

# Table of Contents

<b>1</b>	<b>State Vector Formalism</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Postulates of Quantum Mechanics</b>	<b>7</b>
2.1	正文 . . . . .	7
2.2	课后习题 . . . . .	11
2.3	课后习题解答 . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Heisenberg Picture</b>	<b>16</b>
3.1	正文 . . . . .	16
3.2	例子 . . . . .	17
3.2.1	玻色子的产生算符和消灭算符 . . . . .	17
<b>4</b>	<b>Tensor Product, Density Matrix and Partial Trace</b>	<b>22</b>
4.1	Tensor Product . . . . .	22
4.2	Density Matrix . . . . .	26
4.2.1	系综的概念与其表示方法 . . . . .	26
4.2.2	密度矩阵随时间的演化 . . . . .	29
4.3	Partial Trace . . . . .	29
<b>5</b>	<b>Interaction Picture and Integro-differential form of S.E.</b>	<b>32</b>
5.1	Comments on Tensor . . . . .	32
5.2	Interaction Picture . . . . .	32
5.3	Integro-differential form of S.E. . . . .	34
5.3.1	积分微分方程的正规形式 . . . . .	34
5.3.2	一些假设 . . . . .	34



# 1 State Vector Formalism

根据哥本哈根诠释 (**Copenhagen Interpretation**, 现今主流的量子力学观点), 微观系统的状态可由一系列向量表示, 称为态向量 (**State Vector**)。取其中的一个向量  $\vec{\psi}$  进行研究, 在量子力学中, 将其重新改写为右矢 (**Ket Vector**) 的形式:

$$|\psi\rangle, |\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (1.1)$$

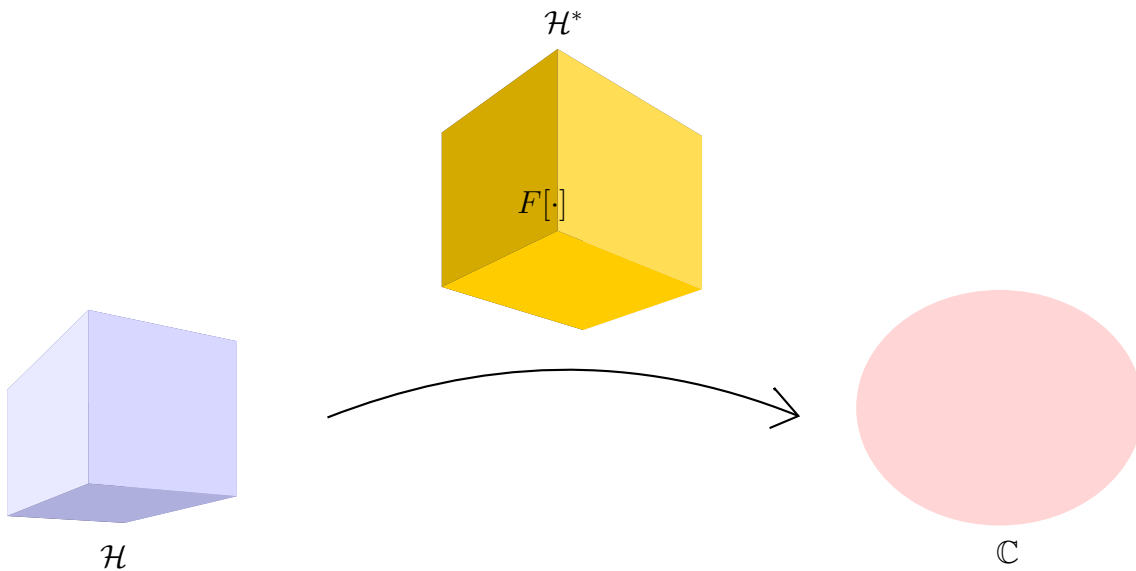
$\mathcal{H}$  表示的是希尔伯特空间 (**Hilbert Space**), 是向量空间的其中一种, 定义为“带有内积的完备向量空间”。内积空间的完备性对于量子物理来说不是特别重要, 因此就不过多赘述了。但“内积”这个概念在量子力学中举足轻重, 值得讨论一番。在介绍“内积”之前, 首先要先引入线性泛函 (**Linear Functional / Linear Form / One-form**) 这个概念: 泛函 (**Functional**), 可以粗浅地理解为函数的函数。它的“操作”对象为函数 (希尔伯特空间中可用向量表示), 得到的结果为复空间 ( $\mathbb{C}$ ) 中的一个标量, 记为:

$$F[|\vec{\psi}\rangle] = C, \quad C \in \mathbb{C} \quad (1.2)$$

而线性泛函的集合组成了原  $\mathcal{H}$  空间的对偶空间 (**Dual Space**), 记作  $\mathcal{H}^*$ , 相应的泛函用映射关系表示为:

$$F : \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C} \quad (1.3)$$

关系图如下所示:



**Figure 1.1:** 泛函形成的对偶空间的示意图

举几个简单的例子: 当一个三维列向量  $\vec{x}$  作为  $\mathcal{H}$  的元素时, “横向量左点乘”:  $\vec{y} \cdot$  就是

一个位于其对偶空间  $\mathcal{H}^*$  的泛函，因为

$$F[\vec{x}] \equiv \vec{y} \cdot \vec{x} = \begin{pmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

$$= y_1 x_1 + y_2 x_2 + \dots + y_n x_n = C, \quad C \in \mathbb{C}$$

其结果为一个复数。又例如，当一个函数  $\psi(x)$  为  $\mathcal{H}$  的元素时，“乘以某个函数再在整个定义域内积分”  $\int_{-\infty}^{\infty} \phi \cdot$  也是一个泛函：

$$F[\vec{x}] \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \phi \cdot \psi = C, \quad C \in \mathbb{C} \quad (1.5)$$

在量子力学中，泛函常用左矢 (**Ket Vector**) 的方式表示：

$$\langle \phi |, \quad \langle \phi | \in \mathcal{H}^* \quad (1.6)$$

把左矢和右矢写在一起，就是对右矢进行一次泛函“操作”，并得到一个复数。这样的“操作”也被称为内积 (**Inner Product**):

$$\langle \phi | \psi \rangle = C, \quad C \in \mathbb{C} \quad (1.7)$$

也就是说，内积既可以表示行列向量的相乘，也可以表示两个函数相乘后的积分，等等等等，是一个比线性代数中的点乘更为宽泛的概念。

除了一般向量空间有的性质（即加法和数乘运算）以外，希尔伯特空间的内积运算还满足以下特点：

1. 共轭对称性：

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^* \quad (1.8)$$

2. 右矢线性

$$\langle \phi | (\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 \langle \phi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \phi | \psi_2 \rangle \quad (1.9)$$

3. 可归一性

$$\langle \psi | \psi \rangle = p[|\psi\rangle], \quad p \in \mathbb{R}, \quad p \geq 0 \quad (1.10)$$

其中  $p$  为范数 (**Norm**)。令

$$|\psi'\rangle = \frac{|\psi\rangle}{p[|\psi\rangle]} \quad (1.11)$$

则可将向量归一化。当且仅当  $|\psi\rangle = \vec{0}$  时， $\langle \psi | \psi \rangle = 0$ 。

描述一个空间中的元素，基 (**Basis**) 的概念必不可少。像三维空间里面的笛卡尔坐标系一样，一个向量  $(x, y, z)$  其实是通过三个相互垂直且归一化的基  $(1, 0, 0)$ ,  $(0, 1, 0)$  和

(0,0,1) 来确定的。在希尔伯特空间里，我们仿照这个思想，选取一系列的规范正交 (**orthonormal**) 的向量  $\{|u_i\rangle\}$  作为该空间的基，即这些向量之间满足：

$$\langle u_j | u_i \rangle = \delta_{ji}. \quad (1.12)$$

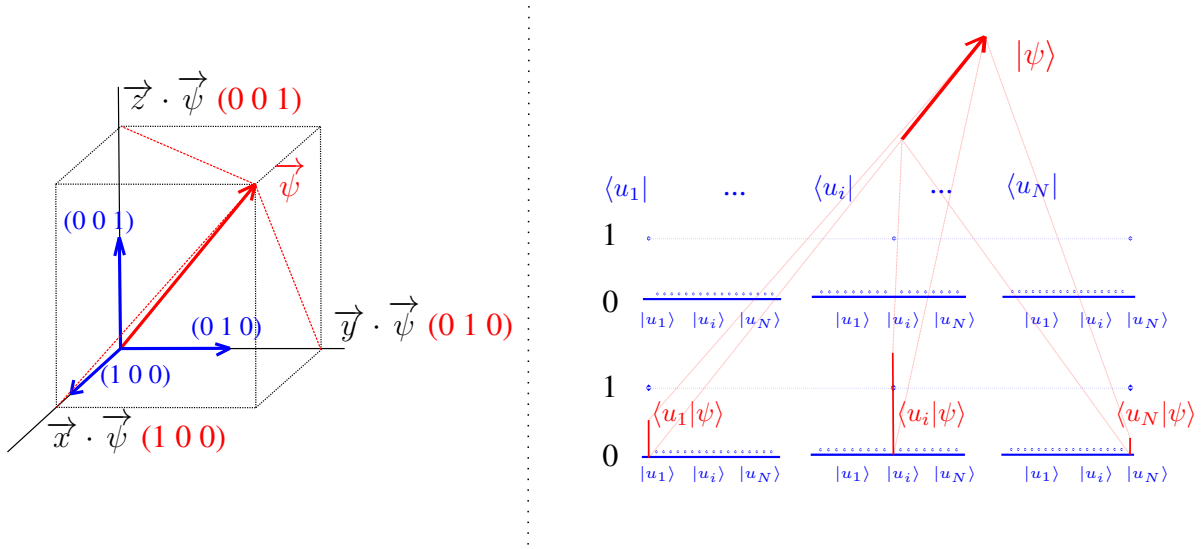
类比在三维空间中的做法，要获取某向量在这个基中的对应分量或坐标，采取的是投影 (**Projection**) 操作：

$$\langle u_i | \psi \rangle |u_i\rangle = |u_i\rangle \langle u_i | \psi \rangle \quad (1.13)$$

其中对应的坐标  $c_i = \langle u_i | \psi \rangle$ ，故右矢可表示为

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad (1.14)$$

投影操作如Figure 1.2所示：



**Figure 1.2:** 三维空间和希尔伯特空间中的投影对比

对应的在对偶空间的基为  $\langle u_i |$ ，故左矢可表示为：

$$\langle \psi | = \sum_i c_i^* \langle u_i | \quad (1.15)$$

投影操作记为  $|u_i\rangle \langle u_i|$ ，是希尔伯特空间中向量外积 (**Outer Product**) 的结果。将空间中所有投影进行求和，若该操作具有闭包性 (**Closure**) 和完备性 (**Completeness**)，则称该操作为全同操作 (**Identity**)：

$$\begin{aligned} \hat{I} &= \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| \\ \hat{I}|\psi\rangle &= \sum_i |u_i\rangle \langle u_i | \psi \rangle = |\psi\rangle \end{aligned} \quad (1.16)$$

上述的一些定义也可以推广到连续基的情况，两者的比较如下：

1. 正交规范基：

$$\langle u_j | u_i \rangle = \delta_{ji} \quad \Leftrightarrow \quad \langle \omega_\alpha | \omega_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha, \alpha') \quad (1.17)$$

2. 向量在基上的分解：

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle, \quad c_i = \langle u_i | \psi \rangle \quad \Leftrightarrow \quad |\psi\rangle = \int c(\alpha) |\omega_\alpha\rangle d\alpha, \quad c(\alpha) = \langle \omega_\alpha | \psi \rangle \quad (1.18)$$

3. 全同操作：

$$\hat{I} = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| \quad \Leftrightarrow \quad \hat{I} = \int |\omega_\alpha\rangle \langle \omega_\alpha| d\alpha \quad (1.19)$$

观察得出，上述的“全同操作”以一个向量为对象，得到的结果也是一个向量。这种操作在量子力学中被称为算子 (**Operator**)

$$\hat{O}|\psi\rangle = |\psi'\rangle, \quad |\psi\rangle, |\psi'\rangle \in \mathcal{H} \quad (1.20)$$

而量子力学中常用到的都是线性算子，具有以下特性：

$$\hat{O}(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 \hat{O}|\psi_1\rangle + \lambda_2 \hat{O}|\psi_2\rangle \quad (1.21)$$

当算子作用在基向量  $|u_i\rangle$  上时，得到的向量  $|\chi\rangle$  很大几率不再是基向量，但还是可以写成同一组基向量  $\{u_j\}$  的线性组合，因为结果最终仍在同一个希尔伯特空间里。其中对应的系数为  $O_{ji}$ ：

$$\hat{O}|u_i\rangle = \sum_j |u_j\rangle O_{ji} \quad (1.22)$$

将上式两端左乘一系列左矢  $\langle u_k|$ ，就可以求出系数的值：

$$\langle u_k | \hat{O} | u_i \rangle = \langle u_k | \sum_j |u_j\rangle O_{ji} = \sum_j \langle u_k | u_j \rangle O_{ji} = O_{ki} \quad (1.23)$$

由于每个系数的下标都是由两个数字  $i, j$  组成的，故可以把它们拼成一个矩阵  $\mathbf{O}$ ，其中第  $i$  行，第  $j$  列的元素  $(\mathbf{O})_{ij}$  为：

$$(\mathbf{O})_{ij} = O_{ij} = \langle u_i | \hat{O} | u_j \rangle \quad (1.24)$$

和线性代数里面的矩阵一样，交换两个矩阵的位置一般会影响最终的结果。同理，交换两个线性算子一般也会影响最终的运算结果。定义交换前后运算结果的差异为交换子 (**Commutator**)，记作：

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (1.25)$$

对应的矩阵的表示形式为：

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \quad (1.26)$$

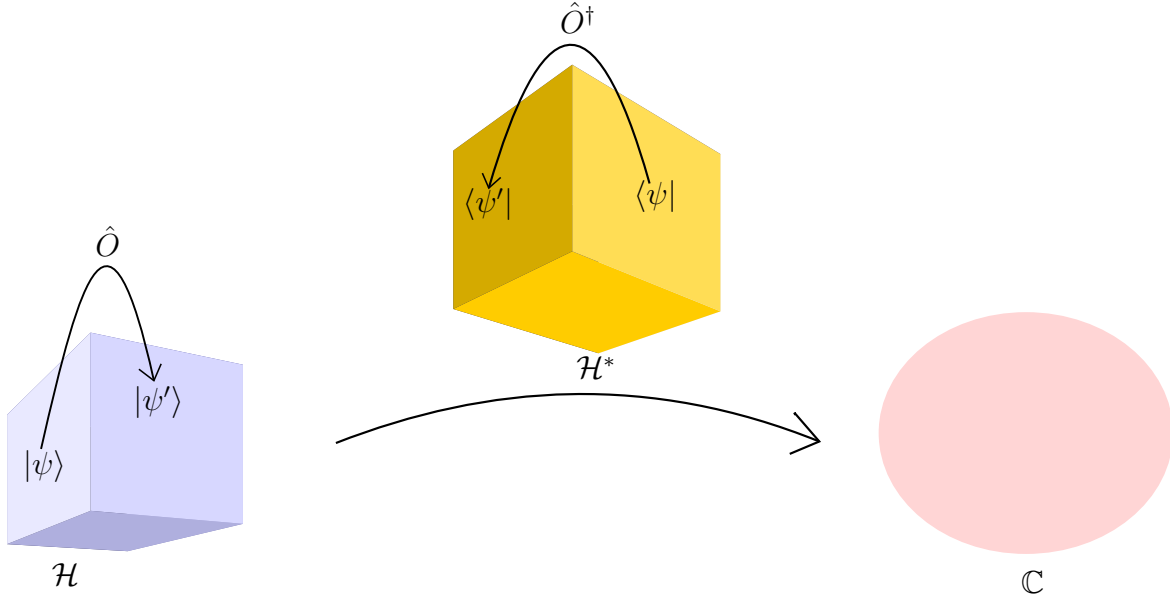
在最基本的情况下，线性算子将一个希尔伯特空间里的向量转换成另外一个同一空间的向量：

$$\hat{O}|\psi\rangle = |\psi'\rangle, \quad \hat{O} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \quad (1.27)$$

定义线性算子  $\hat{O}$  的埃尔米特伴随/厄米伴随 (**Hermitian Adjoint**) 如下：

$$\langle\psi|\hat{O}^\dagger = \langle\psi'|, \quad \hat{O}^\dagger : \mathcal{H}^* \rightarrow \mathcal{H}^* \quad (1.28)$$

关系如Figure 1.3所示：



**Figure 1.3:** 右矢在希尔伯特空间中的变换以及左矢在对应对偶空间中的变换

伴随具有以下性质：

1. 对合性 (**Involutivity**): 即伴随的伴随为自身

$$(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \quad (1.29)$$

2. 反线性 (**Anti-linearity**):

$$(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger \quad (1.30)$$

$$(\lambda A)^\dagger = \lambda^* \hat{A}^\dagger \quad (1.31)$$

其中  $\lambda^*$  为  $\lambda$  的复共轭。

3. 反分配律 (**Anti-Distributivity**):

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger \quad (1.32)$$

4. 厄米伴随不仅适用于方阵，也适用于一般矩阵，也适用于行列向量，那么对于外积来说立刻有以下结论：

$$(|\phi\rangle\langle\psi|)^\dagger = |\psi\rangle\langle\phi| \quad (1.33)$$

当一个算子的伴随等于自身时，将这样的算子称为自伴随算子 (**Self-Adjoint Operator**) 或厄米算子 (**Hermitian Operator**)

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \quad (1.34)$$

算子在物理上又被称为可观察量 (**Observable**)。一个微观系统，它的状态由向量  $|\psi\rangle$  记录着，而我们若想要对其某样性质进行观测，就要选用合理的算子，作用在这个向量上，就例如要测足球的速度，我们可以记录其通过两扇光电门的时间求得；要测足球的位置，我们可以让扫地阿姨把整个球场扫一遍，扫帚碰到阻碍的那个位置就是足球的位置；但是很可惜的是，微观系统由于太过微观，我们所有的检测手段都会对其本身的状态产生影响，使得观察过后的系统只会处在某几个特定的状态，称为本征态 (**Eigenstate**)。对本征态进行观测，得到的结果为本征态的若干倍，则称该倍数为本征值 (**Eigenvalue**)，为我们观测量的数值结果。用数学的语言再表述一遍：当且仅当

$$\hat{A}|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle \quad (1.35)$$

$|\alpha\rangle$  为  $\hat{A}$  的本征向量,  $a$  为  $\hat{A}$  的本征值。

由于物理学中的观测值都为实数，因此厄米算子在物理里面具有非常重要的地位，因为它的本征值为实数：

$$\begin{aligned} a &= a\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|a|\alpha\rangle \\ &= \langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle \\ &= \langle\alpha|\hat{A}^\dagger|\alpha\rangle \\ &= (\langle\alpha|\hat{A}|\alpha\rangle)^* = a^* \end{aligned} \quad (1.36)$$

一个算子的本征值的数量，本征向量的数量以及本征向量所处所在的希尔伯特空间的维度有以下关系：

$$N(a) \leq N(|\psi\rangle) \leq \text{Dim}(\mathcal{H}) \quad (1.37)$$

当  $N(a) < N(|\psi\rangle)$  时，即有重复的本征值时，说明了有简并的 (**degenerate**) 本征态共用同一个本征值。在线性代数里面一个很重要的结论是：一个矩阵的本征向量都是相互正交的（有兴趣可以看下面红框部分的证明），因此经过处理后的本征向量常常被用于做基向量。

同一算子的本征态相互正交

需要分为两种情况去讨论：（1）本征值不相同的本征向量必定正交，以及（2）本征值相同的本征向量可以被正交化

（1）本征值不相同的本征向量必定正交



## 2 Postulates of Quantum Mechanics

在上一节中我们为了介绍态向量不可避免地提前剧透了一些量子力学公设，在本节中将会把这些公设重新一条条归纳，并加入对应例子，方便大家的理解。

### 2.1 正文

公设 I. 微观粒子遵循薛定谔方程 (Schrödinger Equation)。

微观粒子的行为遵循薛定谔方程，其中最深入人心，也最容易让人理解的形式是波函数的形式：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t) \quad (2.1)$$

经典力学中，系统的位置  $x$ ，动量  $p$  在确定的势能场里，在某个给定时刻  $t$  都是唯一确定的。微观粒子中在特定时刻里面也有能确定的东西，就是所谓的“状态”  $\psi$ 。“状态”包罗万象，而在特定位置出现的概率幅 (Probability Amplitude)  $\psi(\vec{x}, t)$  则是能从其中提取出来的一项信息，且与波的行为具有高度相似性，故从这个层面上来说微观粒子具有波性（见下文：以正弦波为例引出薛定谔方程）。概率幅本身不具有物理意义，但其绝对值的平方等于粒子在位置  $\vec{x}$ ， $t$  时刻内找到该粒子的概率：

$$P(\vec{x}, t) = \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) = |\psi(\vec{x}, t)|^2 \quad (2.2)$$

摒弃其位置信息，薛定谔方程同样也适合用于表述“状态”本身，用右矢的符号  $|\psi(t)\rangle$  来表示“状态”，故 eq. (2.1) 可以改为更广义的形式：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (2.3)$$

其中  $\hat{H}$  为哈密顿算符 (Hamiltonian)，是与系统能量相关的一个算符。

波动力学角度引出薛定谔方程

想象一列在  $x$  方向上传播的正弦波：

$$\psi(x, t) = A \cdot e^{-i2\pi(\nu t - \frac{x}{\lambda})} \quad (2.4)$$

公设 II. 微观粒子的状态可以用向量表示。

上述的特定时刻  $t$  的“状态”可以用希尔伯特空间  $\mathcal{H}$  内的向量  $|\psi(t)\rangle$  来表示，或者说，满足与向量一样的运算法则。量子系统的“状态”为何在“本质上”和向量是相同的东西，不是本教程讨论的内容。但包含其位置信息  $\vec{x}$  的波函数可以用向量来表示，这是毋庸置疑的，具体的例子可以看下面灰框内的内容：

函数是如何写成向量的？

以往我们都是把一维函数  $f(x)$  考虑成一个从一维空间到一维空间的映射，即  $f: \mathbb{R}^1 \rightarrow \mathbb{R}^1$ 。现在不妨换另外一个思路，把  $x$  轴上的每个点，都看作一个一个的基向量  $|x_i\rangle$ ，而映射  $f$  本身（不是  $f(x)$ ）则可以看成一个右矢  $|f\rangle$ ，可以用基表示出来。在离散的情况下，假设一共有  $N$  个基向量，则映射  $|f\rangle$  可以写成：

$$|f\rangle = \sum_{i=1}^N f(x_i) |x_i\rangle = \begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_N) \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

对应的示意图如Figure 2.1所示。

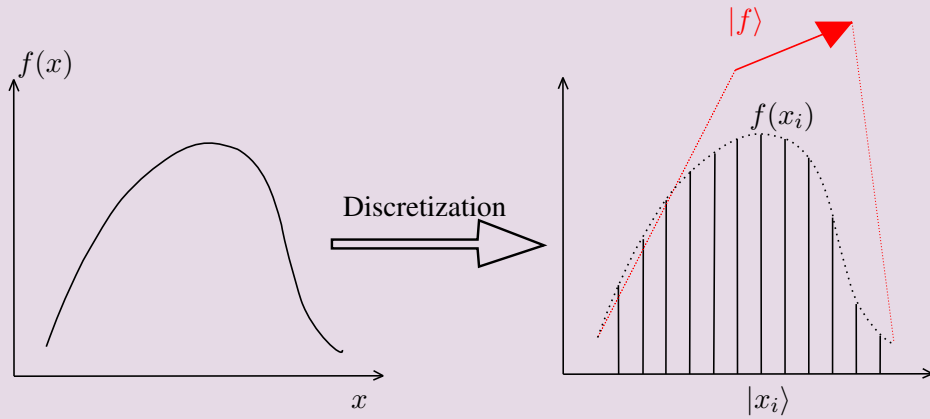


Figure 2.1: 函数的向量表示

以向量的角度，可以重新定义关于位置的函数：

$$f(x) \equiv \langle x | f \rangle \quad (2.6)$$

很容易得出函数满足线性关系：

$$\begin{aligned} (f + g)(x) &= f(x) + g(x) \\ \langle x | (|f\rangle + |g\rangle) &= \langle x | f \rangle + \langle x | g \rangle \end{aligned} \quad (2.7)$$

另外一个很有意思的结论是：两函数的内积等于两函数相乘后积分：也就是说，函数的内积，并不是如第一节里所说的，仅仅是一个强行定义的概念，而是真的与向量点乘有更加密切的联系。首先先考虑离散情况：

$$\begin{aligned} \langle g | f \rangle &= \langle g | \sum_{i=1}^N |x_i\rangle f(x_i) = \sum_{i=1}^N \langle g | x_i \rangle f(x_i) \\ &= \sum_{i=1}^N g^*(x_i) \cdot f(x_i) = \begin{pmatrix} g^*(x_1) & g^*(x_2) & \cdots & g^*(x_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.8)$$

同理将 eq. (1.18) 中的连续情况代入到上述证明中，可得：

$$\begin{aligned}\langle g|f\rangle &= \langle g|\int |x\rangle f(x)dx \\ &= \int \langle g|x\rangle f(x)dx = \int g^*(x)f(x)dx\end{aligned}\quad (2.9)$$

故函数的内积与其积分具有非常深刻的联系。：)

公设 III. 微观系统的可观测量是通过作用在系统的算子来获得的。

前面已经提到过了，右矢  $|\psi\rangle$  本身包罗万象，而其物理性质，或者能被观测到的物理量，是通过依靠不同的算子  $\hat{O}$  作用在状态上来获得的。而在上一节 eq. (1.27) 已经提到过了，将一个算子作用于右矢上，得到的结果还是同一个空间中的右矢，例如哈密顿算符：

$$\hat{H}|\psi\rangle = |\psi_N\rangle \quad (2.10)$$

角动量平方算符：

$$\hat{L}^2|\psi\rangle = |\psi_L\rangle \quad (2.11)$$

以及角动量算符的  $z$  分量：

$$\hat{L}_z|\psi\rangle = |\psi_M\rangle \quad (2.12)$$

等等..... 上述的这些算符具体的物理意义，等到以后将氢原子模型的时候再细细探讨。现在只需要接受“向量可以表示量子系统”，或者“量子系统符合向量的运算法则”这个设定即可。

公设 IV. 单次观测的最终结果只可能是算子的本征值。

接受了公设 II 和公设 III 的设定以后，算子自然而然的就可以用矩阵表示出来 (eq. (1.24))。而由于物理学里的可观测量是厄米算子 (eq. (1.34))，且特征向量都相互正交，因此上述经过算子处理后的向量可以写成特征向量  $|\alpha_i\rangle$  的线性组合：

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle = \sum_{i=1}^N \Re(a_i) \cdot a_i |\alpha_i\rangle \quad (2.13)$$

这里的  $\Re(a_i)$  我们先把它看作一个待定系数。

邪门的事情就发生在这里了。由于微观粒子过于小，以至于任何观测手段将会对其本身状态产生影响，使其坍缩到某一个本征态  $|\alpha_i\rangle$  上，得到的观测值则为对应的本征值  $a_i$ ，如 Figure 2.2 所示。而在观测后再次采取相同的测量手段进行测量时，得到的结果 100% 是原来的本征值  $a_i$ ；而改变测量手段后（使用另一个不对易的算子），又会重新以一定几率坍缩到其他状态  $|\beta_j\rangle$ ，如 Figure 2.3 所示。

这里再举一个光的双折射现象作为例子，以便大家理解。

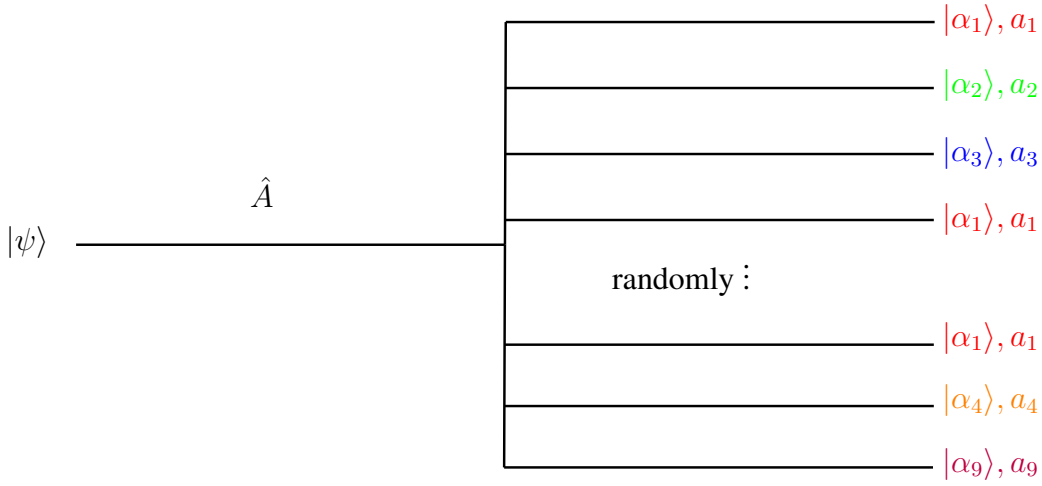


Figure 2.2: 量子态在测量后的随机坍缩

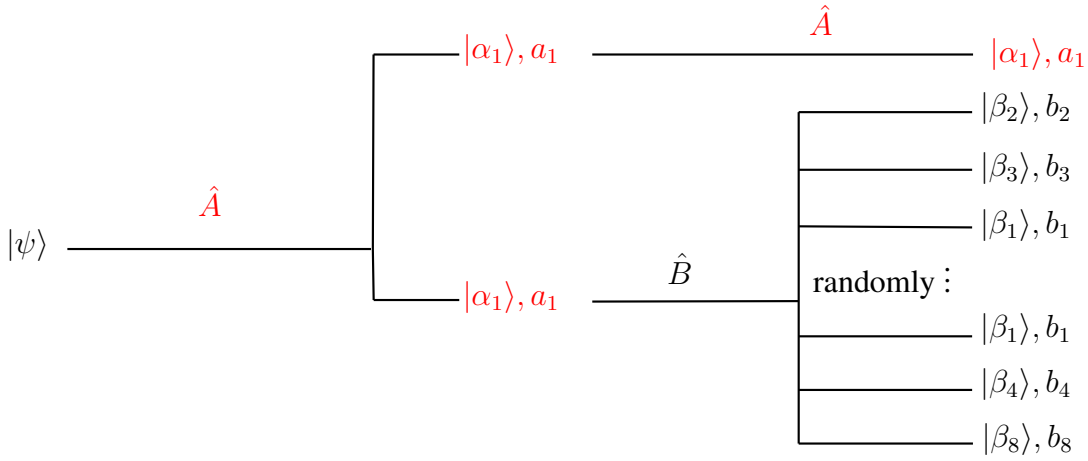


Figure 2.3: 量子态坍缩后再次测量的影响

光的双折射

冰洲石是一种双折射晶体

公设 V. 经过测量后粒子的状态将以一定概率  $P(a_i)$  坍缩到某个本征态  $|\alpha_i\rangle$  上，得到本征值  $a_i$ 。而这个概率  $P(a_i)$  为：

$$P = \mathfrak{P}^* \mathfrak{P} \quad (2.14)$$

$$\mathfrak{P}(a_i) = \langle \alpha_i | \psi \rangle \quad (2.15)$$

这与上一节中基的分解 eq. (1.18) 完全一致，故原向量可以表示成结果向量的线性组合

$$|\psi\rangle = \mathfrak{P}(a_i) |\alpha_i\rangle \quad (2.16)$$

可以证明，这里的概率幅  $\mathfrak{P}(a_i)$  正是 eq. (2.13) 中的待定系数。将 eq. (2.13) 左边左乘一个左矢  $\langle \alpha_k |$ ，可得：

$$\begin{aligned}\langle \alpha_k | \hat{A} | \psi \rangle &= (\langle \psi | \hat{A} | \alpha_k \rangle)^* \\ &= (a_k \langle \psi | \alpha_k \rangle)^* \\ &= a_k^* \langle \alpha_k | \psi \rangle \\ &= \mathfrak{P}(a_k) a_k\end{aligned}\tag{2.17}$$

公设 VI. 经过测量后的状态是归一的，即

$$\langle \alpha_i | \alpha_i \rangle = 1\tag{2.18}$$

目的是为了满Figure 2.3中所描述的情况：当刚好测量到算子  $\hat{A}$  的某一个本征态  $|\alpha_1\rangle$  时，本征态不会再改变，且测量的结果必定为对应的本征值  $a_1$ ，即 100% 的概率观测到  $|\alpha_1\rangle$ ，因为：

$$\begin{aligned}\langle \alpha_1 | \hat{A} | \alpha_1 \rangle &= \langle \alpha_1 | \sum_{i=1}^N \mathfrak{P}(a_i) \cdot a_i | \alpha_i \rangle \\ &= \mathfrak{P}(a_1) a_1 \langle \alpha_1 | \alpha_1 \rangle = a_1\end{aligned}\tag{2.19}$$

所以当  $\langle \alpha_i | \alpha_i \rangle = 1$  成立时，每次观测到  $a_1$  的概率幅  $\mathfrak{P}(a_1)$  才会等于 1，从而概率  $P(a_1)$  也才会等于 1。由此也可以引申出用算子  $\hat{A}$  对状态处于同一量子态  $|\psi\rangle$  的微观系统多次观测后的（量子）平均值：

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_i^N P(a_i) a_i\tag{2.20}$$

## 2.2 课后习题

1. (a) 证明

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \phi(t) \rangle = 0\tag{2.21}$$

(b) 证明时间平移算符 (**Time Evolution**):  $\hat{U}(t) \equiv \partial/\partial t$ , 为幺正算子 (**Unitary Operator**), 即

$$\hat{U}^\dagger(t) \hat{U}(t) = \hat{I}\tag{2.22}$$

其中时间平移算符的定义为：

$$\hat{U}(t) |\psi(t_1)\rangle = |\psi(t_1 + t)\rangle\tag{2.23}$$

(c) 考虑哈密顿量  $\hat{H}$  不随时间变化的情况，使用哈密顿量  $\hat{H}$  的本征值  $E_i$  和本征态  $|E_i\rangle$  来表示时间平移算符  $\hat{U}(t)$

2. 证明埃伦费斯特定理: (**Ehrenfest Theorem**):

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle \quad (2.24)$$

### 2.3 课后习题解答

1. (a) 不妨用把右矢  $|\phi(t)\rangle$  重新拆分, 看成系数随时间变化, 但本身恒定不变基矢的叠加, 即:

$$|\phi(t)\rangle = \sum_i^N C_i(t) |u_i\rangle \quad (2.25)$$

同理, 左矢则可看作:

$$\langle\psi(t)| = \sum_i^N D_i^*(t) \langle u_i| \quad (2.26)$$

然后就不难理解薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\phi(t)\rangle \quad (2.27)$$

以及其对偶形式了:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\psi(t)| = \langle\psi(t)| \hat{H}^\dagger(t) \quad (2.28)$$

使用微分的分配率可得:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle\psi(t)|\phi(t)\rangle &= \langle\psi(t)| \left( \frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle \right) + \left( \frac{d}{dt} \langle\psi(t)| \right) |\phi(t)\rangle \\ &= \langle\psi(t)| \hat{H}(t) |\phi(t)\rangle - \langle\psi(t)| \hat{H}^\dagger(t) |\phi(t)\rangle \\ &= 0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

(b) 根据时间平移算符的定义可得:

$$\langle\psi(t)|\phi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)|\phi(0)\rangle \quad (2.30)$$

由 (a) 可知,  $d/dt \langle\psi(t)|\phi(t)\rangle = 0$ , 所以

$$\langle\psi(t)|\phi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\phi(0)\rangle \quad (2.31)$$

故 eq. (2.22) 成立。

(c) 将  $|\psi(t)\rangle$  在基矢  $\{|E_i\rangle\}$  上进行分解:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^N a_{E_i}(t) |E_i\rangle \quad (2.32)$$

其中

$$a_{E_i}(t) = \langle E_i | \psi(t) \rangle \quad (2.33)$$

则在  $t = 0$  时刻的状态也可分解为

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{i=1}^N a_{E_i}(0) |E_i\rangle \quad (2.34)$$

将薛定谔方程移项可得：

$$0 = \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) |\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^N \left( i\hbar \frac{d}{dt} a_{E_i}(t) - E_i a_{E_i}(t) \right) |E_i\rangle \quad (2.35)$$

因为  $|E_i\rangle$  之间是线性无关，且都不为  $\vec{0}$  向量，所以可得微分方程：

$$a_{E_i}(t) - E_i a_{E_i}(t) = 0 \quad (2.36)$$

其解为：

$$a_{E_i}(t) = a_{E_i}(0) e^{-iE_i t/\hbar} \quad (2.37)$$

或者写成：

$$\langle E_i | \psi(t) \rangle = \langle E_i | \psi(0) \rangle e^{-iE_i t/\hbar} \quad (2.38)$$

代入回 eq. (2.32) 中可得：

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^N |E_i\rangle \langle E_i | \psi(0) \rangle e^{-iE_i t/\hbar} \quad (2.39)$$

所以，时间平移算符的表达式为：

$$\hat{U}(t) = \sum_{i=1}^N |E_i\rangle \langle E_i | e^{-iE_i t/\hbar} \quad (2.40)$$

也可以写为（证明暂略）：

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (2.41)$$

一句题外话：当  $|\psi(0)\rangle$  为定态波函数时（为其中一个本征态  $|E_k\rangle$  时）上述的表达式可简化为

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_0 t/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (2.42)$$

再一句题外话：上述采用固定基矢的方法，被称为薛定谔绘景：**(Schrödinger Picture)**。另外一种维持向量本身不变，而基矢和算子随时间演变的考虑方法被称为海森堡绘景：**(Heisenberg Picture)**，在以后的教程会提到。



2. 只需要把观测值的期望值详细展开，并进行微分分配即可：

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \left( \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \right) &= \left( \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi | \right) \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} \left( \frac{\partial}{\partial t} | \psi \rangle \right) \\
 &= \frac{i}{\hbar} \langle \psi | \hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} | \psi \rangle \\
 &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle
 \end{aligned} \tag{2.43}$$

而从海森堡绘景的角度来看，上述结论可以由下面的海森堡运动公式一步到位：

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathcal{A}}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\mathcal{A}}(t)] + \left( \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \right)_H \tag{2.44}$$

至于此公式里面的各个符号代表什么意思，且听下回分解。

### 3 Heisenberg Picture

#### 3.1 正文

上回说到，在薛定谔绘景中，当体系的哈密顿量不显性含时的时候，基矢固定而量子态相对其做周期旋转运动：

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle \quad (3.1)$$

检查一下可以得知，上述  $|\psi(t)\rangle$  的表达式满足薛定谔方程（eq. (2.3)）

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle \\ &= i\hbar \cdot (-i/\hbar) \hat{H} e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\psi(0)\rangle \\ &= \hat{H} |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (3.2)$$

若哈密顿量显性与时间相关时，薛定谔绘景中的状态表示将会变得尤为困难：

$$|\psi(t)\rangle = \prod_{n=0}^{N-1} e^{-i\Delta \hat{H}(n\Delta)/\hbar} |\psi(0)\rangle, \quad \Delta = t/N \quad (3.3)$$

尽管如此，该态向量  $|\psi(t)\rangle$  仍然是符合薛定谔方程的。

一个不怎么严格的推演

由 eq. (3.3) 可以得出在  $t + \Delta$  时刻的态向量  $|\psi(t + \Delta)\rangle$ ：

$$\begin{aligned} |\psi(t + \Delta)\rangle &= \hat{U}(t + \Delta) |\psi(0)\rangle = \prod_{n=0}^N e^{-i\Delta \hat{H}(n\Delta)/\hbar} |\psi(0)\rangle \\ &= e^{-i\hat{H}(N\Delta)\Delta/\hbar} \prod_{n=0}^{N-1} e^{-i\Delta \hat{H}(n\Delta)/\hbar} |\psi(0)\rangle \end{aligned} \quad (3.4)$$

对状态进行偏导：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} |\psi(0)\rangle \\ &= \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{\hat{U}(t + \Delta) - \hat{U}(t)}{\Delta} |\psi(0)\rangle \\ &= \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{\left( e^{-i\hat{H}(N\Delta)\Delta/\hbar} - \hat{I} \right) \prod_{n=0}^{N-1} e^{-i\Delta \hat{H}(n\Delta)/\hbar}}{\Delta} |\psi(0)\rangle \end{aligned} \quad (3.5)$$

考虑等价无穷小  $(e^x - 1) \sim x$ ，则上式变成

$$\begin{aligned} &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(N\Delta) \prod_{n=0}^{N-1} e^{-i\Delta \hat{H}(n\Delta)/\hbar} |\psi(0)\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(N\Delta) |\psi(t)\rangle \end{aligned} \quad (3.6)$$

即量子态  $|\psi(t)\rangle$  以及时间平移算符  $\hat{U}(t)$  都符合薛定谔方程 eq. (2.3)，而算符  $\hat{U}(t)$  的薛定谔方程可表示为：

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\hat{U}(t) \\ \frac{\partial}{\partial t}\hat{U}^\dagger(t) &= \frac{i}{\hbar}\hat{U}^\dagger(t)\hat{H}(t)\end{aligned}\quad (3.7)$$

这里一定要注意  $\hat{U}$ ,  $\hat{H}$ ,  $\hat{U}^\dagger$  之间的排列顺序！

另一方面，海森堡则将所有的时间依赖性从量子态转移到算子上，从而将量子态固定不变：

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}(t)\rangle &= \langle\psi(t)|\hat{A}(t)|\psi(t)\rangle \\ &= \langle\psi(0)|\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}(t)\hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \\ &= \langle\psi(0)|\hat{\mathcal{A}}(t)|\psi(0)\rangle\end{aligned}\quad (3.8)$$

为了避免混淆，我们采用两种不同的字体来对不同框架下的含时算符进行区分，其中  $\hat{A}$ ,  $\hat{H}$  为薛定谔绘景中的算符， $\hat{\mathcal{A}}$ ,  $\hat{\mathcal{H}}$  为海森堡绘景中的算符。对  $\hat{\mathcal{A}}(t)$  进行时间微分：

$$\begin{aligned}\frac{d\hat{\mathcal{A}}(t)}{dt} &= \frac{\partial\hat{U}^\dagger(t)}{\partial t}\hat{A}(t)\hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}\hat{U} + \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}(t)\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t} \\ &= \frac{i}{\hbar}\hat{U}^\dagger(t)\hat{H}\hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t) - \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)\hat{U}^\dagger(t)\hat{H}\hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t)\hat{A}(t)\frac{\partial\hat{U}(t)}{\partial t} \\ &= \frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{H}}(t)\hat{\mathcal{A}}(t) - \frac{i}{\hbar}\hat{\mathcal{A}}(t)\hat{\mathcal{H}}(t) + \hat{U}^\dagger(t)\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}\hat{U}(t) \\ &= \frac{i}{\hbar}\left[\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\mathcal{A}}(t)\right] + \hat{U}^\dagger(t)\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}\hat{U}(t)\end{aligned}\quad (3.9)$$

记最后一项

$$\hat{U}^\dagger(t)\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}\hat{U}(t) = \left(\frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t}\right)_H \quad (3.10)$$

则可得到海森堡公式 eq. (2.44)。

注意一点很好玩的事实，那就是关于哈密顿量对时间微分在两个绘景中的转换表明，可以先左右夹时间算符后再求微分，也可以先求微分再夹时间算符，即：

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\frac{\partial\hat{H}(t)}{\partial t}\hat{U}(t) \quad (3.11)$$

## 3.2 例子

### 3.2.1 玻色子的产生算符和消灭算符

更具体地，我们选择光子作为本节的讨论对象，但得出的结论和公式是适用于其他玻色子系统的。每个光子本身是没有区别的 (**indistinguishable**)，有意义的只是某量子态

上有多少个光子。光子数是个动力学变量，可以通过算符  $\hat{n}$  进行测量，其本征值为  $n = 0, 1, 2, \dots$ ，对应的本征矢为  $|n\rangle = |0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, \dots$ ，即

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle \quad (3.12)$$

因为  $\hat{n}$  的本征值间距相等，因此可以考虑通过和数量算符  $\hat{n}$  的对易关系，来构造  $\hat{n}$  的一对升降算符 (**Raising & Lowering Operator**)。当有  $\hat{n}$  有一个已知的本征值和本征向量时，可以通过升降算符来迅速获得其他本征值和本征向量。对易关系如下：

$$\begin{aligned} [\hat{n}, \hat{a}] &= -\hat{a}, \\ [\hat{n}, \hat{a}^\dagger] &= \hat{a}^\dagger. \end{aligned} \quad (3.13)$$

其中， $\hat{a}$  和  $\hat{a}^\dagger$  相互厄米共轭。对于这样构造出来的升降算符有以下性质：

(1) 只要  $\hat{a}^\dagger|n\rangle \neq \vec{0}$ ，那么它就是  $\hat{n}$  的另一个本征值为  $n+1$  的本征矢。

(2) 只要  $\hat{a}|n\rangle \neq \vec{0}$ ，那么它就是  $\hat{n}$  的另一个本征值为  $n-1$  的本征矢。

用数学的语言可以表达为

$$\begin{aligned} \hat{n}\hat{a}|n\rangle &= (n-1)\hat{a}|n\rangle, \\ \hat{n}\hat{a}^\dagger|n\rangle &= (n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle. \end{aligned} \quad (3.14)$$

即

$$\begin{aligned} \hat{a}|n\rangle &= C_{n \rightarrow n-1}|n-1\rangle, \\ \hat{a}^\dagger|n\rangle &= C_{n \rightarrow n+1}|n+1\rangle. \end{aligned} \quad (3.15)$$

一个范围更广的结论和证明

给定一个算符  $\hat{A}$ ,  $\hat{A}|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle$ ，如果能够找到一对厄米共轭算符  $\hat{\eta}$  和  $\hat{\eta}^\dagger$ ，它们满足与  $\hat{A}$  以下的对易关系：

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{\eta}] &= -\lambda\hat{\eta}, \\ [\hat{A}, \hat{\eta}^\dagger] &= \lambda\hat{\eta}^\dagger. \end{aligned} \quad (3.16)$$

则

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{\eta}|\alpha\rangle &= (a-\lambda)\hat{\eta}|\alpha\rangle, \\ \hat{A}\hat{\eta}^\dagger|\alpha\rangle &= (a+\lambda)\hat{\eta}^\dagger|\alpha\rangle. \end{aligned} \quad (3.17)$$

将 eq. (3.16) 中的第一条等式两端作用于本征矢  $|\alpha\rangle$  上，可得：

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{\eta}]|\alpha\rangle &= -\lambda\hat{\eta}|\alpha\rangle \\ \hat{A}\hat{\eta}|\alpha\rangle - \hat{\eta}\hat{A}|\alpha\rangle &= -\lambda\hat{\eta}|\alpha\rangle \\ \hat{A}\hat{\eta}|\alpha\rangle - a\hat{\eta}|\alpha\rangle &= -\lambda\hat{\eta}|\alpha\rangle \\ \hat{A}\hat{\eta}|\alpha\rangle &= (a-\lambda)\hat{\eta}|\alpha\rangle \end{aligned} \quad (3.18)$$

同理可证升算符的特性。

由 eq. (3.15) 可以看出，升算符  $\hat{a}^\dagger$  将“有  $n$  个光子的状态”变为了“有  $n+1$  个光子的状态”，可以用于描述光子的发射，因此也被称为产生算符 (**Creation Operator**)；相对应的  $\hat{a}$  可以用于描述光子的吸收，称为湮灭算符 (**Anihilation Operator**)。考虑系统的光子态从真空变成一个光子的过程：

$$\hat{a}^\dagger|0\rangle = C_{0\rightarrow 1}|1\rangle \quad (3.19)$$

根据公设 V 的阐述，发射一颗光子后观察到光子态为  $|1\rangle$  的概率幅为：

$$\langle 1|\hat{a}^\dagger|0\rangle = C_{0\rightarrow 1} \quad (3.20)$$

光子被吸收后观测到光子态为  $|0\rangle$  的概率幅为

$$\langle 0|\hat{a}|1\rangle = C_{1\rightarrow 0} = C_{0\rightarrow 1}^* \quad (3.21)$$

光子态从  $|0\rangle$  到  $|1\rangle$  的过程被称为自发辐射；不妨将  $C_{n\rightarrow n+1}$  重新定义辐射发生于自发辐射概率幅的比值，那么

$$C_{0\rightarrow 1} = C_{1\rightarrow 0} = 1 \quad (3.22)$$

根据爱因斯坦的观察，若在某个特定量子态中已经有了  $n$  个光子，原子在发射一个光子到此状态的概率幅，比没有光子时大了  $\sqrt{n+1}$  倍，即

$$C_{n\rightarrow n+1} = \sqrt{n+1}C_{0\rightarrow 1} \quad (3.23)$$

据此可得：

$$\begin{aligned} \hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle, \\ \hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \end{aligned} \quad (3.24)$$

将一个状态  $|n\rangle$  先降后升，可以得到：

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\hat{a}^\dagger|n-1\rangle = n|n\rangle \quad (3.25)$$

即我们之前没有详细介绍的粒子数算符  $\hat{n}$ ，其实就是先降后升的乘积：

$$\hat{n} = \hat{a}^\dagger\hat{a} \quad (3.26)$$

同理，将一个状态  $|n\rangle$  先升后降，则可得到：

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\hat{a}|n+1\rangle = (n+1)|n\rangle \quad (3.27)$$

比较 eq. (3.25) 和 eq. (3.27) 两式，可以得出如下对易关系：

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = \hat{I} \quad (3.28)$$

我们从升降算符的数学定义 eq. (3.13)，升降算符的物理含义 eq. (3.22) 以及实验得出的玻色子的性质 eq. (3.23) 推导出了粒子数算符的数学表达 eq. (3.26) 以及玻色子升降算符

的对易关系 eq. (3.28)。而实际上，升降算符的对易关系可能才是粒子更深层的本质：例如满足某粒子系统的升降算符如果满足 eq. (3.28)，则该系统为玻色子系统；而满足某粒子系统的升降算符如果满足反对易 (**Anticommutation**) 关系：

$$\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} = \hat{a}_i \hat{a}_j^\dagger + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i = \delta_{ij} \hat{I} \quad (3.29)$$

则该系统为费米子系统。也就是说，如果我们把逻辑反过来，从升降算符的对易关系入手，再从数学上直接定义粒子数算符 eq. (3.26)，并加入归一化条件，一样可以推出符合玻色子系统实验结果的结论 eq. (3.23)。

上述的结论是在薛定谔绘景中进行推导的，不过既然是算符，升降算子也一样可以变换到海森堡绘景中，以查看其时间演变规律。考虑最简单的情形，即系统的哈密顿量不随时间改变。此时光子的哈密顿量可以写成：

$$\hat{H}(t) = \hat{H} = \hat{a}^\dagger \hat{a} \omega_0 \hbar \quad (3.30)$$

即状态的能量在光子角频率  $\omega_0$  恒定的情况下，正比于光子数量，其中  $\hat{a}$  和  $\hat{a}^\dagger$  处于薛定谔绘景之下。首先考察降算符  $\hat{a}$ ，将其变换到海森堡绘景中，套用 eq. (2.41) 则有：

$$\hat{a}(t) = e^{i\omega_0 \hat{a}^\dagger \hat{a} t / \hbar} \hat{a} e^{-i\omega_0 \hat{a}^\dagger \hat{a} t / \hbar} \quad (3.31)$$

上式还能够进一步简化，但需要用到两个数学上的结论：

#### Baker-Campbell-Hausdorff Formula

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{12}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \frac{1}{12}[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] \dots} \quad (3.32)$$

这个其实不重要，重要的是从它推出的一个引理：

#### Baker-Hausdorff Lemma

$$e^{i\lambda \hat{A}} \hat{B} e^{i\lambda \hat{A}} = \hat{B} + i\lambda [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{(i\lambda)^2}{2!} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (3.33)$$

则上述降算符的表达式为

$$\begin{aligned}
 \hat{a}(t) &= \hat{a} + i\omega_0 t [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}] + \frac{(i\omega_0 t)^2}{2!} [\hat{a}^\dagger \hat{a}, [\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a}]] + \dots \\
 &= \hat{a} + (-1)i\omega_0 t \hat{a} + \frac{(i\omega_0 t)^2}{2!} [\hat{a}^\dagger \hat{a}, -\hat{a}] + \dots \\
 &= \hat{a} + (-1)i\omega_0 t \hat{a} + (-1)^2 \frac{(i\omega_0 t)^2}{2!} \hat{a} + \dots \\
 &= \hat{a} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-i\omega_0 t)^i}{i!} \\
 &= \hat{a} e^{-i\omega_0 t}
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

同理可得升算符在海森堡绘景中的表达式为：

$$\hat{a}^\dagger(t) = \hat{a}^\dagger e^{i\omega_0 t} \tag{3.35}$$

## 4 Tensor Product, Density Matrix and Partial Trace

### 4.1 Tensor Product

从稍微数学一点的角度，但又不是真正的数学定义来描述张量积 (**Tensor Product**)，也就是从“性质给出定义”，defined in terms of property. 考虑两个处于不同空间的状态的两个向量：

$$\begin{aligned} |\phi\rangle &\in \mathcal{H}_1, \quad \text{Dim}(\mathcal{H}_1) = N \\ |\chi\rangle &\in \mathcal{H}_2, \quad \text{Dim}(\mathcal{H}_2) = M \end{aligned} \quad (4.1)$$

考虑有一个双线性映射 (**Bilinear Map**)  $f(\cdot, \cdot)$ ，它能使  $|\phi\rangle$  和  $|\chi\rangle$  变换成第三个空间  $\mathcal{H}_3$  的向量  $|\Phi\rangle$ ，

$$\begin{aligned} f(|\phi\rangle, |\chi\rangle) &= |\Phi\rangle \\ f : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 &\rightarrow \mathcal{H}_3 \end{aligned} \quad (4.2)$$

且具有如下性质：

$$f(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle, |\chi\rangle) = f(|\phi_1\rangle, |\chi\rangle) + f(|\phi_2\rangle, |\chi\rangle) \quad (4.3)$$

$$f(|\phi\rangle, |\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle) = f(|\phi\rangle, |\chi_1\rangle) + f(|\phi\rangle, |\chi_2\rangle) \quad (4.4)$$

$$f(a|\phi\rangle, |\chi\rangle) = af(|\phi\rangle, |\chi\rangle) = f(|\phi\rangle, a|\chi\rangle) \quad (4.5)$$

那么定义两个向量的张量积为在新空间  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$  的一个新向量  $|\phi \otimes \chi\rangle$ ：

$$|\phi \otimes \chi\rangle = |\phi\rangle \otimes |\chi\rangle, \quad \text{Dim}(\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2) = M \times N \quad (4.6)$$

且有与  $f(\cdot, \cdot)$  唯一对应的一个单线性映射  $f'(\cdot)$ ，使得

$$\begin{aligned} f'(|\phi \otimes \chi\rangle) &= |\Phi\rangle \\ f' : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 &\rightarrow \mathcal{H}_3 \end{aligned} \quad (4.7)$$

关于张量积和双线性映射等之间的关系如Figure 4.1所示。

因为张量积的定义是从双线性映射中引出的，自然而然地，张量积也继承了它的特性：

$$\begin{aligned} f'(|\phi\rangle \otimes (|\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle)) &= f(|\phi\rangle, |\chi_1\rangle + |\chi_2\rangle) \\ &= f(|\phi\rangle, |\chi_1\rangle) + f(|\phi\rangle, |\chi_2\rangle) \\ &= f'(|\phi \otimes \chi_1\rangle) + f'(|\phi \otimes \chi_2\rangle) \end{aligned} \quad (4.8)$$

所以我们有：

$$|\phi \otimes (\chi_1 + \chi_2)\rangle = |\phi \otimes \chi_1\rangle + |\phi \otimes \chi_2\rangle \quad (4.9)$$

同理可证：

$$|(\phi_1 + \phi_2) \otimes \chi\rangle = |\phi_1 \otimes \chi\rangle + |\phi_2 \otimes \chi\rangle \quad (4.10)$$



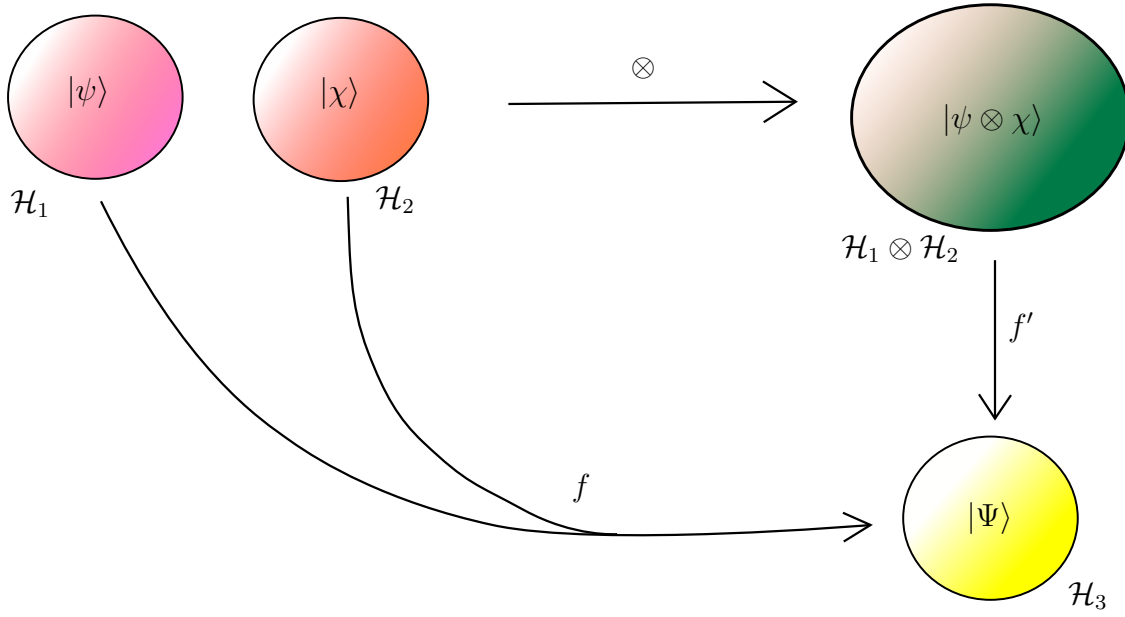


Figure 4.1: 张量积的非严格定义示意图

以及

$$|a\phi \otimes \chi\rangle = a|\phi \otimes \chi\rangle = |\phi \otimes a\chi\rangle \quad (4.11)$$

要描述新空间里面的向量，自然也离不开寻找和确定新空间里面的基。一个很直观的方法是利用原空间中的基  $\{|m_i\rangle\} \in \mathcal{H}_1$  和  $\{|n_j\rangle\} \in \mathcal{H}_2$  来进行构造  $|m_i \otimes n_j\rangle$  即可，且从这步开始，省略狄拉克符号内的张量积符号，简记为  $|m_i n_j\rangle$ 。有了相应的基构造方法，还要构造其之间的正交关系，因此需要相应左矢的表示方法。我们考虑对应原来空间中的双线性映射：

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}_{kl}(|m_i\rangle, |n_j\rangle) &= \langle m_k | m_i \rangle \cdot \langle n_l | n_j \rangle \\ &= \delta_{ki} \delta_{lj}, \quad \mathfrak{B}_{kl} : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathbb{R} \end{aligned} \quad (4.12)$$

按照定义，我们也可以找到一个与  $\mathfrak{B}_{kl}$  对应的单线性映射，使得对应的张量积空间中的右矢  $|m_i n_j\rangle$  也得到和上述一样的结果，我们把这样的单线性映射，更确切地说是泛函记作  $\langle m_k \otimes n_l |$  或  $\langle m_k n_l |$ ，使得

$$\langle m_k n_l | m_i n_j \rangle = \delta_{ki} \delta_{lj}, \quad \langle m_k n_l | : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \rightarrow \mathbb{R}, \quad (4.13)$$

上述式子就是在张量积空间中基的正交归一关系。至此，张量积空间内的所有向量  $|\Phi\rangle$  都可以用基矢叠加的方法来表示：

$$|\Phi\rangle = \sum_i^M \sum_j^N |m_i n_j\rangle = \sum_{i,j}^{M,N} |m_i n_j\rangle \quad (4.14)$$

要注意的一点是，所有的向量都可以通过叠加表示，但不一定所有的向量都可以写成两个原空间矢量的张量积（**may not be factorizable**），例如：

$$|\Phi\rangle = |m_1 n_1\rangle + |m_2 n_2\rangle \quad (4.15)$$

就不能表示为两个矢量的张量积，且不能单独描述子系统的性质，而只能够描述整体系统的性质，因此也被称为纠缠态 (**Entangled state**)。

同理我们可以定义两个算子  $\hat{A} \in \mathcal{H}_1$  和  $\hat{B} \in \mathcal{H}_2$  的张量积  $\hat{A} \otimes \hat{B}$ ，成为新的张量空间里的算子，运算规则为：

$$\hat{A} \otimes \hat{B} |\phi\chi\rangle = \hat{A} |\phi\rangle \otimes \hat{B} |\chi\rangle \quad (4.16)$$

新矩阵对应的矩阵元为：

$$\begin{aligned} (\mathbf{A} \otimes \mathbf{B})_{kl ij} &= \langle m_k n_l | \hat{A} \otimes \hat{B} | m_i n_j \rangle \\ &= \langle m_k | \hat{A} | m_i \rangle \langle n_l | \hat{B} | n_j \rangle \\ &= (\mathbf{A})_{ki} (\mathbf{B})_{lj} \end{aligned} \quad (4.17)$$

我们可以看到，新矩阵的矩阵元居然带了四个下标  $klij$ ，那么这个矩阵元到底处于哪个位置呢？我们举一个实例来更清楚地认识这些下标表示的含义。

#### 张量的矩阵表示形式

考虑由一个质子 p 和一个电子 e 组成的氢原子系统，它们各自有一套表述自旋算符和自旋态的方法。对于电子有描述自旋的本征态矢

$$|\uparrow\rangle \simeq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle \simeq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad (4.18)$$

以及对应的泡利矩阵：

$$\hat{\sigma}_{ex} \simeq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_{ey} \simeq \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_{ez} \simeq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.19)$$

同理对于质子来说，我们描述自旋的本征态：

$$|\uparrow\rangle \simeq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle \simeq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad (4.20)$$

以及对应的泡利矩阵：

$$\hat{\sigma}_{px} \simeq \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_{py} \simeq \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_{pz} \simeq \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.21)$$

考察泡利算符如何改变电子和质子的自旋，我们考察下面两个例子：

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_{ex}|\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle, \\ \hat{\sigma}_{py}|\downarrow\rangle &= -i|\uparrow\rangle\end{aligned}\quad (4.22)$$

而对于它们的组合态矢来说，可以使用组合泡利算符来进行考察，例如：

$$\hat{\sigma}_{ex} \otimes \hat{\sigma}_{py}|\uparrow\downarrow\rangle = |\downarrow\rangle \otimes (-i|\uparrow\rangle) = -i|\downarrow\uparrow\rangle \quad (4.23)$$

使用矩阵形式来表示组合态矢，可以写成：

$$|\uparrow\downarrow\rangle \simeq \begin{pmatrix} 1 \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ 0 \times \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

组合泡利算符可以写成：

$$\hat{\sigma}_{ex} \otimes \hat{\sigma}_{py} \simeq \begin{pmatrix} 0 \times \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & 1 \times \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ 1 \times \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} & 0 \times \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

则 eq. (4.23) 则可以用矩阵表示成：

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.26)$$

也就是说四个下标  $klij$  中的  $ki$  表示分块矩阵大块的行和列，而  $lj$  表示的是元素在某一块里面的位置。至于其他的电子和质子的组合写法也是一样的，在这里就不过多赘述了。

根据上述张量积的计算方法，我们可以对原本子空间的算符进行“升级”，以探究在只观测其中一个子系统的情况下，整个系统是怎么改变的。将第一个子空间的张量重新写成  $\hat{A}^{(1)}$ ，则能够作用于张量空间的算符  $\hat{A}^{(12)}$  变为

$$\begin{aligned}\hat{A}^{(12)} &= \hat{A}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)} \\ \hat{A}^{(12)}|\phi\chi\rangle &= (\hat{A}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)})|\phi\chi\rangle \\ &= |(\hat{A}^{(1)}\phi) \otimes \chi\rangle\end{aligned}\quad (4.27)$$

若  $|\alpha\rangle$  为  $\hat{A}^{(1)}$  的本征矢, 那么对于任意  $|\chi\rangle$  来说,  $|\alpha\chi\rangle$  都为  $\hat{A}$  的本征矢:

$$\begin{aligned}\hat{A}|\alpha\chi\rangle &= |(\hat{A}^{(1)}\alpha) \otimes \chi\rangle \\ &= |a\alpha \otimes \chi\rangle \\ &= a|\alpha\chi\rangle\end{aligned}\tag{4.28}$$

当然, 在新空间内有些算子  $\hat{C}$  是没办法拆开成两个算子的张量积的, 这个时候只能按照定义老老实实地求矩阵元:

$$(\mathbf{C})_{kl ij} = \langle m_k n_l | \hat{C} | m_i n_j \rangle\tag{4.29}$$

## 4.2 Density Matrix

### 4.2.1 系综的概念与其表示方法

在 section 4 之前, 我们所涉及到的理论都是用来描述单一粒子系统的状态的。把单一粒子称为“系统”的原因是, 即使只有一个粒子, 它也有多种不同的可能性, 坍缩到不同的本征态上。因此, 在量子力学的框架内, “一颗”粒子是被描述成多个状态的线性叠加, 也就无愧于“系统”这个称号了。然而现实生活中, 我们往往研究的是“一堆”粒子的体系 (假设为  $N$  个), 每个粒子在被观测前会依照某种概率分布处于某种特定的量子态  $\{|\Phi_1\rangle, |\Phi_2\rangle, \dots, |\Phi_N\rangle\}$ 。而每个粒子  $|\Phi_i\rangle$  在被  $\hat{A}$  观测后又会有不同的几率坍缩到各个本征态  $\{|\alpha_1\rangle, |\alpha_2\rangle, \dots\}$  上。我们一般把这种“多粒子”体系称为系综 (**Ensemble**), 而假设系综中处于有  $n_i$  个粒子处于状态  $|\Phi_i\rangle$ , 则可以使用密度矩阵 (算符) (**Density Matrix**)  $\rho$  来记录整个系综的状态:

$$\hat{\rho} = \sum_i^N p_i |\Phi_i\rangle \langle \Phi_i|\tag{4.30}$$

其中  $p_i = n_i/N$ 。密度算符有如下性质:

1. 密度算符是一个厄米算符:

$$\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}\tag{4.31}$$

2. 密度算符的迹为 1:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = 1\tag{4.32}$$

3. 半正定性:

$$\langle \Phi | \hat{\rho} | \Phi \rangle\tag{4.33}$$

当只有特定一个  $p_i = 1$ , 而其他  $p_j = 0$  时, 则称该系综为纯态, 此时物理规律和理想的单一粒子系统无异, 且在前三条的基础上多一条特殊性质:

4. 密度矩阵的平方等于自身 (这条性质也被用于检测系综的“纯度”):

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}\tag{4.34}$$

举几个例子来对比一下可能更好理解：

几个密度矩阵的例子

1. 考虑一个完全由  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  确定的二维空间，其中：

$$\begin{aligned} |0\rangle &\simeq \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |1\rangle &\simeq \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

1.a. 当系综中只有处于状态  $|0\rangle$  或  $|1\rangle$  的系统，即系综为纯态时：

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= |0\rangle\langle 0|, \quad \rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \text{ or} \\ \hat{\rho} &= |1\rangle\langle 1|, \quad \rho = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.36)$$

经计算两者都能得到  $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$ ，然而

1.b. 当系综的组成成分为  $p(|0\rangle) = 0.5$ ， $p(|1\rangle) = 0.5$  时

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.37)$$

此时根据矩阵的运算法则  $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$ 。

2. 考虑一个完全由  $|+\rangle$  和  $|-\rangle$  确定的二维空间，其中：

$$\begin{aligned} |+\rangle &\simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ |-\rangle &\simeq \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.38)$$

2.a. 当系综处于纯态时

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \text{ or} \\ \rho &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.39)$$

此时  $\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$  也是成立的；

2.b. 当系综的组成成分为  $p(|+\rangle) = 0.5$ ， $p(|-\rangle) = 0.5$  时

$$\rho = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

此时密度的平方就不等于密度本身了。要注意各个密度矩阵之间的异同点，例如比较系统 2.a. 和 1.b.: 两个矩阵都是基于同一组基矢下的表达，即  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$ 。当使用本征值为  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  的算子  $\hat{O}$  来对系统综进行测量时，测量结果的概率都为  $p(|0\rangle) = 1/2$  和  $p(|1\rangle) = 1/2$ ，也就是对应矩阵对角线上的元素。但是情况 1.b. 中这两个基矢是相干的 (**coherent**)，而两态之间的相干性由对应位置的非对角元来描述。非零的非对角元意味着观察后的两个结果在观察前并不是独立的，而是存在由两态相干叠加之后的状态，如本例中的  $|+\rangle = (1/\sqrt{2})|0\rangle + (1/\sqrt{2})|1\rangle$ 。而 2.a. 中两态则是完全独立的，因此非对角元也为零。

关于相干性我们有机会再用相关例子更仔细地来讨论。

对某一系统  $\rho$  进行性质  $\hat{A}$  的观测，相当于对该系统内的所有粒子都进行观测后的平均值  $\langle \hat{A} \rangle_{\text{ave}}$ 。注意  $\langle \hat{A} \rangle_{\text{ave}}$  中包含两重平均值，一重是对单个粒子进行观测后的量子平均值，第二重是这些不同的平均值在系统综内的经典平均值。具体可以通过求迹来确认它的值：

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}) &= \sum_i \langle m_i | \hat{A} \hat{\rho} | m_i \rangle \\
 &= \sum_i \langle m_i | \hat{A} \sum_j |\Phi_j\rangle \langle \Phi_j | m_i \rangle p_j \\
 &= \sum_i \sum_j \left( \langle \Phi_j | \hat{A} | m_i \rangle \right)^* (\langle m_i | \Phi_j \rangle)^* p_j \\
 &= \sum_j \left( \langle \Phi_j | \hat{A} \sum_i | m_i \rangle \langle m_i | \Phi_j \rangle \right)^* p_j \\
 &= \sum_j \left( \langle \Phi_j | \hat{A} \hat{I} | \Phi_j \rangle \right)^* p_j \\
 &= \sum_j \langle \Phi_j | \hat{A} | \Phi_j \rangle p_j \\
 &= \langle \hat{A} \rangle_{\text{ave}}
 \end{aligned} \tag{4.41}$$

对于上述的推导有几点需要说明：

1. 上述的公式对原系统综中的粒子处于什么状态  $|\Phi_j\rangle$  并没有什么限制，即  $|\Phi_j\rangle$  不一定为本征态。
2. 状态  $|\Phi_j\rangle$  种类的数量是不定的，但这并不意味着  $\hat{\rho}$  的维度是不定的； $\hat{\rho}$  的维度是由基矢来确定的，也就是说总是和  $\hat{A}$  的维度数一样，不需要担心  $\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}$  矩阵大小不匹配的问题。
3. 取迹运算从矩阵的角度来看是对角线所有元素相加，但从更本质的角度出发，应该将其理解为算符在某一套完备归一正交基度量下的量子平均值之和，故有 eq. (4.41) 一开头的展开式，所以基矢  $|m\rangle$  是任取的，不一定非要是  $\hat{A}$  的特征向量。
4. 虽然  $\hat{A}$  和  $\hat{\rho}$  不对易，但是可以自己证明  $\text{Tr}(\hat{A}\hat{\rho})$  和  $\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{A})$  结果是一样的。[狗头]

### 4.2.2 密度矩阵随时间的演化

我们晓得，一个系统随时间的演化可以通过薛定谔方程（eq. (2.3)）和态向量来描述。与之对应的，一个系综随时间的演化则可以通过态密度以及另外一条方程来描述。这条方程为冯诺伊曼方程 (Von Neumann Equation)，可以通过薛定谔方程推导出来：

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\rho}(t) &= \sum_j p_j \left( \frac{\partial}{\partial t} |\Phi_j(t)\rangle \langle \Phi_j(t)| + |\Phi_j(t)\rangle \frac{\partial}{\partial t} \langle \Phi_j(t)| \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_j p_j \left( \hat{H}(t) |\Phi_j(t)\rangle \langle \Phi_j(t)| - |\Phi_j(t)\rangle \langle \Phi_j(t)| \hat{H}(t) \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]\end{aligned}\quad (4.42)$$

千万不要将这个方程和海森堡运动方程（eq. (2.44)）搞混了，上述的密度算符和哈密顿量都是在薛定谔图景里面的。不过两者是有联系的，把 eq. (4.42) 代入 eq. (2.44) 中，可得：

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{(H)}(t) &= \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\rho}_{(H)}(t)] + \hat{U}^\dagger(t) \frac{\partial \hat{\rho}_{(S)}(t)}{\partial t} \hat{U}(t) \\ &= \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\rho}_{(H)}(t)] - \frac{i}{\hbar} \hat{U}^\dagger(t) [\hat{H}(t), \hat{\rho}_{(S)}(t)] \hat{U}^\dagger(t) \\ &= 0\end{aligned}\quad (4.43)$$

即在海森堡绘景中密度算符是不随时间变化的。这符合我们的预期，因为海森堡绘景的目的就是将所有态的时间依赖性全部转移到算子上；所有的态都不随时间变化，那自然密度算符也是不随时间变化的。

## 4.3 Partial Trace

由单一粒子系统组成的系综我们可以通过上述的密度矩阵去描述，同样的我们也可以用密度矩阵来描述张量积后多粒子系统形成的系综。我们以双粒子系统为例子来研究如何用密度算符去描述，我们知道，无论系综中有多少个不同的态  $|\Phi\rangle$ ，最终的密度矩阵的维度都必须是  $M^2 \times N^2$ ，也无需在意每个态  $|\Phi\rangle$ ，出现的概率  $p(|\Phi\rangle)$ ，我们都可以把系综的密度算子用  $\{|mn\rangle\}$  来加四个坐标来描述，其对应的矩阵元为  $\rho_{klij}$

$$\hat{\rho}^{(12)} = \sum_{klij} |m_k n_l\rangle (\rho)_{klij} \langle m_i n_j| \quad (4.44)$$

根据 eq. (4.41)，我们可以通过下式求某个“升级”后算符  $\hat{A}^{(12)}$  的系综平均值：

$$\text{Tr}(\hat{A}^{(12)} \hat{\rho}^{(12)}) = \langle \text{Tr}(\hat{A}^{(12)}) \rangle_{\text{ave}} \quad (4.45)$$

但根据 eq. (4.27)，我们知道，这种“升级”后的算符得出的结果其实和先算再张量积的效果是完全一样的，那么我们会想，存不存在一个等价的密度算符  $\hat{\rho}^{(1)}$ ，使得下面等价关系成立呢：

$$\text{Tr}(\hat{A}^{(1)} \hat{\rho}^{(1)}) = \text{Tr}(\hat{A}^{(12)} \hat{\rho}^{(12)}) = \langle \text{Tr}(\hat{A}^{(12)}) \rangle_{\text{ave}} \quad (4.46)$$

结合 eq. (4.44) 和 eq. (4.45) 两式我们可以得到:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}(\hat{A}^{(12)} \hat{\rho}^{(12)}) &= \sum_{op} \langle m_o n_p | \hat{A}^{(12)} \sum_{klj} | m_k m_l \rangle \rho_{klj} \langle m_i n_j | m_o n_p \rangle \\
 &= \sum_{op} \langle m_o n_p | \hat{A}^{(1)} \otimes \hat{I}^{(2)} \sum_{kl} | m_k m_l \rangle \rho_{kl op} \\
 &= \sum_{op} \sum_{kl} \langle m_o | \hat{A}^{(1)} | m_k \rangle \langle n_p | n_l \rangle \rho_{kl op} \\
 &= \sum_{opk} A_{ok} \rho_{kpop} \\
 &= \sum_{ok} \langle m_o | \hat{A}^{(1)} | m_k \rangle \sum_p \langle m_k n_p | \hat{\rho}^{(12)} | m_o n_p \rangle
 \end{aligned} \tag{4.47}$$

此时, 只需要令:

$$\langle m_k | \hat{\rho}^{(1)} | m_o \rangle = \sum_p \langle m_k n_p | \hat{\rho}^{(12)} | m_o n_p \rangle \tag{4.48}$$

就是我们梦寐以求的  $\hat{\rho}^{(1)}$  的每个矩阵元的计算方法了。落实到矩阵的写法里面, 我们可以看出, 其实就是对分块矩阵的小块里面的对角元求和, 也就是求对应小块的迹, 所以人们也常使用部分迹的方式来表示约化密度算符:

$$\hat{\rho}^{(1)} = \text{Tr}_2(\hat{\rho}^{(12)}) \tag{4.49}$$

另外一个约化密度算符也有相似的表达式:

$$\hat{\rho}^{(2)} = \text{Tr}_1(\hat{\rho}^{(12)}) \tag{4.50}$$

下面举两个例子来让我们更清楚地了解矩阵元是怎么相加的:

部分迹的矩阵表示

1. 考虑一个纠缠态纯态  $|\Phi\rangle$  形成的系综, 它对应的密度算符表达如下:

$$\begin{aligned}
 |\Phi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle) \\
 \hat{\rho}^{(12)} &= \frac{1}{2} (|+-\rangle\langle+-| + |+-\rangle\langle-+| + |-+\rangle\langle+-| + |-+\rangle\langle-+|)
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

上式中加粗的部分只是为了将向量和加减号区分开来而已, 没有其他特别含义。认清每个下标的对应位置 (eq. (4.26)), 以及结合 (eq. (1.24)), 我们可以得到密度矩阵:

$$\hat{\rho}^{(12)} \simeq \begin{matrix} & \begin{matrix} |++\rangle & |+-\rangle & |-+\rangle & |--\rangle \end{matrix} \\ \begin{matrix} \langle++| \\ \langle+-| \\ \langle-+| \\ \langle--| \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & & 0 & \\ & 1/2 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & \\ & 0 & & 0 \end{pmatrix} \end{matrix} \tag{4.52}$$



将对应颜色的框框相加，就是对应的部分迹，得到的约化矩阵为：

$$\hat{\rho}^{(1)} \simeq \begin{matrix} & \begin{matrix} |+\rangle & |-\rangle \end{matrix} \\ \begin{matrix} \langle +| \\ \langle -| \end{matrix} & \begin{pmatrix} \text{blue } 1/2 & \text{yellow } 0 \\ \text{green } 0 & \text{red } 1/2 \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (4.53)$$

可以验证，用矩阵方法和直接用狄拉克记符号算出来的约化密度结果是一致的，用狄拉克符号计算的结果为：

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{(1)} &= \text{Tr}(\hat{\rho}^{(12)}) \\ &= \frac{1}{2} (|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|) \end{aligned} \quad (4.54)$$

2. 同理我们也可以用例子来写出第二个子空间的约化密度矩阵 (eq. (4.50))。使用  $|g\rangle$  和  $|e\rangle$  来表示原子系统的基态和激发态，使用  $|n\rangle$  和  $|n+1\rangle$  来表示光子的状态，它们之间可以相互进行张量积，来描述原子光子组合的系统。用  $\hat{\rho}^{(a,f)}$  来表示组合系统形成的系综：

$$\hat{\rho}^{(a,f)} \simeq \begin{matrix} & \begin{matrix} |e, n+1\rangle & |e, n\rangle & |g, n+1\rangle & |g, n\rangle \end{matrix} \\ \begin{matrix} \langle e, n+1| \\ \langle e, n| \\ \langle g, n+1| \\ \langle g, n| \end{matrix} & \begin{pmatrix} \text{blue} & \text{yellow} & & \\ \text{green} & \text{red} & & \\ & & \text{blue} & \text{yellow} \\ & & \text{green} & \text{red} \end{pmatrix} \end{matrix} \quad (4.55)$$

一样地，将对应颜色的框框相加，得到用于描述光子态的约化密度矩阵  $\hat{\rho}^{(f)}$  为：

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^{(f)} &= \text{Tr}_a(\hat{\rho}^{(a,f)}) \\ &\simeq \begin{matrix} & \begin{matrix} |n+1\rangle & |n\rangle \end{matrix} \\ \begin{matrix} \langle n+1| \\ \langle n| \end{matrix} & \begin{pmatrix} \text{blue} & \text{yellow} \\ \text{green} & \text{red} \end{pmatrix} \end{matrix} \end{aligned} \quad (4.56)$$

## 5 Interaction Picture and Integro-differential form of S.E.

### 5.1 Comments on Tensor

在本节重头开始之前，首先要整理一下张量积的一些内容。我们曾在 section 4 中从稍微数学一点的角度来引入了张量积的概念，也意识到了我们可以通过两个不同空间中的态向量，可以张量积在一起，用于描述组合系统的行为。组合系统是怎么随着时间演化的呢？换句话说，它的薛定谔方程是怎么样的呢？我们首先有一个非常不成熟的想法，先考虑一个没有相互作用的系统  $|\Phi(t)\rangle = |\phi(t)\chi(t)\rangle$ ，也就是可以写成两个原系统的张量积（原系统 1 的算子不会影响到系统 2），它的薛定谔方程为：

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\Phi(t)\rangle &= \frac{\partial}{\partial t}|\Phi(t)\rangle \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t}|\phi(t)\rangle\right) \otimes |\chi(t)\rangle + |\phi(t)\rangle \otimes \left(\frac{\partial}{\partial t}|\chi(t)\rangle\right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left( \left(\hat{H}^{(1)}(t)|\phi(t)\rangle\right) \otimes |\chi(t)\rangle + |\phi(t)\rangle \otimes \left(\hat{H}^{(2)}(t)|\chi(t)\rangle\right) \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left( \hat{H}^{(1)}(t) \otimes \hat{I}^{(2)}(t) + \hat{I}^{(1)}(t) \otimes \hat{H}^{(2)}(t) \right) |\phi(t)\chi(t)\rangle \end{aligned} \quad (5.1)$$

所以

$$\hat{H}(t) = \hat{H}^\psi(t) + \hat{H}^\chi(t). \quad (5.2)$$

即总系统的哈密顿量应该等于分系统哈密顿量的和，而不是分系统哈密顿量的张量积  $\hat{H}^{(1)}(t) \otimes \hat{H}^{(2)}(t)$

### 5.2 Interaction Picture

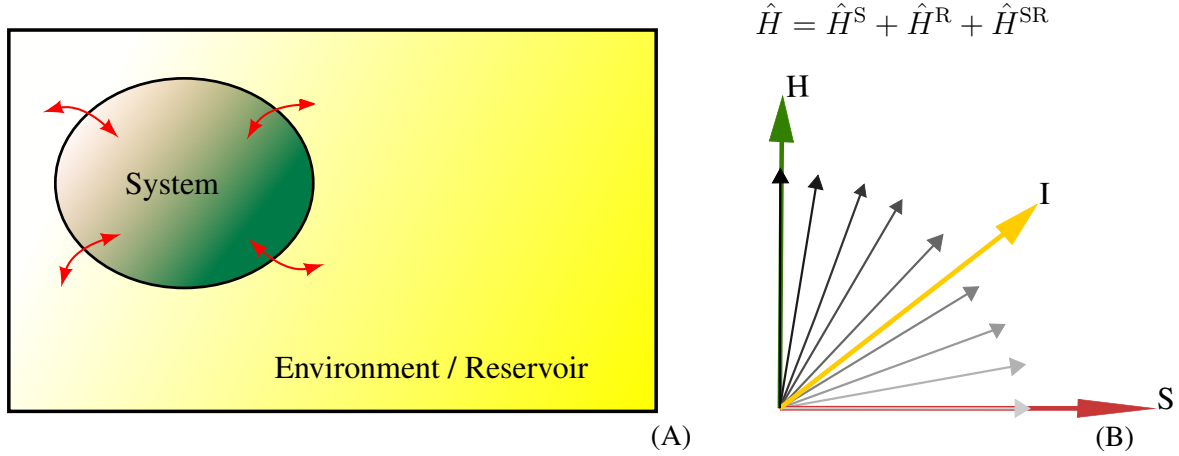
但是我们知道由于纠缠态的存在，实际情况下的两个系统是有相互作用的（**correlated**），即上述哈密顿量之和只是一个近似，上述  $|\phi(t)\chi(t)\rangle$  也并非正统哈密顿量的解。我们得重新考虑系统和环境的关系（这里采用“**Reservoir**”的说法，直译为水库。其他教材里 **Environment** 和 **Bath** 表达的是同一样东西），如Figure 5.1（A）所示，我们把缺失的相互作用项记作  $\hat{H}^{\text{SR}}$ ，补入到总哈密顿量中：

$$\hat{H} = \hat{H}^{\text{S}} + \hat{H}^{\text{R}} + \hat{H}^{\text{SR}} \quad (5.3)$$

记  $|\Phi_{(\text{I})}(t)\rangle$  为（系统 + 环境）在交互绘景中的态向量，定义为：

$$|\Phi_{(\text{I})}(t)\rangle = e^{i(\hat{H}^{\text{S}} + \hat{H}^{\text{R}})t/\hbar} |\Phi_{(\text{S})}(t)\rangle, \quad (5.4)$$

其中  $|\Phi_{(\text{S})}(t)\rangle$  是薛定谔绘景中的态向量。这里我们为了简单起见，只考虑薛定谔绘景下  $\hat{H}$  不显性含时的情况。如Figure 5.1（B）所示，三个绘景中，薛定谔绘景中的参考系是



**Figure 5.1:** (A) 系统与环境交互 (B) 薛定谔，海森堡和交互图景中坐标轴的转动方式

固定不动的，故态向量看起来实在逆时针旋转；而海森堡绘景中的参考系旋转速度和态向量的是一致的，所以态向量相对静止；而交互绘景的参考系介于两者中间，故态向量还看起来还是逆时针旋转，且之间的夹角恰好用于度量相互作用的大小，为  $e^{-i\hat{H}^{SR}t/\hbar}$ 。同理，在交互绘景下的密度算符  $\hat{\rho}_{(I)}(t)$  的表达式为：

$$\hat{\rho}_{(I)}(t) = e^{i(\hat{H}^S + \hat{H}^R)t/\hbar} \hat{\rho}_{(S)}(t) e^{-i(\hat{H}^S + \hat{H}^R)t/\hbar} \quad (5.5)$$

仿照海森堡公式的推导 eq. (3.9)，并结合冯诺依曼方程 eq. (4.42)，我们可以得到交互绘景下密度算符随时间的演化规律：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{(I)}(t) &= \left( \frac{d}{dt} e^{\hat{H}^x} \right) \hat{\rho}_{(S)}(t) e^{-\hat{H}^x} + e^{\hat{H}^x} \hat{\rho}_{(S)}(t) \left( \frac{d}{dt} e^{-\hat{H}^x} \right) + e^{\hat{H}^x} \frac{\partial \hat{\rho}_{(S)}(t)}{\partial t} e^{-\hat{H}^x} \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ \hat{H}_{(I)}^S + \hat{H}_{(I)}^R, \hat{\rho}_{(I)}(t) \right] + e^{\hat{H}^x} \frac{\partial \hat{\rho}_{(S)}(t)}{\partial t} e^{-\hat{H}^x} \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ \hat{H}_{(I)}^S + \hat{H}_{(I)}^R, \hat{\rho}_{(I)}(t) \right] - \frac{i}{\hbar} e^{\hat{H}^x} \left[ \hat{H}_{(S)}, \hat{\rho}_{(S)}(t) \right] e^{-\hat{H}^x} \\ &= \frac{i}{\hbar} \left[ \hat{H}_{(I)}^S + \hat{H}_{(I)}^R, \hat{\rho}_{(I)}(t) \right] - \frac{i}{\hbar} \left[ \hat{H}_{(I)}, \hat{\rho}_{(I)}(t) \right] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}, \hat{\rho}_{(I)}(t) \right] \end{aligned} \quad (5.6)$$

其中指数  $\hat{H}^x = i(\hat{H}^S + \hat{H}^R)t/\hbar$ ， $\hat{H}_{(S)}^{S,R}$  和  $\hat{H}_{(I)}^{S,R}$  为薛定谔绘景下的算符， $\hat{H}_{(I)}^{S,R}$  为交互绘景里的算符。上式又被称为交互绘景中的运动学方程。虽然我们的推导是建立在哈密顿量不显性含时的假设上的，但哈密顿量随时间变化时，上述交互绘景中的运动学方程仍然是成立的。

### 5.3 Integro-differential form of S.E.

#### 5.3.1 积分微分方程的正规形式

将 eq. (5.6) 等式两端进行积分, 我们得到

$$\hat{\rho}_{(I)}(t) = \hat{\rho}_{(I)}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t [\hat{H}_{(I)}^{\text{SR}}(t'), \hat{\rho}_{(I)}(t')] dt' \quad (5.7)$$

将上述步骤循环一次, 我们得到二重积分形式:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{(I)}(t) = & \hat{\rho}_{(I)}(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' [\hat{H}_{(I)}^{\text{SR}}(t'), \hat{\rho}_{(I)}(0)] \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \int_0^{t'} dt' dt'' [\hat{H}_{(I)}^{\text{SR}}(t'), [\hat{H}_{(I)}^{\text{SR}}(t''), \hat{\rho}_{(I)}(t'')]] \end{aligned} \quad (5.8)$$

而把积分形式代入微分形式 eq. (5.6) 中, 我们得到:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{(I)}(t) = & \frac{1}{i\hbar} \left[ \hat{H}_{(I)}^{\text{SR}}(t), \hat{\rho}_{(I)}(0) + \int_0^t [\hat{H}_{(I)}^{\text{SR}}(t'), \hat{\rho}_{(I)}(t')] dt' \right] \\ = & \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}_{(I)}^{\text{SR}}(t), \hat{\rho}_{(I)}(0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t [\hat{H}_{(I)}^{\text{SR}}(t), [\hat{H}_{(I)}^{\text{SR}}(t'), \hat{\rho}_{(I)}(t')]] dt' \end{aligned} \quad (5.9)$$

上式被称为薛定谔方程的积分微分形式 (**Integro-differential form**)。我们关注点经常还是会放在系统的密度算子  $\hat{\rho}_{(I)}^{\text{S}}(t)$  上, 但因为这个等式非常复杂, 通常不会利用这个等式求密度矩阵的解析解。然而有以下几个近似, 在求  $\hat{\rho}_{(I)}^{\text{S}}(t)$  的近似表达式时非常有用。

#### 5.3.2 几个近似

仿照 eq. (5.3) 的思想, 我们知道, 一个系统的密度算符如果仅仅是写成系统  $\hat{\rho}_{(I)}^{\text{S}}(t)$  和环境  $\hat{\rho}_{(I)}^{\text{R}}(t)$  的张量积, 是绝对不够完备的, 因此我们将为其补充一项交互项, 使其变成:

$$\hat{\rho}_{(I)}(t) = \hat{\rho}_{(I)}^{\text{S}}(t) \otimes \hat{\rho}_{(I)}^{\text{R}}(t) + \hat{\rho}_{(I)}^{\text{SR}}(t) \quad (5.10)$$

#### Born-Markov Approximation (Product Initial State Assumption)

假设系统是在  $t = 0$  的时候才开始与环境有交互的, 即

$$\hat{\rho}_{(I)}(0) = \hat{\rho}_{(I)}^{\text{S}}(0) \otimes \hat{\rho}_{(I)}^{\text{R}}(0) \quad (5.11)$$

那么对 eq. (5.8) 等式两边取对环境 R 的部分迹，可以得到：

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_{(I)}^S(t) &= \hat{\rho}_{(I)}^S(0) + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \text{Tr}_R \left\{ \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t'), \hat{\rho}_{(I)}^S(0) \right] \right\} \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \int_0^{t'} dt' dt'' \text{Tr}_R \left\{ \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t'), \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t''), \hat{\rho}_{(I)}^S(t'') \right] \right] \right\}\end{aligned}\quad (5.12)$$

根据上述假设，可得  $\text{Tr}_R \left\{ \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t), \hat{\rho}_{(I)}^S(0) \right] \right\} = 0$ ，于是上述等式变为：

$$\hat{\rho}_{(I)}^S(t) = \hat{\rho}_{(I)}^S(0) - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \int_0^{t'} dt' dt'' \text{Tr}_R \left\{ \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t'), \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t''), \hat{\rho}_{(I)}^S(t'') \right] \right] \right\} \quad (5.13)$$

### Born Approximation (Weak Coupling)

弱耦合意味着我们在 eq. (5.10) 中添加的耦合项可以忽略，可得：

$$\hat{\rho}_{(I)}(t) = \hat{\rho}_{(I)}^S(t) \otimes \hat{\rho}_{(I)}^R(t) \quad (5.14)$$

当环境非常的“庞大”时，即使系统发生改变，环境也能迅速地弛豫回到原来的状态 ( $t \gg \tau^R$ )，故上述的弱耦合条件可以进一步简化，可得：

$$\hat{\rho}_{(I)}(t) = \hat{\rho}_{(I)}^S(t) \otimes \hat{\rho}_{(I)}^R(0) \quad (5.15)$$

代入到 eq. (5.13)，并进行微分可得：

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_{(I)}^S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \text{Tr}_R \left\{ \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t), \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t'), \hat{\rho}_{(I)}^S(t') \otimes \hat{\rho}_{(I)}^R(0) \right] \right] \right\} \quad (5.16)$$

### Markov Approximation (Memory-less Assumption)

除此以外，弱耦合假设还暗含了另外一个条件，即  $\hat{H}_{(I)}^{SR}(t')$  对系统密度矩阵的影响也只被视作“微扰”，故在  $t$  足够长的一段时间内，对系统的密度矩阵进行积分操作，总会抹平这些微扰带来的影响。因此上述等式可转变为时间局域形式 (**time-local form**)，即可以用  $\hat{\rho}_{(I)}^S(t)$  直接替换等式中的  $\hat{\rho}_{(I)}^S(t')$ ，变成：

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_{(I)}^S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \text{Tr}_R \left\{ \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t), \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t'), \hat{\rho}_{(I)}^S(t) \otimes \hat{\rho}_{(I)}^R(0) \right] \right] \right\} \quad (5.17)$$

然后我们令  $s = t - t'$ ，用于指示在  $s$  时段前，系统与环境之间耦合作用的影响，则上述积分将会变成：

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_{(I)}^S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t ds \text{Tr}_R \left\{ \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t), \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t-s), \hat{\rho}_{(I)}^S(t) \otimes \hat{\rho}_{(I)}^R(0) \right] \right] \right\} \quad (5.18)$$

而马尔可夫假设是弱耦合条件下，系统的记忆是很短的（考虑一个指数递减函数，积不积分后面对最终积分值差别不大），所以把  $s$  的积分上限直接拉满，上述积分变为：

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_{(I)}^S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty ds \text{Tr}_R \left\{ \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t), \left[ \hat{H}_{(I)}^{SR}(t-s), \hat{\rho}_{(I)}^S(t) \otimes \hat{\rho}_{(I)}^R(0) \right] \right] \right\} \quad (5.19)$$

上述的等式也被称为 **Markovian quantum master equation**。