处理

将哈密顿量表示为

$$H(t) = H_0 + \lambda V(t), \quad \lambda \in [0,1]$$

含时系数 $c_n(t)$ 满足的方程 (15) 变为

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}c_m(t)}{\mathrm{d}t} = \lambda \sum_n \langle m^{(0)}|V(t)|n^{(0)}\rangle \, e^{i\omega_{mn}t} c_n(t) \tag{16}$$

将 $c_n(t)$ 展开为

$$c_n(t) = c_n^{(0)}(t) + \lambda c_n^{(1)}(t) + \lambda^2 c_n^{(2)}(t) + \cdots \tag{17}$$

代入 (16), 并按照 λ 的幂次整理.

λ^0 项给出

$$\frac{\mathrm{d}c_m^{(0)}}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{18}$$

表明 $c_m^{(0)}(t)$ 实际上是常数, 始终等于初态 (11) 中的 $c_m(0)$,

$$\boxed{c_m^{(0)}(t) = c_m(0)}$$

这对应于不存在微扰时的情况.

λ^1 项给出

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}c_m^{(1)}}{\mathrm{d}t} = \sum_n \langle m^{(0)}|V(t)|n^{(0)}\rangle \, e^{i\omega_{mn}t} c_n^{(0)}(t) \tag{19}$$

这给出了量子态的一级修正.

第 $r+1$ 级修正由第 r 级修正决定

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}c_m^{(r+1)}}{\mathrm{d}t} = \sum_n \langle m^{(0)}|V(t)|n^{(0)}\rangle \, e^{i\omega_{mn}t} c_n^{(r)}(t) \tag{20}$$

在很多实际情况中考虑的问题

含时微扰项 $V(t)$ 在一段时间间隔 $[0,T]$ 内介入.

在 $t \leqslant 0$ 时, 系统的哈密顿量是 H_0, 系统处于某个能级 $E_j^{(0)}$, 量子态是本征态 $|j^{(0)}\rangle$.

在 $t = T$ 时刻之后, 微扰消失, 系统重新在 H_0 的支配下自由演化.

在 $t \geqslant T$ 时, 如果观测系统的哈密顿量, 那么发现系统处于另外某个能级 $E_f^{(0)}$ $(f \neq j)$ 的几率是多少? 暂且假设系统的能级是非简并的, 那么这个几率由展开系数 $c_f(t)$ $(t \geqslant T)$ 决定:

$$p_{j\to f} = |c_f(t)|^2 = |c_f(T)|^2 \tag{21}$$

几率 $p_{j\to f}$ 称为**跃迁几率**.

以下过程中省略 H_0 本征值和本征态的上标 (0), 简记作 E_n, $|n\rangle$, $|m\rangle$, $|j\rangle$ 等等

跃迁几率的量级

在一级近似下,

- 系统仍处于初始能级 E_j 的几率没有改变.
- 系统跃迁至其它能级的几率是微扰强度的二级项.

初条件 $c_f^{(0)} = c_f(0) = 0$ 给出值为零的零级修正.

一级近似的结果就是 $c_f^{(1)}(T)$. 而 $c_f^{(1)}(T)$ 可以通过方程 (19) 求出

$$c_f^{(1)}(T) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^T \langle f|V(t)|j\rangle\, e^{i\omega_{fj}t}\,\mathrm{d}t, \quad f \neq j \tag{22}$$

既然微扰使系统以一定的几率处于别的能级, 那么 T 时刻以后系统处于初始能级 E_j 的几率应该有所减少. 对此作量级上的估算 —— 关于 λ 的量级. 在时间间隔 $0 \leqslant t \leqslant T$ 内, 由 $|\psi(t)\rangle$ 的归一化, 有

$$1 = \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = |c_j(t)|^2 + \sum_{n\neq j}|c_n(t)|^2$$

在一级近似下, 对于 $n \neq j$, $c_n(t) \approx c_n^{(0)}(t) + c_n^{(1)}(t) = c_n^{(1)}(t)$. 而 $c_{n\neq j}^{(1)}(t)$ 是通过求解关于 λ^1 的方程得到的, 可以说 $|c_{n\neq j}^{(1)}(t)|$ 是 λ 量级的量, $|c_{n\neq j}^{(1)}(t)| \sim O(\lambda)$. 于是 $\sum_{n\neq j}|c_n(t)|^2 \sim O(\lambda^2)$, 对于 $|c_j(t)|$, 有

$$|c_j(t)| \sim \left[1 - O(\lambda^2)\right]^{1/2} \sim 1 - O(\lambda^2)$$

这表明, 在一级近似下, 含时微扰只对 $c_j(t)$ 有相位上的修正, 几率的减少则体现于更高级的近似修正.

当然, 可以看看 $c_j^{(1)}$ 满足的方程. 由 (19) 式, 即

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}c_m^{(1)}}{\mathrm{d}t} = \sum_n \langle m|V(t)|n\rangle\, e^{i\omega_{mn}t}c_n^{(0)}(t)$$

考虑 $m = j$, 在右端的求和中, 只有 $c_j^{(0)}(t)$ 这一项是非零的, 且 $c_j^{(0)}(t) = c_j(0) = 1$, 于是 $c_j^{(1)}(t)$ 满足的方程是

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}c_j^{(1)}}{\mathrm{d}t} = \langle j|V(t)|j\rangle = V_{jj}(t)$$

其中 $V_{jj}(t)$ 是 $V(t)$ 的矩阵元, 是对角项.

$$c_j^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t V_{jj}(t')\,\mathrm{d}t'$$

注意到 $V_{jj}(t)$ 是实数, 所以一级修正项 $c_j^{(1)}(t)$ 是纯虚数. 一级近似的结果是

$$c_j^{(0)}(t) + c_j^{(1)}(t) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t V_{jj}(t')\,\mathrm{d}t' \tag{23}$$

这表明一级近似是相位的改变[1].

一个例子, 匀速进动磁场中的质子

在 Chapter 5-1 中讨论含时 Schrödinger 方程的时候, 我们严格求解了在匀角速度旋转的磁场中自旋 1/2 的粒子的量子态.

考虑质子在磁场中的运动. 随时间变化的磁场, 质子的哈密顿量分别是

$$\boldsymbol{B}(t) = B_0\boldsymbol{e}_z + B_1(\cos\omega t\boldsymbol{e}_x + \sin\omega t\boldsymbol{e}_y) \tag{24}$$

$$H(t) = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} = -\frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z - \frac{1}{2}\hbar\omega_1(\sigma_x\cos\omega t + \sigma_y\sin\omega t) \tag{25}$$

$$\omega_0 = \frac{|e|B_0}{m}, \quad \omega_1 = \frac{|e|B_1}{m}. \tag{26}$$

和第五章的计算过程相比, 哈密顿量相差一个负号, 原因是那里讨论的是电子, 这里则是质子.

设质子的初态是 $|\psi(0)\rangle = c_0(0)\,|0\rangle + c_1(0)\,|1\rangle$, 可以解出 t 时刻的量子态是[2]

$$|\psi(t)\rangle = c_0(t)\,|0\rangle + c_1(t)\,|1\rangle$$

$$c_0(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}}\left\{\left[\cos\frac{\Omega t}{2} + \frac{i(\omega_0+\omega)}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right]c_0(0) + \frac{i\omega_1}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}c_1(0)\right\}$$

$$c_1(t) = e^{+i\frac{\omega t}{2}}\left\{\frac{i\omega_1}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}c_0(0) + \left[\cos\frac{\Omega t}{2} - \frac{i(\omega_0+\omega)}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right]c_1(0)\right\}$$

$$\text{其中 } \Omega = \sqrt{(\omega_0+\omega)^2+\omega_1^2}$$

[1] 考虑复数 $re^{i\theta}$ 的模和幅角都有微小的改变, $r \longrightarrow r+\delta r$, $\theta \longrightarrow \theta+\delta\theta$, 在一级近似下, $(r+\delta r)e^{i(\theta+\delta\theta)} \approx (r+\delta r)e^{i\theta}(1+i\delta\theta) \approx re^{i\theta}(1+i\delta\theta) + \delta re^{i\theta}$ 上式右端第一项对应于相位的一级近似, 第二项对应于模的一级近似, 后者不是一个纯虚数. 对照 (23) 式, 仅有的一级近似项是一个纯虚数, 所以 (23) 只是体现了相位的改变.

[2] 在第四章中我们讨论的是电子, 这里是质子, 带电量相差一个符号, 所以出现在结果中的调谐项不再是 $\omega-\omega_0$, 而是 $\omega+\omega_0$.

再设初态是 $|0\rangle$, 即 $c_0(0)=1$, $c_1(0)=0$, 则 t 时刻的量子态是

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega t}{2}}\left[\cos\frac{\Omega t}{2}+\frac{i(\omega_0+\omega)}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right] \\ e^{i\frac{\omega t}{2}}\frac{i\omega_1}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2} \end{pmatrix} \tag{27}$$

在 t 时刻, 质子处于 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 的几率分别是

$$p_0(t)=\cos^2\frac{\Omega t}{2}+\left(\frac{\omega_0+\omega}{\Omega}\right)^2\sin^2\frac{\Omega t}{2} \tag{28}$$

$$p_1(t)=\frac{\omega_1^2}{\Omega^2}\sin^2\frac{\Omega t}{2} \tag{29}$$

为了和近似解对照, 设横向磁场的磁感应强度 B_1 很小, 相应的的 ω_1 很小. 将上述结果展开到 ω_1 的一阶项或者二阶项.

$$\Omega=(\omega_0+\omega)\sqrt{1+\frac{\omega_1^2}{(\omega_0+\omega)^2}}\approx\omega_0+\omega+\frac{\omega_1^2}{2(\omega_0+\omega)}$$

$$\frac{\omega_0+\omega}{\Omega}=\frac{1}{\sqrt{1+\frac{\omega_1^2}{(\omega_0+\omega)^2}}}\approx 1-\frac{1}{2}\frac{\omega_1^2}{(\omega_0+\omega)^2}$$

$$\frac{\omega_1}{\Omega}\approx\frac{\omega_1}{\omega_0+\omega}$$

$$\begin{aligned}&\cos\frac{\Omega t}{2}+\frac{i(\omega_0+\omega)}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\\ \approx&\cos\frac{\Omega t}{2}+i\sin\frac{\Omega t}{2}-\frac{i}{2}\frac{\omega_1^2}{(\omega_0+\omega)^2}\sin\frac{(\omega_0+\omega)t}{2}\\ \approx&e^{i\frac{(\omega_0+\omega)t}{2}}-\underbrace{\frac{i}{2}\frac{\omega_1^2}{(\omega_0+\omega)^2}\sin\frac{(\omega_0+\omega)t}{2}}_{\omega_1\text{ 的高阶项}}\end{aligned}$$

$$\frac{\omega_1}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\approx\frac{\omega_1}{\omega_0+\omega}\sin\frac{(\omega_0+\omega)t}{2}$$

略去 ω_1 的二阶及更高阶的项, 写出 $|\psi(t)\rangle$ 的一级近似形式:

$$|\psi(t)\rangle\approx\begin{pmatrix} e^{i\frac{\omega_0 t}{2}} \\ e^{i\frac{\omega t}{2}}\ \frac{i\omega_1}{\omega_0+\omega}\sin\frac{(\omega_0+\omega)t}{2} \end{pmatrix} \tag{30}$$

可以看到, $c_0(t)$ 的一级近似只是相位的改变, 而 $c_1(t)$ 的模在一级近似下是有改变的.

几率的一级近似值是

$$p_0(t)\approx 1 \tag{31}$$

$$p_1(t)\approx\frac{\omega_1^2}{(\omega_0+\omega)^2}\sin^2\frac{(\omega_0+\omega)t}{2} \tag{32}$$

如果忽略 ω_1 的二次项, 那么 $p_0(t)$ 为 1, 而 $p_1(t)$ 为 0. 这个结论显然不太合适, 原因在于, 几率来自于几率幅的模的平方, 而我们做的近似是关于几率幅的一级近似, 所以应该从几率幅的一级近似形式给出几率的近似值, 不应该在几率的表达式中简单地舍去 ω_1 的平方项.

另外需要指出的是, 以上近似过程的条件是 $\omega_1 \ll \omega_0 + \omega$. 但是, 在共振情况下, $\omega_0 + \omega \approx 0$, 近似条件不再成立. 共振情况下的精确解是 (设 $\omega_0 + \omega = 0$)

$$p_0(t) = \cos^2 \frac{\omega_1 t}{2} \tag{33}$$

$$p_1(t) = \sin^2 \frac{\omega_1 t}{2} \tag{34}$$

这是随时间振荡的几率分布. 而近似结果 (31) 和 (32) 却没有表现出随时间振荡的现象. 稍后将继续讨论共振行为.

微扰计算 在哈密顿量 (25) 中, 认为其中的第一项是未受扰项,

$$H_0 = -\frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z$$

本征态是 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$, 对应的本征值分别是 $E_0 = -\frac{1}{2}\hbar\omega_0$ 和 $E_1 + \frac{1}{2}\hbar\omega_0$. 能级差是 $E_1 - E_0 = \hbar\omega_0$. 哈密顿量 (25) 的第二项是含时微扰项, 即

$$V(t) = -\frac{1}{2}\hbar\omega_1(\sigma_x \cos\omega t + \sigma_y \sin\omega t)$$

$V(t)$ 的对角项为零.

设质子的初态是 $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$, 微扰的一级近似给出

$$c_0(t) \approx c_0^{(0)}(t) + c_0^{(1)}(t) = 1 \tag{35}$$

$$\begin{aligned} c_1(t) \approx c_1^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle 1|V(t')|0\rangle\, e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_0)t'}\,\mathrm{d}t' \\ &= \frac{1}{i\hbar}\Big(-\frac{1}{2}\hbar\omega_1\Big)\int_0^t e^{i(\omega_0+\omega)t'}\,\mathrm{d}t' \\ &= \frac{\omega_1}{2(\omega_0+\omega)}\big[e^{i(\omega_0+\omega)t} - 1\big] \\ &= \frac{i\omega_1}{2}\,\frac{\sin\frac{(\omega_0+\omega)t}{2}}{\frac{\omega_0+\omega}{2}}\,e^{i\frac{(\omega_0+\omega)t}{2}} \end{aligned} \tag{36}$$

t 时刻质子处于能级 E_1 的几率等于

$$p_1(t) = |c_1(t)|^2 \approx \frac{\omega_1^2}{(\omega_0+\omega)^2}\sin^2\frac{(\omega_0+\omega)t}{2} \tag{37}$$

与 (32) 式相符.

需要再一次指出的是, 在共振情形下 $(\omega_0+\omega=0)$, (37) 式给出的结果是

$$p_1(t)\approx\lim_{\omega_0+\omega\to0}\frac{\omega_1^2}{(\omega_0+\omega)^2}\sin^2\frac{(\omega_0+\omega)t}{2}=\frac{\omega_1^2t^2}{4}$$

这与精确结果 (34) 式不符 —— 除非 $\omega_1 t$ 很小. 但是, 当微扰作用的时间很长的时候, 不能保证 $\omega_1 t$ 很小, 于是通过近似方法得到的结果不能反映实际情况.

常微扰

设微扰项是不随时间变化的, 但是在某一个特定的时刻才引入. 微扰项 V 是某个力学量, 可以与位置, 动量或自旋有关, 这里不明确写出它的具体形式, 但是须明白 V 不是简单的常数.

$$V(t)=\begin{cases}0, & t<0\\ V, & t\geqslant0\end{cases}\tag{38}$$

设 $t=0$ 时, 系统处于未受扰的哈密顿量 H_0 的某个本征态 $|j\rangle$, 对应的能级是 E_j. 量子态的初条件是

$$c_n(0)=\delta_{nj}\tag{39}$$

在 $V(t)$ 的影响下, t 时刻系统的状态可以表示为 $\sum_n c_n(t)e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle$. 进而关注前面提到的问题: 如果在 t 时刻测量系统的哈密顿量, 那么发现系统处于能级 E_f $(f\neq j)$ 的几率是多少? 在一级近似下, $c_f(t)\approx c_f^{(0)}(t)+c_f^{(1)}(t)=c_f^{(1)}(t)$.

$$\begin{aligned}c_f^{(1)}(t)&=\frac{1}{i\hbar}\int_0^t\langle f|V|j\rangle\,e^{i\omega_{fj}t'}\,\mathrm{d}t',\quad \text{其中 } \omega_{fj}=\frac{E_f-E_j}{\hbar}\\&=\frac{V_{fj}}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{fj}t'}\,\mathrm{d}t'\\&=\frac{V_{fj}}{E_f-E_j}\left(1-e^{i\omega_{fj}t}\right)\end{aligned}$$

由此可以得到 t 时刻系统处于能级 E_f 的几率, 即跃迁几率

$$\begin{aligned}p_{j\to f}(t)&=\left|c_f^{(1)}(t)\right|^2\\&=\frac{|V_{fj}|^2}{(E_f-E_j)^2}(2-2\cos\omega_{fj}t)\\&=\frac{4|V_{fj}|^2}{(E_f-E_j)^2}\sin^2\left[\frac{(E_f-E_j)t}{2\hbar}\right]\end{aligned}\tag{40}$$

跃迁几率不但依赖于 $|V_{fj}|^2$, 而且和终态能级 E_f 有关. 如果能级是离散分布的, 那么该结果可以用来近似说明微扰导致的态的变化和能量期望值的改变.

如果能级是连续分布的, 那么情况要复杂一些. 我们只能问这样的问题: 观测系统的能量, 得到的观测结果处于 E_f 的邻域内的几率是多少?

令 $\omega = \frac{E-E_f}{\hbar}$, 考察函数 $\frac{4}{\omega^2}\sin^2\frac{\omega t}{2}$. 这个函数在 $\omega = \omega_{fj}$ 附近的行为有助于回答上述问题. 图 1 描绘了该函数图像.

$$p_{j\to f}(t) = \frac{4|V_{fj}|^2}{(E_f - E_j)^2}\sin^2\left[\frac{(E_f - E_j)t}{2\hbar}\right]$$

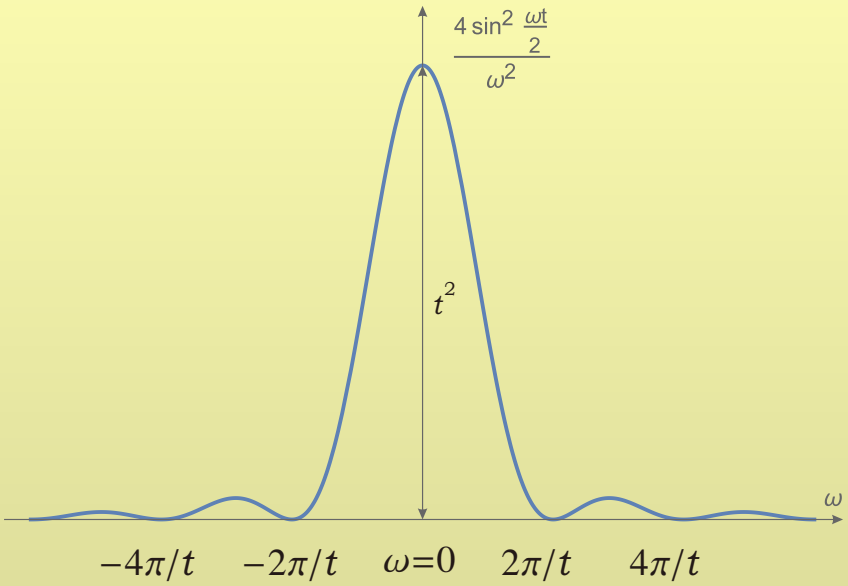


图 1

可以看出, 在偏离 $\omega = 0$ 附近的区域, 函数衰减得很快, 最大值 (峰值) 为 t^2, 中间最大的波包的宽度正比于 $\frac{1}{t}$. 系统有较大的可能性跃迁至分布于区域 $\omega \in [-\frac{2\pi}{t}, \frac{2\pi}{t}]$内的能级, 而跃迁至其它能级上的几率很小而可被忽略. 另外, 还应该注意到, 如果微扰作用的时间较短, 那么中间波包的宽度较大, 波峰较低. 如果时间较长, 则波包宽度小, 波峰较高.

为了进一步求出从初始能级 E_j 到处于 E_f 的邻域内的终态能级的跃迁几率, 还需要考虑态密度. 我们把与此有关的考虑放到下面将要讨论的简谐微扰部分.

简谐微扰, 参看 Cohen 书第 XIII 章第 C 部分

微扰项随时间的变化是

$$V(t) = V_0 e^{-i\omega t} + V_0^\dagger e^{i\omega t}, \quad t \geqslant 0 \tag{41}$$

其中 V_0 未必是厄密算子, 但是 $V(t)$ 始终是厄密的. 这里, 假设微扰项是在 $t \geqslant 0$ 时发生作用. 而在其它时间内, 系统随时间的演化仅仅由未受扰的哈密顿量 H_0 确定.

假设在 $t = 0$ 时系统处于某个能量本征态 $|j\rangle$. 在 t 时刻系统的状态可以表示为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$$

其中的 E_n 仍旧是 H_0 的本征值.

根据前面的讨论, 在 t 时刻, 系数 $c_f(t)$ $(f \neq j)$ 的一级近似为

$$\begin{aligned}
c_f(t) &\approx c_f^{(1)}(t) \\
&= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle f|V(t')|j\rangle \, e^{i\omega_{fj}t'} \, \mathrm{d}t' \\
&= \frac{1}{i\hbar} \langle f|V_0|j\rangle \int_0^t e^{i(\omega_{fj}-\omega)t'} \, \mathrm{d}t' + \frac{1}{i\hbar} \langle f|V_0^\dagger|j\rangle \int_0^t e^{i(\omega_{fj}+\omega)t'} \, \mathrm{d}t' \\
&= \frac{\langle f|V_0|j\rangle}{\hbar} \frac{1 - e^{i(\omega_{fj}-\omega)t}}{\omega_{fj} - \omega} + \frac{\langle f|V_0^\dagger|j\rangle}{\hbar} \frac{1 - e^{i(\omega_{fj}+\omega)t}}{\omega_{fj} + \omega} \\
&= \frac{-2i \langle f|V_0|j\rangle}{\hbar} \frac{\sin\frac{(\omega_{fj}-\omega)t}{2}}{\omega_{fj} - \omega} e^{i\frac{(\omega_{fj}-\omega)t}{2}} + \frac{-2i \langle f|V_0^\dagger|j\rangle}{\hbar} \frac{\sin\frac{(\omega_{fj}+\omega)t}{2}}{\omega_{fj} + \omega} e^{i\frac{(\omega_{fj}+\omega)t}{2}}
\end{aligned}$$

在上面的推导中, 如果令 $\omega = 0$, 则回到常微扰情形.

跃迁几率是

$$p_{j\to f}(\omega, t) = \left|c_f^{(1)}(t)\right|^2$$

这里, 在跃迁几率所依赖的参量中加入了简谐微扰的频率 ω.

令

$$A_- = \frac{\sin\frac{(\omega_{fj}-\omega)t}{2}}{\frac{\omega_{fj}-\omega}{2}} e^{i\frac{(\omega_{fj}-\omega)t}{2}} \tag{42}$$

$$A_+ = \frac{\sin\frac{(\omega_{fj}+\omega)t}{2}}{\frac{\omega_{fj}+\omega}{2}} e^{i\frac{(\omega_{fj}+\omega)t}{2}} \tag{43}$$

计算跃迁几率 $p_{j\to f}(\omega,t)=|c_f(t)|^2$

$$p_{j\to f}(\omega,t)\approx \underbrace{\frac{|\langle f|V_0|j\rangle|^2}{\hbar^2}|A_-|^2}_{\text{共振吸收几率}}+\underbrace{\frac{|\langle f|V_0^\dagger|j\rangle|^2}{\hbar^2}|A_+|^2}_{\text{共振辐射几率}}+\underbrace{2\mathrm{Re}\left\{\frac{\langle f|V_0|j\rangle\langle f|V_0^\dagger|j\rangle^*}{\hbar^2}A_-A_+^*\right\}}_{\text{相干项}} \tag{44}$$

共振　一般情况下, 跃迁几率 $p_{j\to f}$ 的形式较为复杂, 画两个图看看.

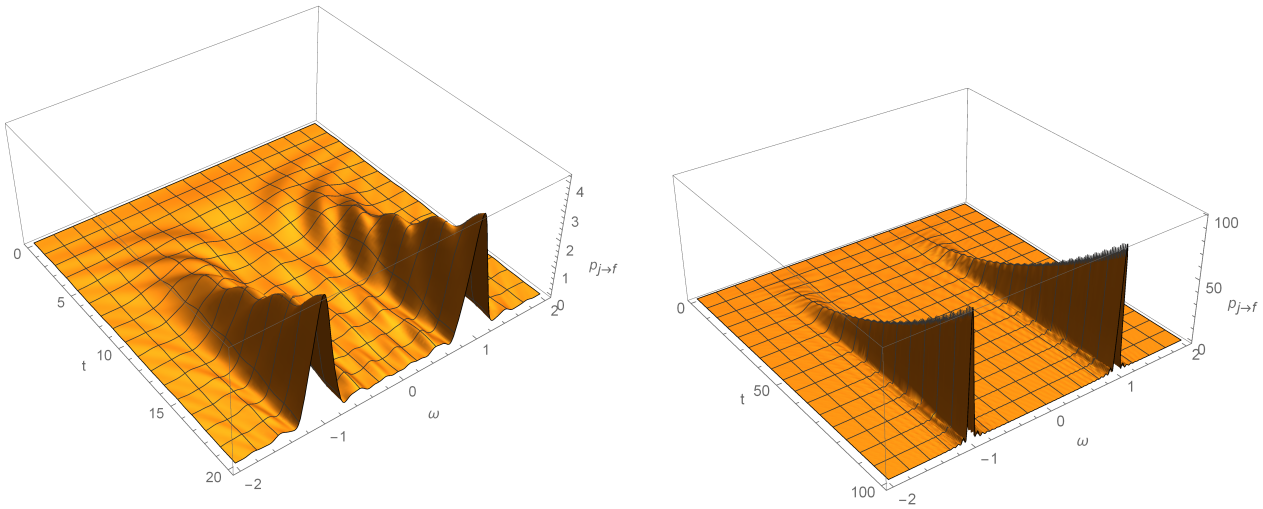


图 2: 跃迁几率 $p_{j\to f}(\omega,t)$ 的函数图像. 其中我们设 $\hbar=1$, $\langle f|V_0|j\rangle=\langle f|V_0^\dagger|j\rangle=0.1$, $\omega_{fj}=1$. 左图中微扰作用时间为 20, 右图的微扰作用时间是 100.

图 2 描述了从 $t=0$ 到 $t=20$ 和 $t=100$ 跃迁几率随时间和外场频率 ω 的变化.

图像显示了跃迁几率的特点:

- 随着时间的延长, 出现两个明显的峰值.
- 峰值出现在 ω_{fj} 附近, 即 $\omega\approx\pm\omega_{fj}$.
- 看起来跃迁几率可以远大于 1, 这是不合理的, 稍后讨论.

图中的峰值就是我们要关注的共振现象.

作为外场的频率, ω 一般设为正的, 即 $\omega\geqslant 0$. 于是, 对于 $\omega\approx\omega_{fj}$, 意味着末态能级 E_f 比初态能级 E_j 高, 系统从外场中吸收一定的能量 $\hbar\omega$ 从较低能级跃迁至较高能级. 这个过程被称为共振吸收. 而对于 $\omega\approx-\omega_{fj}$, 则意味着末态能级比初态能级低, 系统向外场放出能量 $\hbar\omega$, 从高能级跃迁至低能级. 这个过程被称为共振辐射, 也叫做受激辐射.

当 $\omega \approx \omega_{fj}$ 时, $|A_-|^2$ 的值很大, 其它项可以忽略

共振吸收的几率是

$$p^{\text{abs}}_{j\to f}(\omega,t) = \frac{|\langle f|V_0|j\rangle|^2}{\hbar^2}\,|A_-|^2 = \frac{|\langle f|V_0|j\rangle|^2}{\hbar^2}\left\{\frac{\sin[(\omega_{fj}-\omega)t/2]}{(\omega_{fj}-\omega)/2}\right\}^2 \tag{45}$$

当 $\omega \approx -\omega_{fj}$ 时, $|A_+|^2$ 很大, 其它项可以忽略

共振辐射几率是

$$p^{\text{emi}}_{j\to f}(\omega,t) = \frac{|\langle f|V_0^\dagger|j\rangle|^2}{\hbar^2}\,|A_+|^2 = \frac{|\langle f|V_0^\dagger|j\rangle|^2}{\hbar^2}\left\{\frac{\sin[(\omega_{fj}+\omega)t/2]}{(\omega_{fj}+\omega)/2}\right\}^2 \tag{46}$$

需要进一步说明上述做法的合理性. (45) 和 (46) 来自于如下两方面的近似.

1. 考虑共振吸收 (辐射) 的时候忽略共振辐射 (吸收).
2. 忽略相干项.

第 1 个近似成立的条件是, 共振吸收峰和共振辐射峰较远, 重叠很小. 图 3 描绘了共振吸收几率 (45) 和共振辐射几率 (46) 的函数图像.

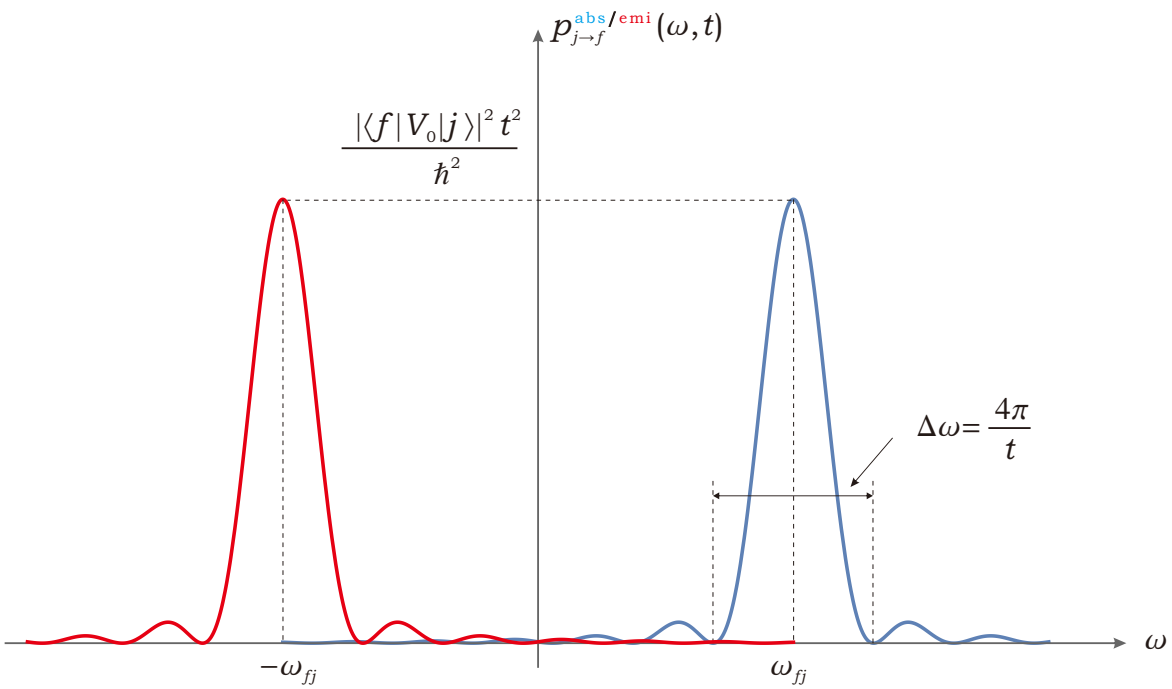


图 3

共振峰的宽度为 $\Delta\omega = \frac{4\pi}{t}$, 两个峰值的间距为 $2|\omega_{fj}|$. 第一个近似成立的条件就是

$$2|\omega_{fj}| \gg \Delta\omega, \quad \text{i.e.,}\ \ t \gg \frac{1}{\omega_{fj}} \approx \frac{1}{\omega} \tag{47}$$

也就是说, 微扰作用的时间要足够长. 如果微扰作用的时间较短, 那么微扰项没有充分的时间体现振荡的特性, 近乎线性微扰或常微扰.

当然, (45) 和 (46) 两式给出的共振情形下的跃迁几率, 因此外场的频率 ω 不能是任意的. 前面我们简单地说, $\omega \approx \omega_{fj}$ 或者 $\omega \approx -\omega_{fj}$. 现在说得更具体一些,

$$|\omega_{fj} - \omega| < \frac{2\pi}{t}$$

第二个近似是忽略 (44) 式中的相干项. 这就需要相干项比较小. 为了使相干项的形式简单一些, 设 V_0 是对称的实矩阵, $V_0 = V_0^\dagger$, 且 $\langle f|V_0|j\rangle$ 是实数, (44) 式右端的相干项记作 $\mathcal{A}$.

$$\mathcal{A}(\omega, t) = -\frac{4\langle f|V_0|j\rangle^2}{\hbar^2} \frac{\cos\omega t(\cos\omega t - \cos\omega_{fj} t)}{\omega^2 - \omega_{fj}^2}$$

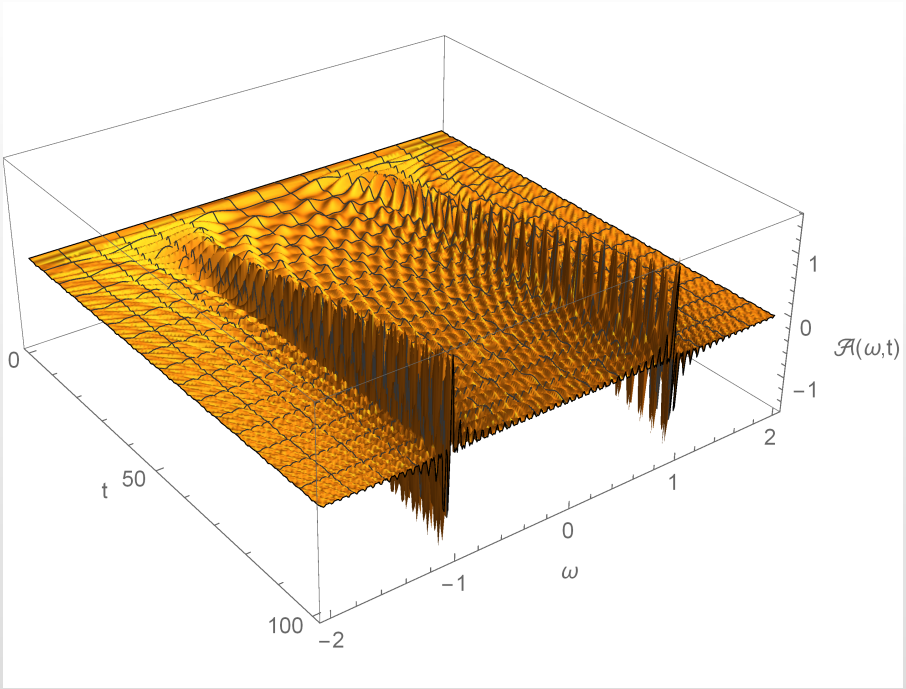


图 4: 跃迁几率 (44) 式中的相干项随时间和外场频率的变化图像. 参数的设定与图 2 相同.

考察外场频率远离共振区域的情形, 可以看到, 当时间 t 不是很长的时候, $\mathcal{A}$ 的峰值随 ω 的变化有明显的改变; 而当 t 充分长的时候, $\mathcal{A}$ 的峰值变化不大. 在图 5 中可以看得更清楚.

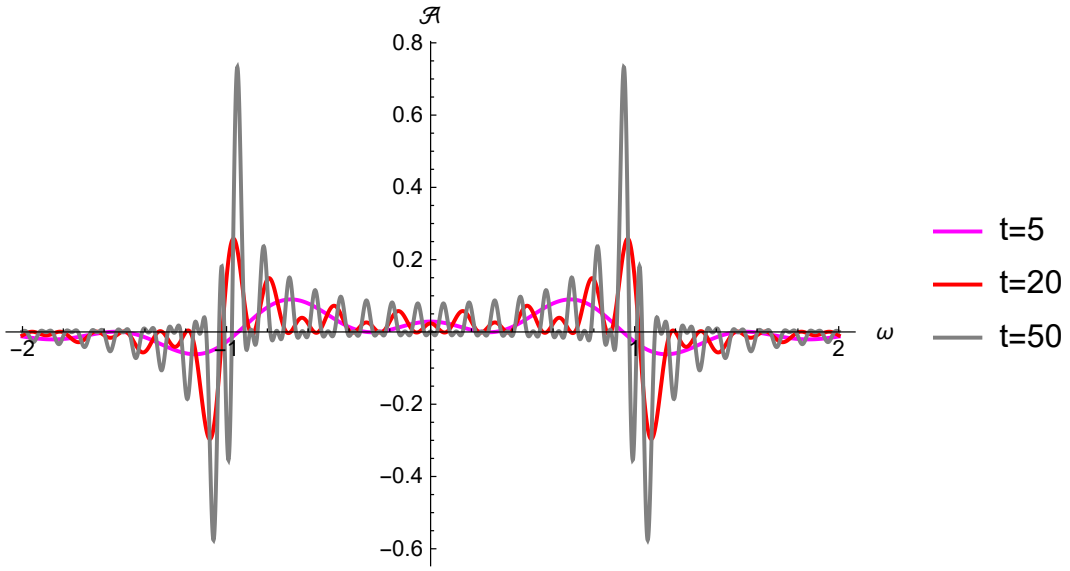


图 5: 在不同的三个时刻, $t=5$, $t=20$, $t=50$, 相干项 $\mathcal{A}(\omega,t)$ 随微扰频率 ω 的变化图像. 依旧采用前面的参数设置. 可以看到, 在非共振区域, 例如 $\omega\in[-0.5,0.5]$, 随着时间的延长, 相干项的峰值变化越来越不明显.

在 ω 接近共振区域的时候, $\mathcal{A}$ 的峰值有明显的改变, 但相比于共振吸收的几率 (45) 和共振辐射的几率 (46), 当 $\omega\approx\pm\omega_{fj}$ 的时候, 相干项给出的贡献很小, 可以忽略. 可以计算一下在共振时 $\mathcal{A}$ 的极限值,

$$\mathcal{A}(\omega,t)=-\frac{4\left\langle f|V_0|j\right\rangle^2}{\hbar^2}\,\frac{\cos\omega t(\cos\omega t-\cos\omega_{fj}t)}{\omega^2-\omega_{fj}^2}$$

$$\mathcal{A}(\omega,t)\xrightarrow{\omega\to\pm\omega_{fj}}\frac{\left\langle f|V_0|j\right\rangle^2}{\hbar^2}\,\frac{t\sin(2\omega_{fj}t)}{\omega_{fj}}$$

共振时 $\mathcal{A}$ 的峰值随着时间 t 呈线性变化. 对比 (44) 式中的共振吸收项或者共振辐射项,

$$p^{\text{abs}}_{j\to f}(\omega,t)=\frac{|\left\langle f|V_0|j\right\rangle|^2}{\hbar^2}\left\{\frac{\sin[(\omega_{fj}-\omega)t/2]}{(\omega_{fj}-\omega)/2}\right\}^2$$

$$p^{\text{abs}}_{j\to f}(\omega,t)\xrightarrow{\omega\to\omega_{fj}}\frac{\left\langle f|V_0|j\right\rangle^2}{\hbar^2}\,t^2$$

共振时的值 $\propto t^2$, 所以, 当时间足够长时, 相干项被忽略.

微扰时间既不能很短, 也不能很长

- 前面提到, 如果微扰作用的时间较短, 那么微扰项没有充分的时间体现振荡的特性, 近乎线性微扰或常微扰. 见 (47) 式.
- 现在发现, 随着时间的延长, 跃迁几率似乎可以远大于 1. 从图 3 中看出: 图中最大波包的高度正比于 t^2, 当 t 充分大的时候, 跃迁几率可以远大于 1.

为了使一级近似的共振跃迁几率是合理的, 就应该要求微扰的作用时间也不能非常长. 参考 $p^{\text{abs}}_{j\to f}$ 的峰值 $\frac{|\langle f|V_0|j\rangle|^2 t^2}{\hbar^2}$, 对微扰的作用时间设立一个条件

$$t \ll \frac{\hbar}{|\langle f|V_0|j\rangle|} \tag{48}$$

而在实际情况中, 如果微扰的作用时间非常长, 那么就需要考虑所谓的久期近似 (secular approximation), 参看 Cohen 书 Complement C_{XIII}.

将条件 (47) 和 (48) 结合在一起,

$$\left.\begin{array}{ll} \text{Eq. (47)} & 2|\omega_{fj}| \gg \Delta\omega, \quad \text{i.e.,} \quad t \gg \frac{1}{\omega_{fj}} \approx \frac{1}{\omega} \\ \text{Eq. (48)} & t \ll \frac{\hbar}{|\langle f|V_0|j\rangle|} \end{array}\right\} \Longrightarrow \frac{1}{|\omega_{fj}|} \ll \frac{\hbar}{|\langle f|V_0|j\rangle|}$$

也就是说, 能级差 $|E_f - E_j| = \hbar|\omega_{fj}|$ 应该比矩阵元 $|\langle f|V_0|j\rangle|$ 大得多. 这也是微扰的 "微弱" 性的体现.

末态能级呈连续分布

如果末态能级 E_f 不是离散能级中的一个, 而是未受扰哈密顿量 H_0 的连续能谱中的某个值, 那么我们就不能在此连续情形下考虑一个 "点" 事件.

合理的表达是: 微扰作用一定时间后, 发现系统处于 E_f 的邻域内的几率是多少?

需要引入态密度 (density of states). 以一维自由运动的粒子为例. 如果自由粒子的量子态是一个波包 —— 由不同的动量本征态叠加而成:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(p)\,|p\rangle\,\mathrm{d}p$$

其中 $|p\rangle$ 是动量 P 的本征态, $P|p\rangle = p|p\rangle$. 而 $\varphi(p)$ 实际上就是量子态 $|\psi\rangle$ 的动量破函数. 如果测量粒子的动量, 那么测到的动量值介于 p_1 和p_2 之间的几率是

$$\text{Prob}(p \in [p_1, p_2]) = \int_{p_1}^{p_2} |\varphi(p)|^2\,\mathrm{d}p$$

但是, 有的时候, 关注的对象是粒子的能量. 如果测量粒子的能量, 那么发现测量得到的能量值介于 E_1 和 E_2 之间的几率是

$$\text{Prob}(E \in [E_1, E_2]) = \int_{\sqrt{2mE_1}}^{\sqrt{2mE_2}} |\varphi(p)|^2\,\mathrm{d}p + \int_{-\sqrt{2mE_2}}^{-\sqrt{2mE_1}} |\varphi(p)|^2\,\mathrm{d}p$$

将积分变量改为能量, 有

$$\text{Prob}(E \in [E_1, E_2]) = \int_{E_1}^{E_2} \sqrt{\frac{m}{2E}}\,\left|\varphi\big(\sqrt{2mE}\big)\right|^2\mathrm{d}E + \int_{E_1}^{E_2} \sqrt{\frac{m}{2E}}\,\left|\varphi\big(-\sqrt{2mE}\big)\right|^2\mathrm{d}E$$

出现在被积函数中的 $\sqrt{\frac{m}{2E}}$ 就是态密度, 记作 $\rho(E)$. 这里, 对于一维自由粒子,

$$\rho(E) = \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}E} = \sqrt{\frac{m}{2E}}$$

现在回到关于微扰的讨论, 考虑末态能级呈连续分布.

常微扰情形

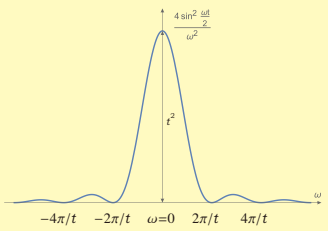
(40) 式给出了能级呈离散分布时的跃迁几率.
现在设初态能级仍然是离散的, 系统处于能级 E_j, 末态能级是连续分布的. 跃迁到 E_f 邻域内 (用 δE_f 表示这个邻域) 的几率是

$$p_{j\to[f]} = \int_{E\in\delta E_f} \rho(E)\frac{4|V_{Ej}|^2}{(E-E_j)^2}\sin^2\left[\frac{(E-E_j)t}{2\hbar}\right]\mathrm{d}E \tag{49}$$

对上式的解释:

- 几率 p 的下标 $j\to[f]$ 表示从离散的能级 E_j 跃迁至连续分布的处于 E_f 的邻域内的能级.
- 积分是对能量进行的, 积分的区域是 E_f 的邻域 δE_f.
- 被积函数中的 $\rho(E)$ 是态密度.
- 在 E_j 和 E_f 都是离散分布的能级时, 微扰项的矩阵元为 V_{fj}. 现在 E_f 是连续分布的, 末态的能级 $E\in\delta E_f$, 因此微扰项的 "矩阵元" 也是连续分布的, 并且将下标改写为 V_{Ej}.

考察由图 1 给出的跃迁几率 (49) 中的函数 $\left[\frac{\sin\frac{(E-E_j)t}{2\hbar}}{\frac{E-E_j}{2\hbar}}\right]^2$



其中 $\omega = \frac{E-E_j}{\hbar}$.

在 $E\sim E_j$ 附近, 即 $\omega\approx 0$ 附近, 函数衰减得很快. 该函数能够显著起作用的区域只是一小段 —— 以 E_j 为中心, 宽度为 $\frac{4\pi\hbar}{t}$ 的能量区间, 即区间

$$\left[E_j - \frac{2\pi\hbar}{t}, E_j + \frac{2\pi\hbar}{t}\right] \tag{50}$$

如果时间 t 充分长, 这个有显著作用的区间变得很小, 而峰值变得很大, 可以近似为

$$\lim_{t\to\infty}\left[\frac{\sin\frac{(E-E_j)t}{2\hbar}}{\frac{E-E_j}{2\hbar}}\right]^2 = \pi t\delta\left(\frac{E-E_j}{2\hbar}\right) = 2\pi\hbar t\delta(E-E_j) \tag{51}$$

再来看跃迁几率 (49) 中被积函数的其余部分, 即 $\rho(E)|V_{Ej}|^2$. 一般来说, 这部分随能级的变化要缓慢得多, 而且, 还应该进一步考虑能级区间 (50), 当时间 t 充分长的时候, 这个区间很窄, 更有理由认为在这个区间中 $\rho(E)|V_{Ej}|^2$ 的变化非常小.

现在, 可以将渐近形式 (51) 代入跃迁几率的积分形式 (49),

$$p_{j\to[f]} = \int_{E\in\delta E_f} \frac{\rho(E)}{\hbar^2}|V_{Ej}|^2\left[\frac{\sin\left[(E-E_j)t/(2\hbar)\right]}{(E-E_j)/(2\hbar)}\right]^2 \mathrm{d}E$$

$$\longrightarrow \int_{E\in\delta E_f} \frac{\rho(E)}{\hbar^2}|V_{Ej}|^2\ 2\pi\hbar t\ \delta(E-E_j)\,\mathrm{d}E$$

看起来似乎是将被积函数中的 E 替换成 E_j 便可得到积分后的结果, 但是有个细节需要注意. 注意矩阵元 $V_{Ej} = \langle E|V|j\rangle$, 这里, $|E\rangle$ 表示连续分布的能谱所对应的能量本征态. 在计算包含 δ 函数 $\delta(E-E_j)$ 的积分的时候, 如果将 E 替换为 E_j, 那么矩阵元将改写为 $\langle E_j|V|j\rangle$. 在这个形式中, 须注意到 $|E_j\rangle$ 是连续能谱的本征态, 也就是说, 虽然 $|E_j\rangle$ 和 $|j\rangle$ 对应于相同的能量本征值, 但是前者属于连续情形, 而后者属于离散情形. 类似地, 在积分结果中, 态密度写作 $\rho(E_f = E_j)$, 而不是简单地记作 $\rho(E_j)$, 旨在表明末态的能级值虽是等于初态的能级值, 但是它们分属于不同性质的能谱.

基于上述考虑, 得到跃迁几率的表达式

$$p_{j\to[f]} = \frac{2\pi}{\hbar}t\big|\,\langle E_f = E_j|V|j\rangle\,\big|^2\rho(E_f = E_j) \tag{52}$$

进而得到单位时间内的跃迁速率, 用 $w_{j\to[f]}$ 表示

$$w_{j\to[f]} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_{j\to[f]} = \frac{2\pi}{\hbar}\big|\,\langle E_f = E_j|V|j\rangle\,\big|^2\rho(E_f = E_j) \tag{53}$$

上式被称为 **Fermi 规则** (Fermi's golden rule).

简谐微扰, 共振情形

在初态和末态都是离散的情形下, 共振吸收的几率是

$$p^{\mathrm{abs}}_{j\to f}(\omega,t) = \frac{\big|\,\langle f|V_0|j\rangle\,\big|^2}{\hbar^2}\ |A_-|^2 \tag{54}$$

其中 A_- 是

$$A_- = \frac{\sin\frac{(\omega_{fj}-\omega)t}{2}}{\frac{\omega_{fj}-\omega}{2}}\ e^{i\frac{(\omega_{fj}-\omega)t}{2}} \tag{55}$$

如果末态是连续分布的, 那么, 就要考虑从初态能级 E_j 到处于 E_f 的邻域内的能级之间的跃迁, 该邻域仍然用 δE_f 表示. 与 (49) 类似, 有

$$p^{\mathrm{abs}}_{j\to[f]} = \int_{E\in\delta E_f}\rho(E)\frac{\big|\,\langle E|V_0|j\rangle\,\big|^2}{\hbar^2}|A_-|^2\,\mathrm{d}E$$

$$= \int_{E\in\delta E_f}\rho(E)\frac{4\big|\,\langle E|V_0|j\rangle\,\big|^2}{\hbar^2}\ \frac{\sin^2\frac{(\omega_{Ej}-\omega)t}{2}}{(\omega_{Ej}-\omega)^2}\,\mathrm{d}E$$

$$= \int_{E\in\delta E_f} \rho(E) \left| \langle E|V_0|j\rangle \right|^2 \left[\frac{\sin \frac{(E-E_j-\hbar\omega)t}{2\hbar}}{\frac{E-E_j-\hbar\omega}{2\hbar}} \right]^2 \mathrm{d}E \tag{56}$$

其中 $\rho(E)$ 是态密度, $|E\rangle$ 表示连续分布的能级所对应的能量本征态.

利用 $t \to \infty$ 时的渐近性质 (51), 有

$$\lim_{t\to\infty} \left[\frac{\sin \frac{(E-E_j-\hbar\omega)t}{2\hbar}}{\frac{E-E_j-\hbar\omega}{2\hbar}} \right]^2 = \pi t \delta \left(\frac{E-E_j-\hbar\omega}{2\hbar} \right) = 2\pi\hbar t \delta(E-E_j-\hbar\omega) \tag{57}$$

代入共振吸收的跃迁几率, 有

$$p^{\text{abs}}_{j\to[f]} = \frac{2\pi}{\hbar} t \left| \langle E_f = E_j + \hbar\omega|V_0|j\rangle \right|^2 \rho(E_f = E_j + \hbar\omega) \tag{58}$$

跃迁速率是

$$w^{\text{abs}}_{j\to[f]} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle E_f = E_j + \hbar\omega|V_0|j\rangle \right|^2 \rho(E_f = E_j + \hbar\omega) \tag{59}$$

类似的计算可以给出共振辐射的几率和跃迁速率

$$p^{\text{emi}}_{j\to[f]} = \frac{2\pi}{\hbar} t \left| \langle E_f = E_j - \hbar\omega|V_0|j\rangle \right|^2 \rho(E_f = E_j - \hbar\omega) \tag{60}$$

$$w^{\text{emi}}_{j\to[f]} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle E_f = E_j - \hbar\omega|V_0|j\rangle \right|^2 \rho(E_f = E_j - \hbar\omega) \tag{61}$$

第十章　微扰论 IV

电磁场中的原子

前面关于简谐微扰的讨论可以用于分析原子在外场中的吸收和 (受激) 辐射. 下面的讨论是半经典的: 用量子理论处理原子, 用经典的电磁理论处理电磁场.

Cohen 书中的叙述

首先谈谈 Cohen 书中的 Complement $\mathrm{A}_{\mathrm{XIII}}$. 考虑原子中的价电子, 电子的质量为 M, 电量为 $q=e<0$. 设电子处在中心势场 $V(r)$ 中, r 是价电子与原子实中心之间的距离. 原子实与电子的折合质量约等于电子质量 M. 原子处于电磁场中, 电子的 Hamilton 量是 (国际单位制)

$$H=\frac{1}{2M}\left[\boldsymbol{P}-q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},t)\right]^2+V(R)-\frac{q}{M}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{R},t) \tag{1}$$

上式最后一项表示电子的自旋磁矩与外磁场之间的相互作用.

电势能项 $q\phi$ 去哪了?

可以通过规范变换, 使得 $\phi=0$.

按照 Cohen 书中的设定, 考虑沿 y 方向传播的单一频率的平面电磁波. 矢量势沿 z 方向, 表示为

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{e}_z\mathscr{A}_0e^{iky-i\omega t}+\boldsymbol{e}_z\mathscr{A}_0^*e^{-iky+i\omega t} \tag{2}$$

其中 $\mathscr{A}_0$ 是复常数, 它的辐角依赖于初始时刻的选择. 接着可以给出电场强度和磁感应强度,

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\partial\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)}{\partial t}=\boldsymbol{e}_z\,i\omega\mathscr{A}_0e^{i(ky-\omega t)}-\boldsymbol{e}_z\,i\omega\mathscr{A}_0^*e^{-i(ky-\omega t)} \tag{3}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)=\nabla\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{e}_x\,ik\mathscr{A}_0e^{i(ky-\omega t)}-\boldsymbol{e}_x\,ik\mathscr{A}_0^*e^{-i(ky-\omega t)} \tag{4}$$

选择初始时刻, 使得 $\mathscr{A}_0$ 为纯虚数, 并且令

$$i\omega\mathscr{A}_0 = \frac{\mathscr{E}}{2}, \quad ik\mathscr{A}_0 = \frac{\mathscr{B}}{2} \tag{5}$$

其中 $\mathscr{E}$ 和 $\mathscr{B}$ 是实常数, 且

$$\frac{\mathscr{E}}{\mathscr{B}} = \frac{\omega}{k} = \text{光速 } c$$

则矢量势 $\boldsymbol{A}$ 可以写为

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{e}_z\ 2i\mathscr{A}_0 \sin(ky-\omega t) = \frac{\mathscr{E}}{\omega}\sin(ky-\omega t) \tag{6}$$

于是, 电场强度和磁感应强度分别表示为

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{e}_z\ \mathscr{E}\cos(ky-\omega t) \tag{7}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{e}_x\ \mathscr{B}\cos(ky-\omega t) \tag{8}$$

这样一来, $\mathscr{E}$ 和 $\mathscr{B}$ 分别是平面电磁波中的电场振幅和磁场振幅.

(1) 式给出的哈密顿量所对应的势的选择是

$$\left.\begin{aligned} &\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \tfrac{\mathscr{E}}{\omega}\sin(ky-\omega t) \\ &\phi(\boldsymbol{r},t) = 0 \end{aligned}\right\} \tag{9}$$

考虑规范变换

$$\chi(\boldsymbol{r},t) = z\frac{\mathscr{E}}{\omega}\sin\omega t$$

得到规范变换后的矢量势和标量势,

$$\left.\begin{aligned} &\tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{A} + \nabla\chi = \boldsymbol{e}_z\tfrac{\mathscr{E}}{\omega}[\sin(ky-\omega t) + \sin\omega t] \\ &\tilde{\phi} = \phi - \tfrac{\partial\chi}{\partial t} = -z\mathscr{E}\cos\omega t \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

所以, 规范变换后的哈密顿量为

$$\tilde{H} = \frac{1}{2M}\big[\boldsymbol{P} - q\tilde{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{R},t)\big]^2 + V(R) + q\tilde{\phi} - \frac{q}{m}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{R},t) \tag{11}$$

在 $\tilde{H}$ 中, 出现了我们熟悉的电势能项 $q\tilde{\phi}$.

到目前为止, 还没有作近似处理. 看到的是, 可以通过规范变换消除标量势. 但是, 不能通过规范变换将矢量势变为零: 标量函数 $\chi(x,y,z,t)$ 对 x 和 y 的偏导数均为零, 但是, 对 z 的偏导数的结果却是 y 的函数, 这样的标量函数不存在.

Lorentz 规范和 Coulomb 规范

回顾电动力学的内容. 这里用国际单位制.

在 Maxwell 方程中, 引入标量势 ϕ 和矢量势 $\boldsymbol{A}$, 有

$$\nabla^2\phi + \frac{\partial}{\partial t}(\nabla\cdot\boldsymbol{A}) = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{12}$$

$$\nabla^2\boldsymbol{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2} - \nabla\left(\nabla\cdot\boldsymbol{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = -\mu_0\boldsymbol{j} \tag{13}$$

也就是说, 利用标量势和矢量势将四个 Maxwell 方程改写为上述两个方程. 注意 $\nabla^2\boldsymbol{A} \neq \nabla(\nabla\cdot\boldsymbol{A})$.

方程 (12) 和 (13) 彼此耦合的, 可以通过规范变换解除它们的耦合. 对于某个标量函数 $\chi(\boldsymbol{r},t)$, 作变换

$$\boldsymbol{A} \longrightarrow \boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla\chi \tag{14}$$

$$\phi \longrightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t} \tag{15}$$

代入方程 (12) 和 (13), 发现它们的形式没有改变, 只是将 ϕ 和 $\boldsymbol{A}$ 分别换成了 ϕ' 和 $\boldsymbol{A}'$. 但是, 如果规范变换后, $\boldsymbol{A}'$ 和 ϕ' 满足

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A}' + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi'}{\partial t} = 0 \tag{16}$$

那么方程 (12) 和 (13) 将不再耦合, 它们分别变为

$$\nabla^2\phi' - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\phi'}{\partial t^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{17}$$

$$\nabla^2\boldsymbol{A}' - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}'}{\partial t^2} = -\mu_0\boldsymbol{j} \tag{18}$$

式 (16) 就是 Lorentz 条件, 满足该条件的规范变换是 Lorentz 规范.

将规范变换的表达式 (14) 和 (15) 代入 Lorentz 条件(16),

$$\nabla\cdot\boldsymbol{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t} + \nabla^2\chi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\chi}{\partial t^2} = 0$$

这就是说, 如果原先的势不满足 Lorentz 条件, 那么只要规范函数 χ 满足

$$\nabla^2\chi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\chi}{\partial t^2} = -\left(\nabla\cdot\boldsymbol{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)$$

那么规范变换后的势满足 Lorentz 条件.

即便原先的势 $\boldsymbol{A}$ 和 ϕ 已经满足 Lorentz 条件了, 也还是有规范选择的自由. 只要规范函数 χ 满足

$$\nabla^2\chi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\chi}{\partial t^2} = 0$$

那么规范变换后的势依然满足 Lorentz 条件.

另一类型的规范是 Coulomb 规范. 选择规范函数, 使得

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0 \tag{19}$$

方程 (12) 变为

$$\nabla^2 \phi = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \tag{20}$$

标量势便是由电荷分布 $\rho(\boldsymbol{r}, t)$ 形成的 Coulomb 势,

$$\phi(\boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\boldsymbol{r}', t)}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} \, \mathrm{d}^3 r$$

这就是 "Coulomb 规范" 这一名称的由来.

在 Coulomb 规范下, 矢量势 $\boldsymbol{A}$ 满足的方程 (13) 变为

$$\nabla^2 \boldsymbol{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2} = -\mu_0 \boldsymbol{j} + \frac{1}{c^2} \nabla \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right) \tag{21}$$

考虑电磁波在无源空间中 ($\rho = 0$, $\boldsymbol{j} = 0$) 传播, 在 Coulomb 规范下, (20) 变为 $\nabla^2 \phi = 0$, 标量势可以设为 $\phi = 0$, 实际上, 为了使得无穷远处电势为零, $\nabla^2 \phi = 0$ 只有唯一解 $\phi = 0$. 这就是辐射规范 (radiation gauge). 在此情形下, (21) 式简化为

$$\nabla^2 \boldsymbol{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2} = 0 \tag{22}$$

较为一般的考虑

现在我们知道, 哈密顿量 (1) 是 Coulomb 规范 (或者辐射规范) 的结果. 电磁场的矢量势应该满足如下条件

$$\nabla^2 \boldsymbol{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2} = 0, \quad \nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0 \tag{23}$$

上面第一个方程的解具有平面波的形式,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega, t) &= 2\boldsymbol{A}_0(\omega) \cos(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \alpha) \\ &= \boldsymbol{A}_0(\omega) e^{i(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \alpha)} + \boldsymbol{A}_0(\omega) e^{-i(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \alpha)} \end{aligned} \tag{24}$$

在这里, 我们特别添上了电磁场的频率 ω, 一方面是为了指明目前考虑的是固定的单一频率的电磁场, 另一方面是为了以后推广到一般情形 —— 电磁场由不同频率电磁波构成. (24) 式实际上是 (2) 式的一般形式. 其中 $\boldsymbol{A}_0(\omega)$ 是一个仅仅与频率有关的实向量, α 是初始时刻的相位. 为了使 (24) 满

足条件 (23) 中的第一个条件, 需要有 $\omega = kc$, 其中 $k = |\boldsymbol{k}|$. 为了满足 (23) 式的第二个条件, 则需要 $\boldsymbol{A}_0(\omega)$ 垂直于 $\boldsymbol{k}$, 即 $\boldsymbol{A}_0(\omega) \cdot \boldsymbol{k} = 0$. 将这两个条件写在一起,

$$\omega = kc, \quad \boldsymbol{A}_0(\omega) \cdot \boldsymbol{k} = 0 \tag{25}$$

接着可以用 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega, t)$ 表示电场和磁场,

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, \omega, t) = -\frac{\partial \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega, t)}{\partial t} = -2\boldsymbol{A}_0(\omega)\omega \sin(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \alpha)$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}, \omega, t) = \nabla \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, \omega, t) = -2\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{A}_0(\omega) \sin(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \alpha)$$

计算一下 Poynting 矢量 $\boldsymbol{G} = \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{B}$,

$$\boldsymbol{G}(\boldsymbol{r}, \omega, t) = \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{B} = \boldsymbol{k}\frac{4\omega A_0^2(\omega)}{\mu_0} \sin^2(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r} - \omega t + \alpha)$$

传播方向沿波矢 $\boldsymbol{k}$ 的方向. 在一个周期内的平均值的大小是

$$\bar{G}(\boldsymbol{r}, \omega) = |\bar{\boldsymbol{G}}(\boldsymbol{r}, \omega)| = \frac{2\omega^2 A_0^2(\omega)}{c\mu_0} = 2\epsilon_0 c\omega^2 A_0^2(\omega) \tag{26}$$

电磁场的能量密度

$$u = \frac{1}{2}\left(\epsilon_0 E^2 + \frac{1}{\mu_0}B^2\right)$$

在一个周期内的平均值是

$$\bar{u}(\omega) = 2\epsilon_0\omega^2 A_0^2(\omega) \tag{27}$$

国际单位制和 Gauss 单位制有如下关系 (参看 Jackson 著《经典电动力学》).

国际单位制	Gauss 单位制
$(\boldsymbol{E}, \phi, V)$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}(\boldsymbol{E}, \phi, V)$
$\boldsymbol{D}$	$\sqrt{\frac{\epsilon_0}{4\pi}}\boldsymbol{D}$
(q, ρ)	$\sqrt{4\pi\epsilon_0}(q, \rho)$
$(\boldsymbol{B}, \boldsymbol{A})$	$\sqrt{\frac{\mu_0}{4\pi}}(\boldsymbol{B}, \boldsymbol{A})$
$\boldsymbol{H}$	$\frac{1}{\sqrt{4\pi\mu_0}}\boldsymbol{H}$

在国际单位制中,

Poynting 向量 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}$

$$\boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}, \quad \text{假设标量势为零}$$

$$\boldsymbol{H} = \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B} = \frac{1}{\mu_0}\nabla \times \boldsymbol{A}$$

在 Gauss 单位制中,

$$\boldsymbol{G} = \frac{c}{4\pi}\boldsymbol{E} \times \boldsymbol{H}$$

$$\boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}$$

$$\boldsymbol{H} = \nabla \times \boldsymbol{A}$$

所以在 Gauss 制中, Poynting 矢量的表达式 (26) 改写为

$$\bar{G}(\boldsymbol{r}, \omega) = \frac{\omega^2}{2\pi c} A_0^2(\omega)$$

继续讨论哈密顿量 (1), 将其展开, 注意到已经利用了 Coulomb 规范, 所以展开式中不存在 $\nabla \cdot \boldsymbol{A}$ 项,

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(R) - \frac{q}{M}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}, t) \cdot \boldsymbol{P} - \frac{q}{M}\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{R}, t) + \frac{q^2}{2m}\big[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}, t)\big]^2 \tag{28}$$

其中矢量势 $\boldsymbol{A}$ 中的参量 ω 暂且省略未写.

将未受扰项 H_0 和微扰项 $H'(t)$ 分别视作

$$H_0 = \frac{P^2}{2M} + V(R) \tag{29}$$

$$H'(t) = -\frac{q}{M}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}, t) \cdot \boldsymbol{P} - \frac{q}{M}\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{R}, t) + \frac{q^2}{2m}\big[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}, t)\big]^2 \tag{30}$$

在微扰项中, 前两项与 $|\boldsymbol{A}_0|$ 的依赖关系是线性的, 第三项则是平方关系. 在普通情形下, $\boldsymbol{A}_0^2$ 项可以忽略, 即忽略上式右端的第三项, 因此将微扰项写为

$$H'(t) \approx W_I(t) + W_{II}(t)$$

其中

$$W_I(t) = -\frac{q}{M}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}, t) \cdot \boldsymbol{P} \tag{31}$$

$$W_{II}(t) = -\frac{q}{M}\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{R}, t) \tag{32}$$

再作量级估计. 自旋角动量 $\boldsymbol{S}$ 是 $\hbar$ 量级的, 磁场 $\boldsymbol{B}$ 是 $k|\boldsymbol{A}_0|$ 量级的, 所以

$$\frac{W_{II}(t)}{W_I(t)} \approx \frac{\frac{q}{M}\hbar k|\boldsymbol{A}_0|}{\frac{q}{M}p|\boldsymbol{A}_0|} = \frac{\hbar k}{p}$$

注意到 $\frac{\hbar}{p}$ 最大不过原子尺度, 具有 Bohr 半径的量级. 而 k 等于 $\frac{2\pi}{\lambda}$, 波长 λ 则比 Bohr 半径大得多, 所以

$$\frac{W_{II}(t)}{W_I(t)} \approx \frac{a_0}{\lambda} \ll 1$$

于是, 又进一步地略去了自旋与外磁场的相互作用项 W_{II}, 也就相当于将磁场视作零.

经过上述近似处理之后, 含时微扰项是

$$W_I(t) = -\frac{q}{M}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},t)\cdot\boldsymbol{P} \tag{33}$$

通常称之为 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}$ 形式的微扰.

现在考虑跃迁几率. 假设在 $t<0$ 时不存在外加电磁场, 系统处于离散分布的能级中的某个 E_j, 相应的本征态记作 $|j\rangle$. 在 $t=0$ 时刻电磁场开始对系统产生影响. 在弱场近似下, 外场对系统的影响由 (33) 式确定. 以前我们讨论过形如 $V_0e^{-i\omega t}+V_0^\dagger e^{i\omega t}$ 的简谐微扰导致的跃迁几率, 目前需要知道在 (33) 中与 V_0 对应的形式是什么.

将 (24) 式写为算子形式, 代入 (33),

$$W_I(t) = -\frac{q}{M}\left[e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}+\alpha)}\boldsymbol{A}_0\cdot\boldsymbol{P}\right]e^{-i\omega t} - \frac{q}{M}\left[e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}+\alpha)}\boldsymbol{A}_0\cdot\boldsymbol{P}\right]e^{i\omega t}$$

注意到 $\boldsymbol{k}\perp\boldsymbol{A}_0$ (见 (25) 式), 因此 $[e^{\pm i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}+\alpha)}, \boldsymbol{A}_0\cdot\boldsymbol{P}]=0$, 于是令

$$V_0 = -\frac{q}{M}\left[e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}+\alpha)}\boldsymbol{A}_0\cdot\boldsymbol{P}\right] \tag{34}$$

微扰项可以表示为

$$W_I(t) = V_0e^{-i\omega t}+V_0^\dagger e^{i\omega t}$$

考虑共振吸收的几率 $p^{\text{abs}}_{j\to f}(\omega,t)$, 假设能级 E_f 也是离散的, 直接利用 Chapter10-3 中的结论,

$$p^{\text{abs}}_{j\to f}(\omega,t) = \frac{|\langle f|V_0|j\rangle|^2}{\hbar^2}\left\{\frac{\sin[(\omega_{fj}-\omega)t/2]}{(\omega_{fj}-\omega)/2}\right\}^2$$

其中 $\omega_{fj}=(E_f-E_j)/\hbar$. 接下来就要计算矩阵元 $\langle f|V_0|j\rangle$. 不妨假设电磁波沿 y 方向传播, $\boldsymbol{k}=k\boldsymbol{e}_y$, 矢量势的方向沿 z 方向, $\boldsymbol{A}_0=A_0\boldsymbol{e}_z$, 因此 V_0 表示为

$$V_0 = -\frac{qA_0}{M}e^{i(k_yY+\alpha)}P_z$$

再作进一步的近似. 注意到电磁场能够对原子起作用的区域仅仅具有原子尺度的大小, 所以, 只保留 $e^{\pm ikY}$ 展开的第一项, 即 $e^{\pm ikY}\sim\mathbb{1}$. 而且, 初始时刻的相因子 $e^{i\alpha}$ 不会对跃迁几率带来任何影响, 所以忽略相位上的 α, 将 V_0 写为

$$V_0 = -\frac{qA_0}{M}P_z \tag{35}$$

利用对易子 $[Z,H_0]=[Z,\frac{P^2}{2M}]=i\hbar\frac{P_z}{M}$, 计算 V_0 的矩阵元 $\langle f|V_0|j\rangle$.

$$\langle f|V_0|j\rangle = -\frac{qA_0}{i\hbar}\langle f|[Z,H_0]|j\rangle$$

$$= \frac{qA_0}{i\hbar}(E_f - E_j)\langle f|Z|j\rangle$$

$$= -iqA_0\omega_{fj}\langle f|Z|j\rangle$$

然后得到共振吸收的跃迁几率

$$p^{\text{abs}}_{j\to f}(\omega,t) = \frac{q^2A_0^2\omega_{fj}^2}{\hbar^2}\big|\langle f|Z|j\rangle\big|^2\left\{\frac{\sin[(\omega_{fj}-\omega)t/2]}{(\omega_{fj}-\omega)/2}\right\}^2 \tag{36}$$

其中外场频率 ω 在 Bohr 频率 ω_{fj} 附近. 共振辐射的跃迁几率有类似形式.

进一步的推广

在上面讨论的中, 电磁场被充分简化了: 单一的频率, 沿固定方向传播. 应该作进一步的推广, 认为电磁场由不同频率组成, 而且传播方向也是任意的.

先讨论关于频率的推广. 电磁场的传播方向仍然是波矢 $\boldsymbol{k}$ 的方向, 但是由不同频率的电磁波组成, 于是将矢量势表示为不同频率的 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},\omega,t)$ 关于 ω 的积分形式, 即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},t) &= \int_0^\infty \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},\omega,t)\,\mathrm{d}\omega \\ &= \int_0^\infty \left\{\boldsymbol{A}_0(\omega)e^{-i[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}-\omega t+\alpha(\omega)]} + \boldsymbol{A}_0(\omega)e^{-i[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}-\omega t+\alpha(\omega)]}\right\}\mathrm{d}\omega\end{aligned}$$

这里, 我们将初相位写为 $\alpha(\omega)$, 意在表明对应于不同频率的矢量势可以有不同的初相.

将上述形式的矢量势带入微扰项 $W_I(t) = -\frac{q}{M}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R},t)\cdot\boldsymbol{P}$,

$$W_I(t) = -\frac{q}{M}\int_0^\infty e^{i[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}-\omega t+\alpha(\omega)]}\boldsymbol{A}_0(\omega)\cdot\boldsymbol{P}\,\mathrm{d}\omega + \text{H.C.} \tag{37}$$

其中 H.C. 表示前一个表达式的厄密共轭. 注意到 $\boldsymbol{k}\perp\boldsymbol{A}_0(\omega)$, 所以 $\boldsymbol{A}_0(\omega)\cdot\boldsymbol{P}$ 与 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}$ 对易, H.C. 项实际上就是

$$-\frac{q}{M}\int_0^\infty e^{-i[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}-\omega t+\alpha(\omega)]}\boldsymbol{A}_0(\omega)\cdot\boldsymbol{P}\,\mathrm{d}\omega$$

类似于关于得到 (35) 式的考虑, 针对含时微扰项 (37), 作近似 $e^{\pm i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}\approx\mathbb{1}$, 将 $W_I(t)$ 写为

$$W_I(t) = -\frac{q}{M}\int_0^\infty \boldsymbol{A}_0(\omega)\cdot\boldsymbol{P}e^{-i[\omega t-\alpha(\omega)]}\,\mathrm{d}\omega - \frac{q}{M}\int_0^\infty \boldsymbol{A}_0(\omega)\cdot\boldsymbol{P}e^{i[\omega t-\alpha(\omega)]}\,\mathrm{d}\omega \tag{38}$$

然后, 回顾含时微扰情形下能级 E_f 的几率幅一级近似的表达式, $c_f(t)\approx c_f^{(0)}(t)+c_f^{(1)}(t) = c_f^{(1)}(t)$.

$$\begin{aligned}c_f^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar}\int_0^t \langle f|W_I(t')|j\rangle\, e^{i\omega_{fj}t'}\,\mathrm{d}t' \\ &= -\frac{1}{i\hbar}\frac{q}{M}\int_0^t \mathrm{d}t\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\ \langle f|\boldsymbol{A}_0(\omega)\cdot\boldsymbol{P}|j\rangle\, e^{i(\omega_{fj}-\omega)t}e^{i\alpha(\omega)}\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&-\frac{1}{i\hbar}\frac{q}{M}\int_0^t \mathrm{d}t \int_0^\infty \mathrm{d}\omega \ \langle f|\boldsymbol{A}_0(\omega)\cdot\boldsymbol{P}|j\rangle\, e^{i(\omega_{fj}+\omega)t}e^{-i\alpha(\omega)} \\
=&-\frac{1}{i\hbar}\frac{q}{M}\langle f|\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}|j\rangle \\
&\times\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\ A_0(\omega)\left\{\frac{\sin\frac{(\omega_{fj}-\omega)t}{2}}{\frac{\omega_{fj}-\omega}{2}}\ e^{i\frac{(\omega_{fj}-\omega)}{2}}e^{i\alpha(\omega)}+\frac{\sin\frac{(\omega_{fj}+\omega)t}{2}}{\frac{\omega_{fj}+\omega}{2}}\ e^{i\frac{(\omega_{fj}+\omega)}{2}}e^{-i\alpha(\omega)}\right\} \qquad (39)
\end{aligned}
$$

在上面最后一个等式中, 我们假设矢量势的方向是 $\boldsymbol{n}$, 即 $\boldsymbol{A}_0(\omega)=A_0(\omega)\boldsymbol{n}$. 将上式第一项称为 共振吸收项, 将第二项称为 共振辐射项.

现在考虑跃迁几率 $\left|c_f^{(1)}(t)\right|^2$,

$$
\left|c_f^{(1)}(t)\right|^2=|\text{共振吸收项}|^2+|\text{共振辐射项}|^2+\text{相干项}
$$

在 (39) 式中, 函数 $\sin\frac{(\omega_{fj}\mp\omega)t}{2}\Big/\frac{\omega_{fj}\mp\omega}{2}$ 以及它的平方形式具有相同的特点: 峰值分别出现在 $\omega=\pm\omega_{fj}$ 处. 当微扰时间的充分长, 这两个峰都变高变窄, 且距离很远. 基于这样的考虑, 忽略相干项, 并且只关心近共振情形. 以共振吸收为例,

$$
\begin{aligned}
p^{\text{abs}}_{j\to f}(t)&=|\text{共振吸收项}|^2 \\
&=\frac{q^2}{\hbar^2M^2}|\langle f|\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}|j\rangle|^2\left|\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\ A_0(\omega)\frac{\sin\frac{(\omega_{fj}-\omega)t}{2}}{\frac{\omega_{fj}-\omega}{2}}\ e^{i\frac{(\omega_{fj}-\omega)}{2}}e^{i\alpha(\omega)}\right|^2
\end{aligned}
$$

这里应该注意到, 严格地说, 上式中积分的模方不等于被积函数的模方的积分, 即不等于

$$
\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\ \left|A_0(\omega)\frac{\sin\frac{(\omega_{fj}-\omega)t}{2}}{\frac{\omega_{fj}-\omega}{2}}\ e^{i\frac{(\omega_{fj}-\omega)}{2}}e^{i\alpha(\omega)}\right|^2
$$

但是, 我们假设构成电磁场的不同频率的平面电磁波之间没有相干性, 也就是说, 不同频率的平面波的初相位 $\alpha(\omega)$ 之间没有联系, 可以视作随机分布, 于是在严格计算 $|\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\ \cdots|^2$ 的过程中出现的相干项很小, 就此忽略, 进而将跃迁几率表示为

$$
p^{\text{abs}}_{j\to f}(t)=\frac{q^2}{\hbar^2M^2}|\langle f|\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}|j\rangle|^2\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\ \left|A_0(\omega)\frac{\sin\frac{(\omega_{fj}-\omega)t}{2}}{\frac{\omega_{fj}-\omega}{2}}\ e^{i\frac{(\omega_{fj}-\omega)}{2}}e^{i\alpha(\omega)}\right|^2 \qquad (40)
$$

$$
=\frac{q^2}{\hbar^2M^2}|\langle f|\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}|j\rangle|^2\int_0^\infty \mathrm{d}\omega\ A_0^2(\omega)\left[\frac{\sin\frac{(\omega_{fj}-\omega)t}{2}}{\frac{\omega_{fj}-\omega}{2}}\right]^2 \qquad (41)
$$

在上面的被积函数中, $[\cdots]^2$ 项随着外场作用时间的延长, 最大的波峰越来越高, 越来越窄, 其余的波峰变得很小, 该项对积分的贡献只是集中于 ω_{fj} 附近的一小段. 而 $A_(\omega)$ 在这个小区间中的变化不大, 因此, 将 $A_0^2(\omega)$ 视作 $A_0^2(\omega_{fj})$, 并从积分中提出, 剩下的积分是

$$
\int_0^\infty \left\{\frac{\sin[(\omega_{fj}-\omega)t/2]}{(\omega_{fj}-\omega)/2}\right\}^2\mathrm{d}\omega
$$

如果上面的积分限是从 $-\infty$ 到 $+\infty$, 那么积分的结果是 $2\pi t$, 而现在要计算的积分是从 0 到 ∞, 难以计算这个积分的严格结果. 但是注意当时间 t 充分长的时候被积函数的行为, 在远离 ω_{fj} 的区域被积函数非常小, 因此可以近似地将上述积分区域扩展到 $(-\infty,+\infty)$, 其结果就是 $2\pi t$. 于是

$$p^{\text{abs}}_{j\to f}(t)=\frac{2\pi q^2A_0^2(\omega_{fj})}{\hbar^2M^2}|\left\langle f|\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}|j\right\rangle|^2t$$

这里出现了矢量势振幅的平方项 $A_0^2(\omega_{fj})$, 我们希望将它表示为更为真实的物理量. 前面计算过 Poynting 矢量的表达式 (26), 于是将 $A_0^2(\omega_{fj})$ 表示为

$$A_0^2(\omega_{fj})=\frac{\bar{G}(\omega_{fj})}{2\epsilon_0c\omega_{fj}^2}$$

将矢量势的方向设为 z 方向, $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}=P_z$, 矩阵元 $\left\langle f|P_z|f\right\rangle$ 为

$$\left\langle f|P_z|j\right\rangle=\frac{M}{i\hbar}\left\langle f|[Z,H_0]|j\right\rangle=iM\omega_{fj}\left\langle f|Z|j\right\rangle$$

再将共振吸收几率写为

$$p^{\text{abs}}_{j\to f}(t)=\frac{\pi q^2}{\hbar^2c\epsilon_0}\bar{G}(\omega_{fj})\big|\left\langle f|Z|j\right\rangle\big|^2t \tag{42}$$

如果用电磁场的能量密度表示, 那么利用 (27) 式, 将 $A_0^2(\omega)$ 用 $\bar{u}(\omega)$ 表示, 然后有

$$p^{\text{abs}}_{j\to f}(t)=\frac{\pi q^2}{\hbar^2\epsilon_0}\bar{u}(\omega_{fj})\big|\left\langle f|Z|j\right\rangle\big|^2t \tag{43}$$

接下去讨论关于偏振方向的推广. 到目前为止, 电场的方向 (或者说矢量势 $\boldsymbol{A}$ 的方向) 设为 z 方向, 更一般地, 电场的方向可以指向空间各个方向, 设为各向同性的分布. 因此, 需要对 $\left\langle f|Z|j\right\rangle$ 进行推广. 用 $\boldsymbol{n}$ 表示矢量势 $\boldsymbol{A}$ 的指向. 关于矩阵元 $\left\langle f|\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{P}|j\right\rangle$ 的计算实际上落实在 $\left\langle f|\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{R}|j\right\rangle$, 因此,

$$\text{用 }|\left\langle f|\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{R}|j\right\rangle|^2\text{ 的关于 }\boldsymbol{n}\text{ 的平均代替 }|\left\langle f|Z|j\right\rangle|^2 \tag{44}$$

计算关于 $\boldsymbol{n}$ 的平均值, 令

$$X_{fj}=\left\langle f|X|j\right\rangle,\quad Y_{fj}=\left\langle f|Y|j\right\rangle,\quad Z_{fj}=\left\langle f|Z|j\right\rangle$$

- 假设电磁波的传播方向是 z 方向, 则电场方向 $\boldsymbol{n}$ 位于 xy 平面内, 与 x 轴的夹角设为 ϕ.

  $$|\left\langle f|\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{R}|j\right\rangle|^2=|X_{fj}\cos\phi+Y_{fj}\sin\phi|^2$$

  计算上式所示的模的平方关于角度 ϕ 的平均值, 其中的交叉项涉及 $\sin\phi\cos\phi$ 从 0 到 2π 的积分, 结果为零, 所以

  $$|\left\langle f|\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{R}|j\right\rangle|^2=\frac{1}{2}(|X_{fj}|^2+|Y_{fj}|^2)=\frac{1}{2}|R_{fj}|^2\sin^2\theta$$

  其中 $|R_{fj}|^2=|X_{fj}|^2+|Y_{fj}|^2+|Z_{fj}|^2=|\left\langle f|\boldsymbol{R}|j\right\rangle|^2$, 而 θ 是与位置算子 $\boldsymbol{R}$ 对应的向量 $\boldsymbol{r}$ 与 z 轴的夹角, 也就是位置向量 $\boldsymbol{r}$ 与电磁场传播方向之间的夹角.

- 然后, 对电磁场的不同的传播方向再作平均. 为此, 换一个视角, 将 $\boldsymbol{r}$ 设为 z 轴, 就是说把 $\boldsymbol{r}$ 设为极轴. 传播方向与 z 轴的夹角仍为 θ, 其变化范围是 $0 \leqslant \theta \leqslant \pi$. 而且, 传播方向还可以绕着 z 轴旋转, 旋转角度 $\phi \in [0, 2\pi]$. 在 4π 立体角内作平均,

$$\frac{1}{4\pi}\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \left[\frac{1}{2}|R_{fj}|^2 \sin^2\theta\right] \sin\theta = \frac{1}{3}|R_{fj}|^2$$

总之, 以上分析给出

$$|\langle f|Z|j\rangle|^2 \longrightarrow \frac{1}{3}|\langle f|\boldsymbol{R}|j\rangle|^2$$

回到 (42) 或 (43), 采用 (44), 得到一般情况下的共振吸收几率及其速率,

$$p^{\mathrm{abs}}_{j\to f}(t) = \frac{\pi q^2}{3\hbar^2 c\epsilon_0}\bar{G}(\omega_{fj})\left|\langle f|\boldsymbol{R}|j\rangle\right|^2 t = \frac{\pi q^2}{3\hbar^2\epsilon_0}\bar{u}(\omega_{fj})\left|\langle f|\boldsymbol{R}|j\rangle\right|^2 t \tag{45}$$

总结一下整个过程和其中用到的近似处理

- 选用 Coulomb 规范, 使得矢量势满足 $\nabla\cdot\boldsymbol{A} = 0$, 并且标量势 $\phi = 0$.
- 忽略哈密顿量中的自旋与磁场的相互作用.
- 忽略哈密顿量中矢量势的平方项.
- 对于通常的电磁场, 波长远大于原子尺度, 因此, 就原子受到的影响而言, 可以忽略电磁场随空间位置的变化, 这体现在 (35) 式上.
- 以上过程给出单一频率电磁场带来的跃迁几率, 即 (36) 式
- 考虑频率呈连续分布的电磁场, 认为不同频率的电磁波之间没有相干性, 跃迁几率等于不同频率的电磁场带来的跃迁几率的简单相加, 于是才有 (40) 式.
- 最后是关于传播方向的推广.

以上是采用半经典的方法处理原子的受激辐射: 用量子力学的观点描述原子, 用经典电动力学处理电磁场. 这种做法不能解释原子的自发辐射, 即没有外场时处于激发态的原子可以放出光子并回到基态. Einstein 提出了关于自发辐射的唯象理论, 其结果和量子电动力学的结论吻合得很好, 这里不再叙述.

关于规范变换的一些问题

由于 $\boldsymbol{A}$ 不是规范不变的, 以 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{P}$ 作为微扰的做法有一定的风险. 更进一步的分析可以参考 Stokes, A. *Noncovariant gauge fixing in the quantum Dirac field theory of atoms and molecules*, Physical Review A **86**, 012511 (2012)

另外, 规范变换还会带来一些附加的问题. 在含时问题中, 我们把 $|\psi(t)\rangle$ 展开为 H_0 的本征态 $|n\rangle$ 的线性叠加,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\,|n\rangle$$

$|c_n(t)|^2$ 则是 t 时刻系统处于能级 E_n 的几率.

规范变换后, $|\psi'(t)\rangle = e^{iq\chi/\hbar}\,|\psi(t)\rangle$. 但是, $|\psi'(t)\rangle$ 也有其自身的展开形式

$$|\psi'(t)\rangle = \sum_n c'_n(t)\,|n\rangle$$

$|c'_n(t)|^2$ 同样是 t 时刻系统处于能级 E_n 的几率. 变换前后几率幅之间的关系是

$$c'_n(t) = \sum_m \langle n|e^{iq\chi/\hbar}|m\rangle\, c_m(t)$$

考虑到 χ 是空间位置的函数, $|c_n(t)|^2$ 并不是总能等于 $|c_n(t)|^2$. 详细讨论见 Kobe, D. H. and Smirl, A. L. *Gauge invariant formulation of the interaction of electromagnetic radiation and matter*, American Journal of Physics **46**, 624-633 (1978).

作业一

2017/09/14

问题 1

抛掷一枚硬币, 正面朝上的概率是 0.5, 反面朝上的概率也是 0.5.

1. 抛 100 次和抛 200 次, 有一半正面朝上的概率分别是多少?
2. 抛 100 次和抛 200 次, 分别计算正面朝上的硬币的百分比介于 45% 和 55% 之间的概率.

问题 2 ("Inverse probability" problem and Bayes postulate)

回顾光的双折射现象. 设入射光为线偏振光, 偏转方向 (即极化方向或电场方向) 为 x 方向, 传播方向为 z 方向. 方解石晶体的界面是 xy 平面, 光轴也位于 xy 平面, 与 x 轴的夹角是 θ. 如图 1 所示. 光的电磁理论告诉我们, 出射的 O 光和 E 光的强度分别是

$$I_O \propto \sin^2\theta, \quad I_E \propto \cos^2\theta.$$

如果用单光子源做实验, 制备大量的沿 x 方向极化的单光子, 让它们 "一个一个" 地通过方解石晶体, 那么看到的现象是, 随着光子数的增多, 观察到的 O 光的频度 f_O 和观察到的 E 光的频度 f_E 趋近于固定值, 即

$$f_O \longrightarrow \sin^2\theta, \quad f_E \longrightarrow \cos^2\theta. \tag{1}$$

因此, $\sin^2\theta$ 和 $\cos^2\theta$ 就是几率: 观测沿 x 方向极化的光子通过方解石晶体之后的极化方向, 分别看到 O 光和 E 光的几率.

以上说的是, 可以用单光子实验检验光的电磁理论给出的预言. 反过来, 如果我们不知道光轴的指向, 那么只能通过观测结果进行推测. 而实际的观测结果只能是频度, 不是几率.

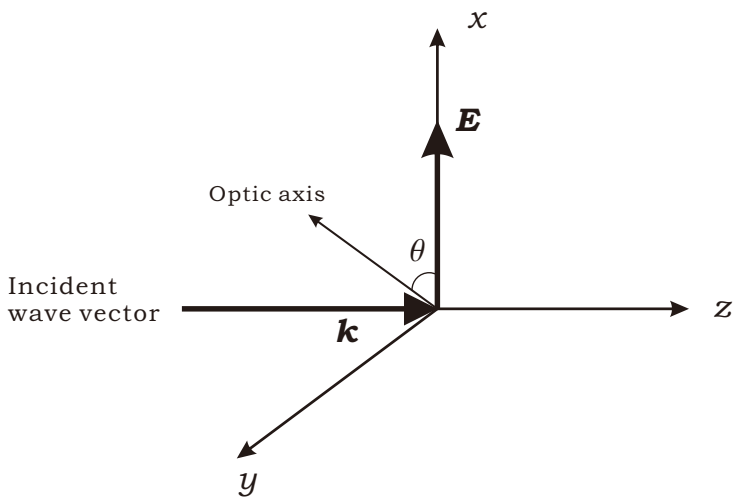


图 1: 线偏振光垂直入射到方解石晶体的表面.

考虑两个事件,

1. 事件 A. 光轴的方向与 x 轴的夹角为 θ.
2. 事件 B. 对 (比如说) 7 个沿 x 方向极化的单光子进行实验, 观测到 4 个 O 光, 3 个 E 光.

我们想知道的是, 当事件 B 发生的时候, 事件 A 出现的几率是多少? 显然, 这是一个条件几率, 记作 $p(A|B)$. 为此, 需要知道联合几率 $p(A,B)$, 或者写作 $p(A\wedge B)$, 表示两个事件 A 和 B 同时出现的几率. 关于联合几率, 边缘几率和条件几率, 我们有如下结论,

$$p(A\wedge B) = p(A|B)p(B) = p(B|A)p(A).$$

我们希望知道的几率就是

$$p(A|B) = \frac{p(B|A)p(A)}{p(B)}. \tag{2}$$

在上式中, 条件几率 $p(B|A)$ 被视作已知的, 这属于光的电磁理论告诉我们的事情, 也就是 (1) 式表达的意思: 给定 θ, 出现 O 光的几率是 $\sin^2\theta$, 出现 E 光的几率是 $\cos^2\theta$. 而现在说的事件 B 是: 看到 4 个 O 光光子, 3 个 E 光光子.

✍ 写出条件几率 $p(B|A)$ 的表达式.

为了利用 (2) 计算 $p(A|B)$, 我们还需要知道 $p(A)$ 和 $p(B)$. 事件 A 是关于光轴的指

向的, 这正是我们要猜测的事情, 是不可能事先知道的. 假设 θ 有多种可能的取值 θ_j, 相应的我们把事件 A 记作 A_j, 这些个事件出现的几率记作 $p(A_j)$. 在这种情况下, 事件 B 的几率应该写为

$$p(B) = \sum_j p(B|A_j)p(A_j). \tag{3}$$

可是, 几率 $p(A_j)$ 又等于什么呢? 这就需要采用 Bayes postulate. 这个假设说的是, 如果没有明显的证据表明某个方向是特殊的, 那么就认为所有的方向是等几率的. 目前, 光轴位于 xy 平面内, 我们只需考虑 $0 \leqslant \theta < \pi$ 的情况, 因为 θ 和 $\theta + \pi$ 是等价的. 事件 A 在 $0 \leqslant \theta < \pi$ 范围内等几率分布, 几率就是

$$p(A) = \frac{1}{\pi} d\theta.$$

它的意思是, 光轴位于从 θ 到 $\theta + d\theta$ 范围内的几率是 $\frac{1}{\pi}$.

✍ 式 (3) 是关于离散分布的 A_j 而言的, 现在, 对于连续分布的 A 事件, 写出 $p(B)$ 的表达式, 这应该是一个积分形式.

至此, 可以利用 (2) 式了.

✍ 计算给出 $p(A|B)$ 的具体形式. 它的样子大概是

$$p(A|B) = f(\theta)d\theta.$$

$f(\theta)$ 是 θ 的函数. 当 θ 取什么值的时候, 这个函数有最大值?

问题 3

沿 x 方向极化的线偏振光垂直入射到方解石晶体的表面, 晶体的光轴位于 xy 平面内, 如图 1 所示. 第一个晶体的光轴方向是

$$\boldsymbol{o}_1 = \left(\sin\frac{\pi}{2N}, \quad \cos\frac{\pi}{2N}\right).$$

N 是某个固定的自然数. 假设晶体足够厚, 出射的 O 光和 E 彼此没有重叠. 出射的两束光接着垂直入射到第二个晶体表面, 光轴方向是

$$\boldsymbol{o}_2 = \left(\sin\frac{2\pi}{2N}, \quad \cos\frac{2\pi}{2N}\right).$$

接着通过第 3 个, ……, 第 m 个晶体. 第 m 个晶体的光轴是

$$\boldsymbol{o}_m = \left(\sin\frac{m\pi}{2N},\quad \cos\frac{m\pi}{2N}\right).$$

晶体的总数是 N, 第 N 个晶体的光轴是

$$\boldsymbol{o}_N = (1,\quad 0).$$

设沿 x 方向极化的偏振光的入射强度为 I, 通过第一个晶体之后分为两束, 一束光的极化方向垂直于 $\boldsymbol{o}_1$, 强度为 $I\cos^2\frac{\pi}{2N}$; 另一束光的极化方向平行于 $\boldsymbol{o}_1$, 强度为 $I\sin^2\frac{\pi}{2N}$. 继续考虑它们通过第二个晶体后的极化方向和强度. 以此类推, 从最后的第 N 个晶体出来的光应该有 2^N 束, 因为我们假设每一个晶体都足够厚, 所有的出射光彼此间都没有重叠.

✍ 计算从第 N 个晶体出来的光束中, 沿 y 方向极化的光的强度. 进一步考虑当 $N\to\infty$ 时的极限值.

问题 4

设想有一个盒子, 可以储存光子. 盒子里储存了 10^6 个沿 x 方向偏振的光子和 10^6 个沿 y 方向偏振的光子. 盒子的尺寸远大于光子的相干波长, 所以可以忽略光子所遵从的 Bose 统计. 另有一个相同的盒子, 里面储存了 10^6 个左旋圆偏振光子和 10^6 个右旋圆偏振光子. 现在, 给你其中一个盒子, 当然不会告诉你盒子里面储存的光子有着怎样的偏振行为. 你可以将盒子里的光子一一引出来进行测量, 而且假设测量装置是理想的. 你能否通过观测来确定给你的到底是哪一个盒子? 如果可以, 估算一下猜测失败的可能性有多大?

作业二

2017/09/18

问题 1

证明 Cauchy-Schwarz 不等式: 对于任意的 $|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathbb{C}^n$, 有

$$|\langle\varphi|\psi\rangle|^2 \leqslant \langle\varphi|\varphi\rangle \langle\psi|\psi\rangle$$ □

问题 2

证明 Riesz 定理. □

问题 3

考虑 $\mathbb{C}^n$ 中的向量和矩阵和线性变换. 设 $|\psi\rangle, |\varphi\rangle \in \mathbb{C}^n$, $X \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^n)$. 证明如下等式.

(1) $\mathrm{Tr}(|\psi\rangle\langle\varphi|) = \langle\varphi|\psi\rangle$.

(2) $\langle\psi|X|\varphi\rangle = \mathrm{Tr}\left(X \ |\varphi\rangle\langle\psi|\right)$ □

问题 4

定义 Pauli 矩阵

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

写出尽可能多的 Pauli 矩阵的性质. □

问题 5

令 $\sigma_0 = \mathbb{1}_2$ 是 2×2 单位阵, $\sigma_{1,2,3}$ 分别是上题中的 Pauli 矩阵 $\sigma_{x,y,z}$. 设 A 是 $\mathbb{C}^2$ 上的厄密矩阵, 即 $A = A^\dagger$. 证明: A 可以表示为

$$A = \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{3} r_i \sigma_i,$$

其中 r_i 是实数, $r_i = \mathrm{Tr}(A\sigma_i)$. □

问题 6

设 $|\psi\rangle$ 是 $\mathbb{C}^2$ 中的单位向量, 即 $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^2$, 且 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$. 可以把 $|\psi\rangle$ 表示为

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix}, \quad \text{其中 } c_0, c_1 \in \mathbb{C}, \text{且 } |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1.$$

写出 $|\psi\rangle\langle\psi|$ 的矩阵形式, 并用上题提到的方式重新表示 $|\psi\rangle\langle\psi|$, 求出 r_i. □

作业三

2017/09/30

问题 1 Sakurai 书 Modern quantum mechanics 第一章习题 1. 其中 $\{\cdot,\cdot\}$ 表示反对易子.

问题 2 Sakurai 书 第一章习题 5.

问题 3 Sakurai 书 第一章习题 6.

问题 4 Sakurai 书 第一章习题 10.

问题 5 Sakurai 书 第一章习题 16.

问题 6 以下形式中, 哪些可以用来表示量子态? 哪些是纯态?

$$\rho_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} \\ \frac{3}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{pmatrix} \frac{9}{25} & \frac{12}{25} \\ \frac{12}{25} & \frac{16}{25} \end{pmatrix}$$

$$\rho_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_4 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{4} & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

$$\rho_5 = \frac{1}{3}|u\rangle\langle u| + \frac{2}{3}|v\rangle\langle v| + \frac{\sqrt{2}}{3}|u\rangle\langle v| + \frac{\sqrt{2}}{3}|v\rangle\langle u|$$

其中在 ρ_5 中, $\langle u|u\rangle = \langle v|v\rangle = 1$, $\langle u|v\rangle = 0$.

问题 7 设系统的某个观测量可以在三维复空间 $\mathbb{C}^3$ 上表示为厄密矩阵 A,

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

当系统分别处于下列三种状态时, 计算得到观测结果 0 的几率.

$$\text{(a)}\ \rho=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&0&0\\0&\frac{1}{4}&0\\0&0&\frac{1}{4}\end{pmatrix};\quad \text{(b)}\ \rho=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&0&\frac{1}{2}\\0&0&0\\\frac{1}{2}&0&\frac{1}{2}\end{pmatrix};\quad \text{(c)}\ \rho=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}&0&0\\0&0&0\\0&0&\frac{1}{2}\end{pmatrix}$$

问题 8 设 $A,B,C\in\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)$, 考虑这三个矩阵的相乘, 记作 $X=ABC$. 现在, 把这种相乘的形式想象为对矩阵 B 的变换, 变换的法则是, 左乘 A, 右乘 C. 于是, 可以设想有一个超算子 (记作 $\hat{\Phi}$) 将矩阵 B 变成了矩阵 X,

$$B\xrightarrow{\hat{\Phi}}X$$

为了给出超算子 $\hat{\Phi}$ 的更为具体的表示, 我们设法把矩阵 B 改写成向量的形式. 设 $\mathbb{C}^n$ 的自然基向量为 $|e\rangle_i$, $i=1,2,\cdots,n$. 考虑如下过程,

$$B=\sum_{i,j}b_{ij}\,|e_i\rangle\langle e_j|\,,\quad B\in\mathcal{L}(\mathbb{C}^n)$$

$$\text{令}\ |B\rangle=\sum_{i,j}b_{ij}\,|e_i\rangle\otimes|e_j\rangle\,,\quad |B\rangle\in\mathbb{C}^n\otimes\mathbb{C}^n$$

这里, $\mathbb{C}^n\otimes\mathbb{C}^n$ 是两个 n 维复空间 $\mathbb{C}^n$ 的直积, 它是一个 n^2 维的复空间. 形象地说, 将矩阵 B 的每一行的元素排成列向量, 再从上到下依次排列, 构成一个 n^2 维的列向量.

✍ 证明, 对于 $A=\sum_{i,j}a_{ij}\,|e_i\rangle\langle e_j|$ 和 $B=\sum_{i,j}b_{ij}\,|e_i\rangle\langle e_j|$, 有

$$\mathrm{Tr}(A^\dagger B)=\langle A|B\rangle$$

这里 $\langle A|=\sum_{i,j}a_{ij}^*\,\langle e_i|\otimes\langle e_j|$.

回到我们要考虑的超算子 $\hat{\Phi}$. 令

$$\Phi=A\otimes C^T,\quad \Phi\in\mathcal{L}(\mathbb{C}^{n^2})$$

Φ 是 $\mathbb{C}^{n^2}$ 上的矩阵.

✍ 证明

$$|X\rangle=\Phi\,|B\rangle$$

这里 $|X\rangle$ 的是矩阵 $X=ABC$ 的向量表示.

我们说, $n^2\times n^2$ 的矩阵 Φ 是超算子 $\hat{\Phi}$ 的表示.

问题 9 (从另一个角度看纯态的密度矩阵) 设 $|\psi\rangle$ 是 $\mathbb{C}^2$ 中的单位向量, 即

$$|\psi\rangle = \xi\,|0\rangle + \eta\,|1\rangle \in \mathbb{C}^2, \quad |\xi|^2 + |\eta|^2 = 1.$$

因此, $|\psi\rangle$ 中的实参数有三个. 可以认为 $|\psi\rangle$ 对应于 $\mathbb{R}^4$ 空间中的单位球面 $\mathcal{S}^3$ 上的点, $|\psi\rangle \in \mathcal{S}^3$.

现在重新考虑 $|\psi\rangle$ 的表示.

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix} = \xi \begin{pmatrix} 1 \\ \eta\xi^{-1} \end{pmatrix} \\ &= |\xi| \begin{pmatrix} 1 \\ \eta\xi^{-1} \end{pmatrix} e^{i\delta} = \frac{1}{\sqrt{1+|c|^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ c \end{pmatrix} e^{i\delta} \end{aligned}$$

其中 $c = \eta\xi^{-1}$, δ 是 ξ 的幅角. 把 ξ 和 η 写为

$$\xi = \xi_1 + i\xi_2, \quad \eta = \eta_1 + i\eta_2, \quad \xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2 \in \mathbb{R}.$$

接着把复数 c 表示为

$$\begin{aligned} c &= \frac{\eta}{\xi} = \frac{\xi^*\eta}{|\xi|^2} \\ &= \frac{(\xi_1 - i\xi_2)(\eta_1 + i\eta_2)}{\xi_1^2 + \xi_2^2} \\ &= \frac{(\xi_1\eta_1 + \xi_2\eta_2) + i(\xi_1\eta_2 - \xi_2\eta_1)}{\xi_1^2 + \xi_2^2} \end{aligned}$$

令

$$x_1 = \mathrm{Re}(c) = \frac{\xi_1\eta_1 + \xi_2\eta_2}{\xi_1^2 + \xi_2^2}, \quad x_2 = \mathrm{Im}(c) = \frac{\xi_1\eta_2 - \xi_2\eta_1}{\xi_1^2 + \xi_2^2}$$

于是 (x_1, x_2) 是二维平面 $\mathbb{R}^2$ 上的点, 记作 P'. 利用 Stereographic projection (见图 1), 可以将 P' 点映射到单位球 $\mathcal{S}^2$ 上.

连接单位球 $\mathcal{S}^2$ 的南极点和 P' 点, 与 $\mathcal{S}^2$ 的交点记作 P, 点 P 的坐标是 (x, y, z), 满足 $x^2 + y^2 + z^2 = 1$.

✍ 用 x, y, z 表示 x_1 和 x_2.

✍ 进一步地用 $\xi_1, \xi_2, \eta_1, \eta_2$ 表示 x, y, z.

✍ 验证如下关系

$$x = \langle\psi|\,\sigma_x\,|\psi\rangle, \quad y = \langle\psi|\,\sigma_y\,|\psi\rangle, \quad z = \langle\psi|\,\sigma_z\,|\psi\rangle.$$

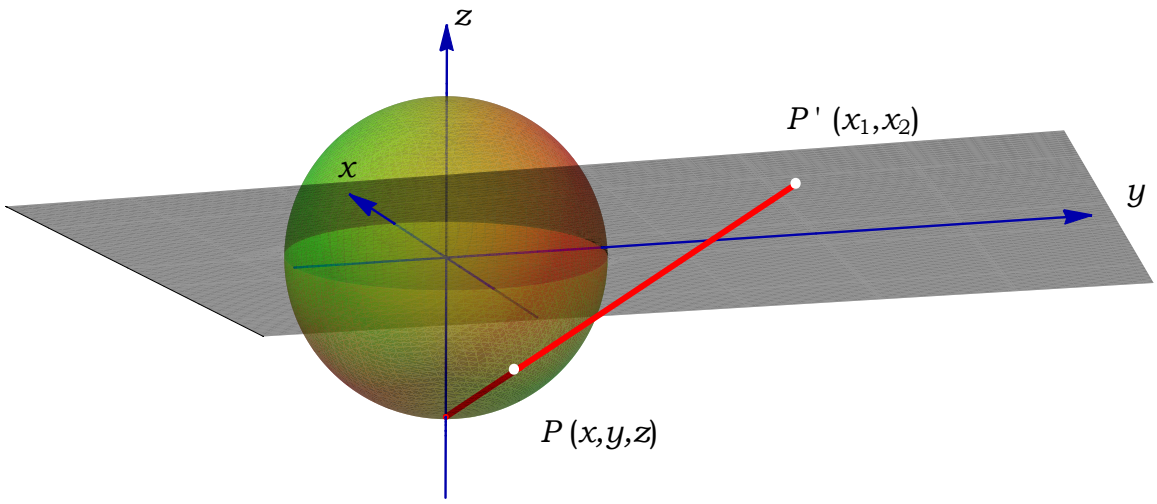


图 1: Stereographic projection

问题 10 ($\mathbb{C}^2$ 上的密度矩阵的 Bloch 表示) 双值量子系统的量子态是 ρ,

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} \\ \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix}$$

又可以表示为 $\rho = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})$, 其中 $\boldsymbol{r}$ 是 $\mathbb{R}^3$ 中的向量, 且 $|\boldsymbol{r}| \leqslant 1$, 被称为 Bloch 向量. 我们知道, 它的三个分量是 $r_i = \mathrm{Tr}(\rho\sigma_i)$, $i = 1, 2, 3$. 当然, 也可以写为 4-矢量的形式, 令

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} 1 \\ \boldsymbol{r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$$

定义酉矩阵

$$\Upsilon = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & i & -i & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

将密度矩阵 ρ 写成列向量的形式, 记作 $\vec{\rho}$, 即

$$|\rho\rangle = \begin{pmatrix} \rho_{00} \\ \rho_{01} \\ \rho_{10} \\ \rho_{11} \end{pmatrix} \equiv \vec{\rho}$$

验证如下关系

$$\vec{r} = \sqrt{2}\Upsilon\vec{\rho}$$

就是说, 矩阵 Υ 将密度矩阵的列向量形式变为 Bloch 向量的 4-矢量形式.

作业四

2017/10/13

问题 1 从概率论的角度来说, 用 a, b 和 c 表示三个不同的事件. 考虑当两个事件 a 和 b 都出现的时候, 事件 c 出现的几率. 证明如下公式,

$$p(c|a,b) = \frac{p(b,c|a)}{p(b|a)}$$

在第三章中, 我们讲过对量子态进行序列测量. 设系统的初态是纯态 $|\psi\rangle$, 它的密度矩阵形式记作 $\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$. 以先后顺序依次测量三个观测量, A, B 和 C. 观测量的本征值分别是 a, b 和 c, 它们有若干个可能的取值, 对应的本征向量分别记作 $|a\rangle$, $|b\rangle$ 和 $|c\rangle$, 假设这些观测量没有简并. 回顾联合事件的几率 $p(a,b,c)$ 和条件几率 (如 $p(b|a)$) 的计算结果, 考虑以下问题.

问题 2 如果对 A 的测量得到结果 a, 并且对 B 的测量得到结果 b, 那么在此条件下, 对 C 的测量得到结果 c 的几率是多少? 即计算条件几率 $p(c|a,b)$.

在问题 2 中, 作为条件的联合事件 (a,b) 发生在 C 测量之前, 我们可以称之为前选择 (pre-selection). 另一方面, 我们还可以考虑后选择 (post-selection). 将前选择的对象设为事件 a, 将后选择的对象设为事件 c, 考虑中间事件 b 发生的几率, 有条件几率 $p(b|a,c)$.

问题 3 设双值量子系统的初态是 $|\psi\rangle = \alpha\,|z+\rangle + \beta\,|z-\rangle$, $|a|^2 + |\beta|^2 = 1$. 依次测量三个观测量 $A = \sigma_z$, $B = \sigma_n$, $C = \sigma_x$, 其中 $\sigma_n = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$, $\boldsymbol{n} = (\sin\theta,\ 0,\ \cos\theta)$. 在前选择 $a = +1$ 和后选择 $c = +1$ 的条件下, 计算中间的测量结果 $b = +1$ 的几率, 即 $p(b = +1|a = +1, b = +1)$. 进而回答这样的问题: 是否存在某个量子态 ρ, 对它进行 B 测量, 给出 $b = +1$ 的几率可以等于 $p(b = +1|a = +1, b = +1)$?

在第一章中, 我们讨论过互易性原理, 其数学表示是

$$|\,\langle\psi|\varphi\rangle\,|^2 = |\,\langle\varphi|\psi\rangle\,|^2 \tag{1}$$

这不过是数学上的平庸的等式. 现在我们希望通过序列测量和前后选择理解 (1) 式的意义.

设系统初态的密度矩阵为 ρ, 考虑两个次序相反的测量序列:

1. 先测量观测量 A, 然后测量观测量 B.

2. 先测量观测量 B, 然后测量观测量 A.

问题 4 在序列 1 中, 给出条件几率 $p(b|a)$ 的表达式, 其中的条件是对 A 测量并获得结果 a, 在此前提下, 考虑对 B 测量并获得结果 b 的几率. 类似地, 在序列 2 中, 给出条件几率 $p(a|b)$ 的表达式.

上述问题中的两个条件几率是相等的, 而且与初态无关, 计算结果体现了互易性原理. 互易性原理意味着测量次序是可逆的, 或者说, 测量序列对于时间的正向和反向是对称的.

事情还没有结束, 看看下图所示的测量序列.

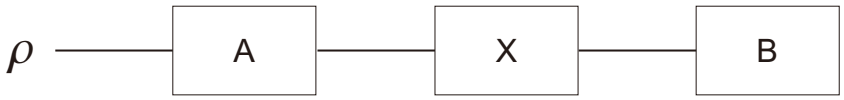


图 1

在 A 测量和 B 测量之间有一个关于观测量 X 的测量过程, 观测量 X 的本征值记作 x, 相应的本征向量记作 $|x\rangle$. 我们已经知道如何计算联合几率 $p(a,x,b)$. 现在考虑前后选择, 前选择是 A 的测量结果 a, 后选择是 B 的测量结果 b. 将联合事件 (a,b) 作为条件, 考虑中间的测量 X 给出结果 x 的几率, 即 $p(x|a,b)$. 这实际上就是问题 2 的结论.

把图 1 中的测量次序换一下, 如下图所示.

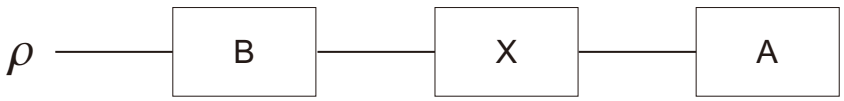


图 2

问题 5 考虑图 2 中的测量过程, 前选择是 B 的测量结果 b, 后选择是 A 的测量结果 a, 给出条件几率 $p(x|b,a)$. 与条件几率 $p(x|a,b)$ 比较, 并分析讨论.

作业五

2017/10/18

我们说过, 对 $\mathbb{C}^2$ 中的量子态进行 SU(2) 变换的时候, 可以等价地用旋转变换的观点描述. 借助 Bloch 向量, 旋转变换有了形象直观的图像: 对密度矩阵的 SU(2) 变换就相当于对 Bloch 向量的 SO(3) 变换. 现在, 我们希望把这种看法严格地表示出来.

首先考虑 Bloch 向量. 回顾作业三中的问题 8. 将 $\mathbb{C}^2$ 空间上的密度矩阵 ρ 排成 4 分量的长向量,

$$|\rho\rangle = \begin{pmatrix} \rho_{00} \\ \rho_{01} \\ \rho_{10} \\ \rho_{11} \end{pmatrix} \equiv \vec{\rho}$$

其中 ρ_{ij} 是 ρ 的矩阵元.

ρ 的 Bloch 向量记作 $\boldsymbol{r}$, 相应的 4-矢量记作 $\vec{r}$,

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} 1 \\ \boldsymbol{r} \end{pmatrix}$$

定义酉矩阵

$$\Upsilon = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & i & -i & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

问题 1 验证如下关系,

$$\vec{r} = \sqrt{2}\Upsilon\vec{\rho}$$

就是说, 可以利用矩阵 Υ 将向量形式的密度矩阵 ρ 变为 4-分量的 Bloch 向量.

再来考虑对量子态 ρ 进行酉变换, $\rho \longrightarrow \rho' = U\rho U^\dagger$. 可以把变换过程表示为

$$|\rho\rangle \longrightarrow |\rho'\rangle = (U \otimes U^*)\,|\rho\rangle\,, \quad \text{或者} \quad \vec{\rho}' = (U \otimes U^*)\vec{\rho} \tag{1}$$

现在我们希望得到 Bloch 向量的变换过程.

用 $\sqrt{2}\Upsilon$ 左乘 (1) 式的两端, 有

$$\sqrt{2}\Upsilon\vec{\rho}' = \sqrt{2}\Upsilon(U\otimes U^*)\vec{\rho}$$

$$\sqrt{2}\Upsilon\vec{\rho}' = \sqrt{2}\Upsilon(U\otimes U^*)\Upsilon^\dagger\Upsilon\vec{\rho}$$

$$\vec{r}' = \Upsilon(U\otimes U^*)\Upsilon^\dagger\vec{r}$$

令

$$L_U = \Upsilon(U\otimes U^*)\Upsilon^\dagger$$

于是 Bloch 向量的变换可以表示为

$$\vec{r}' = L_U\vec{r}$$

问题 2 设 $U = e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_y}$, 写出相应的变换 L_U.

问题 3 两体量子系统的两个子系统分别是 A 和 B. 描述这两个子系统的 Hilbert 空间分别是 $\mathscr{H}^A$ 和 $\mathscr{H}^B$, 它们的维数分别是 d^A 和 d^B. 整体量子态的密度矩阵是 ρ, 两个约化密度矩阵分别是 ρ^A 和 ρ^B. 证明如下结论.

(a) 如果两体系统处于纯态, 那么 ρ^A 的量子熵 $S(\rho^A)$ 等于 ρ^B 的量子熵 $S(\rho^B)$.

(b) 测量子系统 A 的某个力学量 A, 厄米矩阵 A 的本征分解的形式是

$$A = \sum_{i=1}^{d^A} a_i\,|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$$

对测量结果不作任何选择. 证明测量后子系统 B 的局部量子态是 ρ^B, 即, 对 A 的完全测量不影响 B 的状态.

问题 4 考虑由 A 和 B 组成的 $2\otimes 2$ 两体量子系统. 设整体的量子态是

$$|\Psi\rangle = \cos\theta\,|00\rangle + \sin\theta\,|11\rangle$$

上式中直积的次序是 $\mathrm{A}\otimes\mathrm{B}$.

事件 a: 测量子系统 A 的力学量 σ_z^A, 得到结果 $+1$.

事件 b: 测量子系统 B 的力学量 σ_z^B, 得到结果 $+1$.

计算几率 $p(a)$, $p(b)$ 以及联合几率 $p(a,b)$.

问题 5 写出如下 $\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$ 上的酉变换的矩阵形式

$$U = \exp\left\{-i\sum_{i=1}^{3}\xi_i\sigma_i\otimes\sigma_i\right\}$$

其中 ξ_i 是实数.

问题 6 考虑 d 维实线性空间中的三个单位向量, $\boldsymbol{u}$, $\boldsymbol{v}$, $\boldsymbol{w}$. 用列向量表示它们.

$$\|\boldsymbol{u}\| = (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}) = \boldsymbol{u}^T \boldsymbol{u} = 1.$$

对于 $\boldsymbol{v}$ 和 $\boldsymbol{w}$ 也是如此. 假设这三个向量之间的内积是相同的, 即

$$(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}) = (\boldsymbol{v}, \boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{w}, \boldsymbol{u}) = a.$$

a 是实数. 形象地说, 这三个向量两两之间的夹角是相等的.

证明, $d \times d$ 的矩阵 $M = \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T + \boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^T + \boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^T$ 只有三个非零的本征值, 它们是

$$\boxed{1 - a,\ 1 - a,\ 1 + 2a.}$$

问题 7 处于量子态 ρ 的量子系统的熵是

$$S(\rho) = -\operatorname{Tr}\left(\rho \log \rho\right) = -\sum_i \lambda_i \log \lambda_i$$

其中对数的底没有明确写出, 可以取 2 为底, 也可以取 e 为底, λ_i 是 ρ 的本征值.

现在考虑制备过程包含的经典熵和制备成的量子态的量子熵.

制备自旋 1/2 粒子的混和态. 设制备过程有三种可供选择的方式:

(1) 制备 $\psi_1 = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|$, $|\psi_1\rangle = \binom{1}{0}$,

(2) 制备 $\psi_2 = |\psi_2\rangle\langle\psi_2|$, $|\psi_2\rangle = \frac{1}{2}\binom{-1}{\sqrt{3}}$,

(3) 制备 $\psi_3 = |\psi_3\rangle\langle\psi_3|$, $|\psi_3\rangle = \frac{1}{2}\binom{-1}{-\sqrt{3}}$.

容易看出, 上述三个纯态的 Bloch 向量分别是

$$\boldsymbol{r}_1 = (0,\ 0,\ 1),$$

$$\boldsymbol{r}_2 = (-\sqrt{3}/2,\ 0,\ -1/2),$$

$$\boldsymbol{r}_3 = (\sqrt{3}/2,\ 0,\ -1/2).$$

它们彼此间的夹角都是 120°, 呈对称分布.

为了构造一个量子混和态, 可以设想有一个经典随机变量 X, 可能的取值有三个, x_1, x_2, x_3, 相应的几率分别为 p_1, p_2, p_3, 并且 $p_1 + p_2 + p_3 = 1$. 当随机变量 X 的值是 x_1 的时候, 选用第一种制备方式; 取值为 x_2 时, 选用第二种; 取值为 x_3 时, 选用第三种. 于是得到混和态

$$\rho = p_1\psi_1 + p_2\psi_2 + p_3\psi_3$$

现在, 令 $p_1 = p_2 = p_3 = \frac{1}{3}$, 即等几率混和.

计算该情形下的量子熵. 由于 ρ 是最大混和态, 容易有

$$S(\rho) = \log 2. \tag{2}$$

虽然制备出来的态是量子的, 但是, 制备过程中用到的实验参数却是经典的. 例如, 为了制备 $|\psi_1\rangle$, 就需要将 SG 装置的磁场置于 z 方向, 并且选择向 $+z$ 方向偏转的出射粒子束. 为了制备 $|\psi_2\rangle$, 就需要将 SG 装置的磁场方向置于 xz 平面的第三象限并且与 z 轴的夹角是 120°, 然后选择向该方向偏转的出射粒子束. 类似地, 制备 $|\psi_3\rangle$. 这里, 描述磁场方向的参数是经典的, 是可以准确地区分的. 随机变量 X 是经典随机变量, 它的三个可能的取值控制了磁场方向的选择. 因此, 这种随机的制备方式中包含经典意义上的不确定性, 有经典的 Shannon 熵:

$$H(X) = -\sum_{i=1}^{3} p_i \log p_i.$$

当 $p_1 = p_2 = p_3 = \frac{1}{3}$ 时,

$$H(X) = \log 3. \tag{3}$$

从 (2) 和 (3), 可以看到 $S(\rho)$ 和 $H(X)$ 的差异.

继续考虑由两个自旋 1/2 粒子组成的两体系统, 即 $2 \otimes 2$ 系统. 按照上述方式制备这样的混和态:

$$\rho^{(2)} = \frac{1}{3}\big(\rho_1 \otimes \rho_1 + \rho_2 \otimes \rho_2 + \rho_3 \otimes \rho_3\big). \tag{4}$$

即, $\rho^{(2)}$ 描述的是两体系统的混和系综, 这个系综是由 $\rho_i \otimes \rho_i$ 以等几率混和而成.

✍ 计算 $\rho^{(2)}$ 的量子熵.

再考虑由 n 个自旋 1/2 粒子构成的 n 体复合系统. 制备混和态,

$$\rho^{(n)} = \frac{1}{3}\big(\rho_1 \otimes \cdots \otimes \rho_1 + \rho_2 \otimes \cdots \otimes \rho_2 + \rho_3 \otimes \cdots \otimes \rho_3\big). \tag{5}$$

其中每一项包含 n 个 ρ_i 的直积.

✍ 验证, 当 $n \to \infty$ 时, $\rho^{(n)}$ 的量子熵趋于 $\log 3$, 即

$$\lim_{n\to\infty} S(\rho^{(n)}) = \log 3.$$

作业六

2017/10/25

设 A 和 B 是系统的两个观测量. 在系统的量子态 ρ 中, 测量 A, 得到结果 a_i 的几率记作 p_i^A. 测量 B, 得到结果 b_j 的几率记作 p_j^B. 相应的 Shannon 熵是

$$H(A|\rho) = -\sum_i p_i^A \log p_i^A, \quad H(B|\rho) = -\sum_j p_i^B \log p_j^B$$

这两个经典熵衡量了观测结果的混乱程度.

有这样的不等式

$$H(A|\rho) + H(B|\rho) \geqslant -2\log c, \quad \forall \rho \tag{1}$$

不等式右侧的 c 是

$$c = \max_{i,j} |\langle \alpha_i | \beta_j \rangle|,$$

其中 $|\alpha_i\rangle$ 和 $|\beta_j\rangle$ 分别是 A 和 B 的本征态.

问题 1 (熵形式的不确定关系) 现在, 在 $\mathbb{C}^2$ 空间中考虑不等式 (1), 即考虑一个双值量子系统. 设 $A = \sigma_z$, $B = \sigma_x \sin\theta + \sigma_z \cos\theta$, $\theta \in [0, \pi/2]$. 对于给定的某个 θ, 在 $\mathbb{C}^2$ 上的所有量子态中考虑 (1) 式左端的最小值.

✍ 画出 $H(A|\rho) + H(B|\rho)$ 的最小值与 θ 的关系图像.

只需要在纯态情形下求极值即可. 另外, 对熵函数求极值的时候会遇到超越方程, 只能得到数值解. 所以你需要用到一些数学工具, 比如 Mathematica, MatLab, Maple.

我们说过, 在量子力学中, 关于力学量的值, 稳妥的说法是:

- 测量某个力学量所能得到的结果是该力学量的本征值;
- 一般情形下, 测量的结果是随机的;
- 如果量子态处于力学量的本征态, 那么测量的结果是确定的.

在这些说法中, 测量是反复强调的一个因素, 并且, 力学量的值是通过测量体现出来的. 但是, 更微妙的是, 即便是通过测量得到的力学量的值, 也仍然与经典力学的情形有很大差别.

在经典力学中, 在任何一个特定的时刻, 不论是否进行测量, 力学量的值是确定的. 如果希望拉近量子力学和经典力学的差距, 那么不妨考察一番位居二者之间的一个中庸的模型. 设想力学量具有真实而实在的值, 而到底取得什么值则是随机的, 换句话说, 在我们要考察的模型中, 力学量就像是经典概率论中的随机变量.

考虑简单的双值力学量 A, 即, 在任何时刻, A 的可能的取值只有两个, $+1$ 和 -1, 只是我们不能确定到底是哪一个. 现在, 选择任意的四个时刻, $0 < t_1 \leqslant t_2 \leqslant t_3 \leqslant t_4$, 做如下 4 轮实验测量力学量 A 的值.

I. 在 t_1 和 t_2 时刻测量 A, 得到的结果记作 $v(t_1)$ 和 $v(t_2)$.

II. 在 t_2 和 t_3 时刻测量 A, 得到的结果记作 $v(t_2)$ 和 $v(t_3)$.

III. 在 t_3 和 t_4 时刻测量 A, 得到的结果记作 $v(t_3)$ 和 $v(t_4)$.

IV. 在 t_1 和 t_4 时刻测量 A, 得到的结果记作 $v(t_1)$ 和 $v(t_4)$.

当然, $v(t_i)$ 的值只能是 $+1$ 或 -1. 容易验证 $v(t_i)$ 满足以下不等式

$$v(t_1)v(t_2) + v(t_2)v(t_3) + v(t_3)v(t_4) - v(t_1)v(t_4) \leqslant 2. \tag{2}$$

强调指出: 这个不等式的内核是实在性, 即, 在任何时候, 力学量都具有真实而明确的值, 而测量揭示了这种真实性.

问题 2 (Leggett 不等式) 现在, 在量子力学中考察不等式 (2). 将上面提到的力学量 A 看作是 Pauli 矩阵 σ_z. 系统的哈密顿量设为

$$H = \frac{1}{2}\omega\sigma_x. \tag{3}$$

这里我们令 $\hbar = 1$. 设系统的初态是某个任意的归一化的向量 $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^2$. 在 t_1 时刻测量 σ_z, 得到的结果记作 $v_m(t_1)$, 其值是 $+1$ 或者 -1, 下标 m 表示测量得到的值. 测量后系统的态是 $|z_+\rangle$ 或者 $|z_-\rangle$, 相应的几率分别是 $p\big(v_m(t_1) = +1\big)$ 和 $p\big(v_m(t_1) = -1\big)$. 然后, 系统从 $|z_+\rangle$ 或者 $|z_-\rangle$ 开始继续在哈密顿量 H 的支配下继续演化. 在 t_2 时刻测量 σ_z, 得到结果是 $v_m(t_2) = +1$ 或 -1.

✍ 计算下面四个条件几率

$$p\big(v_m(t_2) = +1|v_m(t_1) = +1\big), \quad p\big(v_m(t_2) = -1|v_m(t_1) = +1\big),$$

$$p\big(v_m(t_2) = +1|v_m(t_1) = -1\big), \quad p\big(v_m(t_2) = -1|v_m(t_1) = -1\big).$$

定义第一个实验给出的**关联函数**:

$$C(t_1, t_2) := \langle v_m(t_1)v_m(t_2)\rangle$$

$$=(+1)\,p\big(v_m(t_1)=+1, v_m(t_2)=+1\big)+(+1)\,p\big(v_m(t_1)=-1, v_m(t_2)=-1\big)$$

$$+(-1)\,p\big(v_m(t_1)=+1, v_m(t_2)=-1\big)+(-1)\,p\big(v_m(t_1)=-1, v_m(t_2)=-1\big).$$

其意思就是 $v_m(t_1)v_m(t_2)$ 的期望值.

类似地, 可以定义其它三个实验给出的关联函数, $C(t_2,t_3)$, $C(t_3,t_4)$, $C(t_1,t_4)$. 所以, 在量子力学中, 与不等式 (2) 对应的形式应该是

$$C(t_1,t_2)+C(t_2,t_3)+C(t_3,t_4)-C(t_1,t_4)\leqslant 2. \tag{4}$$

✍ 在量子力学中, 不等式 (4) 总是成立的么? 为了使计算简单, 不妨设 $t_2-t_1=t_3-t_2=t_4-t_3=\Delta t$. 在量子力学中, 对不等式 (4) 的最大违反是多少?

问题 3 两体量子系统由子系统 A 和 B 构成. 两个子系统都是自旋 1/2 粒子. 子系统 A 有两个彼此互补的观测量, 记作 A_1 和 A_2; 子系统 B 的两个彼此互补的观测量为 B_1 和 B_2. 也就是说, 设 A_1 的两个本征向量为 $|\alpha_0^{(1)}\rangle$ 和 $|\alpha_1^{(1)}\rangle$, A_2 的两个本征向量为 $|\alpha_0^{(2)}\rangle$ 和 $|\alpha_1^{(2)}\rangle$, 那么对于 $i,j\in\{0,1\}$, 有 $|\langle\alpha_i^{(1)}|\alpha_j^{(2)}\rangle|=\frac{1}{\sqrt{2}}$. 观测量 B_1 和 B_2 之间的互补性有与此相同的描述. 考虑如下形式的两体系统的观测量,

$$C=A_1\otimes B_1+A_1\otimes B_2+A_2\otimes B_1-A_2\otimes B_2.$$

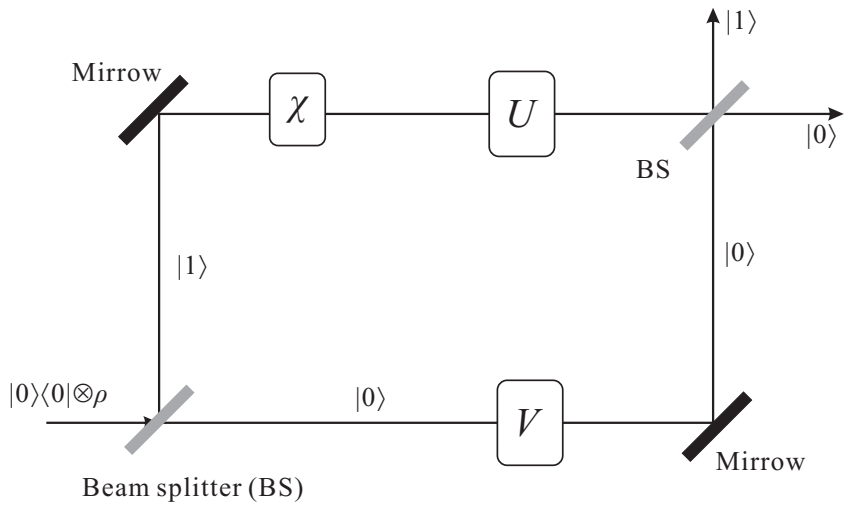
✍ 对于所有的 $\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$ 空间中量子态 $|\Psi\rangle$, 证明观测量 C 的期望值 $\langle C\rangle=\langle\Psi|\,C\,|\Psi\rangle$ 的最大值等于 $2\sqrt{2}$.

注 为了简化计算, 可以将观测量 A_i 和 B_j 选择为特殊形式, 比如 Pauli 矩阵. □

问题 4 干涉仪中的混和态.

输入态是混和态 ρ. 用 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 标记水平路径和垂直路径.

✍ 经过下图所示的演化过程, 写出在出射端的 $|0\rangle$ 路径和 $|1\rangle$ 路径上系统的状态, 以及在这两个路径上获得观测结果的几率.



图中的 χ 表示对系统的状态进行相位变换, 即 $|\psi\rangle \to e^{i\chi}|\psi\rangle$. U 和 V 表示作用于系统的不同的酉变换.

✍ 证明, 在输出端 ($|0\rangle$ 或 $|1\rangle$), 观测结果的能见度 (visibility) 是

$$\boxed{\mathcal{V} = \mathrm{Tr}(\rho U^\dagger V).}$$

如果将输入态选择为最大混和态 $\mathbb{1}/2$, 那么能见度变为 $\mathrm{Tr}(U^\dagger V)/2$. 当 U 和 V 相等的时候, 能见度达到最大. 这表明, 可以通过能见度的大小衡量两个酉变换的相近程度.

作业七

2017/11/07

在这次作业里, 我们要分析非理想测量, 讨论弱测量和弱值.

理想测量, 又叫做 von Neumann 测量, 可以体现量子力学的测量假设 (Born-Lüders 规则). 设系统 Q 处于纯态 $|\psi\rangle$, 被测力学量是 $A = \sum_i a_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$, 非简并. 测量结果为 a_i 的几率是 $p_i = |\langle\alpha_i|\psi\rangle|^2$. Born 规则毕竟只是一个规则, 既抽象又乏味. 稍微实际一些的说法是, 测量是间接的, 现象是要反映在仪器上的.

设系统 Q 的力学量 A 与仪器的力学量 X 之间有相互作用, 忽略系统和仪器自身的哈密顿量, 则两体系统的整体哈密顿量是

$$H = gA \otimes X$$

其中 g 视作耦合常数. 系统和仪器随时间演化之后, 对仪器的另一个力学量 Z 进行观测, 以一定的几率获得观测结果其本征值 z_i. 为了以后的讨论, 我们还需要为系统设定另一个力学量 B. 下表列出了要用到的物理量和量子态.

表 1: **仪器采用离散变量时的量子测量**

	系统	仪器
力学量	A, B	X, Z
本征值和本征值	$(a_i, \|\alpha_i\rangle)$, $(b_j, \|\beta_j\rangle)$	$(x_i, \|\xi_i\rangle)$, $(z_j, (\|\zeta_j\rangle))$
初态	$\|\psi\rangle$	$\|\varphi\rangle$
相互作用	$H = gA \otimes X$	

将系统的初态表示为

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\alpha_i\rangle, \quad c_i = \langle\alpha_i|\psi\rangle$$

如果系统和仪器达到如下形式的 pre-measurement state

$$\sum_i c_i |\alpha_i\rangle \otimes |\zeta_i\rangle \tag{1}$$

那么就可以观测仪器的力学量 Z, 得到结果 z_i 的几率是 $|c_i|^2 = |\langle \alpha_i|\psi\rangle|^2$, 正是 Born 规则给出的理论预言.

系统的力学量 A 的期望值是

$$\langle A\rangle = \sum_i a_i |c_i|^2 = \langle\psi|A|\psi\rangle \tag{2}$$

由于系统和仪器的整体的哈密顿量已经设为 $H = gA\otimes X$, 因此 $[A, H] = 0$, 即 A 是守恒量, 期望值 $\langle A\rangle$ 在测量过程中始终保持不变.

在下面的讨论中, 我们遵守这样的假设:

假设 1 在测量过程中, 系统的被测力学量是守恒量, 它的期望值在测量过程中是不变的. □

仔细分析一下 (2) 式, 其中的 a_i 是 A 的本征值. 根据量子力学的测量假设, 测量结果属于 A 的本征值的集合. 其中的 $|c_i|^2$ 是得到结果 a_i 的几率, 从间接测量的角度说, 这个几率是在仪器上反映出来的. 在理想测量的情形中, 在仪器上观测到 z_i 的几率正是 $|c_i|^2$. 所以, 在较为实际的系统–仪器测量模型中, 理想情形下的测量结果反映了 Born 规则.

在非理想的测量中, 系统和仪器达到的测量前的量子态不再是 (1) 式, 而可能是形如下式的量子态

$$|\Psi\rangle = \sum_i |\tilde{\psi}_i\rangle \otimes |\zeta_i\rangle \tag{3}$$

这里, $|\tilde{\psi}_i\rangle$ 没有归一化, 而且也不是彼此正交的. 显然, $|\tilde{\psi}_i\rangle$ 不是 A 的本征态.

问题 1 证明, 在 (3) 中, 对仪器的力学量 Z 作测量, 得到结果 z_i 的几率是

$$p_i^Z = \langle\tilde{\psi}_i|\tilde{\psi}_i\rangle \tag{4}$$

非理想情形下的几率 p_i^Z 肯定不等于理想测量中的 $|c_i|^2$, 但是我们始终遵守假设 1, 不论是理想测量还是非理想测量, 被测力学量 A 的期望值是不变的. 根据仪器上观测结果的几率分布, 写出系统的被测力学量的期望值, 其形式应该是

$$\langle A\rangle = \sum_i \tilde{a}_i p_i^Z \tag{5}$$

这里的 $\tilde{a}_i$ 肯定不能是 A 的本征值 a_i.

以最简单的 $2\otimes 2$ 情形为例, 回顾 Chapter 4-3 的内容. 系统 Q 的被测力学量是 σ_z, 系统 Q 和仪器 M 的相互作用哈密顿量是

$$H^{\text{int}} = -\hbar g \sigma_z^Q \otimes \sigma_y^M \tag{6}$$

其中 g 是耦合常数, 设 $g > 0$, 它的大小反映了相互作用的强弱. 在不致引起混淆的时候, 上标 Q 和

M 将被省去. 略去系统和仪器自身的哈密顿量, 两体系统的时间演化算符是 $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$,

$$U(\tau) = \begin{pmatrix} \cos\tau & \sin\tau & 0 & 0 \\ -\sin\tau & \cos\tau & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\tau & -\sin\tau \\ 0 & 0 & \sin\tau & \cos\tau \end{pmatrix} \tag{7}$$

其中 $\tau = gt$. 设系统 Q 的初态是 $|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$, 仪器 M 的初态是 $|\varphi\rangle = |x+\rangle$. 二者共同的初态是 $|\Psi(0)\rangle = |\psi\rangle \otimes |\varphi\rangle$, 演化的结果是

$$\begin{aligned} |\Psi(\tau)\rangle &= U(\tau)\,|\Psi(0)\rangle \\ &= |\tilde{\psi}_0(\tau)\rangle \otimes |0\rangle + |\tilde{\psi}_1(\tau)\rangle \otimes |1\rangle \end{aligned} \tag{8}$$

其中

$$|\tilde{\psi}_0(\tau)\rangle = c_0 \cos\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right)|0\rangle + c_1 \sin\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right)|1\rangle$$

$$|\tilde{\psi}_1(\tau)\rangle = c_0 \sin\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right)|0\rangle + c_1 \cos\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right)|1\rangle$$

以下可以令

$$d_0 = \cos\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right), \quad d_1 = \sin\left(\frac{\pi}{4} - \tau\right)$$

我们希望测量 (8) 式中仪器的力学量 σ_z^M, 以获得对系统的 σ_z^Q 的认识.

问题 2 *对于简单的 $2 \otimes 2$ 测量模型, 在 (8) 式所示的情形中, 考虑系统的被测力学量的期望值 (5), 给出 $\tilde{a}_0$ 和 $\tilde{a}_1$ 的表达式.*

显然, 一般情况下, $\tilde{a}_i$ 不等于 σ_z^Q 的本征值 ± 1. 我们作如下假设.

假设 2 *量子系统的观测量的值取决于具体的测量过程. 在理想测量情形中, 观测量的值是相应的厄密算子的本征值. 对于一般的非理想测量, 被测力学量的值由假设 1 以及仪器上观测到的现象的几率确定, 称之为互文值* (contextual value) [1, 2]. □

这个假设并不违反量子力学的基本原理. 到目前为止, 人们还是认为, 量子系统的观测量不具有本体论意义上的客观性质, 也不能像经典力学那样为之赋予确定的值. 观测量的值依赖于测量过程, 这体现为量子力学的互文性 (contextuality), 参看 [3]. Born-Lüders 规则说的是理想测量情况下观测量的值 —— 相应的厄密算子在的本征值, 我们以此为出发点, 推广得到非理想测量情况下观测量的互文值, 如问题 2 中的 $\tilde{a}_0$ 和 $\tilde{a}_1$.

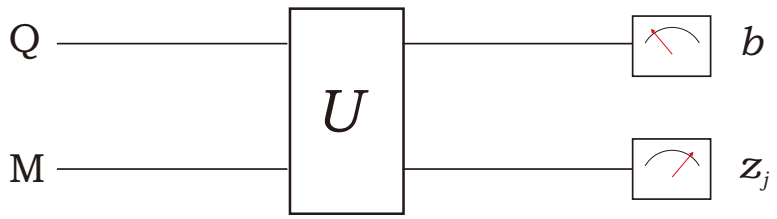
还可以注意到, 在问题 2 中求得的互文值 $\tilde{a}_0$ 和 $\tilde{a}_1$ 可以超出 σ_z^Q 的本征值的范围 $[-1, +1]$, 这没什么大不了的, 由 (5) 式给出的观测量 A 的期望值仍然落在区间 $[-1, +1]$ 中.

Aharonov 等人讨论了后选择 [4,5], 发现在后选择情形下, 观测量 A 的期望值可以超出本征值范围, 并有了弱值 (weak value) 的说法, 这个问题也引起了不少争论, 见综述 [6].

后选择的对象是系统 Q 的某个量子态, 我们从联合测量的角度讨论后选择. 回到表 1 以及式 (3). 非理想测量情形下, 系统和仪器经过酉变换 U 达到了 pre-measurement state (3). 这时, 我们同时对系统和仪器进行测量, 如下图所示. 系统的观测对象是 B, 仪器的观测对象是 Z. 考虑测量 B 得到结果 b (这里省略了本征值 b_j 的下标 j, 与此对应的本征态是 $|\beta\rangle$), 以及测量 Z 得到结果 z_j 的几率. 这个联合事件的几率是

$$p(b, z_j) = \langle\Psi|\Pi_b^B \otimes \Pi_j^Z|\Psi\rangle$$

其中 $|\Psi\rangle$ 由 (3) 式给出, 投影算子 $\Pi_b^B = |\beta\rangle\langle\beta|$, $\Pi_j^Z = |\zeta_j\rangle\langle\zeta_j|$.



然后就可以考虑条件几率 $p(z_j|b)$. 它的意思很明确: 在 $|\Psi\rangle$ 中, 测量系统的力学量 B 得到结果 b, 在此条件下, 测量仪器的力学量 Z 得到结果 z_j 的几率.

$$p(z_j|b) = \frac{p(b, z_j)}{p(b)}$$

其中 $p(b)$ 是测量 B 得到结果 b 的几率,

$$p(b) = \sum_j p(b, z_j)$$

条件几率 $p(z_j|b)$ 可以表示为

$$p(z_j|b) = \frac{p(b, z_j)}{\sum_j p(b, z_j)} \tag{9}$$

所谓的后选择就是对系统的力学量 B 进行测量, 选择某一个结果 b. 成功实现了后选择之后, 在仪器上看到结果 z_j 的几率就是 (9) 式.

进一步地, 考虑后选择之后系统的力学量 A 的期望值. 在假设 2 中说过, 系统的力学量在非理想测量中得到的值不再是厄密算子的本征值, 而是像问题 2 中得到的 $\tilde{a}_i$ 那样的值. 因此, 在后选择成立的情形下, 系统的力学量 A 的期望值应该是

$${}_b\langle A\rangle = \sum_j \tilde{a}_j p(z_j|b) \tag{10}$$

上式左端的下标 b 表示后选择.

问题 3 在问题 2 中, 我们计算了 $2 \otimes 2$ 测量模型中系统的被测力学量 σ_z^Q 的互文值. 现在考虑后选择, 对系统进行 σ_x^Q 测量, 并选择结果 $+1$. 仪器的测量对象仍然是 σ_z^M, 在此情况下, 计算 (10) 式的结果 ${}_{+1}\langle\sigma_z^Q\rangle$. 并指出 ${}_{+1}\langle\sigma_z^Q\rangle$ 的值可以超出区间 $[-1, +1]$.

参考文献

[1] Dressel, J., Agarwal, S., and Jordan, A. N. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 240401 (2010).

[2] Dressel, J. and Jordan, A. N. *Phys. Rev. A* **85**, 022123 (2012).

[3] Mermin, N. D. *Rev. Mod. Phys.* **65**, 803–815 (1993).

[4] Aharonov, Y., Albert, D. Z., and Vaidman, L. *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1351 (1988).

[5] Aharonov, Y. and Botero, A. *Phys. Rev. A* **72**, 052111 (2005).

[6] Dressel, J., Malik, M., Miatto, F. M., Jordan, A. N., and Boyd, R. W. *Rev. Mod. Phys.* **86**, 307 (2014).

作业八

2017/11/25

问题 1 G. J. Pryde, J. L. O'Brien, A. G. White, S. D. Bartlett, T. C. Ralph, Measuring a Photonic Qubit without Destroying It. Physical Review Letters **92**, 190402 (2004).

在这篇论文中, 作者在光学实验中实现了量子非破坏测量.

推导该文中的 (2) 式和 (3) 式, 并推导包含 (3) 式的段落的下一段内容中提到的对于任意输入态 $\gamma|H\rangle + \delta|V\rangle$ 的成功几率 $P = \frac{\gamma^2+3\delta^2}{6}$.

问题 2 (virial theorem) 考虑一维运动. 算子 XP 虽然不是厄密算子, 但是仍然可以有期望值 $\langle XP\rangle$. 对于哈密顿量 $H = T + V$, 其中 T 是动能算子, V 是势能算子,

- 证明
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle XP\rangle = 2\langle T\rangle - \left\langle X\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}X}\right\rangle$$
上式中的期望值是关于任意量子态而言的.

- 证明, 对于定态, XP 的期望值不随时间改变, 即
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle XP\rangle_{\text{stationary}} = 0$$
上式的下标 stationary 强调算子的期望值是在定态中计算的. 于是在定态中,
$$2\langle T\rangle_{\text{stationary}} = \left\langle X\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}X}\right\rangle_{\text{stationary}}$$
这就是一维情形下的维里定理 (virial theorem).

- 证明对于谐振子的定态, 根据维里定理, 有 $\langle T\rangle = \langle V\rangle$. 将 X 和 P 用升降算子表示, 重新计算定态中的期望值 $\langle T\rangle$ 和 $\langle V\rangle$, 以作验证.

问题 3 设质量为 m 的粒子在如下势场中运动,
$$V = \begin{cases} \frac{1}{2}kx^2 & \text{for } x > 0 \\ \infty & \text{for } x < 0 \end{cases}$$

- 该粒子的基态能量是多少?
- 对于基态, 计算期望值 $\langle x^2\rangle$.

问题 4 粒子被限制在一维无限深势阱中, 势阱的宽度为 a. 能级记作 E_n, $n=1,2,\cdots$, 对应的本征态记作 $|\varphi_n\rangle$. 如果对粒子施加一个很小的扰动, 发现放出一个能量为 $h\nu = 3E_1$ 的光子, 那么能否就此判定粒子在受扰前的状态是 $|\varphi_2\rangle$?

问题 5 考虑自由粒子在三维空间中的运动. 假设在 $t=0$ 时刻, 粒子的空间位置波函数是

$$\Psi(\boldsymbol{r},0) = \frac{\pi^{-3/2}}{2}\sin 3x\ \exp\left\{i(5y+z)\right\} \tag{1}$$

波函数 $\Psi(\boldsymbol{r},0)$ 是平面波的叠加. 如果直接计算 $|\Psi(\boldsymbol{r},0)|^2$ 在整个空间的积分, 会得到发散的结果. 式 (1) 并不是一个具有物理意义的量子态, 我们只是用它来讨论一些基本概念.

(a) 如果在 $t=0$ 时刻测量粒子的能量, 那么可能得到什么结果?

(b) 如果在 $t=0$ 时刻测量粒子的动量, 那么会有哪些结果? 几率有是多少?

(c) 写出 t 时刻的波函数 $\Psi(\boldsymbol{r},t)$.

(d) 如果在 $t=0$ 时刻测量动量得到的结果是 $\boldsymbol{p} = \hbar(3\boldsymbol{e}_x + 5\boldsymbol{e}_y + \boldsymbol{e}_z)$, 那么给出粒子在 t 时刻的波函数.

问题 6 假设粒子的空间波函数具有如下形式,

(a) $\psi(\boldsymbol{r}) = f(r)\cos^2\theta$

(b) $\psi(\boldsymbol{r}) = f(r)\sin\theta\cos\theta\sin\phi$

(c) $\psi(\boldsymbol{r}) = N(x+y+z)e^{-r^2/\alpha^2}$, 其中 N 是归一化常数

分别在这些态中, 测量 L^2 和 L_z, 可能的观测结果是什么? 这些结果出现的几率是多少?

问题 7 验证下面的对易关系

$$\left[L^2,[L^2,\boldsymbol{R}]\right] = 2\hbar^2(\boldsymbol{R}L^2 + L^2\boldsymbol{R})$$

其中 L^2 是轨道角动量算子 $\boldsymbol{L}$ 的平方, $\boldsymbol{R}$ 是空间位置算子.

可以首先考虑对易子 $[L^2,X]$, $[L^2,Y]$, $[L^2,Z]$, 在进一步计算的过程中, 注意到 $\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{L} = 0$.

问题 8 设 $|\psi\rangle$ 是氢原子的束缚态 (不一定是哈密顿量的本征态), 能量的期望值是

$$\langle E\rangle = \langle\psi|H|\psi\rangle$$

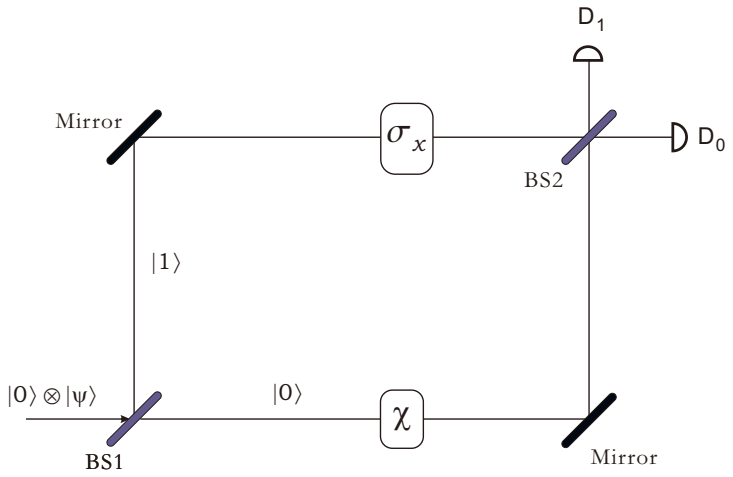
其中 H 是氢原子的哈密顿量. 证明

$$\langle E\rangle \geqslant \langle 100|H|100\rangle = E_1$$

作业九

2017/12/14

问题 1 回顾 Mach-Zehnder 干涉仪 (如下图所示).



在探测器 D_0 上观测到粒子的几率是

$$p_0 = \frac{1}{2}\left[1 + \mathrm{Re}\big(e^{-i\chi}\,\langle\psi|U|\psi\rangle\,\big)\right]$$

现在, 设 $U = \sigma_x$, 即自旋翻转操作, 粒子的初态 $|\psi\rangle$ 是 σ_z 的本征态 $|0\rangle$ 或 $|1\rangle$, 那么, 由于 $\langle 0|\sigma_x|0\rangle = \langle 1|\sigma_x|1\rangle = 0$, 在探测器上观测不到干涉现象. 如果将初态 $|\psi\rangle$ 设置为 $|x+\rangle$ 或者 $|x-\rangle$, 那么, 由于 $\langle x \pm |\sigma_x|x\pm\rangle = \pm 1$, 可以在探测器上观测到最为明显的干涉现象.

现在分析图 1 所示的实验过程.

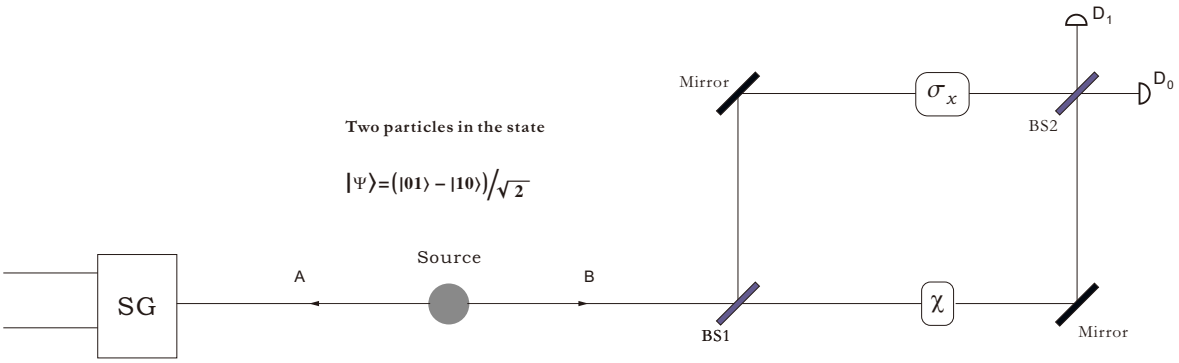


图 1

源发出两个自旋为 1/2 的粒子, 两个粒子处于自旋单态

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \tag{1}$$

根据角动量一章中的内容, 我们知道, $|\Psi\rangle$ 的总的角动量为零, 并且总角动量在 z 方向上的分量亦为零. 可以形象地说, 源原先处于自旋为零的静止状态, 在某个时候裂变为两个质量相同的粒子 A 和 B, 每个粒子的自旋均为 1/2. 由于角动量守恒, A 和 B 的自旋指向总是相反的. A 向左运动, B 向右运动. 由于动量守恒, 它们的速度大小相同, 方向相反.

(1) 的形式只能表明 A 和 B 各自的自旋角动量的 z 分量指向相反. 但是, 注意到

$$|0\rangle = e^{i\frac{\phi}{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}\,|n+\rangle - \sin\frac{\theta}{2}\,|n-\rangle\right),$$

$$|1\rangle = e^{-i\frac{\phi}{2}}\left(\sin\frac{\theta}{2}\,|n+\rangle - \cos\frac{\theta}{2}\,|n-\rangle\right)$$

我们可以把 $|\Psi\rangle$ 表示为

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\,|n+\rangle\,|n-\rangle - |n-\rangle\,|n+\rangle\,\big).$$

这个形式说明 A 和 B 的各自的自旋角动量在任意方向上的指向总是彼此相反的.

现在, 向左运动的 A 粒子进入 SG 装置, 向右运动的 B 粒子进入 MZ 干涉仪. SG 中的磁场梯度的指向有两种选择, 一个是指向 z 方向, 另一个是指向 x 方向. 我们来比较两种不同的选择.

- $SG(z)$ 装置. A 粒子通过 $SG(z)$ 装置以后, 偏转方向是 $\pm z$ 方向. 如果我们在 $SG(z)$ 的出口观测到偏向 $+z$ 或者偏向 $-z$ 的粒子, 那么可以断定 B 粒子处于量子态是 $|1\rangle$ 或者 $|0\rangle$. 对于这种情况, 前面的分析指出, 不会在 MZ 干涉仪中出现干涉现象.

- $SG(x)$ 装置. A 粒子通过 $SG(x)$ 装置以后, 偏转方向是 $\pm x$ 方向. 如果我们在 $SG(x)$ 的出口观测到偏向 $+x$ 或者偏向 $-x$ 的粒子, 那么可以断定 B 粒子处于量子态是 $|x-\rangle$ 或者 $|x+\rangle$. 对于这种情况, 前面的分析指出, 一定会在 MZ 干涉仪中出现干涉现象.

于是, 在左右两端距离甚远的时候, 左侧的测量方式的选择似乎可以在瞬间决定右侧的实验结果. 解释这个矛盾.

问题 2 设想某个物理系统具有固定的轨道角动量, 就是说, 该系统的量子态 $|\psi\rangle$ 是 L^2 的本征态,

$$L^2|\psi\rangle = \ell(\ell+1)\hbar^2|\psi\rangle$$

在位置表象中, $|\psi\rangle$ 的波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$ 可以表示

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \sum_k \sum_{m=-\ell}^{\ell} R_{k,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta,\phi)$$

其中 k 是与角动量无关的量子数 (比如系统的能级), $R_{k,\ell}(r)$ 可以视作系统的径向波函数. 不过, 在下面的讨论中, 并不需要用到波函数的具体形式.

在量子态 $|\psi\rangle$ 中, 轨道角动量 $\boldsymbol{L}$ 的期望值记作

$$\langle \boldsymbol{L} \rangle = \langle\psi|\boldsymbol{L}|\psi\rangle$$

这是一个 $\mathbb{R}^3$ 中的向量, 三个分量是 $\langle\psi|L_k|\psi\rangle$, $k = x, y, z$.

我们暂且假设量子态 $|\psi\rangle$ 能够使得 $\langle\psi|L_x|\psi\rangle = \langle\psi|L_y|\psi\rangle = 0$.

- ✍ 对于所有这样的量子态, $(\Delta L_x)^2 + (\Delta L_y)^2 + (\Delta L_z)^2$ 的最小值是多少? 这里, 对于观测量 A, 定义 $(\Delta A)^2 = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2$.
- ✍ 能够达到这个最小值的量子态是什么样的? 将这样的量子态记作 $|\zeta\rangle$.
- ✍ 考虑与 z 夹角为 θ 的某个方向, 在该方向上的角动量记作 L_θ, 在上述 $|\zeta\rangle$ 中计算 L_θ 的标准方差 $(\Delta L_\theta)_\zeta$, 证明

$$(\Delta L_\theta)_\zeta = \hbar\sqrt{\frac{\ell}{2}}\sin\theta$$

考虑一般意义上的角动量 $\boldsymbol{J}$, 在态 $|\psi\rangle$ 中的期望值是 $\langle\boldsymbol{J}\rangle_\psi$, 用列向量表示

$$\langle\boldsymbol{J}\rangle_\psi = \begin{pmatrix}\langle\psi|J_x|\psi\rangle & \langle\psi|J_y|\psi\rangle & \langle\psi|J_z|\psi\rangle\end{pmatrix}^T$$

其中的上标 T 表示转置.

对 $|\psi\rangle$ 作旋转变换, 相应的酉算子是

$$U(\boldsymbol{n},\vartheta) = \exp\left\{-\frac{i\vartheta}{\hbar}J_n\right\}, \quad J_n = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$$

旋转变换使得 $|\psi\rangle \longrightarrow |\psi'\rangle = U(\boldsymbol{n},\vartheta)\,|\psi\rangle$. 在 $|\psi'\rangle$ 中, 角动量 $\boldsymbol{J}$ 的期望值是

$$\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi'} = \Big(\langle\psi'|J_x|\psi'\rangle \quad \langle\psi'|J_y|\psi'\rangle \quad \langle\psi'|J_z|\psi'\rangle\Big)^T$$

分析两个向量 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi}$ 和 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi'}$ 之间的联系.

问题 3 简单地, 设 $j=1$, 上述旋转变换是绕 z 轴的旋转, 即

$$U(z,\phi) = \exp\Big\{-\frac{i\phi}{\hbar}J_z\Big\}$$

在此情况下, 给出 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi}$ 和 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi'}$ 之间的联系.

在对 $|\psi\rangle$ 进行旋转变换的过程中, 期望值向量 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi}$ 表现得如同 $\mathbb{R}^3$ 中的向量. 我们来考虑向量 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi}$ 的 "长度", 即

$$\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi}^2 = \langle J_x\rangle_{\psi}^2 + \langle J_y\rangle_{\psi}^2 + \langle J_z\rangle_{\psi}^2$$

如果对 $|\psi\rangle$ 进行旋转变换, 那么 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi}^2$ 是不变的. 更进一步地, 还可以找到这样一个旋转变换 U, $|\psi'\rangle = U\,|\psi\rangle$, 不但有 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi}^2$=$\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi'}^2$, 而且还有

$$\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi'} = \Big(0 \quad 0 \quad \langle\psi'|J_z|\psi'\rangle\Big)^T \tag{2}$$

问题 4 考虑自旋-1 的粒子, $s=1$. 设粒子的状态是

$$|\psi\rangle = a\,|+1\rangle + b\,|0\rangle + c\,|-1\rangle$$

其中 a, b 和 c 设为实数, 且 $a^2+b^2+c^2=1$. 基向量 $|k\rangle$, $k=+1,0,-1$, 是 S_z 的本征向量, 对应的本征值分别为 $+\hbar$, 0 和 $-\hbar$. 基向量 $|k\rangle$ 具有自然基向量的形式.

找一个旋转变换 U, 将 $|\psi\rangle$ 变为 $|\psi'\rangle = U\,|\psi\rangle$, 使得期望值向量 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi'}$ 有 (2) 式的形式.

如果把这个问题放在自旋为 1/2 粒子的情形中讨论, 那么计算过程将非常直观, 不妨试试看.

作业十

2017/12/20

继续讨论在作业九中提到的角动量的期望值. 在量子态 $|\psi\rangle$ 中, 角动量 $\boldsymbol{J}$ 的期望值是

$$\langle \boldsymbol{J} \rangle_\psi = \Big(\langle\psi|J_x|\psi\rangle \quad \langle\psi|J_y|\psi\rangle \quad \langle\psi|J_z|\psi\rangle \Big)^T$$

考虑这个期望值向量的 "长度", 即考虑

$$\langle \boldsymbol{J} \rangle_\psi^2 = \langle J_x \rangle_\psi^2 + \langle J_y \rangle_\psi^2 + \langle J_z \rangle_\psi^2$$

当 $j = \frac{1}{2}$ 时, 对于任意的 $|\psi\rangle \in \mathscr{H}_{\frac{1}{2}}$ (实际上 $\mathscr{H}_{\frac{1}{2}} = \mathbb{C}^2$), 总是有 $\langle \boldsymbol{J} \rangle_\psi^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$. 它正好等于 $\langle J^2 \rangle_\psi$, 这只是一个巧合, 或者说是 $\mathscr{H}_{\frac{1}{2}}$ 空间的特殊性造成的. 当 $j = 1$ 时, 就没有这样的结论了. 在作业九的问题 4 中可以看到这一点.

一个自然的问题是: 对于一般的 j, 什么的量子态 $|\psi\rangle \in \mathscr{H}_j$ 可以使得向量 $\langle \boldsymbol{J} \rangle_\psi$ 最长? 也就是说,

$$\max_{\text{All } |\psi\rangle \in \mathscr{H}_j} \langle \boldsymbol{J} \rangle_\psi^2 = ? \tag{1}$$

空间 $\mathscr{H}_j$ 的基向量是 $|j, m\rangle$, $m = -j, \cdots, j$, 或者简单地记作 $|m\rangle$. 这些基向量在形式上等同于自然基向量. 任意的 $|\psi\rangle \in \mathscr{H}_j$ 可以表示为

$$|\psi\rangle = \sum_{m=-j}^{j} c_m |m\rangle$$

需要注意的是, 当 $j = \frac{1}{2}$ 时, 任意的 $|\psi\rangle \in \mathscr{H}_{1/2}$ 都是某个 $J_n = \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{J}$ 的本征向量. 但是一般情况下并不如此. 例如, 考虑自旋为 1 的粒子, 在讲义 8-3 中计算了 S_n 的本征态, 其中只用到了两个参数, θ 和 ϕ. 但是 $\mathscr{H}_1$ 空间中的任意量子态应该表示为

$$c_+ |1, +1\rangle + c_0 |1, 0\rangle + c_- |1, -1\rangle$$

考虑归一化条件之后, 有五个实参数, 即便不管整体相因子, 也有四个实参数, 显然不能总是某个 S_n 的本征态. 实际上, $\mathscr{H}_1$ 和 $\mathbb{C}^3$ 都是三维复空间, 它们的数学结构是一样的, 我们说不能把 $\mathscr{H}_1$ 等同于 $\mathbb{C}^3$, 指的是, 在 $\mathscr{H}_1$ 中考虑的酉变换只能是旋转变换, 而 $\mathbb{C}^3$ 中的酉变换则是一般的 SU(3) 变换.

回到 (1) 式中的问题. 需要在所有可能的 $|\psi\rangle$ 中找寻 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_\psi^2$ 的最大值. 仅仅通过旋转变换是不能穷尽 $\mathscr{H}_1$ (实际上也是 $\mathbb{C}^3$) 中所有的量子态的. 因此 (1) 式应该写为

$$\max_{\text{All } U\,\in\,\mathrm{SU}(3)} \langle\psi|U^\dagger \boldsymbol{J} U|\psi\rangle^2 = ? \tag{2}$$

这里 $|\psi\rangle$ 可以是任意某个固定的量子态.

(2) 式不好处理, 因为我们对 SU(3) 不熟悉. 但是, 在作业九中看到, 可以通过旋转变换将期望值向量 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_\psi$ 变换为如下形式

$$\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi'} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \langle\psi'|J_z|\psi'\rangle \end{pmatrix}^T \tag{3}$$

而旋转变换是不改变期望值向量的 "长度" 的, 所以只需要考虑 J_z 在所有的 $|\psi\rangle \in \mathbb{C}^3$ 中的期望值就可以了. 我们又知道, 厄密算子 A 在某个量子态 ρ 中的期望值介于 A 的最小本征值和最大本征值之间.

$$a_{\min} \leqslant \mathrm{Tr}(A\rho) \leqslant a_{\max}, \quad \text{for } \forall\ \rho$$

这里 $a_{\min}$ 和 $a_{\max}$ 分别是 A 的最小本征值和最大本征值.

问题 1 *根据上面的分析, 考虑自旋为 1 的粒子的角动量 $\boldsymbol{S}$. 定义*

$$(\Delta S)^2 = \langle S^2\rangle - \langle \boldsymbol{S}\rangle^2$$

求出 $(\Delta S)^2$ 的最小值.

在上面的讨论中, 我们把期望值向量旋转到了 (3) 式的形式, 还可以换一种看法, 对角动量算子进行旋转变换.

下面的表达式体现了向量算子的性质,

$$\mathcal{R}\begin{pmatrix} \langle J_x\rangle_\psi \\ \langle J_y\rangle_\psi \\ \langle J_z\rangle_\psi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle J_x\rangle_{\psi'} \\ \langle J_y\rangle_{\psi'} \\ \langle J_z\rangle_{\psi'} \end{pmatrix} \xlongequal{|\psi'\rangle = U(\mathcal{R})|\psi\rangle} \begin{pmatrix} \langle\psi|U^\dagger(\mathcal{R}) J_x U(\mathcal{R})|\psi\rangle \\ \langle\psi|U^\dagger(\mathcal{R}) J_y U(\mathcal{R})|\psi\rangle \\ \langle\psi|U^\dagger(\mathcal{R}) J_z U(\mathcal{R})|\psi\rangle \end{pmatrix}$$

其中 $\mathcal{R} \in \mathrm{SO}(3)$, 而 $U(\mathcal{R})$ 是相应的旋转变换在态空间的酉算子. 令 $\boldsymbol{J}' = U^\dagger(\mathcal{R})\boldsymbol{J}U(\mathcal{R})$, 上式反映了一个的熟知的事实:

$$\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi'} = \langle \boldsymbol{J}'\rangle_\psi$$

就期望值向量的长度而言, 有

$$\langle \boldsymbol{J}\rangle_\psi^2 = \langle \boldsymbol{J}\rangle_{\psi'}^2 = \langle \boldsymbol{J}'\rangle_\psi^2$$

对于某个给定的 $|\psi\rangle$, 期望值向量 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_\psi$ 指向 $\mathbb{R}^3$ 中的某个方向, 记作 $\boldsymbol{n}$. 可以找到一个旋转变换, 将 z 方向转到 $\boldsymbol{n}$ 方向, 相应地, J_z 被旋转到 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J} = J_n$.

问题 2 考虑自旋为 1 的粒子, $s=1$. 设粒子的状态是

$$|\psi\rangle = a\,|+1\rangle + b\,|0\rangle + c\,|-1\rangle$$

其中 a, b 和 c 设为实数, 且 $a^2+b^2+c^2=1$. 基向量 $|k\rangle$, $k=+1,0,-1$, 是 S_z 的本征向量, 对应的本征值分别为 $+\hbar$, 0 和 $-\hbar$. 基向量 $|k\rangle$ 具有自然基向量的形式.

给出期望值向量 $\langle \boldsymbol{J}\rangle_\psi$ 在 $\mathbb{R}^3$ 的指向 $\boldsymbol{n}$, 写出 $J_n = \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}$, 并计算 $\langle J_n\rangle_\psi^2$.

现在考虑 J_n 的本征态. 容易的事情是 J_z 的本征态,

$$J_z\,|j,m\rangle = m\hbar\,|j,m\rangle$$

设酉变换 U 将 J_z 变为 J_n, 即

$$J_n = UJ_zU^\dagger$$

用 U 作用于 J_z 的本征方程的两端, 有

$$UJ_zU^\dagger U\,|j,m\rangle = J_nU\,|j,m\rangle = m\hbar U\,|j,m\rangle$$

表明 $U\,|j,m\rangle$ 就是 J_n 的本征态, 不妨记作 $|\boldsymbol{n}\rangle$. 如果我们知道了 U 的具体形式, 那么 $|\boldsymbol{n}\rangle$ 也就容易得到了.

我们需要的变换是从 z 方向变到 $\boldsymbol{n}$ 方向, 方向 $\boldsymbol{n}$ 的方位角是 (θ,ϕ). 可以这样描述该变换: 首先绕 y 轴转动角度 θ, 然后绕 z 轴转动角度 ϕ. 于是 U 可以表示为

$$U = e^{-i\phi J_z/\hbar}e^{-i\theta J_y/\hbar} \tag{4}$$

为了得到 U 的矩阵元, 仅仅需要关注绕 y 轴的旋转变换, 即 $e^{-i\theta J_y/\hbar}$, 这也就是矩阵 $d^{(j)}(\theta)$. 在课堂上讲过 $j=\frac{1}{2}$ 和 $j=1$ 的矩阵形式, 对于一般的 j, 参看 Sakurai 书的公式 (3.8.33), 抄录如下,

$$\begin{aligned} d^{(j)}_{m'm}(\theta) = &\sum_k (-1)^{k-m+m'}\frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{k!(j+m-k)!(j-k-m')!(k-m+m')!} \\ &\times\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{2j-2k+m-m'}\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)^{2k-m+m'} \end{aligned} \tag{5}$$

关于上式, 有两点需要解释:

1. 对 k 的求和有这样的条件: k 取整数, 并且使得上式的分母中不会出现负数的阶乘.
2. 在有些文献中, 式中符号项可能会写成 $(-1)^k$.

下面针对 $j=\frac{1}{2}$ 的情形验证一下.

当 $j=\frac{1}{2}$ 时, 首先考虑矩阵 $d^{(1/2)}$ 的第一行第一列的矩阵元, 即 $m'=m=\frac{1}{2}$. 为了使 (5) 式分母不出现负数的阶乘, k 要满足如下条件,

$$\left.\begin{array}{l} k\geqslant 0 \\ 1-k\geqslant 0 \\ -k\geqslant 0 \end{array}\right\} \quad\Longrightarrow\quad k=0,\quad (-1)^{k-m+m'}=+1$$

所以

$$d^{(1/2)}_{1/2,1/2}(\theta)=\cos\frac{\theta}{2}$$

再考虑 $m'=\frac{1}{2}$, $m=-\frac{1}{2}$ 的矩阵元, 此时, k 应该满足

$$\left.\begin{array}{l} k\geqslant 0 \\ -k\geqslant 0 \\ k+1\geqslant 0 \end{array}\right\} \quad\Longrightarrow k=0,\quad (-1)^{k-m+m'}=-1$$

所以

$$d^{(1/2)}_{1/2,-1/2}(\theta)=-\sin\frac{\theta}{2}$$

其余两个矩阵元不再继续算了, 最终有

$$d^{(1/2)}(\theta)=\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

在讲义 8-4 里说过这个矩阵.

回到 (4) 式, U 的矩阵元可以表示为

$$U_{m'm}(\theta,\phi)=e^{-im'\phi}d^{(j)}_{m'm}(\theta)$$

现在可以计算 $|\boldsymbol{n}\rangle=U(\theta,\phi)\,|j,m\rangle$ 了.

问题 3 对于任意的 j, 给出 J_n 的对应于最大本征值 $j\hbar$ 的本征态.

这一类本征态被称为角动量相干态, 使得问题 1 中的方差达到最小值.

问题 4 设 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个向量算子, 这意谓着它们与角动量算子之间有特定的对易关系. 证明 $\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}$ 是标量算子.

在位置空间中有动量 $\boldsymbol{P}$ 和轨道角动量 (或者称为线动量) $\boldsymbol{L}$. 对于粒子的内禀属性, 例如自旋, 有自旋角动量 $\boldsymbol{S}$. 问题是, 有没有关于内禀属性的线动量? 暂且用 $\boldsymbol{D}$ 表示这个内禀属性的线动量. 分析 $\boldsymbol{D}$ 是否存在.

回顾关于角动量的讨论. 我们说, 角动量是旋转变换的生成元. 如果量子系统空间自由度和内部自由度, 那么需要用两个 Hilbert 空间的直积的形式描述量子态. 为了有直观的表示, 我们用 $\mathscr{H} = \mathscr{H}^I \otimes \mathscr{H}^S$ 表示两个不同的 Hilbert 空间的直积. 其中 $\mathscr{H}^I$ 是描述内禀自由度的空间, 实际上就是 $\mathbb{C}^n$ 空间, 基向量记作 $|\alpha_j\rangle$, $j = 1, \cdots, n$; $\mathscr{H}^S$ 是描述位置的无限维的连续的 Hilbert 空间, 选用位置表象, 基向量记作 $|\boldsymbol{r}\rangle$. 因此 $\mathscr{H}$ 的基向量是 $|\alpha_j\rangle \otimes |\boldsymbol{r}\rangle$ 量子态可以表示为

$$|\Psi\rangle = \sum_j \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\ \psi_j(\boldsymbol{r}) \, |\alpha_j\rangle \otimes |\boldsymbol{r}\rangle$$

或者写为更直观的形式

$$|\Psi(\boldsymbol{r})\rangle = \langle \boldsymbol{r}|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1(\boldsymbol{r}) \\ \psi_2(\boldsymbol{r}) \\ \vdots \\ \psi_n(\boldsymbol{r}) \end{pmatrix}$$

接着考虑旋转变换. 绕 $\boldsymbol{n}$ 方向旋转角度 θ 的旋转变换对空间波函数的改变是由

$$U^S(\boldsymbol{n}, \theta) = e^{-i\theta \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{L}/\hbar}$$

决定的. 而对于自旋量子态的改变是由

$$U^I(\boldsymbol{n}, \theta) = e^{-i\theta \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{S}/\hbar}$$

决定的.

于是, 旋转变换对整体量子态的改变是

$$|\Psi\rangle \longrightarrow (U^I \otimes U^S) \, |\Psi\rangle$$

写得更明确一些,

$$|\Psi(\boldsymbol{r})\rangle \longrightarrow U^S \begin{pmatrix} \psi_1(R^{-1}\boldsymbol{r}) \\ \psi_2(R^{-1}\boldsymbol{r}) \\ \vdots \\ \psi_n(R^{-1}\boldsymbol{r}) \end{pmatrix}$$

其中 R 是 $\mathbb{R}^3$ 空间中绕 $\boldsymbol{n}$ 方向旋转角度 θ 的旋转变换.

分析无穷小过程, 可以得到整体的旋转变换的生成元,

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$$

用类似的过程分析是否存在与内禀自由度相关的线动量 $\boldsymbol{D}$. 我们知道, 动量是空间平移变换的生成元. 体现在 $\mathscr{H}^S$ 中的平移变换算子是 $T^S(\boldsymbol{a}) = e^{-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{P}/\hbar}$, 体现在 $\mathscr{H}^I$ 中的平移变换算子就应该是 $T^I(\boldsymbol{a}) = e^{-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{D}/\hbar}$, 其中 $\boldsymbol{a}$ 是平移量. 整个量子态的变换是

$$|\Psi\rangle \to \left(T^I(\boldsymbol{a}) \otimes T^I(\boldsymbol{a})\right)\ |\Psi\rangle$$

也就是

$$\Psi(\boldsymbol{r}) \longrightarrow e^{-i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{D}/\hbar} \begin{pmatrix} \psi_1(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}) \\ \psi_2(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}) \\ \vdots \\ \psi_n(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}) \end{pmatrix}$$

问题 5 如果存在 $\boldsymbol{D}$, 那么它的三个分量算子之间的对易子是什么, 它的分量算子与 $\boldsymbol{S}$ 的三个分量算子之间又应该满足怎样的对易关系? 能否证明这个算子不存在?