



中国科学院大学
物理科学学院

量子力学

作者
Hiloxiko

September 30, 2021

Contents

1	序	1
2	量子力学——现代物理学的基础	2
2.1	旧量子论发展历史	2
2.1.1	黑体辐射和能量量子化	3
2.1.2	固体比热的低温反常	5
2.1.3	光电效应和波粒二象性	6
2.1.4	Bohr 氢原子模型和角动量量子化	9
2.1.5	Stern-Gerlach 实验与自旋	11
2.2	量子力学的不同诠释	14
2.2.1	Copenhagen 诠释	15
2.2.2	隐变量诠释	15
2.3	量子力学的物理哲学	16
3	量子力学的数学结构	20
3.1	量子态	20
3.1.1	Dirac 符号与 Hilbert 空间	21
3.1.2	表象与观测	25
3.1.3	量子比特	28
3.1.4	纠缠态	29
3.2	算符	30
3.2.1	力学量的算符表示	31
3.2.2	算符理论	32
3.2.3	C^* -代数 (选)	48
3.3	量子力学公理系统	50
3.3.1	Schrödinger 猫态和退相干理论	50
3.3.2	测不准原理	50
3.3.3	Schrödinger 方程	51

4	量子动力学	53
4.1	Schrödinger 绘景	53
4.1.1	波函数	54
4.1.2	束缚态与散射态, 势阱	54
4.1.3	周期势场	54
4.1.4	中心势场	54
4.2	Heisenburg 绘景	54
4.2.1	传播子	54
4.2.2	路径积分	54
4.3	Dirac 绘景	54
4.4	电磁理论的量子力学	54
4.4.1	Zeeman 效应	54
4.4.2	Landau 能级	54
4.4.3	AB 效应	54
A	Tables	55

Chapter 1

序

这是基于我本人学习量子力学的书籍、笔记以及心得体会而总结出的量子力学笔记, 面向的对象是我自己, 和任何对量子力学感兴趣的读者, 如果已经学习过一遍初等量子力学的话可能会更好. 预备知识大概需要一些理论力学、电动力学和统计力学知识, 以及基本的线性代数知识.

在我本人学习量子力学的过程中, 一方面不断地被量子力学中神奇的物理现象和伟大的物理思想所惊艳, 但另一方面却也对不同教科书中的讲法感到疑惑. 因此, 我希望通过我自己的学习心得展现一条我认为更好的讲述方式, 旨在于更高的视角、更严谨的框架下展现量子力学的思维方式和深刻内容. 首先, 我认为旧量子论的经典-量子过渡必不可少, 其主要体现在 Planck 的光子统计、Einstein-Debye 的声子统计、Einstein 的光电效应、Bohr 氢原子模型以及 Stern-Gerlach 的自旋发现上, 因此将在第一章简要介绍这一部分, 并融入一些我个人的思考. 其次, 我认为量子力学的哲学思考同样是必要的, 虽然这总是被物理工作者所忽视 (很多物理工作者都秉持“闭嘴计算”的理念), 所以将在文中花费一些篇幅陈述一些我个人的物理哲学思考. 第三, 初等量子力学和高等量子力学之间需要一些自然的连接, 具体地, 这主要是少体系统和多体系统、封闭系统和开放系统、经典力学视角和场论视角之间的连接. 于是本篇笔记希望运用更深刻的数学和更偏凝聚态理论的思想呈现量子力学的内容. 最后, 本篇笔记参考了不少书籍和讲义, 全部图片来自网络, 在此鸣谢.

Chapter 2

量子力学——现代物理学的基础

2.1 旧量子论发展历史

量子力学是现代物理学的基本语言和思维模式. 一个物理工作是否蕴含量子力学的思想和方法, 是区分它是否现代的一项最重要的标准. 作为 20 世纪人类最杰出的成果之一, 它以一种完全非经典的新方式描绘了我们所处的这个世界, 给予了人们一个光怪陆离、但却足够大胆的世界图景, 并成功解释与预测了微观世界中那些以往人类不可知或不可描述的神奇现象. 同时, 它也强迫人们重新审视那些过去在经典物理学框架下所习以为常的事情. 也正是基于此, 20 世纪的物理学发展是蓬勃且富有历史价值的. 它重塑了人类的物理哲学观.

量子力学, 是研究原子尺度下的物理体系如何与经典尺度下物理体系之间的相互作用的科学. 论其发展历史而言, 内容和成果是足够丰富的. 本节将简单地梳理旧量子论发展历史上几个重大的节点和著名的发现, 从而在一开始建立起来一个较为自然的量子力学的视野, 以便在正文运用现代量子力学语言讲述量子力学时能够很好地去理解.

量子力学并不是凭空冒出的, 更不是理论物理学家的玩具模型. 它的诞生, 是因为物理学家需要一套全新的理论来解释经典物理学中无法解释的实验现象. 这些处于经典力学边界的现象分别是: 黑体辐射光谱曲线, 光电效应, 原子线状光谱, 原子核稳定性问题以及固体比热的低温反常. 正是这些经典力学已经无力解释的实验现象, 催生了量子力学的建立. 因此, 强行将量子力学与经典力学对立起来, 或认为经典力学已经落后了, 都是一种错误的观点. 经典力学与量子力学之前存在一个平缓的过度, 这一过度就是我们必须去了解的旧量子论. 我们从中可以看到, 一个世纪前的先驱们是如何在黑暗中摸索, 并建立起如此漂亮的一个理论的.

2.1.1 黑体辐射和能量量子化

关于物体热辐射的规律, 19 世纪的物理学家已经开始了研究. 经典物理的处理方法, 通常是用平衡态热力学的方法研究物体的热辐射场, 并得到了各向同性热辐射场的标准辐射能谱. 1859 年, G.Kirchhoff 建立了 Kirchhoff 定律, 它表明, 任何物体在同一温度下的辐射本领与吸收本领成正比, 且比例系数是一个与物质无关的普适函数, 大小正比于标准能谱函数.¹. 那么如何求得这样的标准能谱函数呢?

根据 Kirchhoff 定律, 物体的辐射本领 $r(\nu, T)$ 、吸收本领 $o(\nu, T)$ 和标准辐射能谱 $u(\nu, T)$ 之间的关系为:

$$\frac{r(\nu, T)}{o(\nu, T)} = \frac{c}{4} u(\nu, T). \quad (2.1)$$

我们考虑这样一个理想物体, 它的吸收本领 $o(\nu, T) = 1$, 也即它吸收任何照射在它上面的辐射. 这样的物体被称为绝对黑体. 那么, 只要通过实验测得绝对黑体的辐射能谱 $r(\nu, T)$, 我们就得到了标准辐射能谱 $u(\nu, T)$. 在实验上, 我们构造一个由吸收本领极高的材料制成的 (通常是特制的耐火材料)、开有极小小口的空腔谐振腔; 然后, 空腔谐振腔发出的辐射经由光栅分光, 用由吸收本领较高的材料制成的热电偶探测辐射谱, 见下图:

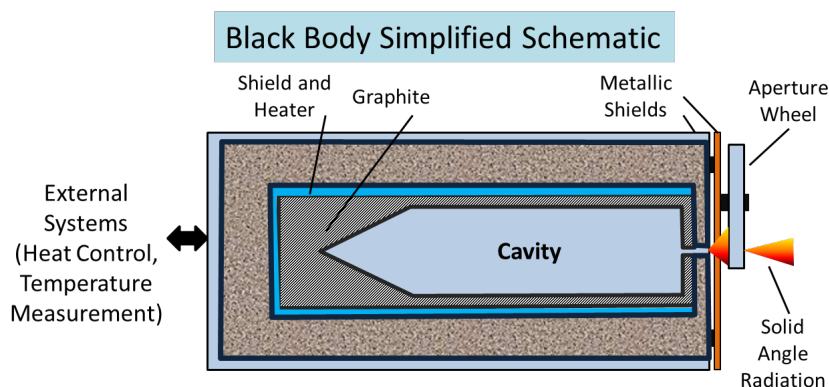


Figure 2.1: 黑体辐射实验装置

实验测得的黑体辐射谱如下图:

¹参考赵凯华. 量子物理

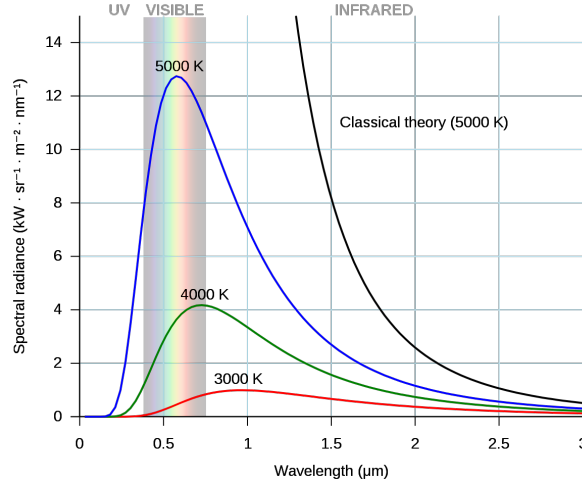


Figure 2.2: 黑体辐射谱

W.Wien 于 1896 年通过经典热力学分析, 给出了黑体辐射谱曲线的公式:

$$\varepsilon_\nu d\nu = C_1 \nu^3 \exp\left(-\frac{C_2 \nu}{T}\right) d\nu. \quad (2.2)$$

这一公式在紫外情况下拟合得很好, 但在红外情况下却并不尽如人意. 随后, J.W.Rayleigh 和 J.H.Jenns 于 1905 年通过电磁谐振腔模型建立了 Rayleigh-Jenns 公式:

$$\varepsilon_\nu d\nu = \frac{8\pi}{c^3} k_B T \nu^2 d\nu. \quad (2.3)$$

这一公式在红外情况下拟合得很好, 但在紫外情况下却发散, 这被称为“紫外灾难”. Planck 于 1900 年通过内插法拟合出了 Planck 公式²:

$$\varepsilon_\nu d\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1} d\nu. \quad (2.4)$$

这里, 常数 h 具有量纲 $[\mathbf{E}][\mathbf{T}]$. 这一公式在紫外情况下, 退化为 Wien 公式:

$$\nu \rightarrow \infty, \varepsilon_\nu d\nu \rightarrow \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right) d\nu,$$

而在红外情况下, 退化为 Rayleigh-Jenns 公式:

$$\nu \rightarrow 0, \varepsilon_\nu d\nu \sim \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{1 + \frac{h\nu}{k_B T} - 1} d\nu \rightarrow \frac{8\pi}{c^3} k_B T \nu^2 d\nu.$$

Planck 需要为他的公式找到物理含义. 在他于 1901 年发表的另一篇论文³中, 他做出了惊人的猜测, 以至于他自己都认为这只是一个猜测. 首先, 根据 Rayleigh-Jenns 的电磁谐振腔模型, 黑体中的能量密度可以写为位于 $(\nu, \nu + d\nu)$ 区间内电磁波驻波模式的个数乘以其平均能量密度的形式:

$$\varepsilon_\nu d\nu = N(\nu, \nu + d\nu) d\nu \overline{\varepsilon_\nu}. \quad (2.5)$$

²M. Planck. verh. D. phys. Ges. 2. 202(1900).

³M. Planck. Ann. der Physik. 4. 553(1901).

于是, 将 Planck 公式写成这样的形式:

$$\frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{k_B T}) - 1} d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu \frac{h\nu}{\exp(\frac{h\nu}{k_B T}) - 1}. \quad (2.6)$$

这样我们得到了平均能量密度 $\overline{\varepsilon}_\nu = \frac{h\nu}{\exp(\frac{h\nu}{k_B T}) - 1}$. Planck 按照统计物理的做法, 将平均能量密度写成配分函数的次阶函数:

$$\overline{\varepsilon}_\nu = \frac{h\nu}{\exp(\beta h\nu) - 1} = -\frac{d}{d\beta} \ln \left(1 - \exp(-\beta h\nu) \right)^{-1}. \quad (2.7)$$

这里 $\beta = \frac{1}{k_B T}$. 于是我们得到黑体内电磁谐振子的配分函数:

$$Z = \sum_n \exp(-\beta \varepsilon_n) = \frac{1}{1 - \exp(-\beta h\nu)} = \sum_n \exp(-\beta n h\nu). \quad (2.8)$$

因此, Planck 由此得出, 黑体内电磁波的能量分布应当是不连续的, 具有确定的能级 $\varepsilon_n = n h\nu$. 他称能量单位 $h\nu$ 为**量子 (quantum)**, $h = 6.62607015 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 为 Planck 常数. 这便是“量子”的首次现身. 事实上, 在二次量子化一节, 我们将给出一种完全基于量子理论的对黑体辐射谱的推导, 它实际上对应着光子气体的玻色分布.

2.1.2 固体比热的低温反常

19 世纪末对低温情形下 (0K 左右) 固体比热的实验测量发现, 一般固体的比热会在低温时呈现反常地显著下降趋势, 并在温度趋于 0K 时线性地减小到零. 这引起了物理学家的困惑. Einstein 于 1907 年, 再次运用 Planck 的量子化假设, 推导出了固体中的声子谱, 并给出了固体比热随温度的量子力学版本的关系, 它较好地符合实验的测量. 这一模型被称为 Einstein 模型.⁴

Einstein 将固体中的晶格振动量子化为格点谐振子的振动 (实际上是声子), 并假设它们遵从 Planck 分布, 得到平均能谱 (它和黑体能谱具有完全相同的形式, 实际上就是玻色分布)

$$\overline{E(n)} = \frac{\hbar \omega_n}{\exp(\frac{\hbar \omega_n}{k_B T}) - 1}. \quad (2.9)$$

考虑 N 个原子, 对应 $3N$ 个振动模式, 并进一步假设振动模式彼此独立, 拥有相同的频率 ω_E , 将能谱积分 (求和), 得到平均能量

$$\overline{E} = \sum_{n=1}^{3N} \overline{E(n)} \approx \frac{3N \hbar \omega_E}{\exp(\frac{\hbar \omega_n}{k_B T}) - 1}. \quad (2.10)$$

⁴Albert Einstein. Die Plancksche Theorie der Strahlung und die Theorie der spezifischen Wärme. Annalen der Physik. 4. 22(1907): 180–190, 800.

如果用态密度来写, Einstein 模型的能量态密度就是最简单的态密度 $D(\omega) = 3N\delta(\omega - \omega_E)$. 内能可以直接积分得到:

$$\bar{E} = \int d\omega 3N\delta(\omega - \omega_E) \frac{\hbar\omega}{\exp(\frac{\hbar\omega}{k_B T}) - 1} = \frac{3N\hbar\omega_E}{\exp(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}) - 1}. \quad (2.11)$$

继而得到比热

$$C_V = \frac{d\bar{E}}{dT} = \frac{3N\hbar\omega_E}{T} \frac{\frac{\hbar\omega_E}{k_B T} \exp(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T})}{(\exp(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}) - 1)^2} = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{BT}\right)^2 \frac{\exp(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T})}{(\exp(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T}) - 1)^2}. \quad (2.12)$$

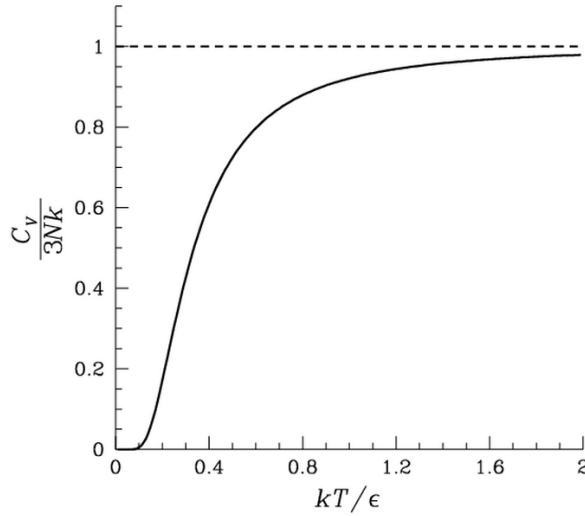


Figure 2.3: Einstein 模型 $C_V \sim T$ 图

但是, Einstein 模型并没有完美地描绘固体内部的声子行为. 他给出的曲线在低温时依旧与实验产生偏差. 事实上, 他描绘的只是光学声子 (其频率接近电磁波频率, 易于外光场耦合) 的比热贡献, 这一支声子在零温时有一能隙. 后来, Debye 于 1912 年给出了 Debye 模型,⁵ 描绘了无能隙的声学声子的比热贡献, 在低温下得到著名的 Debye T^3 律. 他的结果与实验拟合得很好.

对固体比热的量子力学研究, 促进了固体物理的精确研究之发展, 最终使得其于今日作为一个庞大的物理领域——凝聚态物理而存在.

2.1.3 光电效应和波粒二象性

1888 年 Hertz 为验证电磁波的存在, 做了著名的 Hertz 实验. 实验内容如下: 在变压器螺线管两端加一交变电源, 形成发射器, 在外部放置一金属线圈. 螺线管内因电磁感应产生的电磁波将在金属线圈间形成驻波, 通过用火花针在波节无火花的现象, 定出电磁波

⁵Debye, Peter. Zur Theorie der spezifischen Waerme. Annalen der Physik. 39 (4)(1912): 789–839

的波长. 不过, Hertz 发现, 若在一开始将接收器和发射器之间用不透明玻璃板挡住, 则电磁波波长变短, 火花亮度增加, 这表明电磁波的频率增高, 能量增大. 他用三棱镜分光后发现, 只有紫光才会明显造成这一现象. 这就是光电效应最早的发现.

下图给出了光电效应的标准实验电路图:

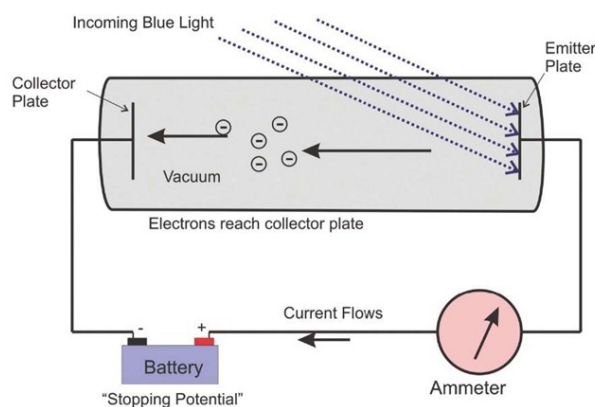


Figure 2.4: 光电效应实验电路图

将入射光打到材料表面, 激发出光电子, 形成光电流. 这些光电子将从光电管阴极出发, 在电场中加速, 在回路中形成稳定的回路光电流. 通过回路中的电流表, 可以测得光电流强度; 通过在光电管两极加反向截止电压, 可以测得光电子的最大初动能. 随着对光电效应实验的逐步研究, 物理学家总结出了一些规律.

Philipp Lénárd 于 1902 年发布了几个关于光电效应的重要实验结果.

1. 从阴极发射的光电子数量每单位时间与入射光的照度成正比;
2. 不同物质所发射出的光电子都有其特定的最大初动能 (由截止电压测得);
3. 光电子的最大初动能与入射光频率成正比, 与入射光照度无关.

下图为光电效应实验数据 I-U 图:

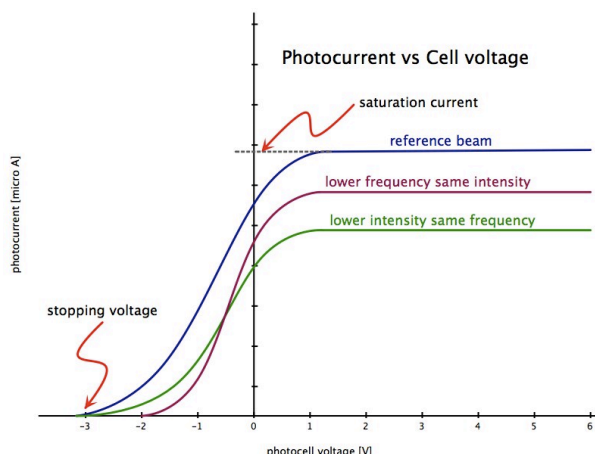


Figure 2.5: 光电效应 I-U 图

最后, Einstein 在 1905 年发表的论文中,⁶详细阐述了光电效应的机制. 他基于 Planck 的量子理论, 将电磁波量子化, 引入了**光量子 (Quanta)**的概念. Einstein 认为, 根据 Planck 的假设, 假如能量是量子化的, 那么我们可以认为照射在材料上的电磁波 (也就是光) 是由一个一个携带单位能量 $h\nu$ 的光子组成的. 单个入射光子的能量仅与光的频率有关, 并且将于材料表明下的电子相互作用, 被电子所吸收. 吸收光子的电子获得了能量被激发, 如果其能量高于需要从材料中逃逸所克服的逸出功, 那么该电子就会顺利地被激发出来, 作为光电子离开材料. 大量光子的连续照射, 将激发一个较为稳定的光电流, 最终达到饱和. 由此, 他提出著名的 Einstein 光电效应方程:

$$E_k(e)_{\max} = h\nu - W. \quad (2.13)$$

其中 $E_k(e)_{\max}$ 为逸出光电子的最大初动能, W 为材料特定的逸出功. 如果在实验上测得能够激发光电子的入射光的最低频率 ν_0 , 就测得了逸出功 $W = h\nu_0$. 这就解释了光电效应的实验结果. Einstein 的光电子假设, 于 1923 年由 Compton 散射实验所证实.

Einstein 的光电子模型启发了法国物理学家 de Broglie. 他认为, 如果电磁现象既可以用波 (电磁波) 来描述, 也可以用粒子 (光子) 来描述, 那么是否所有的物质都具有这种**波粒二象性 (Wave-particle Duality)**? 他于 1923 年在 Nature 发表的一篇 Letter 中,⁷首次提出了物质的波粒二象性概念, 并于随后提交的博士论文中详细阐述了这一理论. de Broglie 给出了物质粒子性和波动性之间的联系:

$$\mathbf{p} = \frac{h}{\lambda} = \hbar \mathbf{k}, \quad E = h\nu = \hbar \omega, \quad (2.14)$$

并根据 Einstein 的狭义相对论推导出了物质波的显式. 根据 de Broglie 的理论, 任何一个实物粒子都可以用一个物质波 $\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(i\mathbf{p} \cdot \frac{\mathbf{x}}{\hbar} - i\frac{Et}{\hbar})$ 描述. 我们称这一波为 de Broglie

⁶Albert Einstein. Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. 可见我的翻译: <https://zhuanlan.zhihu.com/p/136367190>

⁷de Broglie, L. Waves and Quanta. Nature 112, 540 (1923).

波. 这一假设, 将在后面的形式理论中被用到; 它最终被 C. J. Davisson 和 L. H. Germer 于 1927 年用电子衍射实验所证实.

2.1.4 Bohr 氢原子模型和角动量量子化

20 世纪初的原子物理面临两个严重挑战: 原子线状光谱和原子稳定性问题. 自 19 世纪中叶, 物理学家开始着手研究氢原子光谱的线状谱线问题. Balmer 于 1885 年给出了一个波长随谱线条数的经验公式:

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right), \quad (2.15)$$

这里 $R = 1.0973731569 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ 为 Rydberg 常数. 而后相继总结出了谱线的 Balmer 系和 Rydberg 系. 这一公式一直以来无法在物理上得到解释. 另一些问题, 如谱线亮度、谱线分裂问题, 也没有得到合理的解释. 另一方面, 我们知道, 根据 Rutherford 的原子模型, 大量电子围绕着原子核做近似的圆周运动. 但根据经典电动力学, 做变速运动的电子会在其周围感生出交变的电磁场, 继而在运动中向外辐射电磁波, 这将导致电子的能量损失, 最终显然电子会坠落到原子核上. 原子根本不可能稳定存在! 这两个原子层面的问题, 需要物理学家提出新的模型进行解释.

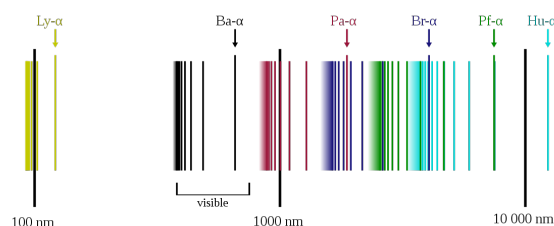


Figure 2.6: 氢原子光谱线系

Bohr 根据 Planck 能量量子化假设和 Balmer 光谱公式, 于 1913 年提出了 Bohr 氢原子轨道模型.⁸他做出了以下四个假设:

1. 定态假设: 原子的核外电子在轨道上运行时, 只能够稳定地存在于具有分立且固定的能量状态中, 这些状态称为定态, 也称为能级. 处于定态的原子能量是量子化的, 并且核外电子不向外辐射能量;
2. 跃迁假设: 原子的能量变化 (包括发射或吸收电磁辐射) 只能在两个定态之间以跃迁的方式进行, 核外电子会从一个能级跃迁到另一个能级, 并发射或吸收光子;
3. 角动量量子化假设: 原子的核外电子的角动量是量子化的

$$J = mvr = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar;$$

⁸N. Bohr. On the Constitution of Atoms and Molecules. Phil. Mag. 26. 1025(1913).

4. 对应假设：也即对应原理，即在经典极限下，能级变得无限稠密，最终能谱可以被视为是连续的。

根据这四条假设，Bohr 给出了氢原子能级公式：

$$E_n = -\frac{2\pi^2 e^4}{n^2 h^2}, \quad (2.16)$$

以及跃迁规则：

$$h\nu_{mn} = E_m - E_n. \quad (2.17)$$

Bohr 的能级公式合理地求出了 Rydberg 常数的表达式： $R = \frac{2\pi^2 e^4 m_e}{h^3 c}$ 。特别地，Bohr 的氢原子模型给出了另一条重要的假设：角动量量子化。这一条假设可以有两种不同的解读。一种解读是 de Broglie 的波动力学解读。利用非相对论下极限的 de Broglie 关系 $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$ ，我们可以将角动量量子化表达式改写成

$$n\lambda = 2\pi r. \quad (2.18)$$

这在物理上表明，如果我们将核外电子看成一个物质波，那么它将完整地绕“轨道”一周，也即：轨道的周长是波长整数倍时，在轨道上才能形成稳定的驻波，这对应于 Bohr 的定态假设。驻波条件在量子化中具有至关重要的地位，注意到在求解黑体辐射能谱时 Planck 就采纳了 Rayleigh-Jeans 的电磁谐振子（对应电磁驻波）的模型。另一种解读可以从经典力学的浸渐不变量导出量子力学 Sommerfeld 条件。在经典力学中，我们知道对一个浸渐过程在相空间拥有不变量

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint pdq. \quad (2.19)$$

我们考虑一个经典一维谐振子，它的相空间轨迹是一个椭圆 $\frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{2E/m\omega^2} = 1$ 。那么对于频率浸渐变化的谐振子，它的浸渐不变量为

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint dpdx = \frac{1}{2\pi} \pi \sqrt{2mE} \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} = \frac{E}{\omega}. \quad (2.20)$$

我们将谐振子的相空间轨道和电子的实空间轨道一一对应，⁹并将能量量子化为 $n\hbar\omega$ 。推广到更高维度，这样就有了 Sommerfeld 量子化条件¹⁰

$$\oint pdq = nh. \quad (2.21)$$

注意到，根据 Maupertuis 原理，左式对应于闭合轨道路径积分的作用量 \mathcal{S} ，因此，这一量子化条件实际上将经典力学的作用量和 Planck 常数之间建立了联系（注意到它们的量纲是一致的！）。事实上，在量子力学中，一个惯用的衡量系统是否具有明显量子效应的判别方法，就是去看系统的作用量和 Planck 常数（或约化 Planck 常数）的比值。如果 $\mathcal{S} \sim h$ ，那么该系统就应当运用量子力学的方法进行研究；而如果 $\mathcal{S} \gg h$ ，则该系统就可以当作一个经典系统。

⁹我们知道， r^{-1} 势和 r^2 势之间的轨道存在一个同构映射。

¹⁰Sommerfeld, Arnold (1919). *Atombau und Spektrallinien*. Braunschweig: Friedrich Vieweg und Sohn. ISBN 978-3-87144-484-5.

2.1.5 Stern-Gerlach 实验与自旋

事实上, Bohr 的轨道角动量量子化假设具有更深刻的意义. 角动量理论在量子力学中通常被单独拿来探讨, 是因为它最能够体现量子力学中那些非经典的效应. 通常, 按照 Bohr 的对应原理, 我们总是希望经典力学的现象能够和量子力学中的现象具有某种对应, 但在量子力学中, 自旋角动量完全是一个量子效应的结果, 它不具有实质的经典对应, 但却如同电荷、质量一样的属于粒子的内禀属性. 自旋角动量是一个不同于轨道角动量的量子化产物. 关于自旋的全面而细致的一般讨论, 将放在角动量理论一节中. 我们在这里仅仅将其作为旧量子论历史发展的一个重要节点进行简单介绍.

1921-1922 年, Stern-Gerlach 通过实验发现, 如果向真空中的非均匀磁场区域发射一束电中性的银原子 (它们被蒸发而出, 可当成银原子气体), 并用一个显示屏观察它们, 结果显示它们将发生偏转, 同时它们的分布并非连续的, 而是只呈现两点离散分布.¹¹¹²¹³

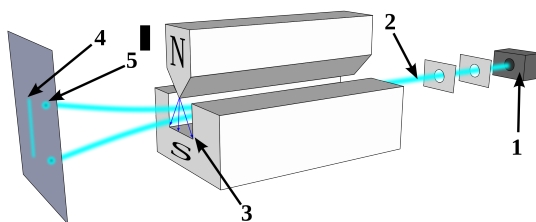


Figure 2.7: Stern-Gerlach 实验

银原子在非均匀磁场中发生偏转, 说明银原子具有一个磁矩 ($F_z = \frac{\partial}{\partial z}(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B})$). 那么这样的磁矩是哪里来的呢? Stern-Gerlach 将其在经典上对应于银原子核外电子的“**自旋 (Spin)**” (记为 \mathbf{S}) ——也即由于电子自旋产生的内禀磁矩, 或者电子的内禀角动量. 而偏转谱是两点离散的, 则表明这样的自旋只可能有 \uparrow 和 \downarrow (或 $+\hat{z}$ 和 $-\hat{z}$) 两个方向. 可是根据经典理论, 如果银原子可以理解为近理想气体, 自旋磁矩的取向应当是在空间连续随机的. 但通过简单的计算可以很清楚地得到, 在这样的假定下偏转谱也应当是连续的. 另一方面, 我们可以通过实验确定电子自旋大小为 $S = \frac{\hbar}{2} \approx 3.3 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, 而电子

¹¹Gerlach. W., Stern. O. (1922). "Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld". Zeitschrift für Physik. 9 (1): 349–352.

¹²Gerlach. W., Stern. O. (1922). "Das magnetische Moment des Silberatoms". Zeitschrift für Physik. 9 (1): 353–355.

¹³Gerlach. W., Stern. O. (1922). "Der experimentelle Nachweis des magnetischen Moments des Silberatoms". Zeitschrift für Physik. 8 (1): 110–111.

的半径约为 $r \approx 10^{-15}$ m, 静质量约为 $m_e \approx 9.1 \times 10^{-31}$ kg. 根据球体转动惯量公式可得电子按照经典意义自旋的角动量大小为

$$S = \frac{2}{5}m_e r^2 \omega.$$

于是反解出“电子边缘”自旋线速度:

$$\omega r = \frac{\hbar}{2} \frac{5}{2m_e r^2} \approx 9.1 \times 10^{17} \text{ m}.$$

这个结果远远超过了光速! 如果电子真的具有经典意义上的自旋, 那么这将破坏相对论性原理. 这说明, 自旋纯粹是一个量子效应, 它只能在空间中呈现离散分布; 而且可以进一步猜测, 它应当是一个相对论性的量子效应.

事实上, 我们完全可以从经典的电动力学出发, 去考察光场的自旋. 我们会发现, 经典光波的左旋-右旋的量子图像实际上就是光子的自旋向上-自旋向下! 对于任意一个椭圆偏振光, 我们都可用如下形式的电磁场来描述它:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{x}, t) &= E_0(\boldsymbol{\epsilon}_1 \pm i\boldsymbol{\epsilon}_2) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t), \\ \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) &= \sqrt{\mu_0 \epsilon_0} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E}. \end{aligned}$$

由此可以进一步定义一组正交归一基:

$$\boldsymbol{\epsilon}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{\epsilon}_1 \pm i\boldsymbol{\epsilon}_2), \quad (2.22)$$

其中 $\boldsymbol{\epsilon}_+$ 表示左旋, 而 $\boldsymbol{\epsilon}_-$ 表示右旋, $\langle \boldsymbol{\epsilon}_{\pm} \rangle$ 张成了全体旋光空间 \mathfrak{E} . 旋光空间 \mathfrak{E} 中的任意一个矢量乘以标准时谐的电磁场, 就得到了一个左旋与右旋叠加的任意椭圆偏振光:

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}, t) = (E_+ \boldsymbol{\epsilon}_+ + E_- \boldsymbol{\epsilon}_-) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t), \quad \mathbf{B}(\mathbf{x}, t) = \sqrt{\mu_0 \epsilon_0} \hat{\mathbf{k}} \times \mathbf{E}. \quad (2.23)$$

现考虑真空中一个局域的电磁场携带的角动量流密度, 该电磁场由任意一个旋光产生. 根据电动力学的基本知识, 角动量流密度写为:

$$\mathbf{J} = \mathbf{x} \times \mathbf{S} = \epsilon_0 \mu_0 \mathbf{x} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) = \epsilon_0 \mathbf{x} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B}). \quad (2.24)$$

将磁场改写成矢势形式, 在给定任意规范下, 我们有

$$\mathbf{J} = \epsilon_0 \mathbf{x} \times (\mathbf{e} \times (\nabla \times \mathbf{A})) = \epsilon_0 \mathbf{x} \times (\nabla(\mathbf{E} \cdot \mathbf{A})) - \epsilon_0 \mathbf{x} \times ((\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{A}). \quad (2.25)$$

用张量分量形式写开（注意 ∇ 的微分只作用在矢势上）：

$$\begin{aligned}
\mathbf{x} \times (\nabla(\mathbf{E} \cdot \mathbf{A})) &= x_i (\nabla(\mathbf{E} \cdot \mathbf{A}))_j \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k \\
&= x_i \left(\frac{\partial}{\partial x_l} (E_m A^m) \right)_j \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k \\
&= x_i E_m \frac{\partial A^m}{\partial x_j} \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k \\
&= E_m \left(x_i \frac{\partial}{\partial x_j} \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k \right) A^m \\
&= E_m (\mathbf{x} \times \nabla) A^m \\
&= \mathbf{E} : (\mathbf{x} \times \nabla) : \mathbf{A},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{x} \times ((\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{A}) &= x_i ((\mathbf{E} \cdot \nabla) \mathbf{A})_j \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k \\
&= x_i \left(E^m \frac{\partial}{\partial x_m} A_l \right)_j \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k \\
&= x_i E^m \frac{\partial A_j}{\partial x_m} \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k \\
&= \frac{\partial}{\partial x_m} (x_i E^m A_j) \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k - \frac{\partial x_i}{\partial x_m} E^m A_j \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k \\
&= \frac{\partial}{\partial x_m} (E^m (x_i A_j \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k)) - \delta_m^i E^m A_j \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k \\
&= \frac{\partial}{\partial x_m} (E^m (\mathbf{x} \times \mathbf{A})) - \mathbf{E} \times \mathbf{A} \\
&= \nabla \cdot (\mathbf{E}(\mathbf{x} \times \mathbf{A})) - \mathbf{E} \times \mathbf{A}.
\end{aligned}$$

从而，我们得到了角动量流密度的显式：

$$\mathbf{J} = \epsilon_0 (\mathbf{E} : (\mathbf{x} \times \nabla) : \mathbf{A} - \nabla \cdot (\mathbf{E}(\mathbf{x} \times \mathbf{A})) + \mathbf{E} \times \mathbf{A}). \quad (2.26)$$

然后将其在全空间积分，由局域性易知第二项会被积掉，而剩下的两项具有明显的不同：第一项跟坐标原点选择有关，而第二项则完全是电磁场内禀的物理量（电场叉乘矢势）。显然，由物理意义我们就明确了：如果我们按照 Einstein 的光量子假设，将电磁波看成大量光子的集体运动，那么第一项应当是光子的“轨道角动量”，而第二项就对应着光子的“自旋角动量”。

我们现在将按照偏振模式展开的电磁场形式带入上式的积分形式，并注意到若选取规范消掉标势，则 $\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = i\omega \mathbf{A} = \omega \mathbf{A}^\perp$ ，同时定义旋光基矢之间的叉乘规则

$$\boldsymbol{\epsilon}_+ \times \frac{1}{i} \boldsymbol{\epsilon}_+ = 2\boldsymbol{\epsilon}_z, \quad \boldsymbol{\epsilon}_- \times \frac{1}{i} \boldsymbol{\epsilon}_- = -2\boldsymbol{\epsilon}_z,$$

就得到：

$$\begin{aligned}
\mathbf{S} &= \text{Re} \int \mathbf{J}_S d^3\mathbf{x} \\
&= \epsilon_0 \text{Re} \int \mathbf{E} \times \mathbf{A} d^3\mathbf{x} \\
&= \epsilon_0 \text{Re} \int [(E_+ \boldsymbol{\epsilon}_+ + E_- \boldsymbol{\epsilon}_-) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t)] \times \frac{1}{i\omega} [(E_+ \boldsymbol{\epsilon}_+ + E_- \boldsymbol{\epsilon}_-) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t)] d^3\mathbf{x} \\
&= \frac{\epsilon_0}{\omega} \text{Re} \int (E_+ \boldsymbol{\epsilon}_+ + E_- \boldsymbol{\epsilon}_-) \times (E_+ (-\boldsymbol{\epsilon}_+^\perp + E_- (-\boldsymbol{\epsilon}_-^\perp)) \cos^2(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - i\omega t) d^3\mathbf{x} \\
&= 2 \frac{\epsilon_0}{\omega} \boldsymbol{\epsilon}_z \int (E_+^2 - E_-^2) \cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t) d^3\mathbf{x}.
\end{aligned}$$

自旋角动量的时空平均为：

$$\bar{\mathbf{S}} = 2 \frac{\epsilon_0}{\omega} \boldsymbol{\epsilon}_z \int (E_+^2 - E_-^2) \overline{\cos^2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)} d^3\mathbf{x} = 2 \frac{\epsilon_0}{\omega} \boldsymbol{\epsilon}_z \int \frac{1}{2} (E_+^2 - E_-^2) d^3\mathbf{x} = \frac{u_+ - u_-}{\omega} \boldsymbol{\epsilon}_z. \quad (2.27)$$

其中

$$\begin{aligned}
u_+ &= \frac{1}{2} \int \epsilon_0 E_+^2 + \mu_o^{-1} B_+^2 d^3\mathbf{x} = \int \epsilon_0 E_+^2 d^3\mathbf{x} \\
u_- &= \frac{1}{2} \int \epsilon_0 E_-^2 + \mu_o^{-1} B_-^2 d^3\mathbf{x} = \int \epsilon_0 E_-^2 d^3\mathbf{x} \\
u &= u_+ + u_-.
\end{aligned}$$

为电磁场左旋能量密度、右旋能量密度和总能量密度。

另一方面，注意到我们是将局域光场做旋光展开，秉持 Einstein 的光量子化精神，将光场视作大量全同光子的集体振动，每个光子的能量均为 $\hbar\omega$ （注意此时并不是电磁谐振腔模型！），那么电磁场能量密度就直接是 $u = \hbar\omega$ ，于是我们就完成了自旋从经典向量量的过渡：

$$\bar{\mathbf{S}} = \frac{E_+^2}{E_+^2 + E_-^2} \hbar \boldsymbol{\epsilon}_z - \frac{E_-^2}{E_+^2 + E_-^2} \hbar \boldsymbol{\epsilon}_z. \quad (2.28)$$

其中， $+\hbar$ 代表自旋向上，其对应的本征态一般记为 $|\uparrow\rangle$ ，而 $-\hbar$ 代表自旋向下，其对应的本征态一般记为 $|\downarrow\rangle$ 。这一结论，和 Stern-Gerlach 实验的结果是一致的。

2.2 量子力学的不同诠释

随着 Schrödinger 建立起 Schrödinger 方程及其对应的波动方程，以及 Dirac 等人架构出的矩阵力学，量子力学的雏形初步诞生。但是，不同的物理学家对它的物理哲学意义上的诠释却并不相同。其中最具代表性的两派就是以 Bohr 为首的 Copenhagen 学派的 Copenhagen 诠释，和以 Einstein 为首的隐变量诠释。

2.2.1 Copenhagen 诠释

Copenhagen 诠释是一个量子态本体论、观测者主体论的诠释。以 Bohr 为首的 Copenhagen 学派认为,世界在未被观测之前是无法被定义的——我们在数学上只能用一个抽象的量子态来描述它。只有观测主体做出了观测,量子态坍缩到某一个本征态上,我们才真正获得了世界的状态——这一状态是观测之后的结果,是受观测主体影响的。与其说世界的原本状态被打破,不如说根本就不存在这样一个原本状态——世界的状态是被观测主体建构出的。身为观测者的我们,仅能以这种方式获得世界的信息。那么我们观测得到的是什么呢?就是波函数(的模平方)。换言之,在 Copenhagen 诠释下,观测者主体对量子态本体观测到的结果是所谓的波函数,而波函数本身是没有物理实体对应的。

Copenhagen 诠释主要遵循以下几条原则: Born 的概率诠释、Bohr 的对应原理、Heisenberg 的测不准原理以及波函数坍缩。其中,最令人费解的莫过于最后一条。根据 Copenhagen 诠释,经典观测者对系统的观测会导致系统波函数发生坍缩,而坍缩这一过程本身无法进一步被解释。这条原则同时也是 Copenhagen 学派最受学界攻讦的一条。在本篇笔记中,我们将秉持不违背 Copenhagen 基本诠释的精神。

2.2.2 隐变量诠释

Einstein 所谓的隐变量诠释认为,在 Copenhagen 诠释下的量子力学并不完备。世界上的所有物理实在都是客观存在的,无论是否被观测者施加观测这一操作。量子力学之所以会出现波函数坍缩和不确定性原理,是因为它无法解释一些隐藏的客观变量。隐变量诠释分为局域隐变量和非局域隐变量,我们在此只给出局域隐变量的相关内容。

按照 Born 的概率诠释,我们观测到的量子体系的波函数 ψ 是一个概率密度 ρ 。局域隐变量理论指出,假设有两个电子通过自旋-自旋相互作用联系在一起构成一个双电子系统,现在不破坏空间旋转对称性的情况下绝热地将二者彼此远离,直至二者可以各自视为独立体系,那么当我们测得一个电子的自旋时,根据角动量守恒,我们应当可以预言另一个电子在任何一个方向上自旋的大小,而这是从一开始就决定好了的,这就是局域隐变量的实在性要求,也即局域实在论。但是,显然根据 Heisenberg 的测不准原理,我们必然不能同时精确测得另一个电子在每个方向上的自旋值,于是就违反了局域的完备性要求,同时我们会发现测量第一个电子的自旋会超距地影响另一个电子的测量。换言之,根据隐变量理论,如果我们承认物理系统的局域性,我们就否定了量子力学的完备性;而如果我们承认量子力学的完备性,我们就否定了物理系统的局域性。这就是著名的 **EPR 佯谬 (Einstein-Podolsky-Rosen Paradox)**。¹⁴

Bell 通过引入 **Bell 不等式 (Bell's Inequality)**

$$p_{ab} \leq p_{ac} + p_{bc}. \quad (2.29)$$

¹⁴A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen. 1935 May. Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?

使得局域隐变量理论具有了实验上的可证伪性. 但是我们只是简单地给出 Bell 不等式, 转而去证明一个比它条件更弱的不等式 (这一不等式取消了 Bell 不等式自旋角动量合为零的假定) .

我们设存在一个隐变量为 ξ , 它决定了系统的实在性. 假设我们测得两个粒子, 在 \hat{a} 方向上测得 A 粒子自旋值为 $s_A(\hat{a}, \xi)$, B 粒子自旋值为 $s_B(\hat{a}, \xi)$; 在 \hat{b} 方向上测得 A 粒子自旋值为 $s_A(\hat{b}, \xi)$, B 粒子自旋值为 $s_B(\hat{b}, \xi)$; 在 \hat{c} 方向上测得 A 粒子自旋值为 $s_A(\hat{c}, \xi)$, B 粒子自旋值为 $s_B(\hat{c}, \xi)$; 在 \hat{d} 方向上测得 A 粒子自旋值为 $s_A(\hat{d}, \xi)$, B 粒子自旋值为 $s_B(\hat{d}, \xi)$. 则我们得到同时测得 $s_A(\hat{a}, \xi)$ 和 $s_B(\hat{b}, \xi)$ 的概率为

$$p_{ab} = \sum_{\xi} s_A(\hat{a}, \xi) s_B(\hat{b}, \xi) \rho(\xi). \quad (2.30)$$

同理, 可以得到另外三个组合的概率为

$$\begin{aligned} p_{db} &= \sum_{\xi} s_A(\hat{d}, \xi) s_B(\hat{b}, \xi) \rho(\xi), \\ p_{ac} &= \sum_{\xi} s_A(\hat{a}, \xi) s_B(\hat{c}, \xi) \rho(\xi), \\ p_{dc} &= \sum_{\xi} s_A(\hat{d}, \xi) s_B(\hat{c}, \xi) \rho(\xi). \end{aligned}$$

注意到自旋的测量值只能取到 ± 1 , 由此我们得到,

$$\begin{aligned} p_{ab} + p_{ac} + p_{bd} - p_{dc} &= \sum_{\xi} [s_A(\hat{a}, \xi) s_B(\hat{b}, \xi) + s_A(\hat{a}, \xi) s_B(\hat{c}, \xi) \\ &\quad + s_A(\hat{d}, \xi) s_B(\hat{b}, \xi) - s_A(\hat{d}, \xi) s_B(\hat{c}, \xi)] \rho(\xi) \\ &= \sum_{\xi} [s_A(\hat{a}, \xi) (s_B(\hat{b}, \xi) + s_B(\hat{c}, \xi)) + s_A(\hat{d}, \xi) (s_B(\hat{b}, \xi) - s_B(\hat{c}, \xi))] \rho(\xi) \\ &\leq \sum_{\xi} 2\rho(\xi) = 2. \end{aligned}$$

这就是著名的 **CHSH 不等式 (CHSH Inequality)**, 它的条件比 Bell 不等式要弱, 因此我们完全可以用它当作判断一个理论是否符合局域隐变量理论的标准.

2.3 量子力学的物理哲学

量子力学, 在物理哲学的意义下, 在我看来向人类抛出了四个重要的问题. 这些问题至今没有答案, 因此我们对于量子力学本质的认知还是非常模糊而幼稚的. 要想回答这些问题, 一方面需要物理学家在理论和实验两个领域做出更多的有价值的工作, 一方面也需要物理学家站在哲学的高度上来扬弃过往人类本身思考问题的方式. 可以说, 量子力学的建立, 深刻地证实了这样一个论断: 物理学是人与自然界相互作用产生的一门学科. 人作为自然界本身孕育的产物, 试图通过物理学来描述并改造自然界. 在这里, 不存在一个

完全的客观客体,也不存在所谓的上帝视角.一切都在无时无刻地发生变化.人类对自然界每一次的观测,都在不断改变着自然界的运行轨迹.虽然这种影响在宏观经典尺度上看足够的小,但在量子尺度上却是相当大的扰动.

第一个重要的诘问就是:什么是客观?在过去,从 Newton 时代建立起来的一整套物理学方法,都默认了一个具有强决定性意味的客观客体的存在,它相对于自然界独立地进行观测,然后告知我们自然界运作的规律.人们当然不会认为,这个能够独立地、与自然界毫不相干地进行观测的客观客体,其实就是他们所抽象出的一个不存在的自我,其本身就是一个主体的抽象形式.而量子力学的测不准原理告诉我们:我们所抽象出的客观存在,越是以(它所认为的)足够客观的手段去观测自然界,它就越发地变得主观.似乎在这里,主体-客体、主观-客观的分界变得模糊了.这是量子力学使人们困惑的一个重要原因.

第二个诘问是:物理是否是决定性的,又是否是随机性的?进而,什么又是随机性?我们知道,在量子力学的框架下,物理事件或是物理客体是具有内禀的随机性的.因此,概率论是量子力学的一种自然的数学语言.需要警惕的是,量子力学意义下的随机性并不同于统计学意义下的随机性.在那里,客观事件每一次发生的状态都是确定的,只是因为大量事件的存在导致我们必须要用概率统计的手段来研究它们的整体性质.但在量子力学中,只有定态是保持恒定的状态,其余的任何一个事件的发生,都不是确定的.我们甚至无法预测单一事件的状态.这就是 Shrödinger 的猫带来的某种诘难.因此,量子力学意义下的随机性是物理内禀的随机性.但事实上,如果我们再进一步去思考,这种随机性的根本来源是,只要人类要观测一个事件并企图获得来自这个事件的一些信息,那么人类的行为就干扰乃至破坏了原先事件的状态,从而所谓的一个“确定性的”或“本原的”物理状态根本无从谈起.这样看来,我们必须重新审视我们口中的“随机性”——随机性也并非这个世界所固有的某种客观属性,而是人类作为世界的一部分企图精确观测自身以外的世界所不得已而描绘的图景的自然属性.我们要求用一个波函数来刻画量子物体的状态,是因为除此之外,我们没有别的手段去刻画它了.在施加观测这一操作之前,世界的状态在我们眼中就是完全随机的——只有这样我们才能够去继续描述我们观测得到的那部分信息.

第三个诘问是:我们的世界是否是连续的?过往的物理学所描绘的世界,在宏观尺度上保证了物理学家运用古典或现代数学分析进行研究的可能性.广义相对论所统一的时空理论,其数学基础是带有 Lorentz 度规的 \mathbb{R}^4 光滑流形上的分析理论,其协变性由 Poincaré 群给出.但量子力学指出,在足够小的尺度下(Planck 尺度下),我们的世界变得不再连续了.物理学家不能再去轻松地运用建立在光滑流形上的微积分理论来处理量子世界的物理现象了.于是,在足够小的尺度下,失去了光滑四维时空背景的物理学,又该如何定义空间和时间?(量子引力)这也是物理学家需要思考的问题.

第四个诘问是:假使我们掌握了万物最基本的定律,能够完全地描述每一个粒子的性质和行为,我们真的有能力基于此重构整个宇宙吗?这个诘问在量子力学诞生之初并没有

被人们所重视, 因为那时的量子力学还没有彻底地改变人们对世界的认知. 但是, 人们早在经典力学中就已经知道, 完全可解的问题仅仅是单体和二体问题, 对于三体及以上的多体问题, 会带来混沌效应, 这是运用经典力学完全无能为力去解决的. 在量子力学中, 事情变得更加复杂. 首先, 单体的 Schrödinger 方程的求解就远比 Newton 方程要困难得多, 那么, 联立 10^{23} 那么多个 Schrödinger 方程并取求解它显然是天方夜谭; 其次, 量子力学允许多体系统之间存在非局域的纠缠现象, 这使得以往单纯运用局域场论来处理多体系统的经典方式变得困难重重; 第三, 在强关联量子系统中, 粒子与粒子之间的相互作用异常之强, 使得它们呈现一种集体的输运行为, 改变任何一个粒子的量子态都会剧烈地扰动整体的量子态, 这也使得曾经物理学家再熟悉不过的微扰论的处理方法失效, 我们需要建立一套非微扰的手段来研究这些体系 (高温超导的机制正与此相关). 综上, 在量子力学的框架下, 一旦涉及到大量粒子共存的体系, 纵然我们能够解释每一个粒子的量子性质和行为, 我们也无法解释它们的集体行为. 因此, 过往还原论的物理哲学观被打破了, 取而代之的是一套崭新的、从属于凝聚态物理学的观念——层展论 (或涌现论, 衍生论). P.W.Anderson 于 1972 年在 Science 上独立发表的文章 More is Different 就是基于这一精神奠定了整个凝聚态物理学物理哲学基础. 在这里, 我试图将 Anderson 的著名论断上升为一个原理, 虽然它并不能提供更多有效的信息, 但却深刻地改变了以往的旧物理观.

原理 1 (层展论原理.Anderson). 将万物还原为简单基本定律的能力, 并不蕴含从这些定律出发重建整个宇宙的能力.

但是, 如何彻底地解释“涌现”, 并采用更为先进的手段处理复杂的量子多体体系, 是凝聚态物理学家试图去理解的.

这四个诘问, 是量子力学对人类朴素的物理观做出的挑战. 但是, 人们依旧有不少方法去尝试解释、应对这些诘问. 一个最为基本的观点就是, 经典力学是量子力学的某种极限——这一观点肯定没有错误, 因为如果我们相信量子力学能够解释目前人类所不能理解的底层的物理, 那么我们能够合法地观测到的经典世界同样也是量子力学的产物. 而它又是和微观量子现象大不相同的、我们非常熟悉的宏观经典现象, 于是我们就能够基于这个观点去从经典规律出发来做量子化, 并且始终拥有一条限制条件: 在某些极限下, 我们得到的量子理论应该自然地退化为我们所熟知的它的经典对应. 这就是 Bohr 的对应原理, 也是我认为量子力学中最为朴素、基础且有用的一条原理. 它的具体表述如下:

原理 2 (对应原理.Bohr). 在微观范畴内的现象与宏观范围内的现象可以各自遵循本范围内的规律, 但当把微观范畴内的规律延伸到经典范畴时, 则它所得到的数值结果应该与经典规律所得到的相一致.

例如, 在尺度足够大的情况下, 或是在粒子数足够多的情况下, 我们相信我们得到的量子

理论一定和经典理论相差无几. 在数学上, 这通常体现为取量子理论中约化 Planck 常数 $\hbar \rightarrow 0$ 或是量子数 $n \rightarrow \infty$ 的极限.

虽然, 目前学界主要的倾向依旧是 “Shut up and calculate!” , 我却认为有必要谈一谈量子力学背后的物理哲学. 不论这些诠释和解读是否真的正确, 我们仍然可以从对其抽象的分析中进一步加深对量子力学的理解. 囿于我才识尚浅, 读者大可略过这一节, 或看个笑话作罢.

Chapter 3

量子力学的数学结构

现代量子力学是一个公理化的学科. 本节将以一个数学物理的视角给出量子力学背后的数学结构, 并导出现代量子力学的公理体系. 我不希望用完全抽象数学的方式, 以定义-定理-证明的思路来给出其数学结构; 而是站在物理的一边, 指明量子力学要求怎样的一个数学结构. 本节将从 Dirac 符号和 Hilbert 空间出发, 介绍表象理论、观测理论和算符理论, 不拘泥于单体系统、而希望在一开始就将多体系统的处理思想融入其中, 最终总结出量子力学的公理体系. 本节还增加了选读内容, 即较为抽象的 C^* -代数理论和复射影空间 $\mathbb{C}P^\infty$, 或许可以让我们对量子力学的数学有更深入的了解.

3.1 量子态

在量子力学中, 我们需要做的第一个基本思想观念上的转变就是, 我们不再将单个物体本身 (即它在我们观测下所呈现的那些熟知的唯象的几何形体或是物理图像) 视为基本的研究对象, 而将物体所处的不同的状态视为基本的研究对象. 例如, 在经典物理中, 如果我们考虑一个电子, 并用 A 标记它. 那么 $A = \{m_e, -e, p, q, \dots\}$ 可能就是我们所研究的对象. 我们用时间来参数化 A , 继而研究它的动力学和动理学. 在不同的时刻下, A 可能处于不同的状态, 但我们认为这些状态是附属在“电子”这一物理实体上的, 并且不具有更为基本性的物理含义. 但在量子力学中, 我们认为是 A 的全部可能状态构成了 A 本身. 如果还有另一个粒子, 它和 A 的状态完全相同, 则在物理上我们就认为它们是同一个粒子. 换言之, 我们可以想象, 在量子力学中, 世界是一系列被填充或未被填充的态的集合, 而那些被填充的态被我们所观测后得到的才是我们所认为的物理实体. 这一点基本思想观念的转变极为重要, 它象征着一种量子力学的思维方式.

那么, 这里就涉及三个问题. 第一, 是那些态, 我们称之为**量子态 (Quantum States)**, 它们到底该如何表示, 又该如何衡量它们的大小? 第二, 是观测本身, 作为观测者的我们又该如何描述这一过程? 第三, 同一个量子态, 在未被观测时和被观测后的表示之间存在怎样的差异和联系? 这三个问题, 其实就蕴含着量子力学背后的数学结构.

3.1.1 Dirac 符号与 Hilbert 空间

我们采用现代量子物理的表示方法, 也即 **Dirac 符号 (Dirac Notation)** 来表示这些量子态. 我们约定, 用 $|\alpha\rangle$ 或 $\langle\alpha|$ 来表示一个量子态. 其中, $|\alpha\rangle$ 被称为**右矢 (Ket)**, 而 $\langle\alpha|$ 被称为**左矢 (Bra)**. 通常, $|\cdot\rangle$ 和 $\langle\cdot|$ 中间的内容可以是各种符号, 只要它能够反映该量子态所表征的物理对象的一些本征特性. 我们将全体右矢的集合记为 \mathcal{H} , 而将全体左矢的集合记为 \mathcal{H}^\dagger . 我们先不去理会这些抽象符号的严格数学定义, 转而先考察这样一个简单的例子.

根据 Stern-Gerlach 实验, 我们知道, 在量子力学中粒子拥有一个内禀角动量, 称为自旋. 一个直观的构造是, 考虑一个自由光子 γ , 它的自旋只有两种状态, 向上或向下. 取右矢记号, 分别记为 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$. 那么, γ 的所有状态应当就是这两个“本征状态”的线性组合. 对于自由光子, 它处于 $|\uparrow\rangle$ 或 $|\downarrow\rangle$ 的概率应当相等, 于是自然, 自由光子所处的状态被写成

$$|\gamma\rangle = c|\uparrow\rangle + c|\downarrow\rangle.$$

在这里, $c \in \mathbb{R} \subset \mathbb{C}$ 似乎是自然的.

不过, 从上面的分析或许也能够看出, 首先, 系数 c 具有概率意义. 而它最简单的数学形式就应当是一个标量, 它通过某种“乘法运算”作用在量子态上. 我们认为 $f(c) \propto p$ 给出了它用乘法作用的对应量子态被观测到的概率, 其中 $f(c)$ 的形式还未定. 其次, 它也可以视为将裸态 $|\gamma\rangle$ 在自旋表象下的自然本征分解后得到的标量系数. 我们先不去理会什么是裸态, 什么又是表象, 根据线性代数的基础, 上述操作就像是将一个矢量在某个给定线性空间的基下的表示. 因为我们知道, $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 显然是两个完全无关的状态. 最后, 任取 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}$ 和任意标量 c_1, c_2 , 显然 $c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle \in \mathcal{H}$ 也应该是一个量子态. 继而, 我们有理由相信, 所谓的 \mathcal{H} 或 \mathcal{H}^\dagger 应该是某个域 \mathbb{F} 上的**向量空间 (Vector Space)**.

这一向量空间应当满足如下性质, 从而能够合理地表示我们的物理实在. 第一, 它应当具有一个良好而简单的测度 μ , 于是要求基域 \mathbb{F} 应当是特征 0 的: $\text{Char } \mathbb{F} = 0$, 从而 \mathcal{H} 上就具备了类欧的分析理论. 这样要求在物理上是自然的, 因为我们总希望我们处理的向量空间和 Euclid 空间具有类似的性质. 我们知道, 最大的特征零代数闭域就是复数域 \mathbb{C} , 我们在这里先暂且认可, $\mathbb{F} = \mathbb{C}$, 之后将给出一种更具说服力的论证. 同时, (\mathcal{H}, μ) 应当是完备的, 这样它才能够容纳物理上所有可能的态. 第二, 它应当配有简单的内积结构, 从而我们可以衡量量子态的“大小”. 因为, 在物理上我们可观测的量不应当是量子态本身 (它作为 \mathcal{H} 上的一个向量, 不应当是一个直接可观测测量). 可观测量都是一些标量. 因此我们需要类似这样一个映射 $\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathcal{H}^\dagger \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$. 我们设 \mathcal{H} 配有内积结构 $\langle \cdot | \cdot \rangle$, 根据 Riesz 引理 (不加证明), 若我们规定所谓的左矢空间就是右矢空间的**对偶空间 (Dual Space)**. 则对偶空间中的左矢构成一个函数 (泛函), 作用在右矢上同构地给出了内积结构. 而在 \mathbb{C} 上, 我们知道向量空间的对偶操作 \dagger 就是对向量做转置共轭, 它对应于向

量空间上的一个 Hermitian 型, 也即:

$$\dagger : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^\dagger, |\alpha\rangle \mapsto \langle\alpha| = |\alpha\rangle^\dagger = \overline{|\alpha\rangle}^T; \quad (3.1)$$

同时, 还有对算符的作用

$$\dagger : \mathfrak{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathfrak{L}(\mathcal{H}^\dagger), \mathcal{A} \mapsto \mathcal{A}^\dagger = \mathcal{A}^{*T}. \quad (3.2)$$

综上, \mathcal{H} 是 \mathbb{C} 上的一个完备的内积空间. 这样的向量空间被称为 **Hilbert 空间 (Hilbert Space)**. 于是, 我们给出 Hilbert 空间数学上严格的定义 (注意, 这里的定义是一般的):

定义 1 (Hilbert 空间). 复数域 \mathbb{C} 上的完备内积空间 \mathcal{H} 被称为 Hilbert 空间.

它满足如下性质:

1. $(\mathcal{H}, +)$ 构成一个加法交换群;
2. $(\mathcal{H}, \mathbb{C}, \cdot)$ 赋予 \mathcal{H} 标量积;
3. \mathcal{H} 是完备的;
4. \mathcal{H} 上配有内积结构 $\langle \cdot | \cdot \rangle$; 以及
5. $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}, \exists \langle\alpha| = |\alpha\rangle^\dagger \in \mathcal{H}^\dagger, 0 \leq \langle\alpha|\alpha\rangle = \|\alpha\|^2 \in \mathbb{C}$;
6. $\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}, \langle\gamma| \in \mathcal{H}^\dagger, \langle\gamma|\alpha + \beta\rangle = \langle\gamma|\alpha\rangle + \langle\gamma|\beta\rangle$;
7. $\forall |\alpha\rangle \in \mathcal{H}, \langle\beta| \in \mathcal{H}^\dagger, c \in \mathbb{C}, \langle\beta|c\alpha\rangle = c\langle\beta|\alpha\rangle; \langle c\beta|\alpha\rangle = c^*\langle\beta|\alpha\rangle; \langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle \in \mathbb{C}$.

同时我们建立量子力学的第一条公理:

公理 1. 物理状态由 Hilbert 空间中的向量表示, 它满足态叠加原理.

我们先给出 Hilbert 空间的一些例子.¹

例子 1 (平方可积函数空间). 定义 $L^2[a, b]$ 为区间 $[a, b]$ 上满足 $\int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty$ 的复值可测函数全体, 则 $L^2[a, b]$ 关于内积

$$\langle f|g\rangle = \int_a^b f(x)^* g(x) dx$$

构成了一个 Hilbert 空间. 它的一般形式为, 定义 $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$ 为 \mathbb{R}^n 上关于 Borel 测度 μ 的平方可积函数空间, 满足 $\int_{\mathbb{R}^n} |f|^2 d\mu < \infty$. 则 $L^2(\mathbb{R}^n, d\mu)$ 关于内积

$$\langle f|g\rangle = \int_{\mathbb{R}^n} f^* g d\mu$$

¹请参考 Reed.Simons. 现代数学物理方法.Hilbert 空间

构成一个 Hilbert 空间.

例子 2 (范数有穷离散空间). 这个例子和平方可积函数空间是类似的, 不过是一种离散形式. 定义 \mathfrak{L}^2 为 \mathbb{C} 上序列 $\{x_i\}_{i=1}^\infty$ 全体, 满足 $\sum_{n=1}^\infty |x_n|^2 < \infty$. 则 \mathfrak{L}^2 关于内积

$$\langle \{x_n\}_{n=1}^\infty | \{y_n\}_{n=1}^\infty \rangle = \sum_{n=1}^\infty x_n^* y_n$$

构成一个 Hilbert 空间.

在数学上, Hilbert 空间满足以下几个定理和性质, 我们只将它们不加证明地列出.

定理 1 (基定理). 任何 Hilbert 空间 \mathcal{H} 都能找到一个正交归一基.

定理 2 (投影定理). 对于 Hilbert 空间中的任一向量 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, 总存在一个投影算符 $\mathcal{P} \in \mathfrak{L}(\mathcal{H})$, 使得 \mathcal{H} 在 \mathcal{P} 下有直和分解: $\mathcal{H} = \mathcal{P}(\mathcal{H}) \oplus \mathcal{P}(\mathcal{H})^\perp$, 同时诱导出对 $|\psi\rangle$ 的直和分解: $|\psi\rangle = \mathcal{P}|\psi\rangle + \mathcal{J}\mathcal{P}|\psi\rangle$. 其中 $\mathcal{J} \in \mathfrak{L}(\mathcal{H})$, 满足 $\mathcal{J}|\psi\rangle \in \mathcal{P}(\mathcal{H})^\perp$. 对于给定的 \mathcal{P} , $\mathcal{P}(\mathcal{H})$ 闭的, 同时这一直和分解是唯一的.

其中, $\mathcal{J} \in \mathfrak{L}(\mathcal{H})$ 满足 $\mathcal{J}^2 = -\mathbb{I}$. 它正给出了 Hilbert 空间上的复化结构.

定理 3 (Cauchy-Schwartz). 对于 $\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$, 必有

$$|\langle \psi | \phi \rangle| \leq \|\psi\| \|\phi\|.$$

Proof. 当 $|\phi\rangle = |0\rangle$ 时, 结论是自然的. 现考虑 $|\phi\rangle \neq |0\rangle$ 的情形. 对 $\forall \lambda \in \mathbb{C}$, 有恒等式

$$0 \leq \langle \psi - \lambda\phi | \psi - \lambda\phi \rangle = \|\psi\|^2 - \lambda^\dagger \langle \psi | \phi \rangle - \lambda \langle \psi | \phi \rangle^\dagger + \|\lambda\|^2 \|\phi\|^2. \quad (3.3)$$

令 $\lambda = \frac{\langle \psi | \phi \rangle}{\|\phi\|^2}$, 代入上式则有

$$0 \leq \|\psi\|^2 - \frac{\langle \psi | \phi \rangle^2}{\|\phi\|^2}, \quad (3.4)$$

简单移项并开根 (利用 Hilbert 空间的完备性) 即可得不等式

$$|\langle \psi | \phi \rangle| \leq \|\psi\| \|\phi\|. \quad (3.5)$$

■

定理 4 (同构). 一个 Hilbert 空间 \mathcal{H} 是可分的, 当且仅当它有可数的正交归一基 $\langle |\alpha\rangle \rangle$. 如果它的基是有穷的, 即 $|\langle |\alpha\rangle \rangle| = N < \infty$, 则 $\mathcal{H} \cong \mathbb{C}^N$; 如果它的基是可数无穷的, 即 $|\langle |\alpha\rangle \rangle| = |\mathbb{N}|$, 则 $\mathcal{H} \cong \mathfrak{L}^2$.

定义 2 (直和). 给定 n 个 Hilbert 空间 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \dots, \mathcal{H}_n$ (n 可以为 ∞), 可以定义它们的直和 (Direct Sum)

$$\oplus : \{\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \dots, \mathcal{H}_n\} \rightarrow \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \dots \oplus \mathcal{H}_n = \bigoplus_{i=1}^n \mathcal{H}_i.$$

直和下的态表示为

$$|\psi_1\rangle \oplus |\psi_2\rangle \oplus \cdots \oplus |\psi_n\rangle = \bigoplus_{i=1}^n |\psi_i\rangle.$$

内积结构为

$$\langle (\psi_1 \oplus \psi_2 \oplus \cdots \oplus \psi_n) | (\phi_1 \oplus \phi_2 \oplus \cdots \oplus \phi_n) \rangle = \sum_{i=1}^n \langle \psi_i | \phi_i \rangle.^2$$

定义 3 (直积). 给定 n 个 Hilbert 空间 $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2, \dots, \mathcal{H}_n$ (n 可以为 ∞), 和它们上的态 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots, |\psi_n\rangle$, 它们有自然的 Descartes 积

$$\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \times \cdots \times \mathcal{H}_n, |\psi_1\rangle \times |\psi_2\rangle \times \cdots \times |\psi_n\rangle = |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\rangle.$$

继而可以定义它们的直积/张量积 (Direct Product/Tensor Product)

$$\otimes : \mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \times \cdots \times \mathcal{H}_n \rightarrow \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_n = \bigotimes_{i=1}^n \mathcal{H}_i,$$

它使得 $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle = \bigotimes_{i=1}^n |\psi_i\rangle$ 构成 $\mathcal{H}_1 \times \mathcal{H}_2 \times \cdots \times \mathcal{H}_n$ 上的多重线性型:

$$(\psi_1 \otimes \psi_2 \otimes \cdots \otimes \psi_n) | \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n \rangle = \langle \psi_1 | \phi_1 \rangle \langle \psi_2 | \phi_2 \rangle \cdots \langle \psi_n | \phi_n \rangle.$$

其中, 内积结构 $\langle \cdot | \cdot \rangle$ 满足

$$\langle (\psi_1 \otimes \psi_2 \otimes \cdots \otimes \psi_n) | (\varphi_1 \otimes \varphi_2 \otimes \cdots \otimes \varphi_n) \rangle = \langle \psi_1 | \varphi_1 \rangle \langle \psi_2 | \varphi_2 \rangle \cdots \langle \psi_n | \varphi_n \rangle.$$

关于直积, 有定理

定理 5. 设 $\langle M, \mu \rangle$ 为一使得 $\mathcal{L}^2(M, d\mu)$ 可分的度量空间, 并设 \mathcal{H} 是一可分的 Hilbert 空间, 则存在一个唯一的从 $\mathcal{L}^2(M, d\mu) \otimes \mathcal{H}$ 到 $\mathcal{L}^2(M, d\mu; \mathcal{H})$ 的同构, 使得对 $\forall f \in \mathcal{L}^2(M, d\mu)$ 和 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, 有 $f \otimes |\psi\rangle \mapsto f\psi$.

\mathbb{C} 上 Hilbert 空间的 N 阶张量空间为 $\mathbb{T}^N(\mathcal{H}) = \mathcal{H}^N$. 全体张量空间的直和

$$\mathcal{F} = \bigoplus_{N=0}^{\infty} \mathcal{H}^N$$

关于自然张量点积 \cdot 构成了一个张量代数. 关于这一张量代数, 有其自然的对称化和反对称化:

$$\mathcal{F} = \text{Sym}\mathcal{F} \oplus \text{Alt}\mathcal{F}, \quad (3.6)$$

其中对于 N 阶张量子代数, 对应于态的对称化和反对称化:

$$\text{Sym} |\psi_{j_1}, \psi_{j_2}, \dots, \psi_{j_N}\rangle \propto \sum_{\sigma \in S_N} |\psi_{j_{\sigma(1)}}\rangle \otimes |\psi_{j_{\sigma(2)}}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{j_{\sigma(N)}}\rangle; \quad (3.7)$$

$$\text{Alt} |\psi_{j_1}, \psi_{j_2}, \dots, \psi_{j_N}\rangle \propto \sum_{\sigma \in S_N} \text{sgn}(\sigma) |\psi_{j_{\sigma(1)}}\rangle \otimes |\psi_{j_{\sigma(2)}}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{j_{\sigma(N)}}\rangle. \quad (3.8)$$

²这里圆括号 () 里的态都省去了 Dirac 符号, 只留下抽象的希腊字母. 下面同样.

后面会看到, $\text{Sym} |\psi_{j_1}, \psi_{j_2}, \dots, \psi_{j_N}\rangle$ 可以代表一个 N 玻色子态, 而 $\text{Alt} |\psi_{j_1}, \psi_{j_2}, \dots, \psi_{j_N}\rangle$ 可以代表一个 N 费米子态.³

3.1.2 表象与观测

根据基定理, 只要我们选择了 \mathcal{H} 的一组基, $\mathcal{H} = \text{Span}\{|\alpha\rangle\}$, 我们就称在物理上确定了一个**表象 (Representation)**. 所谓的表象是与观测相联系的. 如果我们认为这个世界是由无数量子态组成的, 那么我们就必须将量子态以某种形式表示出来. 在物理上, 我们必须选择一个表示框架, 在该框架内所有量子态以某种完全一致的规则被表示出来. 这一表示框架在向量空间理论中就是向量空间的基, 也就是物理上的表象.

在 α 表象下, 任意一个量子态被展开成

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle, \quad c_{\alpha} \in \mathbb{C}. \quad (3.9)$$

一般地, 我们总可以对应地在 \mathcal{H}^\dagger 中取与 $\{|\alpha\rangle\}$ 对偶的一组基 $\{\langle\beta|\}$, 满足正交归一性

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \delta_{\alpha}^{\beta}. \quad (3.10)$$

这样, 对 $|\psi\rangle$ 关于 $\langle\alpha|$ 做内积, 或称左乘 $\langle\alpha|$, 我们得到

$$c_{\alpha} = \langle\alpha|\psi\rangle. \quad (3.11)$$

于是 $|\psi\rangle$ 可以被写成

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \langle\alpha|\psi\rangle |\alpha\rangle. \quad (3.12)$$

同时我们得到了著名的单位算符恒等式:

$$\sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle\alpha| = \mathbb{I}. \quad (3.13)$$

这在量子力学中是非常实用的.

我们称未确定表象时的量子态 $|\psi\rangle$ 为**裸态 (Bare State)**, 而在确定某一 α 表象后, $|\alpha\rangle$ 称为 α 本征态.⁴而记 $\langle\alpha|\psi\rangle = \psi_{\alpha} \in \mathbb{C}$, 称 ψ_{α} 为 α 表象下的态, 又在波动力学中被称为**波函数 (Wave Function)**. 于是

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha} |\alpha\rangle. \quad (3.14)$$

也即, 量子力学中, 波函数是裸态在某一表象下的展开系数. 另一方面, 再考虑将 $|\psi\rangle$ 与自己做内积, 这就得到了它的范数 (平方) 表示:

$$\|\psi\|^2 = \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{\beta} \psi_{\beta}^* \langle\beta| \sum_{\alpha} \psi_{\alpha} |\alpha\rangle = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^* \psi_{\alpha} = \sum_{\alpha} \|\psi_{\alpha}\|^2. \quad (3.15)$$

³详见二次量子化一节.

⁴关于本征态的明确含义, 请看 3.2 节-算符.

任何一个波函数都有一个相位自由度. 这是因为我们观测的是波函数的模平方, 而对波函数添加一个随意的相因子 $\exp(i\alpha)$ 将完全不影响 $\|\psi\|^2$ 的大小. 这一点非常重要, 在后续章节内会利用这一性质.

根据投影定理, 任何一个量子态 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ 都可以被正交分解. 于是在确定的 α 表象下, 我们考察一系列投影算符 $\mathcal{P}_\alpha \in \mathfrak{L}(\mathcal{H})$, 它满足:

1. $\mathcal{P}_{\alpha'}\mathcal{P}_\alpha = \delta_{\alpha'}^\alpha \mathcal{P}_{\alpha'}$;
2. $\sum_\alpha \mathcal{P}_\alpha = \mathbb{I}$;
3. $\mathcal{P}_\alpha = \mathcal{P}_\alpha^\dagger$.

投影算符 \mathcal{P}_α 对 \mathcal{H} 作用, 产生了直和分解

$$\mathcal{H} = \bigoplus_\alpha \mathcal{P}_\alpha(\mathcal{H}). \quad (3.16)$$

其中, $\mathcal{P}_\alpha(\mathcal{H}) = \mathbb{C}|\alpha\rangle$ 是维数为 1 的子空间. 任何一个给定的量子态 $|\psi\rangle$, 在 \mathcal{P}_α 作用下有

$$\mathcal{P}_\alpha|\psi\rangle = \psi_\alpha|\alpha\rangle. \quad (3.17)$$

和表象的物理含义联系起来, 我们称投影算符 \mathcal{P} 是观测算符, 也即每在 Hilbert 空间上做用了一次投影算符, 在物理上就相当于做了一次**观测 (Observation)**. 或者说, 是发生了一次经典宏观观测系统和量子系统之间的相互作用. 只要进行了一次观测, 量子态即刻**坍缩 (collapse)** 到了某表象下的本征态.⁵ 在给定的 α 表象下, \mathcal{P}_α 是 α 表象的本征观测算符, 其观测得到的结果是和 $|\alpha\rangle$ 联系在一起的本征值. 有关本征值的内容, 将在下一节继续阐述. 而对应的权重 (波函数) ψ_α 的物理意义, 对应的就是观测概率.

现在, 我们来在物理上对 Hilbert 空间做出一些要求. 首先, 并不是 Hilbert 空间中的所有向量都是有用的. 注意到, 先前提到态的展开系数, 也即量子态在某表象下各分量的权重 $c_\alpha = \psi_\alpha$ 具有概率意义, 而它往往可能是一个复数. 但是, $f(\psi_\alpha) = \|\psi_\alpha\|^2 \in \mathbb{R}$ 却是一个实数, 它是一个良好的可观测量. 因此, 一个很自然的结论是: Hilbert 空间中量子态的范数平方表示它在物理体系中被占据的概率密度. 可以说, 它衡量了量子态的“大小”. 由此我们将向量空间的线性分析理论与概率论建立了量子力学意义上的联系, 同时得到一个自然的推论:

$$\sum_\alpha \|\psi_\alpha\|^2 = 1. \quad (3.18)$$

这是因为, 不论采取哪种表示, 裸态 $|\psi\rangle$ 本身被测到的总概率应当是 1. 对于带连续标记的概率密度, 例如在坐标表象下的波函数模平方, 这就对应着积分

$$\int \|\psi\|^2 d^3\mathbf{x} = 1. \quad (3.19)$$

⁵关于坍缩及其对应的量子力学公理, 请看 3.2 节-算符.

另外, 我们还能看出, 在物理上, 有意义的那些量子态布满了 Hilbert 空间上的一个单位球面. 两个量子态, 如果它们之间只差一个标量系数, 则二者被视为等价的. 以上内容就是量子力学形式理论的概率诠释. 在这里, 波函数的模平方代表概率密度 (对于多体波函数, 则是一个联合概率密度分布), 对它的求和或积分则得到了观测的概率.

其次, 表象之间的转换满足么正性. 下面考虑表象之间的转换. 我们有

定理 6 (么正变换). 在 Hilbert 空间中, 表象变换是一个么正变换, 它保持了内积结构, 同时也蕴含概率守恒.

Proof. 设 \mathcal{H} 有两种表象, α 表象 $\langle|\alpha\rangle\rangle$ 和 β 表象 $\langle|\beta\rangle\rangle$. 则对于某个给定的裸态 $|\psi\rangle$, 在两种表象下分别被表示成

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \psi_{\alpha} |\alpha\rangle, |\psi\rangle = \sum_{\beta} \psi_{\beta} |\beta\rangle.$$

我们设算符 $\mathcal{U} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, $\mathcal{U}|\alpha\rangle = |\beta\rangle$, $\langle\alpha|\mathcal{U}^{\dagger} = \langle\beta|$ 给出了从 α 表象到 β 表象之间的转换关系. 由基的正交归一关系, 同时有 $\langle\alpha'|\alpha\rangle = \delta_{\alpha}^{\alpha'}$, $\langle\beta'|\beta\rangle = \delta_{\beta}^{\beta'}$. 因此

$$\langle\beta'|\beta\rangle = \langle\alpha'|\mathcal{U}^{\dagger}\mathcal{U}|\alpha\rangle = \langle\alpha'|\alpha\rangle. \quad (3.20)$$

于是, 转换算符应当满足**么正性 (Unitarity)**:

$$\mathcal{U}^{\dagger}\mathcal{U} = \mathbb{I}. \quad (3.21)$$

注意到, 如果我们有任意两个裸态 $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$, 则在 \mathcal{U} 表象变换下, 其内积 $\langle\phi|\psi\rangle$ 是保持不变的, 这是由基的内积的正交归一性保持不变推出的. 由此, $\psi_{\alpha} = \langle\alpha|\psi\rangle$ 的值在表象变换下是不变的, 于是观测到任一 (本征) 态的概率 $\|\psi_{\alpha}\|^2$ 也是不变的. 所以表象变换保证了概率守恒. ■

在数学上, 么正算符 \mathcal{U} 给出了 Hilbert 空间上的同构变换 (等距同构). 注意到对么正算符 \mathcal{U} , $\mathcal{U}^{-1} = \mathcal{U}^{\dagger}$ 同样是么正的, 显然所有么正算符的集合 $\mathbf{U} = \{\mathcal{U}\}$ 关于算符乘法构成了一个群, 我们称之为**酉群 (Unitary Group)**. 酉群就是 Hilbert 空间的自同构群. 酉群背后的对称性在量子力学中具有深刻的意义, 这将在后续有关对称性分析的章节中讨论.

注意到, 对于任意内积 $\langle\phi|\psi\rangle$, 我们将它在 α 表象下展开成

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{\alpha'} \phi_{\alpha'} \langle\alpha'| \sum_{\alpha} \psi_{\alpha} |\alpha\rangle = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^* \psi_{\alpha}.$$

而若利用单位算符恒等式 $\sum_{\beta} |\beta\rangle \langle\beta| = \mathbb{I}$, 将它插入内积中间, 得到

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{\beta} \langle\phi|\beta\rangle \langle\beta|\psi\rangle = \sum_{\beta} \langle\beta|\phi\rangle^{\dagger} \langle\beta|\psi\rangle = \sum_{\beta} \phi_{\beta}^* \psi_{\beta}. \quad (3.22)$$

我们就完成了一个 α 到 β 的表象变换, 这在大量的计算中是非常实用的.

3.1.3 量子比特

用 Dirac 符号表征的 Hilbert 空间中的量子态能够近乎完美地应用于信息计算中, 并开创了量子信息/计算领域. 在这里我们简单地介绍这一思想, 并过渡到纠缠态的概念.

首先考察单态. 在二进制意义下, 我们可以构造两个量子态: $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$. 一个**量子比特 (Qubit)** 是这两个量子态的任意线性叠加:

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle. \quad (3.23)$$

这里, $c_0, c_1 \in \mathbb{C}$ 是归一化系数. 也即它们满足

$$|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1. \quad (3.24)$$

在二维复空间 $\mathbb{C}^2 = \{(c_0, c_1)\}$ 中, 满足这样归一化条件的量子态集合显然是一个同构于 S^2 的球面, 称为 **Bloch 球面 (Bloch Sphere)**. 如下图:

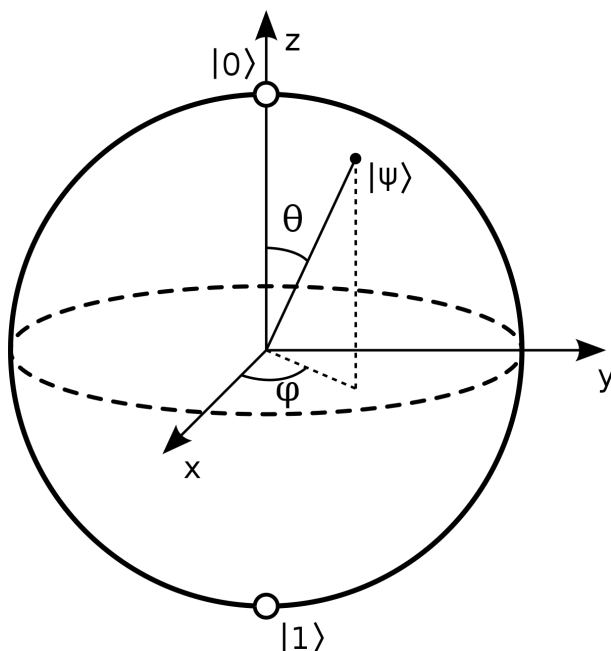


Figure 3.1: Bloch 球

量子比特在 Bloch 球面上的演化都将是么正的. 我们会在之后证明, Bloch 球上的一点表示一个纯态, 而球内的一点表示一个混态. 接下来考察多体态. 一个非纠缠 N 量子比特由 2^N 个量子态基底线性叠加而成:

$$|\Psi\rangle = c_{00\dots 0} |00\dots 0\rangle + c_{00\dots 1} |00\dots 1\rangle + \dots + c_{11\dots 1} |11\dots 1\rangle. \quad (3.25)$$

它满足 $\sum |c|^2 = 1$, 即这样的 N 量子比特集合构成了 \mathbb{C}^N 的一个超球面. 在这里,

$$|\Psi\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |\psi_i\rangle$$

能够被直接写成 N 个量子态的张量积.

3.1.4 纠缠态

事实上, 绝大多数多体量子态在 Hilbert 空间中都不是可分的, 它们彼此之间都存在着纠缠关联. 先考虑最简单的两体纠缠. 两个量子系统构成的复合系统是它们 Hilbert 空间的张量积:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B. \quad (3.26)$$

其中的一个二体态称为**纠缠 (Entanglement)** 态, 如果它不能写成各自小 Hilbert 空间中量子态的直积. 考虑电子自旋表象下的双电子态, 如果电子之间不存在纠缠, 那么我们总可以取到四个本征态构成大 Hilbert 空间的一组基:

$$\begin{aligned} |\uparrow\uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \end{aligned}$$

但是, 如果两个电子之间发生了纠缠, 那么我们可取一个纠缠表象, 在这样一组基下构造出四个新基:

$$\begin{aligned} |\Phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \\ |\Phi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle) \\ |\Psi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\Psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \end{aligned}$$

在这样一组新基下, 任意一个态都无法拆分成单纯小 Hilbert 子空间的态的直积, 并且这样一组基能够表示一个最大的纠缠状态: $|\Phi^\pm\rangle$ 表示了测量得到两个电子自旋情况完全相同 (自旋均向上和自旋均向下各占 $\frac{1}{2}$ 概率) 的状态, 而 $|\Psi^\pm\rangle$ 则表示了测量得到两个电子自旋情况完全相反 (自旋一上一下两种情况各占 $\frac{1}{2}$ 概率) 的状态. 这样一组基下的二体纠缠态被称为一个 **Bell 态 (Bell State)**.

正如在隐变量诠释一节中所说, EPR 佯谬对应的 Bell 不等式在量子力学纠缠系统中被打破. 在自旋一节中, 我们可以用这样一个两体 Bell 态加以证明.

现简单地给出一个方法, 来最大程度地简化任意一个二体态, 更详细的关于纠缠的分析, 请看多体系统和量子统计一节. 考察 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ 中的任意一个态 $|\psi\rangle$, 则它总可以写

成

$$|\psi\rangle = \sum_{i(|i\rangle \in \mathcal{H}_A), j(|j\rangle \in \mathcal{H}_B)} \psi_{ij} |i\rangle \otimes |j\rangle \quad (3.27)$$

的形式. 根据 Shmidt 分解, 任意一个 ψ_{ij} 总可以有如下分解

$$\psi_{ij} = \sum_k u_{ik} \lambda_k v_{kj} \sim (\psi) = U \Lambda V. \quad (3.28)$$

插入原来的态中并简单地处理, 就可以得到

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_k \lambda_k \left(\sum_i u_{ik} |i\rangle \right) \otimes \left(\sum_j v_{kj} |j\rangle \right) \\ &= \sum_k \lambda_k (U^\dagger |k\rangle) \otimes (V |k\rangle) \\ &= \sum_k \lambda_k |k'\rangle \otimes |k''\rangle. \end{aligned}$$

这样我们就将一个二体态 (不论纠缠与否) 在形式上对角化了, 其基就是原先每一个子空间的旧基分别经么正变换而得到的 Shmidt 基. 于是, 根据纠缠态的定义, 当且仅当只有一个非零有效 λ_k 值 (即 $\lambda_k = 1$, $|\psi\rangle = \lambda_k |k'\rangle \otimes |k''\rangle$ 为一个直积态) 时, $|\psi\rangle$ 是非纠缠的, 否则就是纠缠的.

3.2 算符

我们不仅要研究作为向量空间的 Hilbert 空间自身, 还要研究它上面的算符. 根据基本的线性代数理论, 算符就是从向量空间到它自身的映射, 它在向量空间上的作用反映了向量空间本身的一些性质, 同时也为我们研究向量空间的某种动态结构提供了手段. 在上一节中, 我们已经考虑到了 Hilbert 空间的全体算符空间 $\mathfrak{L}(\mathcal{H})$. 我们提到 Hermitian 对偶 \dagger 在 $\mathfrak{L}(\mathcal{H})$ 上的作用, 就是将任一个算符做转置共轭. 还研究了投影算符 \mathcal{P} 、复化算符 \mathcal{J} 以及么正算符 \mathcal{U} . 它们的作用分别给出了观测、复化和表象变换的操作.

算符的本质是向量空间上的映射. 它作用在向量空间上, 于是就在向量空间上形成了一种准动力学的结构. 一些具有相同性质和约束关系的算符的集合可以构成半群或者群之类的性质更加良好的数学对象, 它们在向量空间上的集体作用将反映向量空间的一些整体性质.

Hilbert 空间作为全体量子态生活的空间, 需要具备某种动力学结构. 只有这样物理学家才可以研究量子动力学, 从而发现量子力学的一些独特的、有别于经典力学的动力学特性. 在经典力学中, 我们有最基本的第一性动力学方程 (Newton)

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}. \quad (3.29)$$

它给出了经典动力学系统的演化方式, 同时我们得到了一些基本的力学量: 坐标, 时间, 动量, 角动量, 能量……. 它们的守恒规律反映了力学系统的对称性. 在量子力学中, 我们也需要找到这样的第一性方程, 它能够给出 Hilbert 空间上量子态的动力学; 同时我们要合理地表示那些力学量, 它们需要和动力学方程相容.

3.2.1 力学量的算符表示

历史上, 是由 Heisenberg 首先提出了力学量的算符表示, 从而建立起来了矩阵力学.

Heisenberg 的灵感, 来源于先前提到的 Bohr 氢原子模型. Bohr 氢原子模型告诉我们, 氢原子的核外电子处在不同的能级上, 在每一条能级上的电子是定态的, 若要改变自己的能量, 它需要吸收或放出光子并发生跃迁. 定态跃迁公式为:

$$h\nu_{mn} = E_m - E_n.$$

我们说, 光子 $h\nu_{mn}$ 可以被视为电子状态从能级 (态) E_m 向能级 (态) E_n 改变的跃迁元. 如果我们认为, 能级 E_m, E_n 分别对应着能量表象下裸态 $|\psi_m\rangle, |\psi_n\rangle$ 的两个本征态, 那么所谓的能量应该如何刻画呢? 在经典力学中我们就具备这样的思想: 物理系统中真正有价值的量是那些差值量, 因为基准是可以人为地选择的. 一个具有开创性的想法是, 能量可以由一张表来表示. 其中第 m 行、第 n 列的元素, 就对应着从能级 E_m 向能级 E_n 跃迁的跃迁元! 只要将所有可能态之间的跃迁元全部记录下来, 绘制成一张表, 那么我们就得到了关于能量的全部信息. 那么, 能量在这一意义下就是这样一张表:

$$E \sim \begin{pmatrix} h\nu_{11} & h\nu_{12} & \cdots \\ h\nu_{21} & h\nu_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}.$$

在数学形式上, 显然这样一张二维表对应着某种“矩阵”, 不过这个矩阵可能是无限维的, 因为全部量子态生活的 Hilbert 空间是无限维的. Heisenberg 发展了这一理念, 他认为, 所有的力学量也都应该可以被写成矩阵的形式, 每一个元素都是某本征态到另一本征态的跃迁元. 如果我们记某力学量为 Q , 它的矩阵形式记为 \hat{Q} , 则有

$$(\hat{Q})_{ij} = \langle i|\hat{Q}|j\rangle, |i\rangle \rightsquigarrow \langle i|\hat{Q}|j\rangle \rightsquigarrow |j\rangle. \quad (3.30)$$

之所以将状态 i 表示成左矢而将状态 j 表示成右矢, 是因为我们希望最终得到的力学量是一个可观测的标量, 故两个态之间的运算必须是一个有内积的运算. 于是,

$$\hat{Q} = \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{Q}|1\rangle & \langle 1|\hat{Q}|2\rangle & \cdots \\ \langle 2|\hat{Q}|1\rangle & \langle 2|\hat{Q}|2\rangle & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix}.$$

Heisenberg 在建立这套语言时, 并未意识到这其实是矩阵语言. 是 Dirac 和 Jordan 将这套语言数学规范化, 并最终形成了矩阵力学. 在我们这里, 不需要追溯过多的历史, 而直接进入现代的算符语言.

注意到, 上述操作的根源, 依旧是基于量子力学第一条公理——即我们需要首先认可量子态本体论的世界观. 由上面论述, 如果我们考察 Hilbert 空间中的一个裸态 $|\psi\rangle$, 以及某个力学量 \hat{Q} , 那么力学量的作用就是将 $|\psi\rangle$ 映射到另一个裸态 $|\phi\rangle$ 上. 这样的映射在数学上是天然存在的, 那就是作用在向量空间上的一个算符. 在上面 Heisenberg 的论述中, 似乎我们将力学量都写成矩阵形式, 事实上, 这在数学上并不清晰. 第一, 上面的矩阵可能是无限维的, 这样的“矩阵”一般不是良定义的, 可以证明无限维矩阵破坏了求迹的交换律. 第二, 根据算符理论, 矩阵不过是线性算符的某种表示, 就如同在物理上波函数是裸态的表示, 人们容易处理的不是算符本身, 而通常是它的矩阵表示. 因此, 我们需要研究 Hilbert 空间 \mathcal{H} 上的算符空间 $\mathcal{L}(\mathcal{H})$.

3.2.2 算符理论

在本节中我们将给出有关算符理论的一些内容. 这部分内容是基于严谨泛函分析理论的, 更多的具体内容, 可以参考 Reed 和 Simons 的《现代数学物理方法》一书.

有界算符

我们先讨论有界紧算符. 在物理上我们通常研究的是束缚态, 而在束缚态下算符一般是有界且紧的. 除非必要, 否则我们不会去特意考虑算符的紧性. 而有关无界算符的内容, 将放在散射理论一章讲解.

定义 4 (算符空间). 完备向量空间 Hilbert 空间 \mathcal{H} 上的有界线性映射全体构成了一个向量空间, 称为**算符空间 (Operator Space)**, 记为 $\mathcal{L}(\mathcal{H})$.

定理 7 (范数). $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ 是一个 Banach 空间. 其上赋有范数

$$\|Q\| = \sup_{\psi \neq 0} \frac{\|Q|\psi\rangle\|_{\mathcal{H}}}{\| |\psi\rangle \|_{\mathcal{H}}}.$$

定义 5 (有界算符). 范数存在且有限的算符称为**有界算符 (Bounded Operator)**.

定理 8 (完备性). 令 $\{Q_n\}$ 为一有界算符序列, 并且假设 $\langle Q_n \psi | \phi \rangle (\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H})$ 在 $n \rightarrow \infty$ 时收敛. 则存在一个有界算符 $Q \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ 使得 $\lim_{n \rightarrow \infty} Q_n \rightarrow Q$.

定义 6 (稠定算符). 记 $\text{Ran}(Q)$ 为 Q 的值域. 若 $\text{Ran}(Q)$ 在 \mathcal{H} 中稠密, 则称 Q 是**稠定 (Dense)** 的.

定义 7 (伴随算符). 对于算符 $Q \in \mathfrak{L}(\mathcal{H})$, 存在一个它的伴随算符 (Adjoint Operator) $Q^\dagger \in \mathfrak{L}(\mathcal{H}^\dagger)$, 满足对 $|\psi\rangle \in \mathcal{H}, \langle\phi| \in \mathcal{H}^\dagger$, 有

$$\langle\phi|Q\psi\rangle = \langle Q^\dagger\phi|\psi\rangle. \quad ^6$$

定理 9 (Hermitian 共轭). 对偶映射 $\dagger: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}^\dagger$, 又称 Hermitian 共轭, 给出算符 Q 的伴随算符 Q^\dagger , 同时有如下性质:

1. \dagger 给出 $\mathfrak{L}(\mathcal{H})$ 上共轭线性保内积自同构;
2. 对于两个算符 $A, B \in \mathfrak{L}(\mathcal{H})$, 有 $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$;
3. 如果 Q 有一个有界逆算符 Q^{-1} , 则它的伴随算符 Q^\dagger 同样有一个有界逆算符 $(Q^\dagger)^{-1} = (Q^{-1})^\dagger$;
4. $\|Q^\dagger Q\| = \|Q\|^2$.

定义 8 (自伴算符). $\mathfrak{L}(\mathcal{H})$ 中的一个有界算符 Q 称为自伴算符 (Self-adjoint Operator), 如果 $Q = Q^\dagger$.

由于自伴算符既有左作用也有右作用, 因此当我们考虑一个自伴算符的内积式 $\langle\phi|Q\psi\rangle = \langle Q\phi|\psi\rangle$ 时, 基于对称的考虑, 会直接记为 $\langle\phi|Q|\psi\rangle$.

以上结论, 在任何一本泛函分析书上都能找到, 我们不去证明它们. 在这里只是给出了算符空间上一般而简单的数学结构. 这些数学理论可以保证我们在物理上放心地在它的框架下处理问题. 另外, Hermitian 共轭在量子力学中拥有举足轻重的地位, 它为我们带来可操作的内积结构和算符的伴随形式. 事实上, 好的力学量都是自伴算符, 也被称为 Hermitian 算符.

算符的谱

对于一般的 Banach 空间上的算符, 我们可以定义算符的谱. 谱反映了一个算符在向量空间上作用的某种分布, 同时在物理上给出了一个良好的可观测量集合. 量子力学中, 我们通常通过力学量的谱来研究该力学量本身.

定义 9 (谱). 设 \mathcal{X} 是一个 \mathbb{C} 上的 Banach 空间. 则对于 $Q \in \mathfrak{L}(\mathcal{X})$, $\det(\lambda\mathbb{I} - Q) = 0$ 的解集 $\{\lambda_i\} \in \mathbb{C}$ 称为 Q 的谱 (Spectrum), 记为 $\sigma(Q)$.

定义 10 (本征态和本征值). 设算符 $Q \in \mathfrak{L}(\mathcal{X})$. 如果对 $0 \neq |\psi\rangle \in \mathcal{X}$ 和某些 $\lambda \in \mathbb{C}$, 满足 $Q|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$, 我们就称 $|\psi\rangle$ 是 Q 的本征态 (Eigenvector), 而 λ 称为相应的本征值 (Eigenvalue). 所有本征值的集合称为 Q 的点谱 (Point Spectrum).

⁶这是由之前提到的 Riesz 引理保证的.

如果 λ 不是一个本征值, 并且 $\text{Ran}(\lambda I - Q)$ 不稠密, 则这样的 λ 的集合称为 Q 的**剩余谱 (Residual Spectrum)**.

在量子力学中, 几乎所有的谱都是点谱. 另外, 如果 $\sigma(Q)$ 在 \mathbb{C} 上是连续的 (测度非零), 就称其为连续谱, 关于连续谱的积分用 \int ; 如果是分立的 (测度为零), 就称其为分立谱, 关于分立谱的积分都用 \sum 代替. 坐标算符和动量算符的谱都是连续谱, 而角动量算符和能量算符的谱则一般是分立谱.

下面我们研究自伴算符的谱. Hilbert 空间上自伴算符的谱非常特殊, 它具有很多良好的性质.

定理 10 (自伴算符的谱). 设 $Q \in \mathfrak{L}(\mathcal{H})$, 那么

1. Q 的剩余谱是空谱, 即自伴算符的谱都是点谱;
2. $\sigma(Q) \subset \mathbb{R}$;
3. Q 不同本征值对应的本征态彼此正交.

Proof.

设 $0 \neq |q\rangle \in \mathcal{H}$ 是 Q 的某个本征态, 则有

$$\langle q|Q|q\rangle = \langle q|Qq\rangle = q\langle q|q\rangle = \langle Qq|q\rangle = q^*\langle q|q\rangle,$$

于是 $(q - q^*)\langle q|q\rangle = 0$. 由于 $\langle q|q\rangle$ 正定, 则必有 $q = q^* \Rightarrow q \in \mathbb{R}$. 这表明 Q 的谱 $\sigma(Q) \subset \mathbb{R}$.

假设 $q \in \mathbb{R}$ 属于 Q 的剩余谱, 则 $q^* = q$ 属于 $Q^\dagger = Q$ 的点谱, 由 Q 的剩余谱和点谱的无交性推出矛盾. 故 Q 没有剩余谱.

设 $0 \neq |q_1\rangle, |q_2\rangle \in \mathcal{H}$ 是 Q 的两个本征值分别为 $q_1, q_2 (q_1 \neq q_2)$ 的本征态. 则有

$$\langle q_1|Q|q_2\rangle = \langle q_1|Qq_2\rangle = q_2\langle q_1|q_2\rangle = \langle Qq_1|q_2\rangle = q_1\langle q_1|q_2\rangle,$$

于是 $(q_1 - q_2)\langle q_1|q_2\rangle = 0$. 由于 $q_1 \neq q_2$, 则必有 $\langle q_1|q_2\rangle = 0$ 即 $|q_1\rangle, |q_2\rangle$ 彼此正交. ■

定理 11 (Hilbert-Shmidt). 设 $Q \in \mathfrak{L}(\mathcal{H})$ 是 Hilbert 空间上的一个自伴紧算符. 那么, Hilbert 空间存在一组完备的正交归一基 $\{|\alpha\rangle\}$, 其中每一个基向量 $|\alpha\rangle$ 都是 Q 的本征态.

根据自伴算符 (紧性自动保证) 的谱定理和 Hilbert-Shmidt 定理, 我们可以这样在物理上归纳: 如果我们要求所有力学量都是 Hilbert 空间一个自伴算符 (通常, 要求它是稠定的), 那么该力学量的谱是一个实的谱点, 并且它的本征态全体可以作为 Hilbert 空间的一组正交归一基. 在量子力学中, 我们称选取这样的基的表象为某个力学量的**本征表**

象 (Eigen-representation). 显然, 在本征表象中, 所有的量子态都可以展开成该力学量本征态的叠加, 且有 Hilbert 空间自然的直和分解

$$\mathcal{H} = \bigoplus_q \mathbb{C} |q\rangle,$$

$\{|q\rangle\}$ 为自伴算符 \hat{Q} 的谱分解. 而进行一次测量, 就将得到某个确定本征态的本征值. 我们称读到的本征值为该力学量在其本征态下的值, 也即仪器测量所测到的读数, 它一定是一个实数.

结合先前的投影定理, 以及对投影赋予的“观测”含义, 现在指出观测一个力学量的物理过程. 如果我们有一个量子系统, 它的全部物理量子态构成 Hilbert 空间上的一个单位球面. 现用一个仪器去测量该量子系统的某个力学量 \hat{Q} 的值. 我们将 \hat{Q} 作用在 Hilbert 空间上, 并得到它的一个谱分解 $\{|q\rangle\}$. 在 q 表象 (也即 \hat{Q} 本征表象下), 有投影算符 \mathcal{P}_q , 它起到观测的作用. 任何一个裸态 $|\psi\rangle$ 被写为 $|\psi\rangle = \sum_q \psi_q |q\rangle$, 我们的观测就是将算符 $\hat{Q}\mathcal{P}_q$ 作用在 $|\psi\rangle$ 上, 得到

$$\hat{Q}\mathcal{P}_q |\psi\rangle = \hat{Q}\mathcal{P}_q \sum_q \psi_q |q\rangle = \hat{Q}\psi_q |q\rangle = q\psi_q |q\rangle, q \in \mathbb{R}. \quad (3.31)$$

也即, 我们以 $\langle q|\mathcal{P}_q q\rangle = \|\psi_q\|^2$ 的概率密度测得力学量 \hat{Q} 的值为 q . 同时 $|q\rangle$ 被填充, 我们获得了一个体系的物理实体. 进一步, 根据概率诠释,

$$\overline{Q} = \langle \psi|\hat{Q}|\psi\rangle = \sum_q \|\psi_q\|^2 q$$

称为力学量 \hat{Q} 的**期望 (Expectation)**.

若要对 \hat{Q} 进行连续的 n 次测量, 则将算符 $(\hat{Q}\mathcal{P}_q)^n$ 作用在裸态 $|\psi\rangle$ 上. 故只要进行了第一次测量, 系统的状态就已经坍缩到了某一个本征态, 而后进行每一次测量, 系统的态将一直保持本征态.

现在, 我们来回答先前提到的问题: 为什么我们要求量子态构成的向量空间的基域是复数域 \mathbb{C} ? 第一, 我们熟知的 \mathbb{R} 是 \mathbb{C} 的子域; 第二, \mathbb{C} 是最简单的特征零的代数闭域; 第三, 最关键的是, 由于 \mathbb{C} 是代数闭域, 算符的本征值在 \mathbb{C} 上必定存在, 这一条在物理上是至关重要的, 我们必须保证可观测量的力学量有至少一个本征值. 而在后面的章节中会看到, 在波动力学的视角下, i 的引入可以很好地表达 de Broglie 波的相位自由度. 因此, 我们相信 Hilbert 空间是 \mathbb{C} 上的向量空间是正确的.

现在, 我们来陈述量子力学的另外两条公理:

公理 2. 可观测的力学量由 Hilbert 空间上的自伴算符表示.

公理 3. 对系统进行一次测量, 系统的状态立刻坍缩到某一个本征态上, 测量值即为该本征态对应的本征值. 之后再进行测量, 系统保持在该本征态上.

算符运算

算符空间 $\mathfrak{L}(\mathcal{H})$ 是一个更大的向量空间. 在这一向量空间是 Banach 空间 (有完备范数). 我们可以在这一空间上研究其对应于 Hilbert 空间表象变换的算符变换, 算符提升, 以及算符间的一类特殊运算构成的代数——李代数, 它揭示了力学量背后的对称性.

首先约定, 如果我们没有规定表象, 那么我们就用意大利字体来表示一个抽象的算符 (裸算符) \mathcal{Q} ; 如果我们规定了一个确切地表象, 我们就用在字母上加 \wedge 的方法表示算符.

我们考察由 \hat{a} 诱导的 Hilbert 空间上的 α 表象 $\langle|\alpha\rangle\rangle$, 那么对应的所有态都是 \hat{a} 本征态的线性叠加. 现在, 选取另一个 β 表象对应的本征算符 \hat{b} , 满足

$$\hat{b}|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle. \quad (3.32)$$

$|\beta\rangle$ 是由 $|\alpha\rangle$ 经么正变换而来, 于是

$$\hat{b}|\beta\rangle = \hat{b}\mathcal{U}|\alpha\rangle = \beta\mathcal{U}|\alpha\rangle. \quad (3.33)$$

两边左乘 $\mathcal{U}^\dagger = \mathcal{U}^{-1}$, 得到

$$\mathcal{U}^\dagger \hat{b} \mathcal{U} |\alpha\rangle = \beta |\alpha\rangle. \quad (3.34)$$

这样我们就得到 α 表象下算符 \hat{b} 的形式.

下面利用单位算符诱导的 Hilbert 空间的表象变换, 来看对应的算符在表象变换下的具体变换. 这将给出一个在某一确定表象下各力学量算符形式的方法.

将 (3.19) 两边插入单位算符 $\sum_\alpha |\alpha\rangle \langle\alpha|$:

$$\hat{b} \left(\sum_\alpha |\alpha\rangle \langle\alpha| \right) |\beta\rangle = \beta \left(\sum_\alpha |\alpha\rangle \langle\alpha| \right) |\beta\rangle, \quad (3.35)$$

这就构成了从 β 表象到 α 表象下的转换:

$$\sum_\alpha \hat{b} \langle\alpha|\beta\rangle |\alpha\rangle = \sum_\alpha \beta \langle\alpha|\beta\rangle |\alpha\rangle. \quad (3.36)$$

原则上讲, 我们可以适当地将一些函数或泛函提升为一个算符. 定义复数域上的提升算子 $l: \mathcal{F}(\mathbb{C}) \rightarrow \mathfrak{L}(\mathcal{H}), l(\psi) = \hat{\psi}$. 我们在物理上除了将一般力学量提升为算符, 还会把波函数本身提升为场算符. 但这样做同样会生成新的表象.

算符空间上具有李代数结构. 我们在 $\mathfrak{L}(\mathcal{H})$ 上定义李括号 $[\cdot, \cdot]$:

定义 11 (李代数). $[\cdot, \cdot]: \mathfrak{L}(\mathcal{H}) \times \mathfrak{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathfrak{L}(\mathcal{H})$ 是 $\mathfrak{L}(\mathcal{H})$ 上的一个反交换运算, 它给出 $[\psi, \phi] = \psi\phi - \phi\psi$. $(\mathfrak{L}(\mathcal{H}), [\cdot, \cdot])$ 构成了一个反交换结合代数, 记为 \mathfrak{g} .

定理 12. 李代数满足如下性质:

1. 封闭性;
2. 反交换性: $[\psi, \phi] = -[\phi, \psi]$;
3. 双线性性: $[\lambda\psi + \mu\phi, \varphi] = \lambda[\psi, \varphi] + \mu[\phi, \varphi]$, $[\psi, \lambda\phi + \mu\varphi] = \lambda[\psi, \phi] + \mu[\psi, \varphi]$;
4. Jacobi 恒等式: $[[\psi, \phi], \varphi] + [[\phi, \varphi], \psi] + [[\varphi, \psi], \phi] = 0$.

另外, 对于算符乘积的李代数, 我们有如下运算法则:

1. $[\psi\phi, \varphi] = \psi[\phi, \varphi] + [\psi, \varphi]\phi$;
2. $[\psi, \phi\varphi] = \phi[\psi, \varphi] + [\psi, \phi]\varphi$.

我们知道, 对于任意一个算符 \mathcal{Q} , 有分解

$$\mathcal{Q} = \mathcal{Q}^+ + i\mathcal{Q}^-, \mathcal{Q}^+ = \frac{1}{2}(\mathcal{Q} + \mathcal{Q}^\dagger), \mathcal{Q}^- = \frac{1}{2i}(\mathcal{Q} - \mathcal{Q}^\dagger). \quad (3.37)$$

它导出了自然的直和分解:

$$\mathfrak{L}(\mathcal{H}) = \mathfrak{L}^+(\mathcal{H}) \oplus \mathfrak{L}^-(\mathcal{H}), \quad (3.38)$$

其中 $\mathfrak{L}^+(\mathcal{H}), \mathfrak{L}^-(\mathcal{H})$ 分别为自伴算符空间和反自伴算符空间.

考察反自伴算符空间 $\mathfrak{L}^-(\mathcal{H}), \forall \mathcal{Q} \in \mathfrak{L}^-(\mathcal{H}), \mathcal{Q}^\dagger = -\mathcal{Q}$. 容易验证, 对于两个反自伴算符 \mathcal{Q}, \mathcal{T} , 其李括号 $[\mathcal{Q}, \mathcal{T}] \in \mathfrak{L}^-(\mathcal{H})$. 因此, $(\mathfrak{L}^-(\mathcal{H}), [\cdot, \cdot])$ 构成了一个李代数, 我们记为 \mathfrak{u} . 根据李群-李代数理论, 可以证明 \mathfrak{u} 就是酉群 \mathbf{U} (李群) 的李代数.

对于两个算符 \mathcal{Q}, \mathcal{T} , 如果它们的李括号 $[\mathcal{Q}, \mathcal{T}] = 0$, 就说它们是对易 (Commutable) 的, 否则就是不对易的.

定理 13. 如果两个算符对易, 那么它们拥有共同的本征态.

Proof. 设 $\{|q\rangle\}$ 为本征值为 q 的 \mathcal{Q} 的一个本征子空间, 则 $\mathcal{Q}|q\rangle = q|q\rangle$. 那么

$$\mathcal{Q}\mathcal{S}|q\rangle = \mathcal{S}\mathcal{Q}|q\rangle = q\mathcal{S}|q\rangle, \quad (3.39)$$

因此 $\mathcal{S}|q\rangle$ 是 \mathcal{Q} 的本征值为 q 的本征态, 从而 $\mathcal{S}\{|q\rangle\} \subset \{|q\rangle\}$. 考虑 \mathcal{S} 在 $\{|q\rangle\}$ 上的限制, 则必然存在 $|s, q\rangle \in \{|q\rangle\}$, 使得 $\mathcal{S}|s, q\rangle = s|s, q\rangle \in \{|q\rangle\}$. 故 $|s, q\rangle$ 即为 \mathcal{S}, \mathcal{Q} 共同的本征态. ■

在物理上, 根据观测理论, 力学量算符的李括号 (也称**对易子 (Commutator)**) 衡量了力学量之间的某种“相干”特性. 如果两个力学量可对易, 则测量顺序并不影响测量结果, 否则我们将发现测量顺序会影响到我们的测量结果. 两个不对易的力学量之间基本存在一定的相干性, 它是量子力学有别于经典力学的最大的不同之一.

我们还可以定义**反对易子 (Anti-Commutator)**: $\{\cdot, \cdot\} : \mathfrak{L}(\mathcal{H}) \times \mathfrak{L}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathfrak{L}(\mathcal{H}), \{\psi, \phi\} = \psi\phi + \phi\psi$. $(\mathfrak{L}(\mathcal{H}), \{\cdot, \cdot\})$ 是一个交换结合代数, 可记为 \mathfrak{p} . 容易看到, $(\mathfrak{L}^+(\mathcal{H}), \{\cdot, \cdot\})$ 构成了一个封闭代数. 反对易子在有时有特殊用处.

坐标, 动量, 角动量, 能量算符

下面我们来具体地介绍几个最经典的力学量的算符形式. 我们通常是在坐标表象或动量表象下写这些算符. 坐标表象和动量表象都是连续表象, 即坐标和动量算符的谱都是连续谱, 并且它们构成了一对 Fourier 变换, 拥有非常好的性质.

首先是坐标算符. 在经典力学中, 坐标似乎是最显然最简单的力学量, 以至于人们几乎就把它当作客观的空间参数, 而非一个力学量. 但在量子力学中, 坐标算符或许是最令人费解的力学量——虽然我们依旧秉持经典物理时空观, 通常在研究一个量子体系时取坐标表象, 但我们会发现坐标表象有很多问题. 首先, 坐标算符并不是一个有界紧算符, 它在场论中通常是一个无界算符; 其次, 更根本的是, 一旦我们采用了坐标表象, 就默认了使用经典场论的局域时空观来看待我们的世界, 但在量子力学中很多物理现象呈现非局域性. 不过, 我们依旧先给出坐标算符的定义和性质.

我们用 $\hat{\mathbf{x}}$ 表示坐标算符, 它是一个矢量算符, 即 $\hat{\mathbf{x}} = \hat{x}_i \mathbf{e}^i$. 在束缚态下, 它是一个自伴算符, 同时在坐标表象下, $\hat{\mathbf{x}}$ 的形式就是它自身. 对于任何一个坐标本征态 $|\mathbf{x}\rangle = |x_1, x_2, x_3\rangle = |x_1\rangle \otimes |x_2\rangle \otimes |x_3\rangle$, 坐标算符的作用为:

$$\hat{\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle. \quad (3.40)$$

由于三个一维坐标子空间满足直和关系

$$\left(\sum_{x_1} \mathbb{C} |x_1\rangle \right) \oplus \left(\sum_{x_2} \mathbb{C} |x_2\rangle \right) \oplus \left(\sum_{x_3} \mathbb{C} |x_3\rangle \right) = \mathcal{H},$$

故在其上的坐标算符必有对易关系

$$[x_i, x_j] = 0. \quad (3.41)$$

下面我们在坐标表象下构造动量算符. 根据经典力学, 我们知道动量就是无穷小平移的生成元, 动量守恒对应空间平移对称性. 那么, 在坐标表象下, 我们需要构造这样一个无穷小平移算符 $\mathcal{T}(d\mathbf{x})$, 它作用在坐标本征态上, 给出它的一个无穷小平移, 也即

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}) |\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x} + d\mathbf{x}\rangle. \quad (3.42)$$

显然, 为了保内积, $\mathcal{T}(d\mathbf{x})$ 是一个么正算符, 即 $\mathcal{T}(d\mathbf{x})\mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x}) = \mathbb{I}$. 同时, 在 (3.21) 两边同时作用 $\mathcal{T}^{-1}(d\mathbf{x})$, 我们当然希望获得

$$|\mathbf{x}\rangle = \mathcal{T}^{-1}(d\mathbf{x}) |\mathbf{x} + d\mathbf{x}\rangle \sim \mathcal{T}^{-1}(d\mathbf{x}) |\mathbf{x}\rangle = |\mathbf{x} - d\mathbf{x}\rangle, \quad (3.43)$$

也即 $\mathcal{T}^{-1}(d\mathbf{x}) = \mathcal{T}(-d\mathbf{x})$. 最后, 由于 $\sigma(\hat{\mathbf{x}})$ 是一个连续谱, 我们要求 $\lim_{d\mathbf{x} \rightarrow 0} \mathcal{T}(d\mathbf{x}) = \mathbb{I}$. 下面来找到这样的算符.

由于 \mathcal{T} 是无穷小平移 $d\mathbf{x}$ 的泛函, 它是一个无穷小算符, 故我们考虑平移算符在零点的 Taylor 展开:

$$\mathcal{T}(\Delta\mathbf{x}) = \mathcal{T}(0) + \nabla \mathcal{T}(0) \cdot \Delta\hat{\mathbf{x}} + \mathcal{O}(\Delta\hat{\mathbf{x}}^2). \quad (3.44)$$

显然, 保留到一阶项, $\mathcal{T}(d\mathbf{x}) = \mathcal{T}(0) + \nabla\mathcal{T}(0) \cdot d\hat{\mathbf{x}} = \mathbb{I} + \nabla\mathcal{T}(0) \cdot d\hat{\mathbf{x}}$. 现在需要确定 \mathcal{T} 在零点的梯度. 注意到, 这一梯度在物理上应当和动量算符成正比, 即 $\nabla\mathcal{T}(0) \cdot d\hat{\mathbf{x}} \propto \hat{\mathbf{p}} \cdot d\hat{\mathbf{x}}$. 这里, 动量算符的本征态为 $|\mathbf{p}\rangle = |p_1, p_2, p_3\rangle = |p_1\rangle \otimes |p_2\rangle \otimes |p_3\rangle$. 再利用量纲分析, 由于 $[\mathcal{T}(d\mathbf{x})] = [\mathbb{I}]$, 于是我们设常数 $\lambda \in \mathbb{C}$ 和常量 \hbar 满足其量纲为角动量量纲 $[\mathbf{h}] = [\mathbf{J}]$, 那么我们得到无穷小平移算符的一个形式:

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}) = \mathbb{I} + \lambda \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot d\hat{\mathbf{x}}}{\hbar}. \quad (3.45)$$

最后, 利用 $\mathcal{T}^{-1}(d\mathbf{x}) = \mathcal{T}(-d\mathbf{x}) = \mathcal{T}^\dagger(d\mathbf{x})$, 以及我们要求动量算符是一个自伴算符: $\hat{\mathbf{p}}^\dagger = \hat{\mathbf{p}}$, 我们有 $\lambda^\dagger = -\lambda$, 取最简形式, 显然它就是虚数单位 $\pm i$. 为了和后面具有确定动量的自由粒子的 de Broglie 波之形式相匹配, 我们在这里取负号. 因此, 我们就在物理上得到了无穷小平移算符的显式:

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x}) = \mathbb{I} - i \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot d\hat{\mathbf{x}}}{\hbar}. \quad (3.46)$$

我们称 \hbar 为约化 Planck 常数. 事实上, 它就是 $h/2\pi$, 它真正的物理意义直到波动力学一节才会明朗. 但我们的确通过单纯的公理系统和算符理论导出了这样一个量的存在. 下面由此来看动量算符本身具有的性质.

首先考察对易子 $[\hat{\mathbf{x}}, \mathcal{T}(d\mathbf{x})]$. 将 $\hat{\mathbf{x}}\mathcal{T}(d\mathbf{x})$ 作用在某个坐标本征态上:

$$\hat{\mathbf{x}}\mathcal{T}(d\mathbf{x})|\mathbf{x}\rangle = \hat{\mathbf{x}}|\mathbf{x} + d\mathbf{x}\rangle = (\mathbf{x} + d\mathbf{x})|\mathbf{x} + d\mathbf{x}\rangle. \quad (3.47)$$

再将 $\mathcal{T}(d\mathbf{x})\hat{\mathbf{x}}$ 作用在相同的坐标本征态上:

$$\mathcal{T}(d\mathbf{x})\hat{\mathbf{x}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}\mathcal{T}(d\mathbf{x})|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x} + d\mathbf{x}\rangle. \quad (3.48)$$

于是 $[\hat{\mathbf{x}}, \mathcal{T}(d\mathbf{x})] = d\mathbf{x}$. 由 $\mathcal{T}(d\mathbf{x})$ 和 $\hat{\mathbf{p}}$ 的关系, 以及三维坐标和动量算符对应本征子空间在不同维度的直和性, 易得

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}\mathbb{I}. \quad (3.49)$$

事实上, 无穷小平移算符生成了一个连续么正算符. 考虑从原点态 $|0\rangle$ 到 $|\mathbf{x}\rangle$ 态的平移, 我们这样生成平移算符:

$$\mathcal{T}(\mathbf{x})|0\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{T}(d\mathbf{x})^N|0\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} (\mathbb{I} - i \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{x}}{N\hbar})^N|0\rangle = \exp(-\frac{i\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{\hbar})|0\rangle = |\mathbf{x}\rangle. \quad (3.50)$$

平移算符 $\mathcal{T}(\mathbf{x}) = \exp(-\frac{i\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{\hbar})$ 是一个么正算符. 更一般地, 指数映射 $\exp: \mathbb{R} \times \mathbf{u} \rightarrow S^1$ 将无穷小平移生成元 $\mathbf{u} = \mathbb{I} - i \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}$ 映射成酉群 $\mathbf{U} = \{\exp(-\frac{i\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{\hbar})\}$.

下面考虑坐标表象下动量算符的形式.

在动量表象下, 显然有 $\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle$. 根据算符表象的转换理论, 在坐标表象下, \mathbf{p} 满足

$$\int d\mathbf{x} \hat{\mathbf{p}} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle |\mathbf{x}\rangle = \int d\mathbf{x} \mathbf{p} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle |\mathbf{x}\rangle. \quad (3.51)$$

考虑将平移算符 $\mathcal{T}(\mathbf{x}) = \exp(-\frac{i\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{\hbar})$ 作用在零点态 $|0\rangle$ 上, 得到

$$\exp(-\frac{i\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{\hbar}) |0\rangle = |\mathbf{x}\rangle. \quad (3.52)$$

在两边左乘 $\langle \mathbf{p}|$, 并利用 Hermitian 内积的性质,

$$\langle \mathbf{p} | \exp(-\frac{i\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{\hbar}) | 0 \rangle = \langle \exp(\frac{i\mathbf{x} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{\hbar}) \mathbf{p} | 0 \rangle = \exp(-\frac{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{\hbar}) \langle \mathbf{p} | 0 \rangle = \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle. \quad (3.53)$$

两边同时取复共轭:

$$\exp(\frac{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{\hbar}) \langle 0 | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle. \quad (3.54)$$

我们回忆, $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle$ 就是 $\psi(\mathbf{x})_{\mathbf{p}}$, 也即具有确定动量 \mathbf{p} 的态在坐标表象下的波函数. 由于波函数具有相位自由度, $\langle 0 | \mathbf{p} \rangle$ 取任意复数值都无关紧要. 我们这样确定这一常数.

在连续谱 $\sigma(\hat{\mathbf{x}})$ 和 $\sigma(\hat{\mathbf{p}})$ 上, 我们展开 $\langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle$, 得到

$$\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = \langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle = \int d\mathbf{p} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{x}' \rangle, \quad (3.55)$$

代入

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \exp(\frac{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{\hbar}) \langle 0 | \mathbf{p} \rangle \text{ 和 } \langle \mathbf{p} | \mathbf{x}' \rangle = \exp(-\frac{i\mathbf{x}' \cdot \mathbf{p}}{\hbar}) \langle \mathbf{p} | 0 \rangle,$$

右式变为

$$\| \langle 0 | \mathbf{p} \rangle \|^2 \int d\mathbf{p} \exp(\frac{i\mathbf{p}(\mathbf{x} - \mathbf{x}')}{\hbar}) = \| \langle 0 | \mathbf{p} \rangle \|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (3.56)$$

这就确定了 $\langle 0 | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}$. 那么我们就得到了一般的波函数:

$$\psi(\mathbf{x})_{\mathbf{p}} = \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(\frac{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{\hbar}). \quad (3.57)$$

事实上, 这就是 de Broglie 波. 同时我们也证实了为何要取无穷小平移算符的标量系数为 $-i$. 这样, 代入 (3.37), 我们得到坐标表象下动量算符在波函数上的作用:

$$\hat{\mathbf{p}} \exp(\frac{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{\hbar}) = \mathbf{p} \exp(\frac{i\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}}{\hbar}). \quad (3.58)$$

符合这种作用性质的最简单的算符形式, 也就一目了然:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla. \quad (3.59)$$

由于三个一维动量子空间满足直和关系

$$\left(\sum_{p_1} \mathbb{C} |p_1\rangle \right) \oplus \left(\sum_{p_2} \mathbb{C} |p_2\rangle \right) \oplus \left(\sum_{p_3} \mathbb{C} |p_3\rangle \right) = \mathcal{H},$$

我们得到动量算符的对易关系:

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0. \quad (3.60)$$

我们还可以考虑动量表象种坐标算符和动量算符. 在动量表象下, 我们先有动量算符

$$\hat{\mathbf{p}} |\mathbf{p}\rangle = \mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle. \quad (3.61)$$

跟先前的处理方法一样, 我们在 $\hat{\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x} |\mathbf{x}\rangle$ 中插入单位算符 $\mathbb{I} = \int d\mathbf{p} |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}|$, 得到

$$\int d\mathbf{p} \hat{\mathbf{x}} \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle |\mathbf{p}\rangle = \int d\mathbf{p} \mathbf{x} \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle |\mathbf{p}\rangle. \quad (3.62)$$

我们已知 de Broglie 波 $\langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(-\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar})$, 于是自然得到坐标算符在动量表象下的形式:

$$\hat{\mathbf{x}} = i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}. \quad (3.63)$$

事实上, 有了 de Broglie 波 $\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar})$, 我们可以看到, 对任意一个坐标表象的波函数

$$\langle \mathbf{x} | \alpha \rangle = \psi(\mathbf{x})_{\alpha},$$

我们可以将其展开为

$$\psi(\mathbf{x})_{\alpha} = \int d\mathbf{p} \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \alpha \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\mathbf{p} \exp(\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}) \phi(\mathbf{p})_{\alpha}. \quad (3.64)$$

同理,

$$\phi(\mathbf{p})_{\alpha} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\mathbf{x} \exp(-\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}{\hbar}) \psi(\mathbf{x})_{\alpha}. \quad (3.65)$$

也即 $\psi(\mathbf{x})_{\alpha} \leftrightarrow \phi(\mathbf{p})_{\alpha}$ 构成一对 Fourier 变换!

有了坐标算符和动量算符, 我们可以构造角动量算符. 在经典力学中, 我们知道角动量的定义为

$$\mathbf{J} = \mathbf{x} \times \mathbf{p} = x_i p_j \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k. \quad (3.66)$$

那么, 它在量子力学中的定义就是经典定义的算符化:

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}} = \hat{x}_i \hat{p}_j \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k. \quad (3.67)$$

在坐标表象下, 角动量就是

$$\hat{\mathbf{J}} = x_i (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}) \varepsilon^{ijk} \mathbf{e}_k. \quad (3.68)$$

各分量分别为

$$\hat{J}_i = -i\hbar (x_j \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial x_j}), \hat{J}_j = -i\hbar (x_k \frac{\partial}{\partial x_i} - x_i \frac{\partial}{\partial x_k}), \hat{J}_k = -i\hbar (x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - x_j \frac{\partial}{\partial x_i}). \quad (3.69)$$

其对易关系为：

$$\begin{aligned}
[\hat{J}_i, \hat{J}_j] &= \left[-i\hbar \left(x_j \frac{\partial}{\partial x_k} - x_k \frac{\partial}{\partial x_j} \right), -i\hbar \left(x_k \frac{\partial}{\partial x_i} - x_i \frac{\partial}{\partial x_k} \right) \right] \\
&= -\hbar^2 \left(\left[x_j \frac{\partial}{\partial x_k}, x_k \frac{\partial}{\partial x_i} \right] - \left[x_j \frac{\partial}{\partial x_k}, x_i \frac{\partial}{\partial x_k} \right] - \left[x_k \frac{\partial}{\partial x_j}, x_k \frac{\partial}{\partial x_i} \right] + \left[x_k \frac{\partial}{\partial x_j}, x_i \frac{\partial}{\partial x_k} \right] \right) \\
&= -\hbar^2 \left(x_j \left[\frac{\partial}{\partial x_k}, x_k \right] \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[x_k, \frac{\partial}{\partial x_k} \right] x_i \right) \\
&= -i\hbar \left(x_j \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \right) - \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right) x_i \right) \\
&= i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k.
\end{aligned} \tag{3.70}$$

事实上, 对易关系 $[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k$ 就使得 $(\hat{\mathbf{J}}, [\cdot, \cdot])$ 构成了李代数 $\mathfrak{so}(3)$, 其对应的对称群是李群 $\mathbf{SO}(3)$, 它正是三维旋转群. 在量子力学中, 角动量有着至关重要的地位. 关于角动量算符的其他更多性质以及自旋角动量的算符形式, 我们留在角动量理论一章中继续讨论.

能量算符 \hat{H} 就是 Hamiltonian 的算符化. 根据 Noether 定理, 我们知道能量就是无穷小时间平移生成元. 构造无穷小平移算符 $\mathcal{T}(dt) = \mathbb{I} - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar}$, 指数映射 \exp 将其映射为时间演化算符

$$\mathcal{T}(t) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}\right). \tag{3.71}$$

考虑 t_1 时刻的 Hilbert 空间 $\mathcal{H}(t_1)$ 和 t_2 时刻的 Hilbert 空间 $\mathcal{H}(t_2)$. 则对于两个裸态 $|\psi(t_1)\rangle \in \mathcal{H}(t_1), |\psi(t_2)\rangle \in \mathcal{H}(t_2)$, 我们在同一坐标表象下观测, 并令 $|\psi(t_1)\rangle, |\psi(t_2)\rangle$ 都是坐标 \mathbf{x} 的同一本征态. 这样, 二者同属于由同一组基 $\{|\mathbf{x}\rangle\}$ 张成的大 Hilbert 空间 $\mathcal{H}(t_1) + \mathcal{H}(t_2)$ 中. 现在考虑二者的时间演化, 我们有

$$\mathcal{T}(t_2 - t_1) |\psi(t_1)\rangle = \exp\left(-\frac{i\hat{H}(t_2 - t_1)}{\hbar}\right) |\psi(t_1)\rangle = |\psi(t_2)\rangle. \tag{3.72}$$

考虑无穷小时间平移, 令 $t_1 = t, t_2 = t_1 + dt = t + dt$. 这样就有

$$\left(\mathbb{I} - \frac{i\hat{H}dt}{\hbar}\right) |\psi(t)\rangle = |\psi(t + dt)\rangle, \tag{3.73}$$

整理后得

$$\hat{H} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle. \tag{3.74}$$

这样就得到能量算符的表示: $\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$.

在这里, 需要仔细探讨一下量子力学中关于时间的问题. 在量子力学 (非量子场论) 中, 我们的时空观仍然是经典的 Newton 时空观, 在这里时间和空间的地位并不对称. 时间具有特殊的地位——它不能像坐标一样被提升为算符, 而仅能够充当一种“标记”. 我们讨论时间演化, 和空间演化并不同: 空间演化天生就可以在同一个 Hilbert 空间中在坐标表象下完成; 但是, 不存在一个时间表象, 时间演化事实上是在不同的 Hilbert 空间中完

成的, 只不过我们可以将不同时刻的不同 Hilbert 空间加起来, 构成一个大 Hilbert 空间, 但在这里时间依旧无法构成一个“表象”, 因为没有时间算符. 这一问题的根源, 源自于初等量子力学所采取的时空地位不对称的 Hamilton 动力学体系的时空观. 在 Hamilton 动力学体系中, 我们将运动归结为相空间上的几何学, 在这里地位对称的不是 \mathbf{x} 和 t , 而是 \mathbf{x} 和 \mathbf{p} . 时间在相空间下只是一个动力学参数. 给定一个由 t 参数化的微分同胚群 φ_t , 它绝热地作用在相空间上, 生成了一条由 Hamiltonian 决定的保辛动力学曲线, 其动力学演化方程满足正则方程. 在这样的时空观下, 量子力学中时间并不能被提升为一个算符.

如果我们尝试将时空对称化, 也就是将其相对论化? 直接了当的做法将导出物理上的问题. 我们采取场论的四维语言, 将 4-动量算符化 (采用自然单位制):

$$\hat{p}_\alpha = (\hat{E}, \hat{\mathbf{p}}) = (i\partial_t, -i\nabla). \quad (3.75)$$

为了给出一个标量算符, 将 4-动量缩并:

$$\hat{p}_\alpha \hat{p}^\alpha = -(\partial_t^2 - \nabla^2) = \square^2. \quad (3.76)$$

根据 Einstein 相对论关系: $E^2 = p^2 + m^2$, 于是将能量平方算符作用在量子态上, 得到了一个相对论性的动力学方程:

$$(\square^2 + m^2) |\psi\rangle = E^2 |\psi\rangle. \quad (3.77)$$

这就是著名的 Klein-Görden 方程, 在量子场论中会说明, K-G 方程只能够处理零自旋场, 对于非零自旋场, 会出现负概率的非物理现象. 要处理非零自旋场, 需要应用 Dirac 方程, 这将在后续章节中加以说明. 在时空对称的量子场论中, 我们将波函数视为处于某一时空点上的场算符——在这里坐标和时间都降为了标记. 但对于时间算符是否真的可以构造, 还需要进一步思考.

关于能量算符的动力学方程

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle, \quad (3.78)$$

被我们规定为一条公理. 它就是 Schrödinger 方程. 这样, 我们得到量子力学的第四条公理:

公理 4. 微观系统随时间演化的规律由 Schrödinger 方程给出, 它的一般形式为

$$\hat{H} |\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle.$$

简并

具有相同本征值的不同本征态的集合称为**简并态 (Degenerate States)**. 设 $q \in \sigma(Q)$ 为 Q 的本征值, 其对应的本征态集合为 $\{|q\rangle\}$, 则 $\mathcal{G}(q) = \{|q\rangle\} \subset \mathcal{H}$ 构成了 \mathcal{H} 的一个子

空间, 它是 \mathcal{Q} 不变的:

$$\mathcal{Q}\mathcal{G}(q) \subset \mathcal{V}(q). \quad (3.79)$$

$g = \dim \mathcal{G}(q)$ 称为 \mathcal{Q} 的简并度. 根据 Schmidt 正交化, 我们总可以将 $\mathcal{G}(q)$ 中的特征向量基 $\{|q\rangle\}$ 正交化.

通常, 我们是在能量表象下去考虑简并态, 这往往蕴含了系统的对称性.⁷ 根据 Schrödinger 方程, 我们可以导出一些关于简并性质的结论. 这将在量子动力学一章展开. 在……

密度算符和量子统计

事实上, 上面我们谈论的都是那些完全确定的 Hilbert 空间中的态. 也就是说, 我们直到这个态本身的裸形式, 并在不同的表象下观测它得到不同的本征态. 这样的能用 Hilbert 空间中一个裸态 $|\psi\rangle$ 完全确定的态, 称为**纯态 (Pure State)**.

但实际系统中, 我们并不对一个量子系统 (尤其是多体系统) 完全了解. 我们往往只通过观测得知, 该系统的量子态处于某些态的概率是多大. 基于此, 如果系统的态不能用 Hilbert 空间中的一个裸态 $|\psi\rangle$ 完全确定, 而是分别以 p_i 的概率处于 $|\psi_i\rangle$ 上, 其中 $\{|\psi_i\rangle\}$ 只是一组纯态集合, 那么这样的态称为**混态 (Mixed State)**.

我们这样来严格区分纯态和混态. 定义系统的**密度算符 (Density Operator)**

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (3.80)$$

其在某一表象下对应的表示为密度矩阵: $(\rho_{ij}) = \langle i | \hat{\rho} | j \rangle$.

对于纯态系统, 只由一个确定的态 $|\psi\rangle$ 描述系统, 则其密度算符就是 $\hat{\rho} = |\psi\rangle \langle \psi|$. 对于混态系统, $p_i \leq 1, \sum_i p_i = 1$, 其密度算符就是一般的表达式 $\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$. 下面考虑如何利用密度算符来刻画系统的物理信息. 先考虑纯态系统. 对于一个纯态系统的力学量 \hat{Q} , 其平均值为

$$\bar{Q} = \langle \psi | \hat{Q} | \psi \rangle = \sum_{\alpha} \langle \psi | \hat{Q} | \alpha \rangle \langle \alpha | \psi \rangle = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \psi \rangle \langle \psi | \hat{Q} | \alpha \rangle = \sum_{\alpha} \langle \alpha | \hat{\rho} \hat{Q} | \alpha \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{Q}). \quad (3.81)$$

我们运用密度算符来处理量子统计问题. 在经典统计中, 通过考察系统的相空间 $\Gamma = \{p_i, q^i\}$, 在其上定义 Hamiltonian H , 给出正则运动方程 $\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q^i}; \dot{q}^i = \frac{\partial H}{\partial p_i}$, 和力学量的演化方程 $\dot{Q} = \{Q, H\}$. 继而, 给定态密度函数 $D(E) = D(p_i, q^i, t)$, 我们有力学量平均值

$$\bar{Q} \propto \int Q D(p_i, q^i, t) dp dq. \quad (3.82)$$

对于相空间上的一系综, 对应于一个配分函数 $Z = \sum \exp(-\beta H)$. 通过配分函数, 可以得到系统几乎全部的热力学信息.

⁷详见对称性理论一章.

而对于量子统计, 我们的状态空间变成了 Hilbert 空间 $\mathcal{H} = \{|\psi\rangle\}$, 纯态系统和混态系统分别对应纯态系综和混态系综. 量子系综的统计工作是一个二重统计: 我们既要对量子概率分布进行统计, 也要对多体概率分布再做一次统计. 这一点将在 Hilbert 空间上给定密度算符 $\hat{\rho}$ 实现, 它满足

1. 自伴性: $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$;
2. 么迹性: 在任意表象 $|\alpha\rangle$ 下, $\text{Tr}\hat{\rho} = \sum_\alpha \sum_i p_i \langle\alpha|\psi_i\rangle \langle\psi_i|\alpha\rangle = \sum_i p_i \langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1$;
3. 对于纯态, 有幂等性: $\text{Tr}\hat{\rho}^2 = \sum_\alpha \langle\alpha|\psi\rangle \langle\psi|\psi\rangle \langle\psi|\alpha\rangle = 1 = \text{Tr}\hat{\rho}$;
4. 对于混态, 无幂等性:

$$\begin{aligned}\text{Tr}\hat{\rho}^2 &= \sum_\alpha \langle\alpha| \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \sum_j p_j |\psi_j\rangle \langle\psi_j| |\alpha\rangle \\ &= \sum_i \sum_j p_i p_j |\langle\psi_i|\psi_j\rangle|^2 \\ &\leq 1 = \text{Tr}\hat{\rho}.\end{aligned}$$

我们有力学量平均值 $\bar{Q} = \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{Q})$, 熵算符 $\hat{S} = -k_B \ln \hat{\rho}$. 在一般的正则系综中, 密度算符的显式为

$$\hat{\rho} = \frac{\exp(-\beta\hat{H})}{\text{Tr}[\exp(-\beta\hat{H})]}, \quad (3.83)$$

其中 $Z = \text{Tr}[\exp(-\beta\hat{H})]$ 为配分函数.

密度算符也可以表征量子系统的动力学性质. 我们考虑对密度算符的时间演化:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \sum_i p_i \frac{d}{dt}(|\psi_i\rangle \langle\psi_i|) = \sum_i p_i \left(\frac{d}{dt} |\psi_i\rangle \langle\psi_i| + |\psi_i\rangle \frac{d}{dt} \langle\psi_i| \right). \quad (3.84)$$

利用 Schrödinger 方程与 \hat{H} 的自伴性, 我们有 $\frac{d}{dt} |\psi_i\rangle = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} |\psi_i\rangle$ 和 $\frac{d}{dt} \langle\psi_i| = -\frac{1}{i\hbar} \langle\psi_i| \hat{H}$. 插入上式, 得到:

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \sum_i p_i \hat{H} |\psi_i\rangle \langle\psi_i| - \frac{1}{i\hbar} \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle\psi_i| \hat{H} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (3.85)$$

在量子统计语境下, 上述方程可以直接代替 Schrödinger 方程.

在量子统计中, 我们研究的是大量粒子组成的大 Hilbert 空间. 然而, 我们不能再显然地将系统的量子态写出了, 在非纠缠的情况下, 它只能表示成每个粒子 Hilbert 空间的直积 $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \cdots \otimes \mathcal{H}_N$ 中的多体量子态

$$|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_N\rangle. \quad (3.86)$$

由前面的张量积部分的定理, Hilbert 空间的张量积关于张量乘积 \otimes 构成了一个张量代数. 我们总可以将张量代数写为对称化和反对称化的直和:

$$\text{Sym} |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle \propto \sum_{\sigma \in S_N} |\psi_{\sigma(1)}\rangle \otimes |\psi_{\sigma(2)}\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_{\sigma(N)}\rangle; \quad (3.87)$$

$$\text{Alt } |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle \propto \sum_{\sigma \in S_N} \text{sgn}(\sigma) |\psi_{\sigma(1)}\rangle \otimes |\psi_{\sigma(2)}\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_{\sigma(N)}\rangle; \quad (3.88)$$

在这里写成 \propto 的原因是还差一个归一化系数（这将在二次量子化一节给出）； $\sigma \in S_N$ 为 N 阶置换群 S_N 中的一个置换。从而

$$|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle = \text{Sym } |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle \oplus \text{Alt } |\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle. \quad (3.89)$$

在量子多体理论中，我们不在乎每个粒子所处的量子态是什么，而在乎每一个量子态上有多少个粒子。根据量子态本体论的 Copenhagen 诠释，我们相信这一论断是正确的。如果我们任意调换两个粒子的态，即作用一个置换算符 $\hat{\sigma}$ 上去，我们希望态只有两种变换可能：对称变化 $\hat{\sigma} |\psi\rangle = + |\psi\rangle$ 和反对称变化 $\hat{\sigma} |\psi\rangle = - |\psi\rangle$ 。前一种对称态对应着**玻色子 (Boson)**，而后一种反对称态对应着**费米子 (Fermion)**。因此同一种粒子的调换不会改变系统的态本身。于是，我们得到量子力学的最后一个公理：

公理 5. 同一种微观粒子彼此之间是全同的，无法进行区别。

全同粒子假设的意义想必我们已经在统计物理中见到了，对于任何一个分布，我们都需要将配分函数除以粒子之间可能的排列数，这就是全同粒子假设的要求，如果不这样，将导出著名的 Gibbs 佯谬。

另外，对于费米子，由于其反对称性易知，任意一个态上至多只有一个费米子存在。因为如果有超过两个费米子处于同一个态，那么对换之后并不会改变量子态，于是就有 $|\psi\rangle = - |\psi\rangle$ ，只有平凡的零态满足条件。由此也得出了著名的 **Pauli 不相容原理**：

原理 3 (Pauli). 任意两个费米子不能处于同一个量子态上。

如果任意给定一个 N 体态，我们希望衡量其纠缠，那么仿照先前在纠缠态一节中所做的那样，将这个 N 体态展开：

$$|\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N\rangle = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_N} \Psi_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle = \Psi^{i_1 i_2 \dots i_N} \bigotimes_{j=1}^N |i_j\rangle. \quad (3.90)$$

我们能否也对其做 N 阶 Schmidt 分解，从而将 N 阶张量波函数分解为：

$$\psi^{i_1 i_2 \dots i_N} = \sum_{j_1, j_2, \dots, j_N} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N U_{i_{j_1} i_{j_2} \dots i_{j_k}}^{i_1 i_2 \dots i_l} \Lambda_{i_{j_1} i_{j_2} \dots i_{j_k} i_{j_{k+1}} i_{j_{k+2}} \dots i_{j_N}} V_{i_{j_{k+1}} i_{j_{k+2}} \dots i_{j_N}}^{i_{l+1} i_{l+2} \dots i_N} \quad (3.91)$$

呢？这是我的一个猜测。听说，虽然存在高阶 Schmidt 分解的技术，但却比我们想象的复杂。通常在计算机中处理的办法是不断将高阶张量缩成矩阵然后再采用通常的矩阵 Schmidt 分解，更一般的做法则是张量网络。

在张量网络理论中，张量本身用图来表示。下面是一些常见的张量图记号⁸：

⁸图源：<https://tensornetwork.org/>

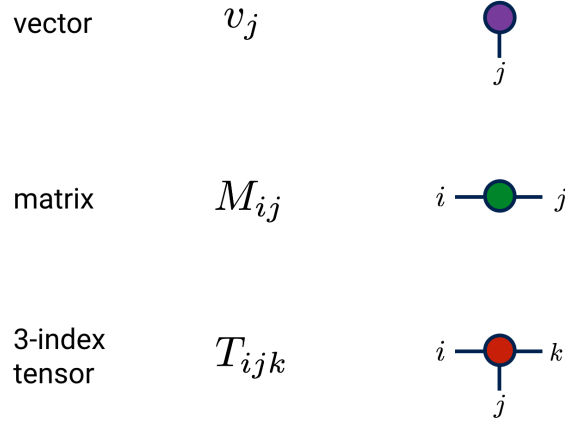


Figure 3.2: 基本表示

在这里, 一个圆表示一个张量, 伸出的腿的根数表示其阶数.

$$\begin{aligned}
 \text{---} \text{green circle} \text{---} \text{purple circle} &= \sum_j M_{ij} v_j \\
 \text{---} \text{green circle} \text{---} \text{orange circle} &= A_{ij} B_{jk} = AB \\
 \text{---} \text{red circle} \text{---} \text{blue circle} &= A_{ij} B_{ji} = \text{Tr}[AB]
 \end{aligned}$$

Figure 3.3: 运算表示 1

张量同指标的缩并就对应着相对腿的同向连接, 而求迹的操作则对应于最外侧相同腿的连接并形成一个零阶圈图.

$$\begin{aligned}
 \text{---} \text{blue circle} \text{---} \text{red circle} &= \sum_k T_{ijkl} V_{km} \\
 \text{---} \text{blue circle} \text{---} \text{cyan circle} \text{---} \text{green circle} \text{---} \text{blue circle} &= \sum_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3} A_{\alpha_1}^{s_1} B_{\alpha_1 \alpha_2}^{s_2} C_{\alpha_2 \alpha_3}^{s_3} D_{\alpha_3}^{s_4}
 \end{aligned}$$

Figure 3.4: 运算表示 2

可以看到, 最后一张图其实就可以推广到任意一个多体态上. 利用张量网络的符号和运算规则, 我们能够很快地将多体态的性质体现出来, 然而, 这些内容超出了我们目前的认知, 可能会在最后稍微谈谈.

3.2.3 C^\dagger -代数 (选)

我们现在给出以上内容的一个更高视角的阐释. 事实上, 上述介绍的量子力学的数学结构可以被总结为 C^\dagger -代数理论. 本节内容为选读内容, 为对数学物理更感兴趣的读者准备.

C^\dagger -代数

定义 12 (\dagger -代数). 设 \mathfrak{A} 是 \mathbb{C} 上的向量空间. (\mathfrak{A}, \dagger) 称为一个 \dagger -代数, 如果 $\dagger: \mathfrak{A} \rightarrow \mathfrak{A}$ 满足, 对 $\forall Q, S, T \in \mathfrak{A}, \forall \lambda, \mu \in \mathbb{C}$ 有

1. \mathfrak{A} 关于 \dagger 封闭;
2. $Q^{\dagger\dagger} = Q$;
3. $(\lambda S + \mu T)^\dagger = \lambda^* S^\dagger + \mu^* T^\dagger$;
4. $(ST)^\dagger = T^\dagger S^\dagger$.

定义 13 (Banach \dagger -代数). 一个 \dagger -代数 (\mathfrak{B}, \dagger) 是一个 Banach \dagger -代数, 如果在它之上赋有完备的范数 $\|Q\| = \|Q^\dagger\|, \forall Q \in \mathfrak{B}$.

定义 14 (C^\dagger -代数). 一个 Banach \dagger -代数 (\mathfrak{C}, \dagger) 是一个 C^\dagger -代数, 如果在它之上有 $\|Q^\dagger Q\| = \|Q\|^2, \forall Q \in \mathfrak{C}$.

定理 14. 对于 C^\dagger 代数 (\mathfrak{C}, \dagger) 上的一酉元 U , 有诱导的自同构 $\text{Ad } U: \mathfrak{C} \rightarrow \mathfrak{C}, Q \mapsto UQU^\dagger$. 在这一自同构下, Q 和 UQU^\dagger 酉等价. 酉等价的算符的谱相同.

定理 15 (C^\dagger -代数的表示). 一个 C^\dagger -代数 \mathfrak{A} 可由一个 Hilbert 空间 \mathcal{H} 和 \dagger -同态 $\varphi: \mathfrak{A} \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ 组成的代数 (\mathcal{H}, φ) 表示. 该表示是不可约的, 当且仅当 φ 是不可约的.

知道了 C^\dagger -代数的表示定理, 我们就将问题归结到了 Hilbert 空间和其上的算符空间上. 其余关于 Hilbert 空间的更高等的种种性质, 在此不一一列举, 读者可参考 Gerard J. Murphy 的《 C^* -Algebra and Operator Theory》一书.

迹类

量子力学中, 我们通常要研究一个算符的迹. $\exp \beta \hat{H}$ 的迹给出了配分函数, $\hat{\rho} \hat{Q}$ 的迹给出了统计力学量的平均值. 现在给出数学上算符迹的定义和性质.

定义 15 (迹). 令 \mathcal{H} 是一个可分的 Hilbert 空间, $\{|\alpha\rangle\}$ 是它的一组正交归一基. 则对于任意正定算符 $Q \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, 它的迹 (Trace) 被定义为

$$\text{Tr } Q = \sum_{\alpha} \langle \alpha | Q | \alpha \rangle.$$

迹满足如下性质:

定理 16. 对 $\forall \mathcal{A}, \mathcal{B} \in \mathfrak{L}(\mathcal{H})$,

1. $\text{Tr}(\mathcal{A} + \mathcal{B}) = \text{Tr}\mathcal{A} + \text{Tr}\mathcal{B}$;
2. $\text{Tr}(\lambda\mathcal{A}) = \lambda\text{Tr}\mathcal{A}$;
3. 对于任意么正算符 \mathcal{U} , $\text{Tr}(\mathcal{U}\mathcal{A}\mathcal{U}^\dagger) = \text{Tr}\mathcal{A}$.

第三条定理告诉我们, 表象变换不改变算符的迹, 也即算符的迹是酉对称的.

定义 16 (迹类算符). 定义算符 \mathcal{Q} 的绝对值为 $|\mathcal{Q}| = \sqrt{\mathcal{Q}^\dagger \mathcal{Q}}$, 则 $\text{Tr}|\mathcal{Q}| < \infty$ 的算符被称为**迹类算符** (Trace Class Operator). 全体迹类算符构成一个**迹类** (Trace Class), 记为 \mathfrak{J}_1 .

定理 17. \mathfrak{J}_1 构成 $\mathfrak{L}(\mathcal{H})$ 中的一个 \dagger -理想. 即

1. \mathfrak{J}_1 构成一个向量空间;
2. 如果 $\mathcal{A} \in \mathfrak{J}_1, \mathcal{B} \in \mathfrak{L}(\mathcal{H})$, 那么 $\mathcal{AB} \in \mathfrak{J}_1, \mathcal{BA} \in \mathfrak{J}_1$.

迹类全体构成一个 \dagger -理想表明, 在计算力学量的平均值时, 即便某个力学量是非迹类的, 或者说通常是无界的, 那么我们依旧可以通过作用密度算符的方式去将其迹类化, 我们依旧可以算出其平均值.

复射影空间 $\mathbb{C}P^\infty$ 和其拓扑性质

事实上, 在规定波函数相位系数 (在后面会看到, 这就是规定一个规范) 的前提下, 我们很容易地发现量子态和 Hilbert 空间中的向量并不是一一对应的, 而是和其中的任意一条射线一一对应, 因为两个量子态矢差一个任意标量系数都表征同一个量子态. 为了尽可能地建立一个双射, 我们希望将 Hilbert 空间转化成另一个空间, 这就是无穷维复射影空间 $\mathbb{C}P^\infty$.

由 Hilbert 空间诱导的复射影空间被定义为:

定义 17 ($\mathbb{C}P^\infty$). 在一个 Hilbert 空间 \mathcal{H} 上定义等价关系: $\sim: |\psi\rangle \sim |\phi\rangle \Leftrightarrow |\phi\rangle = \lambda|\psi\rangle, \lambda \in \mathbb{C}$, 则商空间 $\mathcal{H} \setminus \{0\} / \sim$ 是该 Hilbert 空间诱导的无穷维复射影空间 $\mathbb{C}P^\infty$.

从几何上来说, Hilbert 空间中的任意一条射线都被映射成了 $\mathbb{C}P^\infty$ 中的一个点.

Hopff 纤维化, Fubini-度量. 有待补充.

3.3 量子力学公理系统

至此, 我们得到了现代量子力学的五条公理:

1. 物理状态由 Hilbert 空间中的向量表示, 它满足态叠加原理.
2. 可观测的力学量由 Hilbert 空间上的自伴算符表示.
3. 对系统进行一次测量, 系统的状态立刻坍缩到某一个本征态上, 测量值即为该本征态对应的本征值. 之后再行测量, 系统保持在该本征态上.
4. 微观系统随时间演化的规律由 Schrödinger 方程给出, 它的一般形式为

$$\hat{H} |\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle.$$

5. 同一种微观粒子彼此之间是全同的, 无法进行区别.

同时我们还有概率诠释: 波函数的模平方表示态的概率密度. 当然, 我们只是根据过往发展起来的历史, 运用更高等的数学物理方法导出了这个公理系统, 但这并不意味着我们一定要拘泥于它. 事实上, 关于量子力学底层的研究从未停止, 我们在这里只是按照 Copenhagen 学派所建立起来的一种诠释进行梳理.

3.3.1 Schrödinger 猫态和退相干理论

开放量子系统. 有待补充.

3.3.2 测不准原理

现考虑任何两个 $\mathfrak{L}(\mathcal{H})$ 上的力学算符 \hat{A} 和 \hat{B} . 根据概率诠释, 我们知道 \hat{A} 和 \hat{B} 的测量方差分别是

$$\begin{aligned}\langle(\Delta A)^2\rangle &= \overline{(\hat{A} - \bar{A})^2} = \overline{\hat{A}^2} - \bar{A}^2, \\ \langle(\Delta B)^2\rangle &= \overline{(\hat{B} - \bar{B})^2} = \overline{\hat{B}^2} - \bar{B}^2.\end{aligned}$$

考察任意两个态 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$, 定义误差算符 $\Delta\hat{A} := \hat{A} - \bar{A}\mathbb{I}$, $\Delta\hat{B} := \hat{B} - \bar{B}\mathbb{I}$, 并定义

$$|\alpha'\rangle = \Delta\hat{A} |\alpha\rangle, |\beta'\rangle = \Delta\hat{B} |\beta\rangle. \quad (3.92)$$

根据 Cauchy-Schwartz 不等式, 我们有

$$\|\alpha'\| \|\beta'\| \geq |\langle\alpha'|\beta'\rangle| \Leftrightarrow \langle(\Delta A)^2\rangle \langle(\Delta B)^2\rangle \geq |\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle|. \quad (3.93)$$

我们将算符 $\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}$ 写成其对易子和反对易子的和:

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] + \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}. \quad (3.94)$$

又注意到,

$$\begin{aligned} [\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] &= [\hat{A} - \overline{A}\mathbb{I}, \hat{B} - \overline{B}\mathbb{I}] \\ &= [\hat{A}, \hat{B}] - [\hat{A}, \overline{B}\mathbb{I}] + [\hat{B}, \overline{A}\mathbb{I}] \\ &= [\hat{A}, \hat{B}], \end{aligned}$$

并且 $[\ , \]$ 是反自伴的 $\Rightarrow \langle [\ , \] \rangle$ 是纯虚数, 同理 $\{ \ , \ \}$ 是自伴的 $\Rightarrow \langle \{ \ , \ \} \rangle$ 是纯实数, 结合起来就有

$$|\langle \Delta\hat{A}, \Delta\hat{B} \rangle|^2 = \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2 + \frac{1}{4} |\langle \{ \Delta\hat{A}, \Delta\hat{B} \} \rangle|^2, \quad (3.95)$$

从而我们就得到了著名的 Heisenberg 测不准原理:

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|^2. \quad (3.96)$$

这一不等式表明, 如果 A, B 两个力学量是耦合的, 即其是非对易的, 那么我们将永远无法同时测准它们两个的值. 如果其中一个的测量方差趋于零, 另一个则必将趋于无穷大. 以坐标和动量为例, 我们知道 $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}\mathbb{I}$, 因此对在同一个方向上的坐标和动量的测量将永远有测不准关系:

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (3.97)$$

3.3.3 Schrödinger 方程

根据第四条公理, 一个 (非相对论性的) 量子系统态的含时演化由 Schrödinger 方程给出:

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle.$$

我们在两边左乘 $\langle \mathbf{x}|$ 将裸态表示为坐标表象下的波函数 $\psi(\mathbf{x}, t)$:

$$\langle \mathbf{x}|\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t), \quad (3.98)$$

对于左边, 采用通常取到的 Hamiltonian: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}})$, 它在坐标表象下的表示显然为

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}|\hat{H}|\psi\rangle &= \langle \mathbf{x}|\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}})|\psi\rangle \\ &= \left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla)^2 + V(x) \right] \langle \mathbf{x}|\psi\rangle \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m} + V(x) \right] \psi(\mathbf{x}, t). \end{aligned}$$

这样我们就得到了坐标表象下的 Schrödinger 方程:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x) \right] \psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t). \quad (3.99)$$

这个方程是一个二阶非齐次偏微分方程, 对于大部分物理体系, 就算是单体体系, 使用纯分析的手段求解起来也异常困难. 事实上, 我们除了氢原子和谐振子之外, 将无法精确处理几乎所有别的真实物理系统.

对于一个自由粒子, $V(x) \equiv 0$, Schrödinger 方程的形式就是最简单的

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{x}, t), \quad (3.100)$$

简单的偏微分方程理论告诉我们, 它的解的形式就是

$$\psi(\mathbf{x}, t) \propto \exp(i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)/\hbar). \quad (3.101)$$

这是一个平面自由波的形式, 对其“归一化”(事实上, 我们是将其归一成立 δ 函数, 这表明自由粒子的平面波是不能归一化的, 在物理上这意味着, 量子力学意义下的自由粒子并不真实存在, 这将在后面更进一步说明), 我们显然再次得到在形式理论中规定的 de Broglie 波的形式, 只不过这一次它含有了时间项: $\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp(i(\mathbf{p} \cdot \mathbf{x} - Et)/\hbar)$.

根据概率诠释, 我们设 $\rho(\mathbf{x}, t) = \|\psi(\mathbf{x}, t)\|^2 = \psi^*\psi$ 为波函数对应的概率密度, 我们将看到利用 Schrödinger 方程可以导出量子力学的概率密度守恒方程(连续性方程). 首先对 ρ 求时间导数, 我们得到

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\psi + \psi^*\frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (3.102)$$

根据 Schrödinger 方程, 我们有

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V]\psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V]\psi^*.$$

插入原方程:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} &= -\frac{1}{i\hbar}[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V]\psi^*\psi + \frac{1}{i\hbar}[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V]\psi\psi^* \\ &= \frac{\hbar}{2mi}(\psi\nabla^2\psi^* - \psi^*\nabla^2\psi) \\ &= \nabla \cdot \left(\frac{\hbar}{2mi}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi)\right). \end{aligned}$$

如果我们定义概率流密度: $\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*) = \frac{\hbar}{2m}\text{Im}(\psi^*\nabla\psi)$, 则就得到了概率密度守恒方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (3.103)$$

Chapter 4

量子动力学

在确立了量子力学的基本数学结构之后, 我们可以说具有了一个静态的、但却异常丰富且有待进一步开发的框架(形式理论), 来供我们将具体的物理问题填充进去. 这些具体的物理问题, 和经典力学中所面对的一样, 都无非是考察一个系统的演化. 这也就是量子动力学要处理的问题. 在上一节, 我们已经发现, 量子力学的核心问题就是去求解关于系统的 Schrödinger 方程. 不过, 在导出 Schrödinger 方程时, 我们也提到了时间演化算符和作为其生成元的 Hamiltonian 的特殊性. 至少在非相对论的量子力学中, 时空的地位不是平等的. 严格地说, 我们总是考察每一个等时面上的 Hilbert 空间, 而这些 Hilbert 空间彼此之间的联系(基的转换关系)由时间演化算符或者系统的 Hamiltonian 确定. 在这一节中, 我们将在这一意义上建立基础的量子动力学. 在这里, 我们主要有两大不同绘景, Schrödinger 绘景和 Heisenberg 绘景, 分别对应量子态动力学和算符动力学. 从数学上看, 这实际上就是向量空间中向量的转动到底是被动的还是主动的.

4.1 Schrödinger 绘景

Schrödinger 绘景是一个量子态动力学绘景. 在这里, 守恒的力学量算符将一直不会随时间发生变化, 而量子态将沿着等时面不断地变化到不同的 Hilbert 空间中, 或者, 在等时面的“正上方”来看, 量子态在由同一个固定基底所描述的 Hilbert 空间中不断地转动. 变换方式如下:

$$|\psi\rangle \rightarrow \mathcal{T}(t) |\psi\rangle, \quad (4.1)$$

这里 $\mathcal{T}(t) = \exp(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar})$ 就是时间演化算符. 这一变化的微分动力学方程即为 Schrödinger 方程:

$$\hat{H} |\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle. \quad (4.2)$$

现在, 用同一组能量本征态组成的基底 $\{|\alpha\rangle\}$ 展开 $|\psi\rangle$;

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\alpha\rangle, \quad (4.3)$$

变化之后的态就是：

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \exp(-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}) |\alpha\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \exp(-\frac{iE_{\alpha}t}{\hbar}) |\alpha\rangle. \quad (4.4)$$

因此我们明确了量子态含时演化的展开系数，

4.1.1 波函数

4.1.2 束缚态与散射态, 势阱

无限深方势阱

Delta 势阱

有限深方势阱

4.1.3 周期势场

4.1.4 中心势场

4.2 Heisenburg 绘景

4.2.1 传播子

4.2.2 路径积分

4.3 Dirac 绘景

4.4 电磁理论的量子力学

4.4.1 Zeeman 效应

4.4.2 Landau 能级

4.4.3 AB 效应

Appendix A

Tables

Package	Purpose
<code>amsmath</code>	Mathematical typesetting
<code>amsthm</code>	Mathematical environments for theorems, proofs, etc.
<code>booktabs</code>	Weighted rules for tables
<code>biblatex</code>	Bibliography
<code>csquotes</code>	Inline and display quotations
<code>enumitem</code>	Lists and enumerations
<code>float</code>	Floating objects such as figures and tables
<code>graphicx</code>	Graphics
<code>hyperref</code>	Hyperlinks and bookmarks
<code>listings</code>	Code listings
<code>multicol</code>	Table cells that span multiple columns
<code>multirow</code>	Table cells that span multiple rows
<code>siunitx</code>	Typesetting of units
<code>subcaption</code>	Sub-figures and sub-captions

Table A.1: List of the most relevant packages imported by Sleek Template.

<code>\emph{abcABC123}</code>	<i>abcABC123</i>
<code>\bfseries{abcABC123}</code>	abcABC123
<code>\itshape{abcABC123}</code>	<i>abcABC123</i>
<code>\lowercase{abcABC123}</code>	abcabc123
<code>\normalfont{abcABC123}</code>	abcABC123
<code>\textbf{abcABC123}</code>	abcABC123
<code>\textit{abcABC123}</code>	<i>abcABC123</i>
<code>\textsc{abcABC123}</code>	ABCABC123
<code>\textsf{abcABC123}</code>	abcABC123
<code>\textsl{abcABC123}</code>	<i>abcABC123</i>
<code>\textsubscript{abcABC123}</code>	abcABC123
<code>abcABC123</code>	abcABC123
<code>\texttt{abcABC123}</code>	abcABC123
<code>\underline{abcABC123}</code>	<u>abcABC123</u>
<code>\uppercase{abcABC123}</code>	ABCABC123

Table A.2: Available text fonts in L^AT_EX.

<code>\$_{\mathcal}{abcABC123}\$</code>	$\neg\sqcup\mathcal{ABC}\infty\in\exists$
<code>\$_{\mathit}{abcABC123}\$</code>	<i>abcABC123</i>
<code>\$_{\mathnormal}{abcABC123}\$</code>	<i>abcABC123</i>
<code>\$_{\mathrm}{abcABC123}\$</code>	abcABC123
<code>\$_{\mathbb}{abcABC123}\$</code>	$\ni\mathbb{ABC}\neq\neq$
<code>\$_{\mathfrak}{abcABC123}\$</code>	$\mathfrak{abcABC123}$

Table A.3: Available math fonts in L^AT_EX and AMS.

metre	m	second	s	mole	mol
meter	m	ampere	A	candela	cd
kilogram	kg	kelvin	K		
hertz	Hz	farad	F	lumen	lm
newton	N	ohm	Ω	lux	lx
pascal	Pa	siemens	S	becquerel	Bq
joule	J	weber	Wb	gray	Gy
watt	W	tesla	T	sievert	Sv
coulomb	C	henry	H		
volt	V	celsius	$^{\circ}\text{C}$		
angstrom	\AA	day	d	liter	L
arcminute	'	degree	$^{\circ}$	litre	l
arcsecond	"	electronvolt	eV	minute	min
barn	b	gram	g	neper	Np
bar	bar	hectare	ha	tonne	t
bel	B	hour	h		
yocto	y	milli	m	mega	M
zepto	z	centi	c	giga	G
atto	a	deci	d	tera	T
femto	f	deca	da	peta	P
pico	p	deka	da	exa	E
nano	n	hecto	h	zetta	Z
micro	μ	kilo	k	yotta	Y

Table A.4: Available units in the `siunitx` package.

Expression	Description
<code>\arabic*</code>	Arabic numbers (1, 2, 3, ...)
<code>\alph*</code>	Lowercase letters (a, b, c, ...)
<code>\Alph*</code>	Uppercase letters (A, B, C, ...)
<code>\roman*</code>	Lowercase Roman numerals (i, ii, iii, ...)
<code>\Roman*</code>	Lowercase Roman numerals (I, II, III, ...)

Table A.5: Special expressions for the label of `enumerate` environments.