2022秋量子力学B
第三次习题课讲义

课程主讲老师：易为 教授
助教：宋冰睿，刘丰铨

2022 年 12 月 11 日

目录

1 Bloch球与混合态

量子态是Quantum Mechanics中最基础的概念，在不同表象中有着相异的表达形式. 尽管“一人千面”，量子态本身似乎缺乏一些具象的描述，若要清晰、透彻地理解它，这将可能带来一些困难. 不过，Bloch球这个概念的提出，完美地填补了这一空白，将带来对量子态最本质的思考. 并且，它在Rabi振荡、Ramsey干涉等实际物理过程中有着十分重要而广泛的应用，于物理图像的理解而言是大有裨益的.

要明确的是，Bloch球关注的主要是可用两维复空间$\mathbb{C}^2$描述的双值量子系统. 且为简便起见，在本节的讨论中我们略去表示算符的hat.

1.1 纯态Bloch向量回溯

课上我们已经提到，矢量Pauli算符$\boldsymbol{\sigma}$在$\mathbb{R}^3$空间中单位向量

$$\boldsymbol{n} = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta) \tag{1.1}$$

上的投影$\sigma_n = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$的两相互正交本征态

$$|n_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix},\ |n_-\rangle = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \\ \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} \tag{1.2}$$

与$(\boldsymbol{n}, -\boldsymbol{n})$这组反向平行的向量是一一对应的，如图1所示.

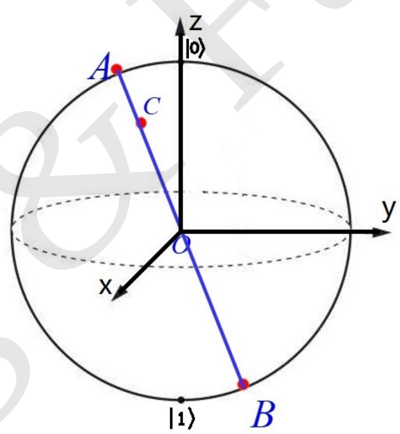

图 1: 反向平行的Bloch向量

然而实际上，该表示还不是最一般的情况. 这是因为$\mathbb{C}^2$空间中的任一量子态可写为

$$|\psi\rangle = c_0|0\rangle + c_1|1\rangle = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} \tag{1.3}$$

其中复系数c_0, c_1满足归一化条件

$$|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1 \tag{1.4}$$

由于复数具有实、虚部，故$|\psi\rangle$还剩**三个**独立实参数——比式1.2中的参数多了一个. 这个多出来的实参数一般

用一整体相因子γ表示（其他两个实参数实际上也有多种取法）. 因此，原则上应将式1.2改写为

$$|n_+\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}\begin{pmatrix}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\\ \sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\end{pmatrix},\ |n_-\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma}\begin{pmatrix}-\sin\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\\ \cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}\end{pmatrix} \tag{1.5}$$

如图2所示. 只不过，由于γ取任意实值时，$|n_\pm(\gamma)\rangle$在Bloch球上均对应的是同一$\pm\boldsymbol{n}$，即它们构成了一个等价类. 因此，我们常常将无关紧要的γ略去.

不过，有时γ仍将发挥其独特的作用，这也正是2.1节的重点. 当然这是后话了.

式1.5给我们的一大启发是，决定$|n_\pm\rangle$各分量的模的，是$\dfrac{\theta}{2}$的而非θ的三角函数. 这一结论在作业10题3（将演化过程在Bloch球中表示）中有着较好的应用.

另外，在式1.5中分别取$(\theta,\phi,\gamma)=\left(\dfrac{\pi}{2},0,0\right)$和$\left(\dfrac{\pi}{2},\dfrac{\pi}{2},\dfrac{\pi}{4}\right)$，即可得到我们熟知的

$$|x_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\ |y_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ \mathrm{i}\end{pmatrix} \tag{1.6}$$

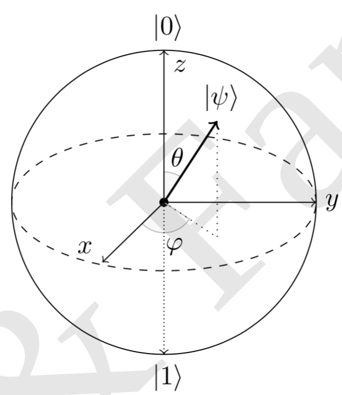

图 2: 纯态Bloch向量

课上提到（且作业10题1c证明过）的另一结论与$\mathbb{C}^2$空间中的任意方阵M有关：

$$M=\sum_{i=0}^{3}M_i\sigma_i,\ M_i=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(M\sigma_i\right) \tag{1.7}$$

式中M_i是复系数，且已经约定$(\sigma_0,\boldsymbol{\sigma})=(\sigma_0,\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3)=(\mathbb{1},\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$.

对于本征态$|n_\pm\rangle$的密度算符，可以证明，“展开系数M_i”就是Bloch向量$\pm\boldsymbol{n}$的分量，即

$$|n_\pm\rangle\langle n_\pm| = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1}\pm\sigma_x\sin\theta\cos\phi\pm\sigma_y\sin\theta\sin\phi\pm\sigma_z\cos\theta\right)=\frac{1}{2}\left(\mathbb{1}\pm\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\right) \tag{1.8}$$

根据该式，并考虑到可利用式1.2计算出的

$$|n_+\rangle\langle n_+| = \begin{pmatrix}\cos^2\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\\ \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} & \sin^2\frac{\theta}{2}\end{pmatrix},\ |n_-\rangle\langle n_-| = \begin{pmatrix}\sin^2\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\\ -\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} & \cos^2\frac{\theta}{2}\end{pmatrix} \tag{1.9}$$

我们很容易写出σ_n的形式：

$$\sigma_n = |n_+\rangle\langle n_+| - |n_-\rangle\langle n_-| = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \\ \sin\theta \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \tag{1.10}$$

我们可用

$$\mathrm{Tr}\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}\right) = n_i \mathrm{Tr}\left(\sigma_i\right) = 0 \tag{1.11}$$

和σ_n的Hermite性来简易地验证一下上式，其中已经采用Einstein求和约定表示了$\boldsymbol{n} = n_i\boldsymbol{e}_i,\ i = 1, 2, 3.$

1.2 混合态概述

上面的讨论均是基于$\mathbb{C}^2$空间中的纯态进行的. 很自然地，我们会想到倘若面对的是一个混合态，还能沿用这一套Bloch球的理论吗？

答案当然是可以. 其实从具象的角度来考虑，只需想到：纯态是与单位球面上的点一一对应的，那Bloch球内部的点，不就有与混合态一一对应的可能了吗？关于这一考虑，我们将在随后详细讨论.

由于混合态在课程中涉及得不多，这里举一个简例帮助回顾.

设有一个双值量子系统，若对其进行测量将有如下两种可能($p_1 + p_2 = 1$)：

- 以p_1的概率得到结果一，系统的状态坍缩至$|\psi_1\rangle$；
- 以p_2的概率得到结果二，系统的状态坍缩至$|\psi_2\rangle$.

那么，若对其进行**非选择测量**，就将得到混合态

$$\varepsilon = \{p_1, \psi_1; p_2, \psi_2\} \tag{1.12}$$

其中$|\psi_i\rangle$的密度算符简记为

$$\psi_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \tag{1.13}$$

所谓“非选择测量”的一个典例是，倘若如上考虑的双值量子系统是基于Stern-Garlech实验，则如果将经仪器测量过后的两束银原子重新会聚在一起，得到的就是两自旋纯态以一定几率组成的混合态.

一般而言，混合系综$\varepsilon = \{p_i, \psi_i\}$的密度算符是

$$\rho = \sum_i p_i\psi_i = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|,\ p_i \geq 0,\ \sum_i p_i = 1 \tag{1.14}$$

密度算符除了是Hermitian以外，有关它的迹，我们还有根据上式易证的如下性质：

$$\mathrm{Tr}\left(\rho\right) = 1,\ \mathrm{Tr}\left(\rho^2\right) \begin{cases} = 1 & ,\text{纯态} \\ < 1 & ,\text{混合态} \end{cases} \tag{1.15}$$

1.3 Bloch球中的混合态

下面，我们来正式讨论Bloch球中的混合态. 根据式1.8，纯态$|\psi_i\rangle$ $(i=1,\cdots,m)$的密度算符是

$$\psi_i = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_i\right) \tag{1.16}$$

因而混合态1.14的密度矩阵是

$$\rho=\sum_{i=1}^{m}p_i\psi_i=\frac{1}{2}\left[\mathbb{1}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\sum_{i=1}^{m}p_i\boldsymbol{n}_i\right)\right]=\frac{1}{2}\left(\mathbb{1}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}\right) \tag{1.17}$$

其中

$$\boldsymbol{r}=\sum_{i=1}^{m}p_i\boldsymbol{n}_i \tag{1.18}$$

被称为**混合态的Bloch向量**，是m个不同单位向量的线性组合. 若记

$$\boldsymbol{r}=r\boldsymbol{n} \tag{1.19}$$

$\boldsymbol{n}$为单位向量，则显然有

$$0\leq r\leq 1 \tag{1.20}$$

因此一般地，$\boldsymbol{r}$不是$\mathbb{R}^3$空间中的单位向量. 可以说，纯态情形下被称作Bloch向量的$\boldsymbol{n}$，只是其模长为最大值1的特殊情况.

$\boldsymbol{r}$有三个分量(r,θ,ϕ) ——r在式1.19中已经显含，(θ,ϕ)则来自于式1.19的第二个因子$\boldsymbol{n}$.

如图3所示，Bloch球由所有不同的$\boldsymbol{r}$构成. 当

- $r=1$时，球面上的点一一对应于$\mathbb{C}^2$空间中的纯态；
- $r<1$时，球内部的点一一对应于$\mathbb{C}^2$空间中的混合态.

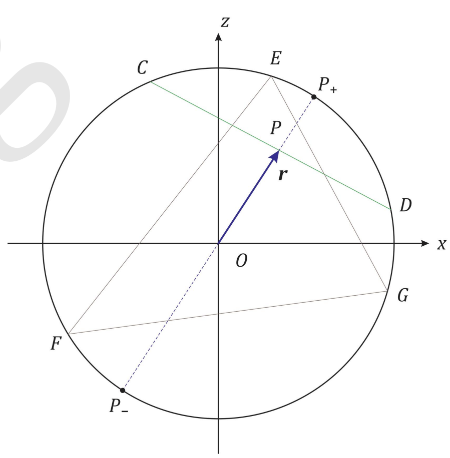

图 3: 混合态Bloch向量

1.4 混合态Bloch向量的求解

上面我们引进了Bloch向量这个概念，却并未讨论在具体问题中如何求出一个态ρ对应的$\boldsymbol{r}$.

这里先给出结论：Bloch向量$\boldsymbol{r}=r_i\boldsymbol{e}_i$在直角坐标系下的第$i\,(i=1,2,3)$个分量

$$r_i=\mathrm{Tr}\left(\sigma_i\rho\right) \tag{1.21}$$

正是Pauli算符σ_i在给定量子态ρ上的期望值.

实际上，这与作业10题1c证明过的结论类似. 我们可将密度算符1.17用Einstein求和约定改写为

$$\rho=\frac{1}{2}\left(\mathbb{1}+r_j\sigma_j\right) \tag{1.22}$$

因此式1.21的右端就是

$$\mathrm{Tr}\left(\sigma_i\rho\right)=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\sigma_i+\sigma_i r_j\sigma_j\right) \tag{1.23}$$

根据Pauli算符性质

$$\mathrm{Tr}\left(\sigma_i\right)=0,\ \mathrm{Tr}\left(\sigma_i\sigma_j\right)=\mathrm{Tr}\left(\mathbb{1}\delta_{ij}+\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\sigma_k\right)=2\delta_{ij} \tag{1.24}$$

式1.23就可进一步化简为

$$\mathrm{Tr}\left(\sigma_i\rho\right)=0+\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(r_j\sigma_i\sigma_j\right)=\frac{1}{2}r_j\cdot 2\delta_{ij}=r_i \tag{1.25}$$

1.5 混合态Bloch向量的物理意义

我们还可以讨论混合态的本征值、本征矢及Bloch向量的物理意义. 将密度算符1.17再次改写为

$$\begin{aligned}\rho&=\frac{1}{2}\left(\mathbb{1}+r\sigma_n\right)\\&=\frac{1}{2}\left[\left|n_+\right\rangle\left\langle n_+\right|+\left|n_-\right\rangle\left\langle n_-\right|+r\left(\left|n_+\right\rangle\left\langle n_+\right|-\left|n_-\right\rangle\left\langle n_-\right|\right)\right]\\&=\frac{1+r}{2}\left|n_+\right\rangle\left\langle n_+\right|+\frac{1-r}{2}\left|n_-\right\rangle\left\langle n_-\right|\end{aligned} \tag{1.26}$$

因而可以说，ρ的两个本征值是$\dfrac{1\pm r}{2}$，相应的本征矢仍为$|n_\pm\rangle$. $\dfrac{1\pm r}{2}$对应至图3中，即分别是线段P_-P和P_+P的长度. 特别地，

- 当$r=1$时，本征值退化为1和0，对应于**纯态**；
- 当$r=0$时，本征值退化为两个$\dfrac{1}{2}$，对应于**最大混合态**或称完全混合态.

从这个层面上我们认为，Bloch向量的模长可以表征量子态的混合程度或**纯度**，如图4所示.

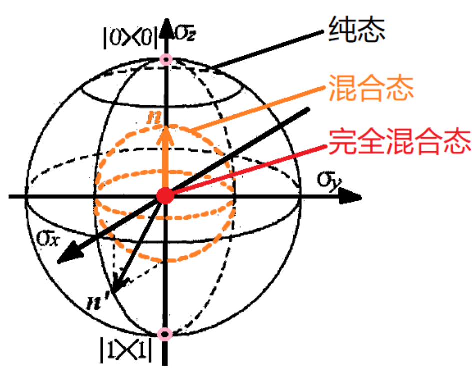

图 4: 不同模长的Bloch向量

实际上，式1.15对于密度算符平方迹的表述也是一套判断量子态纯度的标准.

上面处理的是单个态的Bloch向量. 对于两个不同态，我们又如何利用它们的Bloch向量给出一些相关的信息呢？可以尝试作如下计算：

$$\begin{aligned}\operatorname{Tr}\left(\rho_1\rho_2\right)&=\operatorname{Tr}\left[\frac{1}{2}\left(\mathbb{1}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}_1\right)\cdot\frac{1}{2}\left(\mathbb{1}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{r}_2\right)\right]\\&=\frac{1}{4}\operatorname{Tr}\left[\mathbb{1}+r_1\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_1+r_2\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_2+r_1r_2\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_1\right)\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_2\right)\right]\\&=\frac{1}{2}+\frac{r_1r_2}{2}\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2\end{aligned}\tag{1.27}$$

其中利用了课上推导过的公式

$$\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_1\right)\left(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_2\right)=\mathbb{1}\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2+\mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{n}_1\times\boldsymbol{n}_2\right)\tag{1.28}$$

会发现，Bloch向量的内积$\boldsymbol{r}_1\cdot\boldsymbol{r}_2$表征了两个态间的Overlap ——可以定性地理解为其中一个态“处于另一个态的概率”.

在纯态的情形下，这种理解则可能更加直观. 设式1.27中的$\rho_i=\psi_i=\left|\psi_i\right\rangle\left\langle\psi_i\right|(i=1,2)$，则有

$$\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2=\operatorname{Tr}\left(\psi_1\psi_2\right)=\left\langle\psi_1\,|\,\psi_2\right\rangle\left\langle\psi_2\,|\,\psi_1\right\rangle=\left|\left\langle\psi_1\,|\,\psi_2\right\rangle\right|^2\tag{1.29}$$

在作业8题3d中，我们已经计算过类似的概率.

2 例题选讲

2.1 几何相

考察纯态$|\psi(0)\rangle$在不含时Hamiltonian$\hat{H}$的支配下发生时间演化的过程. 至τ时刻，

- 相位的总变化为

$$\gamma(\tau)=\arg\langle\psi(0)\,|\,\psi(\tau)\rangle$$

- **单独考虑动力学演化**所带来的相位改变——动力学相(dynamic)为

$$\gamma_{\mathrm{d}}(\tau)=\int_0^\tau \mathrm{d}\gamma_{\mathrm{d}}(t)=\int_0^\tau \arg\langle\psi(t)\,|\,\psi(t+\mathrm{d}t)\rangle$$

上式是基于无穷小演化过程导出的.

(a) 尽可能地化简$\gamma_{\mathrm{d}}(\tau)$的表达式. 是否能说明$\gamma_{\mathrm{d}}(\tau)=\gamma(\tau)$？若否，定义**几何相**(geometry)

$$\gamma_{\mathrm{g}}(\tau)\triangleq\gamma(\tau)-\gamma_{\mathrm{d}}(\tau)$$

(b) 具体到$\mathbb{C}^2$空间中，设$|\psi(0)\rangle=\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle+\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$且 $\hat{H}=\frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z$，试计算$\gamma(\tau)$和$\gamma_{\mathrm{d}}(\tau)$. （用$\theta,\omega,\tau$表示）
(c) 当$\tau=T=2\pi/\omega$时，在Bloch球上表示出(b)的演化过程. 分别计算几何相$\gamma_{\mathrm{g}}(T)$和 Bloch向量演化路径所围成的立体角$\Omega=\Omega(\theta)$，并寻找能发现什么规律.

2.1.1 1a

根据题意，我们考虑无穷小过程. 从t时刻至$t+\mathrm{d}t$时刻，态的演化可表示为

$$\left|\psi\left(t\right)\right\rangle \to \left|\psi\left(t+\mathrm{d}t\right)\right\rangle = \left|\psi\left(t\right)\right\rangle + \left|\dot{\psi}\left(t\right)\right\rangle \mathrm{d}t \tag{2.1}$$

因此动力学相位的改变是

$$\mathrm{d}\gamma_{\mathrm{d}}\left(t\right) = \arg\left\langle \psi\left(t\right)\,|\,\psi\left(t+\mathrm{d}t\right)\right\rangle = \arg\left[1+\left\langle \psi\left(t\right)\middle|\,\dot{\psi}\left(t\right)\right\rangle \mathrm{d}t\right] \tag{2.2}$$

当然，$\left|\dot{\psi}\left(t\right)\right\rangle$的表述并不严谨，它并不是一个严格满足归一化条件的Ket，这里只是用它简化代替了$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left|\psi\left(t\right)\right\rangle$.

另一方面，在归一化条件$\left\langle \psi\left(t\right)\,|\,\psi\left(t\right)\right\rangle = 1$两边对$t$求导，可得

$$\left\langle \psi\left(t\right)\middle|\,\dot{\psi}\left(t\right)\right\rangle + \left\langle \dot{\psi}\left(t\right)\middle|\,\psi\left(t\right)\right\rangle = 0 \tag{2.3}$$

即$\left\langle \psi\left(t\right)\middle|\,\dot{\psi}\left(t\right)\right\rangle$和它复共轭的和为0，因而是纯虚数. 于是，式2.2可化为

$$\mathrm{d}\gamma_{\mathrm{d}}\left(t\right) = \arctan\left(-\mathrm{i}\left\langle \psi\left(t\right)\middle|\,\dot{\psi}\left(t\right)\right\rangle \mathrm{d}t\right) = -\mathrm{i}\left\langle \psi\left(t\right)\middle|\,\dot{\psi}\left(t\right)\right\rangle \mathrm{d}t \tag{2.4}$$

也就得到动力学相对时间的导数

$$\dot{\gamma}_{\mathrm{d}}\left(t\right) = -\mathrm{i}\left\langle \psi\left(t\right)\middle|\,\dot{\psi}\left(t\right)\right\rangle \tag{2.5}$$

考虑到$t=0$时的动力学相$\gamma_{d}\left(0\right)=0$，并应用Schrödinger方程，任意$\tau$时刻的动力学相可通过积分求出：

$$\gamma_{\mathrm{d}}\left(\tau\right) = \frac{1}{\mathrm{i}}\int_0^\tau \left\langle \psi\left(t\right)\middle|\,\dot{\psi}\left(t\right)\right\rangle \mathrm{d}t = \frac{1}{\hbar}\int_0^\tau \left\langle \psi\left(t\right)\middle|\,\hat{H}\,\middle|\,\psi\left(t\right)\right\rangle \mathrm{d}t \tag{2.6}$$

最后，由于已知$\hat{H}$不含时，我们有

$$\left\langle \psi\left(t\right)\middle|\,\hat{H}\,\middle|\,\psi\left(t\right)\right\rangle = \left\langle \psi\left(0\right)\middle|\,\hat{U}^{\dagger}\left(t\right)\hat{H}\hat{U}\left(t\right)\middle|\,\psi\left(0\right)\right\rangle = \left\langle \psi\left(0\right)\middle|\,\hat{H}\,\middle|\,\psi\left(0\right)\right\rangle = E\left(0\right) \tag{2.7}$$

因此这是一个守恒量. 式中，$\hat{U}\left(t\right)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar}$是$0\sim t$时段的时间演化算符，$E\left(0\right)$是$t=0$时刻的能量期望值.

最终我们得到

$$\gamma_{\mathrm{d}}\left(\tau\right) = \frac{E\left(0\right)\tau}{\hbar} \tag{2.8}$$

该值一般与总相差$\gamma\left(\tau\right)$相异.

2.1.2 1b

容易得到

$$\left|\psi\left(t\right)\right\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}\cos\frac{\theta}{2}\left|0\right\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}\sin\frac{\theta}{2}\left|1\right\rangle \tag{2.9}$$

于是可以计算内积

$$\begin{aligned}\langle\psi(0)\,|\,\psi(t)\rangle &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}\cos^2\frac{\theta}{2}+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}}\sin^2\frac{\theta}{2}\\ &= \left(\cos\frac{\omega t}{2}-\mathrm{i}\sin\frac{\omega t}{2}\right)\frac{1+\cos\theta}{2}+\left(\cos\frac{\omega t}{2}+\mathrm{i}\sin\frac{\omega t}{2}\right)\frac{1-\cos\theta}{2}\\ &= \cos\frac{\omega t}{2}-\mathrm{i}\cos\theta\sin\frac{\omega t}{2}\\ &\triangleq w(t)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma(t)}\end{aligned}\tag{2.10}$$

其中新引入的两时变参量定义为

$$\begin{cases} w(t)=\sqrt{\cos^2\dfrac{\omega t}{2}+\cos^2\theta\sin^2\dfrac{\omega t}{2}}\\ \gamma(t)=-\arctan\left[\cos\theta\tan\dfrac{\omega t}{2}\right]\end{cases}\tag{2.11}$$

后者即是要求的总相差.

接着可以计算动力学相. 为此，需先计算

$$\begin{aligned}E(0) &= \frac{\hbar\omega}{2}\left[\cos\frac{\theta}{2}\langle 0|+\sin\frac{\theta}{2}\langle 1|\right]\hat{\sigma}_z\left[\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle+\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle\right]\\ &= \frac{\hbar\omega}{2}\left[\cos\frac{\theta}{2}\langle 0|+\sin\frac{\theta}{2}\langle 1|\right]\left[\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle-\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle\right]\\ &= \frac{\hbar\omega}{2}\left(\cos^2\frac{\theta}{2}-\sin^2\frac{\theta}{2}\right)=\frac{\hbar\omega}{2}\cos\theta\end{aligned}\tag{2.12}$$

利用式2.8，就得到τ时刻的动力学相

$$\gamma_{\mathrm{d}}(\tau)=\frac{\omega\tau}{2}\cos\theta\tag{2.13}$$

2.1.3 1c

依定义，任意τ时刻的几何相

$$\gamma_{\mathrm{g}}(\tau)=-\arctan\left[\cos\theta\tan\frac{\omega\tau}{2}\right]-\frac{\omega\tau}{2}\cos\theta\tag{2.14}$$

故当$\tau=T=2\pi/\omega$时，上式化为

$$\gamma_{\mathrm{g}}(T)=\pi(1-\cos\theta)\tag{2.15}$$

另一方面，此时系统量子态为

$$|\psi(T)\rangle=-|\psi(0)\rangle\tag{2.16}$$

与初态仅相差一个相位$\gamma(T)=\pi$，因而在Bloch球中，二者以同一单位向量表示，所要表示的演化过程为一封闭曲线，如图5所示. 这是一种**循环演化**(Cyclic Evolution).

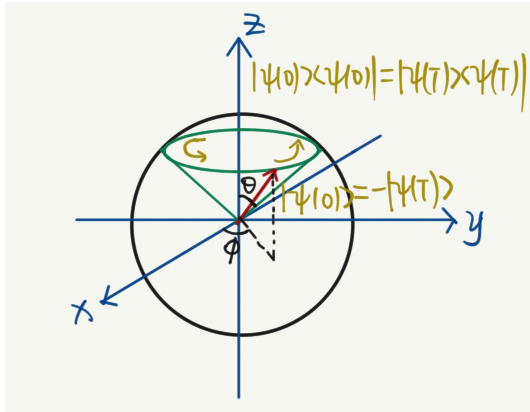

图 5: Bloch球与循环演化

在该时间演化过程中，Bloch向量在$\mathbb{R}^3$中沿着圆锥的母线曲面作进动，从而在θ不变的情况下使得方位角ϕ发生$0\sim 2\pi$的变化. 一个周期T过后，密度算符与$t=0$时相同，即$\psi\left(T\right)=\left|\psi\left(T\right)\right\rangle\left\langle\psi\left(T\right)\right|=\left|\psi\left(0\right)\right\rangle\left\langle\psi\left(0\right)\right|=\psi\left(0\right)$，意味着Bloch向量回到初始位置，但产生了总相差π. 该相差需要再一次的循环演化即$t=2T$时，才可消除. 这也就是1.1节中提到的实参数γ的“独特作用”.

圆锥的底面纬圆是Bloch向量端点的路径，其围成的立体角是

$$\Omega\left(\theta\right)=2\pi\left(1-\cos\theta\right) \tag{2.17}$$

对比上式及式2.15，即得到

$$\Omega\left(\theta\right)=2\gamma_{\mathrm{g}}\left(T\right) \tag{2.18}$$

因此，我们可以形象地认为**几何相等于路径围成立体角的一半**. 对于非循环演化，可以证明，用Bloch球上的测地线连接起点和终点所构成的立体角，仍有“立体角的一半”的结论.

事实上，不论支配系统演化的Hamiltonian是否含时、甚至是否缓变（即是否绝热过程），都将有几何相的存在. 我们上面的推导，也并非完全的严格化、公理化. 一般而言，几何相又称Berry Phase，是由广泛应用于凝聚态物理学中的Berry Curvature和Berry Connection等概念导出. 而我们熟知的Aharonov-Bohm效应，其实就是电磁场几何相位的一种体现.

1998年沃尔夫物理学奖得主Michael Berry，上述一系列概念的提出者，对此曾形象地评述道：“……想象一下，你正试图将车停在两辆车之间的窄空位. 你觉得自己做得不够好，离路边还有一段距离. 为了再靠近一点，你会做一系列蛇形操作，驾驶并转向、驾驶并转向……每一次循环操作之后，你就离路边更近一点. 这些细微的侧向移动，和Berry相位有相同的数学原理：有些东西改变了又变回来了（比如你的方向盘）；其他东西改变了，但变不回来了（比如车的位置）. 在物理的波中，它以一种更微妙、更困难的方式呈现出来，尤其是在量子波或光波上.”

2.2 外磁场中的两自旋$1/2$粒子体系

设某一体系由两个自旋1/2粒子组成，并置于均匀外磁场$\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z$中. 系统的Hamiltonian可表示为

$$\hat{H}=a\hat{\sigma}_{1z}+b\hat{\sigma}_{2z}+c\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2$$

其中a, b, c为非零常系数. 式中，前两项表征粒子内禀磁矩与外磁场的相互作用，最后一项则表征两粒子间的自旋-自旋相互作用. 试求体系的能量本征值.

遇到此类涉及多个角动量的耦合问题，自然需要确定是在耦合表象还是非耦合表象中进行讨论. 鉴于本体系的Hamiltonian含有$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 \sim \hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2$项，我们选择前者为宜.

一般而言，耦合表象的基是$|s_1, s_2; s, m\rangle$. 在将讨论限于(s_1, s_2)所确定的子空间内时，可将其简记为$\{|s, m\rangle\} = \{|0,0\rangle ; |1,1\rangle , |1,0\rangle , |1,-1\rangle\}$. 非耦合表象的基到$\{|s, m\rangle\}$的变换关系已知为

$$\begin{cases} |0,0\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle\right) \\ |1,1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1,0\rangle = \dfrac{1}{\sqrt{2}} \left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) \\ |1,-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \tag{2.19}$$

四个$|s, m\rangle$均与$\hat{\sigma}_{1z}$和$\hat{\sigma}_{2z}$的本征态同时相关. 因此，Hamiltonian的原形式中单独将$\hat{\sigma}_{1z}$及$\hat{\sigma}_{2z}$成项，相对而言不那么便于处理（并非不能），我们不妨尝试将其化为$\hat{\sigma}_{1z} \pm \hat{\sigma}_{2z}$的线性组合，有

$$\begin{aligned} \hat{H} &= c\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 + t_+ \left(\hat{\sigma}_{1z} + \hat{\sigma}_{2z}\right) + t_- \left(\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}\right) \\ &= \frac{4c}{\hbar^2} \hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2 + \frac{2t_+}{\hbar} \hat{S}_z + \frac{2t_-}{\hbar} \left(\hat{S}_{1z} - \hat{S}_{2z}\right) \end{aligned} \tag{2.20}$$

其中$t_\pm \triangleq \dfrac{a \pm b}{2}, \hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$. 下面，我们就上式进行逐项分析.

- 首先熟知

$$\hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2 = \frac{1}{2} \left(\hat{\boldsymbol{S}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}_1^2 - \hat{\boldsymbol{S}}_2^2\right) \tag{2.21}$$

  因而四个$|s, m\rangle$均为$\hat{\boldsymbol{S}}_1 \cdot \hat{\boldsymbol{S}}_2$的本征态，对应本征值为

$$\frac{s\,(s+1) - 3/2}{2} \hbar^2 = \begin{cases} -\dfrac{3}{4}\hbar^2, s = 0 \\ \dfrac{1}{4}\hbar^2, s = 1 \end{cases} \tag{2.22}$$

- 其次，四个$|s, m\rangle$也均为$\hat{S}_z$的本征态，对应本征值为$m\hbar$.

- 重点是第三项$\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}$. 为便于理解，我们引入直积运算，有

$$\begin{aligned} \left(\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}\right) |1,1\rangle &= \left(\hat{\sigma}_{1z} \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \hat{\sigma}_{2z}\right) \left(|\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle\right) = |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle - |\uparrow\rangle |\uparrow\rangle = 0 \\ \left(\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z}\right) |1,-1\rangle &= \left(\hat{\sigma}_{1z} \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \hat{\sigma}_{2z}\right) \left(|\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle\right) = \left(-|\downarrow\rangle\right) |\downarrow\rangle - |\downarrow\rangle \left(-|\downarrow\rangle\right) = 0 \end{aligned} \tag{2.23}$$

  因此$|1,1\rangle$和$|1,-1\rangle$是其本征态，本征值均为0.

类似地，若记$|\psi_+\rangle = |1,0\rangle, |\psi_-\rangle = |0,0\rangle$，我们有

$$\begin{aligned}(\hat{\sigma}_{1z} - \hat{\sigma}_{2z})|\psi_\pm\rangle &= (\hat{\sigma}_{1z} \otimes \mathbb{1} - \mathbb{1} \otimes \hat{\sigma}_{2z}) \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \pm |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle \mp |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle) - (-|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle \pm |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle)] \\ &= \sqrt{2}(|\uparrow\downarrow\rangle \mp |\downarrow\uparrow\rangle) = 2|\psi_\mp\rangle\end{aligned} \tag{2.24}$$

故$|\psi_\pm\rangle$不是其本征态.

综上讨论，$|1,\pm 1\rangle$是系统的能量本征态，对应能量本征值为

$$c \pm 2t_+ = c \pm (a+b) \tag{2.25}$$

还有两个能量本征值需在$\{|1,0\rangle, |0,0\rangle\}$构成的子空间中解出. 为此，需要首先写出Hamiltonian在该子空间内的矩阵形式：

$$H = \frac{4c}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \frac{1}{4}\hbar^2 & 0 \\ 0 & -\frac{3}{4}\hbar^2 \end{pmatrix} + 0 + t_-\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & a-b \\ a-b & -3c \end{pmatrix} \tag{2.26}$$

解久期方程即可得到本征值

$$-c \pm 2\sqrt{c^2 + t_-^2} = -c \pm \sqrt{4c^2 + (a-b)^2} \tag{2.27}$$

在不考虑偶然简并的情况下，体系共有四个能级如式2.25和式2.27.

2.3 时变外磁场中的自旋1/2粒子

一自旋1/2粒子处于时变外磁场

$$\boldsymbol{B}(t) = B_0\boldsymbol{e}_z + B_1(\cos\omega t\boldsymbol{e}_x + \sin\omega t\boldsymbol{e}_y)$$

中，因而其Hamiltonian是

$$\hat{H} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \boldsymbol{B} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\hat{\sigma}_z + \frac{1}{2}\hbar\omega_1(\hat{\sigma}_x\cos\omega t + \hat{\sigma}_y\sin\omega t)$$

其中

$$\omega_0 \triangleq \frac{eB_0}{m},\ \omega_1 \triangleq \frac{eB_1}{m}$$

若已知体系初态为$|\psi(0)\rangle$，试求体系的时间演化.

直接求解Schrödinger方程固然可以解答本题，但并不简洁优雅.

注意到，在时间演化过程中，本体系的Hamiltonian和量子态均发生变化——这并不是我们想看到的. 我们总是希望能够在Schrödinger绘景或Heisenberg绘景中求解时间演化问题. 因此，是否可以尝试作某种变换，使得可以在二者其一中进行讨论，就是我们下一步思考的方向.

观察Hamiltonian中含时的一项$\sim \hat{\sigma}_x \cos\omega t + \hat{\sigma}_y \sin\omega t$，将发现这与作业10题2的结果相同. 这说明这一项是对$\hat{\sigma}_x$绕z方向作角度ωt的旋转变换得到的. 因此，通过其逆变换，我们原则上能消除这一旋转因子.

考虑酉变换

$$\hat{V}(t) = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{\hat{S}_z \cdot \omega t}{\hbar}\right) = \exp\left(-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z\right) \tag{2.28}$$

在其所确定的旋转参考系中，有

$$\begin{cases} \hat{\tilde{H}} = \hat{V}^\dagger(t)\hat{H}(t)\hat{V}(t) = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\hat{\sigma}_z + \frac{1}{2}\hbar\omega_1\hat{\sigma}_x \\ \left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle = \hat{V}^\dagger(t)\left|\psi(t)\right\rangle \end{cases} \tag{2.29}$$

确实使得Hamiltonian成为不含时量.

下面只需正常求解时间演化问题即可. 但要注意，我们并不能简单地认为旋转参考系中的Schrödinger方程是 $\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle}{\mathrm{d}t} ?= \hat{\tilde{H}}\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle$，而应从原始方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\left|\psi(t)\right\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{H}(t)\left|\psi(t)\right\rangle \tag{2.30}$$

中一步步推导出来. 也即，不能想当然地利用$\hat{\tilde{H}}$的表达式直接写出“时间演化算符”或“态的演化”.

将式2.29给出的关系代入原始方程，有

$$\hat{H}(t)\hat{V}(t)\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle = \mathrm{i}\hbar\left[\hat{V}(t)\frac{\mathrm{d}\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}\hat{V}(t)}{\mathrm{d}t}\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle\right] = \mathrm{i}\hbar\hat{V}(t)\frac{\mathrm{d}\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z\left|\psi(t)\right\rangle \tag{2.31}$$

再在两端同时左乘$\hat{V}^\dagger(t)$，得到

$$\hat{\tilde{H}}\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle \tag{2.32}$$

即

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle}{\mathrm{d}t} = \left[\frac{1}{2}\hbar(\omega_0-\omega)\hat{\sigma}_z + \frac{1}{2}\hbar\omega_1\hat{\sigma}_x\right]\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle \tag{2.33}$$

上式右端方才给出了等效的Hamiltonian

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \frac{1}{2}\hbar\omega_1\hat{\sigma}_x - \frac{1}{2}\hbar\Delta\hat{\sigma}_z = \frac{1}{2}\hbar\Omega\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{n} \tag{2.34}$$

其中

$$\Delta \triangleq \omega-\omega_0,\ \Omega \triangleq \sqrt{\Delta^2+\omega_1^2},\ \boldsymbol{n} \triangleq \left(\frac{\omega_1}{\Omega}, 0, -\frac{\Delta}{\Omega}\right) \tag{2.35}$$

因此，最终我们得到

$$\begin{aligned} \left|\psi(t)\right\rangle &= \hat{V}(t)\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\hat{H}_{\text{eff}}t}{\hbar}\right)\left|\psi(0)\right\rangle \\ &= \exp\left(-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}\hat{\sigma}_z\right)\left(\mathbb{1}\cos\frac{\Omega t}{2} - \mathrm{i}\hat{\sigma}_x\frac{\omega_1}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2} + \mathrm{i}\hat{\sigma}_z\frac{\Delta}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right)\left|\psi(0)\right\rangle \end{aligned} \tag{2.36}$$