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 (通过接收屏上的落点) 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.

$$\boxed{\begin{array}{c}\text{量子系统} \longrightarrow \text{量子现象} \qquad (1)\\[2em] \text{量子态} \longrightarrow \text{几率} \qquad (2)\end{array}}$$

可以说 (2) 是 (1) 的量化叙述.

<u>量子态</u>

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

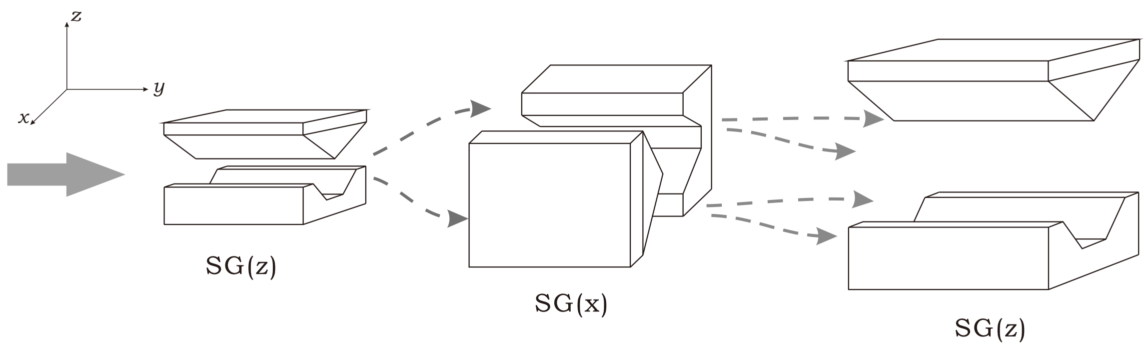

图 1

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 1 的实验结果如图 2 所示.

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 2 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 3 所示的结果.

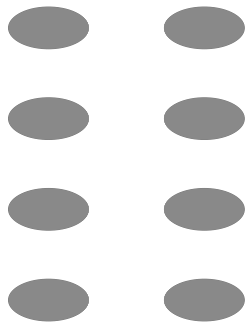

图 2

实际结果如图 4 所示. 当 SG(x) 中的磁场强度减为零时, 结果是图 5.

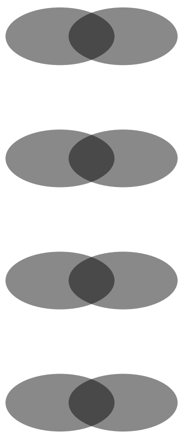

图 3

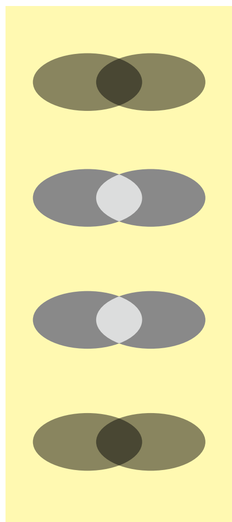

图 4

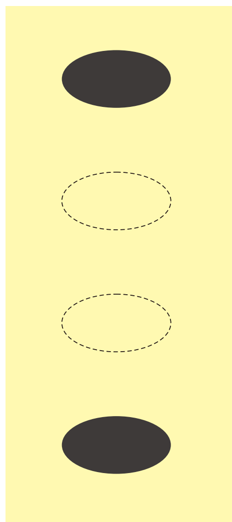

图 5

图 4 和图 5 体现了干涉现象, 这类现象是不能用 “粒子通过了某条路径” 这类描述来解释的.

类比于以上素材, 将量子态表示为向量形式, 更具体地说, 是 Hilbert 空间中的向量. 空间的维数等于可以严格区分的现象的最大个数. 在 SG 实验中, 可以严格区分的现象只有两个, 所以需要最简单的两维复空间 $\mathbb{C}^2$ 描述量子态. 两维实空间不能胜任, 参看 Sakurai 书.

观测量

上一章中谈到, 特定的观测过程对应于特定的观测对象, 又与经典物理中物理量类比, 进而有了位置、动量、角动量、哈密顿量等等基本观测量.

观测量的数学形式 基本物理量对应于时空变换的生成元. 例如, 动量是空间平移变换的生成元, 哈密顿量是时间演化的生成元.

生成元与变换之间的关系就是 Lie 代数与 Lie 群之间的关系.

变换的对象是量子态. 既然量子态被表示为 Hilbert 空间中的向量, 那么, 对向量的变换应该具有矩阵或算子的形式, 从而作为生成元的物理量也具有矩阵或算子的形式.

观测量的值 定性地说, "值" 是不同的观测结果的标记. 观测结果表现在宏观的经典层面, 可以严格区分.

在 SG 实验中, 我们看到的不是磁矩或自旋, 而是粒子落在接收屏上的位置, 通过粒子的落点推断粒子的磁矩或自旋. 将磁场的梯度设为 z 方向, 用 $\uparrow$ 和 $\downarrow$ 标记在接收屏上看到的现象, 这两个标记分别对应于粒子的自旋角动量的 z 分量 S_z 的值: $+\frac{\hbar}{2}$ 和 $-\frac{\hbar}{2}$.

当观测量的值不参与具体分析的时候, 我们可以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.

与观测量的值对应的状态 在 SG(z) 实验中, 用 $\uparrow$ 和 $\downarrow$ 标记观测到的现象. 如果粒子未被摧毁, 那么相应的状态可以表示为 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$. 在上一章谈论量子小球的时候, 也有类似的形式, $|\text{白}\rangle$ 和 $|\text{黑}\rangle$, $|\text{硬}\rangle$ 和 $|\text{软}\rangle$.

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.

在量子小球模型中, $c = 0$ 和 $c = 1$ 是 C 仪器测量结果的标记, 可以严格区分, 也是观测量 C 的值, 对应的状态可以记作 $|c = 0\rangle$ 和 $|c = 1\rangle$, 它们彼此正交.

在 SG 实验中, 观测量磁矩 μ_z 或自旋 S_z 的现象标记为 $\uparrow$, $\downarrow$, 或者 $+1$, -1, 或者 0, 1 等等, 两个现象可以严格区分, 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.

至此, 我们谈论了量子力学的两条基本假设:

1. 量子态被表示为 Hilbert 空间中的向量.
2. 观测量被表示为 Hilbert 空间中的矩阵或算子.

进一步的讨论需要线性空间的基本知识, 下面作简单介绍, 并借此引入 Dirac 符号.

有限维复空间 $\mathbb{C}^N$

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 (inner product)

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:

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

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 $\psi=\sum_i\psi_ie_i\in\mathscr{H}_1$, $\varphi=\sum_j\varphi_jf_j\in\mathscr{H}_2$, $\{e_i\}$ 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,

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

有了对偶空间, 自然有针对 $\varphi \in \mathscr{H}^\dagger$ 的线性变换.

Self-adjoint, 或者简单地说, **厄密共轭**.

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

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

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

在有限维空间中, 容易验证

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

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

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

$\mathbb{C}^n$ 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

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

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.

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.

$$
\begin{aligned}
&|\psi\rangle = \mathbb{1}_n |\psi\rangle = \sum_i^n |e_i\rangle\langle e_i| \ |\psi\rangle = \sum_i^n \psi_i |e_i\rangle \\
&\langle\varphi| = \langle\varphi| \mathbb{1}_n = \sum_i^n \langle\varphi|e_i\rangle \langle e_i| = \sum_i^n \varphi_i^* \langle e_i| \\
&X = \mathbb{1} X \mathbb{1} = \cdots \ \cdots
\end{aligned}
$$

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

$$A = \sum_i a_i |\alpha_i\rangle\langle\alpha_i| \tag{3}$$

厄密矩阵 A 在其自身的表象中具有对角矩阵的形式. (3) 式又称为 A 的本征分解形式, 或谱分解形式.

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 (3) 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.

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

$$\big(U(\varphi), \psi\big) = \big(\varphi, U^{-1}(\psi)\big) \tag{4}$$

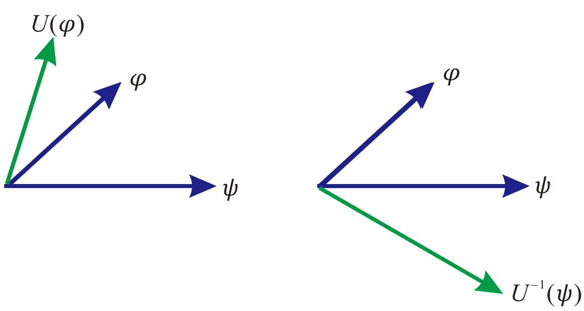

图 6: (4) 式的形象描述.

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 $\det(U) = 1$.

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). □

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

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

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

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.

$$|\beta_j\rangle = \sum_i u_{ij}\,|\alpha_i\rangle\,, \quad U = (u_{ij}) \tag{5}$$

$$u_{ij} = \langle\alpha_i|\beta_j\rangle\,, \quad U = \sum_i |\beta_i\rangle\langle\alpha_i| \tag{6}$$

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.

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

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.

$$
X = PU \tag{7}
$$

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.