保利自旋矩阵、特征值和特征向量

赵晓菲

2023 年 7 月 31 日

在上一张幻灯片中，我们已经看到了 σ_x、σ_y 和 σ_z 的算子和特征值。接下来，我们将继续探讨这些自旋矩阵的基础变换。

1. 在 $\pm$ 基中的表示：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle)$$

对于 σ_x 算子：

$$\sigma_x\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x|0\rangle + \sigma_x|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |0\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |0\rangle)$$

对于 σ_x 算子：

$$\sigma_x\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x|0\rangle - \sigma_x|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |0\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |0\rangle)$$

因此，在 $\pm$ 基中，σ_x 的表示为：

$$\sigma_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Pauli 自旋矩阵的算子和特征值示例（续）

2. 在 $\pm$ 基中的表示：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle)$$

对于 σ_y 算子：

$$\sigma_y \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_y|0\rangle + \sigma_y(i|1\rangle)) = \frac{1}{\sqrt{2}}(i|1\rangle - i|0\rangle) = -i\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle)$$

对于 σ_y 算子：

$$\sigma_y \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - i|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_y|0\rangle - \sigma_y(i|1\rangle)) = \frac{1}{\sqrt{2}}(i|1\rangle + i|0\rangle) = i\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle)$$

因此，在 $\pm$ 基中，σ_y 的表示为：

$$\sigma_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i & -i \\ i & i \end{pmatrix}$$

3. 在 $\pm$ 基中的表示：

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

对于 σ_z 算子：

$$\sigma_z|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle$$

对于 σ_z 算子：

$$\sigma_z|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = -|1\rangle$$

因此，在 $|0\rangle/|1\rangle$ 基中，σ_z 的表示为：

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Pauli 自旋矩阵的特征向量/特征值计算

考虑 Pauli 自旋矩阵 σ_z，我们要找到它的特征向量和特征值。

对于特征向量 $|+\rangle$，满足 $\sigma_z|+\rangle = |+\rangle$。
计算 $\sigma_z|+\rangle$：

$$\sigma_z|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = -|+\rangle$$

因此，特征向量 $|+\rangle$ 对应的特征值为 -1。

对于特征向量 $|-\rangle$，满足 $\sigma_z|-\rangle = |-\rangle$。
计算 $\sigma_z|-\rangle$：

$$\sigma_z|-\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |-\rangle$$

因此，特征向量 $|-\rangle$ 对应的特征值为 1。

Pauli 自旋矩阵的性质

Pauli 自旋矩阵是量子力学中重要的矩阵，具有许多有趣的性质。

1. 定义

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

2. 对易关系

$$\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x = 2i\sigma_z, \quad \sigma_y\sigma_z - \sigma_z\sigma_y = 2i\sigma_x, \quad \sigma_z\sigma_x - \sigma_x\sigma_z = 2i\sigma_y$$

3. 平方

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I$$

4. 反对易关系

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij}I \quad (i, j = x, y, z)$$

5. Pauli 自旋矩阵的乘积性质

$$\sigma_i\sigma_j = \varepsilon_{ijk}\sigma_k + i\delta_{ij}I \quad (i, j, k = x, y, z)$$

Pauli 矩阵的矢量空间

Pauli 矩阵是一组 Hermitian 矩阵，加上单位矩阵 I (有时被认为是第零个 Pauli 矩阵 σ_0)，它们构成了 2x2 Hermitian 矩阵的实向量空间的一组基。

定义 Pauli 矩阵：

$$\sigma_0 = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \sigma_z$$

在这个矢量空间中，任意 Hermitian 矩阵都可以表示为 Pauli 矩阵的线性组合。例如，一个 2x2 Hermitian 矩阵可以写为：

$$A = a_0\sigma_0 + a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 + a_3\sigma_3$$

用哪个基表示 Pauli 矩阵?

当我们写 Pauli 矩阵时，使用了一个特定的基。这个基是：

$$\sigma_0 = I, \quad \sigma_1 = \sigma_x, \quad \sigma_2 = \sigma_y, \quad \sigma_3 = \sigma_z$$

这些矩阵是线性无关的，并且可以组成矢量空间的一组基。通过使用这个基，我们可以方便地进行 Pauli 矩阵的运算和表示。
在这个基下，任意 2x2 Hermitian 矩阵都可以表示为 Pauli 矩阵的线性组合。

任意方向的自旋算符

在 3D 空间中，自旋算符 $\mathbf{S}$ 表示一个粒子在任意方向 n 上的自旋。

我们可以用 Pauli 矩阵来表示自旋算符在 n 方向的分量：

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z$$

其中 n_x, n_y, n_z 是单位向量 $\mathbf{n}$ 在 x, y, z 方向上的分量。

如果我们假设 $\mathbf{n}$ 指向西方，即 $\mathbf{n} = (-1, 0, 0)$，则自旋算符在该方向上的分量为：

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = (-1)\sigma_x + 0\sigma_y + 0\sigma_z = -\sigma_x$$

自旋算符在西方方向的表达式

自旋算符 $\mathbf{S}$ 在任意方向 $\mathbf{n}$ 上的分量可以表示为：

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z$$

对于西方方向，$\mathbf{n} = (-1, 0, 0)$，所以自旋算符在西方方向上的分量为：

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} = (-1)\sigma_x + 0\sigma_y + 0\sigma_z = -\sigma_x$$

类似地，我们可以找到自旋算符在其他方向上的分量。

什么是自伴（厄密）矩阵？

自伴（Hermitian）矩阵是一个复数矩阵，其转置的共轭等于它自身。对于一个 $n \times n$ 的矩阵 A，如果满足以下条件，它就是自伴矩阵：

$$A = A^{\dagger}$$

其中 $A^{\dagger}$ 表示 A 的厄密共轭（共轭转置）。
自伴矩阵在量子力学中扮演着重要的角色，它们的特征值是实数，而且它们的特征向量是正交的。

如何找到特征向量和特征值/对角化矩阵?

对于一个 $n \times n$ 的矩阵 A，特征向量 $|\lambda_i\rangle$ 是满足以下方程的非零向量：

$$A|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle$$

其中 λ_i 是特征值，而 $|\lambda_i\rangle$ 是对应于特征值 λ_i 的特征向量。
要找到特征向量和特征值，我们需要求解特征方程 $|A - \lambda_i I\rangle = 0$，其中 I 是单位矩阵。
一旦我们找到了特征向量，我们可以用它们组成矩阵 P，并将 A 对角化为 D:

$$D = P^\dagger AP$$

其中 D 是对角矩阵，其对角线元素是特征值，而 P 是由特征向量构成的矩阵。

更多的 Bra-Ket 运算

在量子力学中，我们使用 Bra-Ket 表示法来描述物理量和态之间的关系。

- Bra：表示为 $\langle\psi|$，是一个行向量，代表态空间中的一个态，如 $|\psi\rangle$ 的厄密共轭。
- Ket：表示为 $|\psi\rangle$，是一个列向量，代表态空间中的一个态。
- 内积：用 $\langle\phi|\psi\rangle$ 表示，表示两个态的内积，也称为态之间的重叠。
- 外积：用 $|\psi\rangle\langle\phi|$ 表示，表示一个态空间中的投影算符。
- 测量：当测量一个物理量时，态会坍缩为对应的特征态，得到特定的测量结果。

Bra-Ket 表示法在量子力学的数学描述中非常常用，它使得表达物理概念更加简洁和直观。

矩阵的伴随

在线性代数中，矩阵 A 的伴随记为 $A^\dagger$（或有时候写作 A^*），它定义为矩阵 A 的共轭转置。如果 A 是一个 $m \times n$ 的矩阵，那么它的伴随 $A^\dagger$ 就是一个 $n \times m$ 的矩阵。

$$A^\dagger = A^* = (A^T)^*$$

其中 A^T 表示矩阵 A 的转置，$*$ 表示复共轭。

厄密矩阵

如果一个矩阵的伴随等于它本身，那么这个矩阵被称为**自伴随**或**厄密矩阵**。形式上，对于矩阵 A 来说，它是厄密矩阵当且仅当：

$$A^{\dagger} = A$$

在分量形式中，这意味着：

$$A_{ij} = A_{ji}^{*}$$

其中 A_{ij} 表示矩阵 A 的第 i 行第 j 列的元素，A_{ji}^{*} 表示矩阵 A 的第 j 行第 i 列元素的复共轭。
厄密矩阵在量子力学中有一些重要的性质，包括具有实特征值和正交特征向量，因此在量子系统的研究中具有重要地位。

算符的性质

在量子力学中，算符在 Bra-Ket 表示中有一些重要的性质。

1. **对易性**：如果一个算符 M 作用在一个态 $|a\rangle$ 上，然后再与算符 M 对易，那么可以交换它们的顺序。这意味着 $M|a\rangle = |a\rangle M$。
2. **共轭性**：如果一个算符 M 作用在一个态 $|a\rangle$ 上，它的伴随算符 $M^\dagger$ (也称为厄米共轭）将作用在该态的共轭转置 $|a\rangle^\dagger$ 上。即 $M|a\rangle = (M^\dagger|a\rangle)^\dagger$。
3. **零算符**：零算符作用在任何态上都得到零态。即 $0|a\rangle = |0\rangle$。
4. **分配律**：算符的加法和数乘满足分配律。即 $C(M|a\rangle) + D(|b\rangle) = C|M|a\rangle + D|b\rangle$。
5. **结合律**：算符的乘法满足结合律。即 $(AB)|c\rangle = A(B|c\rangle)$。

这些性质在量子力学中起着重要的作用，帮助我们理解算符在量子系统中的行为。