

# 简明量子力学的简明笔记

## 简明量子力学的简明笔记

### 0 Introduction

- 0.1 什么是量子
- 0.2 量子技术

### 1 量子力学简史

- 1.1 量子的诞生
- 1.2 艰难起步
- 1.3 氢原子
- 1.4 新量子力学的诞生：1924-1926
- [量子统计]
- 1.5 矩阵力学
- 1.6 波是粒子，粒子是波

### 2 经典力学和旧量子理论

- 2.1 自由落体
- 2.2 相空间
- 2.3 微分形式的速度和加速度
- 2.4 简谐振子
- 2.5 旧量子理论

## 4 复数和线性代数

### 4.1 复数

### 4.2 线性代数

- 4.2.1 线性空间
- 4.2.2 希尔伯特空间(Hilbert)
- 4.2.3 矩阵
  - 复数域上的矩阵
  - 厄密共轭
  - 厄密矩阵
  - 么正矩阵
- 4.2.4 本征态和本征值
- 4.2.5 直积空间

## 5 迈入量子之门

- 5.1 施特恩-格拉赫实验
- 5.2 自旋
- 5.3 与经典理论的区分
- 5.4 可观测量与算符
- 5.5 任意方向的自旋
  - 改变磁场方向以分析自旋
  - 改变磁场方向后的测量结果
  - 不能同时测量两个算符
  - 期望值 (平均值)
- 5.6 量子力学的基本原则
  - 量子态
  - 可观测量
  - 概率解释
  - 量子态的总体相位

## 6 量子动力学

- 6.1 薛定谔方程
- 6.2 波函数
- 6.3 哈密顿算符和么正演化
  - 描述自旋
  - 量子体系的演化
  - 海森堡方程

## 6.4 量子能级和本征波函数

第一个例子：

第二个例子：

对氢原子的分析

## 6.5 态叠加原理和不可克隆原理

态叠加原理

量子不可克隆定理

## 6.6 双缝干涉（略）

# 7 量子纠缠和贝尔不等式

## 7.1 双自旋

7.1.1 直积符号表示双自旋体系

7.1.2 双自旋态的内积

7.1.3 直积态和纠缠态

7.1.4 双自旋系统的算符

7.1.5 在双自旋体系中计算期望算符

## 7.2 量子纠缠

自旋单重态 $|S\rangle$

7.2.1 双自旋施特恩-格拉赫实验

7.2.2 贝尔不等式

1) 特殊的  $z$  方向

2) 任意方向

3) 贝尔不等式

4) 双自旋单重自旋态里的几率关联会违反这一不等式

7.2.3 自我的缺失

# 8 量子测量

## 8.1 海森堡不确定性关系

# 0 Introduction

## 0.1 什么是量子

量子的六个特征：

### 1.量子性

量子是物理中各种基本场的最小单位激发。

### 2.海森堡不确定性原理

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

上式中 $\hbar = h/2\pi$ 。

液氦到了绝对零度还是液体，因为原子的位置不会完全确定（违反海森堡不确定性原理）。绝对零度时原子也会振动，称之为零点震动。氦原子零点震动尤为显著，因而在绝对零度时仍为液态。

### 3.叠加态原理 superposition

量子比特  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$

薛定谔猫  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\text{活猫}\rangle + |\text{死猫}\rangle)$

### 4.量子随机性

量子力学的随机性来自叠加态原理，而非无知。

## 5.量子全同性

不能把两个量子区分开。

## 6.量子纠缠

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle)$$

超距关联发生的前提是：事先掌握事情的整体情况。

量子纠缠是一种**超距关联**，同时它也具有特征“**自我的缺失**”。

## 0.2 量子技术

隐性量子技术：技术实现的功能并不直接体现量子力学，量子力学的意义是使这类技术得到进步。如晶体管、硬盘等。量子点显示器/量子点电视。

显性量子技术：如量子通信（应用量子纠缠对实现密钥分配）、量子计算。

假的量子技术：如（略）。

# 1 量子力学简史

## 1.1 量子的诞生

**普朗克**（Max Planck, 1858 - 1947）对黑体辐射的研究：

黑体：在吸收所有入射光的同时也会向外辐射光。

**维恩**对于黑体辐射首先给出了一个公式，但在低频区并不适用。

普朗克根据实验结果对之进行改进，得到最初的公式：

$$u(\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

为了给公式以物理意义，假定处于辐射场中的电偶极振子的能量是一份一份的，每份的大小正比于振动的频率。

普朗克作出改动后：

$$u(\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T} - 1}$$

$h$ ：普朗克常数

$k_B$ ：玻尔兹曼常数

## 1.2 艰难起步

**爱因斯坦**认为： $h\nu \gg k_B T$ 时，普朗克的公式就近似于维恩的公式：

$$u(\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} e^{-h\nu/k_B T}$$

故，爱因斯坦通过对光电效应  $E = h\nu - W$  的研究，表明了光的粒子性。

爱因斯坦认为固体中原子振动的能量也是一份一份的，它们应该同样遵守普朗克的黑体辐射公式。他对固体比热（为什么随温度降低而减小）的研究引起能斯特（Walther Nernst）的注意，后者意识到量子理论的重要性，推动爱因斯坦在第一届索尔维会议上作出了报告《辐射和量子》（Radiation and the Quanta）。

### 1.3 氢原子

氢原子发射光谱是离散的，氢原子吸收光谱中有许多离散的暗线（与前面的发射光谱——对应）。**巴耳末**（Johann Balmer, 1825 - 1898）1885 年发现了一个经验公式，可以描述部分氢原子的光谱。在此基础上，1888 年**里德堡**（Johannes Rydberg, 1854-1919）总结出了氢原子光谱经验公式：

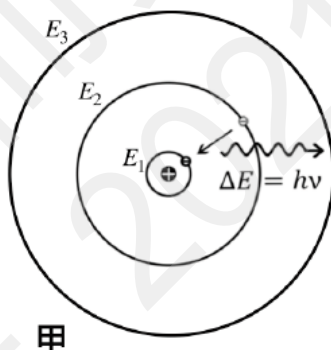
$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

$\lambda$ : 氢原子分立光谱对应的波长

**汤姆逊**（J. J. Thomson, 1856 - 1940）对阴极射线的研究使之发现了电子，基于此提出了原子模型（葡萄干蛋糕模型，正电荷均匀分布在一个球里面；带负电的电子则点缀在这个均匀正电介质里。）

**卢瑟福**（Ernest Rutherford, 1871 - 1937）、**盖革**（Johannes “Hans” Geiger, 1882 - 1945）和**马斯登**（Ernest Marsden, 1889 - 1970）在阿尔法粒子轰击一层薄薄的金箔实验(1909)中，发现有粒子发生了大角度散射，提出原子模型（原子有一个很小的原子核，几乎所有原子的质量都集中在这个核上。）

**尼尔斯·玻尔**（Niels Bohr, 1885 - 1962）的博士论文得出：经典的金属电子理论不可能解释铁的磁性（Bohr-van Leeuwen theorem）。玻尔在卢瑟福基础上，引入量子，提出了自己的原子模型：



玻尔认为：

- (1) 电子只能处于一些分立的稳态上，这些稳态具有分立的能级  $E_1, E_2, E_3, \dots$
- (2) 如果电子要跳到能量更高的稳态，它必须吸收一个光子；如果要跳到能量更低的稳态，它必须放出一个光子。光子的频率为： $h\nu = |E_2 - E_1|$ 。

**索末菲**（Arnold Sommerfeld, 1868-1951）推广了玻尔的理论，比如他认为所有物理体系处于分立的稳态等等。

玻尔-索末菲的量子理论（旧量子理论）不能解释元素周期表的排列（元素电子轨道的问题）。玻尔为此强行做了一些规定，但是这些改进失败了。

## 1.4 新量子力学的诞生：1924-1926

**玻色** (Satyendra Nath Bose, 1894 - 1974) 给出了一个新的推导普朗克黑体辐射公式的方法，在英文期刊发表被拒后，在爱因斯坦帮助下得以发表在德文期刊。

他的论文暗含了**量子全同性**（无法区分两个量子，它们绝对相同）

"We are all your pupils though profiting only by your teachings through your writing."

爱因斯坦在这篇论文的基础上做出了许多推进，比如，预言了玻色-爱因斯坦凝聚（玻色子原子在冷却到接近绝对零度所呈现出的一种气态的、超流性的物质状态（物态））。

**泡利** (Wolfgang Pauli, 1900 - 1958) 试图解释元素周期表，为此做出了两个假设：

- (1) 除了空间自由度外，电子还有一个奇怪的自由度（即后来的“自旋”）
- (2) 任何两个电子不能同时处于完全相同的量子态（即后来的泡利不相容原理），可以解释为什么不是所有的电子都处于最低能量级。

**费米** (Enrico Fermi, 1901 - 1954) 在泡利的论文上，提出一种新的量子气体.....每个量子态最多只能被一个粒子占据。而玻色和爱因斯坦讨论过的多个全同粒子则可以占据一个量子态。

**狄拉克** (Paul Adrien Maurice Dirac, 1902 - 1984) 集合前面的研究，系统地给出了全同粒子的性质。

### [量子统计]

1.**玻色子**：玻色-爱因斯坦统计

光子、胶子、氢原子.....同一个量子态可以被多个玻色子占据。自旋为整数。

2.**费米子**：玻色-爱因斯坦统计

电子、夸克、质子.....一个量子态最多只能被一个费米子占据。自旋为半整数。

## 1.5 矩阵力学

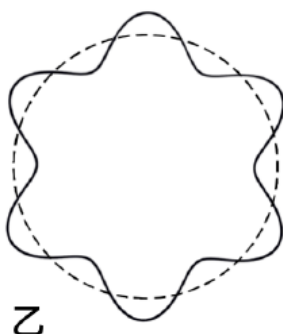
**海森堡** (Werner Heisenberg, 1901 - 1976) 为了解释实验，认为量子数可以为半整数 ( $1/2, 1/4, \dots$ )。

Success sanctifies means.

20 岁时，海森堡引入了半整量子数；24 岁时，海森堡创立了矩阵力学。

## 1.6 波是粒子，粒子是波

**德·布罗意** (Louis Victor Pierre Raymond de Broglie, 1892 - 1987) 认为电子是一种波，每一个玻尔轨道正好对应一个电子驻波（波粒二象性）。



他的博士论文朗之万 (Paul Langevin, 1872 - 1946) 寄给了爱因斯坦, 后者意识到德·布罗意工作的重要性。

首先, 他认为如果一个粒子的动量是 $p$ , 那么它的波长是 $\lambda = h/p$ 。

其次, 他认为既然电子是波, 那么电子围绕质子就会形成驻波。

依照这个思路, 德·布罗意神奇地重新推导出了玻尔的氢原子轨道和能级。

最后, 他预言电子也会发生散射和干涉。

**薛定谔** (Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger, 1887 - 1961) 在波粒二象性的基础上, 提出了波动方程和波函数, 并利用它们给出了氢原子的正确能级。

最后的最后, 狄拉克很快意识到薛定谔的波动力学和海森堡的矩阵力学的等价性。他于1926年9月发表了一篇论文, 题目是《论量子力学理论》。

## 2 经典力学和旧量子理论

### 2.1 自由落体

经典力学中, 任意时刻物体有确定的位置和动量

### 2.2 相空间

能量守恒, 且系统的能量可以连续的变化。

现代物理学家非常喜欢把能量 $E$ 的表达式叫做哈密顿量 (Hamiltonian) 通常用 $H$ 来表示:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

相空间、等能线。由于 $E$ 可以连续变化, 轨迹可以连续在相空间改变。

经典运动的特征:

- 经典粒子有确定的运动轨迹, 数学上可以用相空间里的连续曲线描述。在运动中的每时每刻, 粒子有确定的位置和动量。知道现在的位置和动量, 可以预测将来某个时刻的位置和动量, 或反推过去某个时刻的位置和动量。这体现于相空间中描述粒子运动轨迹的曲线不会分叉。
- 粒子的能量是连续的。
- 如果一个系统有两个粒子, 我们需要确定每个粒子的动量和位置才能确定系统的运动状态。也就是说我们需要确定四个变量: 粒子1的动量和位置 $p_1; x_1$ 以及粒子2的动量和位置 $p_2; x_2$ 。这时相空间是四维的。依次类推, 一个有 $n$ 个粒子的系统, 如果每个粒子在 $d$ 维空间运动, 这个系统相空间的维数是 $2dn$ 。所以相空间的维数是随粒子的个数线性增长的。

### 2.3 微分形式的速度和加速度

略

### 2.4 简谐振子

$$x = x_0 \cos(\omega t), \quad p = -p_0 \sin(\omega t)$$

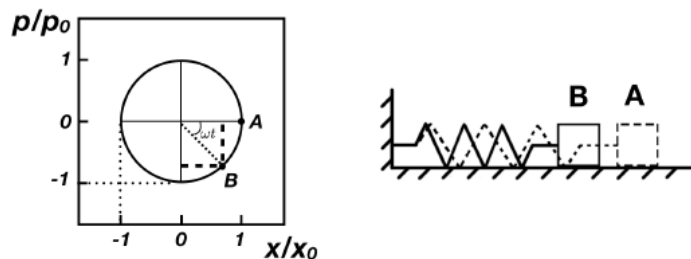


图 3.2: 简谐振子。左: 相空间; 右: 示意图 (忽略摩擦力)。A 是起始点, 时间  $t$  后运动到 B 点。 $\omega$  是振动频率。

可以求出简谐振子的哈密顿量为:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

## 2.5 旧量子理论

玻尔和索末菲的量子化规则是:

量子化轨道在相空间围出的面积  $S$  是普朗克常数  $h$  的整数倍

$$S = \oint p dx = nh, \quad n = 1, 2, \dots$$

将之运用于简谐振子, 可以求得:  $S = 2\pi E/\omega$ , ( $E = mx_0^2\omega^2/2$ )

于是:

$$E_n = n\hbar\omega, \quad (h = 2\pi\hbar)$$

此即为量子化的简谐振子能级, 每个离散的能级在相空间都有一条经典轨迹。

而在现代量子理论中, 则通过求解薛定谔方程获得能级, 应该为:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

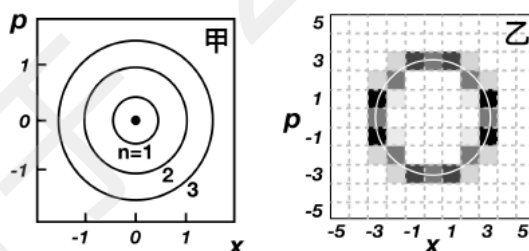


图 3.3: (甲) 相空间中量子化的简谐振子轨道示意图; (乙) 量子相空间和其中的简谐振子本征波函数。在经典相空间中, 每个点代表一个运动状态; 在量子相空间中, 每一个小方格代表一个量子态。每个小方格的面积是普朗克常数  $h$ 。它们通常被称为普朗克相格。相格的颜色越深, 波函数在该相格的取值越大。其中的白色圆圈是相应的玻尔-索末菲量子化轨道。(乙) 中结果来自 [J. Stat. Mech. (2018) 023113]。注意: 我们通过适当选择  $x, p$  的单位使得简谐振子的轨迹是圆的。

## 4 复数和线性代数

### 4.1 复数

根据欧拉公式:  $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ :

$$z = x + yi = re^{i\theta}$$

其中,  $z$  的模  $|z| = r$ ,  $z$  的幅角  $\theta$  (相角、相位)。

用这一公式容易求其倒数 (逆)  $z^{-1} = e^{-i\theta}/r$  和复共轭:  $z^* = re^{-ie}$

## 4.2 线性代数

### 4.2.1 线性空间

比如一个向量:

$$\vec{r} = (x_1, \dots, x_n)$$

基于其计算的一些性质, 就有了线性空间 (向量空间)。

向量也可以写为列向量, 如:

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

thus, 内积可以写做:

$$r^2 = (x, y) \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = x^2 + y^2$$

### 4.2.2 希尔伯特空间(Hilbert)

将向量的每个分量推广为复数.

先讨论2维情形。

用狄拉克符号( $\langle \text{bra} | \text{ket} \rangle$ )表示向量:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

其共轭向量为:

$$\langle \psi| = (a^*, b^*)$$

向量内积为:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = (a_1^*, b_1^*) \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = a_1^* a_2 + b_1^* b_2$$

调换顺序:

$$\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = (a_2^*, b_2^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = a_2^* a_1 + b_2^* b_1$$

于是就易知:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*$$

如果  $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$  就称这两个向量**正交**, 记作  $|\psi_1\rangle \perp |\psi_2\rangle$ 。

一个向量的**长度** $r$ 定义为其与自身内积的平方根:



$$r^2 = \langle \psi | \psi \rangle = |a|^2 + |b|^2$$

利用二维希尔伯特空间的一组单位正交基（**正交归一基**） $|e_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 和 $|e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ，则有：

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a|e_1\rangle + b|e_2\rangle$$

可以换一组正交归一基：

$$|\tilde{e}_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle + i|e_2\rangle), \quad |\tilde{e}_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e_1\rangle - i|e_2\rangle)$$

很容易证明其是正交归一的。

两种证明正交归一的方法：直接代值算；用正交归一基代换之后算。

由此可以用这一组新的正交归一基把最开始的正交归一基表示出来，方法就是解线性方程组。

$$|e_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\tilde{e}_1\rangle + |\tilde{e}_2\rangle), \quad |e_2\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}(|\tilde{e}_1\rangle - |\tilde{e}_2\rangle)$$

以上讨论可以推广至n维希尔伯特空间（比如电子所处的）。

比如：

$$\langle \phi | \psi \rangle = \left( \sum_{j=1}^n a_j^* \langle e_j | \right) \left( \sum_{k=1}^n b_k | e_k \rangle \right) = \sum_{i=1}^n a_i^* b_i$$

就利用了正交归一基的性质： $\langle e_i | e_i \rangle = 1, \langle e_i | e_j \rangle = 0, (i \neq j)$ 。

### 4.2.3 矩阵

旋转变换（绕原点**逆时针**旋转一个角度 $\theta=30^\circ$ ）：

$$R_{30} = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$$

或者说：

$$R_\theta = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

对于一个长度为R，与x轴正方向夹角为 $\theta$ 的向量 $\vec{v}$ ，容易证明：

$$R_\theta \vec{v} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} R \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{pmatrix} = R \begin{pmatrix} \cos(\alpha + \theta) \\ \sin(\alpha + \theta) \end{pmatrix}$$

剪切变换（保持向量的x分量不变而改变y分量）：

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

矩阵的QR分解：做一个变换W可以相当于先做一个旋转变换R再做一个剪切变换Q。

这就是矩阵乘法，也即： $W = QR$ 。具体定义略去。

## 复数域上的矩阵

考虑矩阵元可以为复数的情形。

$$M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & \cdots & M_{1n} \\ M_{21} & M_{22} & \cdots & M_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ M_{n1} & M_{n2} & \cdots & M_{nn} \end{pmatrix}$$

矩阵乘法的不可交换性是量子力学中算符不可交换性的数学基础。

转置、对角矩阵、单位矩阵、逆矩阵等概念略去。

### 厄密共轭

可以理解为转置且元素取复共轭

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 4i & 3i \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & -4i \\ 2 & -3i \end{pmatrix}$$

### 厄密矩阵

如果一个矩阵  $M$  满足  $M = M^\dagger$ ，这个矩阵叫厄密矩阵。

下面三个矩阵都是厄密矩阵，

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

人们通常称这三个矩阵为**泡利矩阵**。显然实的对称矩阵（所有矩阵元都是实数）是厄密矩阵。

### 么正矩阵

如果矩阵  $M$  满足  $M^\dagger M = MM^\dagger = I$ ，这种矩阵叫么正矩阵。下面是一个么正矩阵：

$$U = \begin{pmatrix} \cos \theta & i \sin \theta \\ i \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

直接了当的计算表明它确实满足  $U^\dagger U = UU^\dagger = I_0$

## 4.2.4 本征态和本征值

对于一个矩阵  $M$  有一些特殊向量  $|\psi\rangle$ ，其作用在这些向量上等价于一个常数和这些向量相乘。

$$M|\psi\rangle = v|\psi\rangle$$

称这个向量为**本征向量**，这个常数为**本征值**。

比如对于  $Q = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$  可以知道有一个本征向量  $|a\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ ，对应的本征值为1。

在量子力学中，本征向量对应一个量子态，把本征向量称作为**本征态**。对于任意一个  $n \times n$  厄密矩阵  $O$ ，它的本征态和本征值具有如下普遍性质：

- $O$  一定有  $n$  个本征态  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_n\rangle$ ，其相应本征值为  $v_1, v_2, \dots, v_n$ 。  
即  $O|\phi_j\rangle = v_j|\phi_j\rangle$ ， $(j = 1, 2, \dots, n)$
- 可以证明本征值  $v_1, v_2, \dots, v_n$  都是实的。
- 可以证明本征态  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_n\rangle$  相互正交，即  $\langle \phi_i | \phi_j \rangle = 0, (i \neq j)$ 。
- 一个常数乘一个本征态依然是本征态，故可以选择合适的常数将一个本征态归一化（模长为1），此时称本征态为归一的。

如果某两个本征值相等，即 $v_i = v_j$  ( $i \neq j$ )，这时就称两个相应的本征态**简并**。

## 4.2.5 直积空间

基于两个希尔伯特空间 $V_1$ 和 $V_2$ ，可以通过**直积**（记作 $\otimes$ ）构成一个新的希尔伯特空间：

$$V = V_1 \otimes V_2$$

$V$ 称之为直积空间，其维度为 $n = n_1 n_2$ 。

对于 $V_1$ 和 $V_2$ 中各自的一个向量，其直积成为 $V$ 中的一个向量。同样， $V$ 中任意向量可表示为 $V_1$ 和 $V_2$ 中向量直积的线性叠加：

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |\phi_i\rangle \otimes |\varphi_i\rangle$$

直积的规则：和普通乘法是类似的，但是有**不可交换性**。

强调：不可交换性

$$|0, 1\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle \neq |1, 0\rangle = |1\rangle \otimes |0\rangle$$

# 5 迈入量子之门

## 5.1 施特恩-格拉赫实验

施特恩（Otto Stern, 1888 - 1969）和格拉赫（Walther Gerlach, 1889 - 1979）

每个银原子携带**磁矩**，可以被看作一个小磁铁。

根据经典物理的预期：观察到一条细长的连续条纹

实际观察到的现象：出现两个斑点

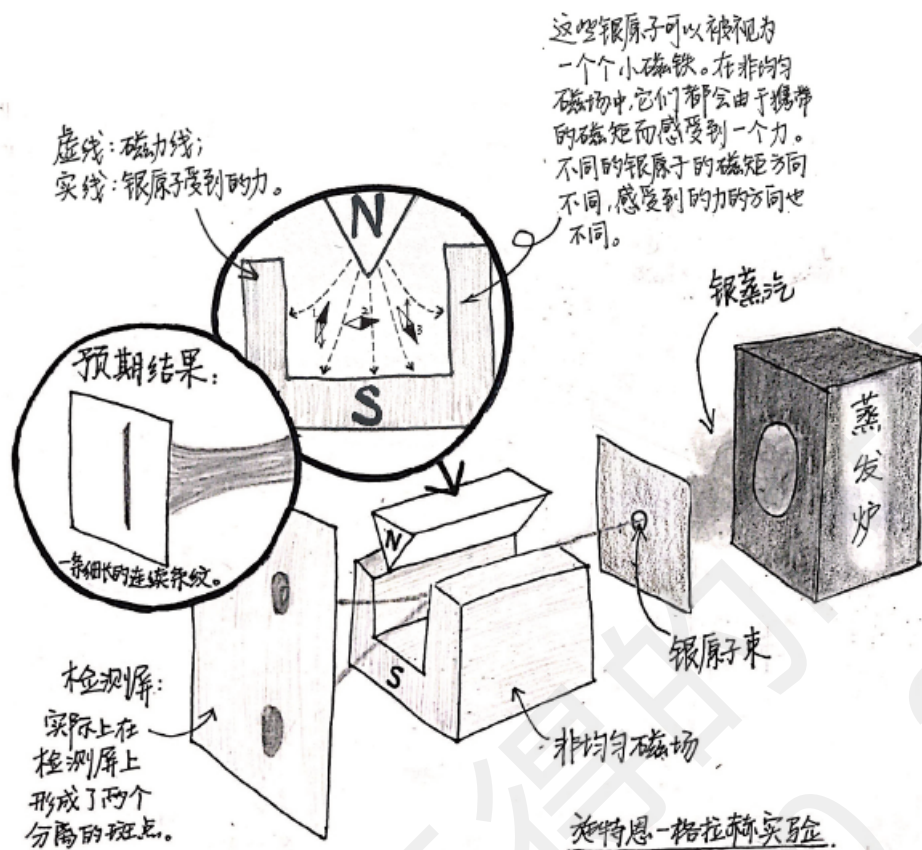


图 5.1: 施特恩-格拉赫实验。银原子具有一个非配对的电子，由于这个电子的自旋，它具有一个小磁矩，可以被当做一个小磁铁。在非均匀的磁场中，每个银原子会由于携带的磁矩感受到一个力。

## 5.2 自旋

自旋：内禀角动量

经典物理中的自转和公转，都是指**轨道角动量**：由于物体的空间旋转而形成的角动量

带电粒子旋转时，就具有磁矩。

而任意微观粒子自旋时（不必带电），具有磁矩。

电子、银原子、质子、中子的自旋是自旋 $1/2$ 。光子自旋是 $1$ 。

自旋 $1/2$ 指的是自旋的最大角动量是 $\hbar/2$ 。其角动量只能是 $\hbar/2, -\hbar/2$

自旋 $1$ 的角动量只能是 $\hbar, 0, -\hbar$ 。

费米子的自旋都是半整数的，比如 $1/2, 3/2, 5/2$ 等；玻色子的自旋都是整数的，比如 $0, 1, 2$ 等

自旋还是一种**自由度**，不同于其他同作为内禀特征的静质量和电荷。

对于两种**自旋态**：向上态 $|u\rangle$ 和向下态 $|d\rangle$ ，有：

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

可以验证他们是正交归一的。

二维希尔伯特空间中，任意向量（量子态）可以由上面这两个向量的线性叠加表示：

$$|\psi\rangle = c_1|u\rangle + c_2|d\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

对上面这个量子态进行测量，那么测到自旋向上、自旋向下的概率分别是 $|c_1|^2, |c_2|^2$ 。

量子态满足**归一化条件**： $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$ 。即概率之和为1。

假定某个银原子出来的时候，处于如下量子态：

$$|\psi_{1/6}\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}}|u\rangle + \sqrt{\frac{5}{6}}|d\rangle$$

测量结果为自旋向上的概率是1/6，自旋向下的概率是5/6。这样上下两个斑点的银原子数就大致为1:5。

## 5.3 与经典理论的区分

预测骰子的问题：我们说骰子最终位于某个面的概率为1/6，其实忽略了丢出时的各种初始条件（v, w, m, V等等），最后才需要用概率去描述骰子的终态。也即，经典力学中的不确定性来自于无知；只要排除了实验的偶然因素（即噪声）后，就可以进行准确的预测。

但是量子几率则是本质的，并不是来自于偶然。

“God doesn't play dice”：通过引进“隐变量”可以建立一个更先进全面的物理理论来预测自旋的方向。

后来贝尔（John Stewart Bell, 1928 - 1990）指出，如果你只对一个粒子或自旋进行测量，你是无法从实验上来区分量子力学的几率和通常的几率的，为了区别它们，你必须考虑至少两个粒子或自旋。贝尔证明了一个著名的不等式，他发现自旋间的几率关联会违反这个不等式，而骰子间的几率关联不会。这就为这个争论指明了一条实验检验的途径。迄今为止，所有的实验都表明隐变量理论不存在，也就是，一个量子态被希尔伯特空间中的一个向量完整描述，量子态对测量结果只能给出几率性的预测。

量子态是希尔伯特空间中的一个向量，但它们不是——对应的：比如两个向量 $|\psi\rangle$ 与 $|\tilde{\psi}\rangle = c|\psi\rangle$ 对应着同一个量子态，只需 $|c|^2 = 1$ 。

另比如下面两个态对应不同的量子态（不同的自旋态），但是在磁场为z方向进行测量时，他们对测量结果的预测是相同的。

$$\begin{aligned} |\psi_{1/6}\rangle &= \sqrt{\frac{1}{6}}|u\rangle + \sqrt{\frac{5}{6}}|d\rangle \\ |\psi'_{1/6}\rangle &= \sqrt{\frac{1}{6}}|u\rangle + \sqrt{\frac{5}{6}}i|d\rangle \end{aligned}$$

这说明改变其中某一个系数，会改变态。（此时旋转磁场产生影响）

但是如果只影响相位，则没有影响。（此时旋转磁场不产生影响）

后面会进一步证明。

## 5.4 可观测量与算符

量子力学引入了**可观测量**（observable）和**算符**（operator）的概念。前面的施特恩-格拉赫实验是在测量可观测量：自旋沿z方向的分量，对应的算符是泡利矩阵 $\hat{\sigma}_z$ 。

对于泡利矩阵 $\hat{\sigma}_z$ ，向上态 $|u\rangle$ 和向下态 $|d\rangle$ 都是它的本征态，对应的本征值分别为1和-1：

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_z|u\rangle &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |u\rangle \\ \hat{\sigma}_z|d\rangle &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = -|d\rangle \end{aligned}$$

对于一个可观测量，量子力学规定观测的结果是相应算符的本征值，所以对于算符的测量结果只可能为1或-1.

在经典力学里，描述粒子运动状态是位置 $x$ 和动量 $p$ ，可观测量也是位置 $x$ 和动量 $p$ ，观测值还是位置 $x$ 和动量 $p$ 。

在量子力学里，运动状态、可观测量、观测结果则是互不相同的概念：**运动状态是希尔伯特空间中的一个向量；可观测量是算符（或矩阵）；观测结果则是算符的本征值。**

可观测量一定是一个厄密矩阵。

## 5.5 任意方向的自旋

用实空间的单位向量 $\vec{n} = \{n_x, n_y, n_z\}$ 表示自旋的方向。则 $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 1$ 。

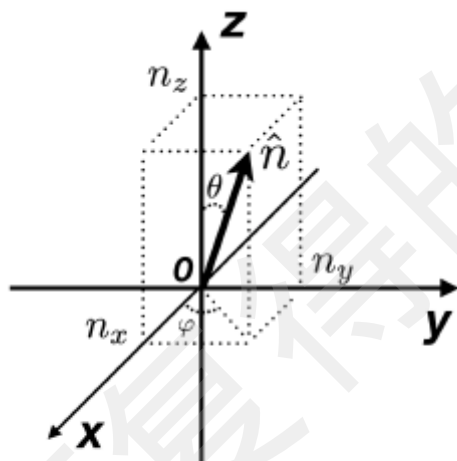


图 5.3: 三维实空间中的单位向量。

对单位向量 $\vec{n}$ 通过泡利矩阵，构造一个算符（厄密矩阵）为：

$$\vec{n} \cdot \hat{\sigma} = n_x \hat{\sigma}_x + n_y \hat{\sigma}_y + n_z \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix}$$

注：

$$\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$$

### 改变磁场方向以分析自旋

1.考虑沿 $z$ 方向单位向量( $\theta=0$ )，此时有：

$$\vec{n} \cdot \hat{\sigma} = \hat{\sigma}_z$$

上面 $\hat{\sigma}_z$ 的本征态是向上态 $|u\rangle$ 和向下态 $|d\rangle$ ，他们的相应本征值是1和-1.

2.同理，当自旋沿 $x$ 方向、沿 $y$ 方向时，就有 $\vec{n} \cdot \hat{\sigma} = \hat{\sigma}_x$ ,  $\vec{n} \cdot \hat{\sigma} = \hat{\sigma}_y$ .

3.最后考虑一般方向的单位向量：

$$\vec{n} = \{\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta\}$$

这时我们有算符：

$$\vec{n} \cdot \hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

可以验证该算符  $\vec{n} \cdot \hat{\sigma}$  的本征态是：

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

对应的本征值分别是  $\pm 1$ 。也就是

$$\vec{n} \cdot \hat{\sigma} |n_+\rangle = |n_+\rangle, \quad \vec{n} \cdot \hat{\sigma} |n_-\rangle = -|n_-\rangle$$

这就是说，无论磁场方向如何，施特恩-格拉赫实验中只会观测到两个斑点。

但有时候，施特恩-格拉赫实验中可能只观测到一个斑点。比如，当自旋处于  $|u\rangle$  态时，如果磁场方向沿  $z$  轴，那么实验上只会观测到一个斑点。

对于任意一个自旋态，我们总是可以找到方向  $\vec{n}$ ，使得它满足

$$\vec{n} \cdot \hat{\sigma} |\psi\rangle = |\psi\rangle$$

我们可以确定这个方向  $\vec{n}$  和  $c_1, c_2$  的关系： $c_1 = \cos \frac{\theta}{2}, c_2 = \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi}$ 。

这个结果的物理含义是：在施特恩-格拉赫实验中，如果产生的银原子总是处于同一个自旋态，那么我们可以调节磁场的方向，使得检测屏上只有一个斑点。

## 改变磁场方向后的测量结果

5.3在数学上阐述了自旋态  $|\psi_{1/6}\rangle, |\psi'_{1/6}\rangle$  是不同的（用模方），现在分析物理上的区别。在施特恩-格拉赫实验中，我们将磁场方向调整为  $x$  轴，即观测自旋沿  $x$  轴的分量。

任意两个正交归一的向量都可以用作二维希尔伯特空间的基。我们选  $\hat{\sigma}_x$  的两个本征态  $|f\rangle$  和  $|b\rangle$  为基，将自旋态用它们展开

$$|\psi_{1/6}\rangle = c_1 |f\rangle + c_2 |b\rangle$$

为了得到  $c_1$ ，上式两边左乘  $\langle f|$ ，利用  $\langle f|f\rangle = 1$  和  $\langle f|b\rangle = 0$ ，我们有：

$$c_1 = \langle f | \psi_{1/6} \rangle = \frac{\sqrt{5} + 1}{2\sqrt{3}}$$

类似地我们有：

$$c_2 = \langle b | \psi_{1/6} \rangle = \frac{1 - \sqrt{5}}{2\sqrt{3}}$$

所以测得自旋向前和向后的概率分别是...（略）

同样，我们可以展开自旋态  $|\psi'_{1/6}\rangle$ ：

$$|\psi'_{1/6}\rangle = c'_1 |f\rangle + c'_2 |b\rangle$$

其中

$$c'_1 = \langle f | \psi'_{1/6} \rangle = \frac{1 + i\sqrt{5}}{2\sqrt{3}}, \quad c'_2 = \langle b | \psi'_{1/6} \rangle = \frac{1 - i\sqrt{5}}{2\sqrt{3}}$$

这样测得自旋向前和向后的概率分别是：...（略）

这些计算表明： $|\psi_{1/6}\rangle$  和  $|\psi'_{1/6}\rangle$  在物理上是非常不一样的： $|\psi'_{1/6}\rangle$  向前和向后的概率是一样的，而  $|\psi_{1/6}\rangle$  向前和向后的概率差别很大。

## 不能同时测量两个算符

操作上，磁场叠加并不会得到两个分离的磁场；

理论上，可以证明三个算符是互不对易的（也就是它们的对易子，换序乘积差）。

## 期望值（平均值）

在通常的概率论里，如果结果  $w_j$  发生的几率是  $p_j$ ，那么平均结果是  $\bar{w} = \sum_j w_j p_j$ 。对于一个量子态  $|\psi\rangle$ ，也可以定义某个可观测量的“平均值”，不过，在量子力学里，大家习惯地把这个“平均值”叫做期待值。对于自旋态  $|\psi\rangle$ ，自旋算符  $\vec{n} \cdot \hat{\sigma}$  期待值的定义是

$$\langle \psi | \vec{n} \cdot \hat{\sigma} | \psi \rangle \quad (5.29)$$

可以看出或者算出下面两个自旋算符对向上态  $|u\rangle$  的期望值。

$$\langle u | \hat{\sigma}_z | u \rangle = 1, \langle u | \hat{\sigma}_x | u \rangle = 0$$

## 5.6 量子力学的基本原则

用1/2自旋说明了什么：量子力学的基本框架中的三条

### 量子态

量子体系内的某个运动状态——**希尔伯特空间中的向量**。

前面描述的自旋——二维希尔伯特空间中的向量。（一般的量子体系则为n维）

任意量子态可以表示为n维希尔伯特空间中一组n个正交归一基的线性叠加，即  $|\psi\rangle = \sum_{j=1}^n c_j |e_j\rangle$ 。

量子力学体系中，这是一个完备的描述。

**展开系数**  $c_j$  称为量子态  $|\varphi\rangle$  在基向量（基矢）  $|e_j\rangle$  上的投影系数，它满足  $c_j = \langle e_j | \varphi \rangle$ 。这些展开系数满足归一化条件：  $\sum_{j=1}^n |c_j|^2 = 1$ 。

### 可观测量

可观测量——算符（厄密矩阵  $\hat{O}$ ）。

它的**本征态**  $|\phi_j\rangle$  **相应的本征值** 对应着该算符可能的**测量结果**，由于本征态最多有n个，测量结果也最多有n个。

对于量子态  $|\psi\rangle$ ，测量结果的期望值为：  $\langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$ 。

### 概率解释

任意量子态可以表示为可观测量  $\hat{O}$  的**本征态的线性叠加**（即  $|\psi\rangle = \sum_{j=1}^n a_j |\phi_j\rangle$ ）

$|a_j|^2 = |\langle \phi_j | \psi \rangle|^2$  就是量子态处于本征态  $|\phi_j\rangle$  的概率（可以由实验测量）。



## 量子态的总体相位

一个重要推论：一个量子态的**总体相位**是没有任何物理意义的。即向量  $|\psi\rangle$  和  $|\psi'\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle$  ( $\theta$  是一个常数) 表示同一个量子态。  $|\psi\rangle$  和  $|\psi'\rangle$  期望值是一样的

$$\langle \psi' | \hat{O} | \psi' \rangle = \langle \psi | e^{-i\theta} \hat{O} e^{i\theta} | \psi \rangle = \langle \psi | e^{-i\theta} e^{i\theta} \hat{O} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle$$

处于本征态  $|\phi_j\rangle$  的概率也是一样的

$$|\langle \phi_j | \psi' \rangle|^2 = |\langle \phi_j | e^{i\theta} | \psi \rangle|^2 = |\langle \phi_j | \psi \rangle|^2 |e^{i\theta}|^2 = |a_j|^2$$

总之，在物理上  $|\psi\rangle$  和  $|\psi'\rangle = e^{i\theta}|\psi\rangle$  没有任何区别，它们表示同一个量子态。

## 6 量子动力学

### 6.1 薛定谔方程

一维形式：

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V(x)\psi(x, t)$$

注：三维薛定谔方程为：

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

关于该公式的介绍详见：

<https://zhuanlan.zhihu.com/p/138317164>

由于篇幅所限此处不赘述。

**波函数(Wave Function)** $\psi(x, t)$ 满足：

$$\psi(x, 0) \propto e^{-\frac{x^2}{2a^2}} e^{ikx}$$

注：粒子的波函数的模平方  $|\psi(x, t)|^2$  表示在  $t$  时刻在空间点  $x$  发现粒子的概率。

薛定谔方程将波函数**随时间的变化**LHS和**随空间的变化**RHS联系起来，是波粒二象性的数学体现。

经典运动可以看成量子运动的一种近似，系统能量越高则这种近似越好。

### 6.2 波函数

从离散的极限到连续（不严格，不数学）

把波函数看作一个希尔伯特空间内的向量，只是它有无穷维，这样在极差固定的条件下令取值数趋于无限多，则可以看作连续。

即所谓  $|\psi\rangle = \sum \psi(x_i) |x_i\rangle$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots, +\infty$

(当然，仅从表达形式上面就可以看出不太行；但大致意思如是)

自注：不如直接从概率质量函数pmf与概率密度函数pdf之联系来看。

此时任意希尔伯特空间内向量写为（只需对前面表达式左乘一个向量）：

$$\psi(x) = \langle x | \psi \rangle$$

此即波函数的狄拉克符号表示。

波函数是抽象的无穷维希尔伯特空间里的一个向量（倒不如直接说是一个映射）。

## 6.3 哈密顿算符和么正演化

本节最前面的薛定谔方程只描述了粒子的空间自由度，不能描述粒子自旋。

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

和最前面的公式对应的**哈密顿算符**为：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

定义**动量算符**：

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

就有：

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

注：现代物理学家非常喜欢把能量E的表达式叫做哈密顿量（Hamiltonian）通常用H来表示

经典哈密顿量：

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

它满足：

$$\frac{d}{dt} x = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

等性质（参考能量）。

可以看到量子哈密顿量与经典哈密顿量之差异就在于经典动量被算符替代了。

一个系统能量很高时，量子运动和经典运动相近。原因是量子哈密顿量与经典哈密顿量的相似性。

### 描述自旋

自旋若处于某一沿z方向的磁场，则其哈密顿算符

$$\hat{H} = \mu_b B \hat{\sigma}_z$$

其中， $\mu_b$ 为自旋携带的磁矩，而B是磁场强度。

经典力学里没有和自旋哈密顿算符对应的哈密顿量。

### 量子体系的演化

演化过程描述为：

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi_0\rangle$$

利用薛定谔方程，可严格证明 $\hat{U}(t)$ 为一个**么正算符**（或矩阵），即：

$$\hat{U}(t)^\dagger \hat{U}(t) = I$$

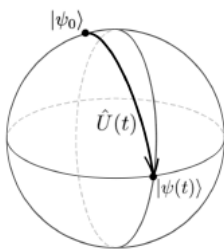


图 6.2: 希尔伯特空间中的动力学演化。量子态  $|\psi_0\rangle$  是希尔伯特空间中的一个向量，它经过一个么正演化  $\hat{U}(t)$  后变成另外一个量子态  $|\psi(t)\rangle$ 。演化轨迹始终在球面上表示么正演化过程中向量的长度不变。

演化过程的结论：

1. 两个量子态的内积不会随时间改变。
2. 如果两个量子态在初始时刻正交，那么在动力学演化过程中它们将一直保持正交。
3. 量子态的向量在动力学演化过程中长度不变。（总的几率在动力学演化过程中是守恒的）

在量子计算和量子通信中，这些操控导致的演化必须是么正的。但操纵也会带来退相干效应，之后会讲。

## 海森堡方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{O}(t) = [\hat{O}(t), \hat{H}]$$

其中  $\hat{O}$  为任意可观测量算符，对应数学上的矩阵。对于动量算符就有下式：

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{p}(t) = [\hat{p}(t), \hat{H}]$$

## 6.4 量子能级和本征波函数

复习5章所提及的：可观测量由算符表示，算符的本征值是可能的观测结果。

哈密顿算符对应的可观测量是能量，其对应的**能量本征态**为  $|\psi\rangle$ ，**本征能级（量子能级）**为  $E_n$ 。

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

这一方程称之为**本征态方程**。

如何求解一个量子系统的能量本征态？——两个例子：

### 第一个例子：

考虑一个在磁场  $\vec{B}$  中的自旋，哈密顿量为  $\hat{H}_s = \mu_b \vec{B} \cdot \hat{\sigma}$

此哈密顿量与第五章的算符  $\vec{n} \cdot \hat{\sigma}$  是等价的。

即若同样用角度  $\theta$  和  $\beta$  来表示  $\vec{B}$  的方向，即  $\vec{B} = B(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$   $\hat{H}_s$  的两个**能量本征态**和之前的公式完全一致：

$$|E_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |E_-\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

容易推出，它们对应的本征能级是  $E_{\pm} = \pm \mu_b B$ 。

让这个自旋和一束频率为  $\nu$  的光 ( 或电磁波 ) 相互作用, 如果光子能量正好等于能级差, 即  $h\nu = \Delta E = E_+ - E_- = 2\mu_b B$ , 自旋会吸收一个光子后翻转方向。这种自旋的共振吸收现象就是**核磁共振**成像技术的基础。

能量本征态提供了一个方便的求解动力学演化的方法。如果自旋的初始状态是  $|\phi_0\rangle = c_1|u\rangle + c_2|d\rangle$ , 我们可以这样来求解时刻  $t$  的自旋态。我们先将  $|\phi_0\rangle$  用能量本征态  $|E_{\pm}\rangle$  展开 (展开方法很简单, 考虑线性方程组)

$$|\phi_0\rangle = \left( c_1 \cos \frac{\theta}{2} + c_2 e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \right) |E_+\rangle + \left( c_1 \sin \frac{\theta}{2} - c_2 e^{-i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \right) |E_-\rangle$$

然后在能量本征态  $|E_{\pm}\rangle$  插入相应的**时间因子**  $e^{-iE_{\pm}t/\hbar}$ , 我们就得到了时刻  $t$  的自旋态

$$|\phi(t)\rangle = \left( c_1 \cos \frac{\theta}{2} + c_2 e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \right) e^{-i\frac{E_+t}{\hbar}} |E_+\rangle + \left( c_1 \sin \frac{\theta}{2} - c_2 e^{-i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \right) e^{-i\frac{E_-t}{\hbar}} |E_-\rangle$$

解释此方法之正确性超越了本书的范围 (orz) 。

我们将  $|\phi(t)\rangle$  用  $|u\rangle$  和  $|d\rangle$  表达

$$|\phi(t)\rangle = (c_1 \cos \omega t - ic_1 \cos \theta \sin \omega t - ic_2 e^{-i\varphi} \sin \theta \sin \omega t) |u\rangle + (c_2 \cos \omega t + ic_2 \cos \theta \sin \omega t - ic_1 e^{i\varphi} \sin \theta \sin \omega t) |d\rangle$$

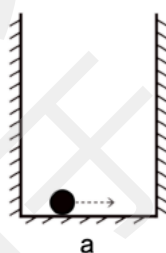
其中频率  $\omega = \mu_b B / \hbar$ 。注意, 当  $t = \pi/\omega$  时,  $|\phi(t)\rangle = -|\phi_0\rangle$ , 即自旋已经回到了初态。所以自旋周期振动的频率是  $2\omega$ , 它被称作**自旋进动频率**。我们还可以把这个动力学用么正演化算符表达出来:

$|\phi(t)\rangle = \hat{U}_s(t) |\phi_0\rangle$ , 其中

$$\hat{U}_s(t) = \begin{pmatrix} \cos \omega t - i \cos \theta \sin \omega t & -ie^{-i\varphi} \sin \theta \sin \omega t \\ -ie^{i\varphi} \sin \theta \sin \omega t & \cos \omega t + i \cos \theta \sin \omega t \end{pmatrix}$$

最后, 再次强调, 自旋周期振动的频率是  $2\omega$ , 这也和之前提到的整体相位有关。

## 第二个例子:



在第二个例子中, 我们考虑一个质量为  $m$  的球, 它在一个一维的盒子里运动, 盒子是固定的, 长度是  $a$ , 盒壁不可穿透, 球和盒壁的碰撞是弹性的 (即碰撞不会改变球的能量)。另外, 为了简单我们忽略球的大小也不考虑摩擦力。由于球在盒子中受到的合力为零, 这相当于公式 (6.7) 中的  $V(x) = 0$ 。所以这个球的哈密顿算符是

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (6.25)$$

根据  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$  可以写出**本征态方程**的形式:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$$

**本征态函数**的形式:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

相应的**量子能级**为:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

经典小球的能量是0，这种非零的最低能量是一种量子效应（第一章的零点振动）。

somehow，我们可以看到薛定谔方程的本征波函数和驻波的振动形式的图形存在某种类似。

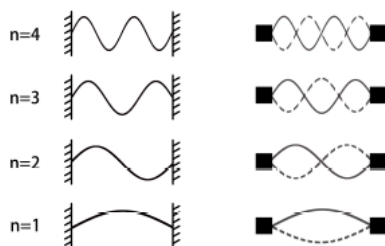


图 6.4: 左：一维盒子中量子小球的四个本征波函数；右：琴弦的振动模式。

## 对氢原子的分析

求解其本征波函数超出本书范围，结果如图：

其中1s 本征波函数的能量最低，通常被称为基态波函数。

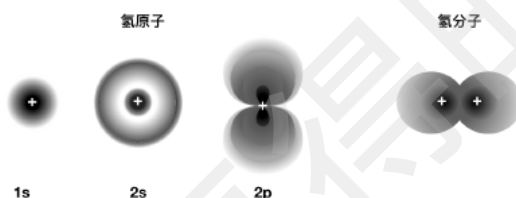


图 6.5: 氢原子中电子的三个能量本征波函数和氢分子基态本征波函数示意图。‘+’代表带正电荷的质子。颜色越深波函数取值越大。请和图2.3中的玻尔轨道和德·布罗意的电子驻波对比。

这反映了量子力学中的一种现象：单个粒子可以同时出现在不同点。

## 6.5 态叠加原理和不可克隆原理

### 态叠加原理

**态叠加原理：**两个量子演化，线性叠加以后依然是一个合理的量子演化。

一个例子：

考虑一个量子系统。它的一个初态  $|\phi_1(0)\rangle$  经过动力学演化成为  $|\phi_1(t)\rangle$ ，另一个初态  $|\phi_2(0)\rangle$  经过动力学演化成为  $|\phi_2(t)\rangle$ 。利用公式 (6.10)，我们有

$$|\phi_1(t)\rangle = \hat{U}(t) |\phi_1(0)\rangle, \quad |\phi_2(t)\rangle = \hat{U}(t) |\phi_2(0)\rangle \quad (6.29)$$

上面两式中的  $\hat{U}(t)$  是这个量子系统的么正演化算符。考察第三个初态，它是前两个初态的线性叠加， $c_1 |\phi_1(0)\rangle + c_2 |\phi_2(0)\rangle$ 。按照下面的推导，它会演化成  $c_1 |\phi_1(t)\rangle + c_2 |\phi_2(t)\rangle$ 。

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) [c_1 |\phi_1(0)\rangle + c_2 |\phi_2(0)\rangle] &= c_1 \hat{U}(t) |\phi_1(0)\rangle + c_2 \hat{U}(t) |\phi_2(0)\rangle \\ &= c_1 |\phi_1(t)\rangle + c_2 |\phi_2(t)\rangle \end{aligned} \quad (6.30)$$

然而，在经典力学中，这种叠加是不合理的。

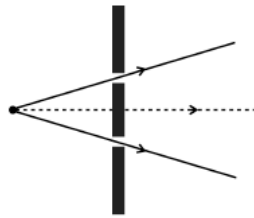


图 6.6: 经典粒子轨迹的线性叠加。除了一个具有双缝的墙，粒子（实心圆）不感受任何其他力。实线代表两条可能的运动轨迹。黑虚线是这两条轨迹的等权重叠加，它代表的轨迹显然在物理上是不可能的。

态叠加原理会带来诸多结果，量子不可克隆定理正是其中之一。

## 量子不可克隆定理

克隆在量子世界是不允许的。根本的原因就是量子力学里的态叠加原理。我们用反证法来证明：

考虑有一个系统处于量子态  $|\psi\rangle$ ，另外一个系统处于空白态  $|\emptyset\rangle$ ，那么这两个系统组成的复合系统处于量子态  $|\psi\rangle \otimes |\emptyset\rangle$ 。（ $\otimes$  就是直积）。假设克隆在量子力学里是可行的，那么我们就应该有

$$|\psi\rangle \otimes |\emptyset\rangle \longrightarrow |\psi\rangle \otimes |\psi\rangle$$

这个量子克隆过程应该是一个么正变换  $\hat{U}$ （否则，就不叫量子克隆）。

所以我们有

$$|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle = \hat{U}(|\psi\rangle \otimes |\emptyset\rangle)$$

类似地对于另外一个量子态  $|\phi\rangle$ ，我们有

$$|\phi\rangle \otimes |\phi\rangle = \hat{U}(|\phi\rangle \otimes |\emptyset\rangle)$$

不失一般性，我们假设  $\langle\phi|\psi\rangle = 0$ 。注意，对于两个不同的量子态  $|\psi\rangle$  和  $|\phi\rangle$ ，量子克隆这个操作必须由同一个么正算符  $\hat{U}$  表示。这和我们日常的复制一样，同一个复印机可以复制内容不同的材料。

现在我们考虑克隆一个新量子态  $|\varphi\rangle = (|\phi\rangle + |\psi\rangle)/\sqrt{2}$ 。我们有两条途径来得到克隆结果

1. 利用态叠加原理，将前面两个式子相加并除以  $\sqrt{2}$ ，我们得到

$$(|\psi\rangle \otimes |\psi\rangle + |\phi\rangle \otimes |\phi\rangle)/\sqrt{2} = \hat{U}[(|\psi\rangle + |\phi\rangle) \otimes |\emptyset\rangle/\sqrt{2}]$$

2. 直接利用  $\hat{U}$  的定义，

$$\frac{1}{2}(|\psi\rangle + |\phi\rangle) \otimes (|\psi\rangle + |\phi\rangle) = \hat{U}[(|\psi\rangle + |\phi\rangle) \otimes |\emptyset\rangle/\sqrt{2}]$$

很显然，两种途径导致了不同的克隆结果。矛盾，假设不成立，量子克隆不存在。这就是量子不可克隆定理。

故，量子计算机**没有存储功能**。（在经典计算机上，我们经常把一些暂时的结果存起来供以后调用，这在量子计算机上是不允许的。）

为什么由按照量子力学运动演化的微观粒子构成的世界中存在克隆呢？因为：

1. 日常生活中的复制并不是么正操作。
2. 量子力学中的相同是绝对的，而经典力学中的相同是近似的。

## 6.6 双缝干涉（略）



图 6.7: 双缝干涉实验。电子自左边入射, 在右侧屏幕形成干涉条纹。可以通过改变线圈的电流强度来移动干涉条纹。

## 7 量子纠缠和贝尔不等式

量子纠缠指的是一个量子系统中两个粒子或多个粒子之间存在的一种超距关联。

量子纠缠会违反贝尔不等式, 经典超距关联则不会。

有必要再记忆一下泡利矩阵。

$$\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

### 7.1 双自旋

纠缠涉及至少两个粒子, 因此我们考虑最简单的多粒子体系: 双自旋。

算符  $\hat{\sigma} = \{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$  表示自旋 1, 算符  $\hat{\tau} = \{\hat{\tau}_x, \hat{\tau}_y, \hat{\tau}_z\}$  表示自旋 2.  $\hat{\tau}$  也是泡利矩阵, 注:

$$\hat{\tau}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

这里用  $\hat{\tau}$  是为了和自旋 1 区分。

这两个自旋组成了一个复合系统。

#### 7.1.1 直积符号表示双自旋体系

如果自旋 1 处于量子态  $|\psi\rangle = a_1|u\rangle + b_1|d\rangle$ , 自旋 2 处于量子态  $|\phi\rangle = a_2|u\rangle + b_2|d\rangle$ , 那么双自旋体系的量子态可以通过直积符号  $\otimes$  表达为

$$\begin{aligned} |\Psi_{12}\rangle &= |\psi\rangle \otimes |\phi\rangle = \underbrace{(a_1|u\rangle + b_1|d\rangle)}_1 \otimes \underbrace{(a_2|u\rangle + b_2|d\rangle)}_2 \\ &= a_1a_2 \underbrace{|u\rangle}_1 \otimes \underbrace{|u\rangle}_2 + a_1b_2 \underbrace{|u\rangle}_1 \otimes \underbrace{|d\rangle}_2 + b_1a_2 \underbrace{|d\rangle}_1 \otimes \underbrace{|u\rangle}_2 + b_1b_2 \underbrace{|d\rangle}_1 \otimes \underbrace{|d\rangle}_2 \end{aligned}$$

约定在这类直积态中左边是自旋 1 的态, 右边是自旋 2 的态。

在实际计算中, 绝大多数情况下省略直积符号  $\otimes$  不会引起混淆, 这和我们经常省略乘号  $\times$  一样。我们对符号进行如下简化

$$\underbrace{|u\rangle}_1 \otimes \underbrace{|u\rangle}_2 \equiv |uu\rangle, \quad \underbrace{|u\rangle}_1 \otimes \underbrace{|d\rangle}_2 \equiv |ud\rangle, \quad \underbrace{|d\rangle}_1 \otimes \underbrace{|u\rangle}_2 \equiv |du\rangle, \quad \underbrace{|d\rangle}_1 \otimes \underbrace{|d\rangle}_2 \equiv |dd\rangle$$

双自旋态  $|\Psi_{12}\rangle$  于是变成

$$|\Psi_{12}\rangle = a_1a_2|uu\rangle + a_1b_2|ud\rangle + b_1a_2|du\rangle + b_1b_2|dd\rangle$$



类似地，我们可以简化共轭向量

$$\underbrace{\langle u |}_1 \otimes \underbrace{\langle u |}_2 \equiv \langle uu |, \quad \underbrace{\langle u |}_1 \otimes \underbrace{\langle d |}_2 \equiv \langle ud |, \quad \underbrace{\langle d |}_1 \otimes \underbrace{\langle u |}_2 \equiv \langle du |, \quad \underbrace{\langle d |}_1 \otimes \underbrace{\langle d |}_2 \equiv \langle dd |$$

即，在共轭向量中也是左边是自旋 1 的态而右边是自旋 2 的态。

## 7.1.2 双自旋态的内积

对于两个双自旋态  $|\psi_1 \phi_1\rangle$  和  $|\psi_2 \phi_2\rangle$ （也就是下面的直积态），我们这样计算它们的内积

$$\langle \psi_1 \phi_1 | \psi_2 \phi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle$$

由此， $\langle uu | uu \rangle = \langle u | u \rangle \langle u | u \rangle = 1$ ,  $\langle dd | ud \rangle = \langle d | u \rangle \langle d | d \rangle = 0$ .

类似可得  $|uu\rangle, |ud\rangle, |du\rangle, |dd\rangle$  是一组正交归一基。任意一个双自旋态  $|\Phi\rangle$  可以用这四个基展开。

$$|\Phi\rangle = c_1|uu\rangle + c_2|ud\rangle + c_3|du\rangle + c_4|dd\rangle$$

各个基前面的系数满足归一化条件。

对于任意两个双自旋量子态  $|\Phi_1\rangle$

$$|\Phi_1\rangle = a_1|uu\rangle + a_2|ud\rangle + a_3|du\rangle + a_4|dd\rangle$$

和

$$|\Phi_2\rangle = b_1|uu\rangle + b_2|ud\rangle + b_3|du\rangle + b_4|dd\rangle$$

可以计算它们的内积  $\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle$

$$\begin{aligned} & \langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle \\ &= (a_1^* \langle uu| + a_2^* \langle ud| + a_3^* \langle du| + a_4^* \langle dd|)(b_1|uu\rangle + b_2|ud\rangle + b_3|du\rangle + b_4|dd\rangle) \\ &= a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + a_3^* b_3 + a_4^* b_4 \end{aligned}$$

另一个内积  $\langle \Phi_2 | \Phi_1 \rangle$  可以类似计算，并且可以验证  $\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = \langle \Phi_2 | \Phi_1 \rangle^*$ 。

## 7.1.3 直积态和纠缠态

$|\Psi_{12}\rangle$  等双自旋态可以表示为两个单自旋态的直积，这种双自旋态称为**直积态**。

并非所有的双自旋态都是直积态，例如

$$|S_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle + |du\rangle)$$

可以用反证法来证明这个结论：

假设  $|S_3\rangle$  是一个直积态，那么可以选择  $|\Psi_{12}\rangle$  中的系数  $a_1, b_1, a_2, b_2$  使得  $|S_3\rangle = |\Psi_{12}\rangle$ 。比较系数有：

$$a_1 a_2 = b_1 b_2 = 0, \quad a_1 b_2 = a_2 b_1 = 1/\sqrt{2}$$

两个等式是矛盾的。

$|S_3\rangle$  这类双自旋态就是**纠缠态**。



## 7.1.4 双自旋系统的算符

双自旋系统里有两种算符：

- **单自旋算符**，比如  $\hat{\sigma}_x$  和  $\hat{\tau}_y$
- **双自旋算符**，比如  $\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\tau}_x$  和  $\hat{\sigma}_y \otimes \hat{\tau}_z$ （更一般地，有  $\vec{n}_1 \cdot \hat{\sigma} \otimes \vec{n}_2 \cdot \hat{\tau}$ ）

当自旋 1 的算符作用到态  $|\Phi\rangle$  时，它只作用在自旋 1 的态上，例如

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_z|\Phi\rangle &= c_1(\hat{\sigma}_z|u\rangle) \otimes |u\rangle + c_2(\hat{\sigma}_z|u\rangle) \otimes |d\rangle + c_3(\hat{\sigma}_z|d\rangle) \otimes |u\rangle + c_4(\hat{\sigma}_z|d\rangle) \otimes |d\rangle \\ &= c_1|uu\rangle + c_2|ud\rangle - c_3|du\rangle - c_4|dd\rangle\end{aligned}$$

类似地，自旋 2 的算符只作用在自旋 2 的态上，例如

$$\begin{aligned}\hat{\tau}_x|\Phi\rangle &= c_1|u\rangle \otimes (\hat{\tau}_x|u\rangle) + c_2|u\rangle \otimes (\hat{\tau}_x|d\rangle) + c_3|d\rangle \otimes (\hat{\tau}_x|u\rangle) + c_4|d\rangle \otimes (\hat{\tau}_x|d\rangle) \\ &= c_1|ud\rangle + c_2|uu\rangle + c_3|dd\rangle + c_4|du\rangle\end{aligned}$$

当双自旋算符，比如  $\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\tau}_x$ ，作用在双自旋态上时，自旋 1 的算符作用在自旋 1 的态上，自旋 2 的算符作用在自旋 2 的态上。下面是一个例子

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\tau}_x|\Phi\rangle &= c_1(\hat{\sigma}_z|u\rangle) \otimes (\hat{\tau}_x|u\rangle) + c_2(\hat{\sigma}_z|u\rangle) \otimes (\hat{\tau}_x|d\rangle) + \\ &\quad c_3(\hat{\sigma}_z|d\rangle) \otimes (\hat{\tau}_x|u\rangle) + c_4(\hat{\sigma}_z|d\rangle) \otimes (\hat{\tau}_x|d\rangle) \\ &= c_1|ud\rangle + c_2|uu\rangle - c_3|dd\rangle - c_4|du\rangle\end{aligned}$$

## 7.1.5 在双自旋体系中计算期望算符

以  $\langle\Phi|\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\tau}_x|\Phi\rangle$  为例来说明如何在双自旋体系里计算**期待值（期望）算符**：

$\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\tau}_x$  作用在向量  $|\Phi\rangle$  上得到一个新的向量，这个新的向量再和向量  $\langle\Phi|$  内积即给出这个算符的期待值。

对于纠缠态，我们就按照上面的规定老老实实算（参见作业9）。

对于**直积态**，算符期待值的计算可以进一步**简化**：

对于双自旋算符有：

$$\begin{aligned}\langle\Psi_{12}|\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\tau}_x|\Psi_{12}\rangle &= (\langle\psi|\langle\phi|)\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\tau}_x(|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle) \\ &= \langle\psi|\hat{\sigma}_z|\psi\rangle \langle\phi|\hat{\tau}_x|\phi\rangle = (a_1^*a_1 - b_1b_1^*)(a_2^*b_2 + a_2b_2^*)\end{aligned}$$

对于单自旋算符有：

$$\langle\Psi_{12}|\hat{\tau}_x|\Psi_{12}\rangle = \langle\psi|\langle\phi|\hat{\tau}_x|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle \langle\phi|\hat{\tau}_x|\phi\rangle = a_2^*b_2 + a_2b_2^*$$

事实上，在任何量子体系中，算符期待值的计算都可以由**算符对量子态的作用规则**和**内积的计算规则**自然给出。

## 7.2 量子纠缠

### 自旋单重态 $|S\rangle$

下面的双自旋态（纠缠态）称为**自旋单重态**。

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle)$$

## 7.2.1 双自旋施特恩-格拉赫实验

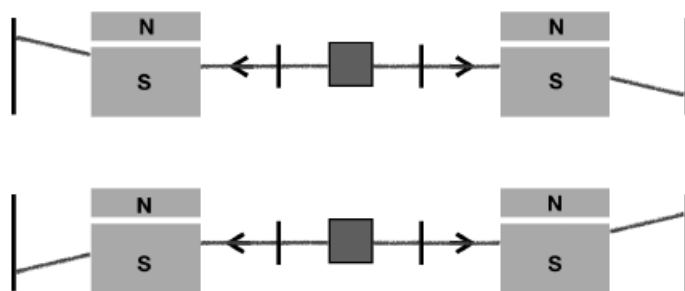


图 7.1: 双自旋施特恩-格拉赫实验。和图5.1不同的地方是：蒸发炉被一个更精巧的装置代替，这个装置能够产生一对一对的自旋：每对自旋都处于单重态；两个自旋具有相反的动量，自旋 1 往左飞和自旋 2 往右飞行。图中示意地描绘了仅有的两种可能观测结果。

## 7.2.2 贝尔不等式

### 1) 特殊的 $z$ 方向

双自旋算符则同时和两个自旋有关。在双自旋施特恩-格拉赫实验中，这对应两边都有磁场。图7.1展示的情形对应双自旋算符  $\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\tau}_z$ 。

可以验证

$$\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\tau}_z |S\rangle = -|S\rangle$$

所以自旋单重态  $|S\rangle$  是双自旋算符  $\hat{\sigma}_z \otimes \hat{\tau}_z$  的本征态，对应的本征值是  $-1$ 。（本征值对应于测量结果）

- 对于单自旋，测量结果只能是向上或向下，即 1 或 -1。
- 对于双自旋，如果测量结果是 -1，这意味着对自旋 1 和自旋 2 的测量结果总是相反的：如果自旋 1 向上，自旋 2 就向下；如果自旋 1 向下，自旋 2 就向上。

### 2) 任意方向

考虑一个新的双自旋算符， $\vec{n} \cdot \hat{\sigma} \otimes \vec{n} \cdot \hat{\tau}$ ：（在双自旋施特恩-格拉赫实验中，这对应两边的磁场都指向  $\vec{n}$ ）

可以计算验证，单重态  $|S\rangle$  也是  $\vec{n} \cdot \hat{\sigma} \otimes \vec{n} \cdot \hat{\tau}$  的本征态，即

$$\vec{n} \cdot \hat{\sigma} \otimes \vec{n} \cdot \hat{\tau} |S\rangle = -|S\rangle$$

本征值是 -1 表明，在图 7.1 的实验中，**两边的磁场无论共同指向哪个方向  $\vec{n}$ ，每对自旋都会飞向相反的斑点**。如果你沿方向  $\vec{n}$  测到自旋 1 向上，那么自旋 2 肯定沿  $\vec{n}$  向下，反之亦然。

可以验算下面这个等式

$$|S\rangle = -\frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2}}(|n_+ n_- \rangle - |n_- n_+ \rangle)$$

其中  $|n_+ \rangle, |n_- \rangle$  是沿  $\vec{n}$  方向自旋算符  $\vec{n} \cdot \hat{\sigma}$  的两个本征态：

沿方向  $\vec{n}$  测到自旋 1 向上，那么自旋 2 肯定沿  $\vec{n}$  向下，反之亦然。

### 3) 贝尔不等式

贝尔不等式：

$$p(A, \neg B) + p(B, \neg C) \geq p(A, \neg C)$$

证明方法：类似于Venn图的简明方法。

### 4) 双自旋单重自旋态里的几率关联会违反这一不等式

经典概率论不能解释量子纠缠中的关联。

在双自旋施特恩-格拉赫实验中，两侧的磁场方向是一样的。也可以让两侧的磁场方向不同，比如左侧磁场的方向是  $\vec{e}_1$ 、右侧的方向是  $\vec{e}_2$ 。为简单起见，我们设定  $\vec{e}_1$  和  $\vec{e}_2$  只处于  $xz$  平面，在  $y$  方向没有分量。由于自旋 1 飞向左边，它的可观测量算符是  $\vec{e}_1 \cdot \hat{\sigma}$ ；类似地，自旋 2 的算符是  $\vec{e}_2 \cdot \hat{\tau}$ 。这样，对于这种实验设置，双自旋算符是  $\vec{e}_1 \cdot \hat{\sigma} \otimes \vec{e}_2 \cdot \hat{\tau}$ 。

$\vec{e}_1 \cdot \hat{\sigma}$  和  $\vec{e}_2 \cdot \hat{\tau}$  各自有两个本征态

$$\begin{aligned}\vec{e}_1 \cdot \hat{\sigma} |e_1^+\rangle &= |e_1^+\rangle, & \vec{e}_1 \cdot \hat{\sigma} |e_1^-\rangle &= -|e_1^-\rangle \\ \vec{e}_2 \cdot \hat{\tau} |e_2^+\rangle &= |e_2^+\rangle, & \vec{e}_2 \cdot \hat{\tau} |e_2^-\rangle &= -|e_2^-\rangle\end{aligned}$$

用这些本征态可以构造出双自旋算符  $\vec{e}_1 \cdot \hat{\sigma} \otimes \vec{e}_2 \cdot \hat{\tau}$  的四个本征态  $|e_1^+ e_2^+\rangle, |e_1^+ e_2^-\rangle, |e_1^- e_2^+\rangle, |e_1^- e_2^-\rangle$ 。这四个本征态正好组成另外一套双自旋希尔伯特空间的正交归一基。我们将自旋单重态用这四个本征态展开

$$|S\rangle = g_1 |e_1^+ e_2^+\rangle + g_2 |e_1^+ e_2^-\rangle + g_3 |e_1^- e_2^+\rangle + g_4 |e_1^- e_2^-\rangle$$

有：

$$p(\hat{e}_1, \hat{e}_2) = |g_1|^2 = |\langle e_1^+ e_2^+ | S \rangle|^2$$

这是同时测到左侧自旋沿  $\vec{e}_1$  向上和右侧自旋沿  $\vec{e}_2$  向上的几率。这个几率显然只应该依赖于  $\vec{e}_1$  和  $\vec{e}_2$  间的夹角，因此为简化计算，我们可以假定  $\vec{e}_1$  就是  $z$  轴，而  $\vec{e}_2$  在  $xz$  平面但和  $z$  轴有个夹角  $\theta$ ：即  $\hat{e}_1 = \{0, 0, 1\}$  和  $\hat{e}_2 = \{\sin \theta, 0, \cos \theta\}$

于是我们有

$$|e_1^+ e_2^+\rangle = |u\rangle \otimes \left( \cos \frac{\theta}{2} |u\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |d\rangle \right) = \cos \frac{\theta}{2} |uu\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |ud\rangle$$

和

$$\begin{aligned}p(\hat{e}_1, \hat{e}_2) &= \left| \cos \frac{\theta}{2} \langle uu | + \sin \frac{\theta}{2} \langle ud | \right| S \rangle \Big|^2 \\ &= \sin^2 \frac{\theta}{2} |\langle ud | S \rangle|^2 = \frac{1}{2} \sin^2 \frac{\theta}{2}\end{aligned}$$

下面用这个结果来演示量子纠缠的超距关联会违反贝尔不等式。

### 7.2.3 自我的缺失

在量子纠缠态中，我们可以确切地知道系统的整体运动状态，但却不知道系统中每个粒子的运动状态。我们把量子纠缠态的这个特征叫做自我的缺失。

例子：自旋单重态中单个自旋失去了自我

从物理角度理解：

对于任意一个单自旋态  $|\psi\rangle$ , 总是可以找到一个方向  $\vec{n}$  以至于  $\vec{n} \cdot \hat{\sigma}|\psi\rangle = |\psi\rangle$ , 也就是  $\langle\psi|\vec{n} \cdot \hat{\sigma}|\psi\rangle = 1$ 。

这个结果表明, 在普通的施特恩-格拉赫实验中, 如果粒子源发射的银原子总是处于自旋态  $|\psi\rangle$ , 我们总是可以适当调整磁场的方向使得屏幕上只有一个点。

**自旋单重态  $|S\rangle$  中的单自旋有完全不同的表现。**

先计算  $\langle S|\vec{n} \cdot \hat{\sigma}|S\rangle$

首先容易证明  $\langle S|\hat{\sigma}_x|S\rangle = 0$ , 类似可以推出

$$\langle S|\hat{\sigma}_y|S\rangle = \langle S|\hat{\sigma}_z|S\rangle = 0$$

所以

$$\langle S|\vec{n} \cdot \hat{\sigma}|S\rangle = n_x \langle S|\hat{\sigma}_x|S\rangle + n_y \langle S|\hat{\sigma}_y|S\rangle + n_z \langle S|\hat{\sigma}_z|S\rangle = 0$$

对于自旋 2, 我们同样有

$$\langle S|\vec{n} \cdot \hat{\tau}|S\rangle = 0$$

双自旋施特恩-格拉赫实验中, 无论你怎么调整两侧磁场的方向, 你永远会在两侧的屏幕上各观察到两个分立的大小相同的斑点。

而直积态则是可以找类似于单自旋态情形的的磁场方向使得两边的斑点各只有一个的。

既然处于纠缠态的单个粒子没有确定的量子态不能用希尔伯特空间中的向量描述, 那它究竟处于什么态, 我们该如何描述它呢? 它处于混合态, 可以用密度矩阵描述它的状态。对于处于自旋单重态的自旋 1, 它处于如下混合态

$$\hat{\rho}_1 = \frac{1}{2}|u\rangle\langle u| + \frac{1}{2}|d\rangle\langle d| \quad (7.41)$$

这个密度矩阵表示自旋 1 处于一个不确定的量子状态: 有 1/2 的概率处于量子态  $|u\rangle$ ; 有 1/2 的概率处于量子态  $|d\rangle$ 。至于这个密度矩阵为什么具有这么古怪的形式, 是怎么得到的, 它的进一步的含义等都超越了本书的范围, 有兴趣的读者可以参考朗道的《量子力学》。

## 8 量子测量

### 8.1 海森堡不确定性关系

众所周知:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$$

平均值或期待值的定义为:

$$\bar{w} = \sum_{i=1}^n p_i w_i$$

不确定度的定义为:

$$\Delta w = \sqrt{\sum_{i=1}^n p_i (w_i - \bar{w})^2}$$

在量子力学中，对于一个自旋 $|\psi\rangle = a|u\rangle + b|d\rangle$ ，对于其互不对易的自旋算符 $\hat{\sigma}_x$ 和 $\hat{\sigma}_z$ ：

根据测量统计可以得到 $\hat{\sigma}_z$ 的期待值为：

$$\bar{\sigma}_z = |a|^2 - |b|^2$$

后面就没有了orz