

高等量子力学学习笔记

黄晨

physchenhuang@gmail.com

目录

第一部分 量子力学的数学结构与基本假设	7
第一章 态叠加原理与力学量测量原理	11
1.1 右矢空间	11
1.2 内积, 对偶空间 \mathbf{V}^* , 左矢	11
1.3 右矢与左矢的对应	12
1.4 \mathbf{V} 上的线性算子	12
1.5 \mathbf{V} 中的离散正交归一基	13
1.6 \mathbf{F} 中的连续基与广义右矢	13
1.7 算符的厄米共轭 Hermitian Conjugate	14
第二章 矩阵表示与表象变换	15
2.1 问题的提出	15
2.2 矩阵表示	15
2.3 表象的变换	15
第三章 力学量测量原理	17
3.1 介绍	17
3.2 可观测量	17
3.3 可对易的观察算子的集合	17
3.4 可对易观察算符的完全集, 即力学量的完全集	17
3.5 \mathbf{F} 中表象和 CSCO 的两个特例	17
3.6 \mathbf{F} 量子化规则笔记在 5 后面	17
第四章 谱分解和波包塌缩	19
4.1 谱分解原理	19
4.1.1 波包的收缩	19
4.1.2 可观测量的平均值和方均根	19
4.1.3	19
4.1.4 方均根偏差	19
4.2 可观测量的相容性问题	20
第五章 平移操作	21
5.1 介绍	21
5.2 形式理论	21

5.2.1 动量算符：平移的生成元	21
第二部分 量子动力学	23
第六章 Schrödinger 方程	25
6.1 时间演化算子	25
6.2 Schrödinger 方程及其形式解	26
6.3 可观测量的平均值的演化：与经典力学的联系	28
6.4 Ehrenfest 定理	29
6.5 保守系，定态问题	29
6.5.1 Schrödinger 方程的解	29
6.5.2 定态	30
6.5.3 守恒量算符	30
6.5.4 Bohr 频率	30
6.6 能量-时间不确定关系	30
第七章 Schrödinger, Heisenberg, 相互作用绘景	31
7.1 介绍	31
7.1.1 绘景的定义	31
7.1.2 绘景问题的关键	31
7.1.3 从总体规定出发分别阐述三个绘景	32
7.2 关于 Heisenberg 绘景的若干讨论	33
7.3 相互作用绘景算例：虚过程的有效哈密顿量	35
7.3.1 虚过程的概念	35
7.3.2 Raman 过程	37
7.3.3 双势阱模型	38
7.3.4 虚过程	38
7.3.5 有效 Hamiltonian(二)	39
7.3.6 有效 Hamiltonian 的若干应用	41
第三部分 Applications	43
第八章 密度矩阵理论	45
8.1 问题的提出	45
8.1.1 统计的不完备性	45
8.1.2 纠缠	45
8.2 量子态的统计混合	47
8.2.1 正则系综	47
8.2.2 量子系综	47
8.2.3 对体系做 B 的测量	48
8.3 密度矩阵方法	48
8.3.1 密度矩阵的引入	48

8.3.2	密度矩阵的性质	49
8.3.3	密度矩阵的经典对应——经典统计力学中的相空间密度 ρ	50
8.3.4	约化密度矩阵	50
8.4	自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的纯态和混态, Bloch 球描述	51
8.4.1	处于态 $ \psi\rangle$ 的自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子	51
8.4.2	密度矩阵的凸性	51
8.4.3	时间演化和退相干过程的 Bloch 球描述	51
8.5	量子统计中的密度矩阵	52
8.5.1	微正则系综	52
8.5.2	正则系综	52
第九章	量子力学中的 Berry 相和拓扑	53
9.1	拓扑的基本概念	53
9.1.1	介绍	53
9.2	Berry 相	53
9.3	Berry Vector Potential	54
9.4	拓扑相变: 临界点附近的 Dirac Fermion	56
9.4.1	Motivation	56
9.4.2	k_0 附近能隙的 close-reopen 过程	57
9.4.3	58
9.4.4	Bernevig-Hughes-Zhang 模型分析	58
9.4.5	BHZ 模型中的 Gauge choice 问题	60
9.5	Aharonov-Bohm Effect	60
9.5.1	Motivation	60
9.5.2	Particle Moving Around a Flux Tube	61
9.5.3	Berry Phase Technique	61
9.5.4	Dirac Quantization of Magnetic Monopole	62
9.6	绝热近似的正确性分析以及非绝热修正问题	63
9.6.1	Motivation	63
9.6.2	Schrödinger 方程的形式通解	64
9.6.3	流密度修正	65
第十章	Laudau 能级的简谐振子解法	67
10.1	谐振子	67
10.2	Quantum Treatment	67
10.3	Laudau 规范下的波函数	68
10.4	对称规范	68
10.5	加入电场时的电子漂移	70
第十一章	散射理论	71
11.1	散射的基本概念	71
11.1.1	碰撞和散射	71
11.1.2	散射问题的若干假设	71

11.1.3	散射截面的概念	71
11.1.4	球对称势下的经典散射算例	71
11.2	散射定态与有效截面	72
11.2.1	方法	72
11.2.2	散射定态的定义	72
11.2.3	利用定态的概率流来计算有效散射截面	73
11.2.4	散射的积分方程: Lippman-Schwinger 方程	74
11.2.5	Born 近似	74
11.2.6	Yukawa 势的 Born 近似	74
11.3	中心势场中的散射: 分波法	75
11.3.1	Partial Wave 的基本原理	75
11.3.2	自由粒子的定态问题	75
11.3.3	势场 $V(r)$ 中的分波	75
11.3.4	用相移表示有效截面	75
11.3.5	散射共振问题	75
第十二章 路径积分		77
12.1	路径积分理论概述	77
12.2	传播函数及其路径积分形式	77
12.2.1	传播子	77
12.2.2	无穷维泛函积分	77
12.2.3	短时传播函数	77
12.2.4	路径积分的相空间表示	78
12.2.5	路径积分的位形空间表示 (路径积分的 Lagrange 形式)	78
12.2.6	路径积分的物理解释	78

第一部分

量子力学的数学结构与基本假设

引言

若一个孤立封闭的质点系中各质点的位置 $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ 和速度 $\frac{d\vec{r}_i}{dt} = (\frac{dx_i}{dt}, \frac{dy_i}{dt}, \frac{dz_i}{dt})$ 都是已知的, 那么该体系的运动就是确定的。引入广义坐标 $q_i(t)$ 和相应的广义速度 $\dot{q}_i(t)$, 可以写出体系的拉格朗日量

$$L = L(q, \dot{q}, t) \quad (1)$$

由此, 可定义体系的广义动量

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} \quad (2)$$

$\{\dot{q}^i, p_i\}$ 即是体系的基本动力学变量, 一切其他物理量都可被表示成 $\{\dot{q}^i, p_i\}$ 的函数。定义体系的哈密顿量

$$H = (q, p, t) = p\dot{q} - L \quad (3)$$

哈密顿方程

$$\frac{dq^i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \{q^i, H\}^1 \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q^i} = \{p_i, H\} \quad (4)$$

由此, 对于任意物理量 $A = A(q, p, t)$

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial q^i} \frac{dq^i}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} + \frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial A}{\partial q^i} \frac{\partial H}{\partial p_i} + \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q^i} + \frac{\partial A}{\partial t} = \{A, H\} + \frac{\partial A}{\partial t} \quad (5)$$

由此可见, 对一个物理体系的经典描述的要求, 在于

1. 体系在确定时刻 t_0 的状态, 取决于 N 对正则坐标和正则动量 $\{\dot{q}^i, p_i\}$ 。
2. 若知道了 t_0 时刻体系的状态, 则体系各物理量在该时刻的取值即被完全确定。
3. 体系状态随时间演变的规律, 由哈密顿方程所决定。只要知道了 t_0 时刻的 $\{\dot{q}^i(t_0), p_i(t_0)\}$, 那么哈密顿方程组的解就被唯一地确定了。

我们下面要做的, 是介绍量子力学的若干假定和相应的若干数学工具, 这些都是为了一个目的服务的, 即量子力学如何回答上述三个问题, 即如何描述体系? 测得的力学量如何表示? 体系如何演化?

¹ $\{A, B\}$ 是 Poisson 括号, $\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial q^i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q^i}$.

第一章 态叠加原理与力学量测量原理

Dirac 在 *Principle of Quantum Mechanics* 中对量子力学的基本原理做了深入的分析，我们先对其中两条做简要回顾，并用合适的数学语言表述之。

- **态叠加原理**：物理体系的状态是复 Hilbert 空间中的非零矢量，称为态矢量。态矢量的线性叠加也是一个可能的态矢量。两个态矢量若仅相差一个非零的复因子，那么它们描述相同的物理状态。
- **力学量测量原理**：力学量是作用于 Hilbert 空间的 Hermitian 算子，其本征值谱是对该力学量测量可能取的所有数值，本征态矢的集合在 Hilbert 空间中是完备的。

对于这里所涉及的这些概念，Dirac 设计了一套特别有效的 Dirac Notation，便于理论计算与推导，下面我们结合量子力学中的若干具体实例来熟悉掌握这套记号。

1.1 右矢空间

我们考虑一个物理体系状态的所有可能取法，构成一个集合 \mathbf{V} ，显然 \mathbf{V} 的性质与我们所考虑的物理问题是直接相关的。 \mathbf{V} 中的任何一个元素，都被称为右矢，用 $|\psi\rangle$ 表示，其中 $|\psi\rangle$ 是对这个元素的标记，以将其与其他元素相区分。

称 \mathbf{V} 是一个复线性空间，我们在 \mathbf{V} 上定义元素的加法和与复数的乘法，则加法是可交换的，乘法是可交换、可结合、可分配的。

Notation: 空间的概念即是集合赋予各种数学结构，例如线性空间、内积空间、拓扑空间。

Example: 波函数空间，对于一个无自旋的粒子，量子力学使用波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 来表述 t 时刻粒子的状态。

由此可见，对所谓的波函数空间做出精确的定义是较困难的。故，我们粗略地说，只考虑 \mathbf{L}^2 中性质“在物理上充分良好”的函数构成的集合，记为 \mathbf{F} 。

1.2 内积，对偶空间 \mathbf{V}^* ，左矢

内积及相关的模长的概念，是三维空间中的向量内积与长度的概念的推广。

Definition: 线性空间 \mathbf{V} 中的内积，是定义于 \mathbf{V} 中的一个双线性运算 $(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) \in \mathbf{C}$ ，对于任意 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle \in \mathbf{V}$ ，满足条件：

- $(|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle) = (|\psi_2\rangle, |\psi_1\rangle)^*$ 。若 $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = 0$ ，则称 $|\varphi\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 正交。
- $(|\varphi\rangle, \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 (|\varphi\rangle, |\psi_1\rangle) + \lambda_2 (|\varphi\rangle, |\psi_2\rangle)$
 $(\lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle, |\psi\rangle) = \lambda_1^* (|\varphi_1\rangle, |\psi\rangle) + \lambda_2^* (|\varphi_2\rangle, |\psi\rangle)$
- $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) \geq 0$ ，且 $(|\psi\rangle, |\psi\rangle) = 0$ 当且仅当 $|\psi\rangle = 0$ ，称 $\sqrt{(|\psi\rangle, |\psi\rangle)}$ 为 $|\psi\rangle$ 的模长。

在赋予了内积运算之后， \mathbf{V} 即被称为内积空间。

内积的重要性质：**Cauchy 不等式**

$$|(\psi_1, \psi_2)|^2 \leq (\psi_1, \psi_1)(\psi_2, \psi_2) \quad (1.1)$$

当且仅当 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ 成比例时，等号成立。

更进一步地，我们讨论线性泛函与对偶空间的概念。这对于我们引入量子力学中左矢概念是重要的。

Definition: 定义在 \mathbf{V} 中的一个线性泛函 (linear functional) 是一个线性映射 $\chi: \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{C}$ ，它将每一个右矢 $|\psi\rangle$ 映射到一个复数上，即

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\chi} \chi(|\psi\rangle) \in \mathbf{C} \quad (1.2)$$

满足线性条件

$$\chi(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 \chi(|\psi_1\rangle) + \lambda_2 \chi(|\psi_2\rangle) \quad (1.3)$$

1.3 右矢与左矢的对应

1.4 \mathbf{V} 上的线性算子

Definition: \mathbf{V} 上的线性算子 A ，是一个数学上的映射

$$A: \mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V} \quad (1.4)$$

$$|\varphi\rangle \in \mathbf{V} \xrightarrow{A} |\psi\rangle = A|\varphi\rangle \in \mathbf{V} \quad (1.5)$$

满足线性性质

$$A(\lambda_1 |\varphi_1\rangle + \lambda_2 |\varphi_2\rangle) = \lambda_1 (A|\varphi_1\rangle) + \lambda_2 (A|\varphi_2\rangle) \quad (1.6)$$

Caution: 这里要区分的，是线性算子与线性泛函的概念

- Linear Functional: $\mathbf{V} \rightarrow \mathbf{C}$

$$|\varphi\rangle \xrightarrow{\langle \chi |} \langle \chi | \varphi \rangle \in \mathbf{C} \quad (1.7)$$

- Linear Operator: $\mathbf{V} \rightarrow \mathbf{V}$

$$|\varphi\rangle \xrightarrow{A} A|\varphi\rangle \in \mathbf{V} \quad (1.8)$$

算子的乘积

$[A, B] = AB - BA$ 为 A, B 两算符的对易子。

矩阵元: 对于 $|\varphi\rangle, |\psi\rangle \in \mathbf{V}$ ，称 $\langle \varphi | A | \psi \rangle$ 为 A 在 $|\varphi\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 之间的矩阵元。 $\langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle \varphi | (A | \psi \rangle)$ 是一个复数。

Example: 考虑波函数空间 \mathbf{F}

1. Parity Operator Π

$$\Pi |\psi\rangle = |\varphi\rangle \quad (1.9)$$

$$\psi(x, y, z) \xrightarrow{\Pi} \varphi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z) \quad (1.10)$$

2. X Operator \mathbf{X}

$$\mathbf{X} |\psi\rangle = |\varphi\rangle \quad (1.11)$$

$$\psi(x, y, z) \xrightarrow{\mathbf{X}} \varphi(x, y, z) = x\psi(x, y, z) \quad (1.12)$$

同理可以定义 \mathbf{Y}, \mathbf{Z} , 以及矢量算子 $\vec{\mathbf{R}} = [\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}]$ 。

Generalization $f(\mathbf{X})$

$$f(\mathbf{X}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d^n f(x)}{dx^n} \Big|_{x=0} (\mathbf{X})^n \quad (1.13)$$

3. x -动量算子 \mathbf{P}_x

$$\mathbf{P}_x |\psi\rangle = |\varphi\rangle \quad (1.14)$$

$$\psi(x, y, z) \xrightarrow{\mathbf{P}_x} \varphi(x, y, z) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, y, z) \quad (1.15)$$

同理可以定义 $\mathbf{P}_y, \mathbf{P}_z$, 以及 $\vec{\mathbf{P}} = [\mathbf{P}_x, \mathbf{P}_y, \mathbf{P}_z]$ 。

$$\vec{\mathbf{P}} = -i\hbar \nabla \quad (1.16)$$

注意: $\vec{\mathbf{R}}$ 和 $\vec{\mathbf{P}}$ 作用以后得到的函数 $\varphi(x, y, z)$ 也许不再平方可积。

4. 回到一般空间 \mathbf{V} 中, 讨论投影算子 Projection Operator。

- $|\psi\rangle$: vector or ket
- $\langle\psi|$: linear functional
- $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$: 内积, 或函数作用在变量上。
- 下面讨论 $|\psi\rangle\langle\varphi|$ 是什么

$$(|\psi\rangle\langle\varphi|)|\chi\rangle = |\psi\rangle\langle\varphi|\chi\rangle = \langle\varphi|\chi\rangle|\psi\rangle \quad (1.17)$$

$|\psi\rangle\langle\varphi|$: from ket to ket and linear, so this is a linear operator.

$$|\chi\rangle \xrightarrow{|\psi\rangle\langle\varphi|} (\langle\varphi|\chi\rangle)|\psi\rangle \quad (1.18)$$

下面看 Projection Operator \mathbf{P}_ψ 。定义: 若 $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, 则 $\mathbf{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ 为关于 $|\psi\rangle$ 的投影算符。任意 $|\varphi\rangle$, 有 $\mathbf{P}_\psi|\varphi\rangle = (\langle\psi|\varphi\rangle)|\psi\rangle$, 得到一个与 $|\psi\rangle$ 成比例的右矢, 比例系数 $\langle\psi|\varphi\rangle$ 称为 $|\varphi\rangle$ 在 $|\psi\rangle$ 上的垂直投影分量。

1.5 \mathbf{V} 中的离散正交归一基

Definition: 设 \mathbf{V} 中的一个可数集合, 用离散指标 $i = 1, 2, \dots, n, \dots$ 标记 $\{|u_i\rangle\}$, 满足

1. 正交归一性: $\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{i,j}$ for any i, j
2. 任意 $|\psi\rangle \in \mathbf{V}$, 可以唯一地按 $\{|u_i\rangle\}$ 展开 $|\psi\rangle$, 即 $|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$

那么, 称 $\{|u_i\rangle\}$ 构成 \mathbf{V} 的一组完备基。这里展开分量的求法:

$$\langle u_j | \psi \rangle = \langle u_j | \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i c_i \delta_{i,j} = c_j \quad (1.19)$$

1.6 \mathbf{F} 中的连续基与广义右矢

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{\psi}(p) e^{ipx} \quad (1.20)$$

$$\tilde{\psi}(p) = \langle v_p | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx v_p^*(x) \psi(x) \quad (1.21)$$

1.7 算符的厄米共轭 Hermitian Conjugate

我们已经知道了一个线性算子作用在右矢上得到新的右矢，下面我们讨论一个线性算子如何作用于一个左矢，并由此得出线性算子的厄米共轭的定义。

取定一个右矢 $|\psi\rangle$ 和一个算子 A ，考虑全体右矢 $|\psi\rangle$ ， $\langle\varphi|A|\psi\rangle$ 是 A 关于 $|\varphi\rangle$ 和 $|\psi\rangle$ 的矩阵元。因此 $\langle\varphi|A$ 可视为一个新的左矢

$$(\langle\varphi|A)|\psi\rangle \in \mathbf{C} \quad (1.22)$$

这个左矢有区别于 $\langle\varphi|$ ，可视为 $\langle\varphi|$ 通过 A 向前作用变化而来。如此， A 将每一个线性泛函 $\langle\varphi|$ ，映射成一个新的线性泛函 $(\langle\varphi|A)$ ，那么 A 也可视为是 \mathbf{V}^* 空间中的一个线性变换

$$(\lambda_1 \langle\varphi_1| + \lambda_2 \langle\varphi_2|)A|\psi\rangle = \lambda_1 \langle\varphi_1|A|\psi\rangle + \lambda_2 \langle\varphi_2|A|\psi\rangle = \lambda_1(\langle\varphi_1|A)|\psi\rangle + \lambda_2(\langle\varphi_2|A)|\psi\rangle \quad (1.23)$$

第二章 矩阵表示与表象变换

2.1 问题的提出

2.2 矩阵表示

2.3 表象的变换

问题的提出：在一中表象中，右矢、左矢、算子用一系列矩阵表示，若我们要更换表象，换一组基，那么，右矢、左矢、算子就要用另一组矩阵表示。这两组矩阵如何联系？

设旧基 $\{|u_i\rangle\}$ 到新基 $\{|t_k\rangle\}$ ，有

$$|t_k\rangle = |u_i\rangle \langle u_i | t_k \rangle = |u_i\rangle S_{i,k} \quad (2.1)$$

左矢和右矢

$$\langle t_k | \psi \rangle = \langle t_k | u_i \rangle \langle u_i | \psi \rangle \quad (2.2)$$

特别地，任意 $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$ ，有

$$\langle \varphi | A | \psi \rangle = \langle \varphi | u_i \rangle \langle u_i | A | u_j \rangle \langle u_j | \psi \rangle = \langle \varphi | t_k \rangle \langle t_k | A | t_l \rangle \langle t_l | \psi \rangle \quad (2.3)$$

这一相等是具有物理上的含义的，即力学量的期望不因表象而发生改变，因为力学量的测量结果是客观的，而表象的选择确实主观的——类似于电动力学中的规范的选择，而且我们今后会看到，若干问题中的表象的选法的结果，就对应于电磁学中的规范变换。

第三章 力学量测量原理

3.1 介绍

3.2 可观测量

我们首先考虑厄米算符的本征值与本征矢所具有的重要性质：当 $A = A^\dagger$ 时， λ 是实的，且属不同 λ 的本征矢相互正交。

Proof: 由

3.3 可对易的观察算子的集合

3.4 可对易观察算符的完全集，即力学量的完全集

3.5 F 中表象和 CSCO 的两个特例

3.6 F 量子化规则笔记在 5 后面

第四章 谱分解和波包塌缩

4.1 谱分解原理

签名的讨论所论述的是对一个态 $|\psi\rangle$ 施行对物理量 A 进行测量可能得到的结果，即 A 的所有可能本征值中的一个，但这一原理没有解决的问题是，在某一次具体的测量之后，我们究竟会得到哪个本征值，以及得到了不同的本征值之后，体系的状态会有怎样的改变。

若体系处于已归一化的态 $|\psi\rangle$ 中，则测量物理量 A 所得到的结果为对应观察算子 A 的本征值 a_n 的概率为

$$P_n = \langle \psi | P_{a_n} | \psi \rangle \quad (4.1)$$

其中， P_{a_n} 是对于本征值 a_n 的本征矢所张成的子空间 \mathbf{V}_n 的投影算子

$$P_{a_n} = \sum_i |u_n^i\rangle \langle u_n^i| \quad (4.2)$$

则

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle \psi | u_n^i \rangle|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 \quad (4.3)$$

特别地，当 a_n 无简并时，

$$P_n = |\langle \psi | u_n \rangle|^2 = |c_n|^2 \quad (4.4)$$

1. 与基矢量选取无关
2. 对 A 测量的结果是概率性而不确定的，这种概率是真概率而不是伪随机。
3. 连续谱的情况

4.1.1 波包的收缩

4.1.2 可观测量的平均值和方均根

4.1.3

4.1.4 方均根偏差

$\langle A \rangle$ 指出了可观测量 A 的大小的数量级，但这个平均值不能告诉我们测量所得结果的弥散成都。

以连续谱为例，测量 A 时可能得到的那些数值，大部分实际上都包含在 $\langle A \rangle$ 周围的宽度为 δA 的区间中， δA 越小，测量结果就越集中在 $\langle A \rangle$ 周围。

可以定义所谓的方均根偏差，即

$$\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (4.5)$$

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle - (\langle \psi | A | \psi \rangle)^2 \quad (4.6)$$

关于两个算子 A, B 的方均根偏差, 有重要的 Heisenberg 不确定关系: 取定一个态矢量 $|\psi\rangle$ 和两个算子 A, B , 有

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 \quad (4.7)$$

Proof:

$$\Delta A = A - \langle A \rangle \quad \Delta B = B - \langle B \rangle \quad (4.8)$$

令

$$|\alpha\rangle = \Delta A |\psi\rangle \quad |\beta\rangle = \Delta B |\psi\rangle \quad (4.9)$$

根据 Cauchy 不等式

$$\langle \psi | (\Delta A)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta B)^2 | \psi \rangle = \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 = |\langle \psi | \Delta A \Delta B | \psi \rangle|^2 \quad (4.10)$$

而

$$\Delta A \Delta B = \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] + \frac{1}{2} \{\Delta A, \Delta B\} \quad (4.11)$$

故

$$|\langle \psi | \Delta A \Delta B | \psi \rangle|^2 = \left| \left\langle \frac{1}{2} [\Delta A, \Delta B] \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} \{\Delta A, \Delta B\} \right\rangle \right|^2 = \left| \left\langle \frac{1}{2} [A, B] \right\rangle + \left\langle \frac{1}{2} \{\Delta A, \Delta B\} \right\rangle \right|^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 \quad (4.12)$$

Example: 由于 $[x, p_x] = i\hbar$, 有 $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$, 即 Heisenberg 不确定性关系。

4.2 可观测量的相容性问题

第五章 平移操作

5.1 介绍

5.2 形式理论

这里我们先介绍一个技巧：如何求 $e^A B e^{-A}$ 。取 $f(\lambda) = e^{\lambda A} B e^{-\lambda A}$ ，有 $f(0) = B$ ，

$$\frac{df}{d\lambda} = e^{\lambda A} [A, B] e^{-\lambda A} \quad (5.1)$$

$$\frac{d^2 f}{d\lambda^2} = e^{\lambda A} [A, [A, B]] e^{-\lambda A} \quad (5.2)$$

我们视 $[A, B] = S_A(B)$ 为一个超算符，即它将一个算符映射成另一个算符，这个映射以 A 作为参量，作用在 B 上，如此即有

$$f'(0) = [A, B] = S_A(B) \quad (5.3)$$

$$f''(0) = [A, [A, B]] = S_A^2(B) \quad (5.4)$$

$$f^{(n)}(0) = S_A^n(B) \quad (5.5)$$

$$f(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \lambda^n S_A^n(B) = e^{\lambda S_A} B \quad (5.6)$$

$$e^A B e^{-A} = e^{S_A} B = e^{[A, \cdot]} B \quad (5.7)$$

由此，我们还可以证明所谓的 B-C-H(Baker-Campbell-Hausdorff) 公式：若两个算子满足 $[[A, B], A] = 0$ 和 $[[A, B], B] = 0$ ，则 $e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{1}{2}[A, B]}$ 。

Proof: 令 $F(t) = e^{At} e^{Bt}$ ，则

$$\frac{dF}{dt} = e^{At} (A + B) e^{Bt} = (A + e^{At} B e^{-At}) e^{At} e^{Bt} \quad (5.8)$$

5.2.1 动量算符：平移的生成元

动量是一个无穷小平移操作的生成元。

经典力学回顾

作用量是 Lagrangian $L(q, \dot{q}, t)$ 在两个位置 q^i 和 q^f 之间的轨道积分

$$S(q^i, q^f, t^i, t^f) = \int_{t^i}^{t^f} L dt \quad (5.9)$$

第二部分

量子动力学

第六章 Schrödinger 方程

6.1 时间演化算子

以下我们阐述态右矢和体系的可观测量的测量结果如何随时间进行动力学演化，这对应于前述的“如何从体系的初始状态推测其末状态”的任务。

但是我们应首先记住的是，时间在量子力学中只是一个参量，而不是一个算符。特别地，时间不是可观测量——这与粒子的动量和坐标等物理量是不一样的。

然而，在相对论中，我们必须处理时空相互转化的问题。故我们要同等地看待时间与空间。在量子场论中，这一问题的解决办法是将位置算子 \vec{R} 降格为参数 x ，用以表征量子场的产生与湮灭算子 $a(x)$ 和 $a^\dagger(x)$ 。

以下我们讨论一个态矢量 $|\psi\rangle$ 如何随时间发生变化。设 t_0 时刻态矢量 $|\psi\rangle = |\psi(t_0)\rangle$ ，则 t 时刻态矢量 $|\psi(t)\rangle$ ，也可以写成 $|\psi, t_0; t\rangle$ ，其中 ψ 是初态， t_0 是初时， t 是末时。于是我们有

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\psi, t_0; t\rangle = |\psi(t_0)\rangle = |\psi, t_0\rangle \quad (6.1)$$

我们的任务是，已知 $|\psi, t_0\rangle$ ，求 $|\psi, t_0; t\rangle$ 。为此，类比于空间平移，我们引入一个时间演化算子 $U(t, t_0)$ 来联系它们，即

$$|\psi, t_0; t\rangle = U(t, t_0) |\psi, t_0\rangle \quad (6.2)$$

与平移类似，以下我们从直观出发，考虑 U 应具备的性质：

- $\lim_{t \rightarrow t_0} U(t, t_0) = \mathbf{I}$

- 线性性

$$U(t, t_0) (a_1 |\psi_1, t_0; t_0\rangle + a_2 |\psi_2, t_0; t_0\rangle) = a_1 |\psi_1, t_0; t\rangle + a_2 |\psi_2, t_0; t\rangle \quad (6.3)$$

- 概率守恒

$$\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \psi(t_0) | U^\dagger U | \psi(t_0) \rangle \quad (6.4)$$

这说明 $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = \mathbf{I}$ ，即 $U(t, t_0)$ 是幺正的。

- 结合性

$$U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0) \quad \text{for } t_2 > t_1 > t_0 \quad (6.5)$$

即体系从 t_0 到 t_2 的演化，等于从 t_0 出发，先到任何一个 t_1 ，再从 t_1 到 t_2 。

我们进一步考虑无穷小时间演化

$$|\psi, t_0; t_0 + dt\rangle = U(t_0 + dt, t_0) |\psi, t_0; t_0\rangle \quad (6.6)$$

并将其写成

$$U(t_0 + dt, t_0) = \mathbf{I} - i\Omega dt \quad (6.7)$$

且 $\Omega^\dagger = \Omega$ 。这里单位元 \mathbf{I} 的出现是连续性要求 $\lim_{t \rightarrow t_0} U(t, t_0) = \mathbf{I}$ ，而 $\Omega^\dagger = \Omega$ 则是来自于概率守恒的要求 $U^\dagger U = \mathbf{I}$ 。

此时我们可以注意到 Ω 具有角频率的量纲。如果我们回忆起 $E = \hbar\omega$ ，再从经典力学中借用“Hamiltonian 函数是时间演化的生成元”的概念。我们就可以得到 Ω 应与 Hamiltonian 算符相对应，即 $\Omega = \frac{H}{\hbar}$ 。

$$U(t_0 + dt, t_0) = \mathbf{I} - \frac{iHdt}{\hbar} \quad (6.8)$$

量子力学中的 Schrödinger 方程如何过渡到经典极限?

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (6.9)$$

$$\psi(r, t) = a(r, t) \exp\left[\frac{i}{\hbar}\varphi(r, t)\right] \quad (6.10)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) + V(r)\psi(r) \quad (6.11)$$

$$i\hbar \left(\frac{\partial a}{\partial t} + a \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \nabla^2 a + (\nabla a) \frac{i}{\hbar} \nabla \varphi \cdot 2 + a \left[\left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 (\nabla \varphi)^2 + \frac{i}{\hbar} \nabla^2 \varphi \right] \right\} + V(r)a \quad (6.12)$$

6.2 Schrödinger 方程及其形式解

以下我们讨论 $U(t, t_0)$ 满足的基本微分方程，即 Schrödinger 方程。由

$$U(t + dt, t_0) = U(t + dt, t)U(t, t_0) = \left(\mathbf{I} - \frac{iHdt}{\hbar} \right) U(t, t_0) \quad (6.13)$$

即有

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad (6.14)$$

将上式两边作用于 $|\psi, t_0; t_0\rangle$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) |\psi, t_0; t_0\rangle = HU(t, t_0) |\psi, t_0; t_0\rangle \quad (6.15)$$

即

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi, t_0; t\rangle = H |\psi, t_0; t\rangle \quad (6.16)$$

一般简写为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle \quad (6.17)$$

由此可见， $U(t, t_0)$ 这个演化算子包含了体系所有的演化信息。故我们当前的第一要务，就是从 Schrödinger 方程出发，寻求 $U(t, t_0)$ 的形式解，这里有三种情况需要讨论。

1. 保守体系，此时 Hamiltonian 算子不显含时。

$$U(t_0, t_0) = \mathbf{I} \quad (6.18)$$

$$U(t, t_0) = \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] \quad (6.19)$$

2. H 含时，但 $[H(t), H(t')] = 0$ 。此时

$$U(t, t_0) = \exp\left[\frac{-i \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau}{\hbar}\right] \quad (6.20)$$

检验: Taylor 展开, 逐项微商求和, 即

$$U(t, t_0) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[- \left(\frac{i}{\hbar} \right) \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau \right]^n \quad (6.21)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H(t) \left[- \left(\frac{i}{\hbar} \right) \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau \right]^n = U(t, t_0) H(t) \quad (6.22)$$

3. H 含时, 且不同时间的 H 不相互对易。从上面的证明可以看出, 此时 $U(t, t_0) = \exp \left[-i \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau \right]$ 是存疑的。这里举一个反例: $H = \omega (a^\dagger a + \frac{1}{2}) + \cos \omega t (a + a^\dagger)$, 若直接积分, 那么驱动项的作用在周期内即被磨平, 体系无法起振, 这是不物理的。

Dyson 级数迭代求解: 由

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t) U(t, t_0) \quad (6.23)$$

有

$$U(t, t_0) = \mathbf{I} - \left(\frac{i}{\hbar} \right) \int_{t_0}^t H(\tau) U(\tau, t_0) d\tau \quad (6.24)$$

迭代

$$U_n(t, t_0) = \mathbf{I} - \left(\frac{i}{\hbar} \right) \int_{t_0}^t H(\tau) U_{n-1}(\tau, t_0) d\tau \quad (6.25)$$

- 零阶

$$U_0(t, t_0) = \mathbf{I} \quad (6.26)$$

- 一阶

$$U_1(t, t_0) = \mathbf{I} + \int_{t_0}^t \left(-\frac{i}{\hbar} \right) H(t_1) U_0(t_1, t_0) dt_1 = \mathbf{I} + \int_{t_0}^t \left(-\frac{i}{\hbar} \right) H(t_1) dt_1 \quad (6.27)$$

- 二阶

$$\begin{aligned} U_2(t, t_0) &= \mathbf{I} + \int_{t_0}^t \left(-\frac{i}{\hbar} \right) H(t_1) U_1(t_1, t_0) dt_1 \\ &= \mathbf{I} + \int_{t_0}^t \left(-\frac{i}{\hbar} \right) H(t_1) dt_1 + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 H(t_1) H(t_2) \end{aligned} \quad (6.28)$$

由此

$$U(t, t_0) = \mathbf{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n) \quad (6.29)$$

注意到积分中 $t_1 > t_2 > \cdots > t_n$, 我们引入编时算子 \mathbf{T}

$$\mathbf{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{T} [H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n)] = \mathbf{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau \right] \quad (6.30)$$

\mathbf{T} 的作用是把时间宗量大的 H 放前面。

$$U(t, t_0) = \mathbf{T} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau \right] \quad (6.31)$$

可以看到 Dyson 级数的展开阶数, 是依照 $H(t)$ 出现的次数来区分的, 这在后面用相互作用表象讨论微扰的时候, 有特别方便的应用!

6.3 可观测量的平均值的演化：与经典力学的联系

考虑一个可观测量 A ，在 t 时刻 A 的平均值为

$$\langle A \rangle_t = \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle \quad (6.32)$$

即 $\langle A \rangle_t$ 通过 $|\psi(t)\rangle$ 和 $\langle\psi(t)|$ 来依赖于 t ，而 $\langle\psi(t)|$ 和 $|\psi(t)\rangle$ 则依照 Schrödinger 方程演化。此外， A 算子本身也可以显式的依赖于时间，故有

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_t = \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | A(t) | \psi(t) \rangle = \left\langle \frac{d\psi}{dt} \left| A | \psi(t) \right. \right\rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A \left| \frac{d\psi}{dt} \right\rangle \quad (6.33)$$

由

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle \quad (6.34)$$

有

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle\psi| = \langle\psi| H \quad (6.35)$$

则

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle A \rangle_t &= \langle\psi| \left(-\frac{H}{i\hbar} \right) A |\psi\rangle + \langle\psi| \frac{\partial A}{\partial t} |\psi(t)\rangle + \langle\psi| A \left(\frac{H}{i\hbar} \right) |\psi\rangle \\ &= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle \end{aligned} \quad (6.36)$$

若 $A = A(\vec{R}, \vec{P}, t)$ ，即 A 是一个有经典对应的物理量。我们有

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial q} \frac{dq}{dt} + \frac{\partial A}{\partial p} \frac{dp}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \left(\frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} \right) = \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\}_{\text{classical}} \quad (6.37)$$

而回忆起我们前面提到的经典——量子对应关系：

$$\{\text{Classical Poisson}\} \Leftrightarrow \frac{1}{i\hbar} [\text{Quantum Commutator}] \quad (6.38)$$

我们这里又体现了经典与量子之间的联系：将经典的相互共轭的正则坐标与正则动量之间的 Poisson 括号升格成为量子力学中的对易子。这一步骤就是**正则量子化**。它强调的是物理可观测量，特别是相互共轭的可观测量之间存在的测不准关系。

但是，这里值得注意的是，不论 A 是否存在经典对应，这一方程都是正确的。例如，当我们讨论自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子在磁场中的进动时，有

$$H = -\vec{S} \cdot \vec{B} \quad (6.39)$$

$$\frac{d\langle S_i \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [S_i, H] = \frac{1}{i\hbar} [S_i, -S_j B_j] = -\frac{1}{\hbar} \varepsilon_{ijk} S_k B_j = -\frac{1}{\hbar} \langle \vec{B} \times \vec{S} \rangle_i \quad (6.40)$$

$$\frac{d\langle S \rangle}{dt} = -\frac{1}{\hbar} \vec{B} \times \langle \vec{S} \rangle \quad (6.41)$$

此时我们要注意的，自旋 $\frac{1}{2}$ 的粒子是不存在经典对应的。

因此，我们这里可以反过来说，我们为量子力学设一个要求，这就是对于那些有经典对应的物理量，正确的经典方程应可以通过

$$\frac{1}{i\hbar} [\text{Quantum Commutator}] \Rightarrow \{\text{Classical Poisson}\} \quad (6.42)$$

来得到。这里要注意的是，在历史上量子力学正是通过相反的逻辑而得到的。这说明，经典力学可以作为一种极限从量子力学中得出，但反之则不然。

下面我们给出两个有用的公式。

$$[R, F(p)] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial p} \Leftrightarrow \{r, F(p)\} = \frac{\partial F}{\partial p} \quad (6.43)$$

$$[P, G(x)] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial x} \Leftrightarrow \{p, G(x)\} = -\frac{\partial G}{\partial x} \quad (6.44)$$

6.4 Ehrenfest 定理

以下我们将前面的所得应用于一个点粒子处于稳定标量场这一问题中。

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(R) \quad (6.45)$$

$$\frac{d}{dt} \langle R \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [R, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \left[R, \frac{P^2}{2m} \right] = \frac{\langle P \rangle}{m} \quad (6.46)$$

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [P, H] \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [P, V(R)] \rangle = -\langle \nabla V(R) \rangle \quad (6.47)$$

这两个等式是类似于 Newton 第二定律的量子力学公式，即 Ehrenfest 定理，其物理含义是：考虑一个 \mathbf{F} 中的波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ ， $\langle \vec{R} \rangle = [\langle \mathbf{X} \rangle, \langle \mathbf{Y} \rangle, \langle \mathbf{Z} \rangle]$ 即为 t 时刻的波包中心，而 $\{\langle \vec{R}(t) \rangle : t \in (-\infty, +\infty)\}$ 即为波包中心所走过的轨迹。

6.5 保守系，定态问题

在 Schrödinger 方程的基本应用中，保守系，即 Hamiltonian 不显含时间的问题，具有特别重要的意义。在经典力学中， $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ ，即意味着能量是守恒量。以下我们枚举出量子力学保守系所具有的重要性质。

6.5.1 Schrödinger 方程的解

H 是一个可观测量，具有本征方程

$$H |\varphi_{n,\tau}\rangle = E_n |\varphi_{n,\tau}\rangle \quad n: \text{本征值} \quad \tau: \text{简并度} \quad (6.48)$$

由于 $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ ，故 E_n 和 $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ 均不含 t ，而当知道了 E_n 和诸 $|\varphi_{n,\tau}\rangle$ 之后，Schrödinger 方程的解是显然的：

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t_0) |\varphi_{n,\tau}\rangle \quad (6.49)$$

$$c_{n,\tau}(t_0) = \langle \varphi_{n,\tau} | \psi(t_0) \rangle \quad (6.50)$$

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right] |\psi(t_0)\rangle = \sum_{n,\tau} c_{n,\tau}(t) |\varphi_{n,\tau}\rangle \quad (6.51)$$

其中

$$c_{n,\tau}(t) = c_{n,\tau}(t_0) \exp\left[-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}\right] \quad (6.52)$$

$|\psi(t)\rangle$ 对时间 t 的依赖体现在 $c_{n,\tau}(t)$ 对时间的依赖上：多个本征态上的分量的模不变，但相位随时间变化。相应的，时间演化算子可以写成

$$U(t, t_0) = \exp\left[-\frac{iH(t-t_0)}{\hbar}\right] \sum_{n,\tau} |\varphi_{n,\tau}\rangle \langle \varphi_{n,\tau}| = \sum_{n,\tau} \exp\left[-\frac{iE_n(t-t_0)}{\hbar}\right] |\varphi_{n,\tau}\rangle \langle \varphi_{n,\tau}| \quad (6.53)$$

在这里，我们事实上引入了一个新的表象——能量表象，即以 H 的本征矢作为基矢量来分析问题。

6.5.2 定态

6.5.3 守恒量算符

6.5.4 Bohr 频率

6.6 能量-时间不确定关系

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (6.54)$$

进一步的, 设

$$|\psi(0)\rangle = c_1 |\varphi_1\rangle + c_2 |\varphi_2\rangle \quad (6.55)$$

则

$$(\Delta E)^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = (|c_1|^2 E_1^2 + |c_2|^2 E_2^2) - (|c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2)^2 = |c_1|^2 |c_2|^2 (E_1 - E_2)^2 \quad (6.56)$$

$$\Delta E = |c_1| |c_2| |E_1 - E_2| \quad (6.57)$$

在这一离散情况下, 量子态的两点关联函数具有形式

$$c(t) = c_1 \exp\left(-\frac{iE_1 t}{\hbar}\right) + c_2 \exp\left(-\frac{iE_2 t}{\hbar}\right) \quad (6.58)$$

$$|c(t)|^2 = |c_1|^2 + |c_2|^2 + c_1 c_2^* \exp\left[-\frac{i(E_1 - E_2)t}{\hbar}\right] + c_1^* c_2 \exp\left[\frac{i(E_1 - E_2)t}{\hbar}\right] \quad (6.59)$$

可见 $c(t)$ 的显著变化, 以 $(t_1 - t_2)$ 为特征时间周期, 即

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (6.60)$$

态的显著变化, 还通过可观测量的测量结果的显著变化来体现。故我们考虑一个物理量 B , 且 $[B, H] \neq 0$, 则在 t 时刻

$$\begin{aligned} P(b_m, t) &= |\langle u_m | \psi(t) \rangle|^2 \\ &= |c_1|^2 |\langle u_m | \varphi_1 \rangle|^2 + |c_2|^2 |\langle u_m | \varphi_2 \rangle|^2 + 2 \operatorname{Re} \left\{ c_1 c_2^* \exp\left[\frac{i(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right] \langle u_m | \varphi_2 \rangle^* \langle u_m | \varphi_1 \rangle \right\} \end{aligned} \quad (6.61)$$

可见, $P(b_m, t)$ 以 $\omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ 的频率来回振荡, 即

$$\Delta t \simeq \frac{2\pi\hbar}{E_2 - E_1} \quad (6.62)$$

$$\Delta E \Delta t \simeq \hbar \quad (6.63)$$

进一步的, 我们考虑连续谱的情况, 在能量表象下

$$|\psi(t)\rangle = \int dE c(E) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) |\varphi_E\rangle \quad (6.64)$$

满足

$$\int |c(E)|^2 dE = 1 \quad (6.65)$$

则

$$c(t) = \int dE |c(E)|^2 \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (6.66)$$

在真实的物理情况下, $|c(E)|^2$ 可能会有一个以 $E = E_0$ 为中心, 而宽度为 ΔE 的峰, 即

$$c(t) = \exp\left(-\frac{iE_0 t}{\hbar}\right) \int dE |c(E)|^2 \exp\left[-\frac{i(E - E_0)t}{\hbar}\right] \quad (6.67)$$

第七章 Schrödinger, Heisenberg, 相互作用绘景

7.1 介绍

7.1.1 绘景的定义

绘景 (Picture)¹是描述系统动力学演化时形式不同、但在物理上等价的观点。一般常用的三种绘景是 Schrödinger 绘景、Heisenberg 绘景和相互作用绘景。

在系统的动力学演化中，能够直接观测的只有两类量：(1) 可观测量的各本征值；(2) 相应该本征值的概率。为了对体系进行理论表述，人们构造了力学量 $\{|\psi\rangle\}$ 和算符 $\{A\}$ 的概念，它们是两个主观人造的事物，其要点在于

1. 可观测量是自然界的，客观的，不随人的意志而转移的；
2. 理论是可以人为拟定的，主观的，按照各种考量是可以改变的。

故一个可能含时的幺正变换 U ，同时作用于 t 时刻的态矢量和算符，产生配套变换：

$$|\psi(t)\rangle \rightarrow |\psi^U(t)\rangle = U(t) |\psi(t)\rangle \quad (7.1)$$

$$A(t) \rightarrow A^U(t) = U(t)A(t)U^\dagger(t) \quad (7.2)$$

可以保证变换前后系统所有可观测物理性质不变，例如：

- 全部概率幅不变

$$\langle \varphi^U | A^U | \psi^U \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle \quad (7.3)$$

- 基本对易关系不变

$$[x^U, p^U] = U[x, p]U^\dagger = i\hbar \quad (7.4)$$

这里所体现的物理等价原则，是下面要讲的三种绘景相互转换的依据和构成它们之间相互转换的准则。

但我们仍应注意，尽管变换前后物理等价，但系统的算符和态矢量的表达形式会有很大的改变。特别的，若 $U(t)$ 含时，系统的运动方程的形式会发生很大的变化。

7.1.2 绘景问题的关键

下面的问题是，在体系的演化中，算符和态矢量这两个人造事物是如何分摊描写系统演化的任务，以体现出可观测量的本征值和几率随时间演化的。这一问题的三个常见观点是：

- **Schrödinger Picture**: 态矢量承担系统全部演化，力学量不承担。
- **Heisenberg Picture**: 力学量承担系统全部演化，态矢量不承担。

¹绘景和表象是不同的概念。表象所指的，是确定一组对易力学量完全集 (CSCO)，选取其共同本征基矢，用以完成态矢量和算符的矩阵描述。而绘景问题不涉及基矢的选择，它考虑的是系统的演化如何在态矢量和算符之间进行分配的问题。

• **Interaction Picture:** 各有分担

三个绘景中的算子和态矢量用顶标标记为

$$A^S, |\psi^S\rangle \quad A^H, |\psi^H\rangle \quad A^I, |\psi^I\rangle \quad (7.5)$$

由前面的陈述可知，绘景问题有两个要点：

1. 三个绘景物理等价，由此给出，由三个绘景计算出的任意概率幅都相同，即

$$\langle \psi^S | A^S | \varphi^S \rangle = \langle \psi^H | A^H | \varphi^H \rangle = \langle \psi^I | A^I | \varphi^I \rangle \quad (7.6)$$

这是支配三个绘景相互关系的基本准则，它约束了各绘景中态矢量和算符这两个人工的理论要素如何配套变化。

2. 三个绘景表述的是同一微观系统，那么，约定在 $t = 0$ 时刻三个绘景重合，体系的 Hamiltonian 也是一致的。

$$|\psi^H(t)\rangle = |\psi^H(0)\rangle = |\psi^S(0)\rangle = |\psi^I(0)\rangle \quad (7.7)$$

$$A^H(0) = A^S(0) = A^I(0) \quad (7.8)$$

7.1.3 从总体规定出发分别阐述三个绘景

1. Schrödinger 绘景

$$|\psi^S(t)\rangle = U^S(t, t_0) |\psi^S(0)\rangle \quad (7.9)$$

其中演化算子

$$U(t, t_0) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau \right] \quad (7.10)$$

$U^S(t, t_0)$ 满足

$$i\hbar \frac{\partial U^S(t, t_0)}{\partial t} = H(t) U^S(t, t_0) \quad (7.11)$$

$$U^S(t_0, t_0) = \mathbf{I} \quad (7.12)$$

在此绘景中，力学量算符维持原状，于是坐标和动量算子均不显含时间。一般来说，即使算符与时间有关，也只是由于自身的原因，而与体系的演化无关。即，在 Schrödinger 绘景中，态矢量承担由 $H(t)$ 产生的全部演化。

2. **Heisenberg 绘景:** 此绘景规定态矢量不随时间演化，由此可知

$$|\psi^H(t)\rangle = |\psi^H(0)\rangle = |\psi^S(0)\rangle \quad (7.13)$$

$$A^H(t) = U^\dagger(t, t_0) A^S(t) U(t, t_0) \quad (7.14)$$

由此可见，Heisenberg 绘景的特征是，系统的全部演化由算符承担，但态矢量始终保持为初态，相应的运动方程是：

$$\frac{d|\psi^H(t)\rangle}{dt} = 0 \quad (7.15)$$

$$\begin{aligned}
\frac{dA^H(t)}{dt} &= U^\dagger \frac{\partial A^S(t)}{\partial t} U + \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A^S(t) U + U^\dagger A^S(t) \frac{\partial U}{\partial t} \\
&= \frac{\partial A^H(t)}{\partial t} - \frac{1}{i\hbar} U^\dagger H(t) A^S(t) U + U^\dagger A^S(t) \frac{1}{i\hbar} H(t) U \\
&= \frac{\partial A^H(t)}{\partial t} - \frac{1}{i\hbar} U^\dagger H(t) U A^H(t) U^\dagger U + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger U A^H(t) U^\dagger H(t) U \\
&= \frac{\partial A^H(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [A^H(t), U^\dagger H(t) U] \\
&= \frac{\partial A^H(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [A^H(t), H^H(t)]
\end{aligned} \tag{7.16}$$

3. **相互作用绘景**：此绘景发源于微扰论的计算，其建立与微扰论密切相关，是最常用的绘景之一，它假定

$$H = H_0 + V \tag{7.17}$$

其中 H 的严格求解十分困难，但 H_0 的本征矢和本征值是已知的。故称 H_0 为参照系统， V 为微扰或相互作用项。记

$$U_0(t, t_0) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_0(\tau) d\tau \right] \tag{7.18}$$

为自由演化算子，在相互作用绘景中，有

$$|\psi^I(t)\rangle = U_0^\dagger(t, t_0) |\psi^S(t)\rangle = U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) |\psi^S(0)\rangle \tag{7.19}$$

$$A^I(t) = U_0^\dagger(t, t_0) A^S(t) U_0(t, t_0) \tag{7.20}$$

由此可知，相互作用绘景下的时间演化算子为

$$U^I(t, t_0) = U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) \tag{7.21}$$

它满足的运动方程是

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{dU^I}{dt} &= i\hbar \frac{dU_0^\dagger}{dt} U + i\hbar U_0^\dagger \frac{dU}{dt} = -U_0^\dagger H_0 U + U_0^\dagger H U \\
&= U_0^\dagger V U = U_0^\dagger V U_0 U_0^\dagger U = V^I(t) U^I
\end{aligned} \tag{7.22}$$

这里的 $V^I(t) = U_0^\dagger V U_0$ 常被称为相互作用绘景的**有效 Hamiltonian**。相应的，算子 $A^I(t)$ 的运动方程是

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{dA^I(t)}{dt} &= i\hbar U_0^\dagger \frac{\partial A^S}{\partial t} U_0 + U_0^\dagger A^S H_0 U_0 - U_0^\dagger H_0 A^S U_0 \\
&= i\hbar \frac{\partial A^I}{\partial t} + U_0^\dagger A^S U_0 U_0^\dagger H_0 U_0 - U_0^\dagger H_0 U_0 U_0^\dagger A^S U_0 \\
&= i\hbar \frac{\partial A^I(t)}{\partial t} + [A^I(t), H_0^I(t)]
\end{aligned} \tag{7.23}$$

相互作用绘景中，由于 V 和 H_0 一般不对易，因此，无论 V 和 H_0 是否含时， $V^I(t)$ 一般都将显含时间，从而使得 U^I 的解具有 Dyson 级数的性质，Dyson 级数的每一阶都对应着微扰的级数。在 V 相对于 H_0 而言不大时， $U^I(t, t_0)$ 可迭代求解，并能合理地指望级数的收敛性至少是渐进收敛，这正是微扰论求解大量问题时的常规做法。

7.2 关于 Heisenberg 绘景的若干讨论

在 Heisenberg 绘景中，用量子 Poisson 括号表示的算符演化方程，与 Hamilton 力学框架中用 Poisson 括号表示的经典运动方程形式完全相同，这正是在理论物理中常用 Heisenberg 绘景进行正则量子化的原因：经典力学系统经此正则量子化以后，立即转入 Heisenberg 绘景。

然而，由于 Heisenberg 绘景的运动方程是算子运动方程，未知数是算子、矩阵。待求的未知数比 Schrödinger 绘景态矢方程多得多，比较难以求解，是故，Heisenberg 绘景特别有利于理论形式的探讨与经典类比，而不适合进行具体的数值计算。

Example 1: 一维谐振子

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2q^2 \quad (7.24)$$

Solution 1: 回忆类比，有

$$\frac{1}{i\hbar}[\text{Quantum Commutator}] = \{\text{Classical Poisson}\} \quad (7.25)$$

由于 H 不含时，有

$$H^H = H^S = \frac{1}{2m}(p^H)^2 + \frac{1}{2}m\omega^2(q^H)^2 \quad (7.26)$$

相应的计算，有

$$\frac{dq^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[q^H, \frac{1}{2m}(p^H)^2 \right] = \frac{p^H}{m} \quad (7.27)$$

$$\frac{dp^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[p^H, \frac{1}{2}m\omega^2(q^H)^2 \right] = -m\omega^2q^H \quad (7.28)$$

于是

$$\frac{d^2q^H}{dt^2} = \frac{1}{m} \frac{dp^H}{dt} = -m\omega^2q^H \quad (7.29)$$

求解此算子方程，有

$$q^H(t) = q(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t \quad (7.30)$$

$$p^H(t) = -q(0)m\omega \sin \omega t + p(0) \cos \omega t \quad (7.31)$$

这一方程和解的形式，都与经典谐振子一致。

Example 2: 一维自由粒子

$$H = \frac{1}{2m}(p^H)^2 \quad (7.32)$$

Solution 2:

$$\frac{dq^H}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[q^H, \frac{1}{2m}(p^H)^2 \right] = \frac{p^H}{m} \quad (7.33)$$

$$\frac{dp^H}{dt} = 0 \quad (7.34)$$

则

$$q^H(t) = q(0) + \frac{p(0)}{m}t \quad (7.35)$$

$$p^H(t) = p(0) \quad (7.36)$$

特别的，可知不同时刻的 q^H 算子不对易：

$$[q^H(t), q^H(0)] = \left[\frac{p(0)}{m}t, q(0) \right] = -\frac{i\hbar}{m}t \quad (7.37)$$

将不确定性关系

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2 \quad (7.38)$$

应用于此对易子，得

$$\langle (\Delta q)^2 \rangle_t \langle (\Delta q)^2 \rangle_0 \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m} \quad (7.39)$$

这说明随着时间的推移，即使 $t = 0$ 时粒子的位置是完全确定的， $\langle(\Delta q)\rangle_t$ 不确定度至少是线性增长的。这种弥散，可以通过求解一个 Gauss 波包的波动力学来表征，也可以认为这一不确定度来自于 Δp 的时间累积效果：

$$\langle\Delta q\rangle_t \sim \frac{\langle\Delta p\rangle_0}{m} \cdot t = \Delta v \cdot t \quad (7.40)$$

$$\langle\Delta q\rangle_t \langle\Delta q\rangle_0 \geq \frac{t}{m} \langle\Delta q\rangle_0 \langle\Delta p\rangle_0 \geq \frac{\hbar t}{2m} \quad (7.41)$$

Example 3: 荡起量子的秋千

$$H = \omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) + g \left(e^{i2\omega t} a a + e^{-i2\omega t} a^\dagger a^\dagger \right) \quad (7.42)$$

设 $\langle a^\dagger a \rangle(0) = 0$ ，求 $\langle a^\dagger a \rangle(t)$ 。

Solution 3:

$$[a^\dagger a, H] = \omega [a^\dagger a, a^\dagger a] + g e^{i2\omega t} [a^\dagger a, a a] + g e^{-i2\omega t} [a^\dagger a, a^\dagger a^\dagger] = -2g e^{i2\omega t} a a + 2g e^{-i2\omega t} a^\dagger a^\dagger \quad (7.43)$$

$$[a a, H] = \omega [a a, a^\dagger a] + g e^{-i2\omega t} [a a, a^\dagger a^\dagger] = 2\hbar\omega a a + 2g e^{-i2\omega t} (a a^\dagger + a^\dagger a) \quad (7.44)$$

$$[a^\dagger a^\dagger, H] = \omega [a^\dagger a^\dagger, a^\dagger a] + g e^{i2\omega t} [a^\dagger a^\dagger, a a] = -2\hbar\omega a a - 2g e^{i2\omega t} (a a^\dagger + a^\dagger a) \quad (7.45)$$

于是

$$i \frac{d\langle a^\dagger a \rangle}{dt} = [a^\dagger a, H] = -2g e^{i2\omega t} a a + 2g e^{-i2\omega t} a^\dagger a^\dagger \quad (7.46)$$

$$\begin{aligned} i \frac{d^2\langle a^\dagger a \rangle}{dt^2} &= -i4g\omega e^{i2\omega t} a a - 2g e^{i2\omega t} \frac{1}{i} [2\omega a a + 2g e^{-i2\omega t} (a a^\dagger + a^\dagger a)] \\ &\quad - i4g\omega e^{-i2\omega t} a^\dagger a^\dagger + 2g e^{-i2\omega t} \frac{1}{i} [-2\omega a a - 2g e^{i2\omega t} (a a^\dagger + a^\dagger a)] \end{aligned} \quad (7.47)$$

整理得

$$\frac{d^2\langle a^\dagger a \rangle}{dt^2} = 8g^2 (a a^\dagger + a^\dagger a) = 16g^2 \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (7.48)$$

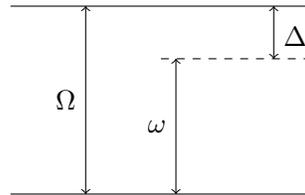
$$\frac{d^2\langle a^\dagger a \rangle}{dt^2} = \frac{16g^2}{\hbar^2} \langle a^\dagger a + \frac{1}{2} \rangle = 16g^2 \langle a^\dagger a \rangle + 8g^2 \quad (7.49)$$

故

$$\langle a^\dagger a \rangle = \frac{1}{4} (e^{4gt} + e^{-4gt}) - \frac{1}{2} \quad (7.50)$$

7.3 相互作用绘景算例：虚过程的有效哈密顿量

7.3.1 虚过程的概念



我们以一个二能级原子，受到失谐的经典电磁场辐照作为例子：

$$H = \frac{1}{2} \Omega \sigma_z + g (e^{i\omega t} \sigma^- + e^{-i\omega t} \sigma^+) \quad (7.51)$$

$$H = H_0 + V \quad (7.52)$$

其中

$$\sigma^- = |\downarrow\rangle\langle\uparrow| \quad \sigma^+ = |\uparrow\rangle\langle\downarrow| \quad (7.53)$$

由于光场和原子的失谐，我们可以判定，在 $g \ll \Delta = \Omega - \omega$ 的情况下，原子是难以被激发的，原因是能量不守恒。

这一判定可以在一个相互作用绘景中得到验证（在量子光学文献中，相互作用绘景又被称为旋转表象）。取

$$H_0 = \frac{1}{2}\omega\sigma_z \quad (7.54)$$

$$V = \frac{1}{2}\Delta\sigma_z + g(e^{i\omega t}\sigma^- + e^{-i\omega t}\sigma^+) \quad (7.55)$$

由我们之前推导过的结论

$$e^A B e^{-A} = e^{S_A} B \quad [A, B] = S_A B \quad (7.56)$$

可以得到

$$e^{iH_0 t}\sigma^+e^{-iH_0 t} = \sigma^+e^{i\omega t} \quad (7.57)$$

$$e^{iH_0 t}\sigma^-e^{-iH_0 t} = \sigma^-e^{-i\omega t} \quad (7.58)$$

故有效 Hamiltonian 为

$$\begin{aligned} V_I(t) &= U_0^\dagger V U_0 = e^{iH_0 t} \left[\frac{1}{2}\Delta\sigma_z + g(e^{i\omega t}\sigma^- + e^{-i\omega t}\sigma^+) \right] e^{-iH_0 t} \\ &= \frac{1}{2}\Delta\sigma_z + g\sigma_x = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \Delta & 2g \\ 2g & -\Delta \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (7.59)$$

令

$$\cos 2\theta = \frac{\Delta}{B} \quad \sin 2\theta = \frac{2g}{B} \quad B = \sqrt{\Delta^2 + 4g^2} \quad (7.60)$$

有

$$V_I = \frac{B}{2} \begin{bmatrix} \cos 2\theta & \sin 2\theta \\ \sin 2\theta & -\cos 2\theta \end{bmatrix} \quad (7.61)$$

本征矢与本征值

$$\begin{bmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{bmatrix} \rightarrow \frac{1}{2}B \quad \begin{bmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{bmatrix} \rightarrow -\frac{1}{2}B \quad (7.62)$$

这个模型是严格可解的

$$|\psi(0)\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \sin \theta \begin{bmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{bmatrix} + \cos \theta \begin{bmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{bmatrix} \quad (7.63)$$

$$|\psi(t)\rangle = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \theta (e^{-i\frac{1}{2}Bt} - e^{i\frac{1}{2}Bt}) \\ \sin^2 \theta e^{-i\frac{1}{2}Bt} + \cos^2 \theta e^{i\frac{1}{2}Bt} \end{bmatrix} \quad (7.64)$$

可见，在上态的粒子布居是极小的。

$$P_\uparrow = (\sin 2\theta)^2 \left(\sin \frac{1}{2}Bt \right)^2 = \frac{4g^2}{\Delta^2 + 4g^2} \cdot \frac{1}{2}(1 - \cos Bt) \quad (7.65)$$

但是这一过程所带来的能量修正在 AMO 领域是常见的。具体来说，当原子从外光场中吸收一个光子向上跃迁的时候，由于能量的失谐，原子待在上能级是不稳定的，它会向下跃迁，然后放出这个光子，从微扰论的观点来看，这是一个二阶过程，会给基态带来二阶的能量修正，即 **Stark 效应**。

回到

$$H = \frac{1}{2}\Omega\sigma_z + g(e^{i\omega t}\sigma^- + e^{-i\omega t}\sigma^+) \quad (7.66)$$

此处我们还可以采用另外一种绘景，即令

$$H_0 = \frac{1}{2}\Omega\sigma_z \quad (7.67)$$

$$V = g(e^{i\omega t}\sigma^- + e^{-i\omega t}\sigma^+) \quad (7.68)$$

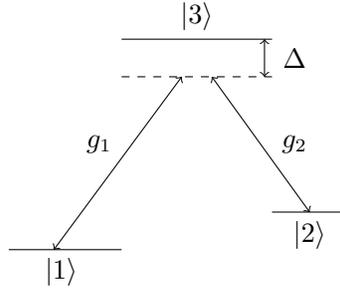
此时有

$$H_I(t) = g(\sigma^+ e^{i\Delta t} + \sigma^- e^{-i\Delta t}) \quad g \ll \Delta \quad (7.69)$$

根据绘景理论，这里的 $H_I(t)$ 和前面的 $V_I(t)$ 应给出相同的物理。这里的要点是，能级的失配给出了 $H_I(t)$ 中的快变因子，而且这个快变因子是 $H_I(t)$ 中最大的能量尺度，而由于能级的失配，上能级是有效的无激发的，于是问题即归纳为如何有效地将上能级积掉，而得到一个只包括下能级的有效理论。

7.3.2 Raman 过程

更进一步的，我们考虑如下的一个三能级问题。 $|1\rangle$ 和 $|2\rangle$ 是体系的两个亚稳态，而 $|3\rangle$ 是激发态，由于跃迁的选择定则， $|1\rangle \rightarrow |3\rangle$ 和 $|2\rangle \rightarrow |3\rangle$ 是容许的， $|1\rangle \rightarrow |2\rangle$ 是禁戒的。



我们想要耦合 $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ 能级，实现两能级上的布居交换。此时，由于 $|3\rangle$ 的自发辐射效应极强， $|1\rangle \rightarrow |3\rangle \rightarrow |2\rangle$ 有极高的损耗而不可良好地操控，因此我们可以考虑如图的虚过程来达到我们的目的。

Raman 过程对应的 Hamiltonian 为

$$H_0(t) = \Omega_1 |1\rangle \langle 1| + \Omega_2 |2\rangle \langle 2| + \Omega_3 |3\rangle \langle 3| \quad (7.70)$$

$$V(t) = g_1 e^{-i\omega_1 t} (|1\rangle \langle 3| + |3\rangle \langle 1|) + g_2 e^{-i\omega_2 t} (|2\rangle \langle 3| + |3\rangle \langle 2|) \quad (7.71)$$

且

$$\Omega_3 - \Omega_1 - \omega_1 = \Omega_3 - \Omega_2 - \omega_2 = \Delta \quad (7.72)$$

相互作用绘景下的有效 Hamiltonian 为

$$\begin{aligned} V_I(t) &= e^{iH_0 t} V e^{-iH_0 t} \\ &= g_1 e^{-i\omega_1 t} (e^{iH_0 t} |1\rangle \langle 3| e^{-iH_0 t} + e^{iH_0 t} |3\rangle \langle 1| e^{-iH_0 t}) \\ &\quad + g_2 e^{-i\omega_2 t} (e^{iH_0 t} |2\rangle \langle 3| e^{-iH_0 t} + e^{iH_0 t} |3\rangle \langle 2| e^{-iH_0 t}) \end{aligned} \quad (7.73)$$

由 $e^A B e^{-A} = e^{S_A} B$, $[A, B] = S_A B$, 得

$$[iH_0 t, |1\rangle \langle 3|] = i\Omega_1 t [|1\rangle \langle 1|, |1\rangle \langle 3|] + i\Omega_3 t [|3\rangle \langle 3|, |1\rangle \langle 3|] = -i(\Omega_3 - \Omega_1) t |1\rangle \langle 3| \quad (7.74)$$

$$[iH_0 t, |3\rangle \langle 1|] = i\Omega_1 t [|1\rangle \langle 1|, |3\rangle \langle 1|] + i\Omega_3 t [|3\rangle \langle 3|, |3\rangle \langle 1|] = i(\Omega_3 - \Omega_1) t |3\rangle \langle 1| \quad (7.75)$$

$$[iH_0t, |2\rangle\langle 3|] = i\Omega_2t[|2\rangle\langle 2|, |2\rangle\langle 3|] + i\Omega_3t[|3\rangle\langle 3|, |2\rangle\langle 3|] = -i(\Omega_3 - \Omega_2)t|2\rangle\langle 3| \quad (7.76)$$

$$[iH_0t, |3\rangle\langle 2|] = i\Omega_2t[|2\rangle\langle 2|, |3\rangle\langle 2|] + i\Omega_3t[|3\rangle\langle 3|, |3\rangle\langle 2|] = i(\Omega_3 - \Omega_2)t|3\rangle\langle 2| \quad (7.77)$$

于是

$$\begin{aligned} V_I(t) &= g_1 e^{-i\omega_1 t} |3\rangle\langle 1| e^{i(\Omega_3 - \Omega_1)t} + g_2 e^{-i\omega_2 t} |3\rangle\langle 2| e^{i(\Omega_3 - \Omega_2)t} + \text{H.C.} \\ &= g_1 e^{-i\omega_1 t} |3\rangle\langle 1| e^{i(\Omega_3 - \Omega_1)t} + g_2 e^{-i\omega_2 t} |3\rangle\langle 2| e^{i(\Omega_3 - \Omega_2)t} + \text{H.C.} \\ &= g_1 |3\rangle\langle 1| e^{i\Delta t} + g_2 |3\rangle\langle 2| e^{i\Delta t} + \text{H.C.} \end{aligned} \quad (7.78)$$

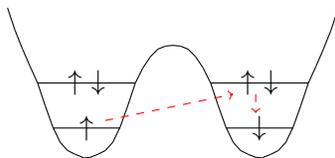
此处我们看到，失谐 Δ 又成为了这一 Hamiltonian 中的最大能量尺度。

这一过程的要点是， $|3\rangle$ 能级是有效地被虚激发的，因此，我们期望得到一个有效的二能级 Hamiltonian，它要描述的是：

- $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ 的布居转换
- $|1\rangle, |2\rangle$ 各自的 Stark shift

7.3.3 双势阱模型

这样一种思路不仅在 AMO 体系中存在，在凝聚态物理中也十分常见。我们以 Mott 绝缘体中的反铁磁序为例，考虑如下的双势阱模型。



由于 $|\uparrow\downarrow\rangle$ 可以通过如图的非共振的隧穿虚过程来获得一个二阶的能量修正，因此， $|\uparrow\downarrow\rangle$ 和 $|\downarrow\uparrow\rangle$ 的能量比 $|\uparrow\uparrow\rangle$ 或 $|\downarrow\downarrow\rangle$ 低，这种机制被称为超交换，它可被认为是反铁磁的起源。同样的，在这一体系中，我们略去高能的虚激发，得到低能的有效 Hamiltonian

$$H_{\text{eff}} = J\vec{S}_L \cdot \vec{S}_R \quad (7.79)$$

7.3.4 虚过程

由此可见，我们在这里所处理的问题有一类共性，即体系被分成两个能量区域：lower manifold 和 upper manifold，这两个区域之间的耦合强度 g 是远小于能量的失谐 Δ 的，此时 upper manifold 是有效无激发或虚激发的，而借助上能级的粒子的“激发——回跳”这一快过程，lower manifold 中就可以出现许多有意义的物理过程，这些过程在量子光学中被称为虚过程。

从数学上来说，我们即是要处理一类带有快变因子的、时间尺度大于 $\frac{\Delta}{\hbar}$ 的 Hamiltonian，即想办法把虚激发的上能级“积分积掉”，或绝热去除掉，从而得到一个缓变的 Hamiltonian，以表述体系长时间运动平均的动力学过程。

有效 Hamiltonian(一)

考虑如下形式的 Hamiltonian：

$$H_I = Ae^{-i\omega t} + A^\dagger e^{i\omega t} \quad (7.80)$$

设 A 不含时， $A^\dagger A$ 的所有本征值都 $\ll \omega^2$ 。我们通过计算 Dyson 级数的方法，得出它所描述的虚过程的有效 Hamiltonian。

$$U(t) = 1 - i \int_0^t H_I(\tau) U(\tau) d\tau \quad (7.81)$$

这里我们假设 $t \gg \frac{1}{\omega}$ ，即我们考虑的时间尺度相对于高频振荡 ω 而言是极大的，这即意味着 $U(t)$ 中所有以 ω 振荡的项都可以被平均而忽略掉！

$$U_0(t) = 1 \quad (7.82)$$

$$\begin{aligned} U_1(t) &= 1 - i \int_0^t H_I(\tau) d\tau \\ &= 1 - i \int_0^t (Ae^{-i\omega\tau} + A^\dagger e^{i\omega\tau}) d\tau \\ &= 1 - i \left(\frac{e^{-i\omega t} - 1}{-i\omega} A + \frac{e^{i\omega t} - 1}{i\omega} A^\dagger \right) \end{aligned} \quad (7.83)$$

$$\begin{aligned} U_2(t) &= 1 - i \int_0^t H(\tau) U_1(\tau) d\tau \\ &= 1 - i \int_0^t (Ae^{-i\omega\tau} + A^\dagger e^{i\omega\tau}) \left[1 - i \left(\frac{e^{-i\omega\tau} - 1}{-i\omega} A + \frac{e^{i\omega\tau} - 1}{i\omega} A^\dagger \right) \right] d\tau \end{aligned} \quad (7.84)$$

此时我们的思路是，若存在一个 H_{eff} 来概括低能有效体系的演化，那么

$$U_{\text{eff}} \approx 1 - iH_{\text{eff}}t \quad (7.85)$$

由此，我们应去关注 $U_2(t)$ 中 t 的线性项，即

$$\begin{aligned} U_2(t) &= 1 - i \int_0^t (Ae^{-i\omega\tau} + A^\dagger e^{i\omega\tau}) \left[1 - i \left(\frac{e^{-i\omega\tau} - 1}{-i\omega} A + \frac{e^{i\omega\tau} - 1}{i\omega} A^\dagger \right) \right] d\tau \\ &\approx 1 - i \int_0^t \left(e^{-i\omega\tau} \frac{e^{-i\omega\tau} - 1}{\omega} AA - e^{i\omega\tau} \frac{e^{i\omega\tau} - 1}{\omega} A^\dagger A^\dagger + \frac{1 - e^{i\omega\tau}}{\omega} A^\dagger A - \frac{1 - e^{-i\omega\tau}}{\omega} AA^\dagger \right) d\tau \\ &\approx 1 - i \int_0^t \left(\frac{1}{\omega} A^\dagger A - \frac{1}{\omega} AA^\dagger \right) d\tau \\ &= 1 - i \frac{(-1)}{\omega} [A, A^\dagger] t \end{aligned} \quad (7.86)$$

即

$$H_{\text{eff}} = -\frac{1}{\omega} [A, A^\dagger] \quad (7.87)$$

7.3.5 有效 Hamiltonian(二)

以下我们考虑用另一种方法来得到这个有效 Hamiltonian。从 $U(t)$ 满足的方程出发，

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H_I(t) U(t) \quad (7.88)$$

考虑一个算符 $O(t)$ 的时间平均，其定义为

$$\overline{O(t)} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t-t') O(t') dt' \quad (7.89)$$

这里的 $f(t)$ 是实值的，且面积为 1 的一个函数，扮演着低通滤波器的角色， $O(t)$ 的一切高频振荡行为都被其归 0，分布积分即有

$$\frac{\partial \overline{O(t)}}{\partial t} = \overline{\left(\frac{\partial O(t)}{\partial t} \right)} \quad (7.90)$$

Proof:

$$\begin{aligned}
\overline{\frac{\partial O(t)}{\partial t}} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\partial}{\partial t} f(t-t') \right] O(t') dt' \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} - \left[\frac{\partial}{\partial t'} f(t-t') \right] O(t') dt' \\
&= - f(t-t') O(t') \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} f(t-t') \frac{\partial}{\partial t'} O(t') dt' \\
&= \overline{\left(\frac{\partial O(t)}{\partial t} \right)}
\end{aligned} \tag{7.91}$$

由此，支配这一体系的有效 Hamiltonian，可被定义为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \overline{U(t)} = H_{\text{eff}} \overline{U(t)} \tag{7.92}$$

即 H_{eff} 表述的是体系的演化的时间平均，这一平均滤去了高频的振荡行为。而由

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t) = H_I(t) U(t) \tag{7.93}$$

有

$$H_{\text{eff}} \overline{U(t)} = \overline{H_I(t) U(t)} \tag{7.94}$$

$$H_{\text{eff}} = \frac{\overline{H_I(t) U(t)}}{\overline{U(t)}} \tag{7.95}$$

这里要注意的是，虽然 $U(t)$ 是么正的，但 $\overline{U(t)}$ 则不尽然，因此，这一 H_{eff} 表达式有一严重的问题，即 H_{eff} 的厄米性无法保证。这里出现 $\overline{U(t)}$ 的非么正是十分显然的：我们把 Hilbert 空间分成了 lower 和 upper 两个 manifold，并试图用时间平均的方法把 upper 部分去掉，出现非么正的演化也就在所难免，这里的处理办法是“强行厄米化”，即令

$$H_{\text{eff}}(t) = \frac{1}{2} [H_{\text{eff}}(t) + H_{\text{eff}}^\dagger(t)] \tag{7.96}$$

根据 $U(t) = T \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H_I(\tau) d\tau \right]$ ，我们可以得到 $U(t)$ 的逐级展开表达：

$$U_1(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t H_I(\tau) d\tau = 1 + V_1(t) \tag{7.97}$$

故

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}}(t) &= \overline{H_I(t) [1 + V_1(t)]} \cdot \overline{[1 - V_1(t)]} \\
&= \overline{H_I(t)} + \overline{H_I(t) V_1(t)} - \overline{H_I(t)} \cdot \overline{V_1(t)}
\end{aligned} \tag{7.98}$$

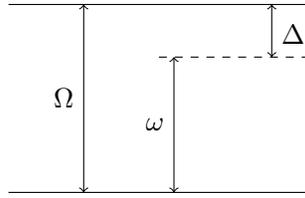
再根据 $H_I(t) = H_I^\dagger(t)$, $V_1^\dagger(t) = -V_1(t)$ ，即有

$$H_{\text{eff}}(t) = \overline{H_I(t)} + \frac{1}{2} \left\{ \overline{[H_I(t), V_1(t)]} - \overline{[H_I(t), V_1(t)]} \right\} \tag{7.99}$$

下面讨论 H_I 具有谐振性的时间依赖形式：

$$H_I(t) = \sum_{n=1}^N (A_n e^{-i\omega_n t} + A_n^\dagger e^{i\omega_n t}) \tag{7.100}$$

7.3.6 有效 Hamiltonian 的若干应用



单原子——单模光场相互作用

$$H = \frac{1}{2}\Omega\sigma_z + \omega a^\dagger a + g(a^\dagger + a)(\sigma^+ + \sigma^-) \quad (7.101)$$

所谓耦合，就是一个体系的算符，与另一个体系的算符相乘。

$$H_0 = \frac{1}{2}\Omega\sigma_z \otimes I_p + \omega I_a \otimes a^\dagger a \quad (7.102)$$

$$V = g(a^\dagger + a)(\sigma^+ + \sigma^-) \quad (7.103)$$

$$\begin{aligned} V_I(t) &= g(a^\dagger e^{i\omega t} + a e^{-i\omega t})(\sigma^+ e^{i\Omega t} + \sigma^- e^{-i\Omega t}) \\ &= g(a^\dagger \sigma^- e^{-i\Delta t} + a \sigma^+ e^{i\Delta t}) + g(a^\dagger \sigma^+ e^{i\Sigma t} + a \sigma^- e^{-i\Sigma t}) \end{aligned} \quad (7.104)$$

在 $g \ll \Delta \ll \omega, \Omega \sim \Sigma$ 的情况下，有

$$H_{\text{eff}} = -\frac{g^2}{\Delta}[a^\dagger \sigma^-, a \sigma^+] - \frac{g^2}{\Sigma}[a \sigma^-, a^\dagger \sigma^+] \quad (7.105)$$

由

$$\begin{cases} \sigma^+ \sigma^- + \sigma^- \sigma^+ = 1 \\ \sigma^+ \sigma^- - \sigma^- \sigma^+ = \sigma_z \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \sigma^+ \sigma^- = \frac{1}{2}(1 + \sigma_z) \\ \sigma^- \sigma^+ = \frac{1}{2}(1 - \sigma_z) \end{cases} \quad (7.106)$$

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= -\frac{g^2}{\Delta}[a^\dagger \sigma^-, a \sigma^+] - \frac{g^2}{\Sigma}[a \sigma^-, a^\dagger \sigma^+] \\ &= -\frac{g^2}{\Delta}[a^\dagger a \sigma^- \sigma^+ - a a^\dagger \sigma^+ \sigma^-] - \frac{g^2}{\Sigma}[a a^\dagger \sigma^- \sigma^+ - a^\dagger a \sigma^+ \sigma^-] \\ &= \frac{g^2}{\Delta} \left(a^\dagger a \sigma_z + \frac{1}{2} \sigma_z + \frac{1}{2} \right) + \frac{g^2}{\Sigma} \left(a^\dagger a \sigma_z + \frac{1}{2} \sigma_z - \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (7.107)$$

Notation: 由于 $\Delta \ll \Sigma$ ，因此，后项的贡献是远远小于前项的，故常略去后项。在处理 Hamiltonian 时，常把这些更快的快变项去除，这就是量子光学中所谓的“旋转波近似”，即

$$V = g(a^\dagger + a)(\sigma^- + \sigma^+) \approx g(a^\dagger \sigma^- + a \sigma^+) \quad (7.108)$$

而这里被抛弃的 $g(a^\dagger \sigma^+ + a \sigma^-)$ 被称为反旋波项 (counter rotating term)，它的贡献一般是被忽略的。从物理上看，这是保留能量近似守恒的慢变量 $a^\dagger \sigma^- + a \sigma^+$ 项，而丢掉能量更不守恒的快变项 $a^\dagger \sigma^+ + a \sigma^-$ 。再看

$$H_{\text{eff}} = \frac{g^2}{\Delta} \sigma_z \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (7.109)$$

原子物理中的 Stark 效应：

$$H = \frac{1}{2}\omega\sigma_z + g\sigma_x \quad (7.110)$$

重新审视荡秋千问题

$$H = \frac{p^2}{2m(t)} + \frac{1}{2}m(t)\omega^2 x^2 \quad (7.111)$$

一阶近似下, 有

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \omega a^\dagger a \quad (7.112)$$

而 $m(t) = m + \delta m(t)$ 诱导了

$$H_1 = \alpha_1(t)p^2 + \alpha_2(t)x^2 \quad (7.113)$$

$$\begin{cases} a^\dagger = \sqrt{\frac{i}{2m\omega}}p + i\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x \\ a = \sqrt{\frac{i}{2m\omega}}p - i\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x \end{cases} \quad (7.114)$$

第三部分

Applications

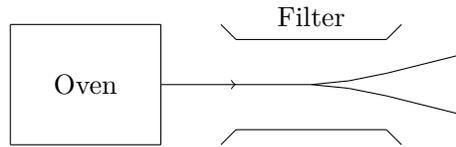
第八章 密度矩阵理论

8.1 问题的提出

至今为止，我们所讨论的都是状态已完全知道的体系，但在实际问题中，我们对体系的状态的信息并不能完全掌握。我们主要遇到的情况会是下面两种。

8.1.1 统计的不完备性

以 Stern-Gerlach 实验为例



经过 filter 之后，

$$\begin{aligned} \text{上} &\Rightarrow 100\% |\uparrow\rangle \\ \text{下} &\Rightarrow 100\% |\downarrow\rangle \end{aligned} \quad (8.1)$$

不确定的因素在于，当银原子出了 Oven 而未通过 filter 时，它们的指向是各自随机的：

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |\uparrow\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} |\downarrow\rangle \quad \theta \in [0, \pi], \varphi \in [0, 2\pi] \quad (8.2)$$

这一状态与球面上的一个单位矢量 $[\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta]^T$ 相对应，这个单位矢量被称为 $|\psi\rangle$ 所对应的 **Bloch 矢量**。

粒子的状态分布，在球面上可以用函数 $P(\theta, \varphi)$ 来表述：

$$\frac{N(\theta \rightarrow \theta + d\theta, \varphi \rightarrow \varphi + d\varphi)}{N} = P(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi \quad (8.3)$$

其中

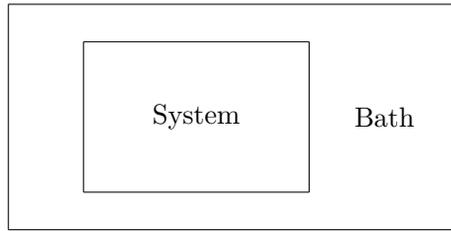
$$\int P(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = 1 \quad (8.4)$$

问题在于，如何在不能确切知道各个粒子状态的情况下，即基于不完备的知识，对这一体系进行量子力学的描述，而这种描述手段所给出的结果和预言，又要最大限度地体现这是不完备的知识？

8.1.2 纠缠

而另一种信息的不完备，来自于所谓的**纠缠 (entanglement)**，即我们所考虑的物理体系只是一个大体系的一小部分。此时，这个大的整体体系，可用一个态矢量 $|\psi\rangle$ 来表述，但是小体系显然是不能的。

$$H = H_S + H_B + H_{\text{Int}} = H_S + H_B + X_S X_B \quad (8.5)$$



System 可测可知; Bath/environment 一般不易测不易知。

- Initial:

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_S(0)\rangle \otimes |\psi_B(0)\rangle \quad (8.6)$$

- Evolution:

$$|\psi(t)\rangle = a_1 |\psi_{S1}\rangle |\psi_{B1}\rangle + a_2 |\psi_{S2}\rangle |\psi_{B2}\rangle \quad (8.7)$$

- Entangle: $|\psi(t)\rangle$ 不能写成 $|\psi_S\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ 直积的形式, 即为纠缠。

Example:

$$H_{\text{int}}^I = g(\sigma_{z1} + I_1)(\sigma_{z2} + I_2) \quad (8.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} [|0\rangle + |1\rangle]_1 [|0\rangle + |1\rangle]_2 &\xrightarrow{t=\frac{\pi}{4g}} \frac{1}{2} [|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle - |11\rangle] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} |0\rangle_1 |+\rangle_2 + \frac{1}{\sqrt{2}} |1\rangle_1 |-\rangle_2 \end{aligned} \quad (8.9)$$

其中

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle + |1\rangle] \quad (8.10)$$

Properties: 考虑 $\frac{1}{\sqrt{2}} [|00\rangle + |11\rangle e^{i\theta}]$, 测量 $\sigma_{z1} \otimes I_2$ 和 $\sigma_{x1} \otimes I_2$

- $\sigma_{z1} \otimes I_2$

$$P(-1) = \frac{1}{2} \quad P(1) = \frac{1}{2} \quad (8.11)$$

- $\sigma_{x1} \otimes I_2$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} [|00\rangle + |11\rangle e^{i\theta}] = \frac{1}{2\sqrt{2}} \{ (|0\rangle + |1\rangle) [|0\rangle + |1\rangle e^{i\theta}] + (|0\rangle - |1\rangle) [|0\rangle - |1\rangle e^{i\theta}] \} \quad (8.12)$$

$$P(-1) = \frac{1}{2} \quad P(1) = \frac{1}{2} \quad (8.13)$$

由此可知, 对于 $\text{spin}\frac{1}{2} \otimes \text{spin}\frac{1}{2}$ 来说, 形如 $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle |+\rangle + |\downarrow\rangle |-\rangle)$ 的态, 在对其中的一个粒子施行局域的任何方向的测量时, 所得的两种态的几率都是 $\frac{1}{2}$ 。这说明了这一状态不能写为 $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ 的直积形式。因为 $|\psi_1\rangle$ 是 $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ 的本征态且本征值为 1, 这里 \vec{n} 的定义为

$$|\psi_1\rangle \langle \psi_1| = \frac{1}{2}(I + \vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \quad (8.14)$$

$$|\psi_1\rangle \langle \psi_1| \psi_1\rangle = \frac{1}{2} |\psi_1\rangle + \frac{1}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma} |\psi_1\rangle = |\psi_1\rangle \quad (8.15)$$

$$\vec{n} \cdot \vec{\sigma} |\psi_1\rangle = |\psi_1\rangle \quad (8.16)$$

由此可见

于是, 这里的问题归结于, 如何对一个整体体系的子体系进行量子力学描述, 并由此描述得出相应的局域物理量的正确测量预言。

这里的“对子体系进行描述”包含两种含义:

1. 在我们仅对子体系的信息完全掌握，对全局信息的掌握并不完备的时候，我们应当怎么办？
2. 当我们“形式上的”获得了关于整个体系的描述，但是对于环境的表述是过于冗长的，而且在研究问题中是不必要的情况下，我们如何略去环境而得到一个描述我们所关注的子体系的有效理论？

8.2 量子态的统计混合

8.2.1 正则系综

当我们对一个体系所具备的知识不完备时，我们应当求助于统计学的概念。

Example 1: 处于温度 T 的热力学平衡的体系，它处于能量为 E_n 的态的几率为

$$P(E_n) = \frac{g_n}{Z} \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) \quad (8.17)$$

其中 g_n 是简并度， $Z = \sum_n g_n \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right)$ 。

Example 2: 如何区分线偏光、椭偏光和部分偏振光？分辨方法：玻片 $-b|H\rangle + a|V\rangle$

- Linear Polarized: $a|H\rangle + b|V\rangle \Rightarrow$ 消光
- Elliptically Polarized: $a|H\rangle + be^{i\theta}|V\rangle \Rightarrow$ 加上玻片后透射光强有起伏，会消光
- Partial Polarized: $a^2|H\rangle, b^2|V\rangle \Rightarrow$ 不起伏，无消光

由上面的三个例子可见，一般而言，在 QM 中我们所具备的关于某一体系的不完备的知识，往往以下列形式体现：该体系以概率 P_i 处于在 $|\psi_i\rangle$ 。即 $\{(|\psi_i\rangle, P_i)\}$ 的非相干统计混合，其中 $\sum P_i = 1$ ，这与相干的态叠加是有本质区别的！

8.2.2 量子系综

我们引入了一个重要的基本概念——量子系综，以对此类问题进行总体上的统计性描述。

Definition: N 个微观粒子复本组成的状态集合，集合中粒子处于各种不同的，不一定相互正交的态上，假定集合的分布是： n_i 个粒子处于 $|\psi_i\rangle$ ，称此集合为一个量子系综，记为

$$\varepsilon = \{|\psi_i\rangle, n_i, \sum_i n_i = N\} \quad (8.18)$$

故，量子系综一般是由不同的纯态组成的状态集合，当 $N \rightarrow \infty$ 时， $\frac{n_i}{N} \rightarrow P_i$ ，有

$$\varepsilon = \{|\psi_i\rangle, P_i, \sum_i P_i = 1\} \quad (8.19)$$

这里的概率分布 $\{P_i\}$ 被假定是先验的，要么通过另外的分析和计算得到，要么根据实验测量确定。由此，我们可以引入两个概念——纯态和混态。

Definition: 如果一个系综中，所有的体系复本都处在同一量子态 $|\psi\rangle$ 上，那么这个系统就被称为纯态系综，此时

$$\varepsilon = \{|\psi\rangle, P_{|\psi\rangle} = 1\} \quad (8.20)$$

反之，若干个纯态系综按照一定几率分布进行非相干混合，所得到的就是混态系综。

Notation:

- 系综定义中的“大量微观粒子复本”不一定是大量粒子，也可以指同一微观粒子经历大量不同的时间演化或测量。实验上就是利用这一观点对大量重复实验的结果进行统计解释的。
- 由量子力学的基本假设得知，任何一个孤立的物理体系一定处在一个确定的量子态上，这个态 $|\psi\rangle$ 是 Hilbert 空间中的一个态矢量，这即是说，它必定是一个纯态，只是因为它到底处在哪个纯态上的信息是不完备的，所以才引入混态的概念去描述它。

8.2.3 对体系做 B 的测量

令 $B: \{B_n, |u_n\rangle\}$ ，而 $|\psi_k\rangle = A_{nk} |u_n\rangle$ ， $A_{nk} = \langle u_n | \psi_k \rangle$ ，则得到 B_n 的几率

$$P_{B_n} = \sum_k |A_{nk}|^2 P_k \quad (8.21)$$

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \sum_n B_n P_{B_n} = \sum_n B_n \sum_k |A_{nk}|^2 P_k \\ &= \sum_n B_n \sum_k P_k \langle u_n | \psi_k \rangle \langle \psi_k | u_n \rangle = \sum_{n,k} B_n P_k \langle u_n | \psi_k \rangle \langle \psi_k | u_n \rangle \end{aligned} \quad (8.22)$$

Notation:

- $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, \dots$ 不必然要正交，但后面可以看到，我们总可以把它们认为是正交的。
- 在这一问题中，概率的概念出现了两次，在两个不同的阶段它们有完全不同的含义，这是我们必须区分的。
 1. 先验概率 P_k 来自于对初态认知的不完备信息，是非相干混合。
 2. P_{B_n} 是出现在应用关于测量的假定时，此时，即使被测物体的初态是完全知晓的，测量的结果也只能用概率的形式来表达。这一概率来自于量子力学中关于测量的概率性的基本假设，在这一步测量中，一个确定性的态将会走向统计性的混合。

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \xrightarrow{B} \{|u_i\rangle, c_i^2\} \quad (8.23)$$

全同，每个粒子都处于 $|\psi\rangle$ 上 每个粒子的状态各不相同， $|u_i\rangle$ 出现的几率为 c_i^2

这里测量前后的状态是完全不一样的，原因在于相干叠加的 $c_1 c_2^*$ 项会导致具有物理意义的干涉效应，这是非相干的混合所不具有的。

8.3 密度矩阵方法

8.3.1 密度矩阵的引入

由前可知，涉及混态的任何有定义的问题，都可用一组态矢的非相干求和的统计平均方法来表述。但是，这对于混态和混态的平均计算方式是不同的。

- 纯态：量子平均 & 相干性
- 混态：经典平均 & 非相干 + 量子平均 & 相干性

理论上，用同一种方式处理纯态和混态是不完善的，而实践中这种统计平均的方法所导致的计算常是繁复而不明确的。为此，von Neumann 提出密度矩阵方法，以统一地表示纯态和混态。

Definition: 一个量子系综 $\varepsilon = \{|\psi_i\rangle, P_i\}$ 对应的密度矩阵是 $\rho = \sum_i P_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ ，即其所含纯态的投影算子的权重和。在这里我们要注意的，为了表述纯态的非相干混合，我们不能使用形如 $|\psi\rangle = \sum_i \sqrt{\rho_i} |\psi_i\rangle$ 的相干叠加形式，而是转而寻求算子的几率混合。

8.3.2 密度矩阵的性质

(1) ρ 是厄米的, $\rho = \rho^\dagger$

(2) $\text{tr}(\rho) = \text{tr}(P_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|) = \sum_i P_i = 1$

(3) ρ 是半正定的, 存在正交谱分解, 即 $\exists |b_i\rangle, \langle b_i|b_j\rangle = \delta_{ij}$, 满足

$$\rho = \sum_i \omega_i |b_i\rangle \langle b_i| \quad \omega_i \geq 0, \sum_i \omega_i = 1 \quad (8.24)$$

(4) $\text{tr}(\rho^2) = \sum_i \omega_i^2 \leq 1$

$$\rho = \sum_i \omega_i |b_i\rangle \langle b_i| \quad (8.25)$$

$$\rho^2 = \sum_i \omega_i^2 |b_i\rangle \langle b_i| \quad (8.26)$$

则

$$\text{tr}(\rho^2) = \sum_i \omega_i^2 \leq 1 \quad (8.27)$$

当且仅当 $\exists \omega_i = 1$ 时等号成立。

(5) 力学量

$$B = \sum_n B_n |u_n\rangle \langle u_n| \quad (8.28)$$

期望值

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \sum_{n,k} B_n P_k \langle u_n | \psi_k \rangle \langle \psi_k | u_n \rangle \\ &= \text{tr} \left[\sum_{n,k} (B_n \langle u_n | u_n \rangle) (P_k \langle \psi_k | \psi_k \rangle) \right] \\ &= \text{tr}(B\rho) \end{aligned} \quad (8.29)$$

这是力学量的期望值用密度矩阵的表达形式。这说明只要有 ρ 的形式, 就可以知道体系任一物理量测量的结果。

(6) ρ 的运动方程

$$\rho = \sum_i P_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (8.30)$$

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\rho}{dt} &= i\hbar \sum_i P_i \left(\frac{d}{dt} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| + |\psi_i\rangle \frac{d}{dt} \langle \psi_i| \right) \\ &= \sum_i (HP_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| - P_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| H) \\ &= [H, \rho] \end{aligned} \quad (8.31)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\langle A \rangle}{dt} &= \frac{d}{dt} \text{tr}(A\rho) = \text{tr} \left(\frac{\partial A}{\partial t} \rho \right) + \text{tr} \left(A \frac{d\rho}{dt} \right) \\ &= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \text{tr} \left[A \frac{1}{i\hbar} (H\rho - \rho H) \right] \\ &= \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle \end{aligned} \quad (8.32)$$

由此, 当知道了某一时刻系综的密度矩阵, 可以预言此后任一时刻体系的密度矩阵。

(7) 密度矩阵的矩阵表示和物理意义：在基 $\{|u_n\rangle\}$ 下，密度矩阵 ρ 有矩阵元

$$\rho_{nm} = \langle u_n | \sum_i P_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i | u_m \rangle \quad (8.33)$$

其物理意义为

- 对角元 $\rho_{nn} = \sum_i P_i |\langle u_n | \psi_i \rangle|^2$ 表示对系综做 $\{|u_n\rangle\}$ 测量，塌缩到 $\{|u_n\rangle\}$ 上的几率。由此，称 ρ_{nn} 为 $|u_n\rangle$ 上的布居数。
- 相干元 $\rho_{nm} = \sum_i P_i \langle u_n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | u_m \rangle$ 表示 $|u_n\rangle$ 和 $|u_m\rangle$ 之间的干涉项，若 $|\psi_i\rangle$ 是 $|u_n\rangle$ 和 $|u_m\rangle$ 的叠加。

Notation:

- 即使所有的 $\langle u_m | \psi_i \rangle \langle \psi_i | u_m \rangle$ 都不为 0， ρ_{nm} 也可以通过 P_i 平均而归 0。这是因为 $\langle u_m | \psi_i \rangle \langle \psi_i | u_m \rangle$ 是复数，而 $\langle u_m | \psi_i \rangle \langle \psi_i | u_n \rangle$ 是正实数。 $\rho_{nm} = 0$ 说明 $|u_n\rangle$ ， $|u_m\rangle$ 之间的干涉效应通过平均而归零。反之，若 $\rho_{nm} \neq 0$ ，则一定存在相干性。
- 对于任意 ρ ，做 $\{|u_n\rangle\}$ 测量，所导致的结果一定是对角元不变，而非对角元归 0。以纯态为例

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \quad \rho = \sum_{ij} c_i c_j^* |u_i\rangle \langle u_j| \quad (8.34)$$

测量后

$$\{|u_i\rangle, c_i^2\} \quad \rho = \sum_i |c_i|^2 |u_i\rangle \langle u_i| \quad (8.35)$$

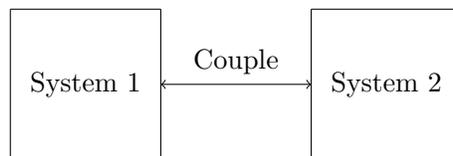
8.3.3 密度矩阵的经典对应——经典统计力学中的相空间密度 ρ

$$\{q, p\}: \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (8.36)$$

一个代表点在相空间中的坐标为 (q, p) ，速度为 (\dot{q}, \dot{p})

8.3.4 约化密度矩阵

下面我们回到前面所说的另一种信息不完备的情形，即我们关注的体系是一个大体系中的子体系。



$$V = V_1 \otimes V_2 \quad (8.37)$$

$$|a, \alpha\rangle = |a\rangle \otimes |\alpha\rangle \quad (8.38)$$

整个体系的密度矩阵具有形式

$$\rho = \rho_{a\alpha, b\beta} |a, \alpha\rangle \langle b, \beta| \quad (8.39)$$

以下考虑对体系 1 测量力学量 $A = A \otimes I_2$ ， A 可写为

$$A = \sum_{n, \alpha} A_n |u_n, \alpha\rangle \langle u_n, \alpha| \quad (8.40)$$

则具有

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \text{tr}(\rho A) \\
 &= \sum_{a,b,n,d,\alpha,\beta,\gamma,\delta} \langle d, \delta | A_n | u_n, \gamma \rangle \langle u_n, \gamma | \rho_{a\alpha, b\beta} | a, \alpha \rangle \langle b, \beta | d, \delta \rangle \\
 &= \sum_{a,b,n} P_{a\alpha, b\alpha} A_n \langle 1 | u_n \rangle \langle u_n | a \rangle \\
 &= \text{tr}_1 [\text{tr}_2(\rho A)]
 \end{aligned} \tag{8.41}$$

其中

$$\text{tr}_2(\rho A) = \sum_{a,b,\alpha} \rho_{a\alpha, b\alpha} |a\rangle \langle b| \tag{8.42}$$

Example:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \tag{8.43}$$

$$\rho = \frac{1}{2}(|00\rangle + |11\rangle)(\langle 00| + \langle 11|) \tag{8.44}$$

$$\rho_1 = \text{tr}_2(\rho) = \frac{1}{2}(|0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1|) \tag{8.45}$$

若 $|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$, 同样有 $\rho_1 = \text{tr}_2(\rho) = \frac{1}{2}(|0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1|)$ 。这里 $|\psi\rangle$ 和 $|\psi'\rangle$ 都是两体纯态, 但所得但 ρ_1 是混态, 且是相同的。

密度矩阵的演化方程被称为主方程, 只能在一些特定的近似下写出并求解。

8.4 自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子的纯态和混态, Bloch 球描述

8.4.1 处于态 $|\psi\rangle$ 的自旋 $\frac{1}{2}$ 粒子

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\varphi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\frac{\varphi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{8.46}$$

$$\rho = |\psi\rangle \langle \psi| = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} & e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} & \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \tag{8.47}$$

8.4.2 密度矩阵的凸性

8.4.3 时间演化和退相干过程的 Bloch 球描述

$$H = \frac{1}{2}B_0\sigma_z + \frac{1}{2}\delta B(t)\sigma_z \tag{8.48}$$

在相互作用绘景下

$$V = \frac{1}{2}\delta B(t)\sigma_z \tag{8.49}$$

初态

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle) \tag{8.50}$$

末态

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2}(|0\rangle + e^{i\phi}|1\rangle) \tag{8.51}$$

在实验中, 我们先制备 $|0\rangle + |1\rangle$ 态, 再让系统进行演化, 再测量。

在实验中有三个时间尺度

1. Every run of pulse. 即每次演化持续时间。

8.5 量子统计中的密度矩阵

8.5.1 微正则系综

8.5.2 正则系综

第九章 量子力学中的 Berry 相和拓扑

9.1 拓扑的基本概念

9.1.1 介绍

拓扑是几何学的一个分支，拓扑学研究几何物体的那些在连续变换下保持不变的几何性质。物理学和数学中有一些显而易见的拓扑性质的例子，我们列举两个。

Example 1: 留数定理

Example 2: Gauss 定理。当 Gauss 面的变换不触碰到这个点电荷时，Gauss 面上的电通量积分即为不变量。

9.2 Berry 相

对于 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi\rangle \quad (9.1)$$

设初态为

$$|\psi(0)\rangle = |n(\vec{R}(t_0))\rangle \quad (9.2)$$

猜测解为

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\theta(t)} |n(\vec{R}(t))\rangle \quad (9.3)$$

将上式代回 Schrödinger 方程，得到

$$E_n |n\rangle = -\hbar \frac{d\theta}{dt} |n\rangle + i\hbar \frac{d}{dt} |n\rangle \quad (9.4)$$

将 $\langle n|$ 作用在方程左右两边，

$$-\hbar \frac{d\theta}{dt} = E_n - i\hbar \langle n| \frac{d}{dt} |n\rangle \quad (9.5)$$

$$\theta(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' + i \int_0^t \langle n(t')| \frac{d}{dt} |n(t')\rangle dt' \quad (9.6)$$

令

$$\alpha_n(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \quad (9.7)$$

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle n(t')| \frac{d}{dt} |n(t')\rangle dt' \quad (9.8)$$

$\alpha_n(t)$ 被称为动力学相 (conventional dynamical phase)， $\gamma_n(t)$ 被称为 Berry Phase。我们可以证明 $\gamma_n(t)$ 是纯虚数。由于 $\langle n|n\rangle = 1$ ，方程两边同时对 t 求导，得

$$\left\langle \frac{dn}{dt} \middle| n \right\rangle + \left\langle n \middle| \frac{dn}{dt} \right\rangle = 0 \quad (9.9)$$

$$\gamma_n = i \int_0^t \langle n | \nabla_R n \rangle \frac{d\vec{R}}{dt'} dt' = i \int_{R_i}^{R_f} \langle n | \nabla_R n \rangle d\vec{R} \quad (9.10)$$

故 Berry Phase 不依赖时间。

9.3 Berry Vector Potential

$$A_n = i \langle n | \nabla_{\vec{R}} | n \rangle \quad (9.11)$$

Berry 矢势来源于规范变化 (gauge transformation)。

$$|n(R)\rangle \rightarrow e^{i\xi(R)} |n(R)\rangle \quad (9.12)$$

$$A_n(R) \rightarrow A_n(R) - \nabla_R \xi(R) \quad (9.13)$$

$$\gamma_n \rightarrow \gamma_n + \xi[R(0)] - \xi[R(T)] \quad (9.14)$$

量子力学中的规范不变性是指 Schrödinger 方程在规范变化下形式不变, 因此规范变化需要满足

$$e^{i\xi[R(0)]} |n(0)\rangle = e^{i\xi[R(T)]} |n[R(T)]\rangle \quad (9.15)$$

对于环路 C , 应用 Stokes 定理

$$\begin{aligned} \gamma_n &= i \oint_C \langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} | n(\vec{R}) \rangle \cdot d\vec{R} \\ &= -\text{Im} \oint_C \langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} | n(\vec{R}) \rangle \cdot d\vec{R} \\ &= -\text{Im} \iint d\vec{S} \cdot \left[\nabla \times \langle n(\vec{R}) | \nabla_{\vec{R}} | n(\vec{R}) \rangle \right] \\ &= -\text{Im} \iint dS_i \varepsilon_{ijk} \nabla_j \langle n(\vec{R}) | \nabla_k | n(\vec{R}) \rangle \\ &= -\text{Im} \iint d\vec{S} \cdot \left[\langle \nabla n(\vec{R}) | \times | \nabla n(\vec{R}) \rangle \right] \end{aligned} \quad (9.16)$$

$$\begin{aligned} \gamma_n &= \oint \vec{A}_n(\vec{R}) \cdot d\vec{R} \\ &= \iint d\vec{S} \cdot \left[\nabla \times \vec{A}_n(\vec{R}) \right] \\ &= -\text{Im} \iint dS_i \varepsilon_{ijk} \nabla_j \langle n(R) | \nabla_k | n(\vec{R}) \rangle \\ &= -\text{Im} \iint d\vec{S} \cdot \left[\langle \nabla n(\vec{R}) | \times | \nabla n(\vec{R}) \rangle \right] \end{aligned} \quad (9.17)$$

其中, 定义 Berry 曲率 (Berry curvature) 为 $\nabla \times \vec{A}_n(\vec{R})$

$$F_{jk} = \frac{\partial A_k}{\partial R_j} - \frac{\partial A_j}{\partial R_k} = i (\nabla_j \langle n | \nabla_R n \rangle - \nabla_k \langle n | \nabla_R n \rangle) = i (\langle \nabla_j n | \nabla_R n \rangle - \langle \nabla_k n | \nabla_R n \rangle) \quad (9.18)$$

我们可以将 F_{jk} 视为参数空间的磁场

$$A_n = i \langle n | \nabla_R n \rangle \quad (9.19)$$

$$A_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} A_{jk} \quad (9.20)$$

Example: Two-level system

$$H = \vec{d} \cdot \vec{\sigma} \quad (9.21)$$

$$\vec{d} = |d| [\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta] \quad (9.22)$$

$$H = |d| \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (9.23)$$

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad |\tilde{-}\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (9.24)$$

$$B = -\text{Im} \langle \nabla n | \times | \nabla n \rangle \quad (9.25)$$

$$A_\theta = i \langle - | \frac{\partial}{\partial \theta} | - \rangle = 0 \quad (9.26)$$

$$A_\varphi = i \langle - | \frac{\partial}{\partial \varphi} | - \rangle = \left(\sin \frac{\theta}{2} \right)^2 \quad (9.27)$$

$$F_{\theta\varphi} = \frac{\partial A_\varphi}{\partial \theta} - \frac{\partial A_\theta}{\partial \varphi} = \frac{1}{2} \sin \theta \quad (9.28)$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = F_{\theta\varphi} \hat{r} \quad (9.29)$$

$$dS = \int d\theta d\varphi \sin \theta \quad (9.30)$$

$$B = -\text{Im} \langle \nabla - | \times | \nabla - \rangle \quad (9.31)$$

Example 3:

$$H = \vec{d}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma} \quad (9.32)$$

其中 $\vec{k} = (k_1, k_2)$

Solution 3:

$$\begin{aligned} F_{12} &= \partial_1 A_2 - \partial_2 A_1 \\ &= i \partial_1 \langle n | \partial_2 n \rangle - i \partial_2 \langle n | \partial_1 n \rangle \\ &= i (\langle \partial_1 n | \partial_2 n \rangle - \langle \partial_2 n | \partial_1 n \rangle) \\ &= \sum_{m \neq n} i (\langle \partial_1 n | m \rangle \langle m | \partial_2 n \rangle - \langle \partial_2 n | m \rangle \langle m | \partial_1 n \rangle) \end{aligned} \quad (9.33)$$

运用

$$\langle m | \partial_j n \rangle = \frac{\langle m | \partial_j H | n \rangle}{E_n - E_m} \quad (9.34)$$

即有

$$F_{12} = \sum_{m \neq n} i \left[\frac{\langle n | \partial_1 H | m \rangle \langle m | \partial_2 H | n \rangle}{(E_n - E_m)^2} - \frac{\langle n | \partial_2 H | m \rangle \langle m | \partial_1 H | n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \right] \quad (9.35)$$

当在二能级体系运用时, 有 $|n\rangle = |-\rangle, |m\rangle = |+\rangle, (E_n - E_m)^2 = 4d^2$, 故

$$\begin{aligned} F_{12} &= \frac{i}{4d^2} \left(\langle - | \partial_1 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} | + \rangle \langle + | \partial_2 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} | - \rangle - \langle - | \partial_2 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} | + \rangle \langle + | \partial_1 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} | - \rangle \right) \\ &= \frac{i}{4d^2} \left[\langle - | \partial_1 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} (|+\rangle \langle + | + |-\rangle \langle - |) \partial_2 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} | - \rangle - \langle - | \partial_2 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} (|+\rangle \langle + | + |-\rangle \langle - |) \partial_1 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} | - \rangle \right] \\ &= \frac{i}{4d^2} \left[\langle - | \left(\partial_1 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} \right) \left(\partial_2 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} \right) | - \rangle - \langle - | \left(\partial_2 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} \right) \left(\partial_1 \vec{d} \cdot \vec{\sigma} \right) | - \rangle \right] \end{aligned} \quad (9.36)$$

此时，我们运用一个数学结论，这个结论在之后的推导中将经常出现

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \sum \sigma_i \sigma_j A_i B_j = \sum A_i B_j (\delta_{ij} + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i \vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) \quad (9.37)$$

有

$$\begin{aligned} F_{12} &= \frac{i}{4d^2} \langle - | 2i \vec{\sigma} \cdot (\partial_1 \vec{d} \times \partial_2 \vec{d}) | - \rangle \\ &= -\frac{1}{2d^2} \langle - | \vec{\sigma} \cdot (\partial_1 \vec{d} \times \partial_2 \vec{d}) | - \rangle \\ &= -\frac{1}{2d^2} \text{tr} \left[\vec{\sigma} \cdot (\partial_1 \vec{d} \times \partial_2 \vec{d}) | - \rangle \langle - | \right] \end{aligned} \quad (9.38)$$

此时，我们再考虑 $H = \vec{d} \cdot \vec{\sigma}$ 的两个本征态：

- $|+\rangle$ 态对应于 Bloch 矢量 $\frac{|\vec{d}|}{d}$
- $|-\rangle$ 态对应于 Bloch 矢量 $-\frac{|\vec{d}|}{d}$

$$H \rho_+ = (\vec{d} \cdot \vec{\sigma}) \rho_+ \quad (9.39)$$

$$\begin{aligned} F_{12} &= -\frac{1}{2d^2} \text{tr} \left[\vec{\sigma} \cdot (\partial_1 \vec{d} \times \partial_2 \vec{d}) \rho_- \right] \\ &= -\frac{1}{2d^2} \text{tr} \left[\vec{\sigma} \cdot (\partial_1 \vec{d} \times \partial_2 \vec{d}) \frac{1}{2} (\mathbf{I} - \vec{m} \cdot \vec{\sigma}) \right] \\ &= -\frac{1}{4d^2} \text{tr} \left[\vec{\sigma} \cdot (\partial_1 \vec{d} \times \partial_2 \vec{d}) (\mathbf{I} - \vec{m} \cdot \vec{\sigma}) \right] \\ &= \frac{1}{4d^3} \text{tr} \left[\vec{d} \cdot (\partial_1 \vec{d} \times \partial_2 \vec{d}) \right] \\ &= \frac{1}{2d^3} \vec{d} \cdot (\partial_1 \vec{d} \times \partial_2 \vec{d}) \end{aligned} \quad (9.40)$$

$$\vec{m} = \frac{\vec{d}}{|\vec{d}|} \quad (9.41)$$

$$F_{ij} = \frac{1}{2} \vec{m} \cdot \left(\frac{\partial \vec{m}}{\partial k_1} \times \frac{\partial \vec{m}}{\partial k_2} \right) \quad (9.42)$$

映射度

$$\frac{1}{4\pi} \int J dk_1 dk_2 = N \quad (9.43)$$

9.4 拓扑相变：临界点附近的 Dirac Fermion

9.4.1 Motivation

在前面的分析中，我们详尽地论述了一个二能级模型

$$H(\vec{k}) = \vec{d}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma} \quad \vec{k} = (k_1, k_2) \quad (9.44)$$

的 Berry Curvature 的结构

$$F_{ij} = \frac{1}{2} \varepsilon_{abc} n_a \partial_i n_b \partial_j n_c \quad \vec{n} = \frac{\vec{d}}{|\vec{d}|} \quad (9.45)$$

F_{ij} 实际上是映射 $(k_1, k_2) \rightarrow \frac{\vec{d}(k_1, k_2)}{|\vec{d}|}$ 的 Jacobian，而 Chern Number

$$C = \frac{1}{2\pi} \int dk_1 \int dk_2 F_{ij} \quad (9.46)$$

是映射 $T^2 \rightarrow S^2$ 的映射度。这个拓扑不变量是被能隙保护的，只要在变化中保持 $|\vec{d}(\vec{k})| \neq 0$ ，那么 C 就是不变的。

下面我们要考虑的问题是，如果体系发生了拓扑相变，使得 C 发生了跃变，那么在这个相变的附近究竟发生了什么？

我们将会看到，这个问题和我们在电磁学中有过的一个有趣的想法等价：如果一个静电荷“骑”在了高斯面上，我们如何计算相应的电通量？

9.4.2 k_0 附近能隙的 close-reopen 过程

我们考虑在 k_0 点， $H(k_0)$ 的两个能级十分接近。我们既然要考虑拓扑相变，就要考虑在 k_0 附近能隙的关闭——重新打开这一过程。

我们在 k_0 附近对 $H(k)$ 做小量展开到一阶，并设所得为

$$H(\vec{k}) = k_a D_{ab} \sigma_b + M \sigma_z \quad a, b = 1, 2 \quad (9.47)$$

其中 $|M|$ 表示 Dirac 能隙在 k_0 处的值——我们假设 k_0 附近 $H(k)$ 的能隙取到了极小。

而矩阵 D_{ab} 表示的是 $H(\vec{k})$ 对于 (k_1, k_2) 变化的响应。这样一个形式的 $H(k)$ 总是可以取得的：首先计算 $\partial_1 \vec{d}$ 和 $\partial_2 \vec{d}$ ，即

$$d_1 = k_1 D_{11} + k_2 D_{12} \quad d_2 = k_1 D_{21} + k_2 D_{22} \quad d_3 = M \quad (9.48)$$

$$\partial_1 \vec{d} = (D_{11}, D_{21}, 0) \quad \partial_2 \vec{d} = (D_{12}, D_{22}, 0) \quad (9.49)$$

令 $(\partial_1 \vec{d} \times \partial_2 \vec{d})$ 的方向为新的 z 方向，这样可以保证 k_1, k_2 的变化不会影响到 σ_z ，则

$$F_{12} = \frac{1}{2d^3} \vec{d} \cdot (\partial_1 \vec{d} \times \partial_2 \vec{d}) = \frac{1}{2d^3} d_3 (D_{11} D_{22} - D_{12} D_{21}) = \frac{1}{2d^3} M \det(D) \quad (9.50)$$

其中

$$d^2 = d_1^2 + d_2^2 + d_3^2 = k_m D_{mj} k_n D_{ni} + M^2 \quad (9.51)$$

Homework: 证明积分

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 F_{12} = \frac{1}{2} \text{sign}(M) \text{sign}[\det(D)] \quad (9.52)$$

这个积分的要义在于，此积分中出现了一个特征尺度 $|M|$ ，即能隙的大小，如果这个能隙很小，那么这个积分就是由 k_0 附近的 F_{12} 给出主要贡献的，因此积分的区域可以自然地推广到 $[-\infty, +\infty] \times [-\infty, +\infty]$ ，因为后面纳入的那些面积对积分的贡献很小。

一个典型的例子是

$$H(k) = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + k_z \sigma_z \quad (9.53)$$

则

$$F_{12} = \frac{1}{2d^3} M \det(D) = \frac{1}{2} \frac{M}{(k^2 + M^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (9.54)$$

$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_1 \int_{-\infty}^{\infty} dk_2 F_{12} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \frac{M}{(k^2 + M^2)^{\frac{3}{2}}} 2\pi k dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{2} M \cdot \frac{1}{|M|^3} (\tan \theta + 1)^{-\frac{3}{2}} \cdot 2\pi |M|^2 \tan \theta \frac{1}{\cos^2 \theta} d\theta \quad (k = |M| \tan \theta) \\ &= \frac{1}{2} \text{sign}(M) \end{aligned} \quad (9.55)$$

这个等式的几何意义是：一个无限大平面向 S^2 做 radical map 的映射度。

- 当 $M > 0$ 时，radical map 正向地覆盖了上半球面，因此有 $\frac{1}{2}$ 的因子出现。

- 当 $M < 0$ 时, radical map 负向地覆盖了下半球面, 这里的负向体现在下半球面的法向是朝下的, 与平面的正方向 $\hat{e}_x \times \hat{e}_y = \hat{e}_z$ 是相反的。

前面我们说过, 映射度是一个整数, 这是对于从闭合流形到闭合流形而言的。此处出现的无限大平面并不闭合, 因此出现 $\frac{1}{2}$ 的映射度时不矛盾的。

- 当 $M = 0$ 时, $H(k) = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y$ 被称为 Dirac Fermion, 这一称谓是从 Dirac 相对论方程中借用过来的, 此时在 $k = 0$ 附近的能谱是无能隙的, 呈锥形, 被称为 Dirac cone。而加入 $M \sigma_z$ 来打开能隙常被称为加入质量项, 这一说法也是从相对论 Dirac 方程中借用过来的。

9.4.3

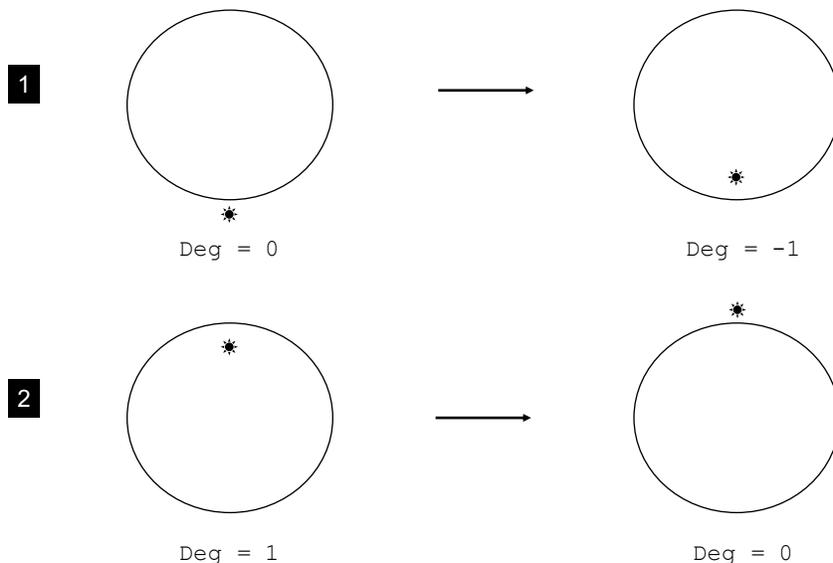
我们下面继续考虑

$$H(k) = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + M \sigma_z \quad (9.56)$$

在 $M = 0$ 附近的拓扑相变。

设初始时 $M > 0$, 当 M 减小到 0 时, $H(k)$ 的能隙关闭, 继续减小 M , 能隙再次打开, 此时我们就有了 Chern number 的变化

$$\Delta C = \frac{1}{2} \text{sign}(M_f) - \frac{1}{2} \text{sign}(M_i) = -1 \quad (9.57)$$



在计算 1 的情况时, 要考虑到闭合曲面的法向是向内的, 故要多一个 (-1) 因子。

9.4.4 Bernevig-Hughes-Zhang 模型分析

以下我们试运用前述对 Dirac Fermion 和拓扑相变的分析, 来处理一个简单模型——BHZ 模型, 这个模型是拓扑能带理论中一个常见的模型。

从 $H(k) = k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + M \sigma_z$ 出发, 为了使 $\vec{k}(d)$ 形成闭合曲面, 同时又在局部保持 Dirac Fermion 的性质, 我们做如下推广和代换

$$k_x \rightarrow \sin k_x \quad k_y \rightarrow \sin k_y \quad (9.58)$$

$$M \rightarrow 2 + M - \cos k_x - \cos k_y \quad (9.59)$$

显然, 在 $k_x = k_y = 0$ 处, 代换前后是等价的, 而引入正余弦函数的目的是使 $d(\vec{k}) : T^2 \rightarrow R^3$ 映成一个闭合曲面。

于是我们得到了 BHZ 模型的 Hamiltonian

$$H = \sin k_x \sigma_x + \sin k_y \sigma_y + (2 + M - \cos k_x - \cos k_y) \sigma_z \quad (9.60)$$

这个 Hamiltonian 是有 Gap 的，只有在 M 取特定值时，在 k 空间的某些点会变成 Gapless，这些点是

- $M = 0$, $(k_x, k_y) = (0, 0)$
- $M = -2$, $(k_x, k_y) = (\pi, 0), (0, \pi)$
- $M = -4$, $(k_x, k_y) = (\pi, \pi)$

以下，我们探讨由参数 M 的变化所导致的 low band 的拓扑相变。我们已经知道，只要 M 的变化不导致能隙的关闭，那么，low band 的 Chern number 就是保持不变的，而如果 M 的变化导致了 Gap 的关闭和重新打开，我们只需要关注那些 Gap close point 附近，在 close-reopen 过程中的 Dirac Fermion 的行为，就可以判定相变前后 Chern number 的变化。

因此我们将 M 的区域分为

- $M > 0$ 和 $M < -4$ ，在这一区域中， $d_3(k)$ 恒大于零或小于零，这即意味着 $\vec{d}(\vec{k})$ 作为一个闭合曲面永在原点之上（或之下），相应地

$$C = \text{deg}(\text{radical map}) = 0 \quad (9.61)$$

- $-2 < M < 0$

$$\Delta C = \frac{1}{2} \text{sign}[\det(D_f)] \text{sign}(M_f) - \frac{1}{2} \text{sign}[\det(D_i)] \text{sign}(M_i) = -1 \quad (9.62)$$

由于已知 $M > 0$ 时， $C_i = 0$ ，于是我们得到这一区域中 lower-band 的 Chern number 为 $C = -1$ 。

- $-4 < M < -2$

分别在 $(\pi, 0)$ 和 $(0, \pi)$ 处展开 $H(k)$ ，有

$$H_1(k) = -k_x \sigma_x + k_y \sigma_y + (2 + M) \sigma_z \quad (9.63)$$

$$H_2(k) = k_x \sigma_x - k_y \sigma_y + (2 + M) \sigma_z \quad (9.64)$$

这两处的分析，都给出了

$$\Delta C = \frac{1}{2} \text{sign}[\det(D_f)] \text{sign}(2 + M)_f - \frac{1}{2} \text{sign}[\det(D_i)] \text{sign}(2 + M)_i = 1 \quad (9.65)$$

即这两个 Dirac Point 每个对相变都贡献一个 (+1) 的 Chern number，故有

$$C = -1 + 2 = 1 \quad (9.66)$$

- $M < -4$

在 $M = -4$ 处，gapless 发生在 (π, π) ，此时的展开即是

$$H = -k_x \sigma_x - k_y \sigma_y + (4 + M) \sigma_z \quad (9.67)$$

$$\Delta C = \frac{1}{2} \text{sign}[\det(D)] [\text{sign}(4 + M)_f - \text{sign}(4 + M)_i] = -1 \quad (9.68)$$

从而有

$$C = 1 + (-1) = 0 \quad (9.69)$$

9.4.5 BHZ 模型中的 Gauge choice 问题

BHZ 模型可以作为我们理解 Gauge choice 这一概念的很好的示范。

我们将证明, 在 $C = 0$ 的区域, 即 $M > 0$ 和 $M < -4$, 我们可以对所有的 (k_x, k_y) 指定 lower band state $|-\rangle$, 且这个指定是单值连续的, 反之, 对于 $-4 < M < 0$, 这种 smooth gauge choice 是不可能的。

为此, 令

$$(d_1, d_2, d_3) = d(\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) \quad (9.70)$$

于是

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2(1 - \cos \theta)}} \begin{pmatrix} 1 - \cos \theta \\ -\sin \theta e^{i\varphi} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2d(d - d_3)}} \begin{pmatrix} d - d_3 \\ -d_1 - id_2 \end{pmatrix} \quad (9.71)$$

而根据 BHZ 模型的写法,

$$d_1 = \sin k_x \quad d_2 = \sin k_y \quad d_3 = 2 + M - \cos k_x - \cos k_y \quad (9.72)$$

$|-\rangle$ 态的奇异点出现在 $\theta = 0$ 处,

$$|-\rangle = \begin{pmatrix} \frac{\theta}{2} \\ -e^{i\varphi} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (9.73)$$

在 $-2 < M < 0$ 时, 我们有

- 在 $k_x = 0, k_y = 0$ 处, $d_1 = 0, d_2 = 0, d_3 = M < 0$
- 在 $k_x = 0, k_y = \pi$ 处, $d_1 = 0, d_2 = 0, d_3 = 2 + M > 0$
- 在 $k_x = \pi, k_y = 0$ 处, $d_1 = 0, d_2 = 0, d_3 = 2 + M > 0$
- 在 $k_x = \pi, k_y = \pi$ 处, $d_1 = 0, d_2 = 0, d_3 = 4 + M > 0$

Homework:

$$H(\vec{k}) = \sin 2k_x \sigma_x + \sin 2k_y \sigma_y + (M - \cos k_x - \cos k_y) \sigma_z \quad (9.74)$$

9.5 Aharonov-Bohm Effect

9.5.1 Motivation

在电磁学中, 我们知道矢势 (φ, \vec{A}) 是非物理的, 这是因为存在规范选择的自由度。而电场 \vec{E} 和磁场 \vec{B} 才是物理的, 施加于粒子的, 影响其运动的物理量。

这一论述的正确性, 在经典物理的范畴下是无疑义的。然而, 在量子力学的框架下, 我们必须更加仔细地考量这一论述。对这一观念的切入点, 来自与对带电粒子在电磁场中的 Hamiltonian 的观察

$$H = \frac{(p - qA)^2}{2m} + q\varphi \quad (9.75)$$

在这一 Hamiltonian 中, 出现的并非 \vec{E}, \vec{B} 等物理场, 而是 (φ, \vec{A}) 这一矢势。这暗示我们, 如果我们求解 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[\frac{(p - qA)^2}{2m} + q\varphi \right] \psi \quad (9.76)$$

其解将以十分微妙的形式依赖于 (φ, \vec{A}) 。这一猜测的验证即是 Aharonov-Bohm 效应。在这一节中, 我们将运用 Berry Phase 作为工具, 将 AB 效应作为 Berry Phase 中的一个例子来进行求解。

9.5.2 Particle Moving Around a Flux Tube

一个截面积为 S ，内部磁场为 \vec{B} 的无限长螺线管，载有磁通 $\Phi = \vec{B} \cdot \vec{S}$ 。而依照电磁学所述，螺线管外的磁场为 0。

但是，螺线管外的矢势 \vec{A} 不可能为 0。这是因为依照 Stokes 定理，我们有

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{r} = \iint \vec{B} \cdot d\vec{S} = \Phi \quad (9.77)$$

在约束螺线管外 $\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = 0$ 下， \vec{A} 的一个保持旋转对称性的取法是

- 柱坐标下

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{\varphi} \quad (9.78)$$

- 直角坐标下

$$\vec{A} = \left(\frac{-y}{x^2 + y^2} \hat{x} + \frac{x}{x^2 + y^2} \hat{y} \right) \frac{\Phi}{2\pi} \quad (9.79)$$

特别的，若令 $\tan \theta = \frac{y}{x}$ ，则

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi} \nabla \arctan \frac{y}{x} = \frac{\Phi}{2\pi} \nabla \theta \quad (9.80)$$

由此可见，对于局部而言，我们一定可以找到一个函数 $f = \frac{\Phi}{2\pi} \theta$ ，使 $\vec{A} = \nabla f$ ，满足 $\nabla \times \vec{A} = 0$ 。

在这一例子中，起关键作用的是空间的拓扑结构，即

- \mathbf{R}^2 是单连通的，其基本群为 $\Pi(\mathbf{R}^2) = \mathbf{I}$
- \mathbf{R}^2

更确切地说， \mathbf{R}^2 中的所有闭合回路都是同伦等价的，都可以连续形变收缩成为一点。

9.5.3 Berry Phase Technique

考虑一个电子，电量为 $-e$ ，在螺线管外运动。此时我们设想，出了矢势 \vec{A} 外，还有一个盒子约束势 (confining potential)，将电子约束在一个小盒子内部。

首先考虑不加磁通，即 $A = 0$ 时，电子的 Hamiltonian 具有形式

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r - x_0) \quad (9.81)$$

其本征函数

$$\psi_{x_0}(r) = \psi(r - x_0) = \langle r | \psi_{x_0} \rangle \quad (9.82)$$

其中 x_0 表示 confining box 中心的位置。

现在，我们在盒子中加入 Magnetic Gauge field，从而 Hamiltonian 产生如下变化

$$H[p, r - x_0] \rightarrow H[p + eA(r), r - x_0] \quad (9.83)$$

$$H = \frac{(p + eA)^2}{2m} + V(r - x_0) \quad (9.84)$$

于是新的 Hamiltonian 的本征函数是

$$\varphi_{x_0}(r) = \exp \left[\frac{-ie}{\hbar} \int_{x_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') d\vec{r}' \right] \psi(r - x_0) = \langle r | \varphi_{x_0} \rangle \quad (9.85)$$

Notation: 由于 Confining potential 的引入, 电子的波函数被局域在盒子内部, 在这一空间内部, $B = 0, \nabla \times \vec{A} = 0$, 故在这个盒子内部, A 的线积分是有良好定义的。

作用在 \exp 上的 $-i\hbar\nabla$

注意, 这里出现了两个矢势, 一个是磁场所对应的矢势 \vec{A} , 一个是 Berry vector potential $\vec{\mathcal{A}}$ 。

$$\mathcal{A}_{x_0} = i \langle \varphi_{x_0} | \nabla_{x_0} \varphi_{x_0} \rangle = i \int d^3r \langle \varphi_{x_0} | r \rangle \langle r | \nabla_{x_0} \varphi_{x_0} \rangle \quad (9.86)$$

$\langle \varphi_{x_0} | r \rangle$ 是已知的, 我们只需计算 $\langle r | \nabla_{x_0} \varphi_{x_0} \rangle$

$$\langle r | \nabla_{x_0} \varphi_{x_0} \rangle = \nabla_{x_0} \langle r | \varphi_{x_0} \rangle = \exp \left[\frac{-ie}{\hbar} \int_{x_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') d\vec{r}' \right] \left[\nabla_{x_0} \psi(r - x_0) + \frac{-ie}{\hbar} (-1) A(x_0) \psi(r - x_0) \right] \quad (9.87)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{x_0} &= i \int d^3r \exp \left[\frac{ie}{\hbar} \int_{x_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') d\vec{r}' \right] \psi^*(r - x_0) \exp \left[\frac{-ie}{\hbar} \int_{x_0}^{\vec{r}} \vec{A}(\vec{r}') d\vec{r}' \right] \left[\nabla_{x_0} \psi(r - x_0) + \frac{ie}{\hbar} A(x_0) \psi(r - x_0) \right] \\ &= i \int d^3r \psi^*(r - x_0) \nabla_{x_0} \psi(r - x_0) - \frac{e}{\hbar} A(x_0) \\ &= -i \int d^3r \psi^*(r - x_0) \nabla_r \psi(r - x_0) - \frac{e}{\hbar} A(x_0) \\ &= \langle \psi_{x_0} | p | \psi_{x_0} \rangle - \frac{e}{\hbar} A(x_0) \\ &= \frac{m}{i\hbar} \langle \psi_{x_0} | [r, H] | \psi_{x_0} \rangle - \frac{e}{\hbar} A(x_0) \\ &= \frac{m}{i\hbar} \langle \psi_{x_0} | r | \psi_{x_0} \rangle (E - E) - \frac{e}{\hbar} A(x_0) \\ &= -\frac{e}{\hbar} A(x_0) \end{aligned} \quad (9.88)$$

$$\exp \left(i \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} \right) = \exp \left(\frac{-ie}{\hbar} \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} \right) \quad (9.89)$$

而 $\oint \vec{A} \cdot d\vec{l}$ 是回路中穿过的磁通

$$\oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \iint \vec{B} \cdot d\vec{S} \quad (9.90)$$

$$\varphi_{\text{下}} - \varphi_{\text{上}} = \oint d\vec{l} \cdot \left(\frac{-e}{\hbar} \right) \vec{A} = \frac{-e}{\hbar} \Phi \quad (9.91)$$

9.5.4 Dirac Quantization of Magnetic Monopole

磁单极子的存在, 可以使 Maxwell 方程获得一个更加对称的形式

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho_e}{\varepsilon_0} \quad (9.92)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = \mu_0 \rho_m \quad (9.93)$$

$$\nabla \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\mu_0 \vec{J}_m \quad (9.94)$$

$$\nabla \times \vec{B} - \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = -\mu_0 \vec{J}_e \quad (9.95)$$

电荷守恒与磁荷守恒

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_e = 0 \quad (9.96)$$

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J}_m = 0 \quad (9.97)$$

由此可见，一个位于原点的磁单极子所产生的磁场

$$\vec{B} = \frac{\mu_0 q_m}{4\pi} \frac{\vec{r}}{r^3} \quad (9.98)$$

$$\varphi = \frac{\mu_0 q_m}{4\pi} \cdot \Omega \cdot \frac{q_e}{\hbar} = \frac{\mu_0 q_m}{4\pi} (\Omega - 4\pi) \frac{q_e}{\hbar} \quad (9.99)$$

$$C = \partial S = -\partial(S^2 - S) \quad (9.100)$$

$$\frac{\mu_0 q_m q_e}{\hbar} = 2\pi N \quad (9.101)$$

9.6 绝热近似的正确性分析以及非绝热修正问题

9.6.1 Motivation

在前述的对于 Berry Phase 的论述中，我们运用了绝热近似这一假定，设定了体系的演化应十分缓慢，以致布局数的改变可以被忽略，但是我们并没有讨论何种程度的慢才是符合要求的，以及如何对这一近似进行修正（如有必要）。这一问题在考虑绝热输运的时候尤其重要。

我们现在来讨论在 A-B 效应中出现的一个关于流密度的佯谬。我们知道，对于 Hamiltonian

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (9.102)$$

一个波函数 $\psi(r)$ 所对应的流密度函数是

$$J = \frac{i\hbar}{2m} (\nabla\psi^*\psi - \psi^*\nabla\psi) \quad (9.103)$$

设

$$\psi(r) = \sqrt{\rho(r)} \exp[i\xi(r)] \quad (9.104)$$

$$\rho(r) = \sqrt{\psi^*(r)\psi(r)} \quad (9.105)$$

则流密度

$$J = \frac{i\hbar}{2m} \left[e^{-i\xi} \left(-i\nabla\xi\sqrt{\rho} + \frac{1}{2} \frac{\nabla\rho}{\rho^{1/2}} \right) \sqrt{\rho} e^{i\xi} - \text{H.C.} \right] = \frac{\hbar}{m} \rho(r) \nabla\xi(r) \quad (9.106)$$

而在前面我们已经论述了 $\xi(r)$ 的经典物理对应是作用量，即

$$\xi(r) = \frac{S}{\hbar} \quad (9.107)$$

再应用

$$dS = pdq - Hdt \quad (9.108)$$

即可知

$$J = \frac{\rho}{m} \nabla[\hbar\xi(r)] \sim \frac{1}{m} \rho p = \rho v \quad (9.109)$$

以下我们回到 A-B 效应中的粒子上来，由于这个粒子是束缚在一个势阱 $V(r)$ 中的，有 $\nabla \times A = 0$ ，且 $\exists f$ ，满足 $A = \nabla f$ ，于是，不论盒子中心 x_0 处于何处，我们总是可以选择规范变化，使得这个束缚势中的矢势是完全消失的，从而得到

$$H = \frac{(p - qA)^2}{2m} + V(r) \Rightarrow H = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (9.110)$$

下面是佯谬的关键, 对于 $H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$, 我们可以证明它的束缚基态流密度为 0。

$$J = \frac{i\hbar}{2m} (\nabla\psi^*\psi - \psi^*\nabla\psi) = \frac{\hbar}{m}\rho\nabla\xi(r) = 0 \quad (9.111)$$

但这一结论显然是不正确的, 可以看到, 由于

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot \vec{J} = 0 \quad (9.112)$$

$$\begin{cases} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H[R(t)]|\psi(t)\rangle \\ |\psi(0)\rangle = |n[R(0)]\rangle \end{cases} \quad (9.113)$$

- 绝热近似成立条件的准确表达
- 超越绝热近似的修正应如何做出
- 这些修正能否以及如何弥合上述佯谬

9.6.2 Schrödinger 方程的形式通解

令

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m C_m(t) \exp[-i\theta_m(t)] |m(t)\rangle \quad (9.114)$$

其中 $\theta_m(t)$ 是动力学相因子的贡献

$$\theta_m(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_m[R(t_1)] dt_1 \quad (9.115)$$

代入 Schrödinger 方程即有

$$\sum_m e^{-i\theta_m(t)} \left[\frac{d}{dt} C_m(t) |m(t)\rangle + C_m(t) \frac{d}{dt} |m(t)\rangle \right] = 0 \quad (9.116)$$

将 $\langle l(t)|$ 作用于方程

$$e^{-i\theta_l(t)} \frac{d}{dt} C_l(t) + \sum_m e^{-i\theta_m(t)} C_m(t) \left\langle l(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} m(t) \right. \right\rangle = 0 \quad (9.117)$$

即

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} C_l(t) &= - \sum_m e^{-i[\theta_m(t) - \theta_l(t)]} C_m(t) \left\langle l(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} m(t) \right. \right\rangle \\ &= - C_l(t) \left\langle l(t) \left| \frac{\partial}{\partial t} l(t) \right. \right\rangle - \sum_{m \neq l} e^{-i[\theta_m(t) - \theta_l(t)]} C_m(t) \frac{\langle l(t) | \frac{\partial H}{\partial t} | m(t) \rangle}{E_m - E_l} \end{aligned} \quad (9.118)$$

绝热近似的本质就是略去第二项, 而当绝热近似需要修正时, 我们就要将第二项找回来。从这个角度看, Berry Phase 时一个零阶近似, 即在初态 $C_m(0) = 1$ 时, 有

$$\begin{cases} C_m(t) = C_m^0(t) \exp \left[- \int_0^t \langle m(t_1) | \frac{\partial}{\partial t_1} m(t_1) \rangle dt_1 \right] \\ C_q^0(t) = 0 \end{cases} \quad (9.119)$$

下面我们考虑迭代求解。对于 $q \neq m$, 有

$$\frac{d}{dt} C_q(t) = \quad (9.120)$$

$$C_q(t) \approx -e^{i\gamma_m^G} \frac{\langle q | \frac{\partial H}{\partial t} | m \rangle}{E_m - E_q} \frac{\hbar e^{-i(\theta_m - \theta_q)}}{-i(E_m - E_q)} \quad (9.121)$$

于是有

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\gamma_m^G(t)} e^{-i\theta_m(t)} |m(t)\rangle + \sum_{q \neq m} (-i\hbar) e^{i\gamma_m^G(t)} e^{-i\theta_m(t)} \frac{\langle q | \frac{\partial H}{\partial t} | m \rangle}{(E_m - E_q)^2} |q\rangle \quad (9.122)$$

$$\frac{\langle q | \frac{\partial H}{\partial t} | m \rangle}{(E_m - E_q)^2} = \frac{\langle q(t) | \frac{\partial}{\partial t} m(t) \rangle}{E_m - E_q} \ll 1 \quad (9.123)$$

9.6.3 流密度修正

$$J = -ev = -e \frac{dr}{dt} = -e \frac{1}{i\hbar} [r, H] \quad (9.124)$$

$$\langle J \rangle = -e \langle \psi(t) | \frac{1}{i\hbar} [r, H] | \psi(t) \rangle \quad (9.125)$$

这里

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\gamma_n^G(t)} e^{-i\theta_n(t)} \left[|n(t)\rangle + \sum_{q \neq n} (-i\hbar) \frac{\langle q | \frac{\partial}{\partial t} n \rangle}{E_n - E_q} |q(t)\rangle \right] \quad (9.126)$$

• 零阶项

$$\langle J \rangle^{(0)} = -e \langle n(t) | \frac{1}{i\hbar} [r, H] | n(t) \rangle = 0 \quad (9.127)$$

• 一阶项

$$\begin{aligned} \langle J \rangle^{(1)} &= -e \left[\langle m | \frac{1}{i\hbar} [r, H] (-i\hbar) \frac{\langle q | \frac{\partial}{\partial t} m \rangle}{E_m - E_q} |q(t)\rangle + \text{H.C.} \right] \\ &= -e \left[\langle m | v | q \rangle (-i\hbar) \frac{\langle q | \frac{\partial}{\partial t} m \rangle}{E_m - E_q} + \text{H.C.} \right] \\ &= -e \left[\frac{1}{i\hbar} \langle m | r | q \rangle (E_q - E_m) (-i\hbar) \left\langle q \left| \frac{\partial}{\partial t} m \right. \right\rangle \frac{1}{E_m - E_q} + \text{H.C.} \right] \\ &= -e \left(\langle m | r \left| \frac{\partial}{\partial t} m \right. \right) + \text{H.C.} \end{aligned} \quad (9.128)$$

第十章 Landau 能级的简谐振子解法

10.1 谐振子

- 谐振子是为数不多的存在严格解的模型。
- 在微扰论中，谐振子常被作为背景 H_0 来导入微扰或相互作用。
- 谐振子的解体现了量子力学中的许多基本概念，如零点涨落和 Heisenberg 不确定性原理。
- 谐振子的解法只依赖于对易关系 $[a, a^\dagger] = 1$ 。

考虑 $x - y$ 平面上运动的二维电子，若施予 z 方向的匀强磁场 B ，我们有运动方程

$$m \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} = q \dot{\vec{v}} \times \vec{B} \quad (10.1)$$

其分量为

$$m \ddot{x} = -eB \dot{y} \quad m \ddot{y} = eB \dot{x} \quad (10.2)$$

定义回转频率 $\omega_B = \frac{eB}{m}$ ，方程的通解是

$$x(t) = x_0 + R \cos(\omega_B t + \varphi) \quad (10.3)$$

$$y(t) = y_0 + R \sin(\omega_B t + \varphi) \quad (10.4)$$

此时，体系的 Hamiltonian 具有形式

$$H = \frac{1}{2m} (p + eA)^2 = \frac{1}{2} m \dot{r}^2 \quad (10.5)$$

在以下的论述中，我们忽略电子的自旋自由度

$$\{p_i + eA_i, p_j + eA_j\} = e\{p_i, A_j\} + e\{A_i, p_j\} = e \frac{\partial A_i}{\partial x^j} - e \frac{\partial A_j}{\partial x^i} = -e \varepsilon_{ijk} B_k \quad (10.6)$$

10.2 Quantum Treatment

以下我们的目标是求解以下 Hamiltonian 的能与本征波函数

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 \quad (10.7)$$

其中 $\nabla \times \vec{A} = \vec{B}$ 对应匀强磁场，此处我们已经过渡到量子力学的领域，而过渡的办法是将 \vec{p} 和 \vec{x} 提升为算子，从而有

$$[x^i, p_j] = i\hbar \delta_j^i \quad [x^i, x^j] = [p_i, p_j] = 0 \quad (10.8)$$

机械动量 $\Pi = p + eA$

定义产生和湮灭算子

$$a = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}}(\Pi_x - i\Pi_y) \quad (10.9)$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}}(\Pi_x + i\Pi_y) \quad (10.10)$$

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} (\Pi_x^2 + \Pi_y^2) = \frac{1}{2m} [(\Pi_x + i\Pi_y)(\Pi_x - i\Pi_y) + i[\Pi_x, \Pi_y]] \\ &= \frac{1}{2m} [(2e\hbar B)a^\dagger a + i(-ie\hbar B)] = \hbar\omega_B \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (10.11)$$

10.3 Landau 规范下的波函数

为了写出 H 的本征波函数，我们必须确定一个规范选择，因为波函数的具体形式与规范有关。满足 $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ 的矢势 A 不止一种，在此处对 A 的选择考虑了实际问题 and 对称性两方面的因素。常见的两种选择是：

- Landau Gauge: $A = [0, Bx, 0]$ 或 $[-By, 0, 0]$

此时，虽然 B 在全空间平移不变，但 A 不是全空间平移不变的—— A 打破了一个方向上的平移对称，而保留了另一个方向的平移对称。

- Symmetric Gauge: $A = \frac{B}{2}[-y, x, 0]$

这个选择保持了绕原点的旋转对称，从而使得 $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ 成为守恒量。

以下，我们首先使用 $\vec{A} = [0, Bx, 0]$ ， \vec{A} 在 y 方向是平移不变的。因此，我们的任务是寻求

$$H = \frac{1}{2m} [p_x^2 + (p_y + eBx)^2] \quad (10.12)$$

和 p_y 的共同本征态。

我们假定

$$\psi_k(x, y) = e^{iky} f_k(x) \quad (10.13)$$

$$H\psi_k(x, y) = \frac{1}{2m} [p_x^2 + (p_y + eBx)^2] \psi_k(x, y) = H_k \psi_k(x, y) \quad (10.14)$$

这个方程的形式是我们非常熟悉的，它描述了一个沿 x 轴放置的谐振子。特别地，

$$H_k = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} m\omega_B^2 (x + kl_B^2) \quad (10.15)$$

其中 $\omega_B = \frac{eB}{m}$ ， $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$

$$\psi_{n,k}(x, y) \sim e^{iky} H_n(x + kl_B^2) \exp\left[-\frac{(x + kl_B^2)^2}{2l_B^2}\right] \quad (10.16)$$

10.4 对称规范

以下我们选择对称规范

$$\vec{A} = \frac{B}{2}[-y, x, 0] \quad (10.17)$$

\vec{A} 同时打破了平移 x 和平移 y 的对称性，但 A 在绕 z 轴的旋转下保持不变。因此，在选择 \vec{A} 时，我们应同时选择 L_z 作为好量子数——这一规范在处理分数量子霍尔效应是时比较常见。

仍从 Hamiltonian 出发, 令 $\Pi = \vec{p} + e\vec{A}$

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 = \hbar\omega_B \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (10.18)$$

其中

$$a = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} (\Pi_x - i\Pi_y) \quad (10.19)$$

我们再引入一组新的算子

$$\tilde{\Pi} = \vec{p} - e\vec{A} \quad (10.20)$$

$\tilde{\Pi}$ 并不是规范不变的, 它的引入是为了方便下面的计算与解释。 $\tilde{\Pi}$ 所遵循的对易关系是

$$[\tilde{\Pi}_x, \tilde{\Pi}_y] = ie\hbar B \quad (10.21)$$

与 Π 类似, 但是 $\tilde{\Pi}$ 的规范依赖体现在 Π 和 $\tilde{\Pi}$ 的对易上

$$[\Pi_x, \tilde{\Pi}_x] = [p_x, -eA_x] + [eA_x, p_x] = 2ie\hbar \frac{\partial A_x}{\partial x} \quad (10.22)$$

$$[\Pi_y, \tilde{\Pi}_y] = [p_y, -eA_y] + [eA_y, p_y] = 2ie\hbar \frac{\partial A_y}{\partial y} \quad (10.23)$$

$$[\Pi_x, \tilde{\Pi}_y] = [\Pi_y, \tilde{\Pi}_x] = ie\hbar \left(\frac{\partial A_y}{\partial x} + \frac{\partial A_x}{\partial y} \right) \quad (10.24)$$

这意味着 $\tilde{\Pi}$ 和 $H = \frac{1}{2m}\Pi^2$ 不能同时对角化。然而对称规范给出了一个例外, 在 $\vec{A} = \frac{B}{2}[-y, x, 0]$ 这一选择下, 有

$$[\Pi_i, \tilde{\Pi}_j] = 0 \quad (10.25)$$

基于 $[\tilde{\Pi}_x, \tilde{\Pi}_y] = i\hbar eB$, 我们可以定义出一组新的产生和湮灭算子

$$b = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} (\tilde{\Pi}_x + i\tilde{\Pi}_y) \quad b^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} (\tilde{\Pi}_x - i\tilde{\Pi}_y) \quad (10.26)$$

满足

$$[b, b^\dagger] = 1 \quad (10.27)$$

我们可以从此出发来研究 Landau 能级的简并特性。

定义基态为 $ket0, 0$, 满足 $a|0, 0\rangle = b|0, 0\rangle = 0$ 。Hilbert 空间中的态矢量可以写成一个双模 Fock 态的形式

$$|n, m\rangle = \frac{(a^\dagger)^n (b^\dagger)^m}{\sqrt{n!m!}} |0, 0\rangle \quad (10.28)$$

其中, $|n, m\rangle$ 所对应的本征能量为 $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega_B$, 它只依赖于 n , 量子数 m 就自然地表示了 E_n 所对应的简并。

接下来我们构造对称规范下的波函数, 这里我们主要关注最低 Landau 能级 (Lowest Landau Level, LLL) $n = 0$, 因为这个能级在讨论分数量子霍尔效应 (FQGE) 中是最重要的。

$|0, m\rangle$ 所遵循的是 $a|0, m\rangle = 0$, 我们把这个方程变为微分方程

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} (\Pi_x - i\Pi_y) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} [p_x - ip_y + e(A_x - iA_y)] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2e\hbar B}} \left[-i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y} \right) + \frac{eB}{2}(-y - ix) \right] \end{aligned} \quad (10.29)$$

为了方便计算，我们引入复数坐标

$$z = x - iy \quad \tilde{z} = x + iy \quad (10.30)$$

于是

$$x = \frac{1}{2}(\tilde{z} + z) \quad y = \frac{1}{2i}(\tilde{z} - z) \quad (10.31)$$

同时，我们引入微分算子

$$\partial = \frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (10.32)$$

$$\tilde{\partial} = \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (10.33)$$

它们遵循

$$\partial z = \tilde{\partial} \tilde{z} = 1 \quad \partial \tilde{z} \pm \tilde{\partial} z = 0 \quad (10.34)$$

利用这套新的变量，我们可以得到¹

$$a = -i\sqrt{2} \left(l_B \tilde{\partial} + \frac{z}{4l_B} \right) \quad (10.35)$$

$$a^\dagger = -i\sqrt{2} \left(l_B \partial - \frac{\tilde{z}}{4l_B} \right) \quad (10.36)$$

其中

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \quad (10.37)$$

LLL 的波函数，即 a 作用为 0 的函数，它们所具有的形式是

$$\psi_{LLL}(z, \tilde{z}) = f(z) \exp\left(-\frac{z\tilde{z}}{4l_B^2}\right) \quad (10.38)$$

对于任意全纯函数 $f(z)$ ，为了写出 LLL 上的态 $|0, m\rangle$ 的波函数，我们将 b 也转换到 z, \tilde{z} 表象，写成

$$b = -i\sqrt{2} \left(l_B \partial + \frac{\tilde{z}}{4l_B} \right) \quad b^\dagger = -i\sqrt{2} \left(l_B \tilde{\partial} - \frac{z}{4l_B} \right) \quad (10.39)$$

基态 $|0, 0\rangle$ 同时被 a, b 湮灭，其波函数是唯一的

$$\psi_{LLL, m=0} \sim \exp\left(-\frac{|z|^2}{4l_B^2}\right) \quad (10.40)$$

而更高阶的 $|0, m\rangle$ 可以通过 b^\dagger 的作用来实现

$$\psi_{LLL, m} \sim \left(\frac{z}{l_B}\right)^m \exp\left(-\frac{|z|^2}{4l_B^2}\right) \quad (10.41)$$

这一组基 $|0, m\rangle$ 有一个显著的优势：它们是角动量算子 $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ 的本征函数

$$L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \quad (10.42)$$

对于一个圆形的样品 $A = \pi R^2$ ，可以容纳的态最多是

$$\sqrt{2N} l_B = R \quad (10.43)$$

$$N = \frac{R^2}{2l_B^2} = \frac{A/\pi}{2\frac{\hbar}{eB}} = \frac{eAB}{2\pi\hbar} = \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (10.44)$$

10.5 加入电场时的电子漂移

¹这里的取厄米共轭的技巧是 $i \rightarrow -i, z \rightarrow \tilde{z}, \partial \rightarrow -\tilde{\partial}$ 。

第十一章 散射理论

11.1 散射的基本概念

11.1.1 碰撞和散射

11.1.2 散射问题的若干假设

- (1) 设入射粒子和靶粒子都没有自旋，这意味着我们不用考虑全同粒子的交换对称之类的问题。
- (2) 不考虑非弹性的散射。
- (3) 假设靶粒子足够稀薄，以至于可以忽略多重散射。
- (4) 忽略靶中各粒子产生的散射波的相干性。
- (5) 假设入射粒子和靶粒子的相互作用只依赖于它们的相对位置。

11.1.3 散射截面的概念

我们首先回到经典物理的卢瑟福散射实验中，回忆散射截面这一概念。

设粒子从无穷远处以动量 p 飞入势场，由于 target 的存在，粒子飞出势场时，会有一个方向的偏转。

显然，偏转角度 $\delta\theta$ 取决于瞄准距离 b 。由此，偏转角在 $[\theta, \theta + d\theta]$ 方向的粒子，一定是瞄准距离在 $[b, b + db]$ 的同心圆环上的粒子散射而来的。

定义散射截面如下：质量为 μ 的粒子沿 z 轴正向入射， $V(r)$ 定域在原点 O 附近。入射粒子的通量为 F_i

$$F_i = \frac{dN}{dt dS} = v \frac{dN}{dV} = \rho v \quad (11.1)$$

设 F_i 充分小，因而可以忽略入射粒子之间的相互作用。

在方位角 (θ, φ) 的方向上，远离势场处，放置一个张角为 $d\Omega$ 的探测器。如此，即可测量单位时间被散射到 (θ, φ) 方向周围立体角 $d\Omega$ 中去的粒子数 dn 。

显然， $dn \propto d\Omega$ ， $dn \propto F_i$ ，定义微分散射截面

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{dn}{F_i d\Omega} \quad (11.2)$$

注意，这里 $[dn] = T^{-1}$ ， $[F_i] = L^{-2}T^{-1}$ ，故 $\sigma(\theta, \varphi)$ 具有面积的量纲，于是得名“散射截面”。

11.1.4 球对称势下的经典散射算例

$$dS = b d\phi db \quad (11.3)$$

dS 中的粒子被散射到立体角 $d\Omega$ 中

$$d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi \quad (11.4)$$

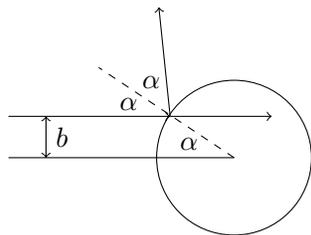
由于势场是球对称势, 故 $d\Omega$ 不依赖于 ϕ , 于是

$$dn = F_i dS = F_i b \cdot d\phi \cdot db \quad (11.5)$$

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{dn}{F_i d\Omega} = \frac{F_i b \cdot d\phi \cdot db}{F_i \sin\theta \cdot d\theta \cdot d\phi} = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| \quad (11.6)$$

Example: 考虑一个硬核球的弹性散射

$$V = \begin{cases} 0 & r > R \\ \infty & r \leq R \end{cases} \quad (11.7)$$



$$b = R \sin\alpha \quad \theta = \pi - 2\alpha \quad (11.8)$$

$$b = R \sin\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) = R \cos\frac{\theta}{2} \quad (11.9)$$

$$\sigma(\theta, \varphi) = \frac{b}{\sin\theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{R \cos\frac{\theta}{2}}{\sin\theta} \quad (11.10)$$

$$\sigma_{\text{tot}} = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \sigma(\theta, \phi) = \pi R^2 \quad (11.11)$$

11.2 散射定态与有效截面

11.2.1 方法

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (11.12)$$

11.2.2 散射定态的定义

Hamiltonian 的本征方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \varphi(r) = E\varphi(r) \quad (11.13)$$

这里设 $V(r)$ 在无穷远处比 $\frac{1}{r}$ 衰减更快。这个设定排除了库仑势, 因此需要用特殊的办法处理。一个典型的手段就是考虑 Yukawa 势

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{r} \quad \alpha > 0 \quad (11.14)$$

讨论 $E > 0$ 的非束缚态

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} \quad (11.15)$$

是入射粒子在无穷远处的动能，它最终仍会以这个动能离开 $V(r)$ 的区域。此外，我们引入

$$U(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \quad (11.16)$$

从而写定态方程为

$$[\nabla^2 + k^2 - U(r)] \varphi(r) = 0 \quad (11.17)$$

符合要求的本征态，被称为是散射的定态，波函数记为 $v_k^{\text{diff}}(r)$

定态的渐进形式

$t \rightarrow -\infty$ 时, $z \rightarrow -\infty$, 粒子是自由的, 故其状态可用一个平面波来表示, 由此可知, v_k^{diff} 中一定要有一项 e^{ikz} , 以表示入射波。

当粒子进入势场后, 在 $V(r)$ 的作用下, 波包的形态发生剧烈变化, 而当 $t \rightarrow \infty$ 后, 粒子脱离势场重变自由, 故其形式也再次变得简单: 它将由透射波包 e^{ikz} 和散射波包组成。

由此可见, 我们待求的 v_k^{diff} , 应来自于一个平面波 e^{ikz} 和一个散射波的叠加。散射波的结构依赖于 $V(r)$, 且十分复杂, 但它在 $r \rightarrow \infty$, 即 $t \rightarrow \infty$ 的渐进形式却十分简单, 我们通过简单分析即可得出它的特性。

- 沿着一个确定的 (θ, ϕ) 方向, 由于散射波与入射波能量相同, 故散射波的径向依赖关系应具有形式 e^{ikr}/r

$$\nabla^2 \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{d}{dr} \left(\frac{e^{ikr}}{r} \right) \right] = -k^2 \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11.18)$$

此外, $1/r$ 因子在量子力学中计算概率即成 $1/r^2$, 它保证了在 r 很大时, 穿过立体角的概率流的通量是守恒的而不依赖于 r 。

- 一般而言, 散射不是各向同性的, 故散射波的振幅依赖于方位角 $[\theta, \phi]$, 且依赖关系取决于初始的 k 。

于是, 我们得出 v_k^{diff} 是 $\nabla^2 + k^2 - U(r)\varphi(r) = 0$ 的满足渐近行为

$$v_k^{\text{diff}}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} + f_k(\theta, \phi) \frac{e^{ikr}}{r} \quad (11.19)$$

的解。这里的 $f_k(\theta, \phi)$ 被称为散射振幅, 其依赖于 $V(r)$ 。

验证

11.2.3 利用定态的概率流来计算有效散射截面

散射定态的流密度

$$J(r) = \frac{i\hbar}{2\mu} [\varphi(r)\nabla\varphi^*(r) - \varphi^*(r)\nabla\varphi(r)] = \frac{1}{\mu} \text{Re} \left[\frac{\hbar}{i} \varphi^*(r)\nabla\varphi(r) \right] \quad (11.20)$$

对于入射波 e^{ikz}

$$J_i(r) = J_z = \frac{\hbar k}{\mu} \quad (11.21)$$

对于散射波

$$[J_d]_r = \frac{1}{\mu} \text{Re} \left[f_k^*(\theta, \phi) \frac{e^{-ikr}}{r} \frac{\hbar}{i} f_k(\theta, \phi) \left(-\frac{1}{r^2} + ik\frac{1}{r} \right) e^{ikr} \right] = \frac{\hbar k}{\mu} \frac{1}{r^2} |f_k(\theta, \phi)|^2 \quad (11.22)$$

微分散射截面

$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{dn}{F_i d\Omega} = |f_k(\theta, \phi)|^2 \quad (11.23)$$

平面波与散射波的干涉：光学定理

11.2.4 散射的积分方程：Lippman-Schwinger 方程

$$[\nabla^2 + k^2 - U(r)] \varphi(r) = 0 \quad (11.24)$$

我们定义算子 $\nabla^2 + k^2$ 的逆，即 Green 函数

$$(\nabla^2 + k^2) G(r) = \delta(r) \quad (11.25)$$

方程可做如下形式化处理

$$(\nabla^2 + k^2) |\varphi\rangle = U |\varphi\rangle \quad (11.26)$$

可写出通解

$$|\varphi\rangle = |\varphi_0\rangle + GU |\varphi\rangle \quad (11.27)$$

其中 $|\varphi_0\rangle$ 是满足齐次方程 $(\nabla^2 + k^2) |\varphi\rangle = 0$ 的某一个解。写在坐标表象下，即是满足积分方程

$$\varphi(r) = \varphi_0(r) + \int d^3r' G(r-r') U(r') \varphi(r') \quad (11.28)$$

$$v_k^{\text{diff}}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int d^3r' e^{-ikUr'} U(r') v_k^{\text{diff}}(r') \quad (11.29)$$

$$f_k(\theta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' r^{-ikUr'} U(r') v_k^{\text{diff}}(\vec{r}') \quad (11.30)$$

入射波矢 \vec{k}_i ，散射波矢 \vec{k}_d ，转移波矢

$$\vec{K} = \vec{k}_d - \vec{k}_i \quad (11.31)$$

11.2.5 Born 近似

$$\sigma_k^{(B)}(\theta, \phi) = \frac{\mu^2}{4\pi^2 \hbar^4} \left| \int d^3r \exp(-i\vec{K} \cdot \vec{r}) V(r) \right|^2 \quad (11.32)$$

11.2.6 Yukawa 势的 Born 近似

考虑 Yukawa 势

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-ar}}{r} \quad a > 0 \quad (11.33)$$

设 $|V_0|$ 充分小

$$f_k^B(\theta, \phi) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' \exp(-i\vec{K} \cdot \vec{r}') \frac{2\mu}{\hbar^2} V_0 \frac{e^{-ar'}}{r'} \quad (11.34)$$

$$\sigma_{\text{tot}} = 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin\theta \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4} \frac{1}{(a^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2})^2} = \frac{4\mu^2 V_0^2}{\hbar^4} \frac{4\pi}{a^2(a^2 + 4k^2)} \quad (11.35)$$

11.3 中心势场中的散射：分波法

11.3.1 Partial Wave 的基本原理

11.3.2 自由粒子的定态问题

问题的提出

径向方程

自由球面波的求解

自由球面波的物理性质

归一化常数的推导

11.3.3 势场 $V(r)$ 中的分波

径向方程和相移

相移的物理含义

11.3.4 用相移表示有效截面

用分波构成散射定态

11.3.5 散射共振问题

第十二章 路径积分

12.1 路径积分理论概述

路径积分强调, 粒子在某一时刻 t_b 的运动状态 $\psi(x_b, t_b)$ 完全由过去某一时刻 $t_a < t_b$ 的所有可能的运动状态 $\psi(x_a, t_a)$ 决定, 即

$$\psi(x_b, t_b) = \int dx_a K(x_b, t_b; x_a, t_a) \psi(x_a, t_a) \quad (12.1)$$

这里的 K 是传播子, 其形式为

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \sum_{\text{all path}} \text{const} \cdot \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} S[x(t)] \right\} \quad (12.2)$$

是固定初末时间和初末位置的作用量泛函, 它依赖于路径 $x(t)$ 的具体取法。

12.2 传播函数及其路径积分形式

12.2.1 传播子

$$\psi(x_b, t_b) = \langle x_b | \psi(t_b) \rangle \quad (12.3)$$

12.2.2 无穷维泛函积分

将 $T = t_b - t_a$ 分为无穷小间隔

$$\varepsilon = \frac{t_b - t_a}{N} = t_{j+1} - t_j \quad j = 0, 1, \dots, N-1 \quad (12.4)$$

$$t_0 = t_a \quad t_N = t_b \quad t_j = t_0 + j\varepsilon \quad (12.5)$$

$$\begin{aligned} K(x_b, t_b; x_a, t_a) &= \langle x_b, t_b | x_a, t_a \rangle \\ &= \int dx_1 \cdots \int dx_{N-1} \langle x_b, t_b | x_{N-1}, t_{N-1} \rangle \langle x_{N-1}, t_{N-1} | x_{N-2}, t_{N-2} \rangle \cdots \langle x_1, t_1 | x_0, t_0 \rangle \\ &= \prod_{k=1}^{N-1} \int_{-\infty}^{\infty} dx_k \prod_{j=0}^{N-1} K(x_{j+1}, x_j; \varepsilon) \end{aligned} \quad (12.6)$$

12.2.3 短时传播函数

$$K(x_{j+1}, x_j; \varepsilon) = \langle x_{j+1} | \exp \left(-\frac{iH\varepsilon}{\hbar} \right) | x_j \rangle = \langle x_{j+1} | \exp \left\{ -\frac{i[H_0 + V(x)]\varepsilon}{\hbar} \right\} | x_j \rangle \quad (12.7)$$

$$e^{\varepsilon(A+B)} = e^{\varepsilon A} e^{\varepsilon B} [1 + O(\varepsilon^2)] \quad (12.8)$$

$$\begin{aligned} K(x_{j+1}, x_j; \varepsilon) &= \langle x_{j+1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 \varepsilon\right) \exp\left[-\frac{i}{\hbar} V(x) \varepsilon\right] | x_j \rangle \\ &= \int dp dx \langle x_{j+1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 \varepsilon\right) | p \rangle \langle p | x \rangle \langle x | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} V(x) \varepsilon\right] | x_j \rangle \end{aligned} \quad (12.9)$$

• 第一项

$$\langle x_{j+1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H_0 \varepsilon\right) | p \rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \varepsilon\right) \langle x_{j+1} | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \varepsilon\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} p x_{j+1}\right) \quad (12.10)$$

• 第二项

$$\langle p | x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} p x\right) \quad (12.11)$$

• 第三项

$$\langle x | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} V(x) \varepsilon\right] | x_j \rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} V(x_j) \varepsilon\right] \delta(x - x_j) \quad (12.12)$$

$$\begin{aligned} K(x_{j+1}, x_j; \varepsilon) &= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} p_j (x_{j+1} - x_j) - \frac{i}{\hbar} \left[\frac{p_j^2}{2m} + V(x_j)\right] \varepsilon\right\} [1 + O(\varepsilon^2)] \\ &= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} p_j (x_{j+1} - x_j) - \frac{i}{\hbar} H(p_j, x_j) \varepsilon\right\} [1 + O(\varepsilon^2)] \end{aligned} \quad (12.13)$$

12.2.4 路径积分的相空间表示

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \int \prod_{j=1}^{N-1} dx_j \prod_{j=0}^{N-1} \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} [p_j (x_{j+1} - x_j) - \varepsilon H(p_j, x_j)]\right\} [1 + O(\varepsilon^2)]^N \quad (12.14)$$

$$S[p, x]_{t_a}^{t_b} = \int_{t_a}^{t_b} dt [p\dot{x} - H(p, x)] \quad (12.15)$$

12.2.5 路径积分的位形空间表示 (路径积分的 Lagrange 形式)

$$\begin{aligned} K(x_{j+1}, x_j; \varepsilon) &= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} p_j (x_{j+1} - x_j) - \frac{i}{\hbar} \left[\frac{p_j^2}{2m} + V(x_j)\right] \varepsilon\right\} \\ &= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar} \left[p_j^2 - \frac{2mp_j(x_{j+1} - x_j)}{\varepsilon}\right]\right\} \\ &= \int \frac{dp_j}{2\pi\hbar} \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{\hbar} \left[\frac{p_j^2}{2m} - \frac{p_j(x_{j+1} - x_j)}{\varepsilon}\right]\right\} \end{aligned} \quad (12.16)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-iap^2} = \sqrt{\frac{\pi}{ia}} \quad (12.17)$$

$$K(x_a, t_a; x_b, t_b) = \lim_{N \rightarrow \infty, \varepsilon \rightarrow 0} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \varepsilon}\right)^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N-1} \left(\int dx_j\right) \exp\left\{\frac{i\varepsilon}{\hbar} \sum_{j=0}^{N-1} \left[\frac{m}{2} \frac{(x_{j+1} - x_j)^2}{\varepsilon} - V(x_j)\right]\right\} \quad (12.18)$$

12.2.6 路径积分的物理解释