

高等量子力学讲座

孙昌璞

中物院研究生院/北京计算科学研究中心



课程特色与要求

1. 本课程是自成体系的，掌握普通物理学中原子物理的学生，原则上可以学懂本课程的主要内容；
2. 本课程力争深入浅出，从例子和具体问题出发，尽可能触及量子物理研究的科学前沿；
3. 深入阐释量子力学的思想起源，倡导科学精神，同时强调解决具体问题的计算能力和分析能力。

基础知识要求：

初等量子力学或原子物理，线性代数，数学物理方程

学习方法的三点要求：

多动手，善思考，勤提问



主要参考书

1. 吴兆颜, 《高等量子力学》, 吉林大学出版社 (2008)
逻辑和数学上严谨, 物理概念准确
2. 喀兴林, 《高等量子力学》, 高等教育出版社 (1999)
系统、细致、可读性强, 偏重推导
3. Steven Weinberg, Lectures on Quantum Mechanics,
Cambridge Univ., 2015,) “一流科学家, 一流教材”, 同时强
调基本概念、逻辑体系和计算能力
3. J. Sakurai, J.Napolitano: 《Modern Quantum Mechanics》,
Second Edition, World Publishing Co. (2011)45.
物理图像简洁, 例子丰富, 习题是生动的物理问题
- 4 曾谨言、裴寿庸等编, 《量子力学新进展》1-5辑中
孙昌璞及其合作者撰写的评述性文章, 北京大学出版社
前沿领域介绍, 涵盖近十年的前沿领域



倡导“研究性学习”

学习：掌握已发现的知识

研究：创造和发现新知识

研究性学习：在掌握**必需知识最小集合**的基础上独立地提出问题、发现问题和解决问题，努力发现和建立新知识，哪怕一点点。可以是已有知识的再发现，目的在于培养自己创造知识的能力。

驾驭知识 → 研究性学习

学习知识不是越多越好
越深越好而是应当
与自己驾驭知识的能力
相匹配。

黄昆

一九九〇·十月

黄昆院士，中国半导体科学奠基人



第一章：量子力学的思想与数学结构

- 1.1 从玻尔模型到矩阵力学
- 1.2 波动力学与玻恩几率诠释
- 1.3 量子力学基本原理的数学表达：
量子力学表象及其变换理论
- 1.4 密度矩阵及其初步应用
- 1.5 谐振子量子化的代数方法
- 1.6 量子力学的理论体系小结



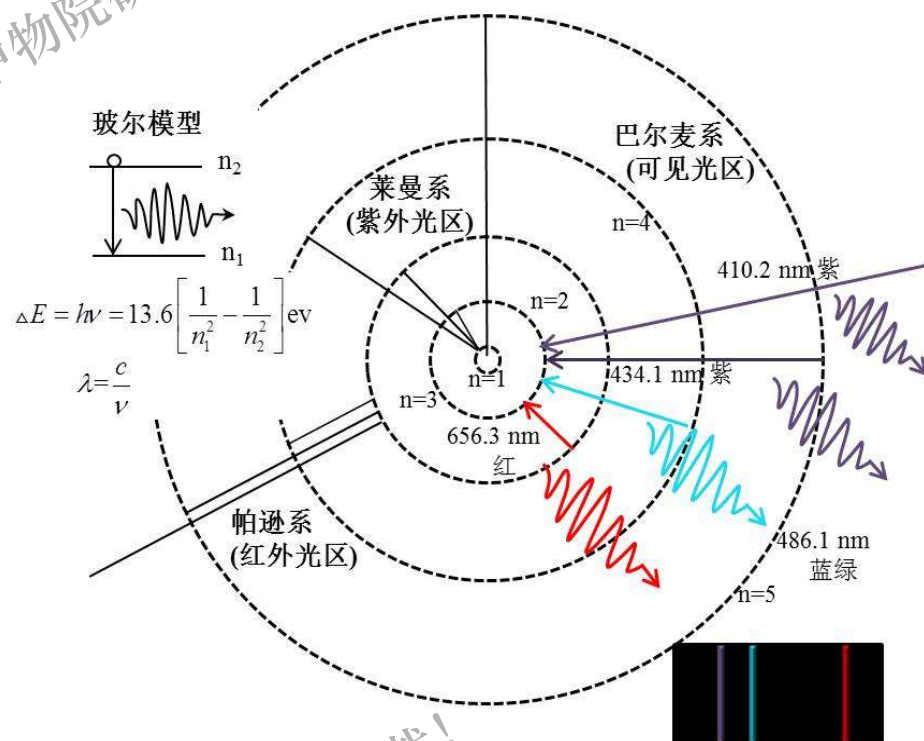
“寇享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”



1.1 从玻尔模型到矩阵力学

1913年，玻尔（Niels Bohr）
针对卢瑟福（Rutherford）的
实验提出：

原子的能量是量子化的



1、原子能量取分立值

$$E = E_1, E_2, \dots, E_n, \dots$$

2、跃迁吸收辐射光子

$$\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$$

3、角动量量子化

$$mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots$$

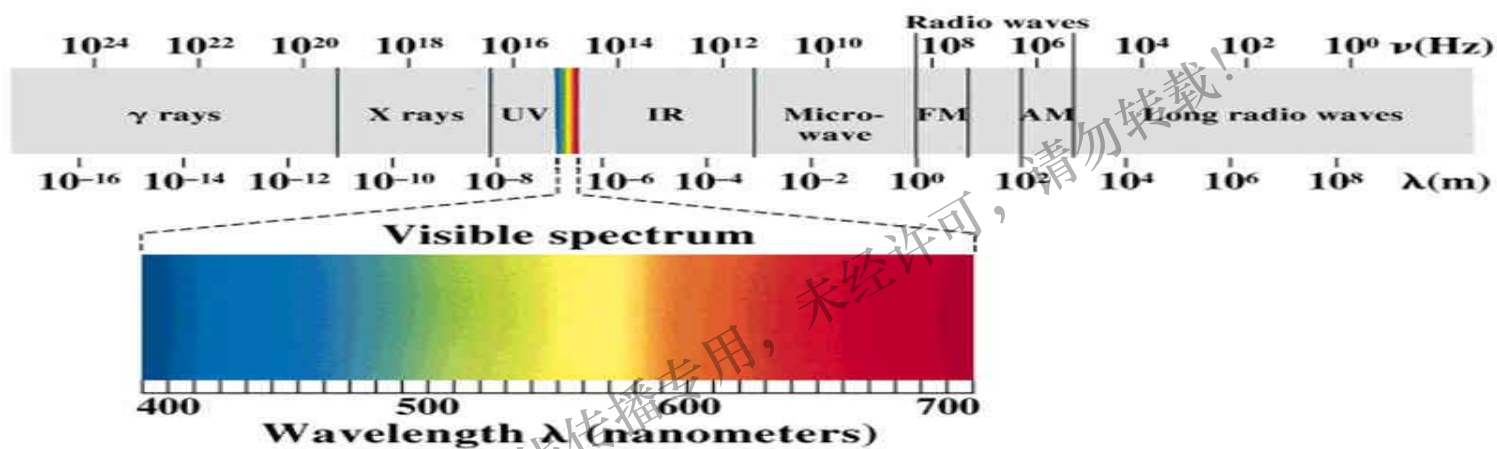
从玻尔模型到矩阵力学

$$\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$$

Ritz 组合公式

$$\omega_{mn} = \zeta \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

复习：玻尔如何推导出Ritz公式？



从玻尔模型到矩阵力学

根据经典电动力学，由坐标的傅里叶变换

$$X(t) = \sum_n X_n e^{i\omega_n t}$$

描述的加速带电粒子，其辐射功率由其加速度决定，即

$$W = \frac{4e^2}{3c^3} |\ddot{X}|^2$$

带电粒子加速运动辐射光的特征频率，一定是出现在坐标的傅里叶变换中的振动项的频率。



从玻尔模型到矩阵力学

海森堡 (Werner Heisenberg, 1925年)

原子轨道和动量不是直接的可观察量。能观察到的辐射吸收与两个指标（轨道）有关，对应着确定的跃迁频率；因此，相应的坐标傅里叶变换必须与两个指标有关：

$$X = \sum_{mn} [X_{mn}] e^{i\omega_{mn}t}, \quad \omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar.$$

电荷 e 做简谐振动时频率 ω_{mn} 的辐射功率为

$$W = \frac{4e^2}{3c^3} |\ddot{X}|^2 \rightarrow W_{(m \rightarrow n)} \propto |X_{mn}|^2 \omega_{mn}^4,$$

即加速电荷辐射光子的功率正比于辐射率的4次方。



从玻尔模型到矩阵力学

谐振子动量和坐标双指标表示：

$$P = \sum P_{mn} e^{i\omega_{mn}t} \quad X = \sum_{mn} X_{mn} e^{i\omega_{mn}t}$$

依据玻恩（1924年《量子力学》）提出差分子量子化关系，海森堡给出能量量子化

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega,$$

海森堡意识到不可对易性，但不知道这是矩阵的基本特性

$$[X][P] \neq [P][X].$$



海森堡如何意识到不可对易性

计算谐振子系统的能量

$$H = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

涉及到 $\dot{x}^2$ 和 x^2 的计算，海森堡用了以下规则

$$(\dot{X}^2)_{mn} = \sum_l \dot{X}_{ml} \dot{X}_{ln} = \sum_l \omega_{ml} \omega_{ln} X_{ml} X_{ln}$$

$$(X^2)_{mn} = \sum_l X_{ml} X_{ln}$$

涉及到不可对易性，需要注意 X 和 P 前后的次序。当年海森堡工作也隐含假设了它们是实的，对应的矩阵是厄米的。



从玻尔模型到矩阵力学

玻恩认为, X, P 可表示为矩阵

$$X = \begin{bmatrix} X_{11} & X_{12} & \cdots & X_{1n} \\ X_{21} & X_{22} & \cdots & X_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ X_{n1} & X_{n2} & \cdots & X_{nn} \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \cdots & P_{1n} \\ P_{21} & P_{22} & \cdots & P_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ P_{n1} & P_{n2} & \cdots & P_{nn} \end{bmatrix}$$

并推导出了基本对易关系

$$[X, P] \equiv XP - PX = ?$$

基本对易关系与运动方程自治

假设 X 和 P 是矩阵, 仍然满足运动方程

$$\dot{P} = -\frac{\partial V(X)}{\partial X}, \dot{X} = \frac{P}{m},$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[X, P] &= \frac{d}{dt}[XP - PX] = \dot{X}P + X\dot{P} - \dot{P}X - P\dot{X} \\ &= \frac{P}{m}P + X\left[-\frac{\partial V(X)}{\partial X}\right] - \left[-\frac{\partial V(X)}{\partial X}\right]X - \frac{P}{m}P = 0 \end{aligned}$$

这里应用了矩阵的微分运算法则
：计算中注意 X, P 的先后顺序



基本对易关系推导

$$\frac{d}{dt} [X, P] = 0, \longrightarrow [X, P] = \text{常数 } C.$$

$$\therefore C = i\hbar$$

$$\therefore C^* = (XP - PX)^\dagger = -XP + PX = -C,$$

海森堡对易关系 OR
玻恩-约当对易关系？

$$[X, P] = i\hbar$$

其中常数 $\hbar$ 由谐振子黑体辐射问题确定为普朗克常数 $\hbar = h/2\pi$
：由对易关系计算得出谐振子能量与普朗克公式对比得到

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \quad E = \left(n + \frac{1}{2}\right) h/2\pi$$



谐振子量子化（海森堡，1925年）

谐振子哈密顿量：
$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2,$$

$$\ddot{X} + \omega^2 X = 0,$$

傅里叶分量满足：

$$\ddot{X}_{mn} + \omega^2 X_{mn} = 0.$$

令 $X_{mn}(t) = X_{mn}(0)e^{i\omega_{mn}t}$ ，则 $(\omega_{mn}^2 - \omega^2)X_{mn} = 0$

仅当 $\omega_{mn} = \pm\omega$ 时， X_{mn} 不为零

对于 $\omega_{mn} \neq \pm\omega$ ， $X_{mn} = 0$

$$X_{mn} = X_{m,m+1}\delta_{n,m+1} + X_{m,m-1}\delta_{n,m-1}$$



谐振子量子化：矩阵元计算

由 $\dot{x} = p/m$ 和基本对易关系,

$$\dot{X}X - X\dot{X} = -i\hbar/m$$



$$(\dot{X}X)_{mn} - (X\dot{X})_{mn} = -i(\hbar/m)\delta_{mn}$$

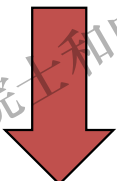
当 $m = n$ 时, 利用矩阵乘法规则和对易关系计算矩阵元

$$(AB)_{mn} = \sum_l A_{ml}B_{ln},$$

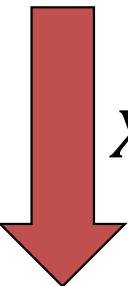
$$\text{左边} = i \sum_l (\omega_{nl} X_{nl} X_{ln} - X_{nl} \omega_{ln} X_{ln}) = 2i \sum_l \omega_{nl} X_{nl} X_{ln} = -\frac{i\hbar}{m} = \text{右边}$$

谐振子量子化：矩阵元计算

取 $l = n \pm 1$, $X_{mn} = X_{nm}$ (坐标为实数)


$$(X_{n,n+1})^2 - (X_{n,n-1})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

给出了 $X_{n+1,n}$ 的递推关系: $X_{n+1,n}^2 - X_{n,n-1}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$


$$X_{n+1,n}^2 = \frac{(n+1)\hbar}{2m\omega}$$

谐振子能量量子化

谐振子能量

$$E_n = H_{nn} = \frac{1}{2}m \left[(\dot{X}^2)_{nn} + \omega^2 (X^2)_{nn} \right] = \frac{1}{2}m \left[\sum_l \dot{X}_{nl} \dot{X}_{ln} + \omega^2 \sum_l X_{nl} X_{ln} \right]$$

$$\dot{X}_{nl}(t) = i\omega_{nl} X_{nl}(0) e^{i\omega_{nl}t} = i\omega_{nl} X_{nl}(t)$$



$$E_n = \frac{1}{2}m \sum_l [-i\omega_{nl} X_{nl} i\omega_{nl} X_{nl} + \omega^2 X_{nl} X_{nl}]$$

$$= \frac{1}{2}m \sum_l (\omega^2 + \omega_{nl}^2) X_{nl}^2 = m\omega^2 (X_{n+1,n}^2 + X_{n,n-1}^2) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

上述给出谐振子量子化。与黑体辐射经验公式比较，得到 $\hbar$ 就是普朗克常量

海森堡量子力学小结

“电子”坐标与动量：

$$X = \sum X_{mn} e^{i\omega_{mn}t} \longleftrightarrow P = \sum P_{mn} e^{i\omega_{mn}t}$$

可观测量依赖于两个指标

核心假设：

$$[X][P] \neq [P][X], ([A] = [A_{mn}])$$

“不对易”

经典运动方程

$$\frac{d}{dt}[X, P] = 0, \quad [X, P] = \text{常数 } C.$$

$$[X, P] = i\hbar$$

玻恩量子化条件

海森堡量子力学小结

由“不对易”运算规则和“玻恩量子化条件”计算

$$E = \sum \frac{1}{2} m \dot{X}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 X^2$$

$$\Rightarrow E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar;$$

对比黑体辐射的普朗克公式

$$E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{h}{2\pi}$$

得到：

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

量子耗散的唯一象描述

1. 考虑一个耗散的谐振子，满足运动方程

$$\ddot{x} = -\gamma\dot{x} - \omega^2 x \quad \gamma > 0$$

(1) $[x, \dot{x}] = ?$

(2) p 与 $\dot{x}$ 的关系是什么？

(3) 系统的（有效）哈密顿量是什么？

提示：由 $\frac{d}{dt}[x, \dot{x}] = -\gamma[x, \dot{x}]$ ，得到

$$[x, \dot{x}] = e^{-\gamma t} i\hbar$$

定义广义动量 $p = e^{\gamma t} \dot{x}$ ，则 $[x, p] = i\hbar$ 不依赖于时间



补充学习材料

我国著名理论物理学彭桓武先生研究量子开系统的故事

第 29 卷 第 8 期

1980 年 8 月

物 理 学 报

ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 29, No. 8

Aug., 1980



阻尼谐振子的量子力学处理

彭 桓 武

(中国科学院理论物理研究所)

1979 年 11 月 28 日收到

提 要

本文假设量子力学中也允许引入阻尼力的描述,给出对与速度成正比的阻尼系统用正则化变换的处理方法,以一维谐振子为例作了具体计算,结果与经典力学比较表明是合理的。

用经典力学处理多自由度系统时,常唯象地引入阻尼力以描述能量从某特定自由度向其它多个自由度的耗散,未知在量子力学中是否根本不允许这种描述。至少在用单自由度近似处理多自由度问题时,类似的描述似乎值得注意。姑且允许这种描述并设阻尼

彭桓武先生关于量子开系统的研究

布朗运动:

随机力驱动的耗散系统或量子开系统,

$$M\ddot{q}(t) = -\gamma\dot{q}(t) - \frac{\partial V(q)}{\partial q} + f(t)$$

$$[q(t), \dot{q}(t)] = \frac{i\hbar}{M} e^{-\gamma t/M} \equiv i\eta(t)$$



$$[x, p] = i\hbar$$

彭桓武先生关于量子开系统的研究

在 $[x, \dot{x}] = i\eta(t)$ 中定义正则坐标和动量的方式并不唯一。一般地, 对于

$$\begin{aligned} q(t) &= xf(t), \\ p(t) &= i\dot{x}g(t)/\hbar, \end{aligned}$$

只要 $f(t)g(t) = \eta(t)$, 就有 $[q, p] = i\hbar$.

这样的 $\{f(t), g(t)\}$ 的选取称作一个“规范”。

“彭桓武规范” :

$$\begin{cases} x(t) = q(t) e^{\gamma t/2M} \\ p(t) = \left[M\dot{q}(t) + \frac{1}{2}\gamma q(t) \right] e^{\gamma t/2M} \end{cases}$$



彭氏哈密顿量的优点与适用条件

彭桓武有效哈密顿量

$$H_e(t) = \frac{p^2}{2M} + e^{\gamma t/M} V(x e^{-\gamma t/2M}) - \frac{\gamma^2}{8M} x^2 - f(t) x \cdot e^{\gamma t/2M}$$

不考虑布朗运动，谐振子的彭氏哈密顿量是时间无关的，而Caldirora-Kani (CK)时间相关哈密顿量

适用条件：外场不能是布朗随机力

布朗随机力 $[f(t), x] \neq 0$

彭先生当时并没有意识到这个适用条件，别人指出后，他非常重视。对此，他有精辟的评价，折射出他高尚严谨的学术品格。



思考题

- 1、当 $f(t)$ 与 x 不对易时，如何量子化布朗运动方程
- 2、对布朗运动的随机性描述主要体现在耗散-涨落定理

$$\langle f(t) \rangle = 0, \quad \langle f(t)f(t') \rangle \propto \gamma \delta(t - t')$$

有耗散时 $\gamma \neq 0$ ，则随机关联 $\langle f(t)f(t') \rangle \neq 0$

如何用量子力学描述这个定理？

进一步阅读：

1. Evolution of the wave-function in a dissipative system
L.H. Yu and C. P. Sun, Phys. Rev. A 49, 592 (1994)
2. Exact dynamics of a quantum dissipative system in a constant external-field
C. P. Sun and L.H. Yu, Phys. Rev. A 51, 1845 (1995)



1.2 波动力学与玻恩几率诠释

1924年，德布罗意 (L. de Broglie) 逆向思考爱因斯坦的光量子假说：既然光可以表现出粒子的行为，粒子也可以表现出波动行为，由平面波描述。

$$\varphi_k(x) \propto e^{ikx - i\omega t}$$

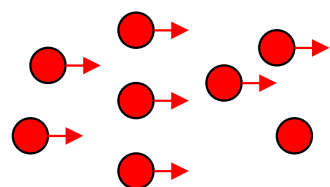
德布罗意关系

$$k = \frac{p}{\hbar} \quad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

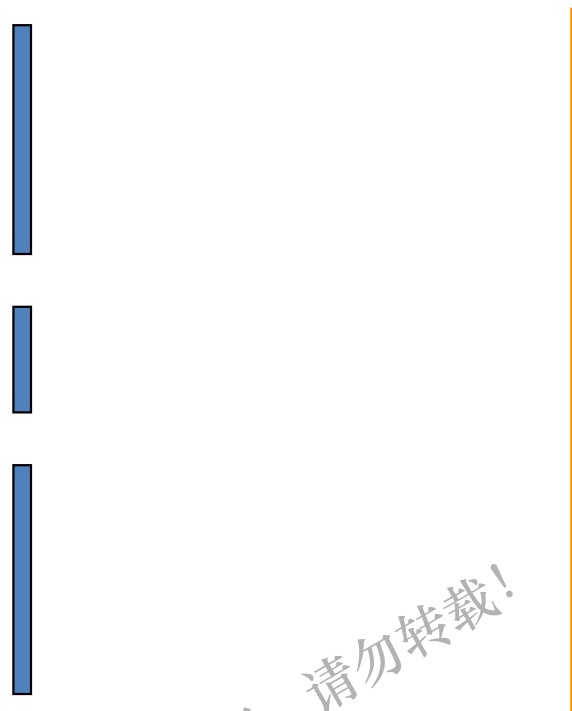
1927年，C.J.戴维森和L.H.革末以及G.P.汤姆孙分别进行了电子束在晶体上的衍射实验，证实了电子的波动性和德布罗意关系；1989年，殿村实现了电子的“双缝干涉”实验。



波粒二象性



粒子束



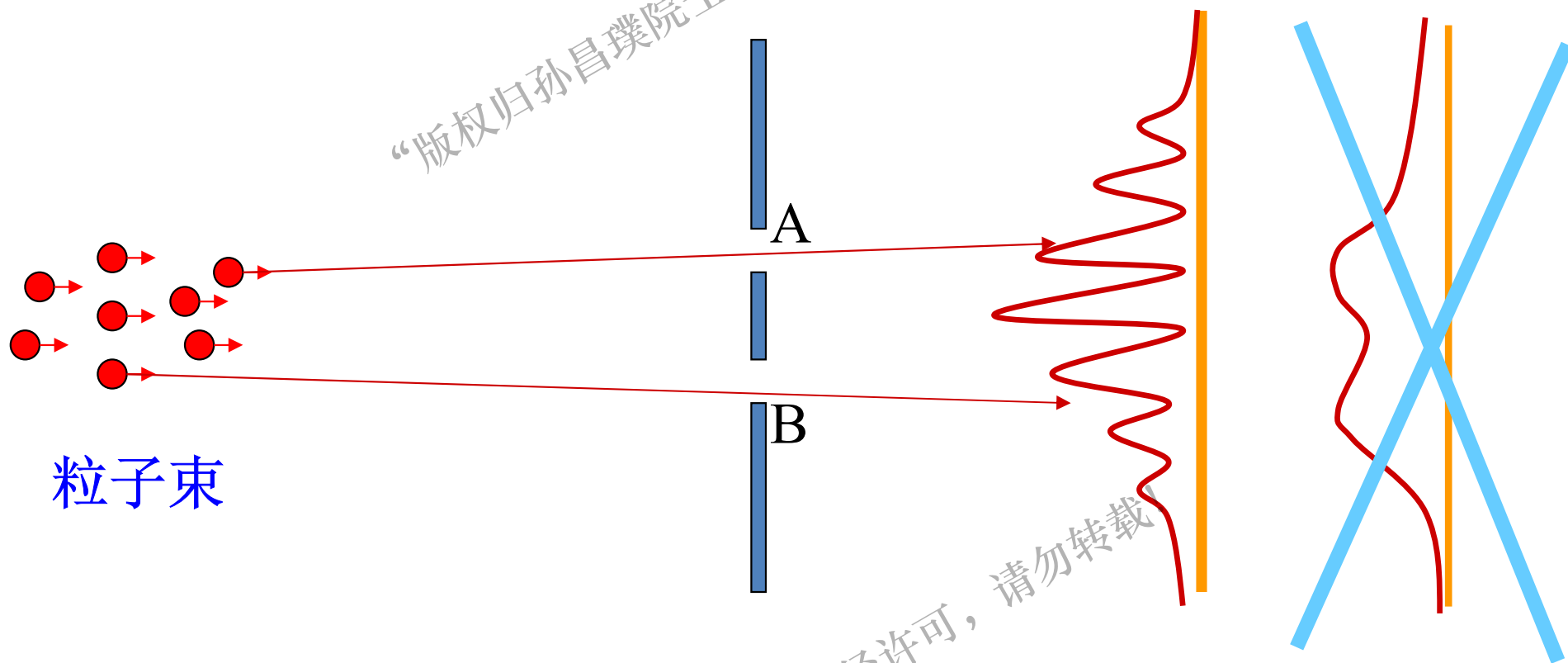
粒子探测器

粒子的双缝实验

波粒二象性

$|0\rangle$: 缝B关闭时的波函数

$|1\rangle$: 缝A关闭时的波函数

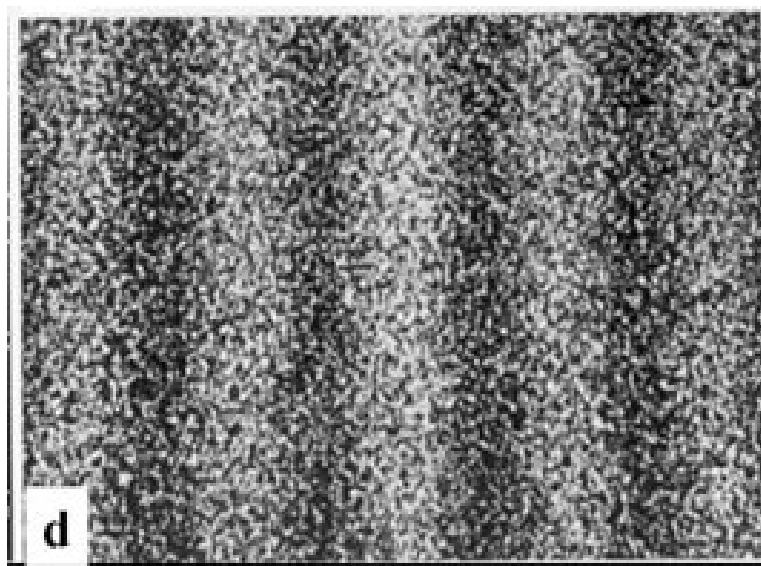


粒子束

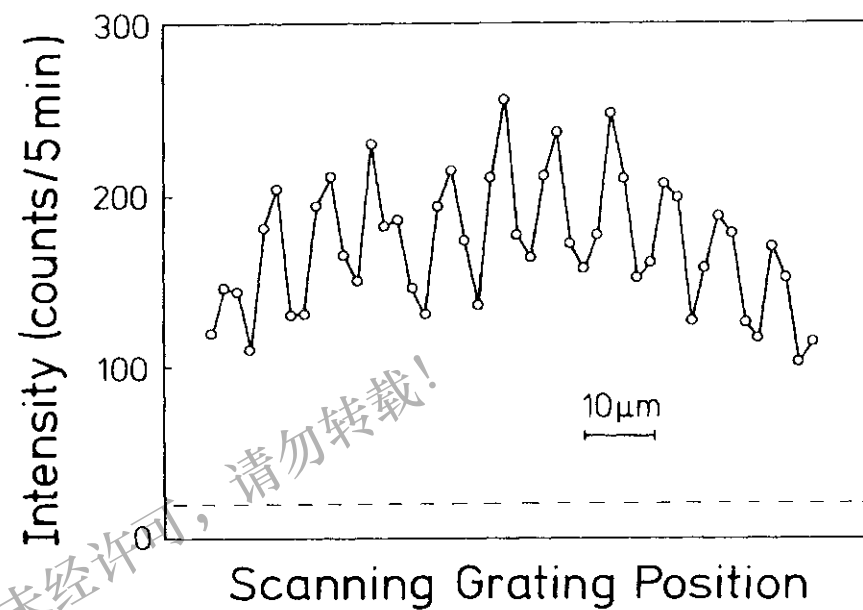
$$|\psi\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$$

实际粒子的双缝实验

电子干涉实验结果



原子干涉实验结果



薛定谔方程

薛定谔回答德拜提出的问题，对任意位势的粒子给出了一般的波动方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \psi(x, t).$$

对于给定能量 E ，定义定态波函数（分离变量）

$$\psi(x, t) = \exp(-iEt/\hbar) \psi(x)$$

$\psi(x)$ 满足定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$



量子隧道效应与“崂山道士”



因为粒子
也是波

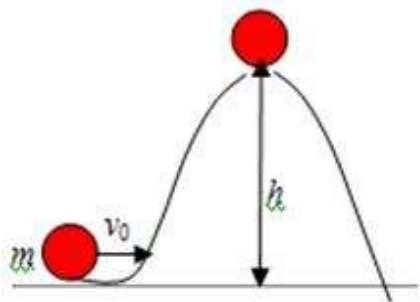
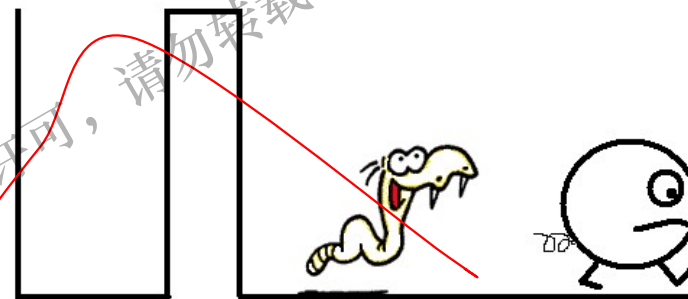
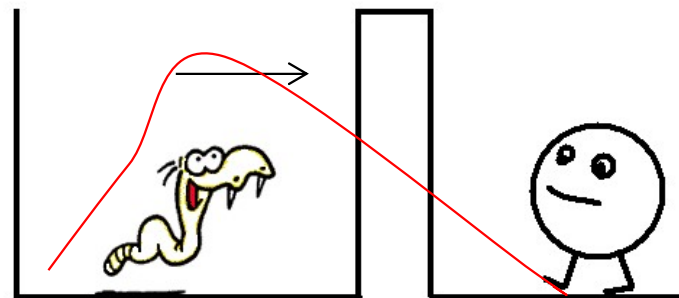


图 12-2-1 经典势垒

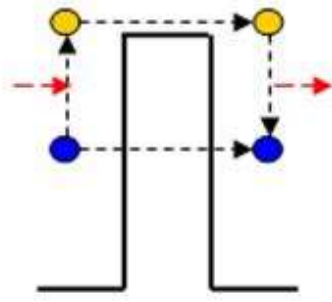
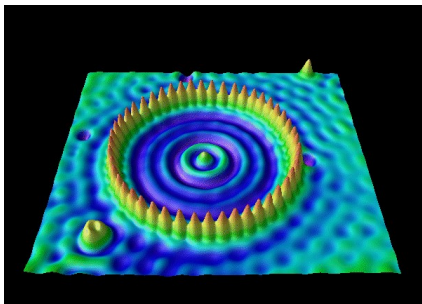
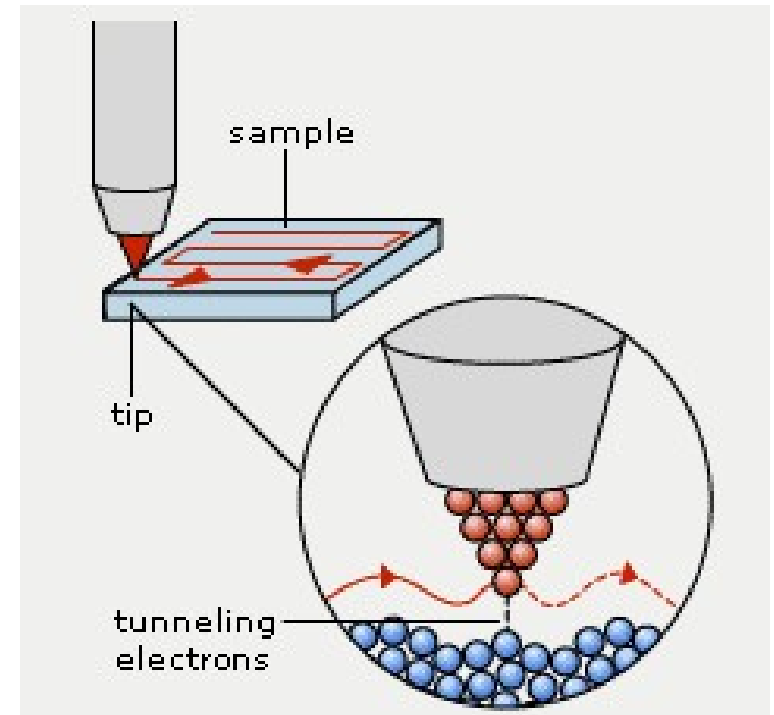
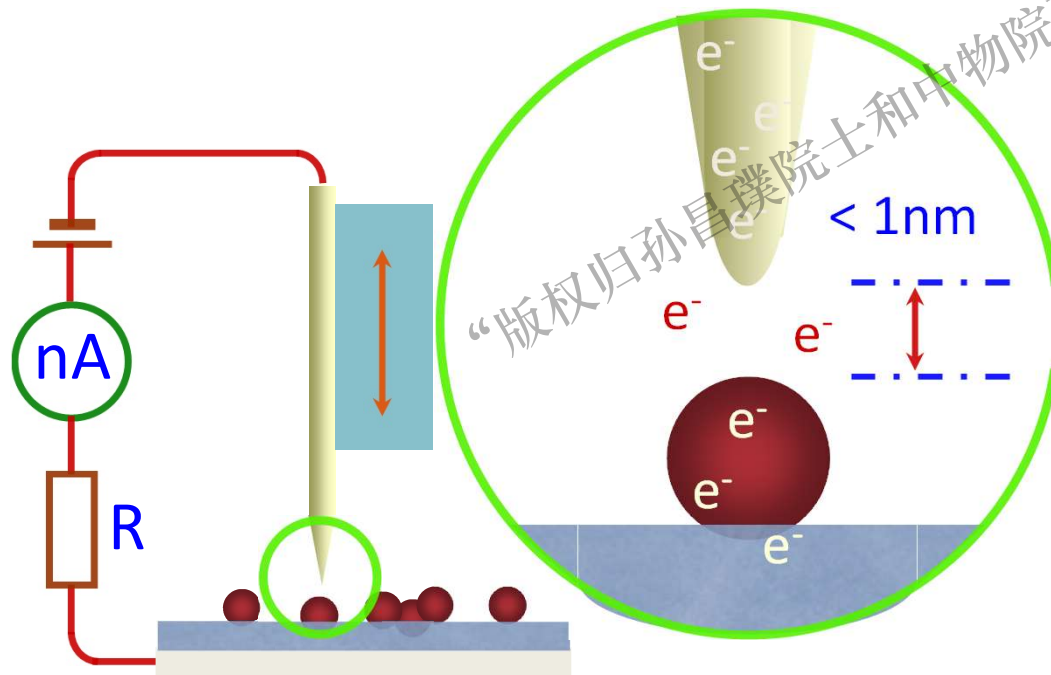


图 12-2-2 量子隧道

扫描隧道显微镜(STM)



Iron atoms on the surface of Cu(111)

波动力学与玻恩几率诠释

	能量	波长	波段
电子	100eV	0.12 nm	硬X射线
冷原子	170nK	$\sim 10^{-6}\text{m}$	
子弹	10g, 300m/s	2×10^{-34}	
崂山道士	50kg, 30m/s	4×10^{-37}	远小于其尺度

思考题：估算一下，一个半径为10 cm，质量为1 kg的球，以30 m/s速度运动，其物质波波长与半径相比如何？由此理解为什么宏观物体不表现量子相干性？

“崂山道士”太肥了，隐藏了量子相干性

波函数的几率诠释

$|\psi(x, t)|^2$ 代表 t 时刻在 x 附近发现粒子的几率密度

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1$$

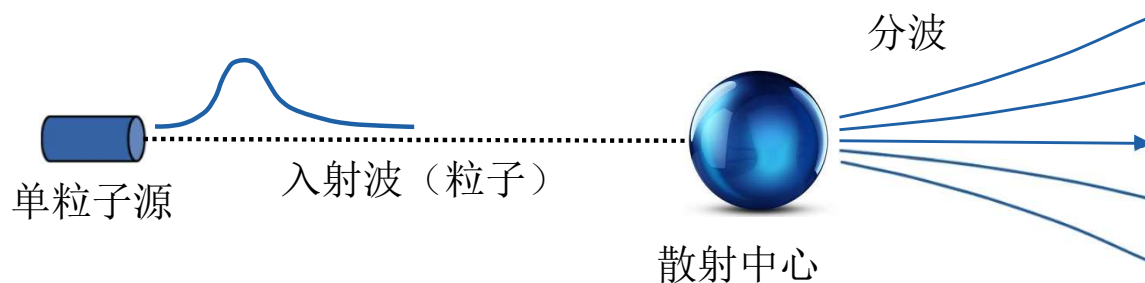
如果简单地代表粒子的空间密度分布，则与粒子散射后还是一个粒子的散射实验事实相矛盾：因为弹性散射实验不假定粒子被打碎了分布在空间

Born, M 1926. The quantum mechanics of the impact process.
Z. Physik, **37**, 863; Quantum mechanics in impact processes **38**, 803.



玻恩诠释是波粒二象性的要求

- 只有波动力学适宜描述粒子间碰撞或散射问题
- 只有几率才能把波粒二象与散射问题等价“和谐”



打散成几个粒子观点与直觉违背，量子几率
被视为波的粒子以特定几率散射到一定的立体角中

互补性原理

1928年, 玻尔把波粒二象性和不确定性关系进一步提升为**互补性原理**(又称**并协性原理**)。

对微观现象的描述不能像刻画经典世界那样进行完备的理想描述。构成完备经典描述的某些互相补充的元素, 在微观世界里通常是互相排斥的, 但这些互补元素刻画微观现象的不同侧面, 是微观描述中必不可少的。

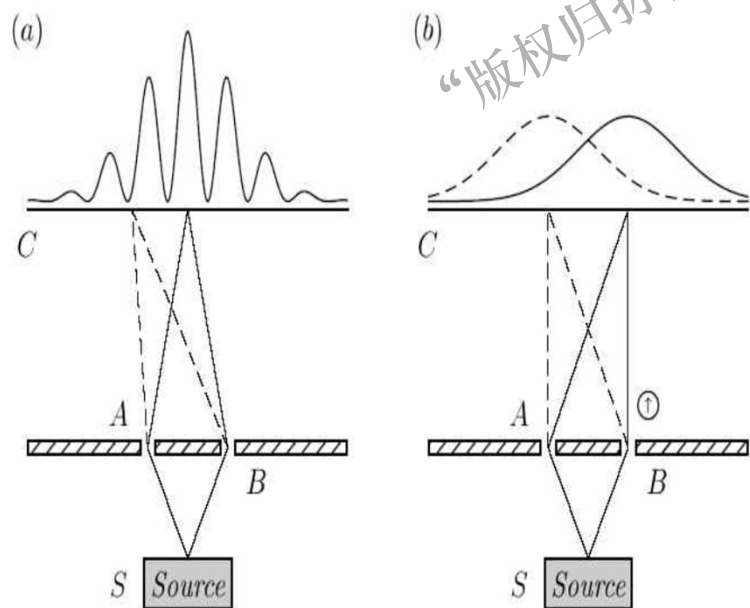
例子:

- 微观粒子在同一方向的坐标和动量都是认识微观粒子运动的两个独立的侧面, 但不能同时测量它们;
- 对微观体系的描述有粒子(以能量和动量为表征)与波动(以频率和波长为表征)互补的两个方面, 但同一个实验中它们不能同时使用。



互补性原理

1995年，美国麻省理工学院D.E.普里恰德研究组通过原子干涉实验准确“验证了”互补原理。



共振光照射原子干涉仪中的原子，保证原子在通过光束时能发生散射可能性很大。当相移的幅度增大时，干涉条纹分辨率很快下降。

在量子测量理论中，仪器能够探测粒子是否通过B缝，是因为仪器与粒子相互作用形成了量子纠缠。纠缠越理想，测量结果越准确。

1.3 量子力学基本原理的数学表述

量子力学第一公设

物理体系的状态可以由其在位形上的Hilbert空间上的一个非零向量——态矢量描述，它的每一个力学量可以用一个厄米算子来表示。

坐标和动量算符满足

$$[x, p] = i\hbar$$

复合力学量要注意 x 和 p 的次序 (Weyl序)

$$F(p, x) = \sum_{nm} C_{nm} p^n x^m$$



第一公设的数学：狄拉克(Dirac)符号

定义

V 上的内积： $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in V$,

$$(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) \equiv \langle\varphi|\psi\rangle.$$

V 变成一个内积空间。内积定义是不唯一的。

数学上要从对偶空间的角度理解内积！

厄米算子 A 的本征函数张成了系统的Hilbert空间 V

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$



狄拉克符号：刀矢，刃矢与对偶空间

定义

V 上有线性函数 $F: V \rightarrow \mathbb{C}$, F 张成 V 的对偶空间

$$F(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = aF(|\alpha\rangle) + bF(|\beta\rangle);$$

$$\forall F \in V^*, \text{ 记 } F = \langle F|.$$

V 的基矢: $\{ |v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_N\rangle \} \longrightarrow \text{刀矢}$

V^* 的基矢: $\{ f_1 = \langle f_1|, f_2 = \langle f_2|, \dots, f_N = \langle f_N| \} \longrightarrow \text{刃矢}$

$$f_j(|v_i\rangle) \equiv \langle f_j|v_i\rangle = \delta_{ij};$$

$$\text{则对于 } \langle F| = \sum_j b_j^* \langle f_j|, |V\rangle = \sum_{j'} a_{j'} |v_{j'}\rangle,$$

$$\text{有 } \langle F|V\rangle = \sum_j b_j^* a_j$$

A 的厄米性定义:

若 $A^\dagger = A$ 或 $\langle A\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle$, 则称 A 是厄米算子



正交性

$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$ 厄米算子的本征函数是正交的

证明

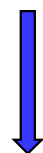
先证明：厄米算子的本征值是实的

厄米性

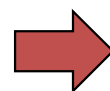
$$a_n \langle n|n\rangle = \langle n|A|n\rangle = \langle An|n\rangle = a_n^* \langle n|n\rangle \quad \Rightarrow \quad a_n = a_n^*$$

$$\langle m|A|n\rangle = a_n \langle m|n\rangle$$

$m \neq n$ 时,



厄米性



$$(a_n - a_m) \langle m|n\rangle = 0$$

$$\langle A^\dagger m|n\rangle = a_m^* \langle m|n\rangle = a_m \langle m|n\rangle$$

假设 a_n 是非简并的,

$$a_n \neq a_m \quad (n \neq m)$$



$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$



完备性

$$|\psi\rangle = \sum_m C_m |m\rangle, \quad \langle n|\psi\rangle = \sum_m C_m \langle n|m\rangle = \sum_m \delta_{nm} C_m,$$

$$C_n = \langle n|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_m |m\rangle \langle m|\psi\rangle = \left(\sum_m |m\rangle \langle m| \right) |\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad \sum_m |m\rangle \langle m| = 1$$

完备性的严格表达：

有上确界或下确界的厄米算子本征态是完备的。

证明可见泛函分析或希尔伯特空间理论，物理学家易理解的证明见李政道先生的《粒子与场》第一卷或《物理学中的数学方法》。



量子力学坐标表象

由基本对易关系证明，动量的算符表示为

$$[x, p] = i\hbar \quad \longrightarrow \quad p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

我们假设大部分情况下，以上分立态的讨论对连续态也成立。

如对于坐标本征函数 $|x\rangle$ ，将 δ 符号变成 δ 函数：

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \quad \int |x\rangle\langle x|dx = 1$$

在坐标表象下

$$|\psi\rangle = \int \varphi(x)|x\rangle dx,$$

坐标表象

对基本对易关系取 x 表象下的矩阵元

$$\langle x' | [x, p] | x \rangle = i\hbar \delta(x' - x)$$

$$(x' - x) \langle x' | p | x \rangle = i\hbar \delta(x' - x)$$

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

$$x \frac{d}{dx} \delta(x) = -\delta(x)$$

$$\frac{d}{dx} \delta(x) = -\frac{\delta(x)}{x}$$

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

坐标表象

因为

$$\int x \frac{d}{dx} \delta(x) \psi(x) dx = \delta(x) \psi(x) x \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \psi(x) dx = -\psi(0)$$

$$\begin{aligned} \langle x | p | \psi \rangle &\equiv \hat{p} \langle x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x | p | x' \rangle \langle x' | \psi \rangle dx' \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\delta(x - x')}{x - x'} \psi(x') dx' = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \psi(x') dx' \end{aligned}$$

注：由于 δ 函数是广义函数，相当于某种分布，所以对其性质的证明要将它作用在函数上



习题

1. 在动量表象下，坐标表示为

$$X = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$$

并证明

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

2. 在坐标表象下，计算

$$\int |x\rangle\langle\mu x|dx = ?$$

提示

考虑 $\hat{A} = \int |x\rangle\langle\mu x|dx$ 为一个算符，将其作用在 $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ 上，考察 $\hat{A}|\psi\rangle = ?$

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{A}|\psi\rangle &= \psi(\mu x) \\ &= \psi(x + (\mu - 1)x) \\ &= ? \quad (\end{aligned}$$

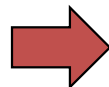
泰勒展开)

变换理论：态的变换

用力学量 A 和 B 的本征态 $\{|n\rangle\}$ 和 $\{|\bar{n}\rangle\}$ 表达同一量子态 $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_n A_n |n\rangle = \sum_n B_n |\bar{n}\rangle \quad (\text{称作} A \text{表象和} B \text{表象})$$

$$A_n = \langle n|\psi\rangle = \sum_m \langle n|\bar{m}\rangle \langle \bar{m}|\psi\rangle$$
$$B_m = \langle \bar{m}|\psi\rangle$$



$$A_n = \sum_m \langle n|\bar{m}\rangle B_m$$
$$A = SB$$

或

$$A = \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_N \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \vdots \\ B_N \end{pmatrix} \quad S = \begin{bmatrix} \langle 1|\bar{1}\rangle, & \langle 1|\bar{2}\rangle, & \cdots & \langle 1|\bar{N}\rangle \\ \langle 2|\bar{1}\rangle, & \langle 2|\bar{2}\rangle, & \cdots & \langle 2|\bar{N}\rangle \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \langle N|\bar{1}\rangle, & \langle N|\bar{2}\rangle, & \cdots & \langle N|\bar{N}\rangle \end{bmatrix}$$

变换理论：算符的变换

在A表象下

$$W = \sum_{m,n} \langle m|W|n\rangle |m\rangle\langle n| \equiv \sum_{m,n} W_{mn} |m\rangle\langle n|$$

在B表象下

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

$$W'_{m'n'} = \langle \bar{m}'|W|\bar{n}'\rangle = \sum_{mn} \langle \bar{m}'|m\rangle \langle m|W|n\rangle \langle n|\bar{n}'\rangle \equiv (S^\dagger W S)_{m'n'}$$

$$W' = S^\dagger W S$$

计算物理可观测量时，算符和态的表象一定要统一！



玻恩几率诠释与坐标平均值

在坐标表象中 $|\psi\rangle = \int \psi(x)|x\rangle dx$

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle = x \text{ 点附近发现粒子的几率幅}$$

$$P(x) = |\psi(x)|^2 = x \text{ 点附近发现粒子的几率密度}$$

$$\int P(x)dx = \int \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \text{ 或 } \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

$$\bar{x} = \int xP(x)dx = \int \psi^*(x)x\psi(x)dx$$

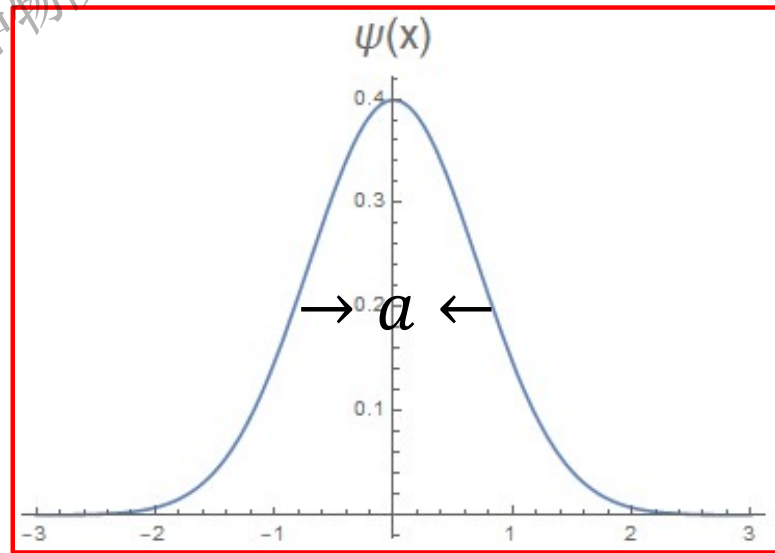
$$\overline{x^2} = \int x^2P(x)dx = \int \psi^*(x)x^2\psi(x)dx$$



玻恩几率诠释与坐标平均值

取高斯波包 $\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{1/4}} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4a^2}}$$



Δx 均方根涨落就是波包宽度

$$\bar{x} = x_0, \quad \Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \bar{x}^2} = a$$

$a \rightarrow 0, \quad \psi(x) \rightarrow \delta(x - x_0)$ 坐标本征函数

测量与玻恩几率诠释

模仿位置平均值定义期望值

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

任意表象中 $|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle$

$$\begin{aligned}\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle &= \langle \psi | A \sum_n |n\rangle \langle n| | \psi \rangle = \sum_n \langle \psi | A | n \rangle \langle n | \psi \rangle \\ &= \sum_n |\langle n | \psi \rangle|^2 a_n = \sum_n P_n a_n \quad \sum_n P_n = 1\end{aligned}$$

一般玻恩诠释: P_n = 力学量本征值 a_n 在 $|\psi\rangle$ 上的分布几率



不确定性关系是玻恩诠释的一个推论

定义

$$\overline{(\Delta A)^2} = \overline{A^2} - \bar{A}^2 \quad \bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

$$\overline{(\Delta A)^2} \overline{(\Delta B)^2} \geq \frac{1}{2} [A, B]^2$$

$$\Delta x \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}$$

证明

见曾谨言《量子力学 卷 I》（第五版）P140-141.

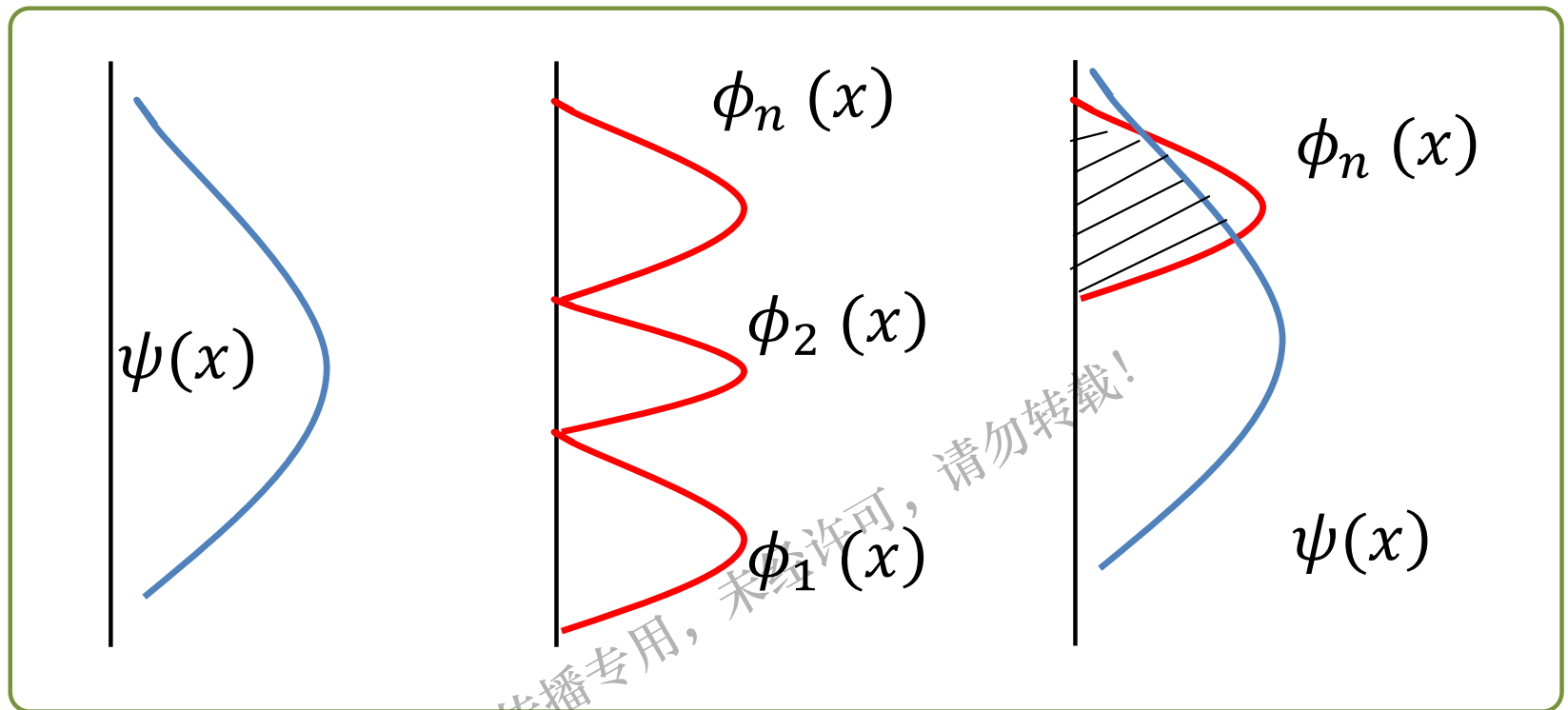


坐标表象的一般玻恩几率诠释

$$C_n = \langle n | \psi \rangle = \int \langle n | x \rangle \langle x | \psi \rangle dx = \int \phi_n^*(x) \psi(x) dx$$

$\phi_n(x) = \langle x | n \rangle$, 是A的本征函数 $|n\rangle$ 的坐标表示

$$P_n = |C_n|^2 = |\langle n | \psi \rangle|^2 = \left| \int \phi_n^*(x) \psi(x) dx \right|^2$$



C_n 是 $\phi_n(x) = \langle x | n \rangle$ 和 $\psi(x)$ 波包重叠积分

量子力学基本原理II

力学量期望值公设 = 玻恩几率诠释：测量公设

$$\bar{A} \equiv \langle A \rangle = \frac{\langle \psi | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \xrightarrow[\sum P_n = 1]{\langle \psi | \psi \rangle = 1} \bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

$$A|n\rangle = a_n|n\rangle$$

力学量的平均值

$$\langle A \rangle = \sum_n a_n |\langle n | \psi \rangle|^2 \equiv \sum_n a_n p_n$$

$$p_n = |\langle n | \psi \rangle|^2 \geq 0$$
$$\sum_n p_n = 1$$

$p_n = a_n$ 的分布几率



玻恩几率诠释：量子测量定理

由力学量期望值公设可证明

在 $|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle$ 上测得的结果是A的本征

值之一 a_n 相应的几率为 $P_n = |C_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2$

当且仅当在本征态 $|n\rangle$ 上，测量的结果是确定的 a_n

$C_n = \langle n|\psi\rangle$ = 在特定 $|n\rangle$ 发现粒子的几率幅

“结果是确定的” = 涨落为零



玻恩量子测量定理证明

逆命题: 如果在 $|\psi\rangle$ 上测量 A 得到的结果是确定的, 那么 $|\psi\rangle$ 一定是 A 的本征态

证明

在 $|\psi\rangle$ 上测 A 得到平均值 $\bar{A}$ 的均方差涨落

$$\begin{aligned}\overline{(\Delta A)^2} &= \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - \langle A \rangle^2 \\ &= \langle (A - \langle A \rangle) \psi | (A - \langle A \rangle) \psi \rangle \equiv \langle \Phi | \Phi \rangle,\end{aligned}$$

其中 $|\Phi\rangle = |(A - \langle A \rangle)\psi\rangle$

当且仅当

$$\begin{aligned}(A - \langle A \rangle)|\psi\rangle &= 0 \\ A|\psi\rangle &= \langle A \rangle|\psi\rangle\end{aligned}$$

$$\overline{(\Delta A)^2} = 0$$

$$\langle A \rangle = a_n, \quad n = 1, 2, \dots$$



量子测量假设-量子力学哥本哈根诠释

被测量系统处于量子态

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad (A|n\rangle = a_n|n\rangle)$$

测量力学量 A 一次, 得到结果 a_n

一次测量确切得到 a_n 后态变为:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \rightarrow |n\rangle$$

量子力学中的演化: 么正 (U过程)
投影测量 $|\psi\rangle \rightarrow |n\rangle$: 非么正 (R过程)



冯·诺依曼, 1929

波包塌缩

wave packet collapse ,
measurement projection

波包塌缩的单粒子图象

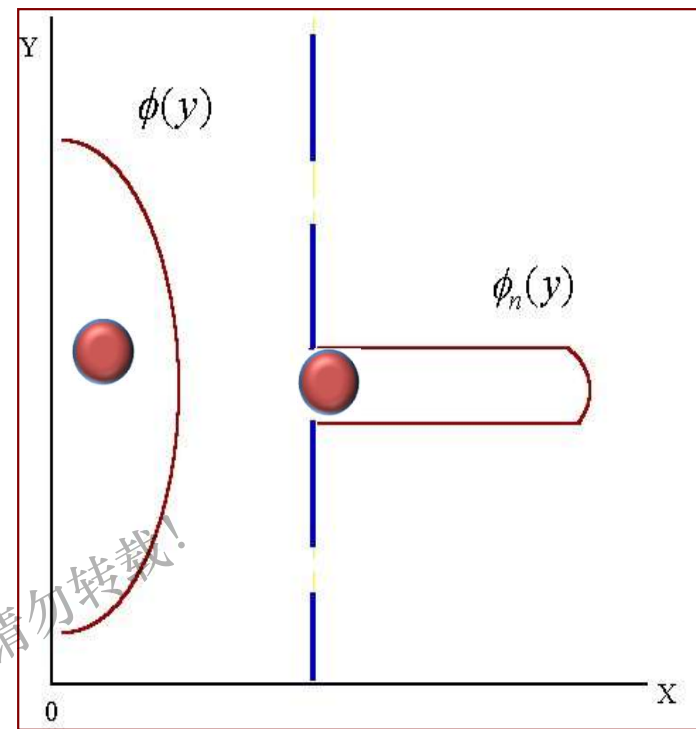
例子：测量位置

$$\phi(y) = \langle y | \psi \rangle$$

测量后波包变窄为

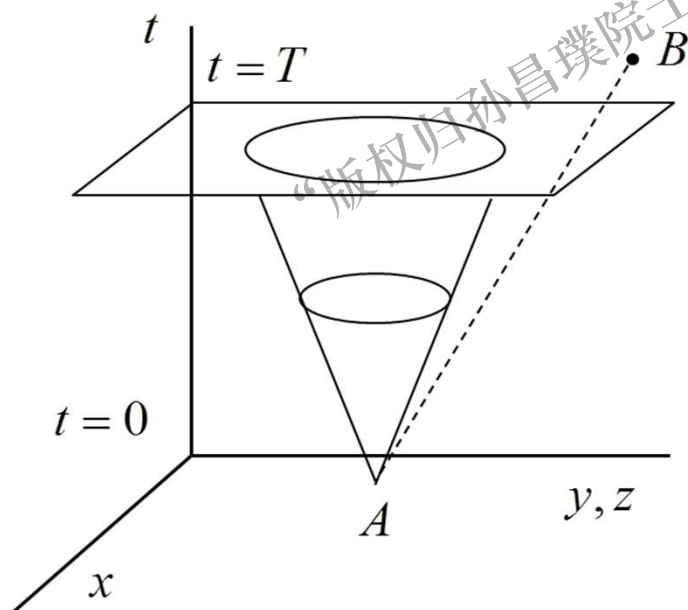
$$\phi_n(y) = \begin{cases} N_n \phi(y), & na \leq y < (n+1)a \\ 0, & na \geq y \text{ or } y \geq (n+1)a \end{cases}$$

$$N_n^{-1} = \sqrt{\int_{na}^{(n+1)a} |\psi(y)|^2 dy}$$



波包塌缩与狭义相对论有表观矛盾

“非定域性违背狭义相对论”暗含了投影假设



$$\phi(0) = \delta(x) \approx \sum_p \exp(ipx)$$

上测量动量，“塌缩”到

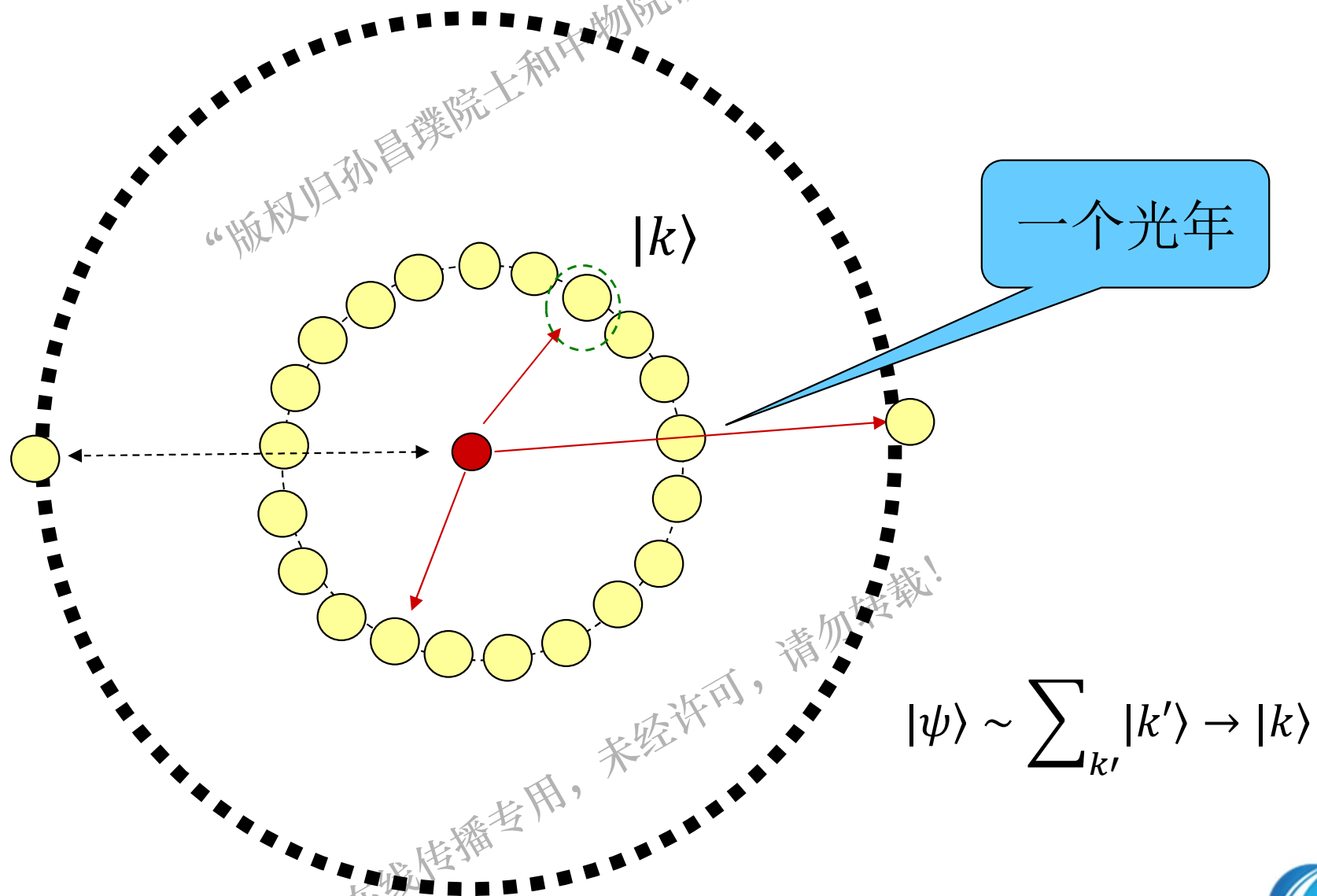
$$\phi(t) = \exp(ipx)$$

上使得类空关联出现

$$G^{(1)}(A, B) = \rho(A, B) = \langle \psi^+(A) \psi(B) \rangle \neq 0, \quad |A - B| > ct$$

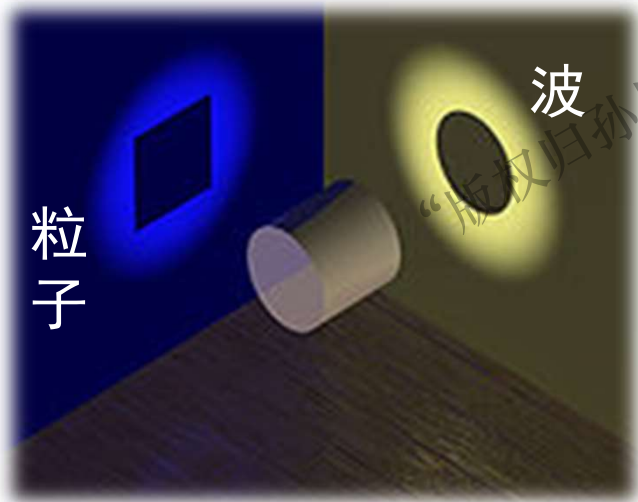
事实上，“Bell不等式违背”意味着非定域性存在，但没有超光速！

波包塌缩：爱因斯坦“光子球”

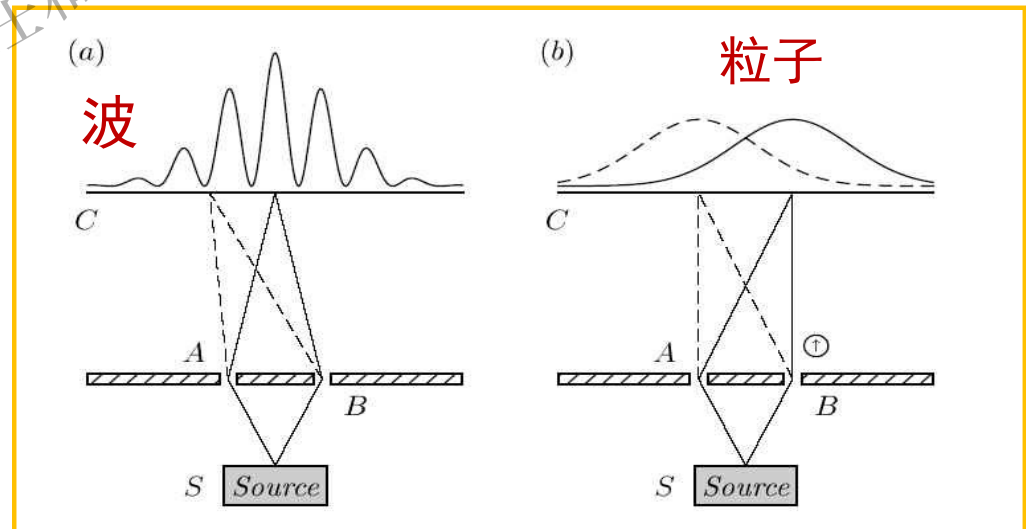


量子力学重启老生常谈的哲学问题讨论

波粒二象性



Wave-Particle Duality



有人认为，量子力学的基础是“物质世界和意识不可分开” “客观世界很有可能并不存在！”

<https://www.23yy.com/4830000/4829790.shtml>

基于哥本哈根诠释—波包塌缩假设的误解

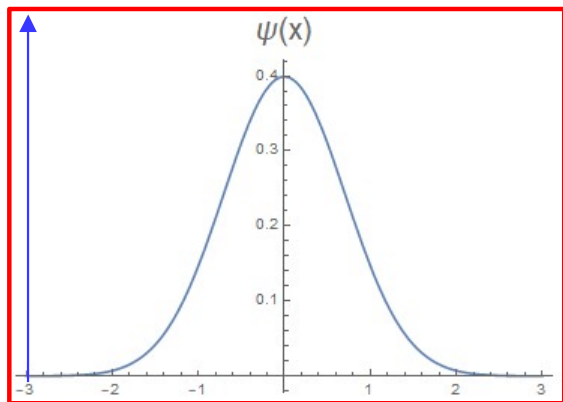
有人说：“在量子物理中，这种没有确定的状态，一被观测，也就是人的意识一参与，基本粒子的波函数就开始坍缩了，电子就会出现在个确定的位置，就出现某种客观实在，所以客观实在产生于意识参与的测量”。

$$x|x\rangle = x|x\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum \psi(x)|x\rangle \rightarrow |x = b\rangle$$

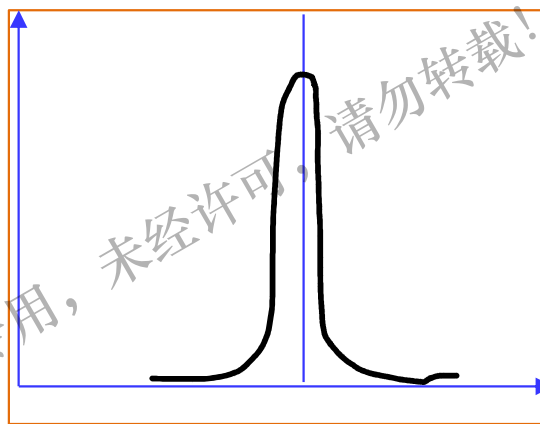
测量坐标“塌缩”到

$$\varphi(x) = \delta(x - b)$$



$x = 0$

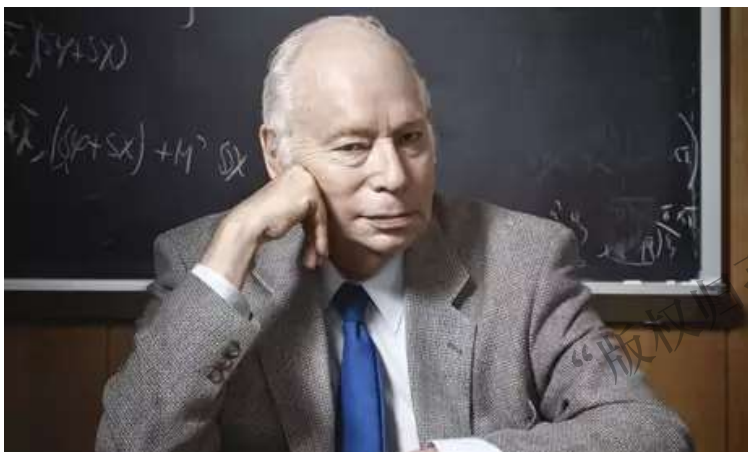
$x = b$



客观实在
Objective Reality

粒子性：确定
的位置和动量

薛定谔、温伯格、盖尔曼对哥本哈根诠释的批评



Steven Weinberg, *Physics Today*, Nov. 2005, p. 31

“量子经典诠释的玻尔版本有很大的瑕疵。…哥本哈根诠释经典地处理观察者与测量这些操作。这种处理方法肯定的不对：观察者与他们的仪器也得遵守同样的量子力学规则…”

温伯格：我为什么对量子力学不满意 2016年11月23日：《科学美国人》



我确实需要给你彻底洗脑……你轻率地常常宣称哥本哈根解释实际上已经被普遍接受,毫无保留地这样宣称,甚至是在一群外行人面前——他们完全在你的掌握之中。这已经触及道德底线了……你真的如此确信人类很快就会屈从于你的愚蠢吗?

作为一位在仅仅几年后就接受了哥本哈根解释的教导,并且直到很久之后才意识到这种愚蠢的人,我发现薛定谔在1960年的这些话直击我心。

M. Gell-Mann有完全类似的批评：见第11章和他的传记

我的观点：量子力学诠释问题



孙昌璞：“对待量子力学诠释严肃的科学态度应该是首先厘清量子力学诠释中哪一部分观念导致了基本应用方面的“高歌猛进”，哪一部分观念导致了理解诠释方面的“莫衷一是”。对量子力学诠释不弄清楚彼此、逻辑上倒因为果的情绪化评价，会在概念上混淆是非，误导量子理论与技术的真正创新。无怪乎，有人以“量子”的名义为认识论中“意识可以脱离物质”的明显错误而张目，其根源就是每个人心目中有不同的量子力学诠释”。

小结：波动力学与玻恩诠释

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) = H\psi(x, t)$$

薛定谔方程

波函数

玻恩诠释（规则）

$|\psi(x, t)|^2 = \text{发现粒子的几率密度}$

矩阵力学

不确定性关系

$$\Delta Q \Delta P \geq \hbar/2$$

奇妙的量子效应

哥本哈根诠释前后的量子力学

- 1、系统的量子态用满足薛定谔方程的波函数来表述（薛定谔）。
可观察量用服从对易关系的厄米算符表示
（海森堡、玻恩、约当、狄拉克）
- 2、量子系统的描述是概率性的。一个事件的发生概率是波函数的绝对值平方（玻恩），由此推导出不确定性原理（海森堡）
- ~~3、物质具有波粒二象性：根据互补原理（Complementarity principle），
同一个实验可以展示出物质的粒子行为或波动行为，但不能同时展示
（玻尔，海森堡）~~
- ~~4、测量仪器必须是经典的，它的数学描述是波包塌缩（玻尔\冯·诺依曼）~~



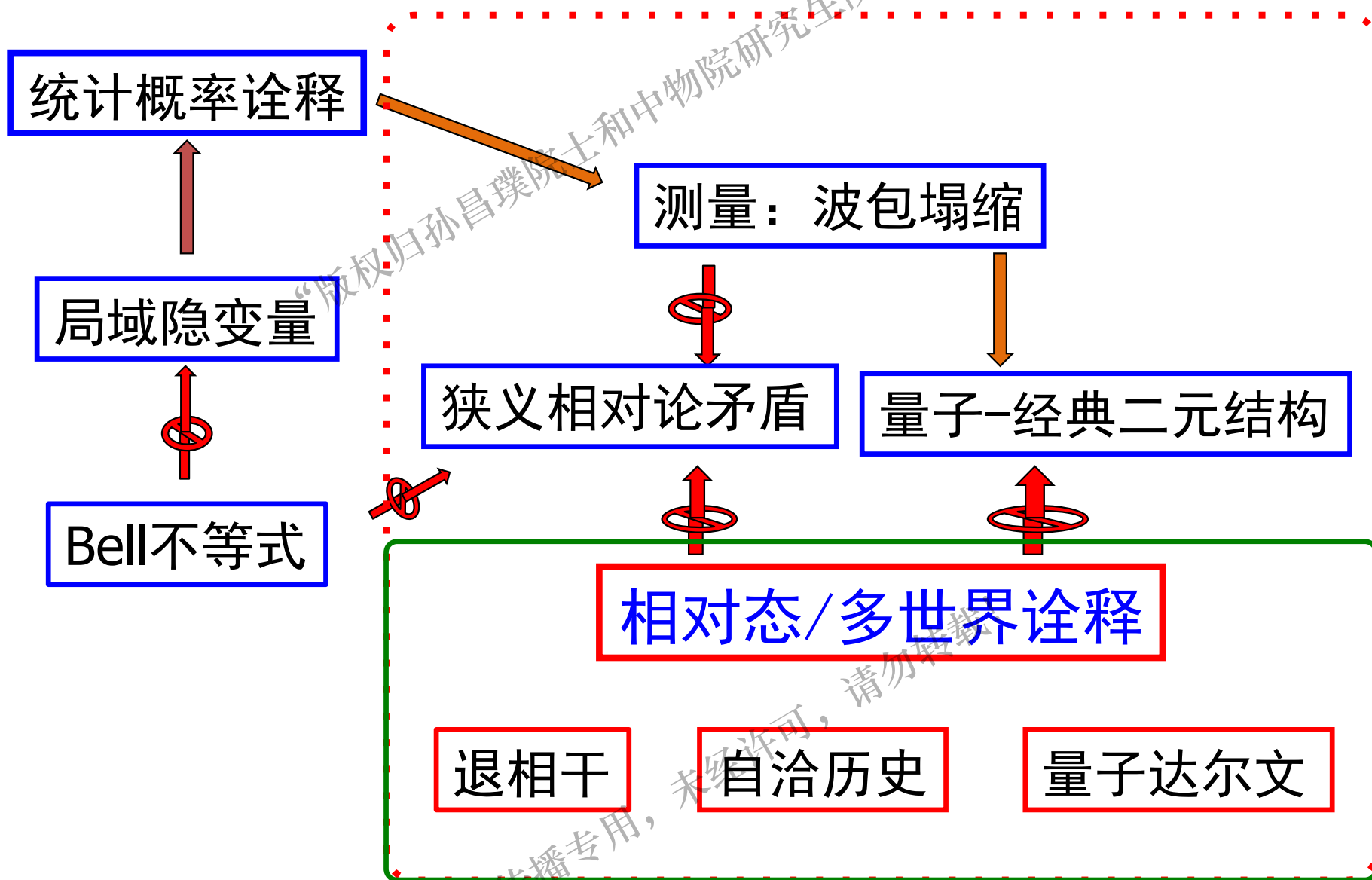
哥本哈根诠释前后的量子力学

- 1、系统的量子态用满足薛定谔方程的波函数来表述（薛定谔）。
可观察量用服从对易关系的厄米算符表示
（海森堡、玻恩、约当，狄拉克）
- 2、量子系统的描述是概率性的。一个事件的发生概率是波函数的绝对值平方（玻恩），由此推导出不确定性原理（海森堡）

无需“投影测量”或哥本哈根诠释的量子力学
量子力学的最小概念框架
预言BELL不等式描述的非定域现实



哥本哈根诠释引发了所谓的“量子测量问题”



1.4 量子态的密度矩阵

纯态密度矩阵

$|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle$ 上 A 的期望可以写为

$$\begin{aligned}\bar{A} &= \sum |C_n|^2 a_n = \sum_n \langle n|\psi\rangle \langle \psi|n\rangle a_n \\ &= \sum_n \langle n|\psi\rangle \langle \psi|A|n\rangle = \text{tr}(A\rho_\psi)\end{aligned}$$

定义纯态密度矩阵为

$$\rho_\psi = |\psi\rangle \langle \psi|,$$

对矩阵的求迹

$$\text{tr}(W) = \sum_n \langle n|W|n\rangle.$$



量子态的密度矩阵：量子比特

考虑一个简单的叠加态

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle)$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \langle\psi| = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \quad 1);$$

纯态 $|\psi\rangle$ 对应的密度矩阵为

$$\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$



纯态密度矩阵描述量子干涉

两个缝同时打开时的波函数

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$$

纯态密度矩阵

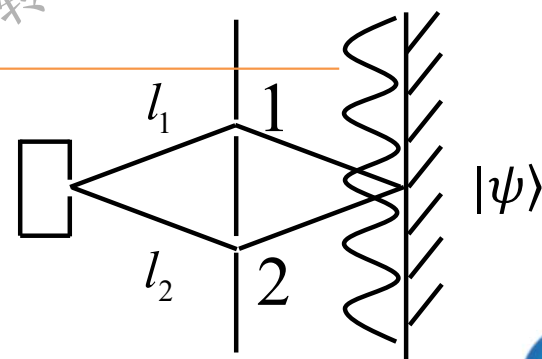
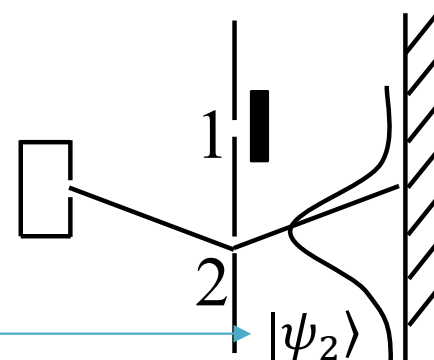
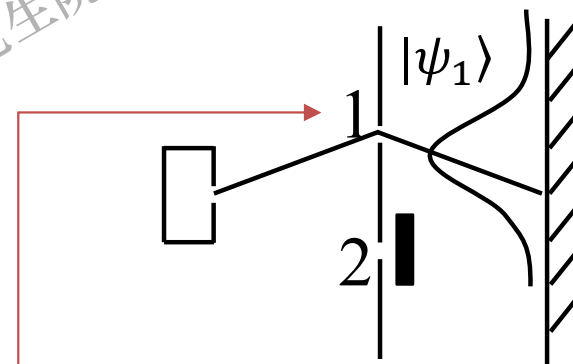
$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + |\psi_1\rangle\langle\psi_2| + \text{h.c.}$$

密度矩阵的对角元 $\rho(x) = \langle x|\rho|x\rangle$

$$\rho(x) = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \psi_1^*(x)\psi_2(x) + \psi_2^*(x)\psi_1(x)$$

$\psi(x) = \langle x|\psi_\alpha\rangle$ = 仅单缝开放时的几率幅

$(\alpha = 1, 2)$



纯态密度矩阵

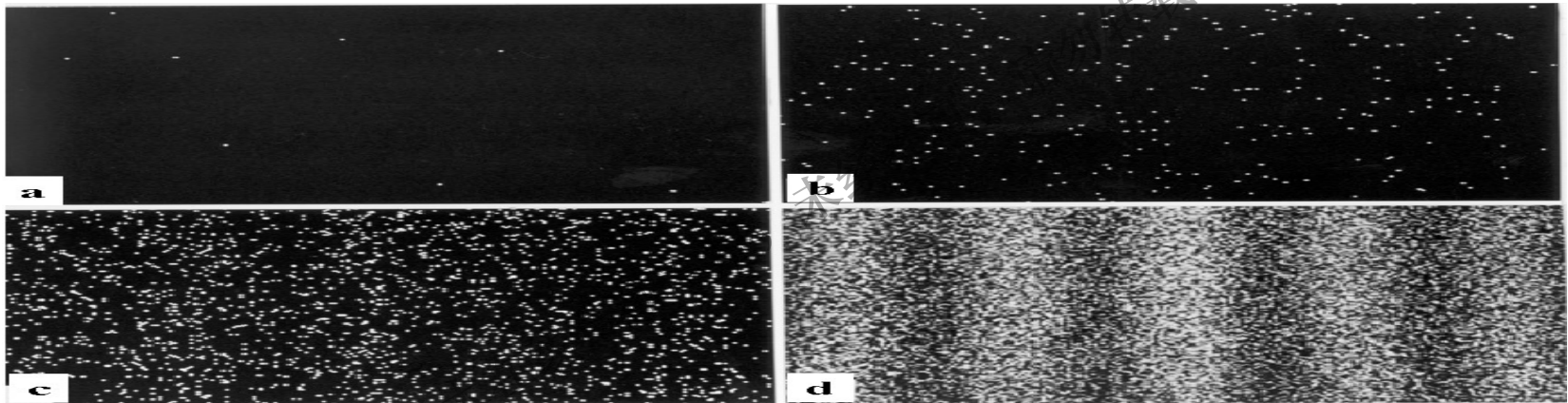
假设源远离双缝, $|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 近似为平面波

$$\psi_1(x) \sim e^{ikx}, \psi_2(x) \sim e^{ik(x+d)}$$

d 代表在屏上物质波的“光程”差

$$\rho(d) = 2 + e^{ikd} + e^{-ikd} = 2(1 + \cos kd)$$

描述了出现在屏上的干涉条纹, d 与屏上位置有关



纯态密度矩阵

纯态密度矩阵性质：

$$\text{tr}(\rho) = 1, \quad \rho^2 = \rho$$

坐标空间的对角元

$$\rho(x) \equiv \langle x | \rho | x \rangle = \langle x | \psi \rangle \langle \psi | x \rangle = |\psi(x)|^2 \equiv |\langle x | \psi \rangle|^2$$

代表空间上的几率密度分布，非对角项

$$\langle x | \rho | x' \rangle = \psi^*(x) \psi(x') \text{代表相干项}$$



纯态密度矩阵性质

$\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$ 满足

1. 归一性 $\text{tr}(\rho) = 1$
2. 投影性 $\rho^2 = \rho$
3. 厄米性 $\rho^\dagger = \rho$
4. 正定性 $\rho > 0$

仅证明(4)： ρ 正定，当且仅当 $\forall |\psi\rangle, \langle\psi|\rho|\psi\rangle > 0$;
而对于 $\rho = |\phi\rangle\langle\phi|$,

$$\langle\psi|\rho|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle\langle\phi|\psi\rangle = |\langle\psi|\phi\rangle|^2 > 0$$



混合态密度矩阵

由 N 个体系所组成的系统，处在 A 的本征态 $|n\rangle$ 上的经典几率为 P_n ，即系统中有 $n' = P_n N$ 个系统处于 $|n\rangle$ 态上。相对于系统而言，测量 A 得到平均值是

$$\langle A \rangle = \sum_n P_n a_n = \sum_n P_n \langle n | A | n \rangle = \text{tr}(\rho A)$$

“经典”平均

“量子”平均

混合平均

定义混态的密度矩阵

$$\rho = \sum_n P_n |n\rangle \langle n|$$

混态密度矩阵是否为非对角依赖于基矢的选择



混合态密度矩阵的性质

与 A 不对易的算子 B , $[A, B] \neq 0$

测 B 的平均值为 $\langle B \rangle = \sum_n P_n \bar{B}_n = \sum_n P_n \langle n|B|n \rangle = \text{tr}(\rho B)$

混态上平均包含两次平均:

(1) 先在 $|n\rangle$ 上做量子力学平均:

$$\bar{B}_n = \langle n|B|n \rangle$$

(2) 再做经典统计平均。

对于混合态而言, 任何力学量期望值与其非对角元无关。
对纯态或混合系统, 以上求平均值公式是普适的。



混态密度矩阵性质

1. 归一性 $\text{tr}(\rho) = 1$
2. $\rho^2 \neq \rho$
3. 厄米性 $\rho^\dagger = \rho$
4. $\text{tr}(\rho^2) < 1$

仅证明(4)

$$\text{tr}(\rho^2) = \text{tr} \sum_n p_n^2 |n\rangle\langle n| = \sum_n p_n^2 < \sum_n p_n = 1$$



密度矩阵的一般表示

作为一个 N 维 ($\dim(V) = N$) 态矢量, 态矢量 $|\psi\rangle \in V$ 可以表示成列矢量

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_N \end{pmatrix},$$

刃矢 $\langle\psi|$ 就表示成行矢量

$$\langle\psi| = (\phi_1^* \quad \phi_2^* \quad \cdots \quad \phi_N^*)$$

纯态对密度矩阵可表示为

$$\rho = \begin{bmatrix} |\phi_1|^2 & \phi_1\phi_2^* & \cdots & \phi_1\phi_N^* \\ \phi_2\phi_1^* & |\phi_2|^2 & \cdots & \phi_2\phi_N^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N\phi_1^* & \phi_N\phi_2^* & \cdots & |\phi_N|^2 \end{bmatrix}$$

密度矩阵的一般表示

对于一个由 N 个系统组成的系统，事先知道系统状态：

$$\begin{array}{ccccccc} |\psi_1\rangle & |\psi_2\rangle & \cdots & |\psi_\alpha\rangle & \cdots & |\psi_M\rangle \\ N_1 \text{ 个} & N_2 \text{ 个} & \cdots & N_\alpha \text{ 个} & \cdots & N_M \text{ 个} \end{array}$$

则这个系统对应的混态密度矩阵可表示为

$$\begin{aligned} \rho &= \sum_{\alpha} \frac{N_{\alpha}}{N} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}| \\ &\stackrel{N \rightarrow \infty}{=} \sum_{\alpha} P_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle \langle \psi_{\alpha}| = \sum_{\alpha} P_{\alpha} \rho_{\alpha} \end{aligned}$$

ρ_{α} 是纯态 $|\psi_{\alpha}\rangle$ 对应的密度矩阵



量子比特：自旋1/2粒子的密度矩阵

自旋1/2的任意密度矩阵可以用Pauli矩阵刻画

$$\rho = \frac{1}{2}(I + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & 1 - a_3 \end{pmatrix},$$

其中Pauli矩阵

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

向量 $\vec{a}$ 被称为Bloch矢量，可以通过密度矩阵计算：

$$\vec{a} = \text{tr}(\rho \vec{\sigma})$$

自旋1/2的密度矩阵对应的 $\vec{a}$ 称为Bloch矢量；
 $\vec{a}$ 的长度表示了“混度”。



自旋1/2的密度矩阵—Bloch球

当处于纯态时 $|\vec{a}| = 1$ ，自旋完全极化。 $|\vec{a}| = 0$ 完全非极化
用球面上点 (θ, ϕ) 表示自旋1/2纯态

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

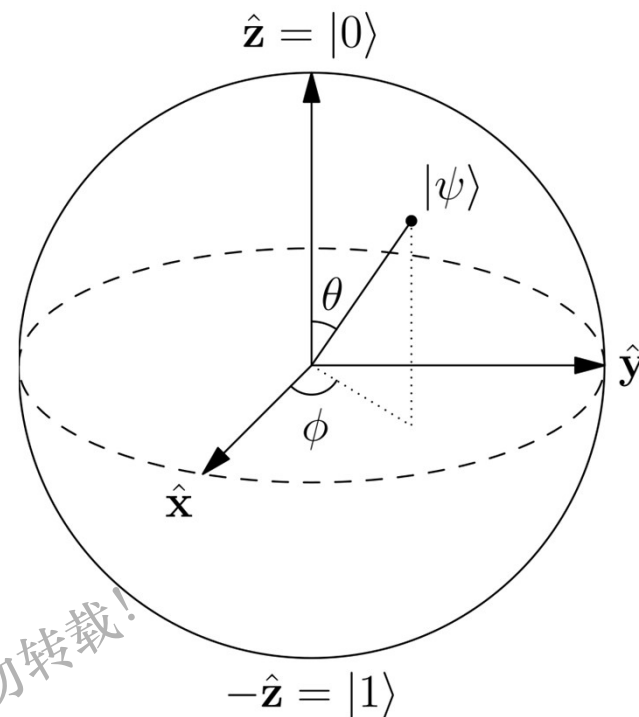
$$\alpha = \cos \theta e^{i\delta}, \beta = \sin \theta e^{i(\delta+\phi)}$$

y, z 轴恰好对应 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 的本征态！

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= e^{i\delta} (\cos \theta |0\rangle + \sin \theta e^{i\phi} |1\rangle) \\ &= \cos \theta |0\rangle + \sin \theta e^{i\phi} |1\rangle \end{aligned}$$

定理

对于自旋1/2的纯态，其Bloch矢量 $|\vec{a}| = 1$ ；对于混合态， $|\vec{a}| < 1$ 。



自旋1/2的密度矩阵

证明

$$\text{由 } \rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + a_3 & a_1 - ia_2 \\ a_1 + ia_2 & 1 - a_3 \end{pmatrix},$$

对于纯态, $\rho^2 = \rho$, 则 $\text{tr}(\rho^2) = \text{tr}(\rho) = 1$;

$$\begin{aligned} \text{tr}(\rho^2) &= \frac{1}{4} \text{tr} \begin{pmatrix} (1 + a_3)^2 + a_1^2 + a_2^2 & \text{whatever} \\ \text{whatever} & (1 - a_3)^2 + a_1^2 + a_2^2 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (1 + |\vec{a}|^2) = 1 \end{aligned}$$

$\Rightarrow |\vec{a}|^2 = 1$, 即纯态对应于Bloch球面上的点; 而对于混态,

$$\text{tr}(\rho^2) < 1 \Rightarrow \frac{1}{2} (1 + |\vec{a}|^2) < 1 \Rightarrow |\vec{a}|^2 < 1,$$

即混态对应于Bloch球内部的点



自旋1/2的密度矩阵

说明

完全混合态为 $\vec{a} = \vec{0}$

$$\rho_{\text{mix}} = \frac{1}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) = \frac{1}{2} I$$

此时密度矩阵是不依赖于上态和下态的选取，在任意基矢下都为单位矩阵。



混合态的密度矩阵举例

热平衡态

$\{|n\rangle \mid n = 1, 2, \dots\}$ 是系统的能量本征态，处于热平衡态的系统在 $|n\rangle: H|n\rangle = E_n|n\rangle$ 上的几率为

$$P_n = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n}$$

其中 $Z = \sum_n e^{-\beta E_n}$, $\beta = \frac{1}{kT}$, T 为温度, k 为玻尔兹曼常数, 能量平均值

$$\bar{H} = \sum_n P_n E_n = \sum_n \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} E_n = \text{tr}(H \rho_T),$$

热平衡态的密度矩阵

$$\rho_T = \sum_n \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} |n\rangle \langle n| = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}$$

密度矩阵的时间演化

对于纯态

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H|\psi\rangle \quad -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi| = \langle\psi|H$$

计算密度矩阵的时间导数

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = i\hbar \sum_n p_n (|\dot{\psi}_n\rangle\langle\psi_n| + |\psi_n\rangle\langle\dot{\psi}_n|) = [H, \rho]$$

由此得到了密度矩阵演化的von Neumann方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho = [H, \rho]$$

这对应着经典力学中的Liouville方程



习题

一个自旋处于方向沿 z 方向的磁场中，场强为 B 。

(1) 若这个自旋处于温度 T 的热态，计算自旋沿 x 方向的极化矢量——沿 x 方向自旋的平均值。

(2) 在Bloch球上表征(1)中热平衡态随温度的变化



“寇享学术在线传播专用，未经许可，请勿转载！”



混合态密度矩阵刻画量子退相干

实物粒子的双缝实验：如果在双缝后面有一个探测器，可以准确探知粒子是通过哪一条缝，则相干条纹消逝-量子退相干。

量子退相干及其3个解释

玻尔互补原理：

对位置的探测决定了粒子性，波动性消逝了

海森堡不确定性关系：

位置探测得越准对动量扰动越大，波矢变得不确定，干涉条纹消逝。

随机位相描述：测量使得叠加

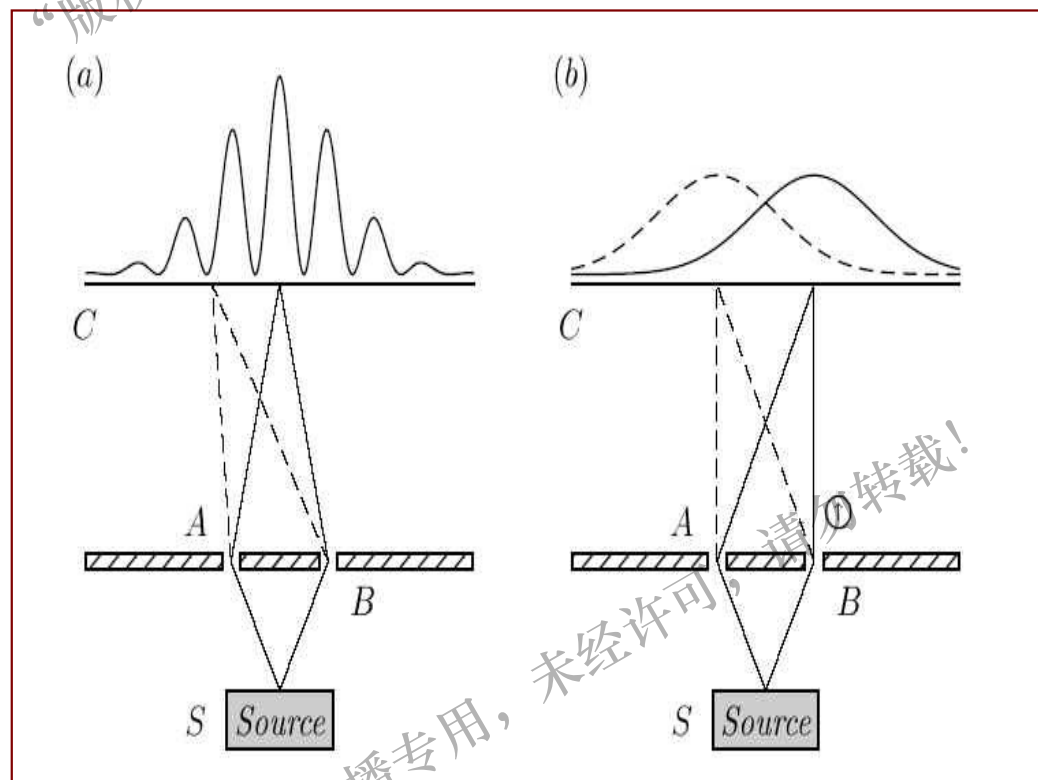
$$|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle \Rightarrow |\psi'\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta e^{i\theta} |\psi_2\rangle$$

θ 为随机位相，其位相因子平均值为零，即 $\langle e^{i\theta} \rangle = 0$

混合态密度矩阵刻画量子退相干

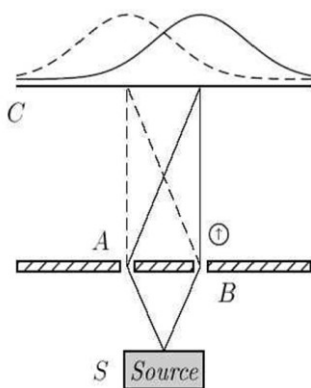
量子退相干的玻尔互补原理诠释

对位置的探测决定了粒子性，波动性消逝了



玻尔量子互补原理：诠释退相干

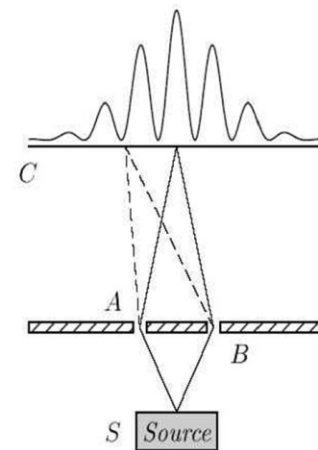
物质具有波动粒子二重属性, 但在同一个实验中二者互相排斥 (一个 **ad hoc** 解释)



**粒子性：确定的
位置和动量**

**波动性：弥散
于整个空间**

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$$



“粒子在测量中产生”

“粒子属性在位置测量中产生”

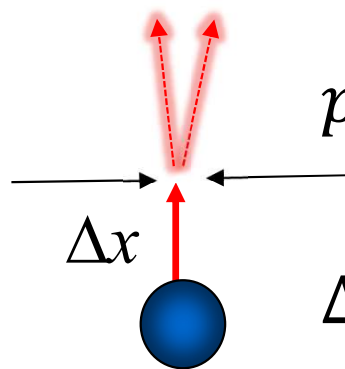
海森堡不确定性关系解释量子退相干



$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2$$

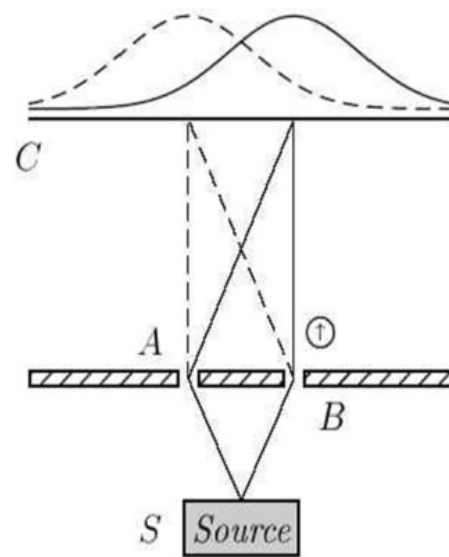
位置不确定

动量不确定



$$p = \hbar k + \Delta p$$

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$$



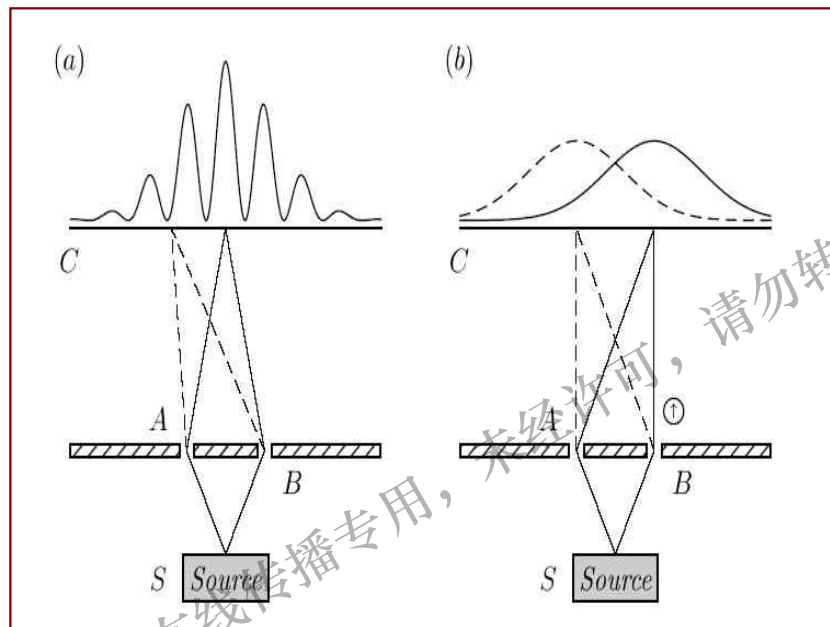
海森堡不确定性关系：位置探测得越准，则对动量扰动越大。从而波矢变得不确定，则干涉条纹消逝。

量子退相干随机位相诠释

随机位相描述：测量使得叠加态

$$|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle \Rightarrow |\psi'\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta e^{i\theta}|\psi_2\rangle$$

θ 为随机位相，其位相因子平均值为零，即 $\langle e^{i\theta} \rangle = 0$



量子退相干随机位相密度矩阵描述

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \rightarrow \rho' = |\psi'\rangle\langle\psi'|$$

$$\rho' = |\alpha|^2 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |\beta|^2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| + \beta^* \alpha |\psi_1\rangle\langle\psi_2| e^{-i\theta} + \text{h.c.}$$

对A求平均:

$$\begin{aligned} \bar{A}' = \text{tr}(\rho' A) &= |\alpha|^2 \langle\psi_1|A|\psi_1\rangle + |\beta|^2 \langle\psi_2|A|\psi_2\rangle \\ &+ \beta^* \alpha e^{-i\theta} \langle\psi_2|A|\psi_1\rangle + \text{c.c.} \end{aligned}$$

显然在纯态上, A 非对角元对期望值有贡献。平均值 $\bar{A}$ 还包含 A 的非对角元。



混合态的密度矩阵计算期望值

整体期望值包含对 $\bar{A}'$ 中随机变量进一步求平均

$$\begin{aligned}\langle \bar{A}' \rangle &= |\alpha|^2 \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle + |\beta|^2 \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle + \beta^* \alpha \langle \psi_2 | A | \psi_1 \rangle \langle e^{i\theta} \rangle + \text{c. c.} \\ &= |\alpha|^2 \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle + |\beta|^2 \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle\end{aligned}$$

对密度矩阵直接平均

$$\bar{\rho}' = \langle \rho' \rangle = |\alpha|^2 |\psi_1\rangle \langle \psi_1| + |\beta|^2 |\psi_2\rangle \langle \psi_2|$$

然后计算 A 的平均值

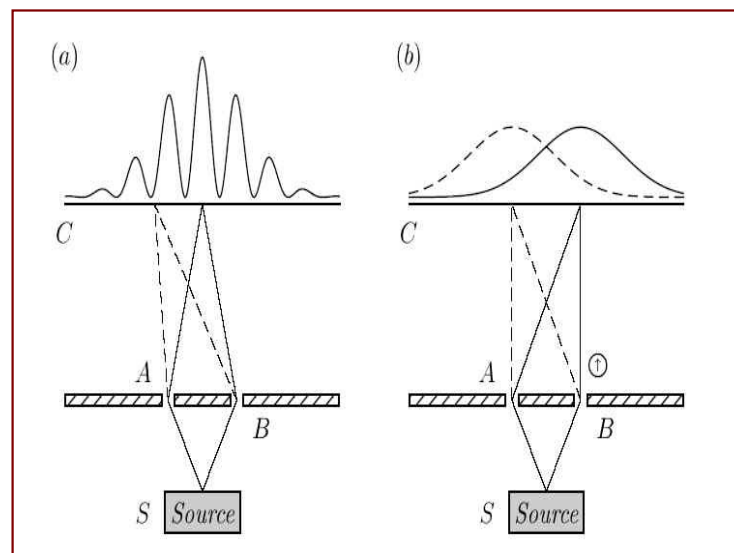
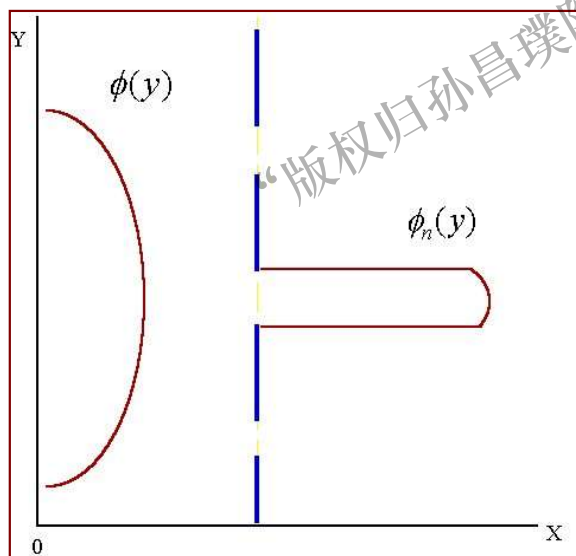
$$\text{tr}(\bar{\rho}' A) = |\alpha|^2 \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle + |\beta|^2 \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle$$

密度矩阵非对角元消逝的现象对应量子退相干
它是今天研究的量子计算物理实现的主要障碍



实验：无法区分波包塌缩和退相干

“波”到“粒子”的跃变 中子的双缝干涉



$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \rightarrow |n\rangle$$

$$|\psi\rangle\langle\psi| \rightarrow \sum_n |c_n|^2 |n\rangle\langle n|$$

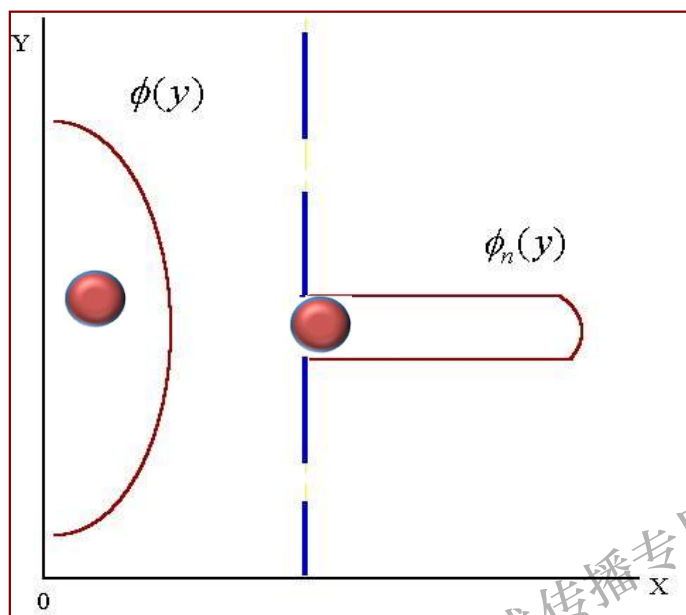
波包塌缩和退相干均导致相同重复测量结果

波包塌缩起因：重复测量给出相同结果

玻恩几率定义的测量：波包塌缩 (WPC)

$$|\psi\rangle = \sum c_n |n\rangle \rightarrow |n\rangle, A|n\rangle = a_n |n\rangle$$

紧接着A的第二次测量得到相同结果



重复测量是否给出
相同结果依赖于量
子测量的定义！！

退相干导致重复测量结果相同

期望值假设定义的测量：退相干 (Decoherence)

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \rightarrow \rho_d = \sum |c_m|^2 |m\rangle\langle m|$$

第一次测量：

$$\bar{A} = \text{tr}(\rho A) = \sum_m \langle m | \rho A | m \rangle = \sum_m a_m |c_m|^2$$

第二次重复测A也得到相同结果

$$\bar{A}' = \text{tr}(\rho_d A) = \text{tr} \left(\sum_m |c_m|^2 |m\rangle\langle m| A \right) = \sum_m a_m |c_m|^2$$

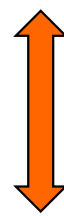
两种量子测量定义的等价性与重复测量结果趋同

玻恩几率定义的单粒子测量:

在 $|\psi\rangle = \sum C_n |n\rangle$ 上, 一旦测得的结果是 A 的本征值之一 a_n 的几率为 $P_n = |C_n|^2$



重复测量得到结果仍然确定是 a_n
对应概率不变



期望值假设定义的系综测量

$$\bar{A} = \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_n a_n |C_n|^2$$



重复测 A 得到相同结果 $\sum_m a_m |c_m|^2$:
 $\bar{A}' = \text{tr}(\rho_d A) = \bar{A}$

逻辑图的可交换, 意味着波包塌缩和退相干都可以无差别地诠释实验, 从而证明可实验观察重复性, 无法保证波包塌缩的唯一正确性!!

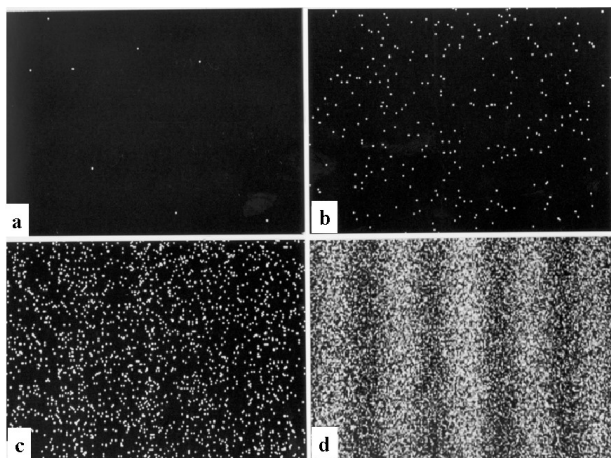
量子测量的物理：系综诠释或几率诠释？

爱因斯坦的“第一观点”：“预言的是事件出现的频率”

“函数无论如何也不能描述单个粒子的状态，它涉及了多个系统，从统计力学角度就是系综”

《爱因斯坦文集》第一集

“玻恩假说”：“预言的是单个体系测量结果的几率”



玻恩观点的演变：

“量子描述...并不回答...某个粒子在特定时刻的位置...回答的只是提出的统计问题” “分歧不是实质性的，只是语言上的”

电子衍射实验涉及到稳定的系统：
时间平均=系综平均，因而不能区分二者

1.5 谐振子量子化的代数方法

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad [x, p] = i\hbar$$

定义产生、消灭算子

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right), \quad a^\dagger = (a)^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right)$$

$$[a, a^\dagger] = 1.$$

坐标和动量可以反过来由产生消灭算子表达

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger), \quad p = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a - a^\dagger).$$



谐振子量子化的代数方法

$$\begin{aligned} H &= -\frac{1}{2m} \frac{m\hbar\omega}{2} (a - a^\dagger)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} (a + a^\dagger)^2 \\ &= \frac{1}{2} \hbar\omega (a^\dagger a + a a^\dagger) \end{aligned}$$

再定义粒子数激发算子： $\hat{n} = a^\dagger a$

$$H = \hbar\omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right)$$



谐振子本征态

先设存在一个状态 $|0\rangle$ 是 a 的零值本征态，后面证明之

$$a|0\rangle = 0$$

定义Fock态

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} a^{\dagger n} |0\rangle, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

证明谐振子有Fock表示：

$$\begin{cases} a^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle & (1) \\ a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle & (2) \\ \hat{n}|n\rangle = n|n\rangle & (3) \end{cases}$$



谐振子本征态

证明

利用 $[a, a^\dagger] = 1$ 和归纳法证明 $[\hat{n}, a^{\dagger n}] = n a^{\dagger n}$

当 $n = 1$, $[\hat{n}, a^\dagger] = a^\dagger$

假设 n 时成立, $n + 1$ 时

$$\begin{aligned} & [\hat{n}, a^{\dagger n+1}] \\ &= [\hat{n}, a^{\dagger n} \cdot a^\dagger] \\ &= [\hat{n}, a^{\dagger n}] a^\dagger + a^{\dagger n} [\hat{n}, a^\dagger] \\ &= (n + 1) a^{\dagger n+1} \end{aligned}$$

故 $n + 1$ 时也成立。



谐振子本征态

由 $[\hat{n}, a^{\dagger n}] = na^{\dagger n}, \hat{n}a^{\dagger n} = na^{\dagger n} + a^{\dagger n}\hat{n}$

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

其中用到了： $\hat{n}|0\rangle = a^{\dagger}a|0\rangle = 0$

谐振子的本征方程 $H|n\rangle = E_n|n\rangle$

量子化能量 $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$



谐振子本征态

练习题

由定义证明： $a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$

由归纳法已证明： $aa^{\dagger n} = a^{\dagger n}a + na^{\dagger n-1}$,

故 $[a, a^{\dagger n}] = na^{\dagger n-1}$

于是有

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \frac{aa^{\dagger n}}{\sqrt{n!}} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^{\dagger n}a|0\rangle + na^{\dagger n-1}|0\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{(n-1)!}} \sqrt{n} a^{\dagger n-1} |0\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \end{aligned}$$



证明谐振子基态的存在

在坐标表象中 $a|0\rangle = 0$ 可表达为 $(a \propto x + \frac{ip}{m\omega})$

$$\langle x | x + \frac{ip}{m\omega} | 0 \rangle = 0 \quad \longrightarrow$$

$\psi_0(x) = \langle x | 0 \rangle$ = 基态波函数

归一化的波函数:

$$\left(x + \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0$$

$$\frac{d}{dx} \psi_0(x) = -\frac{m\omega}{\hbar} x \psi_0(x)$$
$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} x dx$$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

谐振子本征函数的坐标表示

第 n 个激发态可以表示为

$$\begin{aligned}\psi_n(x) = \langle x|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle x|a^{\dagger n}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2} \langle x|\left(x - \frac{ip}{m\omega}\right)^n|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{n/2} \left(x - \frac{\hbar}{m\omega} \frac{d}{dx}\right)^n \psi_0(x)\end{aligned}$$

定义

$$\xi = (m\omega/\hbar)^{1/2} x$$

$$\begin{aligned}\psi_n(x) &= \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!} 2^n} \left(\frac{d}{d\xi} - \xi\right)^n \left[\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\xi^2/2}\right] \\ &= \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!} 2^n} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left[e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2/2}\right]^n e^{-\xi^2/2}\end{aligned}$$

谐振子本征函数的坐标表示

考虑对任意函数 $\psi(x)$

$$e^{\xi^2/2} \left[\frac{d}{d\xi} (e^{-\xi^2/2}) \psi(x) \right] = \left(\frac{d}{d\xi} - \xi \right) \psi(x)$$

从而

$$\begin{aligned} \psi_n(\xi) &= \frac{(-1)^n}{\sqrt{n! 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{\xi^2/2} \left[\frac{d}{d\xi} \right]^n e^{-\xi^2/2} \\ &\equiv \frac{1}{\sqrt{n! 2^n}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \end{aligned}$$

其中 $H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2/2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2}$ 是厄米多项式。

相干态 (Coherent State)

相干态 $|\alpha\rangle$ 定义为消灭算子的本征态

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

设 $|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n |n\rangle$

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} C_n \sqrt{n} |n-1\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_{n+1} \sqrt{n+1} |n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha C_n |n\rangle$$

$$\Rightarrow C_{n+1} = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} C_n$$

$$\Rightarrow \left. \begin{aligned} C_n &= \frac{(\alpha)^n}{\sqrt{n!}} C_0 \\ \langle \alpha | \alpha \rangle &= 1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow C_0 = \exp(-|\alpha|^2/2)$$



相干态 (Coherent State)

相干态的Fock表示

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

定义

相干态的生成算子

$$D(\alpha) = \exp(\alpha a^\dagger - \alpha^* a)$$

$$|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle$$

相干态 (Coherent State)

利用Baker-Hausdorff公式 (当 $[A, B] = C, [C, A] = 0 = [C, B]$)

$$e^{A+B} = e^{-[A,B]/2} e^A e^B$$

$$D(\alpha) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a} = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha a^\dagger} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\alpha^*)^n}{n!} a^n$$

$$\text{利用 } e^{-A} B e^A = B - [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots,$$

得到

$$D^{-1}(\alpha) a D(\alpha) = a + \alpha$$



相干态的坐标表示

当 α 为实数，相干态的生成算子 $D(\alpha)$ 是坐标表示给出坐标空间上的平移算子

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x + \frac{ip}{m\omega} \right), \quad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x - \frac{ip}{m\omega} \right)$$

$$\alpha a^\dagger - \alpha^* a = -\sqrt{\frac{2}{\hbar m\omega}} \alpha ip$$

$$D(\alpha) = e^{-\frac{i}{\hbar} qp} \quad q = \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$$

可以证明： $D(\alpha)\psi(x) = \psi(x - q)$



相干态的坐标表示

$$\begin{aligned} e^{-\frac{i}{\hbar}qp} |x\rangle &= \int |p\rangle \langle p| e^{-\frac{i}{\hbar}q\hat{p}} |x\rangle dp = \int |p\rangle \langle p|x\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}qp} dp \\ &= \int |p\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}(x+q)p} dp = \int |p\rangle \langle p|x+q\rangle dp \\ &= |x+q\rangle \\ \langle p|x\rangle &= (\langle x|p\rangle)^* = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px} \end{aligned}$$

$$D(\alpha)\varphi(x) = \langle x|e^{-\frac{i}{\hbar}qp}|\varphi\rangle = \varphi(x-q).$$

$D(\alpha)$ 代表坐标空间上波函数的平移算符

$$\text{平移的距离: } q = \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$$

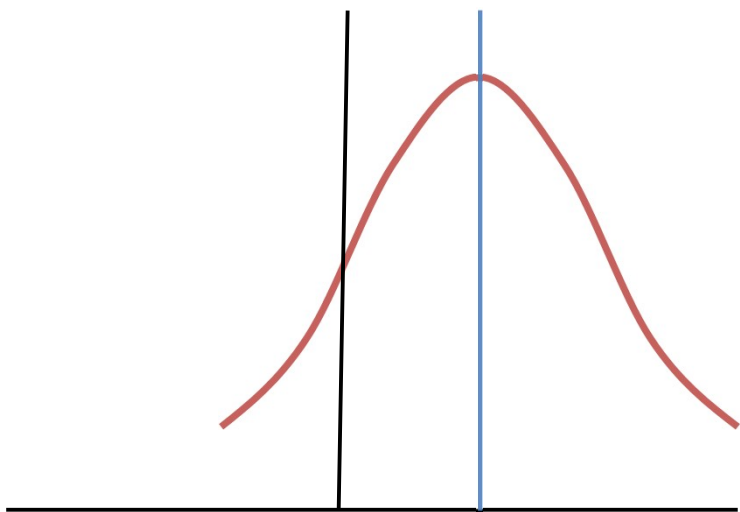
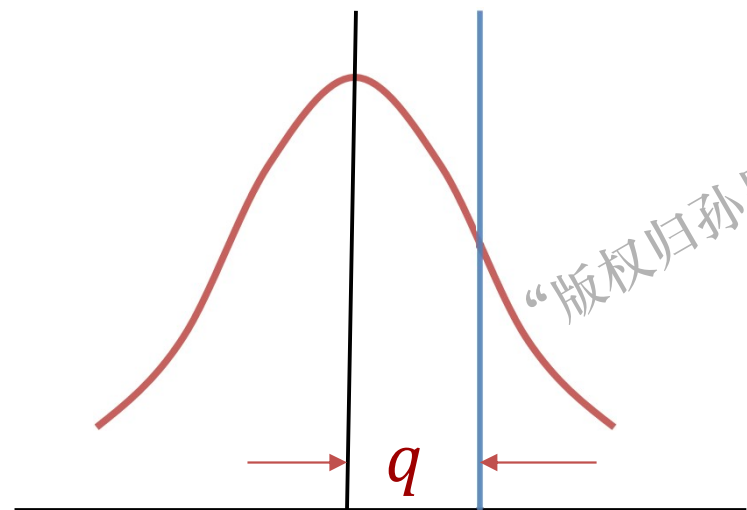


谐振子相干态的物理意义 (1)

$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle \propto e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

代表一个中心在原点的高斯波包。

当 α 为实数时，相干态 $|\alpha\rangle = D(\alpha)|0\rangle$ 代表一个中心被移动了距离 q 的高斯波包



$$\langle x|\alpha\rangle = \langle x|D(\alpha)|0\rangle$$

$$= \psi_0(x - q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega(x-q)^2}{2\hbar}}$$

$$q = \alpha \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$$

谐振子相干态的物理意义 (2)

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

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha + \alpha^*),$$

$$\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (\alpha^2 + \alpha^{*2} + 2\alpha\alpha^* + 1),$$

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}.$$

$$p = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (a - a^\dagger)$$

$$\langle p \rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\alpha - \alpha^*),$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2} (1 + 2\alpha\alpha^* - \alpha^2 - \alpha^{*2}),$$

$$(\Delta p)^2 = \frac{\hbar m\omega}{2}.$$

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2},$$

即相干态满足最小的不确定性关系

谐振子相干态的物理意义 (2)

思考题

是否不确定关系最小态都是相干态？

这个问题的思考导致了压缩态概念的诞生。

参考文献：H. P. Yuen, Phys. Rev. A **13**, 2226 (1976)



薛定谔的相干态

1926年薛定谔提出了波动力学的基本方程，但它可否描述一个质点的运动？如果用一个波包来描述它，但波包的扩散行为与直观物理现象相矛盾，因为一个质点是不会扩散的。薛定谔发现，在谐振子势中，一个特殊叠加出来波包——相干态是不扩散的。这样一个波包的不确定性最小，其中心运动代表了谐振子的经典运动。1960年代，Glauber等人在寻求相干性最好的光场状态，使得原子探测器的效率最高，这样状态正好也是相干态，它正好描述了刚刚发现的激光现象。



相干态的物理意义：时间演化

对于哈密顿量为 $H = \hbar\omega a^\dagger a$ 的谐振子

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(0)\rangle$$

若 $|\psi(0)\rangle = |\alpha\rangle$ ，则 $|\psi(t)\rangle = e^{-ia^\dagger a \omega t} |\alpha\rangle = |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$

$$e^{-i\omega t a^\dagger a} |\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha)^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega t \hat{n}} |n\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

$$|\psi(t)\rangle = e^{-ia^\dagger a \omega t} |\alpha\rangle = |\alpha e^{-i\omega t}\rangle$$



相干态的物理意义：时间演化

α 为实数时

$$\begin{aligned}\psi(x, t) &= \langle x | e^{-i\omega t a^\dagger a} | \alpha \rangle \\ &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} \exp \left[-\frac{\omega m}{\hbar} (q - q_0 \cos \omega t)^2 \right],\end{aligned}$$

它正好代表一个质心做简谐振动的波包，而波包不扩散。

