

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	1
1.1 纯态Bloch向量回溯	1
1.2 混合态概述	3
1.3 Bloch球中的混合态	4
1.4 混合态Bloch向量的求解	4
1.5 混合态Bloch向量的物理意义	5
2 例题选讲	6
2.1 几何相	6
2.1.1 1a	7
2.1.2 1b	7
2.1.3 1c	8
2.2 外磁场中的两自旋1/2粒子体系	9
2.3 时变外磁场中的自旋1/2粒子	11

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 σ 在 \mathbb{R}^3 空间中单位向量

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (1.1)$$

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

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

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

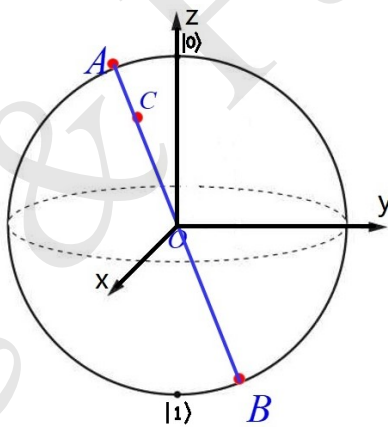


图 1: 反向平行的Bloch向量

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

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

其中复系数 c_0, c_1 满足归一化条件

$$|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1 \quad (1.4)$$

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

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

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 $\pm\mathbf{n}$, 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 $\frac{\theta}{2}$ 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 $(\theta, \phi, \gamma) = (\frac{\pi}{2}, 0, 0)$ 和 $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4})$, 即可得到我们熟知的

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

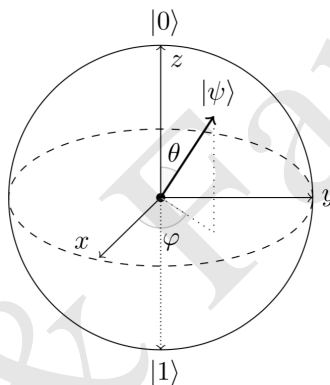


图 2: 纯态Bloch向量

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:

$$M = \sum_{i=0}^3 M_i \sigma_i, \quad M_i = \frac{1}{2} \text{Tr}(M \sigma_i) \quad (1.7)$$

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 $\pm\mathbf{n}$ 的分量, 即

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

根据该式, 并考虑到可利用式1.2计算出的

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

我们很容易写出 σ_n 的形式:

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

我们可用

$$\text{Tr}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) = n_i \text{Tr}(\sigma_i) = 0 \quad (1.11)$$

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 $\mathbf{n} = n_i \mathbf{e}_i$, $i = 1, 2, 3$.

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

$$\varepsilon = \{p_1, \psi_1; p_2, \psi_2\} \quad (1.12)$$

其中 $|\psi_i\rangle$ 的密度算符简记为

$$\psi_i = |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (1.13)$$

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

$$\rho = \sum_i p_i \psi_i = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad p_i \geq 0, \quad \sum_i p_i = 1 \quad (1.14)$$

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:

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

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 $|\psi_i\rangle$ ($i = 1, \dots, m$)的密度算符是

$$\rho_i = \frac{1}{2} (\mathbb{1} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_i) \quad (1.16)$$

因而混合态1.14的密度矩阵是

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

其中

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^m p_i \mathbf{n}_i \quad (1.18)$$

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

$$\mathbf{r} = r \mathbf{n} \quad (1.19)$$

\mathbf{n} 为单位向量, 则显然有

$$0 \leq r \leq 1 \quad (1.20)$$

因此一般地, \mathbf{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 \mathbf{n} , 只是其模长为最大值1的特殊情况.

\mathbf{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 \mathbf{n} .

如图3所示, Bloch球由所有不同的 \mathbf{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.

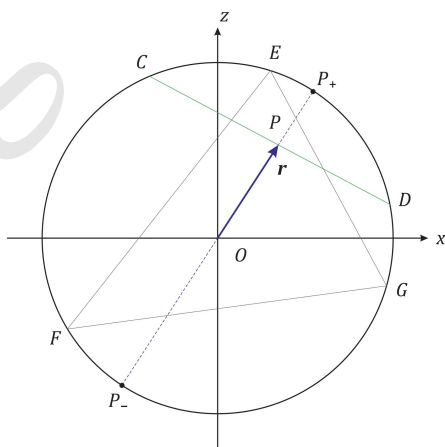


图 3: 混合态Bloch向量

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 \mathbf{r} .

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

$$r_i = \text{Tr}(\sigma_i \rho) \quad (1.21)$$

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

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

因此式1.21的右端就是

$$\text{Tr}(\sigma_i \rho) = \frac{1}{2} \text{Tr}(\sigma_i + \sigma_i r_j \sigma_j) \quad (1.23)$$

根据Pauli算符性质

$$\text{Tr}(\sigma_i) = 0, \text{Tr}(\sigma_i \sigma_j) = \text{Tr}(\mathbb{1} \delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k) = 2 \delta_{ij} \quad (1.24)$$

式1.23就可进一步化简为

$$\text{Tr}(\sigma_i \rho) = 0 + \frac{1}{2} \text{Tr}(r_j \sigma_i \sigma_j) = \frac{1}{2} r_j \cdot 2 \delta_{ij} = r_i \quad (1.25)$$

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

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

因而可以说, ρ 的两个本征值是 $\frac{1 \pm r}{2}$, 相应的本征矢仍为 $|n_{\pm}\rangle$. $\frac{1 \pm r}{2}$ 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 $\frac{1}{2}$, 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.

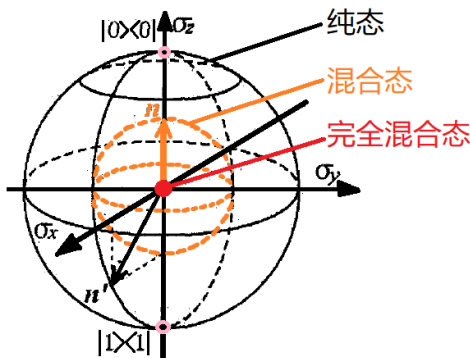


图 4: 不同模长的Bloch向量

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:

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

其中利用了课上推导过的公式

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_1)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_2) = \mathbb{1}\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{n}_1 \times \mathbf{n}_2) \quad (1.28)$$

会发现, Bloch向量的内积 $\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2$ 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 $\rho_i = \psi_i = |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ ($i = 1, 2$), 则有

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2 = \mathrm{Tr}(\psi_1\psi_2) = \langle\psi_1|\psi_2\rangle\langle\psi_2|\psi_1\rangle = |\langle\psi_1|\psi_2\rangle|^2 \quad (1.29)$$

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

$$\gamma_d(\tau) = \int_0^\tau d\gamma_d(t) = \int_0^\tau \arg\langle\psi(t)|\psi(t+dt)\rangle$$

上式是基于无穷小演化过程导出的.

(a) 尽可能地化简 $\gamma_d(\tau)$ 的表达式. 是否能说明 $\gamma_d(\tau) = \gamma(\tau)$? 若否, 定义几何相(geometry)

$$\gamma_g(\tau) \triangleq \gamma(\tau) - \gamma_d(\tau)$$

- (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 $\gamma_d(\tau)$. (用 θ, ω, τ 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 $\gamma_g(T)$ 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 $t + dt$ 时刻, 态的演化可表示为

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi(t+dt)\rangle = |\psi(t)\rangle + |\dot{\psi}(t)\rangle dt \quad (2.1)$$

因此动力学相位的改变是

$$d\gamma_d(t) = \arg \langle \psi(t) | \psi(t+dt) \rangle = \arg \left[1 + \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle dt \right] \quad (2.2)$$

当然, $|\dot{\psi}(t)\rangle$ 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 $\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle$.

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

$$\langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle + \langle \dot{\psi}(t) | \psi(t) \rangle = 0 \quad (2.3)$$

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

$$d\gamma_d(t) = \arctan \left(-i \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle dt \right) = -i \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle dt \quad (2.4)$$

也就得到动力学相对时间的导数

$$\dot{\gamma}_d(t) = -i \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle \quad (2.5)$$

考虑到 $t = 0$ 时的动力学相 $\gamma_d(0) = 0$, 并应用Schrödinger方程, 任意 τ 时刻的动力学相可通过积分求出:

$$\gamma_d(\tau) = \frac{1}{i} \int_0^\tau \langle \psi(t) | \dot{\psi}(t) \rangle dt = \frac{1}{\hbar} \int_0^\tau \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle dt \quad (2.6)$$

最后, 由于已知 \hat{H} 不含时, 我们有

$$\langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t) | \psi(0) \rangle = \langle \psi(0) | \hat{H} | \psi(0) \rangle = E(0) \quad (2.7)$$

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

最终我们得到

$$\gamma_d(\tau) = \frac{E(0)\tau}{\hbar} \quad (2.8)$$

该值一般与总相差 $\gamma(\tau)$ 相异.

2.1.2 1b

容易得到

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

于是可以计算内积

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

其中新引入的两时变参量定义为

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

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

$$\gamma_d(\tau) = \frac{\omega\tau}{2} \cos \theta \tag{2.13}$$

2.1.3 1c

依定义, 任意 τ 时刻的几何相

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

故当 $\tau = T = 2\pi/\omega$ 时, 上式化为

$$\gamma_g(T) = \pi(1 - \cos \theta) \tag{2.15}$$

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).

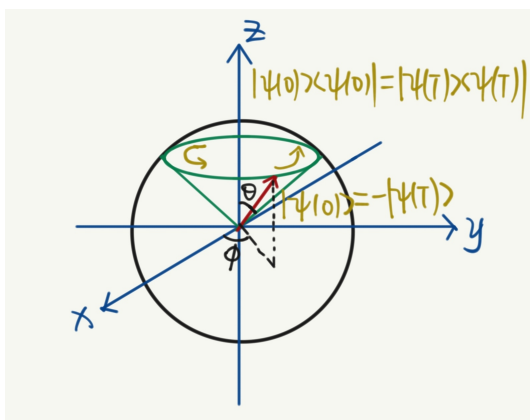


图 5: Bloch球与循环演化

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 $\psi(T) = |\psi(T)\rangle\langle\psi(T)| = |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)| = \psi(0)$, 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

$$\Omega(\theta) = 2\pi(1 - \cos\theta) \quad (2.17)$$

对比上式及式2.15, 即得到

$$\Omega(\theta) = 2\gamma_g(T) \quad (2.18)$$

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 $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ 中. 系统的Hamiltonian可表示为

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

其中 a, b, c 为非零常数. 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 $\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2 \sim \hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2$ 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

$$\begin{cases} |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1, 1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (2.19)$$

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

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

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

- 首先熟知

$$\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 = \frac{1}{2} (\hat{S}^2 - \hat{S}_1^2 - \hat{S}_2^2) \quad (2.21)$$

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

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

- 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

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

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

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

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

$$c \pm 2t_+ = c \pm (a + b) \quad (2.25)$$

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:

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

解久期方程即可得到本征值

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

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

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

中, 因而其Hamiltonian是

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

其中

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

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

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

在其所确定的旋转参考系中, 有

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

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 $i\hbar \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}(t)\rangle = \hat{H} |\tilde{\psi}(t)\rangle$, 而应从原始方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle \quad (2.30)$$

中一步步推导出来. 也即, 不能想当然地利用 \hat{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

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

再在两端同时左乘 $\hat{V}^\dagger(t)$, 得到

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

即

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

上式右端方才给出了等效的Hamiltonian

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

其中

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

因此, 最终我们得到

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