

## 第四章 量子系统随时间的演化

### 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

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \quad (1)$$

这里,  $H$  是系统的哈密顿量, 暂且假设  $H$  不显含时间.

时间演化算子作用于量子态, 使其从初始时刻  $t = 0$  演化到  $t$  时刻, 即

$$|\psi(0)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\psi(0)\rangle.$$

为了得到  $|\psi(t)\rangle$  满足的方程, 对上式求时间的导数, 有

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle} \quad (2)$$

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.

对于孤立量子系统量子态随时间的演化 (即酉演化), Schrödinger 方程是比时间演化算子  $U(t)$  更为基本的描述方式.

(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  $\psi(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$ , 容易得到,

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

对于混和态, 有相同的形式, 即

$$i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [H, \rho(t)]$$

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,  $\mathcal{H}$  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

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1(t) \\ \dot{c}_2(t) \\ \vdots \\ \dot{c}_n(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \cdots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & \cdots & h_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \cdots & h_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_n(t) \end{pmatrix}.$$

这是  $n$  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

$$c_j(t) = c_j(0)e^{-iE_j t/\hbar}$$

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  $\rho(t)$ ,

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t).$$

在能量表象中, 时间演化算子  $U(t)$  也是对角的,

$$\begin{aligned} U(t) &= e^{-iHt/\hbar} = \sum_j e^{-iE_j t/\hbar} |e_j\rangle\langle e_j| \\ &= \text{diag} \left( e^{-iE_1 t/\hbar}, e^{-iE_2 t/\hbar}, \dots, e^{-iE_n t/\hbar} \right) \end{aligned}$$

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, 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  $\rho$  暗含了对哈密顿量的测量过程.

## 观测量的期望值

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,  $|\psi(0)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle$ .
  - 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.

$$p_i(t) = |\langle \alpha_i | U(t) | \psi(0) \rangle|^2$$

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

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle A \rangle(t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle} \quad (3)$$

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, 对于自旋 1/2 粒子, 假设有一个形如  $f(t)\sigma_z$  的观测, 其中  $f(t)$  是时间的函数; 再比如, 含时谐振子的势能是  $\frac{1}{2}m\omega(t)^2x^2$ , 其中频率  $\omega$  随时间变化.

下面证明 (3) 式.

$$\begin{aligned} \frac{d\langle A \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \text{Tr}(\rho(t)A) \\ &= \text{Tr} \left( \frac{d\rho(t)}{dt} A + \rho(t) \frac{\partial A}{\partial t} \right) \\ &= \text{Tr} \left( \frac{1}{i\hbar} [H, \rho(t)] A + \rho(t) \frac{\partial A}{\partial t} \right) \\ &= \text{Tr} \left( \frac{1}{i\hbar} (H\rho(t)A - \rho(t)HA) + \rho(t) \frac{\partial A}{\partial t} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \text{Tr} \left( \frac{1}{i\hbar} (\rho(t)AH - \rho(t)HA) + \rho(t) \frac{\partial A}{\partial t} \right) \\
&= \text{Tr} \left( \frac{1}{i\hbar} \rho(t)[A, H] + \rho(t) \frac{\partial A}{\partial t} \right) \\
&= \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle
\end{aligned}$$

设  $t$  时刻系统处于纯态  $|\psi(t)\rangle$ , 可以写出观测量  $A$  的期望值的具体形式. 选择  $H$  表象, 将  $|\psi(t)\rangle$  表示为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t) |e_j\rangle, \quad c_j(t) = c_j(0)e^{-iE_j t/\hbar}.$$

在  $t$  时刻  $A$  的期望值为

$$\langle A \rangle(t) = \sum_{n,m} c_n(0)c_m^*(0) \langle e_m | A | e_n \rangle e^{i(E_m - E_n)t/\hbar}$$

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  $\omega_{mn}$  仅仅与  $H$  有关, 与力学量  $A$  无关, 与初态无关. 频率  $\omega_{mn}$  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

$$p(a_k) = |\langle \alpha_k | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \sum_j c_j(0) e^{-iE_j t/\hbar} \langle \alpha_k | e_j \rangle \right|^2$$

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  $\mathbf{B}$  中.

先考虑电磁学中说的磁矩. 面积为  $A$  的电流环产生的磁矩

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{A}I$$

而电流强度可以表示为

$$I = \frac{q}{T} = \frac{qv}{2\pi a}$$

令  $\mathbf{s} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v}$ ,  $s = rmv = amv$ . 电流强度可以重写为

$$I = \frac{qs}{2Am}, \quad A = \pi a^2$$

磁矩

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q\mathbf{s}}{2m}$$

量子情形下, 角动量用算子表示, 记作  $\mathbf{S}$ .

对于电子,  $q = e < 0$ . 还要考虑电子的  $g$  因子  $g_e$ .

$$\boldsymbol{\mu}_e = g_e \frac{e\mathbf{S}}{2m_e} = -\frac{g_e\mu_B}{\hbar} \mathbf{S}$$

其中  $\mu_B$  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  $\mathbf{S}$  写为  $\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ ,

$$\boldsymbol{\mu}_e = \frac{e\mathbf{S}}{m_e} = \frac{e\hbar}{2m_e} \boldsymbol{\sigma}$$

在磁场  $\mathbf{B}$  中, 电子的自旋部分的哈密顿量是

$$H = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B} = -\frac{e\hbar}{2m_e} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$$

不含时情形

令  $\mathbf{B} = B\mathbf{n}$ ,  $\omega_0 = \frac{|e|\hbar B}{m_e}$ ,

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \sigma_n = \omega_0 S_n = \omega_0 \mathbf{n} \cdot \mathbf{S}.$$

$H$  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  $\sigma_n$  的本征向量, 当然也是  $H$  的本征向量.

设  $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ ,  $H = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z$ . 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

$$\mathbf{r}(0) = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta).$$

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,

$$i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [H, \rho(t)],$$

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t).$$

$$\rho(0) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \mathbf{r}(0) \cdot \boldsymbol{\sigma}).$$

考虑  $U(t)\sigma_i U^\dagger(t)$ ,  $i = x, y, z$ , 可以得到

$$\begin{aligned} & r_1(0)\sigma_x + r_2(0)\sigma_y + r_3(0)\sigma_z \xrightarrow{U(t)} \\ & \sigma_x [r_1(0) \cos \omega_0 t - r_2(0) \sin \omega_0 t] \\ & + \sigma_y [r_1(0) \sin \omega_0 t + r_2(0) \cos \omega_0 t] \\ & + \sigma_z r_3(0) \end{aligned}$$

于是获得 Bloch 向量的变换,

$$\mathbf{r}(0) \longrightarrow \mathbf{r}(t) = R(z, \omega_0 t)\mathbf{r}(0).$$

力学量的期望值,  $\langle \mathbf{S} \rangle$ ,

$$\left. \begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos(\phi + \omega_0 t), \\ \langle S_y \rangle &= \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin(\phi + \omega_0 t), \\ \langle S_z \rangle &= \frac{\hbar}{2} \cos \theta. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

与 Bloch 向量一样, 绕  $z$  轴旋转. 旋转的角速度是  $\omega_0$ , 与磁感应强度的大小  $B$  有关.

还可以注意到, 在 (4) 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  $\omega_0$  称为 Larmor 频率.

### 含时情形

考虑随时间变化的磁场  $\mathbf{B}(t)$ ,

$$\mathbf{B}(t) = B_0 \mathbf{e}_z + B_1(\cos \omega t \mathbf{e}_x + \sin \omega t \mathbf{e}_y)$$

自旋 1/2 粒子的哈密顿量是

$$H(t) = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \sigma_z + \frac{1}{2} \hbar \omega_1 (\sigma_x \cos \omega t + \sigma_y \sin \omega t)$$

其中

$$\omega_0 = \frac{|e| \hbar B_0}{m}, \quad \omega_1 = \frac{|e| \hbar B_1}{m}$$

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.

这种情形下的 Schrödinger 方程是两个彼此间有耦合的微分方程, 直接求解并不困难, 不过, 可以考虑一下旋转坐标系.  $\mathbf{B}(t)$  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  $\omega$  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  $\omega t$  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

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

将  $|\psi(t)\rangle = V |\tilde{\psi}(t)\rangle$  代入, 有

$$i \hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = i \hbar V \frac{d|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} + \frac{1}{2} \hbar \omega \sigma_z |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$$

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,

$$i \hbar \frac{d|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} = \left[ \frac{1}{2} \hbar \omega_1 \sigma_x + \frac{1}{2} \hbar (\omega_0 - \omega) \sigma_z \right] |\tilde{\psi}(t)\rangle$$

$$\text{令 } \Delta = \omega - \omega_0$$

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2}\hbar\omega_1\sigma_x - \frac{1}{2}\hbar\Delta\sigma_z = \frac{1}{2}\hbar\Omega \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

$$\Omega = \sqrt{\omega_1^2 + \Delta^2}, \quad \mathbf{n} = (\sin\theta, 0, \cos\theta)$$

$$\sin\theta = \frac{\omega_1}{\sqrt{\omega_1^2 + \Delta^2}}, \quad \cos\theta = \frac{-\Delta}{\sqrt{\omega_1^2 + \Delta^2}}$$

$$U_{\text{eff}}(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}H_{\text{eff}}t\right\} = \mathbb{1} \cos\frac{\Omega t}{2} - i\sigma_x \frac{\omega_1}{\Omega} \sin\frac{\Omega t}{2} + i\sigma_z \frac{\Delta}{\Omega} \sin\frac{\Omega t}{2}$$

最终,

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z\right\} U_{\text{eff}}(t) |\psi(0)\rangle \quad (5)$$

这里, 时间演化算子  $U(t)$  的形式不能简单地表示为

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t') dt'\right\}$$

这是因为, 不同时刻的  $H(t)$  不对易. 需要求解 Schrödinger 方程.

可以从 (5) 式写出时间演化算子  $U(t)$ ,

$$U(t) = \exp\left\{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z\right\} U_{\text{eff}}(t)$$

但是, 需要注意的是, 上述形式的酉变换并不满足  $U(t_1)U(t_2) = U(t_1 + t_2)$ , 原因在于, 作为生成元的哈密顿量  $H(t)$  是含时的.

- 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  $\sigma_z$  (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  $p_{+1 \rightarrow -1}$ .

$$p_{+1 \rightarrow -1} = |\langle 1|\psi(t)\rangle|^2$$

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

$$p_{+1\rightarrow-1} = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2}\sin^2\frac{\Omega t}{2}$$

当  $\frac{\Omega t}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \dots$  时, 跃迁几率达到最大, 最大值为

$$\frac{\omega_1^2}{\omega_1^2 + \Delta^2} \leq 1$$

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  $\omega$ . 而且, 在  $t = 0$  时刻, 我们让粒子初态的 Bloch 方向与磁场  $\mathbf{B}(0)$  一致, 此时它们都位于  $xz$  平面内, 与  $z$  轴的夹角为  $\theta$ .

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  $\omega$  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  $i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t) |\psi(t)\rangle$  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  $\omega$  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  $|\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| \simeq |\varphi_0(t)\rangle \langle \varphi_0(t)|$ . 这体现在,  $t$  时刻的量子态  $|\psi(t)\rangle$  对应的 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

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

$$\Downarrow$$

$$|\psi(t)\rangle = U|\tilde{\psi}(t)\rangle, \quad H = U\tilde{H}U^\dagger$$

$$i\hbar \frac{d|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} = \tilde{H}|\tilde{\psi}(t)\rangle$$

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.

## Heisenberg 图像

考虑测量力学量  $A$  得到结果  $a_j$  的几率随时间的变化,

$$p_j(t) = |\langle \alpha_j | U(t) | \psi(0) \rangle|^2 \quad (6)$$

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  $|\psi(t)\rangle$ . 主动观点对应于 Schrödinger 图像.

被动观点: 在 (6) 式中, 将酉变换  $U(t)$  向左作用于  $\langle \alpha_j |$ , 令

$$\langle \alpha_j(t) | = \langle \alpha_j | U(t)$$

或者

$$|\alpha_j(t)\rangle = U^\dagger(t) |\alpha_j\rangle \quad (7)$$

(7) 式描述的是  $|\alpha_j\rangle$  的变换.

在几率  $p_j(t)$  的表达式 (6) 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.

在被动观点中, 系统的量子态不再改变, 随时间变化的是观测量. 观测量  $A$  随时间的变化是

$$A(t) = U^\dagger(t) A U(t) \quad (8)$$

这里, 需要对  $A$  显含时间的情形作些说明. 以  $\mathbb{C}^2$  上的力学量为例. 设系统的哈密顿量为  $H = \frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_z$ , 有待考察的观测量是  $A(t) = f(t)\sigma_x$ , 其中  $f(t)$  时间  $t$  的函数, 这就是说, 观测量  $A$  显含时间. 系统的初态是  $|\psi\rangle$ .

在主动观点中, 或者在 Schrödinger 图像中, 量子态随时间演化, 力学量没有随时间的动力学演化, 但是, 由于  $f(t)$  是时间的函数, 观测量  $A(t)$  有其自身的随时间的变化, 从  $t = 0$  时刻的  $f(0)\sigma_x$  变化到  $t$  时刻的  $f(t)\sigma_x$ .

在被动观点中, 量子态不再变化, 观测量  $A$  随时间的变化来自于两方面: 一是时间的函数  $f(t)$  随时间的变化, 这不属于动力学演化过程; 一是力学量  $\sigma_x$  随时间的演化, 这属于动力学演化过程. 观测量  $A(t)$  随时间的变化由下式给出,

$$A(0) = f(0)\sigma_x \longrightarrow A^H(t) = f(t)\sigma_x(t)$$

其中  $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$ , 并且  $\sigma_x(t) = U^\dagger(t)\sigma_x U(t)$ , 上标  $H$  表示 Heisenberg 图像.

接着考虑  $A^H(t)$  满足的微分方程, 即计算  $A^H(t)$  关于时间的导数. 显然, 在  $\frac{d}{dt}A^H(t)$  的表达式中, 有一项是

$$\frac{df(t)}{dt} U^\dagger(t)\sigma_x U(t)$$

我们把这一项记作  $\frac{\partial}{\partial t}A^H(t)$ , 即

$$\frac{\partial}{\partial t}A^H(t) = \frac{df(t)}{dt} U^\dagger(t)\sigma_x U(t) = U^\dagger(t)\frac{\partial A(t)}{\partial t}U(t) \quad (9)$$

其中  $\frac{\partial A(t)}{\partial t} := \frac{df(t)}{dt}\sigma_x$ , 而  $\frac{d}{dt}A^H(t)$  的其余部分来自于  $U(t)$  和  $U^\dagger(t)$  关于时间的导数.

一般地, 当观测量显含时间的时候, 将 (8) 式写为更一般的形式,

$$A^H(t) = U^\dagger(t)A(t)U(t) \quad (10)$$

然后关于时间求导, 有

$$\frac{dA^H(t)}{dt} = \frac{dU^\dagger(t)}{dt}A(t)U(t) + U^\dagger(t)A(t)\frac{dU(t)}{dt} + \frac{\partial A^H(t)}{\partial t} \quad (11)$$

其中  $\frac{\partial A^H(t)}{\partial t}$  实际上就是  $U^\dagger(t)\frac{\partial A(t)}{\partial t}U(t)$ . 为了给出  $\frac{dU(t)}{dt}$  和  $\frac{dU^\dagger(t)}{dt}$  的形式, 考虑 Schrödinger 方程,

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

考虑到  $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$ , 将 Schrödinger 方程改写为

$$i\hbar\frac{dU(t)}{dt}|\psi(0)\rangle = HU(t)|\psi(0)\rangle$$

上述方程对于任意初态  $|\psi(0)\rangle$  均成立, 所以有

$$i\hbar\frac{dU(t)}{dt} = HU(t)$$

这便是  $U(t)$  满足的方程<sup>1</sup>, 对方程的两端作厄密共轭, 得到  $U^\dagger(t)$  满足的方程. 回到 (11) 式, 有

$$\begin{aligned}\frac{dA^H(t)}{dt} &= -\frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t)HA(t)U(t) + \frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t)A(t)HU(t) + U^\dagger(t)\frac{\partial A(t)}{\partial t}U(t) \\ &= -\frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t)HU(t)U^\dagger(t)A(t)U(t) + \frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t)A(t)U(t)U^\dagger(t)HU(t) + U^\dagger(t)\frac{\partial A(t)}{\partial t}U(t)\end{aligned}$$

在上式右端, 出现了  $U^\dagger(t)HU(t)$  和  $U^\dagger(t)A(t)U(t)$ , 它们分别是被动观点中  $t$  时刻的哈密顿量和观测, 也就是

$$H^H(t) = U^\dagger(t)HU(t), \quad A^H(t) = U^\dagger(t)A(t)U(t)$$

当哈密顿量不显含时间的时候, 才有  $H^H(t) = H$ .

至此得到 Heisenberg 运动方程

$$\boxed{\frac{dA^H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A^H(t), H^H] + \left(\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right)^H} \quad (12)$$

其中

$$\left(\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right)^H = U^\dagger(t)\frac{\partial A(t)}{\partial t}U(t)$$

这也就是我们在 (9) 式中写过的  $\frac{\partial A^H(t)}{\partial t}$ .

可以将 Heisenberg 运动方程 (12) 与力学量的期望值的方程 (3) 比较.

**守恒量, 运动常数**

从 Heisenberg 运动方程 (12) 可以看出, 如果  $\frac{dA^H(t)}{dt} = 0$ , 那么力学量  $A$  是守恒量.

特别地, 如果观测量不显含时间, 即  $\frac{\partial A(t)}{\partial t} = 0$ , 那么

$$[A^H, H^H] = 0 \implies A \text{ 是守恒量}$$

如果进一步地,  $H$  不显含时间, 即  $H^H(t) = H$ , 那么  $[A^H(t), H] = 0$  就意味着  $A$  是守恒量, 注意到

$$[A^H(t), H] = [U^\dagger(t)AU(t), H] = U^\dagger(t)[A, H]U(t)$$

上式的第二个等号用到了 (当哈密顿量不显含时间的时候)  $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$  以及  $[U(t), H] = 0$ , 于是,

$$\frac{\partial A(t)}{\partial t} = 0 \ \& \ [A, H] = 0 \implies A \text{ 是守恒量}$$

也可以在主动观点的 Schrödinger 绘景中说守恒量. 如果对于任意量子态  $\rho$ ,

$$\frac{d\langle A \rangle_\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle_\rho + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle_\rho = 0$$

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.

<sup>1</sup> 当哈密顿量  $H$  显含时间的时候, 该方程很难求解.

## Heisenberg 图像, $\mathbb{C}^2$ 空间

以自旋 1/2 粒子在磁场中运动为例. 令

$$U(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} = \mathbb{1} \cos \frac{\omega t}{2} - i\sigma_z \sin \frac{\omega t}{2} = \text{diag} \left( e^{-i\frac{\omega t}{2}} \quad e^{i\frac{\omega t}{2}} \right)$$

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,

$$\rho(0) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \sigma_x \sin \theta \cos \phi + \sigma_y \sin \theta \sin \phi + \sigma_z \cos \theta)$$

⇓

$$\rho(t) = \frac{1}{2}[\mathbb{1} + U(t)\sigma_x U^\dagger(t) \sin \theta \cos \phi + U(t)\sigma_y U^\dagger(t) \sin \theta \sin \phi + U(t)\sigma_z U^\dagger(t) \cos \theta]$$

$$U(t)\sigma_x U^\dagger(t) = \sigma_x \cos \omega t + \sigma_y \sin \omega t$$

$$U(t)\sigma_y U^\dagger(t) = -\sigma_x \sin \omega t + \sigma_y \cos \omega t$$

$$U(t)\sigma_z U^\dagger(t) = \sigma_z$$

⇓

$$\rho(t) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \sigma_x \sin \theta \cos(\phi + \omega t) + \sigma_y \sin \theta \sin(\phi + \omega t) + \sigma_z \cos \theta)$$

$$\mathbf{r}(0) = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{r}(t) = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos(\phi + \omega t) & \sin \theta \sin(\phi + \omega t) & \cos \theta \end{pmatrix}$$

在上述计算中, 出现了对  $\sigma_x$  的变换,  $U(t)\sigma_x U^\dagger(t)$ , 以及类似的对  $\sigma_y$  的变换. 但这只是数学推导中遇到的一个计算过程, 并不意味着  $\sigma_x$  或  $\sigma_y$  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  $\rho$  的具体形式的时候, 我们应该将它表示为

$$\rho(t) = \frac{1}{2}[\mathbb{1} + r_x(t)\sigma_x + r_y(t)\sigma_y + r_z(t)\sigma_z] \tag{13}$$

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 (13) 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

$$\mathbf{r}(t) = \text{Rotation}(z, \omega t) \mathbf{r}(0)$$

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,  $\sigma_x$  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.

## 几何相

两个量子态,  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ , 二者的相位差定义为<sup>2</sup>.

$$\gamma = \arg \langle\psi_1|\psi_2\rangle \quad (14)$$

这是总的相位差, 可以在干涉仪中观察到.

内积的模  $|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|$  衡量了两个量子态的重叠程度, 内积的幅角  $\arg \langle\psi_1|\psi_2\rangle$  给出了两个量子态的相位差.

当两个量子态正交的时候, 即  $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$ , 相位差无法确定.

<sup>2</sup>S. Pancharatnam, Generalized theory of interference, and its applications. Proc. Indian Acad. Sci. **44**, 247-262 (1956).

**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

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\frac{\omega t}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle \quad (15)$$

$|\psi(0)\rangle$  和  $|\psi(t)\rangle$  的内积是

$$\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle = \cos \frac{\omega t}{2} - i \cos \theta \sin \frac{\omega t}{2} = w e^{i\gamma},$$

$$w = \sqrt{\cos^2 \frac{\omega t}{2} + \cos^2 \theta \sin^2 \frac{\omega t}{2}},$$

$$\gamma = -\arctan \left[ \cos \theta \tan \frac{\omega t}{2} \right].$$

## 几何相

系统的量子态从  $t = 0$  时的初态  $|\psi(0)\rangle$  演化到  $t$  时刻的  $|\psi(t)\rangle$ , 相位的变化是  $\gamma(t) = \arg \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle$ . 我们知道, 量子态随时间的演化是一个动力学过程, 系统的哈密顿量是演化的生成元. 考虑动力学演化带来的相位的改变, 称之为动力学相, 记作  $\gamma_d(t)$ .

### 动力学相 $\gamma_d(t)$ 能否等于 $\gamma(t)$ ?

所谓动力学相, 顾名思义, 就是系统的动力学演化导致的相位改变.

先考虑无穷小过程, 从  $t$  到  $t + dt$ .  $|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi(t + dt)\rangle$ . 动力学相位的改变是

$$d\gamma_d = \arg \langle \psi(t) | \psi(t + dt) \rangle$$

注意到

$$|\psi(t + dt)\rangle = |\psi(t)\rangle + |\dot{\psi}(t)\rangle dt, \quad (16)$$

$$\langle \psi(t) | \psi(t + dt) \rangle = 1 + \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle dt \quad (17)$$

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

$$d\gamma_d(t) = \arctan \left( -i \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle dt \right) \approx -i \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle dt,$$

$$\dot{\gamma}_d = -i \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle$$

从  $t = 0$  到  $\tau$  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,

$$\gamma_g(\tau) = \gamma(\tau) - \gamma_d(\tau) \quad (18)$$

**例** 对于  $t$  时刻的量子态 (15),

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi(0)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}} \cos \frac{\theta}{2} |0\rangle + e^{i\frac{\omega t}{2}} \sin \frac{\theta}{2} |1\rangle$$

动力学相是

$$\gamma_d(\tau) = -i \int_0^\tau \left( -i\frac{\omega}{2} \right) \cos \theta dt = -\frac{\omega\tau}{2} \cos \theta$$

几何相  $\gamma_g(\tau)$ ,

$$\begin{aligned} \gamma_g(\tau) &= \gamma(\tau) - \gamma_d(\tau) \\ &= -\arctan \left[ \cos \theta \tan \frac{\omega\tau}{2} \right] + \frac{\omega\tau}{2} \cos \theta \end{aligned}$$

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  $\gamma_d(T) = -\pi \cos \theta$ ,

$$\gamma_g(T) = \pi(1 + \cos \theta) \pmod{2\pi}.$$

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.

## Hilbert 空间和投影空间

这部分内容尚在整理中.