

## 第一章

Fock态

Lamb位移

算符代数的常用公式

辐射场的密度矩阵

叠加、混合以及密度算子

密度算符的性质

约化密度矩阵

密度矩阵的运动方程

熵最大原理

# 第一章

## Fock态

- 考虑多模的情况，哈密顿量：

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \nu_{\mathbf{k}} \left( \alpha_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \frac{1}{2} \right)$$

多模粒子数表现对应的粒子数本征态的描述方法：

$$|\psi\rangle = |n_{\mathbf{k}_1}\rangle |n_{\mathbf{k}_2}\rangle |n_{\mathbf{k}_3}\rangle \dots |n_{\mathbf{k}_i}\rangle \dots$$

且有：

$$H|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \nu_{\mathbf{k}} \left( n_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} \right) |\psi\rangle$$
$$a_{\mathbf{k}_i} |\psi\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}_i}} |n_{\mathbf{k}_1}\rangle |n_{\mathbf{k}_2}\rangle |n_{\mathbf{k}_3}\rangle \dots |n_{\mathbf{k}_i} - 1\rangle \dots$$

一般情况的多模场为粒子数本征态的叠加：

$$|\varphi\rangle = \sum_{n_{\mathbf{k}_1}} \sum_{n_{\mathbf{k}_2}} \dots \sum_{n_{\mathbf{k}_m}} c_{n_{\mathbf{k}_1}, n_{\mathbf{k}_2}, \dots, n_{\mathbf{k}_m}} |n_{\mathbf{k}_1}\rangle |n_{\mathbf{k}_2}\rangle \dots |n_{\mathbf{k}_m}\rangle$$

## Lamb位移

- 对于量子力学而言： $2S_{1/2}$ ,  $2P_{1/2}$ 是简并的，是具有相同能量的能量本征态，但是实验观测到这两者之间的能级间隔差了1GHz。
- Welton理论解释Lamb位移：  
势能由于真空涨落存在偏移：

$$\Delta V = V(\mathbf{r} + \delta \mathbf{r}) - V(\mathbf{r}) = \delta \mathbf{r} \cdot \nabla V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} (\delta \mathbf{r} \cdot \nabla)^2 V(\mathbf{r})$$

其中 $\delta\mathbf{r}$ 为真空对电子的随机扰动，其平均值为零（这里总体的平均值可以分解为 $\delta\mathbf{r}$ 的平均值与其他部分平均值的乘积，理由是 $\delta\mathbf{r}$ 是对真空做平均，其他部分是对电子的态矢量做平均），于是（第一项平均值为零，第二项展开可以得到下式）：

$$\langle \Delta V \rangle = \frac{1}{6} \langle (\delta\mathbf{r})^2 \rangle \langle \nabla^2 V(\mathbf{r}) \rangle$$

其中第二项满足：

$$\begin{aligned} \nabla^2 \frac{1}{r} &= -4\pi\delta(r), \nabla^2 V = \nabla^2 \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = \frac{e^2}{\epsilon_0} \delta(r) \\ \Rightarrow \langle \nabla^2 V \rangle &= \frac{e^2}{\epsilon_0} |\psi(0)|^2 \end{aligned}$$

这表明只有S态会与真空态产生相互作用，这使得S、P态发生能级的Shift。与此同时，其中第一项也就是关于 $\delta\mathbf{r}$ 的项，其满足经典运动方程：

$$m \frac{d^2}{dt^2} \delta\mathbf{r}_{\mathbf{k}} = -e\mathbf{E}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$$

我们认为：

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) &= \underbrace{\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \mathcal{O}_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{-i\nu_{\mathbf{k}}t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}_{E^{(+)}} + \underbrace{h.c.}_{E^{(-)}} \\ \delta\mathbf{r}_{\mathbf{k}}(t) &\approx \delta\mathbf{r}_{\mathbf{k}}(0) e^{-i\nu_{\mathbf{k}}t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + c.c \end{aligned}$$

可以得到：

$$\delta\mathbf{r}_{\mathbf{k}} = \frac{e\mathbf{E}_{\mathbf{k}}}{mc^2k^2}$$

最后得到平均值：

$$\begin{aligned} \langle (\delta\mathbf{r})^2 \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{e}{mc^2k^2} \right)^2 \langle 0 | \mathbf{E}_{\mathbf{k}}^2 | 0 \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{e}{mc^2k^2} \right)^2 \frac{\hbar ck}{2\epsilon_0 V} \\ &= 2 \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int dk k^2 \left( \frac{e}{mc^2k^2} \right)^2 \frac{\hbar ck}{2\epsilon_0 V} \\ &= \frac{1}{2\epsilon_0\pi^2} \left( \frac{e^2}{\hbar^2} \right) \left( \frac{\hbar}{mc} \right) \int \frac{dk}{k} \end{aligned}$$

最后发现会发散，有人为了解决这个问题，进行截断存在上界与下界：

$$\pi c/a_0 < \nu < mc^2/\hbar$$

这样取的理由是：下界要保证原子的核也保持不动，上界要求产生作用的真空场的能量不能太高。最后：

$$\langle (\delta r)^2 \rangle = \frac{1}{2\epsilon_0\pi^2} \left( \frac{e^2}{\hbar^2} \right) \left( \frac{\hbar}{mc} \right) \int_{\pi/a_0}^{mc/\hbar} \frac{dk}{k} = \frac{1}{2\epsilon_0\pi^2} \left( \frac{e^2}{\hbar^2} \right) \left( \frac{\hbar}{mc} \right) \ln \left( \frac{4\epsilon_0\hbar c}{e^2} \right)$$

最后得到的结果与实验符合得不错。

- 真空态的其他影响：两个金属板之间的卡西米尔效应。
- 一些注释：

哈密顿量中的真空能的取舍，对于单模的情况，往往是不考虑真空零点能的，但是在多模的时候最好不要轻易丢掉。

## 算符代数的常用公式

- 秘笈，要用学过的东西。
  - Baker-Hausdoff定理：

如果：

$$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$$

那么：

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} = e^B e^A e^{\frac{1}{2}[A,B]}$$

- 第二个：

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$$

- 第三个：

如果函数 $f(a, a^\dagger)$ 可以展开成 $a, a^\dagger$ 的幂级数，那么：

$$[a, f(a, a^\dagger)] = \frac{\partial f}{\partial a^\dagger}, [a^\dagger, f(a, a^\dagger)] = -\frac{\partial f}{\partial a}$$

证明，我们先展开：

$$f(a, a^\dagger) = \sum_{m,n} f_{m,n}(a^\dagger)^m a^n$$

可以利用归纳法证明：

$$[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1}$$

另一方面：

$$\frac{\partial f}{\partial a^\dagger} = \sum_{m,n} f_{m,n}(a^\dagger)^{m-1}(m-1)a^n$$

最后第三个公式得证。（作业：证明第三个公式）

- 第四个（波色算子的常用关系式）：

$$e^{xa} a^\dagger e^{-xa} = a^\dagger + x, e^{-xa} a e^{xa} = a + x \\ e^{xa} f(a, a^\dagger) e^{-xa} = f(a, a^\dagger + x), e^{-xa} f(a, a^\dagger) e^{xa} = f(a, a^\dagger + x)$$

证明这个（第四个）公式，需要另一个公式：

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \dots$$

由这个可以直接证明第一排的公式，上式中的省略号在这种情况下全为零。第二排的公式，我们可以写为：

$$e^{xa} f(a, a^\dagger) e^{-xa} = e^{xa} \sum_{m,n} f_{m,n} (a^\dagger)^m a^n e^{-xa}$$

最后带入得到：

$$\sum_{m,n} f_{m,n} (a^\dagger + x)^m a^n = f(a^\dagger + x, a)$$

◦ 第五个：

$$\begin{aligned} e^{xa^\dagger a} a e^{-xa^\dagger a} &= a e^{-x} \\ e^{xa^\dagger a} a^\dagger e^{-xa^\dagger a} &= a^\dagger e^{-x} \\ e^{xa^\dagger a} f(a, a^\dagger) e^{-xa^\dagger a} &= f(a e^{-x}, a^\dagger e^x) \end{aligned}$$

证明需要构造一个函数：

$$g(x) = e^{xa^\dagger a} a e^{-xa^\dagger a}$$

于是有：

$$\begin{aligned} \frac{dg}{dx} &= e^{xa^\dagger a} [a^\dagger a, a] e^{-xa^\dagger a} \\ &= -e^{xa^\dagger a} a e^{-xa^\dagger a} \\ &= -g(x) \\ \Rightarrow g(x) &= g(0) e^{-x} = a e^{-x} \end{aligned}$$

最后第五个公式得证，只不过第三排的公式要再仔细一点（需要展开）。

◦ 第六个（正规排列与反正规排列）；

特指乘积方式，如果具有如下形式为正规排列：

$$(a^\dagger)^m a^n$$

如果具有如下形式为反正规排列：

$$a^n (a^\dagger)^m$$

当然存在一般的排序形式，既不是正规也不是反正规，但是可以利用对易关系写成两者的线性组合。

## 辐射场的密度矩阵

### 叠加、混合以及密度算子

- 态是矢量，但不一定能够是确定下来，所以我们将其分为两种情况
  - 不确定是哪一个矢量
  - 确定是哪一个矢量

当不确定是哪一个矢量的话，这可以用经典不确定统计。

- 一个例子：

两个光子的偏振态：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|HH\rangle + |VV\rangle)$$

H表示水平偏振，V表示垂直偏振，问，光子#1处于什么状态？光子#2处于什么状态？无法确定！光子#1以及光子#2的状态无法写成一个单一的矢量。

- 第二个例子：
- 第三个例子：
- 对于一个纯态而言，其测量的平均值为：

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

对于混合态  $(p_1 : |\psi_1\rangle, p_2 : |\psi_2\rangle)$ ，那么加权平均值为：

$$\langle A \rangle = p_1 \langle \psi_1 | A | \psi_1 \rangle + p_2 \langle \psi_2 | A | \psi_2 \rangle$$

一般性的情况  $(\{p_i : |\psi_i\rangle\})$ ：

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \sum_i p_i \langle \psi_i | A | \psi_i \rangle \\ &= \sum_{i,n} p_i \langle \psi_i | A | n \rangle \langle n | \psi_i \rangle \\ &= \sum_{i,n} p_i \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | A | n \rangle \\ &= \sum_n \langle n | \left( \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| A \right) | n \rangle \\ &= \text{Tr} \left[ \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| A \right] \\ &= \text{Tr}[\rho A] \end{aligned}$$

求Trace具有轮换对称性，其中：

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$$

被叫做密度矩阵，用于描述系统的状态，其物理含义便是  $\{p_i : |\psi_i\rangle\}$ ，系统以  $p_i$  的概率处于  $|\psi_i\rangle$  态上。

那么在第二个例子中，我们就可以将第二种情况写为：

$$\rho_2 = 1/2 |H\rangle \langle H| + 1/2 |V\rangle \langle V|$$

这与第一种情况完全不一样：

$$\begin{aligned} \rho_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle + |V\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle H| + \langle V|) \\ &= 1/2 (|H\rangle \langle H| + |V\rangle \langle H| + |H\rangle \langle V| + |V\rangle \langle V|) \end{aligned}$$

仔细观察，如果我们要对态添加相位对话，那么其体现在非对角元，所以  $\rho_2$  是无法相干的态，其没有确定的相位的概念。

## 密度算符的性质

- 厄米：

$$\rho_A = \rho_A^\dagger$$

- 正定性：

$$\langle \psi | \rho | \psi \rangle \geq 0$$

- 迹为一：

$$\text{Tr}[\rho] = 1$$

- 可对角化：

$$U^\dagger \rho U = \sum_n \lambda_n |n\rangle \langle n|$$

其中 $U$ 为幺正矩阵，密度矩阵的本征值之和为1。

- 当 $\rho$ 为纯态：

$$\text{Tr}[\rho^2] = 1$$

反之亦然。

## 约化密度矩阵

- 确定复合系统中，单一系统的状态，那么这种状态的定义应当能够让我们确定其任意物理量的平均值，按照这个核心法则，我们可以定义出单一系统的状态。
- 考虑复合系统状态 $\rho_{AB}$ ， $A$ 系统的力学量 $M_A$ ，那么：

$$\begin{aligned} \langle M_A \rangle &= \sum_{m,n} \langle n | \langle m | \rho_{AB} M_A | m \rangle | n \rangle \\ &= \sum_n \langle n | \left( \sum_m \langle m | \rho_{AB} | m \rangle M_A \right) | n \rangle \end{aligned}$$

其中 $m$ 是B系统的本征态的量子数， $n$ 是A系统的本征态的量子数，于是我们定义A系统的状态为：

$$\rho_A = \text{Tr}_B[\rho_{AB}]$$

- 例子：

$\frac{1}{\sqrt{2}}(|HH\rangle + |VV\rangle)$ 的光子#1的约化密度矩阵是多少？

## 密度矩阵的运动方程

- 对于纯态而言：

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

- 对于一般性的密度矩阵：

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho]$$

注意不要和算符的运动方程弄混淆了（大家是不同的绘景）：

$$i\hbar \frac{\partial O}{\partial t} = [O, H]$$

## 熵最大原理

- 冯诺伊曼熵：

$$S(\rho) = -k \text{Tr}[\rho \ln \rho]$$

要求熵达到最大：

- $\delta S = 0$ ，其有两个约束
  - $\text{Tr}[\delta \rho] = 0$
  - $\text{Tr}[H \delta \rho] = 0$
- 利用拉格朗日乘子法：

$$\begin{aligned} \text{Tr}[1 + \ln \rho + \lambda + \beta H] \delta \rho &= 0 \\ \text{Tr}[1 + \ln \rho + \lambda + \beta H] &= 0 \\ \Rightarrow \rho &= e^{-1-\lambda} e^{-\beta H} \end{aligned}$$

可以用迹之和为1确定 $\lambda$ ，最后得到：

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]}$$

其中 $\beta$ 猜测为 $\beta = \frac{1}{kT}$ 。

最后可以得到单模的热平衡辐射场