Lewis-Resenfeld 不变量

吴梦之

2020 年 3 月 31 日

这篇 note 旨在梳理 Lewis-Resenfeld 不变量的主要思想。本文主要参考。

1 Lewis-Resenfeld 不变量的引入

我们的目标是求解一个含时 Schrodinger 方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = \hat{H}(t)|\Psi\rangle \tag{1}$$

在这个系统中，我们假定存在一个厄米算符 $\hat{I}(t)$，满足

$$i\hbar\frac{\partial \hat{I}}{\partial t} + [\hat{I}, \hat{H}] = 0 \tag{2}$$

我们称之是一个不变量。不难验证，$\hat{I}$ 的一个性质是：若 $|\Psi\rangle$ 是 Schrodinger 方程的解，那么 $\hat{I}|\Psi\rangle$ 也是 Schrodinger 方程的解，即

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\hat{I}|\Psi\rangle) = \hat{H}(\hat{I}|\Psi\rangle) \tag{3}$$

由于我们假定，每个时刻 $\hat{I}(t)$ 都是一个厄米算符，因此可以认为 $\hat{I}(t)$ 每个时刻的瞬时本征态集合 $\{|\lambda(t), \kappa(t)\rangle\}$ 都构成 Hilbert 空间的一组完备正交基，其中 $\lambda(t)$ 是 $\hat{I}(t)$ 的瞬时本征值，$\kappa(t)$ 是简并自由度。方便起见，不妨只考虑无简并的情形，因此 κ 自由度就没有必要存在了，因此之后我用 $|\phi_n(t)\rangle$ 来表示 $\hat{I}(t)$ 的瞬时本征态。我们还应指出，$|\phi_n(t)\rangle$ 并不一定满足 Schrodinger 方程，它具有一个全局相位的自由度，只有特定相位的态才满足 Schrodinger 方程，记作

$$|\Psi_n(t)\rangle = e^{i\alpha_n(t)}|\phi_n(t)\rangle \tag{4}$$

在对态做展开时应当用 $|\Psi_n(t)\rangle$ 而不是 $|\phi_n(t)\rangle$，这就好比 Gauss 波包本身并不是含时 Schrodinger 方程的解，Gauss 波包乘上随时间演化的相位以后才是 Schrodinger 方程的解 (尽管这个相位并没有可观测效应)。

Lewis 和 Resenfeld 证明了两件很重要的事情，第一个是 $\hat{I}(t)$ 的本征值 $\lambda(t)$ 并不随时间变化，即

$$\frac{\partial \lambda_n}{\partial t} = 0 \tag{5}$$

第二个重要的事情是相位 $\alpha(t)$ 的演化方程是

$$\hbar\frac{d\alpha_n}{dt} = \langle\phi_n| i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}|\phi_n\rangle \tag{6}$$

事实上，因子 $e^{i\alpha_n(t)}$ 代表了时域上的一个规范场。最终的解为

$$|\Psi(t)\rangle = \Sigma c_n e^{i\alpha(t)} |\phi_n(t)\rangle \tag{7}$$

2 Lewis-Resenfeld 不变量

文献利用 Lewis-Resenfeld 不变量反解出了 $\hat{H}(t)$，思路如下：
首先利用 $\hat{I}(t)$ 的瞬时本征态的演化写出时间演化算符 $\hat{U}(t)$ 为

$$\hat{U}(t) = \sum e^{i\alpha_n(t)} |\phi_n(t)\rangle \langle\phi_n(0)| \tag{8}$$

它满足时间演化方程

$$i\hbar\frac{\partial \hat{U}}{\partial t} = \hat{H}\hat{U} \tag{9}$$

于是我们就可以得到 $\hat{H}$ 的表达式为

$$\begin{aligned}\hat{H}(t) &= i\hbar\frac{\partial \hat{U}}{\partial t}\hat{U}^\dagger \\ &= -\hbar\sum\frac{d\alpha_n}{dt}e^{i\alpha_n(t)}|\phi_n(t)\rangle\langle\phi_n(t)| + i\hbar\sum|\partial_t\phi_n(t)\rangle\langle\phi_n(t)|\end{aligned} \tag{10}$$

在 Lie 群理论中，$i\hbar\frac{\partial \hat{U}}{\partial t}\hat{U}^\dagger$ 称作 Maurer-Cartan 形式。所以从 Lie 群和微分几何的观点来看，体系的 Hamilton 量实际上就是 U(1) 群作用在量子态空间上后的 Maurer-Cartan 形式的群表示。

3 抽象理论观点下的 Lewis-Resenfeld 不变量

量子力学中的物理态空间其实并不是 Hilbert 空间，而是复射影空间 $\mathbb{H}/\mathbb{C}^\times$，其中 $\mathbb{H}$ 是 Hilbert 空间。特别地，对于有限维 Hilbert 空间 $\mathbb{C}^{n+1}$，其物理态空间是 $\mathbb{CP}^n = \mathbb{C}^{n+1}/\mathbb{C}^\times$。例如二能级系统的态空间是 $\mathbb{CP}^1$，它微分同胚于单位球面 S^1，即物理态和 S^1 上的点一一对应，因此我们可以用 S^1 对二能级系统进行可视化描述，这正是 Bloch 球。

然而，Schrodinger 方程和态矢量 $|\Psi\rangle$ 其实也并没有定义在复射影空间 $\mathbb{H}/\mathbb{C}^\times$ 上，而允许一个 $U(1)$ 相位的自由度。因此态矢量其实是定义在 $\mathbb{H}/\mathbb{R}^+$，这个 $\mathbb{R}^+$ 代表了概率的归一化。从几何上来看，$\mathbb{H}/\mathbb{R}^+$ 是 $\mathbb{H}/\mathbb{C}^\times$ 上的纤维丛，可以定义商映射 $h : \mathbb{H}/\mathbb{R}^+ \to \mathbb{H}/\mathbb{C}^\times$，则这个商映射可以给出 Hopf 纤维化: $\big(\mathbb{H}/\mathbb{R}^+\big)/\big(\mathbb{H}/\mathbb{C}^\times\big) \simeq U(1)$。例如二能级系统的物理态矢量 $|\Psi\rangle$ 定义在 $\mathbb{C}^2/\mathbb{R}^+$ 上，这个空间微分同胚于 S^3，它相对于态空间 S^2 有一个 Hopf 纤维化 $S^3/S^2 \simeq U(1)$。

态的演化实际上是 $\mathbb{H}/\mathbb{R}^+$ 上的一条曲线，其参数是时间 t，时间演化算子刻画了这条曲线的演化，即 $|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle$。Hamilton 量和时间演化算子的局部关系是 $\hat{U}(\delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\delta t} \sim 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\delta t$，即它们二者由指数映射相联系。我们知道在微分几何中，指数映射联系着切向量和测地线，因此 Hamilton 量和时间演化算子具有一定的几何意义。另外，Hamilton 量可以写成 $\hat{H} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(log\hat{U}) = i\hbar\frac{\partial \hat{U}}{\partial t}\hat{U}^\dagger$，即为 Maurer-Cartan 形式。

态矢量 $|\Psi(t)\rangle$ 可以做正交分解，这实际上是指点 $|\Psi(t)\rangle$ 处的切空间存在一个正交标架 $\{|e_n\rangle\}$，态矢量可以由这组正交标架分解。也就是说，态矢量既是流形上一个点，又是该点处切空间的一个向量，这与分析力学中的位型空间和广义坐标是相似的。Hamilton 量之所以能够表示为一个 Maurer-Cartan 形式，正是因为它所刻画的是活动标架的运动，这也正是 Maurer-Cartan 形式的几何意义——刻画曲线上临近两点处的活动标架之间的变换。

而所谓一个表象 Q，实际上是指 $|\Psi(t)\rangle$ 处切空间上的厄米算子 $\hat{Q}(t)$，其全体特征向量构成 $|\Psi\rangle$ 处切空间一个正交标架。如果 $\hat{Q}(t)$ 随时间 t 的变化而变化，那么每一时刻 t，$\hat{Q}(t)$ 都会给出一个正交标架，我们称之为一个活动标架。应当注意的是，t 时刻的正交标架，经过 Δt 的演化之后得到的正交标架，一般不同于 $\hat{Q}(t+\Delta t)$ 给出的正交标架，接下来我们将看到 Lewis-Resenfeld 不变量的意义。

根据陈垩的论文，真正核心的其实是一组基 (活动标架) 的演化，当我们知道某一组基的演化后，就可以构建时间演化算子，进而构建 Hamilton 量，其中 Hamilton 量与时间演化算子的关系由 Maurer-Cartan 形式来刻画。Lewis-Resenfeld 不变量在这个理论中起到脚手架的作用，即 Lewis-Resenfeld 不变量帮助我们找到了一组基的演化。当然，对于定态问题和绝热过程，我们是已知其一组基的演化的（Hamilton 量本征态演化为下一时刻的 Hamilton 量的本征态），所以这两种情形我们就不需要 Lewis-Resenfeld 不变量了。当然如果我们非要考虑 Lewis-Resenfeld 不变量，那么显然 Hamilton 量本身就是 Lewis-Resenfeld 不变量。

我们来进一步考察 Lewis-Resenfeld 不变量到底干了什么事。若 $|\phi_n(t)\rangle$ 是 $\hat{I}(t)$ 的本征态，即 $\hat{I}(t)|\phi_n(t)\rangle = \lambda_n|\phi_n(t)\rangle$，那么经过 Δt 的演化，有 $\hat{U}(t+\Delta t,t)|\phi_n(t)\rangle \propto |\phi_n(t+\Delta t)\rangle$。但是对于一般的一组基 $|\psi_n(t)\rangle$，它们的演化将是 $\hat{U}(t+\Delta t,t)|\psi_n(t)\rangle = \sum_m c_{mn}|\psi_m(t+\Delta t)\rangle$。也就是说，某一时刻 $\hat{I}(t)$ 所定义的基 (活动标架)，经过任意长时间的演化，是那个时刻 $\hat{I}(t+\Delta t)$ 所定义的基 (活动标架)；而对于一般的表象 Q，某一时刻 $Q(t)$ 所定义的基 (活动标架)，经过一段时间的演化，就不再是那个时刻下 $Q(t+\Delta t)$ 所定义的基 (活动标架) 了。