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

C3-2 矢量和狄拉克符号

课程回顾

算符和可观测量：

- 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，满足

$$\langle\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle = \langle\hat{Q}\Psi|\Psi\rangle$$

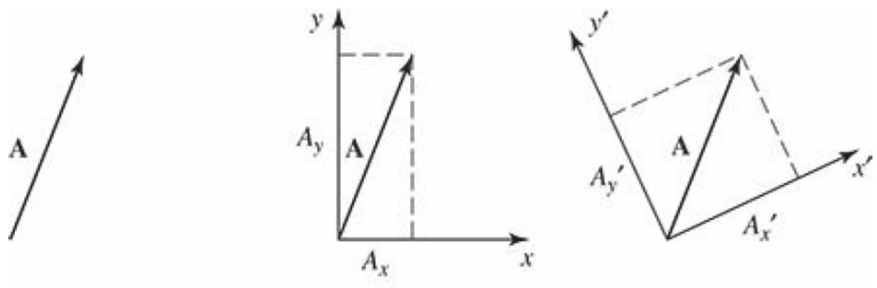
- 量子力学中的**确定值态**是算符的本征函数。算符所有本征函数的集合称为算符的**本征函数系**，所有本征值的集合称为算符的**本征值谱**。
- 如果厄米算符的本征值谱是分立的：（1）厄米算符可归一化本征函数的本征值是实数；（2）厄米算符属于不同本征值的本征函数是正交的；（3）可观测量算符的本征函数是完备的。
- 如果厄米算符的本征值谱是连续的，本征函数不可归一化，它们不在希尔伯特空间内并且不能代表可能的物理态；然而具有实数本征值的本征函数具有狄拉克正交归一性，并且是完备的。

坐标变换

- 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 $\vec{\boldsymbol{a}}$ 都可以定义成映射在基矢量上的分量$\{a_n\}$，即

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

- 以二维空间的矢量 $\boldsymbol{A}$ 为例，我们可以建立直角坐标轴 x 和 y，并且规定$A_x = \boldsymbol{i} \cdot \boldsymbol{A}$，$A_y = \boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{A}$，也完全可以建立另一种坐标轴 x' 和 y'，并且规定$A'_x = \boldsymbol{i}' \cdot \boldsymbol{A}$，$A'_y = \boldsymbol{j}' \cdot \boldsymbol{A}$。但它们是同一矢量，即矢量本身存在于空间中，不依赖于坐标系的选择。



矢量

- 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，即$|\mathcal{S}(t)\rangle$。

- 我们可以用任何不同的基来表示它，比如波函数在直角坐标系中可以表示为，$\Psi(x,t)=\langle x|\mathcal{S}(t)\rangle$，$\Psi(x,t)$相当于$|\mathcal{S}(t)\rangle$用坐标本征函数的基表示时的展开系数。同理，动量空间中的波函数可以表示为，$\Phi(p,t)=\langle p|\mathcal{S}(t)\rangle$，$\Phi(x,t)$相当于$|\mathcal{S}(t)\rangle$用动量本征函数的基表示时的展开系数。或者，我们可以把$|\mathcal{S}(t)\rangle$用能量本征函数的基展开，即$c_n(t)=\langle n|\mathcal{S}(t)\rangle$。

- 以上三种展开方法表示的都是同一个波函数

$$|\mathcal{S}(t)\rangle \longrightarrow \int \Psi(y,t)\delta(x-y)dy = \int \Phi(p,t)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}dp = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x)$$

算符的矩阵表达

算符是一种线性变换，可以将一个矢量变换成另一个矢量，即

$$|\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle$$

考虑一组基$\{|e_n\rangle\}$，不同的矢量可以由它们在基上的分量来表示，如

$$|\alpha\rangle = \sum_n a_n|e_n\rangle \qquad a_n = \langle e_n|\alpha\rangle \quad \text{和} \quad |\beta\rangle = \sum_n b_n|e_n\rangle \qquad b_n = \langle e_n|\beta\rangle$$

在这组基上的算符可以表示为 $Q_{mn} = \langle e_m|\hat{Q}|e_n\rangle$

$$|\beta\rangle = \sum_n b_n|e_n\rangle = \sum_n a_n\hat{Q}|e_n\rangle \quad \Rightarrow \quad \sum_n b_n\langle e_m|e_n\rangle = \sum_n a_n\langle e_m|\hat{Q}|e_n\rangle$$

因此

$$b_m = \sum_n Q_{mn}a_n$$

量子比特(1)

例1. 假定一个体系有两个线性独立的态 $|0\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ $\quad |1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$

一般的态是他们的线性叠加 $\quad |\mathcal{S}(t)\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle = \begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix} \xRightarrow{on\ the\ basis\ of} \begin{matrix}|0\rangle\\|1\rangle\end{matrix}$

假设哈密顿量是一个厄米矩阵 $\quad H = \begin{bmatrix} h & g \\ g & h \end{bmatrix}$

如果体系的初始态为$|1\rangle$，求体系的含时演化。

我们先求解哈密顿量的本征值 $\begin{vmatrix} h-E & g \\ g & h-E \end{vmatrix} = (h-E)^2 - g^2 = 0$

$$\therefore\ E_{\pm} = h \pm g$$

对应的本征矢量为 $\quad a = \pm b$

量子比特(2)

归一化的本征波函数为

$$\left|\mathcal{S}_{\pm}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$

初态波函数可以写成本征波函数的线性叠加

$$|\mathcal{S}(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\mathcal{S}_{+}\right\rangle + \left|\mathcal{S}_{-}\right\rangle\right)$$

因此动态薛定谔方程的解为

$$|\mathcal{S}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-i(h+g)t/\hbar}\left|\mathcal{S}_{+}\right\rangle + e^{-i(h-g)t/\hbar}\left|\mathcal{S}_{-}\right\rangle\right)$$

化简可得

$$|\mathcal{S}(t)\rangle = e^{-iht/\hbar}\begin{pmatrix} \cos(gt/\hbar) \\ -i\sin(gt/\hbar) \end{pmatrix}$$

表象

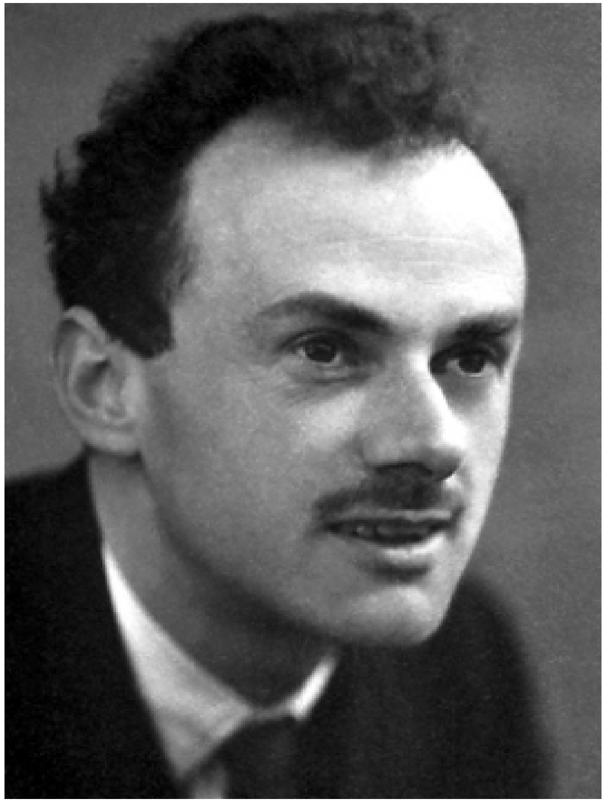
- 希尔伯特空间中的坐标系又被称作表象。选择不同力学量的本征函数（本征矢量）为基，就对应于不同的坐标系，也就是对应于不同的表象。

- 不仅波函数（矢量）在不同的表象下的表达不同，算符在不同表象下的表达也不同，举一个我们熟悉的简单例子

$$\hat{x}(\text{位移算符}) \rightarrow \begin{cases} x & (\text{位移表象}) \\ i\hbar\dfrac{\partial}{\partial p} & (\text{动量表象}) \end{cases}$$

$$\hat{p}(\text{动量算符}) \rightarrow \begin{cases} -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x} & (\text{位移表象}) \\ p & (\text{动量表象}) \end{cases}$$

狄拉克(Paul Dirac,1902-1984)



- 保罗·狄拉克，英国理论物理学家，量子力学的奠基者之一，对量子电动力学早期的发展作出重要贡献。
- 1928年他把相对论引进了量子力学，建立了相对论形式的薛定谔方程，也就是著名的狄拉克方程。这一方程具有两个特点：一是满足相对论的所有要求，适用于运动速度无论多快电子；二是它能自动地导出电子有自旋的结论，并且从理论上预言了正电子的存在。他因创立有效的、新型式的原子理论而获得1933年的诺贝尔物理学奖。
- 狄拉克是量子辐射理论的创始人，曾经和费米各自独立发现了费米-狄拉克统计法。
- 狄拉克建议把内积$\langle\alpha|\beta\rangle$分成两部分，称之为左矢$\langle\alpha|$，和右矢$|\beta\rangle$。后者是一个矢量，前者其实是定义在波函数上的泛函。这就是狄拉克代数。

狄拉克符号(1)

- 在函数空间中，狄拉克符号中的左矢和右矢分别可以表示为

$$\langle f| = \int f^*(\dots)dx \qquad |f\rangle = \int f(\dots)dx$$

- 在矩阵表达中，左矢表示为一个行矩阵，右矢则表示为一个列矩阵

$$\langle \alpha| = [\alpha_1^* \quad \alpha_2^* \quad \alpha_3^* \quad \cdots \quad \alpha_{n-1}^* \quad \alpha_n^*] \qquad |\alpha\rangle = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \cdots \\ \alpha_{n-1} \\ \alpha_n \end{bmatrix}$$

- 所有的左矢集合构成了另外一个矢量空间，即所谓的对偶空间。

投影算符

- 狄拉克符号允许左矢分开处理，提供了一个有力而且简洁的工具。举例来说，假如$|\alpha\rangle$是一个归一化的矢量。我们可以定义算符$\hat{P} \equiv |\alpha\rangle\langle\alpha|$，它可以从任意矢量中选出沿$|\alpha\rangle$方向的部分

$$\hat{P}|\beta\rangle \equiv \langle\alpha|\beta\rangle|\alpha\rangle$$

  因此我们称它为$|\alpha\rangle$张成的一维子空间的**投影算符**。

- 如果$\{|e_n\rangle\}$是一组分立的正交归一的基矢量$\langle e_m|e_n\rangle = \delta_{mn}$，则有$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n| = 1$，即所谓的恒等算符。将恒等算符作用在任意一个矢量$|\alpha\rangle$上

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$$

- 类似地，如果$\{|e_z\rangle\}$是一组连续的狄拉克正交归一的基矢量$\langle e_z|e_{z'}\rangle = \delta(z-z')$，则有

$$\int |e_z\rangle\langle e_{z'}|\, dz = 1$$

狄拉克符号(2)

- 在厄米算符的定义中，我们使用了$\langle f|\hat{Q}f\rangle = \langle\hat{Q}f|f\rangle$。如果用左矢和右矢的方式展开，应当写作$\langle f|\hat{Q}|f\rangle$，但这里$\langle\hat{Q}f|$实际上是$\hat{Q}|f\rangle$在对偶空间中的矢量，$\langle\hat{Q}f| = \langle f|\hat{Q}^\dagger$。

- 算符代表着矢量之间的转换，因此我们可以用狄拉克符号表示算符之间的运算，比如
  a. 求和 $(\hat{Q}+\hat{R})|\alpha\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle + \hat{R}|\alpha\rangle$
  b. 相乘 $\hat{Q}\hat{R}|\alpha\rangle = \hat{Q}(\hat{R}|\alpha\rangle)$

- 有些场合，也可以定义算符的函数，但需要非常小心，比如

$$e^{\hat{Q}} \equiv 1 + \hat{Q} + \frac{1}{2}\hat{Q}^2 + \frac{1}{3!}\hat{Q}^3 + \cdots$$

$$\frac{1}{1-\hat{Q}} \equiv 1 + \hat{Q} + \hat{Q}^2 + \hat{Q}^3 + \cdots$$

表象变换(1)

- 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

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

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

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

表象变换(2)

- 以位移和动量算符为例，在位移表象下 $\hat{x} \to x$

  在动量表象下 $\hat{x} \to i\hbar \dfrac{\partial}{\partial p}$

- 在狄拉克符号表示中 $\langle x|\hat{x}|\mathcal{S}(t)\rangle = x\Psi(x,t)$

$$\langle p|\hat{x}|\mathcal{S}(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial \Phi(x,t)}{\partial p}$$

表象变换(3)

- 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$\hat{U}$，即有

$$|b_n\rangle = \hat{U}|a_n\rangle$$

$$\hat{U} = \sum_n |b_n\rangle\langle a_n|$$

- 表象变换算符$\hat{U}$是所谓的幺正算符，即有 $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = 1$

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \left(\sum_n |b_n\rangle\langle a_n|\right)^\dagger \sum_k |b_k\rangle\langle a_k| = \sum_{n,k} |a_n\rangle\langle b_n|b_k\rangle\langle a_k| = \sum_{n,k} |a_n\rangle\langle a_k|\delta_{nk} = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| = 1$$

参考文献

- 矢量和狄拉克符号主要参考：
  - 教材David J. Griffiths, and Darrell F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics (3rd Edition), Cambridge University Press (2018). 第3.6节。

- 坐标表象部分的内容主要参考：
  - 汪德新，《量子力学（第二版）》，第3.2节。