

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



C3-1 算符和可观测量



课程回顾

- 矩阵表示和数值求解定态薛定谔方程

- a. 物理量之间的不对易关系是矩阵力学的出发点。

- b. 把定态波函数在空间上差分，写成基函数态叠加的形式 $\psi(x) = \sum_{n=1}^N \varphi_n \delta(x - n \cdot \Delta x)$ ，任何建立在基函数矢量所张开的希尔伯特空间中的波函数都可以表达为矢量的形式：

$$|\psi\rangle = [\varphi_1 \quad \varphi_2 \quad \varphi_3 \quad \cdots \quad \varphi_{N-1} \quad \varphi_N]^T$$

- c. 将动能和势能算符作用到每一个矢量元素上得到

$$H = \begin{bmatrix} 2\chi_0 + V_1 & -\chi_0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -\chi_0 & 2\chi_0 + V_2 & -\chi_0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -\chi_0 & 2\chi_0 + V_3 & \cdots & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2\chi_0 + V_{N-1} & -\chi_0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\chi_0 & 2\chi_0 + V_N \end{bmatrix}$$

- d. 因此定态薛定谔方程转化成求解上述矩阵的本征值问题 $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ 。



波函数与算符(1)

- 波函数和算符是量子理论的基石。体系的状态由波函数表示；可观测量用算符表示。
- 从矩阵力学角度来看，波函数满足抽象矢量的定义条件；算符作为线性变换作用于矢量之上。因此，线性代数是量子力学的自然语言。
- 在 N 维空间里，可以定义一套正交归一的基矢量，空间内的矢量 \vec{a} 都可以定义成映射在基矢量上的分量 $\{a_n\}$ ，即

$$|\alpha\rangle = \vec{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix}$$

- 两个矢量的内积则定义为 $\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^*b_1 + a_2^*b_2 + \cdots a_N^*b_N$ ，是一个复数。线性变换 T 则用矩阵表示，比如

$$|\beta\rangle = T|\alpha\rangle \rightarrow \vec{\beta} = T\vec{a} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1N} \\ t_{21} & t_{22} & \cdots & t_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_{N1} & t_{N2} & \cdots & t_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix}$$



希尔伯特空间

- 量子力学中的波函数一般是归一化的 $\int |\Psi|^2 dx = 1$ ，假设在特定区域内平方可积函数的集合 $f(x)$ 满足 $\int |f(x)|^2 dx < \infty$ ，构成一个矢量空间，称为希尔伯特空间。量子力学中的波函数存在于希尔伯特空间中。
- 在希尔伯特空间中可以定义波函数的内积 $\langle f|g \rangle \equiv \int_a^b f^*(x)g(x)dx$ ，这时有 $\langle g|f \rangle = \langle f|g \rangle^*$ 。
- 如果一个波函数与自身的内积为1，我们称波函数是归一化的；如果两个波函数之间的内积为0，那么这两个波函数是正交的；如果存在一组函数既是归一的也是相互正交的，则称它们是正交归一的，即 $\langle f_m|f_n \rangle = \delta_{mn}$ 。
- 如果存在一组函数，希尔伯特空间中的其他任何函数都能表示为这组函数的线性组合，那么这组函数是完备的，即

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x)$$

如果 $\{f_n(x)\}$ 是正交归一的，则 $c_n = \langle f_n|f \rangle$ 。



量子比特

例1. 在量子比特的定义中，我们定义的实际上是二态体系的态函数（波函数）。在假想的二维希尔伯特空间里，我们可以定义态函数的基矢

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

这对基矢满足正交归一条件

$$\langle 0|0\rangle = 1 \quad \langle 1|1\rangle = 1 \quad \langle 1|0\rangle = 0 \quad \langle 0|1\rangle = 0$$

两个基矢之间的线性变化矩阵，即泡利矩阵 X

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

空间内的波函数矢量可以看作映射在基矢的分量 $\{c_0, c_1\}$ 的线性叠加

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{on the basis of}} \begin{matrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{matrix}$$

且

$$c_0 = \langle 0|\psi\rangle \quad c_1 = \langle 1|\psi\rangle$$



厄米算符

$$\langle \psi | A \phi \rangle = \langle A \phi | \psi \rangle^* = \langle \phi | A^\dagger | \psi \rangle^*$$

- 可观测量 Q 的期望值（平均值）可以用内积符号简洁地表示出来

$$\langle Q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi dx = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle$$

- 一般认为测量的结果是实数，所以 $\langle Q \rangle^* = \langle Q \rangle$ ，而且 $\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \hat{Q} \Psi | \Psi \rangle$ 。如果 $\langle f | \hat{Q} f \rangle = \langle \hat{Q} f | f \rangle$ 对任何 $f(x)$ 成立，我们称这样的算符 \hat{Q} 为厄米算符。
- 对于厄米算符， $\langle f | \hat{Q} g \rangle = \langle \hat{Q} f | g \rangle$ 成立，所以厄米算符既可以作用在内积的右侧，也可以作用在内积的左侧。
- 由于厄米算符的期望值为实数，量子力学中的可观测量都是由厄米算符来表示。



确定值态

- 在量子测量中，由于不确定性原理，每次测量并不能得到同样的结果。但问题在于，是否能够找到一个态使得每次观测 Q 都得到同样的值 q 。我们称这样的态为观测 Q 的确定值态。
- 我们知道，测量一个粒子处于定态本征态 ψ_n 时的总能量，必定得到相应的能量本征值 E_n 。因为 Q 的标准差在定态时应该为零

$$\sigma^2 = \langle (\hat{Q} - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle \Psi | (\hat{Q} - q)^2 | \Psi \rangle = \langle (\hat{Q} - q) \Psi | (\hat{Q} - q) \Psi \rangle = 0$$

因此 $\hat{Q}\Psi = q\Psi$ 。确定值态是 Q 的本征函数， q 是对应的本征值。在确定值态上测量得到的结果是本征值。

- 算符所有本征函数的集合称为算符的本征函数系，所有本征值的集合称为算符的本征值谱。有时两个或者多个线性独立的本征函数对应于相同的本征值，这种情况称之为简并。



哈密顿算符

例2. 定态薛定谔方程

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

对于给定势场，可以得到一系列特解 $\{\psi_n\}$ ，相应的能量本征值为 $\{E_n\}$ 。因此在态 ψ_n 上，对粒子总能量的测量 \hat{H} 具有固定的值 E_n 。 ψ_n 称为算符 \hat{H} 的本征态，也是算符 \hat{H} 的确定值态， E_n 称为算符 \hat{H} 的本征值。 $\{\psi_n\}$ 组成 \hat{H} 的本征函数系， $\{E_n\}$ 组成 \hat{H} 的本征值谱。

当解 \hat{H} 的本征方程，得到的某一本征值 E_n 可能对应不止一个本征函数，而是 f 个线性无关的本征函数 $\psi_n^1, \psi_n^2, \psi_n^3, \dots, \psi_n^f$ 。这种情况称为 f 度简并。即有

$$\hat{H}\psi_n^i = E_n\psi_n^i \quad i = 1, 2, \dots, f$$



分立谱(1)

- 厄米算符的本征函数，即可观测量的定态，可以分成两类情况讨论：（1）分立谱。本征值是分立的；本征函数处于希尔伯特空间中，并构成物理上可实现的态。（2）连续谱。本征值连续；本征函数不可归一化。
- 某些算符仅有分立谱（谐振子的哈密顿量）；某些算符仅有连续谱（自由粒子的哈密顿量）；某些既有分立谱，也有连续谱（有限深方势阱中粒子的哈密顿量）。

定理一：厄米算符可归一化的本征函数的本征值是实数。

假设 $\hat{Q}f = qf$ ，并且 $\langle f | \hat{Q}f \rangle = \langle \hat{Q}f | f \rangle$ ，那么有 $q\langle f | f \rangle = q^*\langle f | f \rangle$ ，因此 $q = q^*$ ，证毕。

定理二：厄米算符属于不同本征值的本征函数是正交的。

假设 $\hat{Q}f = qf$ ， $\hat{Q}g = q'g$ ， \hat{Q} 是厄米算符， $\langle f | \hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}f | g \rangle$ ，那么有 $q'\langle f | g \rangle = q\langle f | g \rangle$ ，其中 $q' \neq q$ ，因此 $\langle f | g \rangle = 0$ ，证毕。



分立谱(2)

- 为什么任意形状无限深势阱的定态波函数都是正交的？因为它们都是哈密顿量（可观测量）具有不同本征值的本征函数。注意：这不是哈密顿量所独有的性质，而是对所有可观测量的定态波函数都成立。
- 对于简并的情况，可以利用格拉姆·施密特（Gram-Schmidt）正交化步骤构建正交化的本征函数。因此，即使简并存在，本征函数仍然可以选择正交。

公理：可观测量算符的本征函数是完备的。

在有限维的矢量空间中，厄米矩阵的本征矢量构成一个希尔伯特空间，即任何一个矢量都可以用本征矢量的线性组合来表示。

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x) \quad \text{其中 } c_n = \langle f_n | f \rangle$$



标准正交矩阵

- 在数值求解薛定谔方程的过程中，我们得到了本征波函数的解 ϕ ，即本征函数系所构造的标准正交矩阵。

- 标准正交矩阵即把正交向量组 $\{\phi_1, \phi_2, \phi_3, \dots, \phi_n\}$ 列在同一个矩阵中

$$\phi = \Phi = [\phi_1 \quad \phi_2 \quad \phi_3 \quad \cdots \quad \phi_{N-1} \quad \phi_N]$$

- 标准正交矩阵满足

$$\Phi^T \Phi = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \vdots \\ \phi_{N-1} \\ \phi_N \end{bmatrix} [\phi_1 \quad \phi_2 \quad \phi_3 \quad \cdots \quad \phi_{N-1} \quad \phi_N] = I$$

- 所以有

$$\Phi^T = \Phi^{-1}$$



连续谱(1)

- 如果一个厄米算符的谱是连续的，由于内积可能不存在，其本征函数是不归一化的，定理一和定理二的证明就不成立。然而在某种意义上的三个基本性质（实数性，正交性，完备性）依然成立。下面给出一个实例。
- 假设 $f_p(x)$ 是本征函数， p 是本征值

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f_p(x) = p f_p(x)$$

上式的一般解为

$$f_p(x) = A e^{ipx/\hbar}$$

对于任何（复数的） p 值，解都不是平方可积的，即动量算符在希尔伯特空间内没有本征函数。然而对于实数的本征值，我们可以得到一个人工的正交归一性。

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{p'}^*(x) f_p(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx = |A|^2 2\pi\hbar \delta(p - p')$$



连续谱(2)

如果我们取 $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$, 则有

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

那么我们构造出

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = \delta(p - p')$$

这被称为狄拉克正交归一性, 现在的指标是一个连续的变量, 克罗内克符号变成了狄拉克符号。对于实数本征值, 不仅正交归一性成立, 其本征函数也是完备的, 任何函数 $f(x)$ 都可以写成

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) f_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{ipx/\hbar} dp$$

其系数为

$$c(p') = \langle f_{p'} | f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \langle f_{p'} | f_p \rangle dp = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \delta(p - p') dp$$



连续谱(3)

- 尽管 \hat{p} 的本征函数不处于希尔伯特空间内，但其中具有实数本征值的一部分，具有准正交归一性，它们不是可测量的物理态，但仍然很有用。
- 更一般地，如果厄米算符的谱是连续的，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。



广义统计诠释

- 如果测量一个处于 $\Psi(x, t)$ 态的粒子的可观测量 $Q(x, p)$ ，其结果一定是厄米算符 \hat{Q} 的一个本征值。
- 如果 \hat{Q} 的谱是分立的，得到正交归一函数 $f_n(x)$ 相应的本征值 q_n 的概率是 $|c_n|^2$ ，其中 $c_n = \langle f_n | \Psi \rangle$ 。
- 如果 \hat{Q} 的谱是连续的，具有实数本征值 $q(z)$ 以及狄拉克正交归一的本征函数 $f_z(x)$ ，则得到结果在 dz 中的概率是 $|c(z)|^2 dz$ ，其中 $c(z) = \langle f_z | \Psi \rangle$ 。
- 测量之后，波函数坍缩到相应的本征态。这就是所谓的波函数的广义统计诠释。



分立谱情况(1)

- 当一个力学量 Q 的本征函数系是完备的，波函数可以写做本征函数的线性组合

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n f_n(x)$$

展开系数可以定为

$$c_n = \langle f_n | \Psi \rangle = \int f_n^*(x) \Psi(x, t) dx$$

由于波函数归一化

$$1 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \sum_{n'} c_{n'} f_{n'}(x) | \sum_n c_n f_n(x) \rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n \langle f_{n'} | f_n \rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n \delta_{n' n} = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2$$



分立谱情况(2)

- 力学量 Q 的期望值（即测量结果）为

$$\langle Q \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \sum_{n'} c_{n'} f_{n'}(x) | \hat{Q} \sum_n c_n f_n(x) \rangle$$

考虑到 $\hat{Q}f_n = q_n f_n$ ，所以

$$\langle Q \rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n q_n \langle f_{n'} | f_n \rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n q_n \delta_{n'n} = \sum_n q_n |c_n|^2$$

即力学量 Q 的期望值应该是任何可能本征值与本征值出现概率的加权求和。



连续谱情况

- 考虑我们测量一个处于 Ψ 态的粒子的坐标 x ，波函数为 $g_{x'}(x) = \delta(x - x')$

$$c(x') = \langle g_{x'} | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \Psi(x, t) dx = \Psi(x', t)$$

所以在 x' 处发现粒子的可能性为 $|\Psi(x', t)|^2 dx$ 。同理可以据此检测狄拉克归一化条件。



参考文献

- 算符和可观测量主要参考：
 - 教材David J. Griffiths, and Darrell F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics (3rd Edition), Cambridge University Press (2018). 第3.1-3.4节。

