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

C2-3 矩阵表示和数值求解

课程回顾

- 电子波函数和量子态

a. 分离粒子波函数中时间项和空间项$\Psi = A_0 exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{\boldsymbol{p}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}} - Et)\right) = A_0 exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\boldsymbol{p}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}}\right) exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$得到描述定态波函数 $\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$ 的薛定谔方程：

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

b. 定态波函数同样需要满足连续性条件和归一化条件。

c. 求解定态薛定谔方程可以看作求解哈密顿量的本征值和本征函数的问题 $\hat{H}\psi = E\psi$

d. 求解过程分为四步：（1）列出各势域的定态方程；（2）各势域分别解方程；（3）使用波函数边界条件即连续性条件定解；（4） 定归一化系数。

e. 一维无限深势阱中电子的定态波函数求解以及量子化的能级。

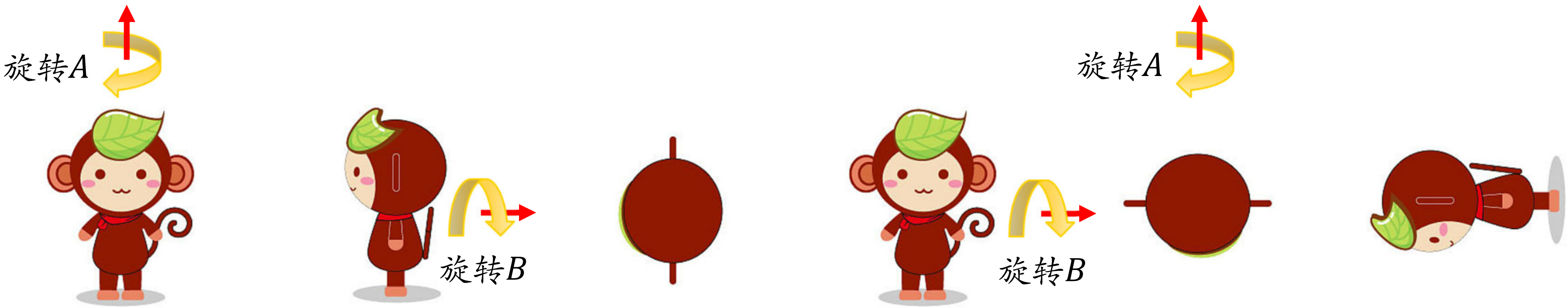
f. 复杂体系可以依靠微扰方法和数值方法（以Matlab程序为例）定解。

g. 电子的二能级体系可以定义相应的量子态叠加，即量子比特。

对易关系和交换律

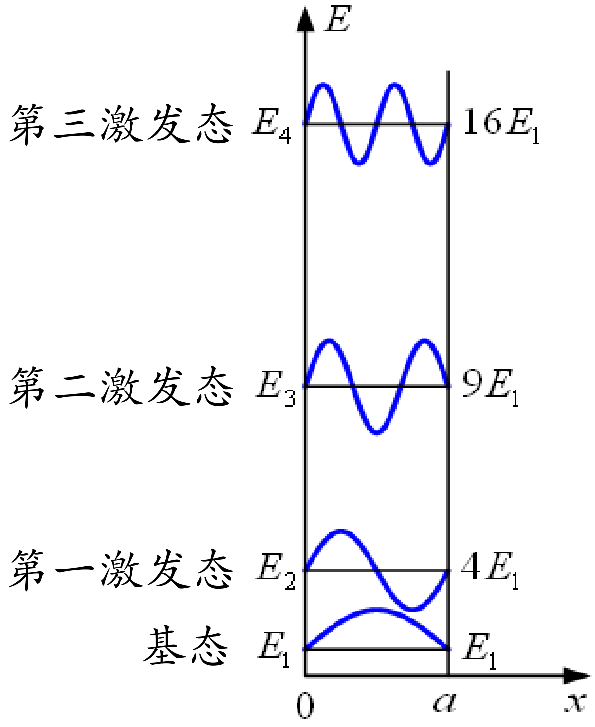
- 对易关系：$[A,B] \equiv AB - BA$ 。如果 $[A,B]=0$， A,B 可对易，则 A 和 B 之间满足乘法交换律；反之 $[A,B] \neq 0$， A,B 不可对易，则不满足乘法交换律。

- 不符合交换律的日常例子：三维旋转。



- 一般情况下，矩阵乘法不符合交换律 $AB \neq BA$，这也是矩阵力学的出发点。

正交归一性(1)



- 无限深势阱中的电子波函数满足： $\psi_n(x)=\sqrt{2/a}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$
- 任意两个不同的波函数之间有

$$\int \psi_m(x)^*\psi_n(x)dx=\frac{2}{a}\int_0^a \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx$$

$$=\frac{1}{a}\int_0^a\left[\cos\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right)-\cos\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)\right]dx$$

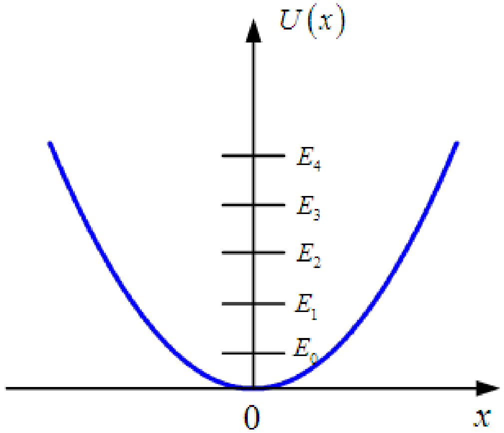
$$=\left\{\frac{1}{(m-n)\pi}\sin\left(\frac{m-n}{a}\pi x\right)-\frac{1}{(m+n)\pi}\sin\left(\frac{m+n}{a}\pi x\right)\right\}\Bigg|_0^a$$

$$=\frac{1}{\pi}\left\{\frac{\sin((m-n)x)}{(m-n)}-\frac{\sin((m+n)x)}{(m+n)}\right\}=0$$

- 正交归一性：

$$\int \psi_m(x)^*\psi_n(x)dx=\delta_{mn}$$

正交归一性(2)



线性谐振子的能级

- 线性谐振子波函数满足： $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n \psi_0$

- 任意两个不同的波函数之间有

$$n\int \psi_m{}^* \psi_n dx = \int \psi_m{}^* (a_+ a_-) \psi_n dx = \int (a_- \psi_m)^* (a_- \psi_n) dx$$

$$= \int (a_+ a_- \psi_m)^* (\psi_n) dx = m \int \psi_m{}^* \psi_n dx$$

- 正交归一性： $\int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$

δ函数

- 克罗内克δ函数

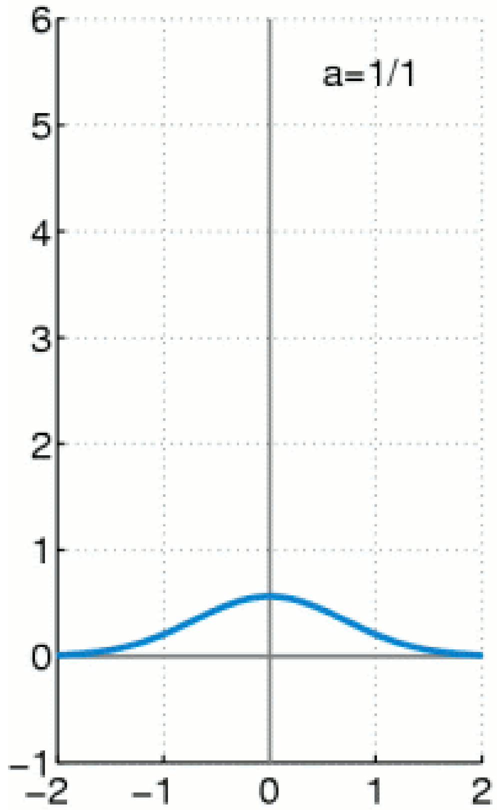
$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m = n \\ 0 & m \neq n \end{cases}$$

- 狄拉克δ函数

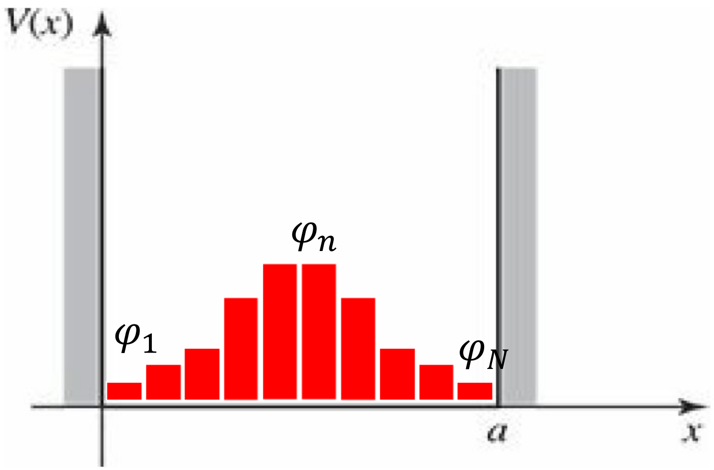
$$\delta(x) = \begin{cases} \infty & x = 0 \\ 0 & x \neq 0 \end{cases} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\, dx = 1$$

- 一个典型的例子

$$\delta_a(x) = \frac{1}{|a|\sqrt{\pi}} e^{-(x/a)^2} \qquad a \to 0$$



数值计算中的波函数



- 将波函数在x方向上差分 $\psi(x) = \sum_{n=1}^{N} \varphi_n \delta(x - n \cdot \Delta x)$

- 设 $\delta(x - n \cdot \Delta x)$, $n = 1,2,3 \ldots N-1, N$ 为基函数，那么波函数可以看作定义在基函数上一个矢量：

$$|\psi\rangle = \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \cdots \\ \varphi_{N-1} \\ \varphi_N \end{bmatrix} \quad \text{and} \quad \langle\psi| = [\varphi_1^* \quad \varphi_2^* \quad \varphi_3^* \quad \cdots \quad \varphi_{N-1}^* \quad \varphi_N^*]$$

- 由归一化条件可知：$\langle\psi|\psi\rangle = 1$

基矢量

- 定义基矢量

$$\delta_n = \delta(x - n \cdot \Delta x)$$

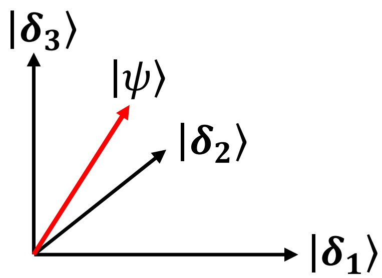
$$|\boldsymbol{\delta}_1\rangle = \begin{bmatrix}1\\0\\0\\\cdots\\0\\0\end{bmatrix}, \quad |\boldsymbol{\delta}_2\rangle = \begin{bmatrix}0\\1\\0\\\cdots\\0\\0\end{bmatrix}, \quad |\boldsymbol{\delta}_3\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\1\\\cdots\\0\\0\end{bmatrix}, \quad \cdots\cdots\cdots \quad |\boldsymbol{\delta}_{N-1}\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\\cdots\\1\\0\end{bmatrix}, \quad |\boldsymbol{\delta}_N\rangle = \begin{bmatrix}0\\0\\0\\\cdots\\0\\1\end{bmatrix}$$

- 正交归一性

$$\langle\boldsymbol{\delta}_m|\boldsymbol{\delta}_n\rangle = \delta_{mn}$$

$$\varphi_n = \langle\boldsymbol{\delta}_n|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N} \varphi_n |\boldsymbol{\delta}_n\rangle = \sum_{n=1}^{N} |\boldsymbol{\delta}_n\rangle\langle\boldsymbol{\delta}_n|\psi\rangle$$



- 基矢量之间形成一个N维的希尔伯特空间。空间中的矢量是基矢量的线性组合。

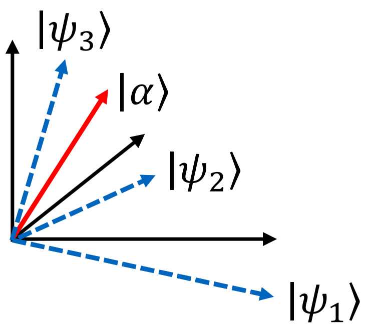
不同的基函数

简谐振子模型定义了一组相互正交的波函数

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n\psi_0 \qquad \int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_n dx = \delta_{mn}$$

写成狄拉克量子代数的形式：$\langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}$

定义一组基矢量为 $|\psi_n\rangle$ 对于任意波函数矢量 $|\alpha\rangle$ 有 $\alpha_n = \langle\psi_n|\alpha\rangle$



同时

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{N}\alpha_n|\psi_n\rangle = \sum_{n=1}^{N}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^{N}|\boldsymbol{\delta_n}\rangle\langle\boldsymbol{\delta}_n|\alpha\rangle$$

数值计算中的算符

我们来看一下动能 $$T=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

将动能作用在波函数上 $$T\varphi_n=-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\varphi_{n-1}-2\varphi_n+\varphi_{n+1}}{\Delta x^2}\right]=-\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}\cdot(\varphi_{n-1}-2\varphi_n+\varphi_{n+1})$$

定义：

$$\boldsymbol{T}|\psi\rangle=-\chi_0\begin{bmatrix}-2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0\\ 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0\\ 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 & 0\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 & 1\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\varphi_1\\ \varphi_2\\ \varphi_3\\ \cdots\\ \varphi_{N-1}\\ \varphi_N\end{bmatrix}$$

其中 $\chi_0=\dfrac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}$

动能平均值（期望值）可以表示为 $$\langle T\rangle=\langle\psi|\boldsymbol{T}|\psi\rangle$$

本征值问题

考虑薛定谔方程 $H\psi = E\psi$

哈密顿量在基函数 $\delta(x - n \cdot \Delta x),\ n = 1,2,3 \dots N-1, N$ 下可表达为

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

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

数值求解薛定谔方程

薛定谔定态方程转换为一个将矩阵本征值问题

$$H\psi = E\psi \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

在Matlab程序eigenfunction.m，我们根据❶式定义了哈密顿量矩阵元素，然后使用了求解矩阵本征值问题的函数eig()。

$$[\mathrm{phi}, D] = \mathrm{eig}(H)$$

定义 $\mathrm{phi} = \boldsymbol{\Phi} = [\phi_1 \quad \phi_2 \quad \phi_3 \quad \cdots \quad \phi_{N-1} \quad \phi_N]$ 其中 $\phi_n = |\psi\rangle_n$

$$D = \boldsymbol{E} = E_n|\boldsymbol{\delta_n}\rangle\langle\boldsymbol{\delta_n}|$$

注意：在eig()中，phi(:, n)已经做了归一化，也就是sum(phi(:, n)^2)=1。所以phi(:, n)^2的物理意义相当于波函数归一化条件中的

参考文献

- 矩阵表示和数值求解主要参考：
  - 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。

第二章小结(1)

- 求解定态薛定谔方程 $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi$

  - 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）

第二章小结(2)

- 量子力学的基本概念

  a. 波粒二象性
  b. 不确定性原理
  c. 量子态叠加原理
  d. 几率诠释
  e. 波的连续性条件和归一化
  f. 对易关系
  g. 线性方程和矩阵表达
  h. 量子代数和狄拉克符号
  i. 量子比特