量子信息基础

第二章：量子信息物理基础

金潮渊
浙江大学信息与电子工程学院

C2-2 电子波函数和量子态

课程回顾

- 波动方程及其物理意义

a. 从经典波动方程的解 $\Psi = A_0 exp\left(i\left(\vec{\boldsymbol{k}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}} - \omega t + \varphi\right)\right)$ 出发，引入物质波假设 $\lambda = h/p$ 和能量量子化假设 $\nu = E/h$，构造出粒子波函数:

$$\Psi = A_0 exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{\boldsymbol{p}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}} - Et)\right)$$

b. 从粒子波函数出发，构造出力场中的亚原子粒子的波动方程，即薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi$$

c. 早期实验证据包括氢原子轨道模型和电子衍射实验。

d. 薛定谔方程必须满足连续性条件和归一化条件。

e. 薛定谔方程是一个线性方程，任意方程解的线性组合也是方程的解。由此可得出量子力学中极为重要的态叠加原理，即经典物理中波叠加原理的几率波版本。

f. 几率诠释引出了物理量的统计描述，比如平均值概念和不确定性原理。

薛定谔方程的解

- 理论上只要$V(\vec{\boldsymbol{r}},t)$已知，可以求出薛定谔方程的解，但含时方程的求解过程是复杂的。

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+V\Psi$$

- 如果我们转变一下思路，观察一下薛定谔方程的解，即粒子波函数的特点。

$$\Psi=A_0 exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{\boldsymbol{p}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}}-Et)\right)=A_0 exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\boldsymbol{p}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}}\right)exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$$

- 粒子波函数的位置和时间部分可以分离变量！
- 考虑到薛定谔方程的归一化条件不受含时演化的影响，有没有可能构造出一个定态的薛定谔方程？

定态薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi+V\Psi$$

当势场$V(\vec{\boldsymbol{r}})$不显含时间，则可以把方程简化。这时方程的解可以分解为两个因式：

$$\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)=\psi(\vec{\boldsymbol{r}})\varphi(t)$$

$$\therefore\quad \frac{\partial\Psi}{\partial t}=\psi\frac{\partial\varphi}{\partial t},\qquad \frac{\partial^2\Psi}{\partial r^2}=\varphi\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}$$

带入薛定谔方程得到：

$$i\hbar\psi\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\varphi\nabla^2\psi+V\psi\varphi \quad\Rightarrow\quad i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\nabla^2\psi+V$$

分离变量后得到：

$$\left\{\begin{array}{l} i\hbar\dfrac{1}{\varphi}\dfrac{\partial\varphi}{\partial t}=E \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{1}{\psi}\nabla^2\psi+V=E \end{array}\right. \quad\Rightarrow\quad \left\{\begin{array}{ll} \varphi(t)=e^{-iEt/\hbar} & \text{含时演化} \\ -\dfrac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi=E\psi & \text{定态薛定谔方程} \end{array}\right.$$

薛定谔方程的含时通解

- 定态波函数 $\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$

- 自由粒子的波函数（薛定谔方程含时通解）

$$\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)=A_0e^{i\vec{p}\cdot\vec{\boldsymbol{r}}/\hbar}e^{-iEt/\hbar}=\psi(\vec{\boldsymbol{r}})e^{-iEt/\hbar}$$

- 解薛定谔方程的过程简化为

解定态薛定谔方程 $\Rightarrow$ $\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$ $\Rightarrow$ $\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)=\psi(\vec{\boldsymbol{r}})e^{-iEt/\hbar}$

定态波函数

- 定态波函数需要满足连续性条件和归一化条件。产生粒子能量量子化的结果。

- 几率密度：粒子状态不随时间变化

$$|\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)|^2 = \Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t)^*\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t) = \psi(\vec{\boldsymbol{r}})^* e^{iEt/\hbar}\psi(\vec{\boldsymbol{r}})e^{-iEt/\hbar} = |\psi(\vec{\boldsymbol{r}})|^2$$

- 物理量的平均值：$\langle Q(x,p)\rangle$可以写为定态波函数的形式

$$\langle Q(x,p)\rangle = \int \psi^* Q\psi dx = \int \psi^* Q\left(x,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi dx$$

- 态叠加原理

$$\Psi(\vec{\boldsymbol{r}},t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(\vec{\boldsymbol{r}},t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(\vec{\boldsymbol{r}})e^{-iE_nt/\hbar}$$

哈密顿量

- 在经典物理中，体系的总能量（即动能和势能的和）称之为体系的哈密顿量。

$$H(x,p)=\frac{p^2}{2m}+V(x)$$

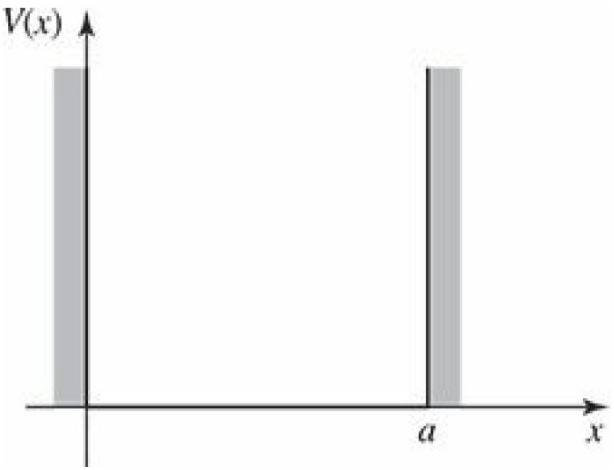
- 其所对应的哈密顿量算符为（考虑到 $\hat{p}=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$）

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)$$

- 定态薛定谔方程可以简化为 $\hat{H}\psi=E\psi$ 本征值问题

- 系统的能量平均值为 $\langle H\rangle=\int\psi^*\hat{H}\psi dr=E\int|\psi|^2dx=E$

一维无限深势阱



势能函数

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & x \le 0, x \ge a \end{cases}$$

微观粒子具有有限能量，故只能在$0 < x < a$范围内运动。

求解定态方程分四步：

a. 列出各势域的一维定态方程。
b. 各势域分别解方程。
c. 使用波函数边界条件定解。
d. 定归一化系数。

解定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi$$

由于$V(x)$ 不显含时间，属于定态问题

势阱内粒子的一维定态薛定谔方程（$V(x)$ =0）：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \qquad 0 < x < a$$

令 $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$ 则定态薛定谔方程改写为

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi + k^2\psi = 0$$

观察可得通解为

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \qquad 0 < x < a$$

其中常数A和B由边界条件和归一化条件决定。

边界条件

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

边界条件（连续性条件） $\psi(0) = \psi(a) = 0$ 得到：

$$\begin{cases} B = 0 \\ A\sin(ka) = 0 \end{cases}$$

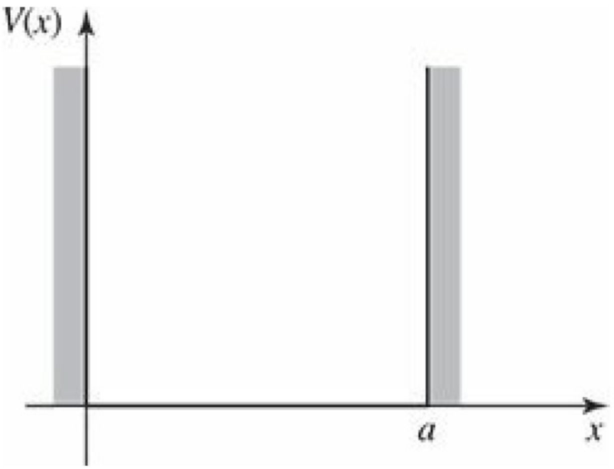
考虑非平凡解 $A \neq 0$ 得到

$$\sin(ka) = 0$$

$$ka = n\pi$$

$$\therefore \quad k = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3\cdots\cdots$$

k值量子化！



定态波函数

解得波函数为： $$\psi_n(x) = A\sin(kx) = A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

归一化条件： $$\int_0^a \psi_n^*\psi_n dx = 1$$

$$\int_0^a \left(A\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right)^2 dx = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \sqrt{2/a}$$

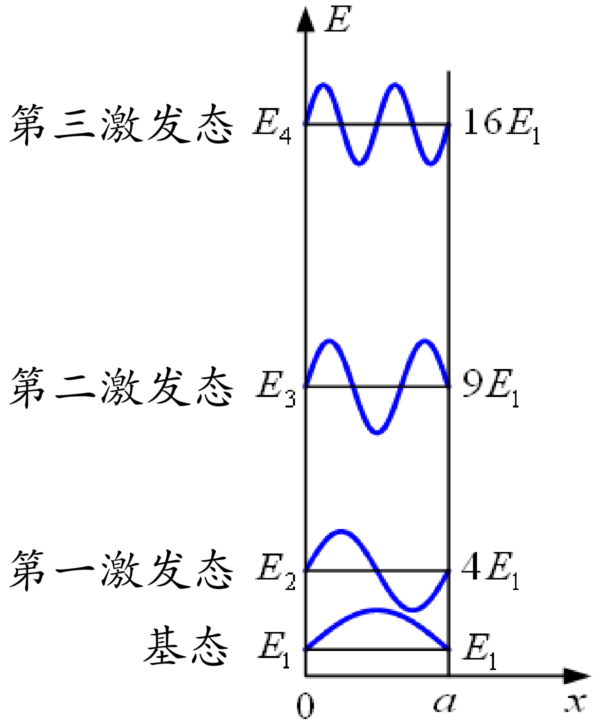
定态波函数： $$\psi_n(x) = \sqrt{2/a}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$ 本征函数

注意：1. n不能取0。2. ψ_n和ψ_{-n}表示的是同一状态，不给出新解。3. 在 $0 < x < a$ 区域内，ψ_n和 E_n 一一对应。

$$k_n = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} = \frac{n\pi}{a} \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = n^2 E_1$$ 本征能量

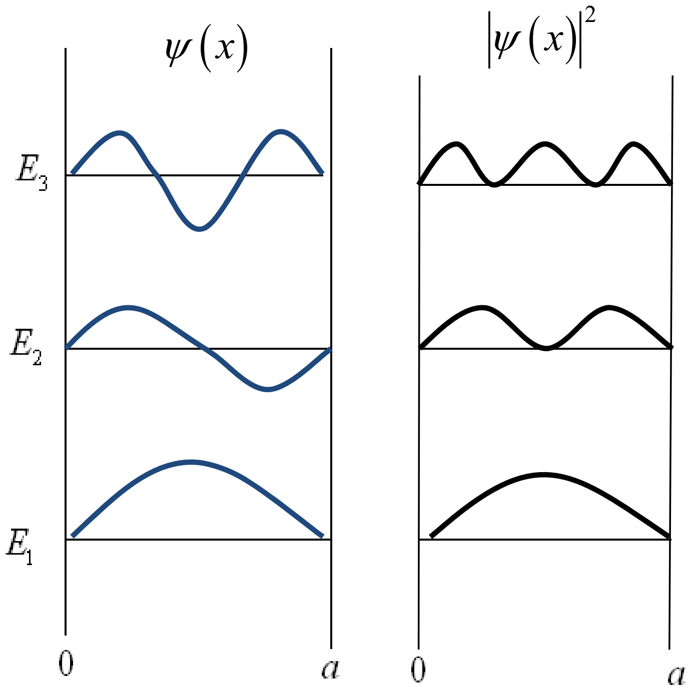
能量量子化！E_1为基态能量

能量量子化



- 能量不连续：$E_n = n^2 \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = n^2 E_1$
- 能量量子化是一切束缚态粒子的共性！
- 能量间隔：$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\left((n+1)^2 - n^2\right) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(2n+1)$
- 能量间隔不等，能量越高，间隔越大。
- 基态能量：$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \neq 0$

几率分布



$$n=3,\quad \psi_3=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{3\pi}{a}x)$$

$$n=2,\quad \psi_2=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{2\pi}{a}x)$$

$$n=1,\quad \psi_1=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{\pi}{a}x)$$

- 能量为E_1的粒子，在$x=a/2$处出现几率最大。
- 能量为E_2的粒子，在 $x=a/4$, $x=3a/4$处出现几率最大
- …
- 波函数有驻波形式。 当n大时，德布罗意波长短。在阱内各点上，粒子出现的几率不同，节点处，几率为0。

薛定谔方程的解析结果

- 无限深势阱
- 有限深势阱
- 多势阱、 delta势阱
- 氢原子
- 谐振子
- 自由粒子、散射、遂穿
- …

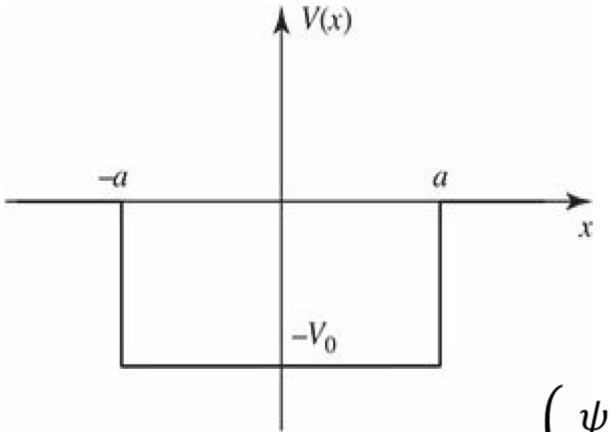
求解定态方程分四步：

a. 列出各势域的一维定态方程。
b. 各势域分别解方程。
c. 使用波函数边界条件定解。
d. 定归一化系数。

复杂体系的解：

a. 微扰方法（以耦合模理论为例）
b. 数值方法（以eigenfunction.m程序为例）

一维有限深势阱



- 解题思路： $$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}-V_0\psi=E\psi$$

猜出波函数解的形式 $$\begin{cases}\psi(x)=Fe^{\kappa x}, & x<-a\\ \psi(x)=A\sin kx+B\cos kx\,, & -a<x<a\\ \psi(x)=Ge^{-\kappa x}, & x>a\end{cases}$$

利用连续性条件，$\psi, d\psi/dx$ 在 $a,-a$ 处连续，得到：

对称：$$\begin{cases}\psi(\xi)=Bc_L\exp(\pi\sqrt{v_0-\varepsilon}\xi)\\ \psi(\xi)=B\cos(\pi\sqrt{\varepsilon}\xi)\\ \psi(\xi)=Bc_L\exp(-\pi\sqrt{v_0-\varepsilon}\xi)\end{cases}$$

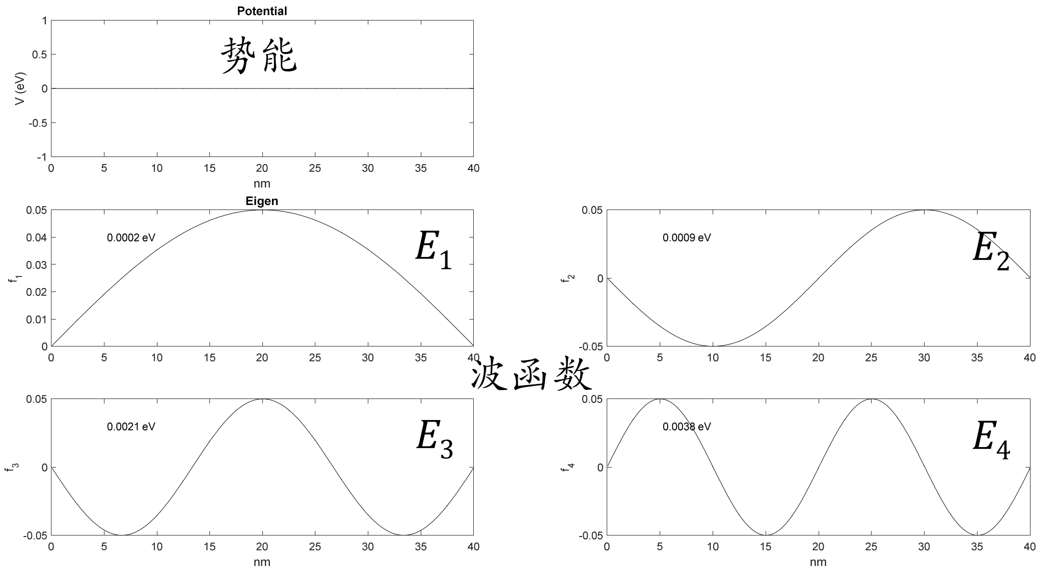
反对称：$$\begin{cases}\psi(\xi)=\text{-}As_L\exp(\pi\sqrt{v_0-\varepsilon}\xi)\\ \psi(\xi)=A\sin(\pi\sqrt{\varepsilon}\xi)\\ \psi(\xi)=As_L\exp(-\pi\sqrt{v_0-\varepsilon}\xi)\end{cases}$$

其中： $$\xi=\frac{x}{a},k=\frac{\pi}{a}\sqrt{\varepsilon},c_L=\frac{\cos\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{\varepsilon}\right)}{exp\left(-\frac{\pi}{2}\sqrt{v_0-\varepsilon}\right)},s_L=\frac{\sin\left(\frac{\pi}{2}\sqrt{\varepsilon}\right)}{exp\left(-\frac{\pi}{2}\sqrt{v_0-\varepsilon}\right)},\varepsilon=\frac{E}{E_1^\infty},v_0=\frac{V_0}{E_1^\infty}$$

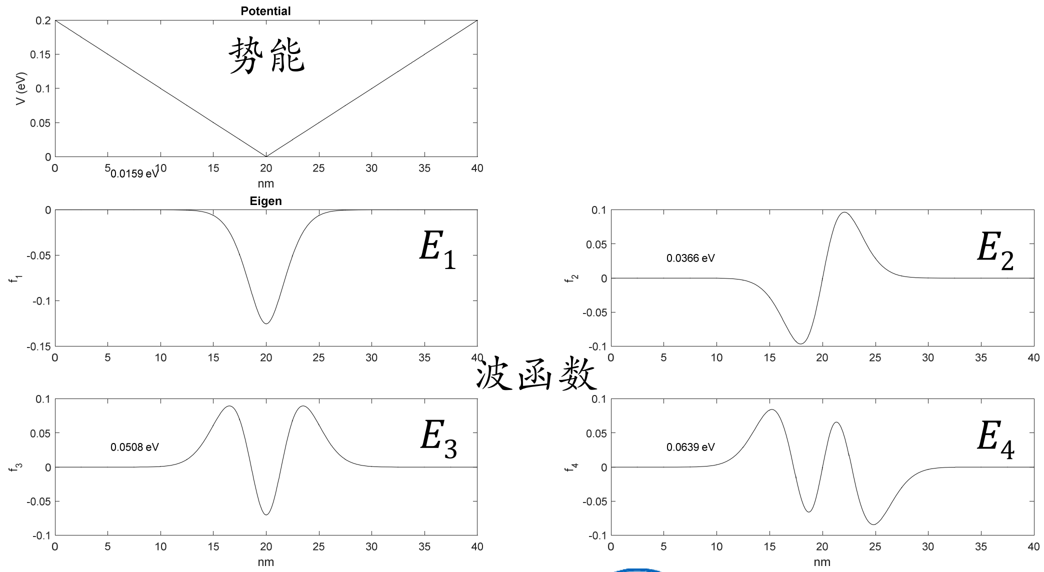
本征值程序

程序eigenfunction.m 解定态薛定谔方程 $\hat{H}\psi = E\psi$ （程序使用Matlab R2015b开发）

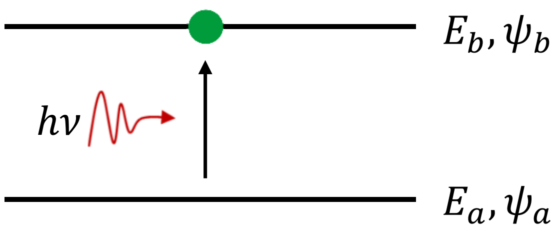
无限深势阱数值结果
（直接运行程序）



三角势阱数值结果
（删除程序中第22行的注释符号%）



量子态的叠加（电子）



- 原子能级
- 自旋
- 势阱中的能级
- 导带/价带

二能级体系的定态薛定谔方程

$$H^0\psi_a = E_a\psi_a \qquad H^0\psi_b = E_b\psi_b$$

波函数满足正交归一性

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}, \qquad (i, j = a, b)$$

二能级体系的定态波函数一般形式为 ψ_a 和 ψ_b 的线性组合：

$$\Psi(0) = c_a\psi_a + c_b\psi_b$$

其中

$$|c_a|^2 + |c_b|^2 = 1$$

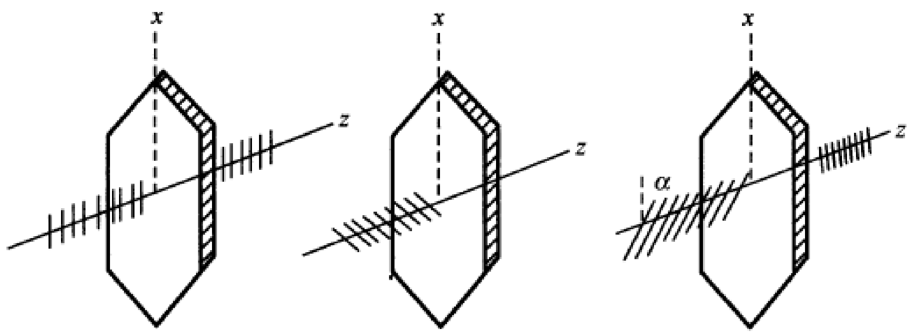
量子态的叠加（光子）

如果我们考虑一个光学的线性偏振片。在量子力学里，对于单光子，究竟是通过偏振片还是被偏振片吸收，只能给予几率性的回答。至于通过晶片的过程中，单光子怎样改变了偏振态，量子力学理论并不能回答。从量子力学看来，应该按照态叠加原理来理解这个实验：即一个偏振方向与晶轴成α角的光子，部分地处于沿晶轴方向偏振的态ψ_x,部分地处在与晶轴方向垂直的态ψ_y。两个量子态的线性叠加即为：

$$\psi_\alpha = \cos\alpha \cdot \psi_x + \sin\alpha \cdot \psi_y$$

用狄拉克符号表示为：

$$|\psi_\alpha\rangle = \cos\alpha\,|\psi_x\rangle + \sin\alpha\,|\psi_y\rangle$$



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

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

这对基矢满足正交归一条件

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

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

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

且

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

量子比特

- 传统计算机的信息处理依赖于比特（1或者0），是信息量的最小单位。相对应地，量子计算机的逻辑运算依赖于量子比特（quantum bits，qubits）。
- 量子比特不是1或者0，而是1态和0态的量子叠加$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle$，其中$|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$。一般情形下，我们要求$\langle 0|1\rangle = 0$。
- 常见的量子比特有二能级体系、光子偏振、核自旋、电子自旋、二能级原子、约瑟夫森结、超导线圈等等。

Quantum system	Physical property	$\|0\rangle$	$\|1\rangle$
Photon	Linear polarization	Horizontal	Vertical
Photon	Circular polarization	Left	Right
Nucleus	Spin	Up	Down
Electron	Spin	Up	Down
Two-level atom	Excitation state	Ground state	Excited state
Josephson junction	Electric charge	N Cooper pairs	$N+1$ Cooper pairs
Superconducting loop	Magnetic flux	Up	Down

参考文献

- 电子波函数和量子态主要参考：
  - 教材David J. Griffiths, and Darrell F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics (3rd Edition), Cambridge University Press (2018). 第2.1-2.2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2.5小节的内容。