

高等量子力学作业

Clark

2.3 一个电子受到一个时间无关的、强度为 B 的沿 z 方向的均匀磁场的作用。在 $t = 0$ 时已知电子处在 $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 的本征态上，本征值为 $s_z = \hbar/2$ ，其中 $\hat{\mathbf{n}}$ 是一个单位矢量，位于 xz 平面上，与 z 轴夹 β 角。

- (a) 求找到电子处在 $s_x = \hbar/2$ 态上作为时间函数的概率。
- (b) 求作为时间函数的 S_x 的期望值。
- (c) 为让你自己放心，在 (i) $\beta \rightarrow 0$ 和 (ii) $\beta \rightarrow \pi/2$ 的极限情况下证明你的答案是有意义的。

解：

已知 $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ 。由于 $\hat{\mathbf{n}}$ 是一个单位矢量，位于 xz 平面上，与 z 轴夹 β 角，可得 $\hat{\mathbf{n}} = \hat{x}\sin\beta + \hat{z}\cos\beta$ 。因此 $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}} = \frac{\hbar}{2}(\sigma_x \sin\beta + \sigma_z \cos\beta)$ 。注意到 $\mathbf{M} = 2\mu_B \mathbf{S}$ ，且 Hamilton 量为 $H = -\mathbf{M} \cdot \mathbf{B}$ ，其中 $\mathbf{B} = \hat{z}B$ ，于是有 $H = -\frac{eB}{mc}S_z$ 。现在假设 $t = 0$ 时， $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ 的本征态为 $|\psi\rangle$ ，即 $\mathbf{S} \cdot \hat{\mathbf{n}}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}|\psi\rangle$ 。于是初态 $|\psi(0)\rangle$ 可表示为 $|\psi(0)\rangle = \cos\frac{\beta}{2}|+\rangle + \sin\frac{\beta}{2}|-\rangle$ ，其中 $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 和 $|-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ 分别是 S_z 的本征值为 $\frac{\hbar}{2}$ 和 $-\frac{\hbar}{2}$ 的归一化本征态。而时间演化算符为 $U(t) = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = e^{-\frac{i\omega t S_z}{\hbar}}$ ，其中 $\omega = -\frac{eB}{mc}$ 。因此电子在时间 t 时刻的态为 $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = \cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i\omega t}{2}}|+\rangle + \sin\frac{\beta}{2}e^{\frac{i\omega t}{2}}|-\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i\omega t}{2}} \\ \sin\frac{\beta}{2}e^{\frac{i\omega t}{2}} \end{pmatrix}$ 。

(a) 已知 s_x 的本征值为 $\frac{\hbar}{2}$ 的归一化本征态为 $|S_x; +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ ，因此电子处

在 $s_x = \frac{\hbar}{2}$ 态上的概率为 $P = |\langle S_x; +|\psi(t)\rangle|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i\omega t}{2}} + \sin\frac{\beta}{2}e^{\frac{i\omega t}{2}} \right) \right|^2 = \frac{1}{2} \left(\cos^2\frac{\beta}{2} + \sin^2\frac{\beta}{2} + \cos\frac{\beta}{2} \sin\frac{\beta}{2} (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \right) = \frac{1}{2} (1 + \sin\beta \cos\omega t)$ ，其中 $\langle +|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i\omega t}{2}}$ ，
 $\langle -|\psi(t)\rangle = \sin\frac{\beta}{2}e^{\frac{i\omega t}{2}}$ ， $\cos\theta = \frac{e^{i\theta} + e^{-i\theta}}{2}$ 和 $\sin 2\theta = 2 \sin\theta \cos\theta$ 。

$$(b) \langle S_x \rangle_t = \langle \psi(t) | S_x | \psi(t) \rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i\omega t}{2}} \\ \sin\frac{\beta}{2}e^{\frac{i\omega t}{2}} \end{pmatrix}^\dagger \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i\omega t}{2}} \\ \sin\frac{\beta}{2}e^{\frac{i\omega t}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2}e^{i\omega t} & \sin\frac{\beta}{2}e^{-i\omega t} \end{pmatrix}$$

$$\cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2}e^{-\frac{i\omega t}{2}} \\ \sin\frac{\beta}{2}e^{\frac{i\omega t}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sin\beta \cos\omega t.$$

(c) (i) 当 $\beta \rightarrow 0$ 时， $|\psi(0)\rangle \rightarrow |+\rangle$ ，此时电子处在 $s_x = \frac{\hbar}{2}$ 态上的概率 $P_{s_x=\frac{\hbar}{2}} \rightarrow \frac{1}{2}(1+0) = \frac{1}{2}$ ，这与 $|+\rangle$ 态测量 S_x 得到 $\frac{\hbar}{2}$ 的概率始终为 $\frac{1}{2}$ 一致。 S_x 的期望值 $\langle S_x \rangle \rightarrow \frac{\hbar}{2} \cdot 0 = 0$ ，这与 $|+\rangle$ 态中 $\langle S_x \rangle = 0$ 一致。

(ii) 当 $\beta \rightarrow \frac{\pi}{2}$ 时， $|\psi(0)\rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle) = |S_x; +\rangle$ ，此时电子处在 $s_x = \frac{\hbar}{2}$ 态上的概率

$P_{s_x=\frac{\hbar}{2}} \rightarrow \frac{1}{2}(1 + 1 \cdot \cos \omega t) = \frac{1}{2}(1 + \cos \omega t)$ 。在 $t = 0$ 时, $P_{s_x=\frac{\hbar}{2}} = \frac{1}{2}(1 + 1) = 1$, 与初态 $|S_x; +\rangle$ 一致, 之后随时间演化, 概率振荡, 符合客观规律。 S_x 的期望值 $\langle S_x \rangle \rightarrow \frac{\hbar}{2} \cdot 1 \cdot \cos \omega t = \frac{\hbar}{2} \cos \omega t$ 。在 $t = 0$ 时, $\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot 1 = \frac{\hbar}{2}$, 与初态 $|S_x; +\rangle$ 一致, 之后随时间演化, 期望值振荡, 符合客观规律。

综上所述, (i) 和 (ii) 两种极限情况均与物理事实相符, 答案是有意义的。

练习 (a) 利用一维谐振子的能量本征波函数公式

$$u_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right), \quad (1)$$

其中, $H_n(x)$ 代表 Hermite 多项式, 证明其传播子可表达为

$$K(x'', t; x', t_0) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin(\omega(t-t_0))}} \exp \left\{ \frac{i m \omega}{2\hbar \sin(\omega(t-t_0))} [(x''^2 + x'^2) \cos(\omega(t-t_0)) - 2x''x'] \right\}. \quad (2)$$

证明过程中, 可使用关于如下 Hermite 多项式的等式

$$\exp(-(\xi^2 + \eta^2)) \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\zeta^n}{2^n n!} \right) H_n(\xi) H_n(\eta) = \frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}} \exp \left(-\frac{\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta\zeta}{1-\zeta^2} \right). \quad (3)$$

(b) 在以上传播子公式中, 求 $\Delta t = t - t_0 \rightarrow 0$ 时的极限式, 其中指数因子中保留到 Δt 的一阶。说明指数因子在此极限下与经典谐振子 Lagrange 量之间的关系。

解:

(a) 一维简谐振子的传播子可以定义为 $K(x'', t; x', t_0) = \langle x'' | e^{-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}} | x' \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle x'' | n \rangle \langle n | x' \rangle e^{-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}} = \sum_{n=0}^{\infty} u_n(x'') u_n^*(x') e^{-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}}$, 其中 $|n\rangle$ 是能量本征态, $\langle x' | n \rangle = u_n(x)$ 是能量本征函数, 能量本征值为 $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ 。此外, 注意到 Hermite 多项式是实函数, 于是有 $u_n^*(x') = u_n(x')$ 。最后得到传播子 $K(x'', t; x', t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\frac{m\omega(x''^2+x'^2)}{2\hbar}} H_n \left(x'' \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right) H_n \left(x' \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \right) e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega(t-t_0)}$ 。注意到 Hermite 多项式的性质, 我们可以令 $\tau = t - t_0$, $\xi = x'' \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, $\eta = x' \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, $\zeta = e^{-i\omega\tau}$, 从而将传播子表示为 $K(x'', t; x', t_0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\frac{\xi^2+\eta^2}{2}} e^{-\frac{i\omega\tau}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{\zeta^n}{2^n n!} \right) H_n(\xi) H_n(\eta)$ 。根据题中给出的关于 Hermite 多项式的等式, 我们可以将上式中的求和部分替换为右侧的表达式, 从而得到传播子 $K(x'', t; x', t_0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\frac{\xi^2+\eta^2}{2}} e^{-\frac{i\omega\tau}{2}} \cdot e^{\xi^2+\eta^2} \frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}} \exp \left(-\frac{\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta\zeta}{1-\zeta^2} \right)$ 。接下来, 我们需要对该表达式进行简化。首先, 注意到 $1 - \zeta^2 = 1 - e^{-2i\omega\tau} = 2ie^{-i\omega\tau} \sin \omega\tau$, 因此 $\frac{1}{\sqrt{1-\zeta^2}} = \frac{1}{\sqrt{2ie^{-i\omega\tau} \sin \omega\tau}} = \frac{e^{\frac{i\omega\tau}{2}}}{\sqrt{2i \sin \omega\tau}}$ 。其次, 注意到 $\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta\zeta = \xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta e^{-i\omega\tau}$, 因此 $\frac{\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta\zeta}{1 - \zeta^2} = \frac{\xi^2 + \eta^2 - 2\xi\eta e^{-i\omega\tau}}{2ie^{-i\omega\tau} \sin \omega\tau} = \frac{e^{i\omega\tau}(\xi^2 + \eta^2) - 2\xi\eta}{2i \sin \omega\tau}$ 。将这些结果代入传播子的表达式中, 我们得到 $K(x'', t; x', t_0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\frac{\xi^2+\eta^2}{2}} \cdot e^{-\frac{i\omega\tau}{2}} \cdot \frac{e^{\frac{i\omega\tau}{2}}}{\sqrt{2i \sin \omega\tau}} \cdot e^{\xi^2+\eta^2} \cdot e^{-\frac{e^{i\omega\tau}(\xi^2+\eta^2)-2\xi\eta}{2i \sin \omega\tau}}$

进一步简化后，我们得到

$$\begin{aligned}
 K(x'', t; x', t_0) &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega\tau}} \exp\left(\frac{\xi^2 + \eta^2}{2} - \frac{e^{i\omega\tau}(\xi^2 + \eta^2) - 2\xi\eta}{2i \sin \omega\tau}\right) \\
 &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega\tau}} \exp\left(i\frac{(\xi^2 + \eta^2) \cos \omega\tau - 2\xi\eta}{2 \sin \omega\tau}\right) \\
 &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega\tau}} \exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega\tau} [(x''^2 + x'^2) \cos \omega\tau - 2x''x']\right) \\
 &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \sin \omega(t-t_0)}} \exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega(t-t_0)} [(x''^2 + x'^2) \cos \omega(t-t_0) - 2x''x']\right),
 \end{aligned} \tag{4}$$

其中用到了 $e^{i\omega\tau} = \cos \omega\tau + i \sin \omega\tau$ 。这就是我们所要证明的传播子表达式。

- (b) 当 $\Delta t = t - t_0 \rightarrow 0$ 时，即 $\tau \rightarrow 0$ ，此时有 $\sin \omega\tau \approx \omega\tau$ 和 $\cos \omega\tau \approx 1$ 。因此求得的传播子精确解可近似为 $K \approx \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar \omega\tau}} \exp\left(\frac{im\omega}{2\hbar \omega\tau} ((x''^2 + x'^2) - 2x''x')\right) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \tau}} \exp\left(\frac{im}{2\hbar \tau} (x'' - x')^2\right)$ 。注意到经典谐振子的 Lagrange 量为 $L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ ，在 $\tau \rightarrow 0$ 时， $\dot{x} \approx \frac{x'' - x'}{\tau}$ ，因此有 $L \approx \frac{1}{2}m\left(\frac{x'' - x'}{\tau}\right)^2 - \frac{1}{2}m\omega^2x'^2$ 。忽略掉势能项（因为在 $\tau \rightarrow 0$ 时，势能项对传播子的贡献可以忽略），我们得到 $L \approx \frac{1}{2}m\left(\frac{x'' - x'}{\tau}\right)^2$ 。将其代入指数因子中，我们发现指数因子实际上是经典作用量的指数形式，即 $\exp\left(-\frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t L dt\right) = \exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right)$ ，其中 $t \rightarrow t_0$ 。此时，传播子的指数因子与经典自由粒子的 Lagrange 量相关，表现为自由粒子的作用量。这表明在短时间间隔内 ($\tau \rightarrow 0$)，量子力学的传播子与经典力学的作用量密切相关，换句话说，对于谐振子来讲，在短时间极限下 ($\tau \rightarrow 0$)，其行为类似于自由粒子，因为势能的影响可以忽略。

2.9 设 $|a'\rangle$ 和 $|a''\rangle$ 是厄米算符 A 的本征态，本征值分别为 a' 和 $a''(a' \neq a'')$ 。Hamilton 量算符由下式给出

$$H = |a'\rangle \delta \langle a''| + |a''\rangle \delta \langle a'|, \tag{5}$$

其中 δ 只是个实数。

- (a) 显然， $|a'\rangle$ 和 $|a''\rangle$ 不是这个 Hamilton 量的本征态。写出该 Hamilton 量的本征态。它们的能量本征值是什么？
- (b) 假定已知 $t = 0$ 时系统处在 $|a'\rangle$ 态上。在 Schrodinger 绘景中写出 $t > 0$ 时的态矢量。
- (c) 假定已知 $t = 0$ 时系统处在 $|a'\rangle$ 态上，在 $t > 0$ 时找到该系统在 $|a''\rangle$ 态的概率是多少？
- (d) 你能想出与这个问题相对应的一种物理情况吗？

解：

显然这个 Hamilton 量可显式地表示为 $H = \delta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ 。

- (a) 因此其本征值可通过该式求解 $\det(H - EI) = 0$ 得到，其中 I 为单位矩阵，即 $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ， E 为本征值。可解得 $E_1 = \delta$ 和 $E_2 = -\delta$ ，对应的归一化本征态分别为 $|E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ 和

$$|E_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

(b) 显然 $|a'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|E_1\rangle + |E_2\rangle) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ 。因此 $t > 0$ 时的态矢量为 $|\psi(t)\rangle =$

$$e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |a'\rangle = e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2}} |E_1\rangle + e^{\frac{iE_2 t}{\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2}} |E_2\rangle = e^{-\frac{i\delta t}{\hbar}} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{\frac{i\delta t}{\hbar}} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\delta t}{\hbar} \\ -i \sin \frac{\delta t}{\hbar} \end{pmatrix}.$$

$$(c) \text{ 概率显然为, } P = |\langle a''|\psi(t)\rangle|^2 = \left| \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos \frac{\delta t}{\hbar} \\ -i \sin \frac{\delta t}{\hbar} \end{pmatrix} \right|^2 = \sin^2 \frac{\delta t}{\hbar}.$$

(d) 这是一个经典的二能级系统的例子（比如自旋为 $-\frac{1}{2}$ 的系统）。假设 $|a'\rangle$ 和 $|a''\rangle$ 分别表示原子中的两个能级，且它们之间通过某种相互作用（如电磁辐射）耦合， δ 表示这种耦合的强度。初始时，系统处于能级 $|a'\rangle$ ，随着时间的推移，由于耦合的存在，系统有可能跃迁到能级 $|a''\rangle$ ，跃迁概率随时间变化，这正是量子力学中二能级系统动力学的典型表现。

2.12 考虑一个处在一维简谐振子位势中的粒子。假定 $t = 0$ 时态矢量为：

$$\exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right) |0\rangle, \quad (6)$$

其中 p 是动量算符，而 a 是某个具有长度量纲的数， $|0\rangle$ 是这样的一个态，它使 $\langle x \rangle = 0 = \langle p \rangle$ 。利用 Heisenberg 绘景求 $t \geq 0$ 时的期待值。

解：

由题意，可推测出 $|0\rangle$ 是简谐振子基态，因此有题中所示结果 $\langle 0|x|0\rangle = 0$ 和 $\langle 0|p|0\rangle = 0$ 。注意到 $\exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right)$ 是一个平移算符，它将位置算符 x 平移 a 。于是有 $\exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right)x \exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right) = \exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right)\left(\left[x, \exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right)\right] + \exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right)x\right) = \exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right)i\hbar\left(-\frac{ia}{\hbar}\right)\exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right) + x = x + a$ ，其中用到了 $[x, G(p)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial p} G(p)$ 。而动量算符 p 在这个变换下保持不变，即 $\exp\left(\frac{ipa}{\hbar}\right)p \exp\left(-\frac{ipa}{\hbar}\right) = p$ 。正文部分，(2.3.45a) 和 (2.3.45b) 已经给出 Heisenberg 绘景中位置和动量算符的时间演化形式，即 $x_H(t) = x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t$ 和 $p_H(t) = -m\omega x(0) \sin \omega t + p(0) \cos \omega t$ 。因此 $t \geq 0$ 时的期待值为

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_t &= \langle \psi(0)|x_H(t)|\psi(0)\rangle = \langle 0|e^{\frac{ipa}{\hbar}} \left(x \cos \omega t + \frac{p}{m\omega} \sin \omega t\right) e^{-\frac{ipa}{\hbar}}|0\rangle \\ &= \langle 0| \left(\left(e^{\frac{ipa}{\hbar}} x e^{-\frac{ipa}{\hbar}}\right) \cos \omega t + \left(e^{\frac{ipa}{\hbar}} \frac{p}{m\omega} e^{-\frac{ipa}{\hbar}}\right) \sin \omega t \right) |0\rangle \\ &= \langle 0| \left((x + a) \cos \omega t + \frac{p}{m\omega} \sin \omega t \right) |0\rangle \\ &= a \cos \omega t, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $\langle 0|x|0\rangle = 0$ 和 $\langle 0|p|0\rangle = 0$ 。同理可得

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_t &= \langle \psi(0)|p_H(t)|\psi(0)\rangle = \langle 0|e^{\frac{ipa}{\hbar}} (p \cos \omega t - m\omega x \sin \omega t) e^{-\frac{ipa}{\hbar}}|0\rangle \\ &= \langle 0| \left(\left(e^{\frac{ipa}{\hbar}} p e^{-\frac{ipa}{\hbar}}\right) \cos \omega t - \left(e^{\frac{ipa}{\hbar}} m\omega x e^{-\frac{ipa}{\hbar}}\right) \sin \omega t \right) |0\rangle \\ &= \langle 0| (p \cos \omega t - m\omega(x + a) \sin \omega t) |0\rangle \\ &= -m\omega a \sin \omega t, \end{aligned} \quad (8)$$

其中 $\langle 0|x|0\rangle = 0$ 和 $\langle 0|p|0\rangle = 0$ 。综上所述，我们得到了 $t \geq 0$ 时位置和动量的期待值分别为 $\langle x \rangle_t = a \cos \omega t$ 和 $\langle p \rangle_t = -m\omega a \sin \omega t$ 。这表明粒子在简谐振子势中以幅度 a 和频率 ω 进行简谐运动。

2.16 考虑一个称为关联函数的函数，其定义为

$$C(t) = \langle x(t)x(0) \rangle, \quad (9)$$

其中 $x(t)$ 是 Heisenberg 绘景中的位置算符。对一个一维简谐振子的基态明显地求出该关联函数。

解：

正文部分，(2.3.45a) 已经给出 Heisenberg 绘景中位置算符的时间演化形式，即 $x_H(t) = x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t$ 。于是有 $C(t) = \langle x(t)x(0) \rangle = \langle 0|x_H(t)x(0)|0\rangle = \langle 0| \left(x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t \right) x(0) |0\rangle = \langle 0| \left(x^2(0) \cos \omega t + \frac{p(0)x(0)}{m\omega} \sin \omega t \right) |0\rangle$ 。已知 $\langle 0|x(0)|0\rangle = 0$ 和 $\langle 0|p(0)|0\rangle = 0$ ，于是有 $C(t) = \cos \omega t \langle 0|x^2(0)|0\rangle + \frac{1}{m\omega} \langle 0|p(0)x(0)|0\rangle \sin \omega t$ 。注意到 $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^\dagger + a)$ 和 $p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a^\dagger - a)$ ，其中 a^\dagger 和 a 分别是简谐振子的上升算符和下降算符，且满足 $[a, a^\dagger] = 1$ 。因此有 $x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}((a^\dagger)^2 + a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a) = \frac{\hbar}{2m\omega}((a^\dagger)^2 + a^2 + 2a^\dagger a + 1)$ 。由于 $a|0\rangle = 0$ 和本征态的正交性： $\langle n|m\rangle = \delta_{n,m}$ ，可得 $\langle 0|x^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle 0|1|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}$ 和 $\langle 0|p(0)x(0)|0\rangle = -i\frac{\hbar}{2}$ 。最终，我们得到了该关联函数为 $C(t) = \frac{\hbar}{2m\omega} \cos \omega t - \frac{1}{m\omega} i \frac{\hbar}{2} \sin \omega t = \frac{\hbar}{2m\omega} e^{-i\omega t}$ 。

2.33 类似于 (2.6.26) 式，动量空间的传播子由 $\langle \mathbf{p}'', t' | \mathbf{p}', t_0 \rangle$ 给出。推导对自由粒子的 $\langle \mathbf{p}'', t' | \mathbf{p}', t_0 \rangle$ 显示表示式。

解：

回忆 (2.6.26) 写为

$$\begin{aligned} K(\mathbf{x}'', t; \mathbf{x}', t_0) &= \langle \mathbf{x}'', t | \mathbf{x}', t_0 \rangle = \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | a' \rangle \langle a' | \mathbf{x}' \rangle \exp \left(-\frac{iE_{a'}(t-t_0)}{\hbar} \right) \\ &= \sum_{a'} \langle \mathbf{x}'' | \exp \left(-\frac{iHt}{\hbar} \right) | a' \rangle \langle a' | \exp \left(\frac{iHt_0}{\hbar} \right) | \mathbf{x}' \rangle. \end{aligned} \quad (10)$$

我们认为 Heisenberg 绘景下，时间演化算符在使基改变时，有如下关系 $|a', t\rangle_H = U^\dagger(t) |a'\rangle_S$ 。因此，可以理解为相对于 Schrodinger 绘景中的态右矢以“反向”演化。于是，对于自由粒子 ($H = \frac{p^2}{2m}$)，动量空间的传播子可表示为

$$\langle \mathbf{p}'', t' | \mathbf{p}', t_0 \rangle = \langle \mathbf{p}'' | e^{-\frac{iHt}{\hbar}} e^{\frac{iHt_0}{\hbar}} | \mathbf{p}' \rangle = \exp \left(\frac{1}{i\hbar} \frac{\mathbf{p}'^2}{2m} (t-t_0) \right) \delta(\mathbf{p}'' - \mathbf{p}'). \quad (11)$$

练习 考虑另一个 Bell 纠缠态 $|\psi'\rangle_{AB} = (1/\sqrt{2})(|+\rangle_A |+\rangle_B + |-\rangle_A |-\rangle_B)$ ，类似于自旋为 0 的 Bell 态的讨论，任找三个方向 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ，对相应方向的自旋进行测量。

1. 证明如果隐变量理论成立，则有如下的 Bell 不等式

$$P(\mathbf{a}+, \mathbf{b}+) + P(\mathbf{b}+, \mathbf{c}+) + P(\mathbf{a}+, \mathbf{c}+) + P(\mathbf{a}-, \mathbf{b}-) + P(\mathbf{b}-, \mathbf{c}-) + P(\mathbf{a}-, \mathbf{c}-) \geq 1; \quad (12)$$

2. 在量子力学中，分别求出上式中每一项的表达式；

3. 利用所得到的结果，在量子力学中找到一个破坏上述 Bell 不等式的反例；
 4. 对于 Alice 对粒子 1 自旋测量和没有测量的两种情况，分别计算出相应子系统 B 的约化密度算符和 von Neumann 熵，并在此基础上，验证无交流定理。

解：

(a) 考虑 Bell 纠缠态 $|\psi'\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_A|+\rangle_B + |-\rangle_A|-\rangle_B)$ 。在隐变量理论中，假设存在局部隐变量 λ ，决定测量结果。对于方向 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ，定义 Alice 的测量结果 $A(\mathbf{a}, \lambda) = \pm 1$, Bob 的测量结果 $B(\mathbf{b}, \lambda) = \pm 1$ 。由于态 $|\psi'\rangle$ 在相同方向测量时结果相关，隐变量理论必须满足 $A(\mathbf{a}, \lambda) = B(\mathbf{a}, \lambda)$ 对于所有 \mathbf{a} 。考虑 Bell 不等式： $S = P(\mathbf{a}+, \mathbf{b}+) + P(\mathbf{b}+, \mathbf{c}+) + P(\mathbf{a}+, \mathbf{c}+) + P(\mathbf{a}-, \mathbf{b}-) + P(\mathbf{b}-, \mathbf{c}-) + P(\mathbf{a}-, \mathbf{c}-) \geq 1$ 其中 $P(\mathbf{a}+, \mathbf{b}+)$ 表示 Alice 测量方向 \mathbf{a} 得 + 且 Bob 测量方向 \mathbf{b} 得 + 的概率，其他类似。在隐变量理论中，概率为： $P(\mathbf{a}+, \mathbf{b}+) = \int d\lambda \rho(\lambda) [A(\mathbf{a}, \lambda) = +1 \text{ 且 } B(\mathbf{b}, \lambda) = +1]$ 类似定义其他概率。因此， $S = \int d\lambda \rho(\lambda) I(\lambda)$ ，其中， $I(\lambda) = [A(\mathbf{a}, \lambda) = +1 \text{ 且 } B(\mathbf{b}, \lambda) = +1] + [A(\mathbf{b}, \lambda) = +1 \text{ 且 } B(\mathbf{c}, \lambda) = +1] + [A(\mathbf{a}, \lambda) = +1 \text{ 且 } B(\mathbf{c}, \lambda) = +1] + [A(\mathbf{a}, \lambda) = -1 \text{ 且 } B(\mathbf{b}, \lambda) = -1] + [A(\mathbf{b}, \lambda) = -1 \text{ 且 } B(\mathbf{c}, \lambda) = -1] + [A(\mathbf{a}, \lambda) = -1 \text{ 且 } B(\mathbf{c}, \lambda) = -1]$ 。由于 $A(\mathbf{a}, \lambda) = B(\mathbf{a}, \lambda)$ ，令 $X = A(\mathbf{a}, \lambda)$, $Y = A(\mathbf{b}, \lambda)$, $Z = A(\mathbf{c}, \lambda)$ ，则： $I(\lambda) = [X = +1 \text{ 且 } Y = +1] + [Y = +1 \text{ 且 } Z = +1] + [X = +1 \text{ 且 } Z = +1] + [X = -1 \text{ 且 } Y = -1] + [Y = -1 \text{ 且 } Z = -1] + [X = -1 \text{ 且 } Z = -1]$ 。对于任意 $X, Y, Z \in \{+1, -1\}$ ，检查所有可能取值：

- 若 $X = Y = Z = +1$ ，则前三个条件为真， $I = 3$ 。
- 若 $X = Y = Z = -1$ ，则后三个条件为真， $I = 3$ 。
- 若 $X = +1, Y = +1, Z = -1$ ，则第一个条件为真， $I = 1$ 。
- 若 $X = +1, Y = -1, Z = +1$ ，则第三个条件为真， $I = 1$ 。
- 若 $X = +1, Y = -1, Z = -1$ ，则第五个条件为真， $I = 1$ 。
- 若 $X = -1, Y = +1, Z = +1$ ，则第二个条件为真， $I = 1$ 。
- 若 $X = -1, Y = +1, Z = -1$ ，则第六个条件为真， $I = 1$ 。
- 若 $X = -1, Y = -1, Z = +1$ ，则第四个条件为真， $I = 1$ 。

因此，对于所有 λ ，有 $I(\lambda) \geq 1$ ，故 $S \geq 1$ 。Bell 不等式得证。

(b) 在量子力学中，态 $|\psi'\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+_z\rangle_A|+_z\rangle_B + |-_z\rangle_A|-_z\rangle_B)$ 。对于方向 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ ，测量概率为：
 $P(\mathbf{a}+, \mathbf{b}+) = \langle \psi' | P_{A,+a} \otimes P_{B,+b} | \psi' \rangle$ 其中投影算符 $P_{A,+a} = \frac{1}{2}(I + \boldsymbol{\sigma}_A \cdot \mathbf{a})$, $P_{B,+b} = \frac{1}{2}(I + \boldsymbol{\sigma}_B \cdot \mathbf{b})$ 。
 类似定义其他投影算符。计算得： $P(\mathbf{a}+, \mathbf{b}+) = \frac{1}{4} \langle I + \boldsymbol{\sigma}_A \cdot \mathbf{a} + \boldsymbol{\sigma}_B \cdot \mathbf{b} + (\boldsymbol{\sigma}_A \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma}_B \cdot \mathbf{b}) \rangle$ 。由于 $\langle \boldsymbol{\sigma}_A \cdot \mathbf{a} \rangle = 0$, $\langle \boldsymbol{\sigma}_B \cdot \mathbf{b} \rangle = 0$ ，且 $\langle (\boldsymbol{\sigma}_A \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma}_B \cdot \mathbf{b}) \rangle = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$ ，所以： $P(\mathbf{a}+, \mathbf{b}+) = \frac{1}{4}(1 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$ 。类似地：
 $P(\mathbf{b}+, \mathbf{c}+) = \frac{1}{4}(1 + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c})$, $P(\mathbf{a}+, \mathbf{c}+) = \frac{1}{4}(1 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{c})$, $P(\mathbf{a}-, \mathbf{b}-) = \frac{1}{4}(1 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$, $P(\mathbf{b}-, \mathbf{c}-) = \frac{1}{4}(1 + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c})$
 和 $P(\mathbf{a}-, \mathbf{c}-) = \frac{1}{4}(1 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{c})$ 。因此，

$$\begin{aligned} S &= P(\mathbf{a}+, \mathbf{b}+) + P(\mathbf{b}+, \mathbf{c}+) + P(\mathbf{a}+, \mathbf{c}+) + P(\mathbf{a}-, \mathbf{b}-) + P(\mathbf{b}-, \mathbf{c}-) + P(\mathbf{a}-, \mathbf{c}-) \\ &= 2 \left(\frac{1}{4}(1 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) + \frac{1}{4}(1 + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) + \frac{1}{4}(1 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) \right) \\ &= \frac{1}{2}(3 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{c}). \end{aligned} \tag{13}$$

最终我们得到量子力学中 S 的表达式为: $S = \frac{1}{2}(3 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{c})$ 。

- (c) Bell 不等式要求 $S \geq 1$ 。在量子力学中, $S = \frac{1}{2}(3 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{c})$ 。欲使 $S < 1$, 需: $3 + \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} < 2$, 即 $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} < -1$ 。取三个方向 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ 在同一平面内, 两两夹角为 120° , 则: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} = \cos 120^\circ = -\frac{1}{2}$ 。所以: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c} + \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} = -\frac{3}{2} = -1.5 < -1$, 代入到 S , 可得 $S = \frac{1}{2}\left(3 - \frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2} \times \frac{3}{2} = \frac{3}{4} = 0.75 < 1$ 。因此, 量子力学违反 Bell 不等式, 反例成立。

- (d) 没有测量时子系统 B 的约化密度算符和熵。整体的 Bell 纠缠态为 $|\psi'\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+z\rangle_A|+z\rangle_B + |-z\rangle_A|-z\rangle_B)$ 。密度算符定义为 $\rho_{AB} = |\psi'\rangle\langle\psi'|$, 展开写为:

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2}(|++\rangle\langle++| + |+\rangle\langle--| + |-+\rangle\langle++| + |--\rangle\langle--|), \quad (14)$$

其中 $|++\rangle = |+z\rangle_A|+z\rangle_B$, $|--\rangle = |-z\rangle_A|-z\rangle_B$ 。约化密度算符定义为 $\rho_B = \text{tr}_A \rho_{AB}$, 具体有 $\text{tr}_A |++\rangle\langle++| = |+z\rangle_B\langle+z|$, $\text{tr}_A |--\rangle\langle--| = |-z\rangle_B\langle-z|$, $\text{tr}_A |+\rangle\langle-| = |+z\rangle_B\langle-z|$, $\text{tr}_A |-\rangle\langle+| = |-z\rangle_B\langle+z|$, 其中 I_B 是 Bob 的 Hilbert 空间上的单位算符。von Neumann 熵定义为 $S(\rho_B) = -\text{tr}(\rho_B \log \rho_B)$ 。由于 $\rho_B = \frac{1}{2}I_B$, 本征值均为 $\frac{1}{2}$, 所以: $S(\rho_B) = -2 \times \frac{1}{2} \log \frac{1}{2} = -\log \frac{1}{2} = \log 2$, 取底数为 2, 则 $S(\rho_B) = 1$ 。Alice 测量粒子 A 后, 子系统 B 的约化密度算符和熵。假设 Alice 在 z 方向测量自旋。以概率 $\frac{1}{2}$ 得到 $|+\rangle$, 态坍缩为 $|+z\rangle_A|+z\rangle_B$; 以概率 $\frac{1}{2}$ 得到 $|-\rangle$, 态坍缩为 $|-z\rangle_A|-z\rangle_B$ 。如果 Bob 不知道测量结果, 则 Bob 的态为混合态: $\rho_B = \frac{1}{2}|+z\rangle_B\langle+z| + \frac{1}{2}|-z\rangle_B\langle-z| = \frac{1}{2}I_B$, 与没有测量时相同。熵 $S(\rho_B) = 1$ 。如果 Alice 测量其他方向, 如方向 \mathbf{a} , 由于 $|\psi'\rangle$ 在任意基下形式相同, 测量之后, Bob 的态为 $\frac{1}{2}|+_a\rangle_B\langle+_a| + \frac{1}{2}|-_a\rangle_B\langle-_a| = \frac{1}{2}I_B$, 熵仍为 1。

因此, 无论 Alice 是否测量, 只要 Bob 不知道结果, Bob 的约化密度算符和熵均不变, 验证了无通讯定理。

3.11 (a) 证明密度算符 ρ (在 Schrödinger 绘景中) 的时间演化算符由下式给定

$$\rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0) \quad (15)$$

- (b) 假定在 $t = 0$ 是有一个纯系综。证明只要时间演化算符由 Schrödinger 方程控制, 则它不可能演化成一个混合系统。

解:

- (a) 正文部分, (3.4.27) 已经给出在某个 t_0 时刻密度算符的定义: $\rho(t_0) = \sum_i w_i |a^{(i)}\rangle\langle a^{(i)}|$ 。考虑 Schrödinger 绘景, 于是有 $\rho(t) = \sum_i w_i |a^{(i)}, t\rangle\langle a^{(i)}, t| = \sum_i w_i U(t, t_0) |a^{(i)}, t_0\rangle\langle a^{(i)}, t_0| U^\dagger(t, t_0) = U(t, t_0) \sum_i w_i |a^{(i)}, t_0\rangle\langle a^{(i)}, t_0| U^\dagger(t, t_0) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)$ 。

- (b) 根据密度算符的性质, 在纯系综下, 我们有 $\rho^2 = 1$ 。现在计算, $\rho^2(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0)^\dagger = U(t, t_0)\rho^2(t_0)U^\dagger(t, t_0) = \rho(t_0)$ 。这是完全合理的, 即如果所有粒子处于相同的态, 那么无论我对其中哪一个粒子做什么操作, 等价于我对它们的全体做一样的操作, 其结果仍然是一个纯系综。

3.28 考虑由两个自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子组成的一个系统。观察者 A 专门测量其中一个粒子的自旋分量 (s_{1z} , s_{1x} , 等等), 同时观察者 B 测量另一个粒子的自旋分量。假定已知系统处于自旋单态, 即 $S_{\text{总}} = 0$ 。

- (a) 当观察者 B 不做任何测量时, 观察者 A 得到 $s_{1z} = \hbar/2$ 的概率是什么? 对于 $s_{1x} = \hbar/2$ 求解同样问题。
- (b) 观察者 B 肯定地确认粒子 2 的自旋处于 $s_{2z} = \hbar/2$ 态。如果观察者 A(i) 测量 s_{1z} ; (ii) 测 s_{1x} , 则对观察者 A 的测量结果能给出的结论是什么? 解释你的答案。

解:

$$\text{已知自旋单态为 } |s=0, m_s=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)。$$

(a) 其实如果 B 不进行测量, 那么他在这个问题中的存在是无关紧要的。观察者 A 得到 $s_{1z} = \frac{\hbar}{2}$ 时, 有 $P_{1,z+} = |_1\langle +|00\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_2\right|^2 = \frac{1}{2}$ 。观察者 A 得到 $s_{1x} = \frac{\hbar}{2}$ 时, 有对应的本征态 $|x, +\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_1 + |-\rangle_1)$ 。最后得到概率, $P_{1,x+} = |_1\langle x, +|00\rangle|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle_2 - \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_2\right)\right|^2 = \frac{1}{2}$ 。因此在此情况下, 观察者 A 其实是分不清对粒子 1 进行的测量, 是在 z 方向上的还是在 x 方向上的。

(b) 当观察者 B 肯定地确认粒子 2 的自旋处于 $s_{2z} = \frac{\hbar}{2}$ 态后, 由于粒子 1 和粒子 2 构成一个自旋单态, 于是可以肯定地确定粒子 1 处在 $s_{1z} = -\frac{\hbar}{2}$ 的态上。为了说明这一点, 我们构造一个对应此时情况的投影算符 $P = I_1 \otimes (|+\rangle\langle +|)_2$ 。于是有 $P_{2,z+} = |P|00\rangle|^2 = \left|I_1 \otimes (|+\rangle\langle +|)_2 \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_1|+\rangle_2\right|^2 = \frac{1}{2}$ 。于是最后得到观察者 B 观测后的态, $|\psi'\rangle = \frac{P|00\rangle}{\sqrt{|P|00\rangle|^2}} = -|-\rangle_1|+\rangle_2 \approx |-\rangle_1|+\rangle_2$, 最后一步我们忽略了全局相位因子。因此, 观察者 A 测量 s_{1z} , 一定得到 $s_{1z} = \frac{\hbar}{2}$, 概率为 1。现在考虑测量 s_{1x} 的情况, 此时的本征态为 $|x, +\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_1 + |-\rangle_1)$ 和 $|x, -\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle_1 - |-\rangle_1)$ 。于是得到 $s_{1x} = \frac{\hbar}{2}$ 的概率为 $P_{1,x+} = |_1\langle x, +|-\rangle_1|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_1\right|^2 = \frac{1}{2}$; 得到 $s_{1x} = -\frac{\hbar}{2}$ 的概率为 $P_{1,x-} = |_1\langle x, -|-\rangle_1|^2 = \left|-\frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle_1\right|^2 = \frac{1}{2}$ 。