量子信息基础

# 第三章：算符与矩阵

金潮渊
浙江大学信息与电子工程学院

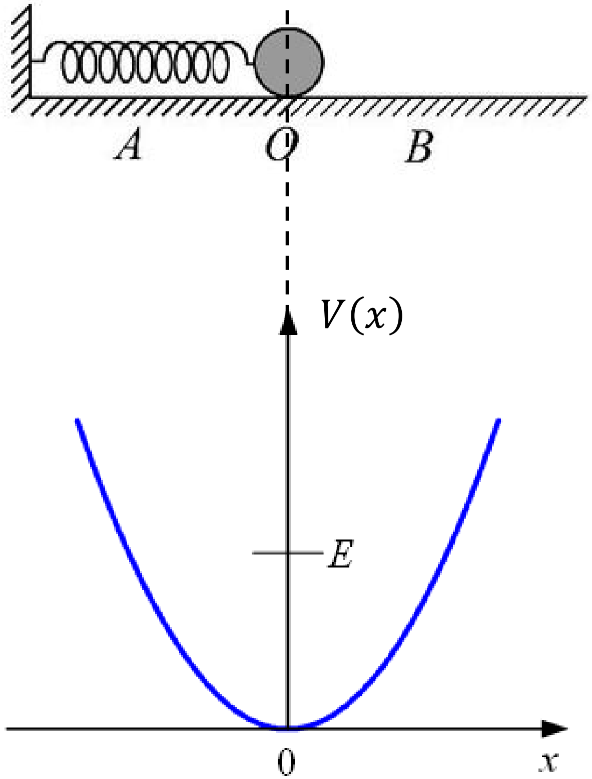
# C3-4 简谐振子模型和光子

# 课程回顾

## 对易关系与不确定性原理:

- 当粒子处于算符 $\hat{A}$ 的某一本征态 $|\psi_n\rangle$ 时，力学量 $A$ 将有确定值 $\lambda_n$。当粒子处于算符 $\hat{A}$ 的非本征态 $|\phi\rangle$时，测量将得到特征值谱系中的任何一个（$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \ldots$）。对态$|\phi\rangle$的测量，将坍缩到任意本征态$|\psi_n\rangle$和本征值$\lambda_n$。
- 力学量 $A$ 和 $B$ 在态 $|\phi\rangle$ 中同时有确定值的条件是：算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 可对易，$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$。$\hat{A}$ 和 $\hat{B}$将具有共同的本征函数系。
- 事实上，每一对算符不对易的可观测量都存在一个“不确定原理”— 我们称它们为不相容可观测量。不相容可观测量没有完备的共同本征函数系。比如位移和动量，时间和能量，粒子数和相位。

# 一维简谐振子




自然界广泛存在简谐振动，任何体系在平衡位置附近的振动，例如分子振动、晶格振动、原子核表面振动以及辐射场的振动等往往都可以分解成若干彼此独立的一维简谐振动。简谐振动往往还作为复杂运动的初步近似，所以简谐振动的研究，无论在理论上还是在应用上都很重要。

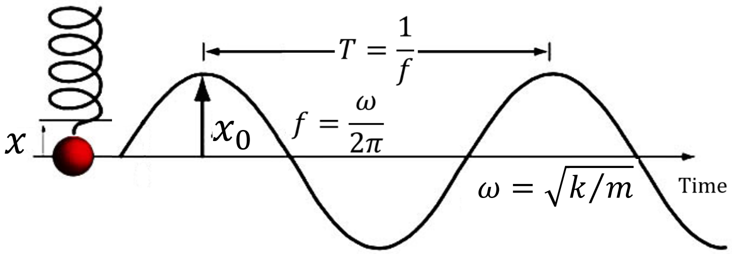
若取 $x=0$，即平衡位置处于势能零点 $V=0$，则：

$$F(x)=-\frac{dV}{dx}=-kx, \omega=\sqrt{k/m} \qquad V=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

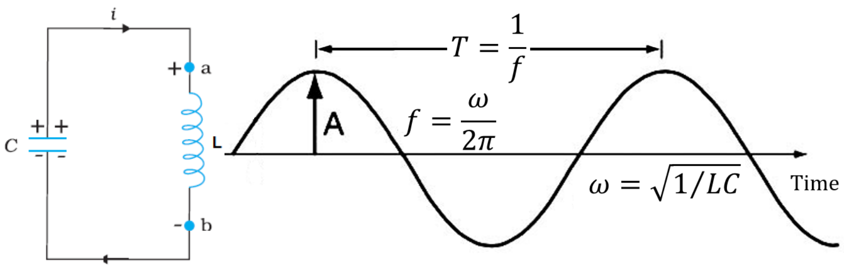
量子力学中的线性谐振子就是指在该式所描述的势场中运动的粒子。

$$E=T+V=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

# 简谐振动和简谐波




弹簧振子




$LC$ 回路

- 简谐振动所产生的波称做简谐波
- 简谐波可以用含时的正弦和余弦函数来表示

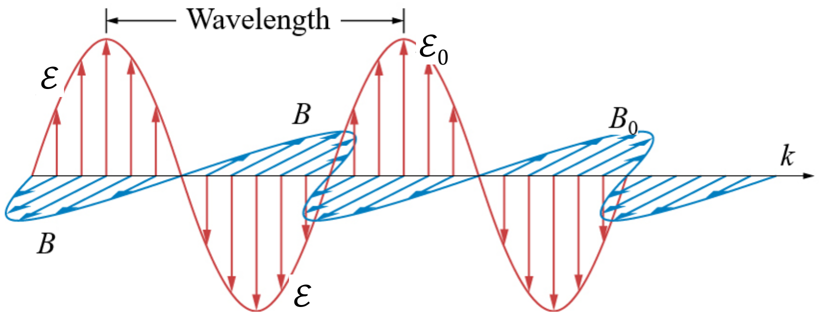
$$x(t) = x_0 \sin(\omega t + \varphi) \sim x_0 \sin(\omega t)$$

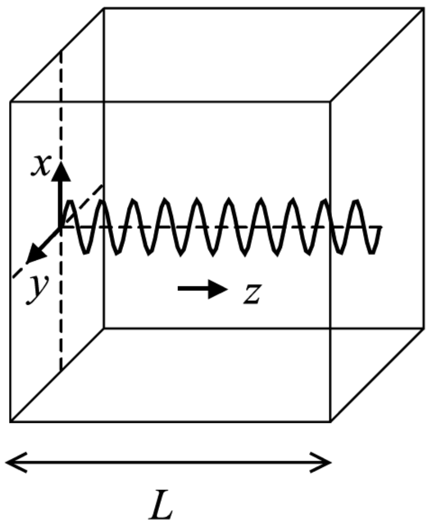
$$p(t) = m\frac{dx}{dt} = p_0 \cos(\omega t + \varphi) \sim p_0 \cos(\omega t)$$

$$p_0 = m\omega x_0$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2m}p_0^2\cos^2(\omega t) + \frac{m\omega^2}{2}x_0^2\sin^2(\omega t)$$

# 电磁波




电磁场能量密度： $U = \frac{1}{2}\varepsilon_0\mathcal{E}^2 + \frac{1}{2}\frac{B^2}{\mu_0}$

正方体$V$内的能量： $E = \frac{V}{4}\left(\varepsilon_0\mathcal{E}_0^2\sin^2(\omega t) + \frac{B_0^2}{\mu_0}\cos^2(\omega t)\right)$

定义：

$$\begin{cases} q(t) = \left(\dfrac{\varepsilon_0 V}{2\omega^2}\right)^{1/2} \mathcal{E}_0\sin(\omega t) \\ p(t) = \left(\dfrac{V}{2\mu_0}\right)^{1/2} B_0\cos(\omega t) \end{cases} \qquad B_0 = \mathcal{E}_0/c_0$$

$$\therefore E = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2)$$ 磁场和电场

经典谐振子：

$$E = \frac{1}{2}\left(\frac{p^2}{m} + m\omega^2 x^2\right)$$ 动能和势能

# 定态方程

一维简谐振子的定态方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$$

令 $p\equiv\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$

$$\frac{1}{2m}[p^2+(m\omega x)^2]\psi=E\psi \qquad \therefore\ H=\frac{1}{2m}[p^2+(m\omega x)^2]$$

构造升降算符

$$a_\pm=\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip+m\omega x) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\ ❶$$

$$a_-a_+=\frac{1}{2\hbar m\omega}(ip+m\omega x)(-ip+m\omega x)=\frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2+(m\omega x)^2-im\omega(xp-px)]$$

引入对易关系

$$[A,B]\equiv AB-BA$$

$$\therefore\ a_-a_+=\frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2+(m\omega x)^2]-\frac{i}{2\hbar}[x,p]$$

# 对易关系

$$[x,p]f(x)=\left[x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(f)-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(xf)\right]=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{df}{dx}-x\frac{df}{dx}-f\right)=i\hbar f(x)$$

位移和动量的对易关系： $[x,p]=i\hbar$ ………………………………………… ❷

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

$$\begin{cases} a_-a_+=\dfrac{1}{\hbar\omega}H+\dfrac{1}{2} \\ H=\hbar\omega\left(a_-a_+-\dfrac{1}{2}\right)\end{cases}$$

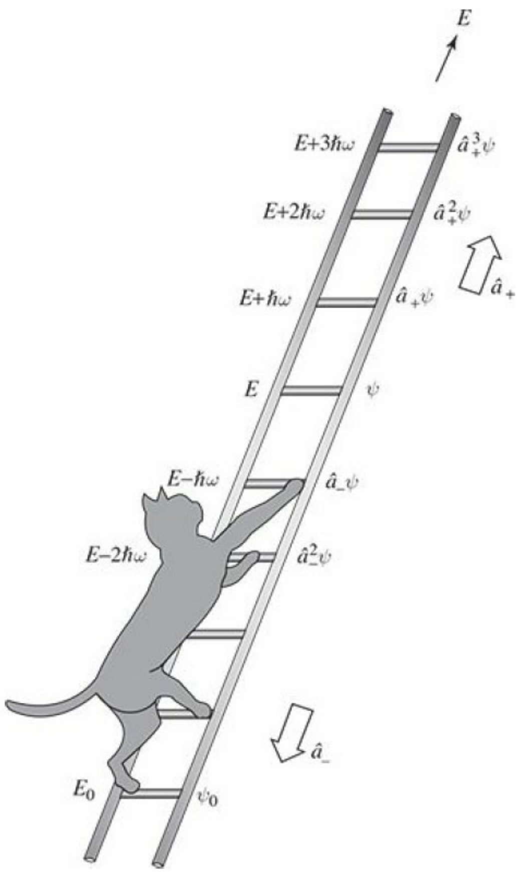
或者

$$\begin{cases} a_+a_-=\dfrac{1}{\hbar\omega}H-\dfrac{1}{2} \\ H=\hbar\omega\left(a_+a_-+\dfrac{1}{2}\right)\end{cases}$$

升降算符的对易关系 $[a_-,a_+]=1$ ………………………………………… ❸

# 产生消灭算符

$[a_-, a_+] = 1$




考虑作用在波函数上的$a_\pm$

$$H(a_+\psi) = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)(a_+\psi) = \hbar\omega\left(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}a_+\right)\psi = a_+\hbar\omega\left(a_-a_+ + \frac{1}{2}\right)\psi$$

$$= a_+\hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2} + 1\right)\psi = a_+(H + \hbar\omega)\psi = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$$

如果$\psi$是$H\psi = E\psi$ 的解，则 $a_+\psi$ 是 $H\psi = E'\psi = (E + \hbar\omega)\psi$ 的解

$$H(a_-\psi) = \hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right)(a_-\psi) = \hbar\omega\left(a_-a_+a_- - \frac{1}{2}a_-\right)\psi = a_-\hbar\omega\left(a_+a_- - \frac{1}{2}\right)\psi$$

$$= a_-\hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2} - 1\right)\psi = a_-(H - \hbar\omega)\psi = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$$

如果$\psi$是$H\psi = E\psi$ 的解，则 $a_-\psi$ 是 $H\psi = E'\psi = (E - \hbar\omega)\psi$ 的解

# 零点能

假设存在最低能级 $\psi_0$ $\qquad a_-\psi_0 = 0$

从❶式可得

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\hbar\frac{d}{dx}+m\omega x\right)\psi_0 = 0$$

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

得到

$$\psi_0(x) = Aexp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

归一化后

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

考虑到 $\hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)\psi_0 = E_0\psi_0$ 和 $a_-\psi_0 = 0$ $\qquad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ $\qquad$ 真空零点能

# 粒子数算符

考虑第$n$个能级有

$$E_n = E_0 + n\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

定态波函数 $\psi_n$满足

$$H\psi_n = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_n = E_n\psi_n$$

$$a_+a_-\psi_n = n\psi_n$$

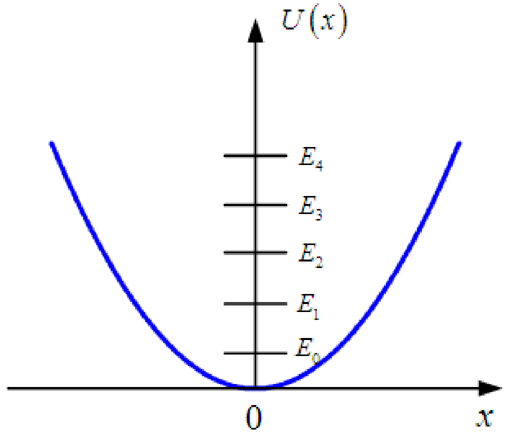
粒子数算符 $\hat{n} = a_+a_-$

第$n$个波函数 $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n\psi_0$

简谐振子的波函数互相正交

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_n dx = \delta_{mn}$$

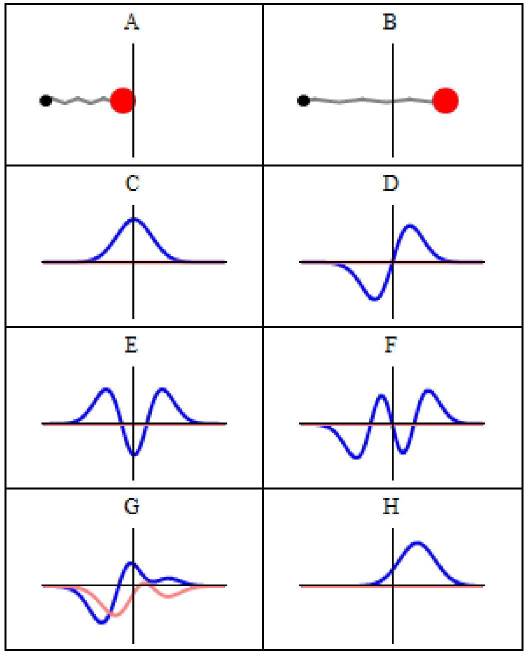
# 小结：简谐振子的能级




线性谐振子的能级

- 简谐振子的能量 $E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega,\ n = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$
- 能量间隔 $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$
- 零点能 $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$
- 零点能量不等于零是量子力学中特有的，是微观粒子波粒二象性的表现，能量为零的静止的波是没有意义的。零点能也反映了空间的量子性质，绝对的真空或者孤立的空间是不存在的。

# 小结：简谐振子的波函数




- 波函数的波节数对应于其量子数
- 第n能级的波函数表达式 $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n \psi_0$
- 波函数相互正交 $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}$

# 粒子数表象下的狄拉克符号

粒子数表象（number state representation ） $\psi_n \equiv |n\rangle$

定态薛定谔方程 $$H|n\rangle = E_n|n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle$$

产生消灭算符 $$a_+|n\rangle = (n+1)^{1/2}|n+1\rangle$$ $$a_-|n\rangle = n^{1/2}|n-1\rangle$$

波函数 $$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n|0\rangle \qquad a_-|0\rangle = 0$$

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

粒子数算符 $$a_+a_-|n\rangle = n^{1/2}a_+|n-1\rangle = \hat{n}|n\rangle$$

# 解析法(不做要求)

一维简谐振子的定态方程：
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$$

等式两边除以 $-\hbar\omega/2$ 得到

$$\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2\psi}{dx^2}-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\psi=-\frac{2E}{\hbar\omega}\psi \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{d\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)^2}+\left[\frac{2E}{\hbar\omega}-\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)^2\right]\psi=0$$

为了简化方程，引入两个新的变量
$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \qquad \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}$$

得到简化的一维简谐振子定态方程：
$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+(\lambda-\xi^2)\psi=0 \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \text{④}$$

# 求解定态方程(不做要求)

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0$$

为求解方程，我们先看一下它的渐近解，即当 $\xi \to \pm\infty$ 时波函数 $\psi$ 的行为。在此情况下，$\lambda \ll \xi^2$，于是方程变为：

$$\frac{d^2\psi_\infty}{d\xi^2} = \xi^2\psi_\infty$$

其解为

$$\psi_\infty = \exp(\pm\xi^2/2) \qquad \text{应用态叠加原理} \ \therefore \psi_\infty = c_1\exp(\xi^2/2) + c_2\exp(-\xi^2/2)$$

验证解的正确性

$$\frac{d\psi_\infty}{d\xi} = \frac{d}{d\xi}\exp(\pm\xi^2/2) = \pm\xi\exp(\pm\xi^2/2) = \pm\xi\psi_\infty$$

$$\frac{d^2\psi_\infty}{d\xi^2} = \frac{d}{d\xi}(\pm\xi\psi_\infty) = \pm\psi_\infty \pm \xi\frac{d\psi_\infty}{d\xi} = (\xi^2 \pm 1)\psi_\infty \approx \xi^2\psi_\infty$$

# 波函数条件(不做要求)

波函数连续有限： $c_1 = 0$

归一化条件： $c_2 = 1$

所以一维简谐振子波函数在 $\xi \to \pm\infty$ 处的渐进解为： $\psi_\infty = \exp(-\xi^2/2)$

我们不妨设置波函数的解析式为

$$\psi(\xi) = CH(\xi)\exp(-\xi^2/2) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \text{⑤}$$

其中 $H(\xi)$ 必须满足波函数的单值、有限、连续的标准条件。即：

① 当$\xi$有限时，$H(\xi)$有限；

② 当$\xi \to \pm\infty$时，$H(\xi)$的行为要保证$\psi(\xi) \to 0$。

# 厄米方程(不做要求)

将❺代入❶式得到

$$\frac{d^2H(\xi)}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH(\xi)}{d\xi}+(\lambda-1)H(\xi)=0$$

用常微分方程的幂级数解法求厄米方程满足有限性条件的有限解，可得厄米方程本征值问题的本征值

$$\lambda_n=2n+1,\ n=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

和哈密顿量

$$H_n(\xi)=(2\xi)^n-n(n-1)(2\xi)^{n-2}+\cdots+(-1)^{(n/2)}\frac{n!}{(n/2)!}(2\xi)^{n-2(n/2)}$$

厄米多项式

# 厄米多项式(不做要求)

我们来看几个厄米多项式

$$H_0 = 1$$
$$H_1 = 2\xi$$
$$H_2 = 4\xi^2 - 2$$
$$H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$$
$$H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$$
$$H_5 = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi$$

厄米多项式的微分形式

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi 2}$$

厄米多项式的积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi}$$

# 本征波函数(不做要求)

$$\psi_n(\xi) = C_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \xrightarrow{\xi = \alpha x} \psi_n(x) = C_n e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x)$$

归一化

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = 1$$

运用积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi)d\xi = 2^n n!\sqrt{\pi}$$

求得归一化常数

$$C_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2}$$

本征波函数：

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2} e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x)$$

# 能量本征值(不做要求)

含时间的本征波函数

$$\Psi_n(x,t)=\psi_n(x)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_n t)$$
$$=(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!})^{1/2}e^{-\alpha^2x^2/2}H_n(\alpha x)\exp(-\frac{i}{\hbar}E_n t)$$

由 $\lambda=\frac{2E}{\omega\hbar}$ 和 $\lambda_n=2n+1$ 可得线性谐振子的能量本征值

$$E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega,\ n=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

# 参考文献

- 简谐振子模型和光子主要参考：
  - 教材David J. Griffiths, and Darrell F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics (3rd Edition), Cambridge University Press (2018). 第2.3小节。
  - 仲顺安等，理论物理导论（第3版），北京理工大学出版社。第2.6小节的内容。

# 第六章小结

- 量子力学中的可观测量一般情况下由厄米算符来表示。厄米算符的期望值为实数。如果厄米算符的本征值谱是分立的，则厄米算符的本征函数满足正交归一性和完备性。如果厄米算符的本征值谱是连续的，本征函数不可归一化，它们不在希尔伯特空间内并且不能代表可能的物理态；然而具有实数本征值的本征函数具有狄拉克正交归一性，并且是完备的。
- 量子力学中的波函数存在于希尔伯特空间中，可以由希尔伯特空间中的矢量符号来表示。希尔伯特空间中的坐标系被称作表象。选择不同力学量的本征函数（本征矢量）为基，就对应于不同的坐标系，也就是对应于不同的表象。表象之间的变换算符为幺正算符。
- 力学量 $A$ 和 $B$ 在态 $|\phi\rangle$ 中同时有确定值的条件是：算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 可对易，$\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$。$\hat{A}$ 和 $\hat{B}$将具有共同的本征函数系。每一对算符不对易的可观测量都存在一个“不确定原理”— 我们称它们为不相容可观测量。
- 在简谐振子模型中引入升降算符，可以实现光子的量子化，从而引入粒子数算符，一般称为二次量子化过程。