量子信息基础

第三章：算符与矩阵

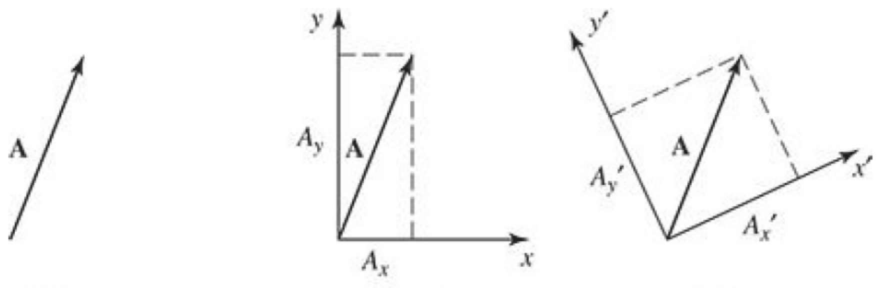
金潮渊
浙江大学信息与电子工程学院

C3-3 对易关系和不确定性原理

课程回顾

波函数矢量与表象变换：

- 量子力学中的波函数存在于希尔伯特空间中，满足抽象矢量的定义条件。因此可以由希尔伯特空间中的矢量符号来表示。
- 算符是一种线性变换，可以将一个矢量变换成另一个矢量。
- 希尔伯特空间中的坐标系又被称作表象。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。
- 假设算符$\hat{A}$和$\hat{B}$的完备的本征矢量系分别为$\{|a_n\rangle\}$和$\{|b_n\rangle\}$，它们所张开的空间分别成为A表象和B表象，可以定义两表象下的变换算符为$\hat{U}$，表象变换算符$\hat{U}$是所谓的幺正算符。



力学量的平均值(1)

- 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 λ_n，绝不会是任何别的值。例如，处于哈密顿量算符 $\hat{H}$ 本征态基态$|\psi_0\rangle$的一维谐振子，其能量为 $E=\frac{1}{2}\hbar\omega$ 。对处于基态的一维谐振子进行能量值的测量，将得到唯一确定的值。

$\hat{A}$ 的归一化的本征态$|\psi_n\rangle$满足

$$\hat{A}|\psi_n\rangle=\lambda_n|\psi_n\rangle$$

左乘$\langle\psi_n|$，得到

$$\langle\psi_n|\hat{A}|\psi_n\rangle=\langle\psi_n|\lambda_n|\psi_n\rangle$$

所以

$$\lambda_n=\langle\psi_n|\hat{A}|\psi_n\rangle$$

此即在 $\hat{A}$ 的本征态$|\psi_n\rangle$中，对 $\hat{A}$ 值进行测量结果的表达式！

力学量的平均值(2)

- 当粒子处于算符 $\hat{A}$ 的非本征态 $|\phi\rangle$， 可由本征态的线性叠加表示

$$|\phi\rangle = \sum_n c_n|\psi_n\rangle$$

此时对 $\hat{A}$ 的测量，将不能得到确定值，有可能是特征值谱系中的任何一个（$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots$），但不会是特征值谱以外的其他值。而且各测量结果 λ_n 对应的几率为 P_n 。测量平均值为

$$\bar{A} = \sum_n P_n\lambda_n$$

其中

$$\sum_n P_n = 1$$

同时我们知道

$$\bar{A} = \langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle$$

力学量的平均值(3)

$$\bar{A} = \langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle = \left(\sum_m c_m^* \langle\psi_m|\right) \hat{A} \left(\sum_n c_n |\psi_n\rangle\right)$$

$$= \left(\sum_m c_m^* \langle\psi_m|\right) \left(\sum_n c_n \lambda_n |\psi_n\rangle\right) = \sum_{m,n} \lambda_n c_m^* c_n \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \sum_n \lambda_n |c_n|^2$$

所以

$$P_n = |c_n|^2$$

如果$\langle\phi|\phi\rangle = 1$，则

$$\sum_n |c_n|^2 = 1$$

如果对态$|\phi\rangle$的测量，坍缩到任意本征态$|\psi_n\rangle$，则

$$\bar{A} = \langle\psi_n|\hat{A}|\psi_n\rangle = \lambda_n$$

力学量同时有确定值的条件

- 同一态中，粒子的坐标和动量不可能同时有确定值，动能和势能也不可能同时有确定值，但不等于说任何两个力学量都不可能同时有确定值。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，$\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$。而且$\hat{A}$ 和 $\hat{B}$有共同的本征函数系。

证明：假设算符 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 可对易，$|\psi_n\rangle$是 $\hat{A}$ 的任一本征函数，相应的本征值为 λ_n（假设无简并）

$$\hat{A}|\psi_n\rangle=\lambda_n|\psi_n\rangle$$

用算符 $\hat{B}$ 左乘两边，可得

$$\hat{B}\hat{A}|\psi_n\rangle=\hat{A}\hat{B}|\psi_n\rangle=\lambda_n\hat{B}|\psi_n\rangle$$

由上式可知，$\hat{B}|\psi_n\rangle$ 也是 $\hat{A}$ 的、属于本征值 λ_n 的本征函数。已知 λ_n 无简并，属于 λ_n 的本征函数只有一个，所以 $\hat{B}|\psi_n\rangle$ 和 $|\psi_n\rangle$ 描写的是同一状态，它们最多相差一个常数因子。

- 当 $\hat{A}$ 和 $\hat{B}$ 可对易，则 $\hat{A}$ 的本征函数也是 $\hat{B}$ 的本征函数，它们有共同的本征函数系。在同一本征态上，力学量 A 具有确定的值 λ_n，力学量 B 具有确定的值 η_n，满足$\hat{B}|\psi_n\rangle=\eta_n|\psi_n\rangle$。

不确定性原理(1)

- 位移和动量之间的不确定性原理 $\sigma_x \cdot \sigma_p \geq \dfrac{\hbar}{2}$

对于任意一个厄米算符 $\hat{A}$（可观测量A）

$$\sigma_A^2 = \left\langle \left(\hat{A} - \langle A \rangle\right)^2 \right\rangle = \left\langle \left(\hat{A} - \langle A \rangle\right)\psi \middle| \left(\hat{A} - \langle A \rangle\right)\psi \right\rangle = \langle f | f \rangle$$

这里

$$f = \left(\hat{A} - \langle A \rangle\right)\psi$$

同理可得，对于任意一个厄米算符 $\hat{B}$（可观测量B）

$$\sigma_B^2 = \left\langle \left(\hat{B} - \langle B \rangle\right)^2 \right\rangle = \left\langle \left(\hat{B} - \langle B \rangle\right)\psi \middle| \left(\hat{B} - \langle B \rangle\right)\psi \right\rangle = \langle g | g \rangle$$

由施瓦茨不等式得到

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2$$

对于任意一个复数 z 有

$$|z|^2 \geq [\mathrm{Im}(z)]^2 = \left[\frac{1}{2i}(z - z^*)\right]^2$$

不确定性原理(2)

综合以上两个不等式得到 $$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq |\langle f|g\rangle|^2 \geq \left(\frac{1}{2i}[\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle]\right)^2$$

这里
$$\langle f|g\rangle = \langle(\hat{A} - \langle A\rangle)\psi\,|(\hat{B} - \langle B\rangle)\psi\,\rangle = \langle\psi\,|(\hat{A} - \langle A\rangle)(\hat{B} - \langle B\rangle)\psi\,\rangle$$
$$= \langle\psi\,|(\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle B\rangle - \hat{B}\langle A\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle)\psi\,\rangle = \langle\psi|\hat{A}\hat{B}\psi\rangle - \langle B\rangle\langle\psi|\hat{A}\psi\rangle - \langle A\rangle\langle\psi|\hat{B}\psi\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle\langle\psi|\psi\rangle$$
$$= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle B\rangle\langle A\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle = \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle B\rangle\langle A\rangle$$

同理有 $$\langle g|f\rangle = \langle\hat{B}\hat{A}\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$$

所以 $$\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle\hat{B}\hat{A}\rangle = \langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle$$

我们得到了不确定性原理的一般表达式

$$\boxed{\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right)^2}$$

不确定性原理(3)

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right)^2$$

对于两个典型的可观测量：坐标（$A = x$）和动量（$B = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$）有

$$[x,p] = i\hbar$$

所以

$$\sigma_x^2\sigma_p^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{x},\hat{p}]\rangle\right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$$

这就是海森堡的不确定性原理

$$\sigma_x \cdot \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

- 事实上，每一对算符不对易的可观测量的都存在一个“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。
- 不确定原理并不是量子力学中一个额外的假设，而是统计诠释的结果。你当然可以测量一个粒子的位置，但是测量本身使波函数坍塌为一个尖峰，这样波的傅立叶展开中波长（动量）分布范围很宽。如果你此时再去测量动量，这个态就会坍塌为一个长正弦波，具有确定的波长。但是此刻的粒子已经不再处于第一次测量时你得到的位置。只有波函数同时是两个力学量的本征态时，才有可能在不破坏粒子的状态的情况下进行第二次测量。

能量-时间不确定性原理(1)

当测量一个体系变化的快慢时，我们可以算可观测量的期望值对时间的导数

$$\frac{d}{dt}\langle Q\rangle=\frac{d}{dt}\langle\psi|\hat{Q}\psi\rangle=\left\langle\frac{\partial\psi}{\partial t}\middle|\hat{Q}\psi\right\rangle+\left\langle\psi\middle|\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\psi\right\rangle+\left\langle\psi\middle|\hat{Q}\frac{\partial\psi}{\partial t}\right\rangle$$

由薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$$

所以

$$\frac{d}{dt}\langle Q\rangle=\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle+\left\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\right\rangle$$

对于两个可观测量：$\hat{A}=H$和$\hat{B}=Q$有（ Q 不显含时间）

$$\sigma_H^2\sigma_Q^2\geq\left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle\right)^2=\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2\left(\frac{d}{dt}\langle Q\rangle\right)^2$$

所以

$$\sigma_H\sigma_Q\geq\frac{\hbar}{2}\left|\frac{d}{dt}\langle Q\rangle\right|$$

能量-时间不确定性原理(2)

我们定义能量和时间的变化量

$$\sigma_H = \Delta E \qquad\qquad \sigma_Q = \Delta Q = \left|\frac{d}{dt}\langle Q\rangle\right| \Delta t$$

所以

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

这就是能量-时间不确定性原理。

- 这里Δt完全依赖于你所关心的那个可观测量（Q）— 对有的可观测量变化较快，而有些较慢。但是，如果ΔE很小的话，则所有的可观测量的变化速率一定是非常平缓的；或者，换言之，假如任一可观测量变化很快的话，能量的“不确定”必定很大。
- 常常有人说，不确定原理意味着量子力学中能量不是严格守恒— 就是说你被允许“借出”能量ΔE，只要在$\Delta t \sim \hbar/2\Delta E$时间内还回；违背守恒越大，它所经历的时间越短。注意：量子力学在任何地方都不允许违背能量守恒，在推导公式 的过程中显然也没有违背能量守恒。但是不确定原理是如此强大坚实，从而很多物理学家习惯于这样应用它。

能量-时间不确定性原理(3)

例1. 在定态的特殊情况下，能量值可被唯一确定，即可观测量的期望值不随时间变化

$$\Delta E = 0 \qquad \Delta t = \infty$$

在之前的范例中，我们注意到，能量的期待值变化需要至少两个定态本征函数的线性组合，即

$$\Psi(x,t) = a\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + b\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

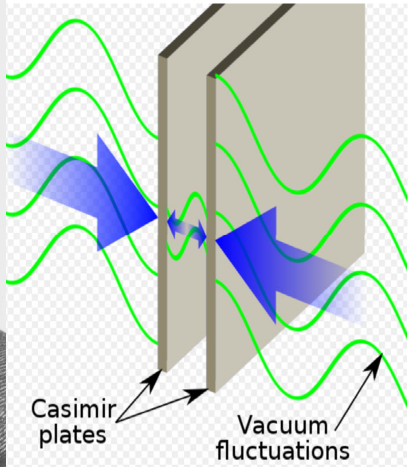
如果a，b，ψ_1，ψ_2是实数或者实函数，则

$$|\Psi(x,t)|^2 = a^2\big(\psi_1(x)\big)^2 + b^2\big(\psi_2(x)\big)^2 + 2ab\psi_1(x)\psi_2(x)\cos\left(\frac{E_2-E_1}{\hbar}t\right)$$

振荡的周期为$\tau = 2\pi\hbar/(E_2-E_1)$。考虑到这时能量的不确定度为$\Delta E = E_2 - E_1$，时间的不确定度为$\Delta t = \tau$

$$\Delta E \Delta t = 2\pi\hbar \geq \hbar/2$$

真空场和虚光子



- 一维谐振子模型下，我们解薛定谔方程，得到振子的零点能量。
- 真空中充满了任意频率电磁波的真空电磁场，其能量为光子能量的一半

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}$$

- 亨德里克·卡西米尔（Hendrik Casimir，1909-2000）于1948年提出的一种真空中金属平板相互吸引的现象，此效应随后被检测到，并以卡西米尔力为名纪念他。
- 卡西米尔力可以看作真空中虚光子涨落导致的交换力，“虚光子”存在的时间满足能量-时间不确定性原理，即$\Delta t \sim \hbar /（2\Delta E）= 1/\omega$，大约在$10^{-14}$秒的量级。

时间演化算符

波函数随时间的变化取决于动态薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=\hat{H}\psi(\boldsymbol{r},t)$$

假设$\hat{H}$的本征函数和本征值为$\{\psi_n(\boldsymbol{r}),E_n\}$，满足定态方程

$$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n \qquad\qquad n=1,2,\ldots$$

波函数的含时演化可以写作本征函数的含时演化，即

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(\boldsymbol{r})=e^{-i\hat{H}t/\hbar}\sum_n c_n\psi_n(\boldsymbol{r})=e^{-i\hat{H}t/\hbar}\psi(\boldsymbol{r},0)$$

我们定义时间演化算符$\hat{U}(t)=e^{-i\hat{H}t/\hbar}$，其共轭为$\hat{U}^\dagger(t)=e^{i\hat{H}t/\hbar}$，为幺正算符，

$$\hat{U}^\dagger\hat{U}=\hat{U}\hat{U}^\dagger=1$$

海森堡表象

目前为止，我们在推导中隐含了波函数随时间变化，而力学量算符不随时间变化的假设，这就是所谓的薛定谔表象。如果我们考虑力学量的平均值的含时变化

$$\langle Q\rangle = \int \psi^*(\boldsymbol{r},t)\,\hat{Q}\psi(\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r} = \int \left(\hat{U}(t)\psi(\boldsymbol{r},0)\right)^* \hat{Q}\hat{U}(t)\psi(\boldsymbol{r},0)d\boldsymbol{r} = \int \psi^*(\boldsymbol{r},0)\left(\hat{U}^\dagger(t)\hat{Q}\hat{U}(t)\right)\psi(\boldsymbol{r},0)d\boldsymbol{r}$$

可以引入含时的力学量和不含时的波函数

$$\hat{Q}(t) = \hat{U}^\dagger(t)\hat{Q}\hat{U}(t) \qquad\qquad \psi(\boldsymbol{r},0) = \psi(\boldsymbol{r})$$

在这种假设下，量子力学的一切推导和结论仍然成立，这就是所谓的海森堡表象。联系薛定谔表象和海森堡表象的表象变化算符$\hat{U}(t)$就是时间演化算符。

表象变换

- 狄拉克符号让我们不用过多考虑基矢量的问题。比如我们可以定义不同的基上的恒等算符

$$1=\int dx|x\rangle\langle x| \qquad 1=\int dp|p\rangle\langle p| \qquad 1=\sum_n |n\rangle\langle n|$$

- 所以希尔伯特空间中一般矢量$|\mathcal{S}(t)\rangle$分别表示为

$$|\mathcal{S}(t)\rangle=\int dx\,|x\rangle\langle x|\mathcal{S}(t)\rangle\equiv\int\Psi(x,t)\,|x\rangle dx$$

$$|\mathcal{S}(t)\rangle=\int dp\,|p\rangle\langle p|\mathcal{S}(t)\rangle\equiv\int\Phi(p,t)\,|p\rangle dp$$

$$|\mathcal{S}(t)\rangle=\sum_n |n\rangle\langle n|\mathcal{S}(t)\rangle\equiv\sum_n c_n(t)|n\rangle$$

力学量的运动方程

在海森堡表象下，力学量的时间变化率可以按照经典力学的方式定义，比较自然

$$\frac{d}{dt}\hat{Q}(t)=\frac{d}{dt}\left(\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{Q}\hat{U}(t)\right)=\frac{d\hat{U}^{\dagger}(t)}{dt}\hat{Q}\hat{U}(t)+\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{Q}\frac{d\hat{U}(t)}{dt}=-\frac{i}{\hbar}\left(\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{Q}\hat{U}(t)\hat{H}-\hat{H}\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{Q}\hat{U}(t)\right)$$

由于哈密顿算符和时间演化算符可对易，不难得到

$$\hat{H}(t)=\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{H}\hat{U}(t)=\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{U}(t)\hat{H}=\hat{H}$$

因此

$$\boxed{\frac{d}{dt}\hat{Q}(t)=-\frac{i}{\hbar}\left[\hat{Q}(t),\hat{H}(t)\right]}$$

此即力学量的运动方程，通常称为海森堡运动方程（思考：怎样从薛定谔表象中得到海森堡运动方程？）。

参考文献

- 对易关系和不确定性原理主要参考：
  - 教材David J. Griffiths, and Darrell F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics (3rd Edition), Cambridge University Press (2018). 第3.5节。
- 力学量的平均值和不同力学量同时有确定值的条件主要参考
  - 仲顺安等，理论物理导论（第3版），北京理工大学出版社。第3-5，3-6小节的内容。
- 波函数和力学量随时间的演化
  - 钱伯初，量子力学，高等教育出版社。第3-9小节的内容。