普通高等教育“十三五”规划教材
天津工业大学学位与研究生教育改革项目资助（项目编号：Y20170702）

高等量子力学

闫学群　编著

電子工業出版社
Publishing House of Electronics Industry
北京 · BEIJING

内 容 简 介

“高等量子力学”课程是物理类各专业研究生的一门基础课。本书是作者在讲授此课程多年所用教案的基础上编写而成的。书中系统和详细地讲述了量子力学的基本概念、原理、处理问题的方法和一些重要理论问题。全书共分 8 章，内容不仅包括传统的量子力学基本概念和一般理论、二次量子化方法、辐射场的量子化及其与物质的相互作用、形式散射理论、相对论量子力学，还包括近些年发展起来的量子力学测量问题、开放量子系统动力学和开放系统退相干。

本书可作为物理及相关专业研究生的高等量子力学教材和参考书，也可供教师和科研人员参考。学习本书内容需要有初等量子力学基础。

图书在版编目（CIP）数据

高等量子力学 / 闫学群编著. —北京：电子工业出版社，2020.1

ISBN 978-7-121-38122-5

I. ①高…　II. ①闫…　III. ①量子力学－高等学校－教材　IV. ①O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2019）第 274156 号

策划编辑：秦淑灵　杜　军
责任编辑：刘真平
印　　刷：
装　　订：
出版发行：电子工业出版社
　　　　　北京市海淀区万寿路 173 信箱　邮编　100036
开　　本：787×1092　1/16　印张：15　字数：423.3 千字
版　　次：2020 年 1 月第 1 版
印　　次：2020 年 1 月第 1 次印刷
定　　价：49.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题，请向购买书店调换。若书店售缺，请与本社发行部联系，联系及邮购电话：（010）88254888，88258888。

质量投诉请发邮件至 zlts@phei.com.cn，盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

本书咨询联系方式：qinshl@phei.com.cn。

前　　言

量子力学是当代自然科学最重要的理论基础之一，当今的化学、材料科学、生物学、宇宙学乃至哲学都依赖于量子力学的发展。因此，“量子力学”或“高等量子力学”课程已经成为物理类各专业及相关专业研究生的一门基础课。本书是作者在为研究生讲授“高等量子力学”课程多年所用教案的基础上编写和扩充而成的，书中不但介绍了量子力学的基本概念、原理、处理问题的方法，还详细讲述了量子力学近些年发展起来的一些重要理论问题。

量子力学是整个微观物理学所依赖的基本理论框架。近百年来，它在物理学基础与应用的方方面面取得了一个又一个的成功，从基本粒子到物质结构，从天体物理到宇宙早期演化，从半导体到激光，再从原子能到信息技术，等等。这个历史不是一次性的革命过程，而是大大小小持续的革命过程，也导致了人类社会和生产生活的深刻变革。现代社会离不开量子力学，量子力学还在进一步发展中。有学者认为，在量子信息和量子操控等方面正发生着第二次量子革命。20 世纪即将结束的时候，以计算机和通信技术为代表的信息科学和技术开始对世界经济、科技、军事、教育和文化产生越来越深刻的影响。信息技术的迅速普及和应用，带动了世界范围信息产业的蓬勃发展。与此同时，由量子力学和信息科学形成的一门新兴交叉学科——量子信息学，无论在理论还是在实验方面都取得了长足的进步。迄今为止的研究证实，量子信息在提高运算速度、确保信息安全、增大信息容量等方面可以突破现有传统信息系统的极限。目前，科学家们普遍认为量子信息处理器很快可以在实验中获得实现。1993 年，基于量子纠缠(简称纠缠)的量子隐形传态方案的提出及 1997 年首次实验的实现，更为量子信息的实际应用描绘出了一幅美好的前景。例如，通过量子态隐形传输的手段将为量子计算机的研制提供帮助。进入 21 世纪，特别是近些年来，量子信息研究更加呈现出蓬勃发展之势。

鉴于量子信息理论和技术的迅速发展，理论和实验研究需要量子力学的支持，传统的量子力学教材，无论是物理及相关专业本科生学习所用的初等量子力学，还是研究生选用的高等量子力学教材内容，都不能完全满足现代科技发展的要求。特别是研究生使用的传统高等量子力学教材中讲述的理论知识和内容普遍落后于量子信息等前沿理论研究的需求。目前，量子信息研究所需要的理论知识很大部分分散于量子光学、激光原理、群论等教材中，甚至有些内容根本不在现有任何课程教材之内，但是，这些内容却是当前量子理论及量子信息前沿研究所不可缺少的量子力学基础理论。例如，与纠缠方面相关的内容，量子测量理论、量子开放系统理论等，以往国内少数高等量子力学教材对此只是粗浅地一提，大部分内容甚至从未涉及。因此，本教材内容主要是针对传统的高等量子力学做符合近些年量子力学研究前沿需求的调整和补充。

本教材是针对研究生编写的，目的是使学生在掌握必要的传统基本理论的基础上，对当前研究的冷门项目所需要的知识有所了解，而对当前研究的热点所需要的理论知识能够较全面地掌握，为尽快尽早地进入前沿领域打下基础，并且为未来研究工作减少障碍。另外，量子力学的很多问题仍然没有解决，因此量子力学是一个在不断发展的学科。当前量子力学的研究有可能正在开辟一条具有挑战性的道路。希望本书关于量子力学全新的基本理论的介绍也能对有志于此的读者有所帮助。从诞生到现在，量子力学在不到百年的时间里迅速发展，内容极其广泛。高等量子力学不同的教材和书籍包含不同的内容，并没有一个较为严格的界限以区别于初等量子力学；并且关于初等量子力学和高等量子力学的叫法也见仁见智。不过，以本人的观点，它必须要有所谓二次

量子化的内容才能够称得上高等量子力学。

最后，作者还想和研究生谈点个人粗浅的认识。我想对于登山者来说，恐怕最痛苦的不是能不能登上哪座山，而是不知道山在哪儿，即使知道了山在哪儿又不知道该登哪座山及登哪座山受益最大。本书则试图将适合的初学者领到离“山”最近的地方。再者，想象是科学技术的发展源泉，但是它必须建立在头脑中具备一定知识的基础之上。学习理论要循序渐进。有人提出学习和读书可分为三个区：舒适区、伸长区、恐惧区。因此，我认为提高知识水平既要避免长时间处于舒适区，又要避免处于恐惧区。长时间处于舒适区会使你的知识止步不前，而处于恐惧区又会使你丧失自信和进一步学习的兴趣，只有伸长区才是合适的。所以，学习高等量子力学一定要在学习了前序知识的基础上才会有效果。

本人从事本科和研究生量子力学的教学工作多年，使用和参考过多种国内外各级各类量子力学教材。因此，本书很多地方借鉴了这些同行和前辈著作的内容，在此对这些前辈和同行表示感谢。

由于作者水平有限，错误之处在所难免，真诚希望阅读此书的老师和同学多提宝贵意见。作者邮箱是：yanxuequn@tjpu.edu.cn。

作　　者

2019 年 3 月 18 日于天津

目　　录

第 1 章　量子力学基本概念和一般理论

量子力学主要研究的是微观系统的组成、相互作用及其运动规律。要研究和把握系统的现象和规律，需要对系统的状态及其随时间的演化进行描述。然而，由于微观系统表现出来的波粒二象性，对微观系统的描述与经典情况截然不同。因此，量子物理学与经典物理学的根本区别在于是否注意到波粒二象性或概率性。

一般说来，描述微观系统的力学量，为了反映波粒二象性应满足某种不对易关系，使其转化为算符，在量子理论中人们不再能用带有量纲的数(c 数)来表示力学量，而要用矩阵和作用于 c 数函数上的微分算符来“表示”量子理论中的力学量(q 数)。算符是一种运算约定，它只有作用在某个态矢量上才有意义。只有通过态矢量及力学量两者的结合，才能借助统计物理学方法算出在某个状态中测量某个物理量时所得到的各种可能值及其概率，并算出平均值。这些可能值及其概率和平均值直接与实验上可测量相联系，而平均值的一种重要特例是本征值。对于微观状态及其随时间演化的描述可以采用不同的表述方式，或者不同的“表象”。在量子力学中，时间是一个参数，而不是力学量。为区别起见，对状态的表述方式称为“表象”；而对它随时间演化的表述方式称为“绘景”。

实际上，一种量子理论总是由经典理论转变或者说是量子化而成的，通常形式的量子化的第一个步骤是借助经典理论求出哈密顿量和其他重要的表达式，把它们表示为一组正则变量的函数。第二个步骤是确定这些正则变量的算符，从而确定各种力学量的算符。实现从经典理论到量子理论转变的方法称为正则量子化。正则变量的算符满足一组称为量子条件的关系式，它们代表量子力学的另一个基本原理。在所谓正则量子化方案下，反映波粒二象性的具体办法是：令描述客体的广义坐标与相应的正则动量满足某种不对易关系。例如，对于一维粒子系统有 $[x,p]=i\hbar$，其中 $\hbar$ 为普朗克常数，x 和 p 分别为粒子的坐标和动量。

除上述方法之外，实现量子化的另一种重要方法是所谓路径积分方法。对于粒子系统，就是通过对位形空间或相空间中的路径积分来实现。由位形空间或相空间中的路径积分决定态矢量的时间变化的方法仍然和粒子的情形相同。本章 1.8 节将讲述这种方法。

1.1　态矢量和力学量算符的表示

我们知道，对于经典系统用相空间描述系统的(经典)态。相空间中单独的点代表整个物理系统的态。而在量子力学中，类似的概念是希尔伯特空间。希尔伯特空间中单独的点代表整个系统的量子态。希尔伯特空间包含描述微观粒子状态的态矢量(也称态矢)和表示力学量算符的张量。

1.1.1　量子态矢量

我们首先来看描述量子系统状态的态矢量。

1．态矢量的定义

描述微观粒子状态的态矢量 ψ 等符号代表一个复矢量，而 ψ^+ 是 ψ 的厄密共轭矢量或称“对偶矢量”。用狄拉克符号记为 $|\psi\rangle$，表示波函数 ψ 的右矢；$\langle\psi|$ 表示左矢。右矢和左矢是互相独立的，但存在如下关系：$\langle\psi|=(|\psi\rangle)^+$。

2．态矢量服从的条件

令 a 和 b 分别为一复数，则有：

(1) $|\psi\rangle+|\varphi\rangle=|\varphi\rangle+|\psi\rangle$。

(2) $|\psi\rangle+(|\varphi\rangle+|\chi\rangle)=(|\psi\rangle+|\varphi\rangle)+|\chi\rangle$。

(3) $|\psi\rangle(a+b)=|\psi\rangle a+|\psi\rangle b$。

(4) $(|\psi\rangle+|\varphi\rangle)a=|\psi\rangle a+|\varphi\rangle a$。

(5) $\langle\psi|\varphi\rangle=\langle\varphi|\psi\rangle^*$。

(6) $\langle\psi|(|\varphi\rangle+|\chi\rangle)=\langle\psi|\varphi\rangle+\langle\psi|\chi\rangle$。

(7) $\langle\psi|\psi\rangle\geqslant 0$，对任意 $|\psi\rangle$ 成立。

(8) $\langle\psi|\varphi\rangle=0$，则 $|\psi\rangle$ 与 $|\varphi\rangle$ 正交。

(9) $\langle\psi a|=a^*\langle\psi|$。

(10) $\langle a\psi+b\varphi|\equiv|a\psi+b\varphi\rangle^+=a^*\langle\psi|+b^*\langle\varphi|$。

3．右矢 $|\psi\rangle$ 或左矢 $\langle\psi|$ 的模定义

$$|\psi|=\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$$

4．任意态矢 $|\psi\rangle$ 在基矢 $\{\nu_i\}$ 下的表示

$$|\psi\rangle=\sum_i|\nu_i\rangle\langle\nu_i|\psi\rangle \tag{1.1}$$

其中，基矢满足正交归一化关系 $\langle\nu_i|\nu_j\rangle=\delta_{ij}$，以及完备性关系 $\sum_i|\nu_i\rangle\langle\nu_i|=I$。值得注意的是，零矢量不是希尔伯特空间可以解释为物理状态的要素。

1.1.2　量子算符

下面我们来看算符，算符为作用于态矢量上的运算符号，是一种操作。

1．线性算符定义

设 A 为线性算符，则满足如下关系：

$$A(\lambda_1|\psi_1\rangle+\lambda_2|\psi_2\rangle)=\lambda_1 A|\psi_1\rangle+\lambda_2 A|\psi_2\rangle \tag{1.2}$$

式中，$|\psi_1\rangle$ 和 $|\psi_2\rangle$ 为任意态矢，λ_1 和 λ_2 是任意复数。实际上量子力学中出现的算符绝大多数是线性算符，以后在不做特殊说明的情况下我们讨论的算符都是线性算符。

2．线性算符的运算规则和性质

设 A 和 B 为任意线性算符，$|\psi\rangle$ 和 $|\varphi\rangle$ 是任意态矢量，I 为单位算符，则有：

(1) $(A+B)|\psi\rangle=A|\psi\rangle+B|\psi\rangle$。

(2) $(AB)|\psi\rangle=A(B|\psi\rangle)$。

(3) $[A,B]\equiv[A,B]_-\equiv AB-BA$；$\{A,B\}\equiv[A,B]_+\equiv AB+BA$，为所规定的对易式。

(4) $\langle\psi|A^+|\varphi\rangle=\langle\varphi|A|\psi\rangle^*$。

(5) 若 $A=A^+$，则 A 称为厄米算符。

(6) 若由方程 $A|\psi\rangle=|\varphi\rangle$ 能够唯一地解出 $|\psi\rangle$，则可定义算符 A 的逆算符 A^{-1} 为 $A^{-1}|\varphi\rangle=|\psi\rangle$，于是 A^{-1} 满足

$$AA^{-1}=A^{-1}A=I \tag{1.3}$$

(7) 若 $UU^+ = U^+U = I$，则 U 称为幺正算符。

(8) $F(A) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n A^n$，表示算符 A 的函数。可以证明

$$e^{\alpha A} B e^{-\alpha A} = B + \frac{\alpha}{1!}[A,B] + \frac{\alpha^2}{2!}[A,[A,B]] + \cdots \tag{1.4}$$

式中，α 为参数。若 $[A,[A,B]] = 0,\quad [B,[A,B]] = 0$，并令 $\alpha = 1$，则

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} = e^B e^A e^{\frac{1}{2}[A,B]} \tag{1.5}$$

式(1.5)称为 Glauber 公式。

1.2　幺正变换的一般理论

同一微观粒子状态的态矢量和力学量算符的具体形式可用不同表象表示。所谓表象，实际上就是一个复矢量空间，或称作希尔伯特空间，该空间可由某个力学量算符的本征矢集或某几个力学量的共同本征矢集作为基矢而张成。态矢量在不同表象的表示之间存在“幺正变换”关系，力学量存在“相似变换”关系。

1.2.1　态矢量和力学量算符表示的变换

首先，考察一个态矢量在不同表象，如 A 表象和 B 表象的表示之间的联系。设 $|\alpha\rangle$ 为任意一个态矢量，A 表象基矢记为 $|a_i\rangle$，B 表象基矢记为 $|b_i\rangle$，注意，A 表象和 B 表象的维数不一定相等。

利用 A 表象基矢的完备性条件可得

$$\langle b_i|\alpha\rangle = \sum_j \langle b_i|a_j\rangle\langle a_j|\alpha\rangle \equiv \sum_j U_{ij}\langle a_j|\alpha\rangle \tag{1.6}$$

式中，$\langle b_i|\alpha\rangle$ 为态矢量 $|\alpha\rangle$ 在 B 表象中的表示，$\langle a_j|\alpha\rangle$ 是态矢量 $|\alpha\rangle$ 在 A 表象中的表示，两者通过矩阵元

$$U_{ij} = \langle b_i|a_j\rangle \tag{1.7}$$

的变换矩阵相联系。式(1.6)可记为矩阵形式

$$\boldsymbol{\alpha}^B = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\alpha}^A \tag{1.8}$$

其中，从 A 到 B 表象的变换矩阵为

$$\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} \langle b_1|a_1\rangle & \langle b_1|a_2\rangle & \cdots \\ \langle b_2|a_1\rangle & \langle b_2|a_2\rangle & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{1.9}$$

对于逆变换可如下获得。利用 B 表象基矢的完备性条件可得

$$\langle a_i|\alpha\rangle = \sum_j \langle a_i|b_j\rangle\langle b_j|\alpha\rangle \equiv \sum_j U_{ij}^{-1}\langle b_j|\alpha\rangle \tag{1.10}$$

式中

$$U_{ij}^{-1} = \langle a_i|b_j\rangle \tag{1.11}$$

由于 $\langle a_i|b_j\rangle = \langle b_j|a_i\rangle^* = U_{ji}^* = \tilde{U}_{ij}^* \equiv U_{ij}^+$，所以式(1.11)可记为 $U_{ij}^{-1} = U_{ij}^+$，相应的矩阵可表示为

$$\boldsymbol{U}^{-1}=\boldsymbol{U}^{+} \tag{1.12}$$

因此我们得出结论：态矢量在不同表象表示之间的变换是通过幺正变换实现的，而幺正变换矩阵元即为新表象基矢左矢和原表象基矢右矢的内积。

其次，考察力学量算符表示的变换。设力学量 L 在 A 表象中的矩阵元为 $L_{ij}^{A}=\langle a_i|L|a_j\rangle$，在 B 表象中的矩阵元为 $L_{ij}^{B}=\langle b_i|L|b_j\rangle$，利用 A 表象基矢的完备性条件可得

$$\langle b_i|L|b_j\rangle=\sum_{kl}\langle b_i|a_k\rangle\langle a_k|L|a_l\rangle\langle a_l|b_j\rangle=\sum_{kl}U_{ik}L_{kl}^{A}U_{lj}^{-1} \tag{1.13}$$

相应的矩阵形式为

$$\boldsymbol{L}^{B}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{L}^{A}\boldsymbol{U}^{-1} \tag{1.14}$$

其中，$\boldsymbol{U}$ 是从 A 表象到 B 表象的幺正变换矩阵式(1.9)。所以，与态矢量表示的变换式(1.6)或式(1.8)相应，力学量算符表示必须按式(1.13)或式(1.14)做相应的变换，力学量算符的这种变换称为相似变换。

例 1.1 已知 $\boldsymbol{\sigma}_z$ 表象中，泡利矩阵为

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

试求它们在 $\boldsymbol{\sigma}_x$ 表象中的形式。

解：因为 $\boldsymbol{\sigma}_z$ 表象基矢(即 $\boldsymbol{\sigma}_z$ 的本征矢)为

$$\boldsymbol{a}_1=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{a}_2=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

对应的本征值分别为 1 和 -1。$\boldsymbol{\sigma}_x$ 表象的基矢是 $\boldsymbol{\sigma}_x$ 在 $\boldsymbol{\sigma}_z$ 表象中的本征矢，有

$$\boldsymbol{b}_1=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{b}_2=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$$

对应的本征值也分别为 1 和 -1。由式(1.7)可知，从 $\boldsymbol{\sigma}_z$ 表象到 $\boldsymbol{\sigma}_x$ 表象的变换矩阵在 $\boldsymbol{\sigma}_z$ 表象的矩阵元为

$$U_{11}=\langle b_1|a_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(1\ \ 1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}，\quad U_{12}=\langle b_1|a_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(1\ \ 1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$U_{21}=\langle b_2|a_1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(1\ \ -1)\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}，\quad U_{22}=\langle b_2|a_2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(1\ \ -1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}=-\frac{1}{\sqrt{2}}$$

所以，有

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

因此，在 $\boldsymbol{\sigma}_x$ 表象中 $\boldsymbol{\sigma}_x$、$\boldsymbol{\sigma}_y$ 和 $\boldsymbol{\sigma}_z$ 的矩阵形式为(利用 $\boldsymbol{L}^{B}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{L}^{A}\boldsymbol{U}^{-1}$)

$$\boldsymbol{\sigma}_x'=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\sigma}_x\boldsymbol{U}^{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1&1\\1&-1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_y'=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\sigma}_y\boldsymbol{U}^{-1}=\begin{pmatrix}0&i\\-i&0\end{pmatrix}，\quad \boldsymbol{\sigma}_z'=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\sigma}_z\boldsymbol{U}^{-1}=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

1.2.2　幺正变换的基本性质

幺正变换具有许多非常有意义的性质。

(1) 幺正变换下两个态矢量的内积不变。

设态矢量从不带撇表示转化到带撇表示：$|\alpha'\rangle = U|\alpha\rangle$，$|\beta'\rangle = U|\beta\rangle$。显然有，$\langle\beta'|\alpha'\rangle = \langle\beta|U^{+}U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$。上述性质的一个重要推论是：任何态矢量的模，或者说它的归一化性质在幺正变换下保持不变。

(2) 幺正变换下算符方程的形式不变。

特别地，在幺正变换下算符的对易关系保持不变。这个结论可以简单推导如下：设$[A,B]=C$，且 $A'=UAU^{-1}$，$B'=UBU^{-1}$ 和 $C'=UCU^{-1}$，则有

$$[A',B'] = U[A,B]U^{-1} = UCU^{-1} = C'$$

(3) 幺正变换下力学量算符对应的平均值保持不变。

上述说法也可更一般地表述为：算符矩阵元的形式保持不变。这可以简单证明为：$\langle\beta'|A'|\alpha'\rangle = \langle\beta|U^{+}UAU^{-1}U|\alpha\rangle = \langle\beta|A|\alpha\rangle$。

(4) 幺正变换下算符的行列式不变。

证明如下：由矩阵的行列式公式 $\det(\boldsymbol{AB}) = \det\boldsymbol{A}\cdot\det\boldsymbol{B}$ 可得

$$\det\boldsymbol{A}\cdot\det\boldsymbol{A}^{-1} = \det(\boldsymbol{AA}^{-1}) = 1$$

所以有

$$\det\boldsymbol{A}' = \det(\boldsymbol{UAU}^{-1}) = \det\boldsymbol{U}\cdot\det\boldsymbol{A}\cdot\det\boldsymbol{U}^{-1} = \det\boldsymbol{A}$$

(5) 幺正变换下算符的本征值谱不变。

因为确定算符本征值的方程是特征方程，$\det(A-\lambda I)=0$，所以利用性质(4)可得

$$0=\det(A-\lambda I) = \det[U(A-\lambda I)U^{-1}] = \det(A'-\lambda I)$$

可见变换后由新表象中的特征方程所确定的本征值谱仍然是λ。

(6) 幺正变换下算符的迹不变。

因为

$$\mathrm{Tr}(ABC) = \mathrm{Tr}(BCA) = \mathrm{Tr}(CAB)$$

而矩阵的迹定义为它的对角元之和，即 $\mathrm{Tr}\boldsymbol{A} = \sum_i A_{ii}$，所以有

$$\mathrm{Tr}\boldsymbol{A}' = \mathrm{Tr}(\boldsymbol{UAU}^{-1}) = \mathrm{Tr}(\boldsymbol{AU}^{-1}\boldsymbol{U}) = \mathrm{Tr}\boldsymbol{A}$$

由以上性质容易知道，矩阵的迹就是矩阵的本征值之和。

(7) 利用上述性质(6)可以给出指数算符函数的一个有用公式。设 $B=\mathrm{e}^{A}$，则可以证明得出以下公式

$$\det B = \mathrm{e}^{\mathrm{Tr}A} \tag{1.15}$$

上式在任何表象中均成立。这个结论可以通过下面的证明给出。

任何力学量算符在自身表象中是一个对角化矩阵，其对角元就是本征值谱；而在一般表象中并非对角矩阵。根据表象理论，原则上总可以找到一个幺正变换，通过它将算符从非对角表象转化到对角表象，即自身表象表示。另一方面，根据幺正变换的基本性质可知，在表象变换下，算

符矩阵的行列式和迹保持不变，于是有

$$\mathrm{Tr}\boldsymbol{A}=a_1+a_2+\cdots=\text{算符}\ A\ \text{的本征值之和} \tag{1.16}$$

$$\det\boldsymbol{A}=a_1\cdot a_2\cdots=\text{算符}\ A\ \text{的本征值之积} \tag{1.17}$$

由此，常常把一个算符矩阵的迹和行列式作为该算符的“特征量”。它们从整体上反映了算符的本征值谱。作为应用，我们来导出关于指数算符函数的一个有用公式。设 $B=\mathrm{e}^A$，其中指数算符函数通过如下展开式定义：

$$\mathrm{e}^A=1+\frac{1}{1!}A+\frac{1}{2!}A^2+\cdots=\lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{A}{n}\right)^n \tag{1.18}$$

因为在 A 表象中，$B=\mathrm{e}^A$ 中的算符 B 的第 i 个本征值为 $b_i=\mathrm{e}^{a_i}$，其中 a_i 是算符 A 的第 i 个本征值，所以有 $\det B=\mathrm{e}^{\mathrm{Tr}A}$。

(8) 可以证明，若算符 R 是厄米算符，即 $R=R^+$，则由它所生成的算符

$$U=\mathrm{e}^{i\lambda R} \tag{1.19}$$

一定是幺正算符，其中 λ 为实参数。

厄米算符和幺正算符是量子理论中最重要的两类算符。厄米算符的本征矢可用作基矢来构造表象，从而对微观现象进行描述和计算。另一方面，描写状态在不同表象之间的变化，或者描写状态随时间、空间或其他力学量的变化而变化，则常常需要采用幺正算符。

能够证明，波函数的幺正变换在经典极限下导致经典变量(如动量 p 和坐标 q)之间的正则变换。因此，幺正变换是正则变换这一经典概念的量子力学推广。由此，幺正变换常被称作正则变换。

1.3 状态随时间改变的描述——三种绘景

前面讲到，状态的不同表述之间的联系可以通过不含时间的幺正变换实现。然而人们建立量子理论不仅是为了描述微观状态，更希望了解微观状态的变化过程及决定变化过程的相互作用或动力学机制，从而达到控制和利用微观现象的目的。因此，下面我们进一步讨论量子动力学问题，即微观粒子系统的状态随时间演化的问题。

由于系统随时间的演化包括态矢量和力学量算符两个方面，所以有可能采用不同的表述方式。量子系统随时间演化的表述方式称为绘景，通常有三种绘景：薛定谔绘景、海森伯绘景和相互作用绘景。下面我们分别介绍这三种绘景。

1.3.1 薛定谔绘景

所谓薛定谔绘景(简记为 S.P.)，是用态矢量随时间的变化表达系统的运动过程的一种绘景。这种绘景通常适用于存在不随时间改变的相互作用的量子力学问题。若某时刻 t 的态矢量记为 $|\psi(t)\rangle$，则 t 时刻态矢量与初始时刻态矢量之间的关系可记为

$$|\psi(t)\rangle=U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle \tag{1.20}$$

其中，$U(t,t_0)$ 称为时间演化算符。因为这种绘景将量子状态随时间的演化完全归因于态矢量，所以状态随时间改变的全部信息均包含在这个时间演化算符之中。时间演化算符 $U(t,t_0)$ 有如下基本性质：

1．初始条件

$$U(t_0,t_0)=1 \tag{1.21}$$

这是时间演化算符定义式(1.20)的必然结果。

2．幺正性

$$U^{+}(t,t_0)U(t,t_0)=U(t,t_0)U^{+}(t,t_0)=1 \tag{1.22}$$

这个性质是概率守恒性的结果。概率守恒性要求态矢量的归一化条件在时间演化过程中保持不变，因此有

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=\langle\psi(t_0)|U^{+}(t,t_0)U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle=\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

由此可得式(1.22)。

3．因子化特性

$$U(t,t_0)=U(t,t_1)U(t_1,t_0) \tag{1.23}$$

这个性质也是时间演化算符定义式(1.20)的必然结果。

4．时间反演特性

$$U^{-1}(t,t_0)=U(t_0,t) \tag{1.24}$$

由初始条件式(1.21)和因子化特性式(1.23)可得$U(t,t_0)U(t_0,t)=1$，于是可得式(1.24)。时间反演算符的反演特性是量子力学理论满足时间反演不变性的体现。

5．薛定谔绘景中的动力学方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)=HU(t,t_0) \tag{1.25}$$

它是时间演化算符关于时间的微分方程。可以简单推导如下：将时间间隔为$\mathrm{d}t$的时间演化算符表示为

$$U(t+\mathrm{d}t,t)=1-i\Omega\mathrm{d}t$$

其中，Ω显然应为厄米算符，即$\Omega^{+}=\Omega$。将Ω表示为

$$\Omega=H/\hbar$$

式中，$\hbar$是普朗克常数，因此H是具有能量量纲的厄米算符。利用因子化特性，则有

$$U(t+\mathrm{d}t,t_0)=U(t+\mathrm{d}t,t)U(t,t_0)=\left(1-i\frac{H}{\hbar}\mathrm{d}t\right)U(t,t_0)$$

即

$$U(t+\mathrm{d}t,t_0)-U(t,t_0)=-i\frac{H}{\hbar}\mathrm{d}tU(t,t_0)$$

容易看出，上述结果可写成方程式(1.25)的形式。此方程具有薛定谔方程的形式，但实际上它是一个算符方程。不过将方程作用于初态$|\psi(t_0)\rangle$，可得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=H|\psi(t)\rangle \tag{1.26}$$

这正是关于态矢量的薛定谔方程。

若哈密顿算符 H 不显含时间，则由方程式(1.25)满足初始条件式(1.21)的解为

$$U(t,t_0)=\mathrm{e}^{-iH(t-t_0)/\hbar} \tag{1.27}$$

这个结果显然是式(1.19)由厄密算符 H 生成幺正算符的一个例子，幺正的时间演化算符是由厄米的哈密顿算符生成的。需要强调的是，若 H 显含时间，则算符 U 不能表达为式(1.27)的形式。这时方程式(1.25)可采用迭代法求出其级数解(参见 1.3.3 节的介绍)。一般说来，如果所研究的系统只是一个更大的系统的一部分，这个系统和大系统的其余部分之间存在着能量交换，则所研究的系统的哈密顿量将明显含时。

将式(1.27)代入式(1.20)可得形式解

$$\left|\psi(t)\right\rangle=U(t,t_0)\left|\psi(t_0)\right\rangle=\mathrm{e}^{-iH(t-t_0)/\hbar}\left|\psi(t_0)\right\rangle \tag{1.28}$$

应当指出，式(1.28)仅仅是一种形式解，为了获得最后结果，应当选择具体表象。例如，若能量表象的基矢表示为 $\left|E,r\right\rangle$，其中 E 为 H 的本征值，r 为其他量子数，则式(1.28)中在态矢量下加入态指标 α 后，可化为

$$\left\langle E,r\middle|\psi_\alpha(t)\right\rangle=\left\langle E,r\right|\mathrm{e}^{-iH(t-t_0)/\hbar}\left|\psi_\alpha(t_0)\right\rangle=\mathrm{e}^{-iE(t-t_0)/\hbar}\left\langle E,r\middle|\psi_\alpha(t_0)\right\rangle$$

在能量表象中态矢量随时间的演化具有最简单的形式。若取坐标表象，以一维系统为例，为简单起见取 $t_0=0$，于是有

$$\left\langle x\middle|\psi_\alpha(t)\right\rangle=\left\langle x\right|\mathrm{e}^{-iHt/\hbar}\left|\psi_\alpha(0)\right\rangle=\sum_E\left\langle x\right|\mathrm{e}^{-iHt/\hbar}\left|E\right\rangle\left\langle E\middle|\psi_\alpha(0)\right\rangle=\sum_E\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\left\langle x\middle|E\right\rangle\left\langle E\middle|\psi_\alpha(0)\right\rangle$$

若记 $\left\langle x\middle|\psi_\alpha(t)\right\rangle=\psi_\alpha(x,t)$，$\left\langle x\middle|E\right\rangle=\varphi_E(x)$ 和 $\left\langle E\middle|\psi_\alpha(0)\right\rangle=c_\alpha$，则上式可化为波动量子力学中常见的形式

$$\psi_\alpha(x,t)=\sum_E c_\alpha\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\varphi_E(x) \tag{1.29}$$

6．薛定谔绘景中力学量的平均值随时间演化的公式

薛定谔绘景中的力学量通常不随时间改变，所以其平均值随时间的变化完全起因于态矢量的改变。利用式(1.25)，可得

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle\psi(t)\right|A\left|\psi(t)\right\rangle&=i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left\langle\psi(t_0)\right|U^+AU\left|\psi(t_0)\right\rangle\\
&=i\hbar\left\langle\psi(t_0)\right|\left(\frac{\partial U^+}{\partial t}AU+U^+A\frac{\partial U}{\partial t}\right)\left|\psi(t_0)\right\rangle\\
&=\left\langle\psi(t_0)\right|U^+(-HA+AH)U\left|\psi(t_0)\right\rangle\\
&=\left\langle\psi(t)\right|[A,H]\left|\psi(t)\right\rangle
\end{aligned} \tag{1.30}$$

这里我们需要指出，薛定谔绘景中力学量不随时间改变，并不意味着力学量不能随时间改变。随时间改变的力学量通常出现在哈密顿算符的相互作用部分。不过在这种情况下，人们通常采用下面要讲到的另外一种绘景，即所谓相互作用绘景。

1.3.2 海森伯绘景

将量子系统随时间的演化归因于力学量算符，而态矢量不随时间变化，这种描述方式称为海森伯绘景(简记为 H.P.)。

1．海森伯绘景中的动力学方程

通常令初始时刻 t_0 薛定谔绘景和海森伯绘景“重合”，于是有

$$\left|\ \right\rangle_H = \left|\psi(t_0)\right\rangle_S\,,\quad A_H(t_0) = A_S \tag{1.31}$$

其中，下标 S 和 H 分别标明了薛定谔绘景和海森伯绘景。利用式(1.20)中关于态矢量的关系式可得

$$\left|\ \right\rangle_H = U^{-1}(t,t_0)\left|\psi(t)\right\rangle_S \tag{1.32}$$

可见，时间演化算符也是一个绘景变换算符，它使任意时刻的态矢量从海森伯绘景表示转化到薛定谔绘景表示。根据幺正变换理论，与态矢量的变换式(1.32)相应，力学量算符将做如下相似变换：

$$A_H(t) = U^{-1}(t,t_0)A_S U(t,t_0) \tag{1.33}$$

由式(1.33)对时间 t 求导，容易得到

$$i\hbar\frac{\partial A_H(t)}{\partial t} = [A_H(t),H] \tag{1.34}$$

这就是海森伯绘景中的动力学方程。与此相应，薛定谔绘景中的动力学方程是关于时间演化态矢量的薛定谔方程。式(1.34)与薛定谔绘景中的力学量平均值随时间变化的方程形式上类似，但实际上完全不同。一个是关于算符的方程，另一个是关于函数(平均值)的方程，而且它们属于不同的绘景。

这里值得指出的是，在讨论海森伯绘景和薛定谔绘景的相互转化时有两个特点非常有用。首先，系统的哈密顿算符在两种绘景中完全相同。这一点由式(1.33)可以清楚地看出，因为算符 U 是由 H 生成的幺正算符，它当然与 H 对易。而对于其他力学量，在薛定谔绘景中不随时间变化，所以在表象取定后其形式始终保持不变，但是在海森伯绘景中将随时间改变，在表象取定后力学量算符在不同时刻将具有不同形式。其次，另一个特点是关于对易关系。设薛定谔绘景中存在如下对易关系：

$$[A_S,B_S] = C_S \tag{1.35}$$

则由于 $U^{-1}[A_S,B_S]U = [A_H(t),B_H(t)]$，$U^{-1}C_S U = C_H(t)$，于是可得

$$[A_H(t),B_H(t)] = C_H(t) \tag{1.36}$$

这涉及海森伯绘景中同一时刻 t 不同力学量之间的对易关系，称为同时性对易关系。上述结果表明，海森伯绘景中力学量之间的同时性对易关系与薛定谔绘景中的形式相同。但是，一般非同时性对易关系与时间差有关。例如，对于一维线性谐振子，有

$$\begin{cases}[q_H(t),q_H(t')] = \dfrac{i\hbar}{m\omega}\sin\omega(t'-t)\\ [p_H(t),p_H(t')] = i\hbar m\omega\sin\omega(t'-t)\\ [q_H(t),p_H(t')] = i\hbar\cos\omega(t'-t)\end{cases} \tag{1.37}$$

式中，q 表示谐振子的正则坐标，p 为谐振子的正则动量。

2．海森伯绘景中的基矢

海森伯绘景中态矢量不随时间变化，那么基矢或力学量的本征矢呢？为此，我们写出薛定谔绘景中关于算符 A 的本征方程：

$$A_S\left|a_i\right\rangle_S = a_i\left|a_i\right\rangle_S \tag{1.38}$$

由式(1.38)容易看出，薛定谔绘景中基矢不随时间变化，因为此时力学量不随时间变化。让我们再来考察海森伯绘景的情况。设 $t=0$ 时这两种绘景重合，将时间演化算符的厄米共轭 $U^{+}(t,0)$ 作用于式(1.38)，再利用它的幺正性，可得

$$U^{+}A_S UU^{+}\left|a_i\right\rangle_S = a_i U^{+}\left|a_i\right\rangle_S$$

上式可以看作算符 $A_H(t)=U^{+}(t,0)A_S U(t,0)$ 的本征值方程，即

$$A_H(t)\left|a_i,t\right\rangle_H = a_i\left|a_i,t\right\rangle_H \tag{1.39}$$

其中

$$\left|a_i,t\right\rangle_H = U^{+}(t,0)\left|a_i\right\rangle_S \tag{1.40}$$

是算符 A_H 的属于本征值 a_i 的本征矢，也就是海森伯绘景中 A 表象的基矢。可见在海森伯绘景中，态矢量不随时间变化，但基矢随时间变化。

讨论量子状态随时间的演化可以采用不同绘景，但由此计算的实验上可测量量(如力学量的平均值、本征值，以及发现系统处于某个本征态的概率)应与绘景选择无关。式(1.38)和式(1.39)已经表明，力学量的本征值谱与绘景选择无关。现在来考察态矢量按基矢展开的系数，即量子系统处于某个特殊态(本征态)的概率幅。设 $t=0$ 时刻态矢量为 $\left|\alpha,t_0=0\right\rangle$。在薛定谔绘景中，$t$ 时刻的态矢量为 $U\left|\alpha,t_0=0\right\rangle$，此时该系统处于力学量 A 的第 i 个本征态 $\left|a_i\right\rangle$ 的概率幅为

$$c_i = \left\langle a_i\right|\left(U\left|\alpha,t_0=0\right\rangle\right) \tag{1.41}$$

在海森伯绘景中，t 时刻的态矢量仍然为 $\left|\alpha,t_0=0\right\rangle$，但本征矢应为 $U^{+}\left|a_i\right\rangle$，因此有

$$c_i = \left(\left\langle a_i\right|U\right)\left|\alpha,t_0=0\right\rangle \tag{1.42}$$

可见，计算结果与绘景选取无关。

1.3.3 相互作用绘景

下面我们来看一个更一般的绘景——相互作用绘景(简记为 I.P.)。

1．态矢量的动力学方程

当存在相互作用时，系统能量的本征值问题除少数几个例子外，往往不能精确求解。不过在实际问题中，系统的哈密顿算符常常可分解为两部分，有

$$H = H_0 + H_1 \tag{1.43}$$

其中，H_0 与时间无关，且其本征值问题可严格求解，而 H_1 是微扰部分。因此我们现在的问题是：已知 H_0 表象，需要求出态矢量和力学量算符随时间的演化。这类问题采用相互作用绘景最方便。相互作用绘景可通过要求其态矢量 $\left|\psi_I(t)\right\rangle$ 与薛定谔绘景中的态矢量 $\left|\psi_S(t)\right\rangle$ 存在如下幺正变换关系来定义：

$$\left|\psi_I(t)\right\rangle = U_0^{-1}(t,0)\left|\psi_S(t)\right\rangle = \mathrm{e}^{iH_0 t/\hbar}\left|\psi_S(t)\right\rangle \tag{1.44}$$

其中，为简单起见，式(1.44)中已取 $t_0=0$。应当注意，U_0 并非实际系统的时间演化算符，而是为了求解问题引进的非微扰系统的时间演化算符。此外，在上述定义中已假定初始 t_0 时刻相互作用绘景与薛定谔绘景重合，即

$$\left|\psi_I(t_0)\right\rangle = \left|\psi_S(t_0)\right\rangle \tag{1.45}$$

由以上结果可以求出态矢量的运动方程。式(1.44)对时间 t 求导，则有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = -H_0 \mathrm{e}^{iH_0t/\hbar}|\psi_S(t)\rangle + \mathrm{e}^{iH_0t/\hbar}\cdot i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_S(t)\rangle$$
$$= \mathrm{e}^{iH_0t/\hbar}[-H_0 + H_0 + H_1]|\psi_S(t)\rangle$$
$$= \mathrm{e}^{iH_0t/\hbar}H_1\mathrm{e}^{-iH_0t/\hbar}|\psi_I(t)\rangle$$

对于上式，若令

$$H_I(t) = \mathrm{e}^{iH_0t/\hbar}H_1\mathrm{e}^{-iH_0t/\hbar} \equiv U_0^{-1}H_1U_0 \tag{1.46}$$

则得到态矢量的运动方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = H_I(t)|\psi_I(t)\rangle \tag{1.47}$$

可以看出在相互作用绘景中，系统的哈密顿算符 $H_I(t)$ 是含时的。

2．算符的动力学方程

设任意算符 A 在薛定谔绘景和相互作用绘景中分别表示为 A_S 和 A_I。利用式(1.44)，得到 A 的平均值为

$$\langle\psi_S(t)|A_S|\psi_S(t)\rangle = \langle\psi_I(t)|\mathrm{e}^{iH_0t/\hbar}A_S\mathrm{e}^{-iH_0t/\hbar}|\psi_I(t)\rangle$$

由上式我们定义相互作用绘景的算符 A_I 为

$$A_I \equiv \mathrm{e}^{iH_0t/\hbar}A_S\mathrm{e}^{-iH_0t/\hbar} \tag{1.48}$$

式(1.48)对时间 t 求导，则有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}A_I = \mathrm{e}^{iH_0t/\hbar}(A_SH_0 - H_0A_S)\mathrm{e}^{-iH_0t/\hbar}$$

即

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}A_I = [A_I(t), H_0] \tag{1.49}$$

这正是相互作用绘景的算符 A_I 的动力学方程。

值得注意的是，相互作用绘景的时间演化算符仅由自由哈密顿算符 H_0 产生，而海森伯绘景的时间演化算符则是由全部哈密顿算符 H 产生的。

3．求解运动方程

现在求解相互作用绘景中的运动方程(1.47)。定义相互作用绘景中从时刻 t_0 到 t，态矢量的演化算符 $U_I(t,t_0)$ 满足以下条件：

$$|\psi_I(t)\rangle = U_I(t,t_0)|\psi_I(t_0)\rangle \tag{1.50}$$

显然，$U_I(t,t_0)$ 满足

（1）

$$U_I(t_0,t_0) = 1 \tag{1.51}$$

此式即为相互作用绘景演化算符的初始条件。

(2) 当 $t-t_0$ 有限时，由定义式(1.44)及式(1.28)求得

$$|\psi_I(t)\rangle = \mathrm{e}^{iH_0t/\hbar}|\psi_S(t)\rangle = \mathrm{e}^{iH_0t/\hbar}\mathrm{e}^{-iH(t-t_0)/\hbar}|\psi_S(t_0)\rangle$$

$$= e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} e^{-iH_0 t_0/\hbar} |\psi_I(t_0)\rangle$$

$$= U_I(t,t_0)|\psi_I(t_0)\rangle$$

其中

$$U_I(t,t_0) = e^{iH_0 t/\hbar} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} e^{-iH_0 t_0/\hbar} \tag{1.52}$$

需要注意的是，一般 H 与 H_0 不对易，所以式(1.52)的算符次序很重要。

(3) U_I 是幺正算符，满足

$$U_I^+(t,t_0)U_I(t,t_0) = U_I(t,t_0)U_I^+(t,t_0) = 1 \tag{1.53}$$

$$U_I^+(t,t_0) = U_I^-(t,t_0)$$

(4) 由式(1.52)可证

$$U_I(t_1,t_2)U_I(t_2,t_3) = U_I(t_1,t_3) \tag{1.54}$$

(5) 由 $U_I(t,t_0)U_I(t_0,t) = 1$，可得

$$U_I(t_0,t) = U_I^+(t,t_0) \tag{1.55}$$

式(1.52)虽然是 $U_I(t,t_0)$ 的形式解，但在实际计算中并无多大用处。然而另一方面，若求出 $U_I(t,t_0)$，由式(1.50)可求得 $|\psi_I(t)\rangle$，由于 H_0 已知，再由式(1.44)就可求出 $|\psi_S(t)\rangle$，给出整个哈密顿量 H，包括 H_I 的影响在内的本征函数。因此，有必要给出求 $U_I(t,t_0)$ 的方案。

(6) 戴逊(Dyson)展开(即求 $U_I(t,t_0)$)。

由式(1.47)和式(1.50)，得 $U_I(t,t_0)$ 的演化方程为

$$i\hbar\frac{\partial U_I(t,t_0)}{\partial t} = H_I(t)U_I(t,t_0) \tag{1.56}$$

方程(1.56)满足初始条件式(1.51)的解为

$$U_I(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt' H_I(t')U_I(t',t_0) \tag{1.57}$$

这是一个关于 U_I 的积分方程，可以用逐步迭代法求解。重复使用式(1.57)，则得

$$U_I(t,t_0) = 1 + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t} dt' H_I(t') + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_I(t')H_I(t'') + \cdots \tag{1.58}$$

若 H_I 是微扰，则式(1.58)其实就是一个微扰展开式，可以按所要求的精度逐级求解。式(1.58)右端第三项是个积分限变化的积分。下面来化简这个积分，将积分分成两部分，然后对第二部分交换积分次序，即

$$\begin{aligned}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_I(t')H_I(t'') &= \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_I(t')H_I(t'') + \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_I(t')H_I(t'') \\ &= \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H_I(t')H_I(t'') + \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt'' \int_{t''}^{t} dt' H_I(t')H_I(t'')\end{aligned} \tag{1.59}$$

将式(1.59)右端第二个等式第二项的积分变数 t' 和 t'' 互换，有

$$\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt'' \int_{t''}^{t} dt' H_I(t')H_I(t'') = \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t} dt' \int_{t'}^{t} dt'' H_I(t'')H_I(t')$$

代入式(1.59)后，得到

$$\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int_{t_0}^{t'}\mathrm{d}t''H_I(t')H_I(t'')=\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'[H_I(t')H_I(t'')\theta(t'-t'')+H_I(t'')H_I(t')\theta(t''-t')] \tag{1.60}$$

式中，$\theta(t)$ 是阶跃函数。方程式(1.60)右端具有如下特点：时间 t 大的算符排在左边。引入时序算符 T，其作用是使它作用的算符按时间 t 大小的顺序从左向右排列，即

$$\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int_{t_0}^{t'}\mathrm{d}t''H_I(t')H_I(t'')=\frac{1}{2}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t''T[H_I(t')H_I(t'')] \tag{1.61}$$

对展开式(1.58)中的每项进行同样处理，最后得到

$$U_I(t,t_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\frac{1}{n!}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\cdots\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_nT[H_I(t_1)\cdots H_I(t_n)] \tag{1.62}$$

如果 $H_I << H_0$，则式(1.62)给出了在相互作用绘景中演化算符的微扰展开式。

1.3.4 在三种绘景下求解的例子——受微扰的谐振子

下面我们用三种绘景讨论同一个问题，以便对三种绘景之间的关系和它们各自的特点有更多的了解。

设一个一维谐振子受到微扰 $H_1=\varepsilon x$（ε 为一小量)作用。系统的总哈密顿量为

$$H=H_0+H_1 \tag{1.63}$$

其中

$$H_0=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=\frac{1}{2}\hbar\omega(aa^++a^+a) \tag{1.64}$$

$$H_1=\varepsilon x=\varepsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^++a)=\alpha\hbar(a^++a) \tag{1.65}$$

式中，$\alpha=\varepsilon\sqrt{1/2m\hbar\omega}$，$a$ 和 a^+ 分别为谐振子的湮灭和产生算符。

假设系统在没加微扰时，H_0 的本征态为 $|n\rangle$，$t=0$ 时刻突然加上微扰 H_1，在 t 时刻撤去微扰，求 t 时刻系统的能量取各值的概率。

1. 薛定谔绘景

谐振子系统满足的薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle=H|\psi(t)\rangle,\quad H=H_0+H_1 \tag{1.66}$$

初始条件为 $|\psi(0)\rangle=|n\rangle$，所求的概率为 $|\langle m|\psi(t)\rangle|^2$。将方程的解 $|\psi(t)\rangle$ 按 H_0 的本征矢展开为

$$|\psi(t)\rangle=\sum_k|k\rangle\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}E_kt}c_k(t)=\sum_k|k\rangle\mathrm{e}^{-i\left(k+\frac{1}{2}\right)\omega t}c_k(t) \tag{1.67}$$

式中，$c_k(t)$ 为展开系数。将式(1.67)代入式(1.66)后，得到 $c_k(t)$ 的普遍情况下的方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c_l(t)=\sum_k\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(E_l-E_k)}\langle l|H_1|k\rangle c_k(t) \tag{1.68}$$

所求的概率即是$|c_m(t)|^2$，因为

$$c_m(t)=\langle m|\psi(t)\rangle e^{i\left(m+\frac{1}{2}\right)\omega t}$$

此问题的微扰H_1的矩阵元为

$$\langle l|H_1|k\rangle=\alpha\hbar\langle l|(a^++a)|k\rangle=\alpha\hbar\left[\sqrt{l}\delta_{l-1,k}+\sqrt{l+1}\delta_{l+1,k}\right]$$

将此式代入式(1.68)中，得$c_l(t)$的微分方程为

$$\frac{d}{dt}c_l(t)=-i\alpha[\sqrt{l}e^{i\omega t}c_{l-1}(t)+\sqrt{l+1}e^{-i\omega t}c_{l+1}(t)] \tag{1.69}$$

由于初态是$|n\rangle$，此式的初始条件是$c_l(0)=\delta_{ln}$。式(1.69)很容易用逐级近似法求解：将$c_l(t)$的已知的低级近似$c_l^{(n)}(t)$代入方程右边，即可解得高一近似$c_l^{(n+1)}(t)$。我们先用零级近似$c_l^{(0)}(t)=\delta_{ln}$代入式(1.69)右边，得

$$\frac{d}{dt}c_l^{(1)}(t)=-i\alpha[\sqrt{l}e^{i\omega t}\delta_{l-1,n}+\sqrt{l+1}e^{-i\omega t}\delta_{l+1,n}] \tag{1.70}$$

令l取不同值，得

$$l\leqslant n-2,\quad \frac{d}{dt}c_l^{(1)}(t)=0$$

$$l=n-1,\quad \frac{d}{dt}c_{n-1}^{(1)}(t)=-i\alpha\sqrt{n}e^{-i\omega t}$$

$$l=n,\quad \frac{d}{dt}c_n^{(1)}(t)=0$$

$$l=n+1,\quad \frac{d}{dt}c_{n+1}^{(1)}(t)=-i\alpha\sqrt{n+1}e^{i\omega t}$$

$$l\geqslant n+2,\quad \frac{d}{dt}c_l^{(1)}(t)=0$$

这些方程在$c_l^{(1)}(0)=\delta_{ln}$条件下的解为

$$c_{n-1}^{(1)}(t)=-\frac{\alpha}{\omega}\sqrt{n}(1-e^{-i\omega t})$$

$$c_n^{(1)}(t)=1$$

$$c_{n+1}^{(1)}(t)=-\frac{\alpha}{\omega}\sqrt{n+1}(e^{i\omega t}-1)$$

$$c_l^{(1)}(t)=0\quad \left(l\leqslant n-2,\quad l\geqslant n+2\right)$$

因此$c_l(t)$的一级近似为

$$c_l^{(1)}(t)=\delta_{ln}-\frac{\alpha}{\omega}\left[\sqrt{n}(1-e^{-i\omega t})\delta_{l,n-1}+\sqrt{n+1}(e^{i\omega t}-1)\delta_{l,n+1}\right] \tag{1.71}$$

再将式(1.71)代入式(1.69)，得二级近似方程为

$$\frac{d}{dt}c_l^{(2)}(t)=-i\alpha\left[\sqrt{l}e^{i\omega t}c_{l-1}^{(1)}(t)+\sqrt{l+1}e^{-i\omega t}c_{l+1}^{(1)}(t)\right]$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_{n-2}^{(2)}(t)=i\frac{\alpha^2}{\omega}\sqrt{n(n-1)}\mathrm{e}^{-i\omega t}(1-\mathrm{e}^{-i\omega t})$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_{n-1}^{(2)}(t)=-i\alpha\sqrt{n}\mathrm{e}^{-i\omega t}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_{n}^{(2)}(t)=-i\frac{\alpha^2}{\omega}\left[n(\mathrm{e}^{i\omega t}-1)+(n+1)(1-\mathrm{e}^{-i\omega t})\right]$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_{n+1}^{(2)}(t)=i\alpha\sqrt{n+1}\mathrm{e}^{i\omega t}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_{n+2}^{(2)}(t)=i\frac{\alpha^2}{\omega}\sqrt{(n+2)(n+1)}\mathrm{e}^{i\omega t}(\mathrm{e}^{i\omega t}-1)$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}c_{l}^{(2)}(t)=0\qquad\left(l\leqslant n-3,\quad l\geqslant n+3\right)$$

它们在初态条件 $c_l^{(2)}(0)=\delta_{ln}$ 下的解为

$$\begin{cases}c_{n-2}^{(2)}(t)=-\dfrac{\alpha^2}{\omega^2}\sqrt{n(n-1)}\left(\mathrm{e}^{-i\omega t}-\dfrac{1}{2}\mathrm{e}^{-2i\omega t}-\dfrac{1}{2}\right)\\ c_{n-1}^{(2)}(t)=\dfrac{\alpha}{\omega}\sqrt{n}(\mathrm{e}^{-i\omega t}-1)\\ c_{n}^{(2)}(t)=1+\dfrac{\alpha^2}{\omega^2}[(n+1)\mathrm{e}^{-i\omega t}+n\mathrm{e}^{i\omega t}+i\omega t-2n-1]\\ c_{n+1}^{(2)}(t)=-\dfrac{\alpha}{\omega}\sqrt{n+1}(\mathrm{e}^{i\omega t}-1)\\ c_{n+2}^{(2)}(t)=\dfrac{\alpha^2}{\omega^2}\sqrt{(n+2)(n+1)}\left(\dfrac{1}{2}\mathrm{e}^{2i\omega t}-\mathrm{e}^{-i\omega t}+\dfrac{1}{2}\right)\\ c_{l}^{(2)}(t)=0\quad\left(l\leqslant n-3,\quad l\geqslant n+3\right)\end{cases}\tag{1.72}$$

将 $c_l^{(2)}(t)$ 代入式(1.67)中，即得 $|\psi(t)\rangle$ 的二阶近似。$\left|c_l^{(2)}(t)\right|^2$ 即是在 t 时刻，微扰撤去后系统的能量取 $\hbar\omega(l+1/2)$ 的概率，其中不为零的有

$$\left|c_{n-2}^{(2)}(t)\right|^2=\frac{\alpha^4}{\omega^4}n(n-1)(1-\cos\omega t)^2$$

$$\left|c_{n-1}^{(2)}(t)\right|^2=\frac{\alpha^2}{\omega^2}2n(1-\cos\omega t)$$

$$\left|c_{n}^{(2)}(t)\right|^2=1-\frac{\alpha^2}{\omega^2}2(2n+1)(1-\cos\omega t)+O\left(\frac{\alpha^4}{\omega^4}\right)$$

$$\left|c_{n+1}^{(2)}(t)\right|^2=\frac{\alpha^2}{\omega^2}2(n+1)(1-\cos\omega t)$$

$$\left|c_{n+2}^{(2)}(t)\right|^2=\frac{\alpha^4}{\omega^4}(n+2)(n+1)(1-\cos\omega t)^2$$

在二阶近似(即 α^2/ω^2 量级)范围内，这些概率之和为 1。

2．相互作用绘景

在相互作用绘景下，我们用演化算符 $U_I(t,0)$ 即式(1.62)来计算，这时有

$$|\psi_I(t)\rangle = U_I(t,0)|\psi_I(0)\rangle = U_I(t,0)|n\rangle \tag{1.73}$$

$U_I(t,0)$ 的前三项为

$$U_I(t,0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t H_I(t_1)\mathrm{d}t_1 + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t \left[H_I(t_1)\int_0^{t_1} H_I(t_2)\mathrm{d}t_2 \right]\mathrm{d}t_1 \tag{1.74}$$

这里我们宁愿用上限不同的式(1.58)型的式子，因为此式便于计算。

首先计算 $H_I(t)$，由式(1.46)，有

$$H_I(t) = \mathrm{e}^{itH_0/\hbar} H_1 \mathrm{e}^{-itH_0/\hbar} = \mathrm{e}^{\xi C} B \mathrm{e}^{-\xi C}$$

式中，$\xi = i\omega t$，$C = a^+ a + \frac{1}{2}$，$B = \alpha\hbar(a^+ + a)$。利用式(1.4)得到

$$H_I(t) = \alpha\hbar(a^+ \mathrm{e}^{i\omega t} + a\mathrm{e}^{-i\omega t}) \tag{1.75}$$

式(1.74)等号右边第二项和第三项分别为

$$-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H_I(t_1)\mathrm{d}t_1 = -\frac{\alpha}{\omega}[a^+(\mathrm{e}^{i\omega t}-1) - a(\mathrm{e}^{-i\omega t}-1)]$$

$$\begin{aligned}
&\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t \left[H_I(t_1)\int_0^{t_1} H_I(t_2)\mathrm{d}t_2 \right]\mathrm{d}t_1 \\
&= -\frac{i}{\hbar}\int_0^t \alpha\hbar(a^+\mathrm{e}^{i\omega t_1} + a\mathrm{e}^{-i\omega t_1})\left(-\frac{\alpha}{\omega}\right)[a^+(\mathrm{e}^{i\omega t_1}-1) - a(\mathrm{e}^{-i\omega t_1}-1)]\mathrm{d}t_1 \\
&= \frac{\alpha^2}{\omega^2}\left[a^+a^+ + \frac{1}{2}(\mathrm{e}^{i\omega t}-1)^2 + a^+a(\mathrm{e}^{i\omega t}-1-i\omega t) + aa^+(\mathrm{e}^{-i\omega t}-1+i\omega t) - aa\frac{1}{2}(\mathrm{e}^{-i\omega t}-1)^2 \right]
\end{aligned}$$

将上两式代入式(1.74)中，并将其作用于初态 $|n\rangle_I = |n\rangle$ 上，得到

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle_I = U_I(t,0)|n\rangle_I &= |n\rangle - \frac{\alpha}{\omega}\left[\sqrt{n+1}(\mathrm{e}^{i\omega t}-1)|n+1\rangle - \sqrt{n}(\mathrm{e}^{-i\omega t}-1)|n-1\rangle \right] \\
&+ \frac{\alpha^2}{\omega^2}\left\{ \frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}}{2}(\mathrm{e}^{i\omega t}-1)^2|n+2\rangle \right. \\
&- \left[(2n+1)(1-\cos\omega t) + \frac{1}{2}(\mathrm{e}^{i\omega t}-\mathrm{e}^{-i\omega t}) - i\omega t \right]|n\rangle \\
&\left. + \frac{\sqrt{n(n-1)}}{2}(\mathrm{e}^{-i\omega t}-1)^2|n-2\rangle \right\}
\end{aligned} \tag{1.76}$$

可以看到，式(1.76)的结果与式(1.72)完全一致。

3．海森伯绘景

为了能用海森伯运动方程解决问题，我们转而讨论算符。虽然算符 $a_H(t)$ 不对应物理量，但它是物理量 x 和 p 的线性函数，因此也服从海森伯运动方程

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}a_H(t) &= [a_H(t), H] \\
&= [a_H(t), H_0] + [a_H(t), H_1] \\
&= \hbar\omega[a, a^+a] + \varepsilon\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[a^+, a] \\
&= \hbar\omega a_H(t) + \alpha\hbar
\end{aligned} \tag{1.77}$$

计算中用到了

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a^{+}+a)\text{，}\quad H=\hbar\omega\left(a^{+}a+\frac{1}{2}\right)\text{，}\quad [a,a^{+}]=1$$

方程式(1.77)的解为

$$a_H(t)=\mathrm{e}^{-i\omega t}[a_H(0)+f(t)] \tag{1.78}$$

$$f(t)=-\frac{\alpha}{\omega}(\mathrm{e}^{i\omega t}-1) \tag{1.79}$$

常数 α 反映了微扰 H_1 对 $a_H(t)$ 影响的大小。

下面我们来进一步计算。首先计算 ${}_H\langle n(0)|0(t)\rangle_H$。由

$$|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^{+}\right)^n|0\rangle$$

可以得到

$$|n(t)\rangle_H=\mathrm{e}^{itH/\hbar}|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a_H^{+}(t)\right)^n|0(t)\rangle_H$$

所以

$$\begin{aligned}{}_H\langle n(0)|0(0)\rangle_H&=\frac{1}{\sqrt{n!}}{}_H\langle 0(0)|(a_H(0))^n|0(t)\rangle_H\\&=\frac{1}{\sqrt{n!}}{}_H\langle 0(0)|(a_H(t)\mathrm{e}^{i\omega t}-f(t))^n|0(t)\rangle_H\\&=\frac{1}{\sqrt{n!}}[-f(t)]^n{}_H\langle 0(0)|0(t)\rangle_H\end{aligned} \tag{1.80}$$

计算中最后一个等式用到了 $a_H(t)|0(t)\rangle_H=0$，即 $a|0\rangle=0$ 在海森伯绘景下的形式。式中 ${}_H\langle 0(0)|0(t)\rangle_H$ 可如下求出：

$$\begin{aligned}1={}_H\langle 0(t)|0(t)\rangle_H&={}_H\langle 0(t)|\left[\sum_n|n(0)\rangle_H\,{}_H\langle n(0)|\right]|0(t)\rangle_H\\&=\sum_n\left|{}_H\langle n(0)|0(t)\rangle_H\right|^2=\sum_n\frac{1}{n!}|f(t)|^{2n}\left|{}_H\langle 0(0)|0(t)\rangle_H\right|^2\\&=\mathrm{e}^{|f(t)|^2}\left|{}_H\langle 0(0)|0(t)\rangle_H\right|^2\end{aligned}$$

所以

$${}_H\langle 0(0)|0(t)\rangle_H=\gamma(t)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|f(t)|^2}$$

式中，$\gamma(t)$ 为模为 1 的复数。为求概率，取 $\gamma(t)=1$ 即可。于是，式(1.80)可写为

$${}_H\langle n(0)|0(t)\rangle_H=\frac{1}{\sqrt{n!}}\gamma(t)[-f(t)]^n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|f(t)|^2} \tag{1.81}$$

其次，我们来计算概率幅 ${}_H\langle n(0)|m(t)\rangle_H=c_{mn}(t)$，有

$$c_{mn}(t)={}_H\langle n(0)|m(t)\rangle_H=\frac{1}{\sqrt{n!}}{}_H\langle n(0)|\left[a_H^{+}(t)\right]^m|0(t)\rangle_H \tag{1.82}$$

利用式(1.78)，有

$$[a_H(t)]^m\left|n(0)\right\rangle_H = \mathrm{e}^{-im\omega t}\sum_{v=v_0}^{m}\frac{m!}{v!(m-v)!}f^v(t)[a_H(0)]^{m-v}\left|n(0)\right\rangle_H$$
$$= \mathrm{e}^{-im\omega t}\sum_{v=v_0}^{m}\frac{m!}{v!(m-v)!}f^v(t)\sqrt{\frac{n!}{(n-m+v)!}}\left|(n-m+v)(0)\right\rangle_H$$

式中，$\left|(n-m+v)(0)\right\rangle_H$ 表示 $\left|k(0)\right\rangle_H$，其中 $k=n-m+v$。而对 v 取和时 v 的下限为

$$v_0=\begin{cases}m-n, & m\geqslant n\\ 0, & m<n\end{cases} \tag{1.83}$$

将前面所求结果的左矢形式代入式(1.82)，并利用式(1.81)，得

$$\begin{aligned} c_{mn}(t) &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\mathrm{e}^{im\omega t}\sum_{v=v_0}^{m}\frac{m!}{v!(m-v)!}f^{*v}(t)\sqrt{\frac{n!}{(n-m+v)!}}\ {}_H\left\langle (n-m+v)(0)\middle|0(t)\right\rangle_H \\ &= \gamma(t)\mathrm{e}^{im\omega t}\sqrt{\frac{n!}{m!}}e^{-\frac{1}{2}\left|f(t)^2\right|}\cdot[-f(t)]^{n-m}\sum_{v=v_0}^{m}\frac{m!}{v!(m-v)!(n-m+v)!}[-\left|f(t)\right|^2]^v \end{aligned} \tag{1.84}$$

式中，$f(t)$ 为式(1.79)，取和下限 v_0 之值见式(1.83)。式(1.84)是我们所求概率幅的最后结果，由于计算过程中未做任何近似，因而这是一个精确结果。

现在我们具体计算处于 n 态的谐振子，在 $t=0$ 时加入微扰 H_1，经 t 时间后撤去微扰时，它的能量取 E_m 的概率。

由于 ε 或 α 是反映微扰大小数量级的量，概率幅式(1.84)的平方可以写成 ε 的多项式，其中 ε 的幂次反映计算的精度。下面约定将概率计算精确到 ε^4 量级。

当 $m=n$ 时，由式(1.84)得到

$$\begin{aligned} c_{nn}(t) &= \gamma(t)\mathrm{e}^{in\omega t}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left|f(t)\right|^2}\sum_{v=0}\frac{n!}{v!(n-v)!\ \ v!}[-\left|f(t)\right|^2]^v \\ &= \gamma(t)\mathrm{e}^{in\omega t}\left[1-\frac{1}{2}\left|f(t)\right|^2+\frac{1}{2}\cdot\frac{1}{4}\left|f(t)\right|^4\right]\left[1-n\left|f(t)\right|^2+\frac{n(n-1)}{4}\left|f(t)\right|^4\right] \\ &= \gamma(t)\mathrm{e}^{in\omega t}\left\{1-\frac{\varepsilon^2}{\omega^2}\frac{1}{2m\hbar\omega}(2n+1)(1-\cos\omega t)\right. \\ &\quad \left.+\frac{\varepsilon^4}{\omega^4}\frac{1}{(2m\hbar\omega)^2}\left[n(n+1)+\frac{1}{2}\right](1-\cos\omega t)^2\right\} \end{aligned} \tag{1.85}$$

其余的概率幅为

$$\begin{cases} c_{n-3,n}=0(\varepsilon^5) \\ c_{n-2,n}=\gamma(t)\mathrm{e}^{in\omega t}\dfrac{\varepsilon^2}{\omega^2}\dfrac{1}{2m\hbar\omega}\dfrac{1}{2}\sqrt{n(n-1)}(1-\mathrm{e}^{-i\omega t})^2 \\ c_{n-1,n}=\gamma(t)\mathrm{e}^{in\omega t}\dfrac{\varepsilon}{\omega}\dfrac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\sqrt{n}(1-\mathrm{e}^{-i\omega t})\left[1-\dfrac{\varepsilon^2}{\omega^2}\dfrac{1}{2m\hbar\omega}n(1-\cos\omega t)\right] \\ c_{n+1,n}=-\gamma(t)\mathrm{e}^{in\omega t}\dfrac{\varepsilon}{\omega}\dfrac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\sqrt{n+1}(1-\mathrm{e}^{-i\omega t})\left[1-\dfrac{\varepsilon^2}{\omega^2}\dfrac{1}{2m\hbar\omega}(n+1)(1-\cos\omega t)\right] \\ c_{n+2,n}=\gamma(t)\mathrm{e}^{in\omega t}\dfrac{\varepsilon^2}{\omega^2}\dfrac{1}{2m\hbar\omega}\dfrac{1}{2}\sqrt{(n+1)(n+2)}(1-\mathrm{e}^{-i\omega t})^2 \\ c_{n+3,n}=0(\varepsilon^5) \end{cases} \tag{1.86}$$

由上面的 0 概率幅容易得各概率为

$$\begin{cases} |c_{nn}|^2 = 1-(4n+2)\dfrac{\varepsilon^2}{\omega^2}\dfrac{1}{2m\hbar\omega}(1-\cos\omega t)+(6n^2+6n+2)\dfrac{\varepsilon^4}{\omega^4}\dfrac{1}{(2m\hbar\omega)^2}(1-\cos\omega t)^2 \\ |c_{n-1,n}|^2 = 2n\dfrac{\varepsilon^2}{\omega^2}\dfrac{1}{2m\hbar\omega}(1-\cos\omega t)-4n^2\dfrac{\varepsilon^4}{\omega^4}\dfrac{1}{(2m\hbar\omega)^2}(1-\cos\omega t) \\ |c_{n+1,n}|^2 = (2n+2)\dfrac{\varepsilon^2}{\omega^2}\dfrac{1}{2m\hbar\omega}(1-\cos\omega t)-4(n+1)^2\dfrac{\varepsilon^4}{\omega^4}\dfrac{1}{(2m\hbar\omega)^2}(1-\cos\omega t)^2 \\ |c_{n-2,n}|^2 = n(n-1)\dfrac{\varepsilon^4}{\omega^4}\dfrac{1}{(2m\hbar\omega)^2}(1-\cos\omega t)^2 \\ |c_{n+2,n}|^2 = (n+1)(n+2)\dfrac{\varepsilon^4}{\omega^4}\dfrac{1}{(2m\hbar\omega)^2}(1-\cos\omega t)^2 \\ |c_{m,n}|^2 = 0(\varepsilon^5) \qquad (m>n+2,\quad m<n-2) \end{cases} \tag{1.87}$$

这些概率之和为 $1+O(\varepsilon^5)$。

1.4 矢量空间的直和与直积

在矢量空间 R 中，部分基矢的集合(也可以是无限多个)若满足矢量空间的运算规则，则此集合形成原矢量空间的子空间。剩下的基矢集形成另一个或多个子空间。不同子空间的矢量是相互正交的。因此，不属于某个子空间的矢量就不能表示为那个子空间中基矢的线性组合。例如，三维位矢空间中的矢量不能表示为二维位矢空间中矢量的叠加。一维位矢空间是二维空间的子空间。

1.4.1 直和空间

一般来说，某个大矢量空间可能分解成一些子空间的直和。设矢量空间 R_1 中的矢量为 $|\alpha\rangle,|\beta\rangle,\cdots$；算符为 $A,B,\cdots$。而矢量空间 R_2 中的矢量为 $|\psi\rangle,|\varphi\rangle,\cdots$；算符为 $L,M,\cdots$。考虑一种“双矢量”作为我们的数学对象，双矢量即取 R_1 空间中一个矢量与 R_2 空间中一个矢量放在一起(不计次序)，做如下表示：

$$|\alpha\rangle\oplus|\psi\rangle, \quad |\beta\rangle\oplus|\varphi\rangle$$

它们分别称为矢量 $|\alpha\rangle$ 与 $|\psi\rangle$、矢量 $|\beta\rangle$ 与 $|\varphi\rangle$ 的直和。这个直和及其叠加可以构成一个新的矢量空间。下面定义这个矢量空间中的如下运算规则。

1. 运算规则

(1) 加法：$\big(|\alpha\rangle\oplus|\psi\rangle\big)+\big(|\beta\rangle\oplus|\varphi\rangle\big)=\big(|\alpha\rangle+|\beta\rangle\big)\oplus\big(|\psi\rangle+|\varphi\rangle\big)$。

(2) 零矢量：$|O\rangle=\left|O^{(1)}\right\rangle\oplus\left|O^{(2)}\right\rangle$。

(3) 数乘: $\big(|\alpha\rangle\oplus|\psi\rangle\big)a=|\alpha\rangle a\oplus|\psi\rangle a$， a 为复数。

(4) 内积: $\big(\langle\alpha|\oplus\langle\psi|\big)\big(|\beta\rangle\oplus|\varphi\rangle\big)=\langle\alpha|\beta\rangle+\langle\psi|\varphi\rangle$。

(5) 算符直和：$(A\oplus L)\big(|\alpha\rangle\oplus|\psi\rangle\big)=A|\alpha\rangle\oplus L|\psi\rangle$。

(6) 算符加法：$(A\oplus L)+(B\oplus M)=(A+B)\oplus(L+M)$。

(7) 算符乘法：$(A\oplus L)(B\oplus M)=AB\oplus LM$。

算符乘法可以简单证明如下。

$$
\begin{aligned}
(A\oplus L)(B\oplus M)\big(|\alpha\rangle\oplus|\psi\rangle\big)&=(A\oplus L)\big[B|\alpha\rangle\oplus M|\psi\rangle\big]\\
&=AB|\alpha\rangle\oplus LM|\psi\rangle\\
&=(AB\oplus LM)\big(|\alpha\rangle\oplus|\psi\rangle\big)
\end{aligned}
$$

其中，设$|\alpha\rangle\oplus|\psi\rangle$为直和空间中任一矢量，所以等式成立。

2．直和空间 $R_1\oplus R_2$ 的维数

设 R_1 中一组基矢 $\{|\nu_i\rangle\}(i=1,2,\cdots,n_1)$，是算符 K 的本征矢（K 表象）；R_2 中一组基矢 $\{|\varepsilon_m\rangle\}(m=1,2,\cdots,n_2)$，是算符 P 的本征矢（P 表象），则直和空间中的任意矢量$|\alpha\rangle\oplus|\psi\rangle$都可以写成下式：

$$
|\alpha\rangle\oplus|\psi\rangle=\sum_i|\nu_i\rangle\alpha_i\oplus\sum_m|\varepsilon_m\rangle\psi_m \tag{1.88}
$$

由此可以看出，若取直和空间的基矢为

$$
\left\{|\nu_i\rangle\oplus\left|O^{(2)}\right\rangle,\quad \left|O^{(1)}\right\rangle\oplus|\varepsilon_m\rangle\right\}\ (i=1,2,\cdots,n_1,\quad m=1,2,\cdots,n_2) \tag{1.89}
$$

则任意矢量$|\alpha\rangle\oplus\langle\psi|$可写成上述$n_1+n_2$个基矢的叠加。所以直和空间的维数为$n=n_1+n_2$。在直和空间中，以式(1.89)为基矢的表象称为 KP 表象。因为它们是算符$K\oplus P$的本征矢，容易证明它们是归一化并且彼此正交的。

3．矢量和算符的矩阵表示

为具体起见，我们取 R_1 为二维空间，$n_1=2$；R_2 为三维空间，$n_2=3$；基矢分别为$\{|\nu_1\rangle,|\nu_2\rangle\}$和$\{|\varepsilon_1\rangle,|\varepsilon_2\rangle,|\varepsilon_3\rangle\}$。此时直和空间为五维，分别为$|\nu_1\rangle\oplus|O\rangle$、$|\nu_2\rangle\oplus|O\rangle$、$|O\rangle\oplus|\varepsilon_1\rangle$、$|O\rangle\oplus|\varepsilon_2\rangle$和$|O\rangle\oplus|\varepsilon_3\rangle$。由于$|\alpha\rangle$在 K 表象中表示为

$$
|\alpha\rangle=\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\end{pmatrix},\quad \alpha_i=\langle\nu_i|\alpha\rangle
$$

$|\psi\rangle$在 P 表象中表示为

$$
|\psi\rangle=\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\end{pmatrix},\quad \psi_m=\langle\varepsilon_m|\psi\rangle
$$

则矢量$|\alpha\rangle\oplus|\psi\rangle$的 KP 表象矩阵形式为

$$
|\alpha\rangle\oplus|\psi\rangle=\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\\ \psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\end{pmatrix}
$$

类似地，在 R_1 和 R_2 中，算符 A 和 L 的矩阵形式分别为

$$
\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}A_{11} & A_{12}\\ A_{21} & A_{22}\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{L}=\begin{pmatrix}L_{11} & L_{12} & L_{13}\\ L_{21} & L_{22} & L_{23}\\ L_{31} & L_{32} & L_{33}\end{pmatrix}
$$

则

$$A \oplus L = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 & 0 & 0 \\ A_{21} & A_{22} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L_{11} & L_{12} & L_{13} \\ 0 & 0 & L_{21} & L_{22} & L_{23} \\ 0 & 0 & L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{pmatrix}$$

其中，$A_{ij} = \langle \nu_i | A | \nu_j \rangle$，$L_{mn} = \langle \varepsilon_m | L | \varepsilon_n \rangle$。值得一提的是，有时也在直和空间说算符 A，实际上是指算符 $A \oplus O^{(2)}$；说算符 L，实际上是指算符 $O^{(1)} \oplus L$。这里 $O^{(1)}$ 和 $O^{(2)}$ 分别是 R_1 和 R_2 中的零算符。

以上可以推广到多个方阵情况，这时各个方阵沿主对角线排列成一系列方块，把这样的矩阵称为分块对角矩阵，$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B} \oplus \boldsymbol{C} \cdots$，其中 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}, \cdots$ 分别为分块矩阵，$\boldsymbol{M}$ 为直和空间矩阵。它有如下性质：

（1）
$$\det \boldsymbol{M} = (\det \boldsymbol{A})(\det \boldsymbol{B})(\det \boldsymbol{C}) \tag{1.90}$$

（2）
$$\mathrm{Tr}\boldsymbol{M} = \mathrm{Tr}\boldsymbol{A} + \mathrm{Tr}\boldsymbol{B} + \mathrm{Tr}\boldsymbol{C} + \cdots \tag{1.91}$$

另外，经过相似变换后就能分解成分块对角矩阵的表示，我们称之为可约表示（reducible representation），否则称为不可约表示（inreducible representation）。相应地存在如下重要定理：每一个可约表示都可以唯一地分解为不可约表示的直和。

1.4.2 直积空间

直积是由两个或多个已知空间构成一个较大空间的另一种做法。例如，设 R_1 态矢量为 $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \cdots\}$，算符为 $A, B, \cdots$；R_2 态矢量为 $\{|\psi\rangle, |\varphi\rangle, \cdots\}$，算符为 $L, M, \cdots$。$|\alpha\rangle$ 与 $|\psi\rangle$ 的直积（不必考虑前后次序）为

$$|\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle \equiv |\alpha\rangle |\psi\rangle \equiv |\alpha\psi\rangle \tag{1.92}$$

算符 $A \otimes L$ 定义为

$$(A \otimes L)\big(|\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle\big) = A|\alpha\rangle \otimes L|\psi\rangle \tag{1.93}$$

容易看出，算符只对自己空间矢量起作用。

1．直积空间 $R_1 \otimes R_2$ 中的运算规则

（1）加法：$|\alpha\psi\rangle + |\beta\varphi\rangle$ 是一个新矢量。
（2）数乘：$|\alpha\rangle|\psi\rangle a = \big(|\alpha\rangle a\big)|\psi\rangle = |\alpha\rangle\big(|\psi\rangle a\big)$，其中 a 为复数。
（3）内积：$\big(\langle\alpha|\langle\psi|\big)\big(|\beta\rangle|\varphi\rangle\big) = \langle\alpha|\beta\rangle\langle\psi|\varphi\rangle$。
（4）分配律：$\big(|\alpha\rangle + |\beta\rangle\big)|\psi\rangle = |\alpha\rangle|\psi\rangle + |\beta\rangle|\psi\rangle$。

2．算符运算规则

（1）
$$(A+B) \otimes L = A \otimes L + B \otimes L \tag{1.94}$$

（2）
$$(A \otimes L)(B \otimes M) = AB \otimes LM \tag{1.95}$$

（3）
$$(A \otimes L)^* = A^* \otimes L^*;\quad (A \otimes L)^{\mathrm{T}} = A^{\mathrm{T}} \otimes L^{\mathrm{T}};\quad (A \otimes L)^+ = A^+ \otimes L^+ \tag{1.96}$$

值得注意的是，在直积空间中，A 是 $A \otimes I^{(2)}$ 的简写，L 是 $I^{(1)} \otimes L$ 的简写。

$$A + L = A \otimes I^{(2)} + I^{(1)} \otimes L \tag{1.97}$$

式中，$I^{(1)}$ 与 $I^{(2)}$ 分别是 R_1 和 R_2 中的单位算符。

3．直积空间的维数

设在 R_1 中取 K 表象，基矢为 $\{|\nu_i\rangle\}$，任意矢量为 $|\alpha\rangle$；R_2 中取 P 表象，基矢为 $\{|\varepsilon_m\rangle\}$，任意矢量为 $|\psi\rangle$。则有

$$|\alpha\rangle = \sum_i |\nu_i\rangle \alpha_i \text{，} \quad \alpha_i = \langle \nu_i | \alpha \rangle \tag{1.98}$$

$$|\psi\rangle = \sum_m |\varepsilon_m\rangle \psi_m \text{，} \quad \psi_m = \langle \varepsilon_m | \psi \rangle \tag{1.99}$$

这时

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle|\psi\rangle \equiv |\alpha\psi\rangle \equiv |\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle &= \sum_i \sum_m (|\nu_i\rangle \otimes |\varepsilon_m\rangle) \alpha_i \psi_m \\ &\equiv \sum_{im} |E_{im}\rangle (\alpha\psi)_{im} \end{aligned}$$

可见，若在直积空间中取 $|\nu_i\rangle \otimes |\varepsilon_m\rangle$ 为基矢，则可以叠加出所有矢量，这些基矢是用两个下标 i 和 m 编号的，有

$$|E_{im}\rangle \equiv |\nu_i\rangle \otimes |\varepsilon_m\rangle = |\nu_i\rangle |\varepsilon_m\rangle \tag{1.100}$$

基矢 $|E_{im}\rangle$ 是算符 $K \otimes P$ 的本征矢，所以以 $|E_{im}\rangle$ 为基矢的表象称 KP 表象。而 $|E_{im}\rangle$ 共有 $n_1 \times n_2$ 个，即直积空间的维数等于两空间维数的乘数，$n = n_1 \times n_2$。

4．直积空间态矢量和算符的矩阵形式

为简单起见，我们仍取 $n_1 = 2$，$n_2 = 3$，则在 KP 表象中 $|\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle$ 的矩阵形式为

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle \otimes |\psi\rangle &= \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \alpha_1\psi_1 \\ \alpha_1\psi_2 \\ \alpha_1\psi_3 \\ \alpha_2\psi_1 \\ \alpha_2\psi_2 \\ \alpha_3\psi_3 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \alpha_1\psi \\ \alpha_2\psi \end{pmatrix} \end{aligned}$$

直积算符 $A \otimes L$ 在 KP 表象的矩阵元为

$$(A \otimes L)_{im,jn} = \langle \nu_i \varepsilon_m | (A \otimes L) | \nu_j \varepsilon_n \rangle = A_{ij} L_{mn}$$

写成矩阵形式为

$$\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & L_{13} \\ L_{21} & L_{22} & L_{23} \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11}\boldsymbol{L} & A_{12}\boldsymbol{L} \\ A_{21}\boldsymbol{L} & A_{22}\boldsymbol{L} \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} A_{11}L_{11} & A_{11}L_{12} & A_{11}L_{13} & A_{12}L_{11} & A_{12}L_{12} & A_{12}L_{13} \\ A_{11}L_{21} & A_{11}L_{22} & A_{11}L_{23} & A_{12}L_{21} & A_{12}L_{22} & A_{12}L_{23} \\ A_{11}L_{31} & A_{11}L_{32} & A_{11}L_{33} & A_{12}L_{31} & A_{12}L_{32} & A_{12}L_{33} \\ A_{21}L_{11} & A_{21}L_{12} & A_{21}L_{13} & A_{22}L_{11} & A_{22}L_{12} & A_{22}L_{13} \\ A_{21}L_{21} & A_{21}L_{22} & A_{21}L_{23} & A_{22}L_{21} & A_{22}L_{22} & A_{22}L_{23} \\ A_{21}L_{31} & A_{21}L_{32} & A_{21}L_{33} & A_{22}L_{31} & A_{22}L_{32} & A_{22}L_{33} \end{pmatrix}$$

另外，可以证明

$$\mathrm{Tr}(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{L})=\mathrm{Tr}\boldsymbol{A}+\mathrm{Tr}\boldsymbol{L} \tag{1.101}$$

以上是以两个矢量空间的直积为例进行的讨论，实际上可以用同样的方法讨论两个以上空间的直积。

1.5 密 度 矩 阵

我们知道，凡是能用希尔伯特空间中的一个矢量描述的状态均叫作纯态，之前我们主要谈到的都是纯态。然而，对于一些复杂情况，量子系统所处的状态无法用一个态矢量来描述。即系统并不处在一个确定的态中，而是有可能处于$|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle,\cdots$各个态中，分别有概率$p_1,p_2,\cdots$。这种状态无法用一个态矢量来表示，称为混合态。

纯态和混合态是完全不同的两种状态。试讨论一个物理量A在这两种态中的取值概率。设A的本征矢量为$|a_i\rangle$，相应的本征值是a_i。再设两个纯态$|\psi_1\rangle$和$|\psi_2\rangle$，通过叠加得到另一个状态: $|\psi\rangle=c_1|\psi_1\rangle+c_2|\psi_2\rangle$。在这个纯态中，物理量$A$取值$a_i$的概率为

$$\left|\langle a_i|\psi\rangle\right|^2=\left|\langle a_i|\psi_1\rangle c_1+\langle a_i|\psi_2\rangle c_2\right|^2 \tag{1.102}$$

在混合态中，若系统处于$|\psi_1\rangle$态，则A取a_i的概率幅为$\langle a_i|\psi_1\rangle$；若系统处于$|\psi_2\rangle$态，则$A$取$a_i$的概率幅为$\langle a_i|\psi_2\rangle$。系统既然以概率$p_1$处于$|\psi_1\rangle$态，以概率$p_2$处于$|\psi_2\rangle$态，因此，$A$取$a_i$的概率应为

$$\left|\langle a_i|\psi_1\rangle\right|^2 p_1+\left|\langle a_i|\psi_2\rangle\right|^2 p_2 \tag{1.103}$$

这与式(1.102)是不同的。

以上的说法若在坐标表象中说，则纯态的态函数为

$$\psi(x)=\psi_1(x)c_1+\psi_2(x)c_2$$

而混合态的态函数可写为

$$\begin{cases}\psi_1(x): p_1\\ \psi_2(x): p_2\end{cases}$$

粒子处于x_0点的概率在纯态中为

$$\left|\psi(x_0)\right|^2=\left|\psi_1(x_0)c_1+\psi_2(x_0)c_2\right|^2$$

而在混合态中为

$$\left|\psi_1(x_0)\right|^2 p_1+\left|\psi_2(x_0)\right|^2 p_2$$

由此看出，在纯态中两个态$\psi_1(x)$和$\psi_2(x)$发生干涉现象，而混合态则不发生干涉，各自表现

出自己的位置概率。所以，两个态形成纯态是相干叠加，而形成混合态是不相干叠加。前者是概率幅的相加，而后者则是概率本身的相加。我们说微观粒子表现出波动性，正是指相干叠加而言的。

1.5.1 纯态的密度算符(矩阵)

我们可以用一个单一的数学量去描述混合态，这个量就是密度算符。下面先从纯态来介绍密度算符。

1．密度算符

考虑随时间的演化，量子态记为$|\psi(t)\rangle$，并设已归一化：$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle=1$。相应的密度算符定义为

$$\rho(t)\equiv|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \tag{1.104}$$

容易证明

$$\rho^{+}=\rho,\quad \rho^{2}=\rho \tag{1.105}$$

2．密度矩阵

如果采用一个具体表象，例如，F表象(分立情形，$\hat{F}|n\rangle=f_n|n\rangle$)，则与量子态$|\psi\rangle$相应的密度算符可表示成如下矩阵形式，称为密度矩阵。

$$\rho_{nn'}(t)=\langle n|\rho(t)|n'\rangle=\langle n|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|n'\rangle=c_n(t)c_{n'}^{*}(t) \tag{1.106}$$

其对角元为

$$\rho_{nn}(t)=|c_n(t)|^2=|\langle n|\psi(t)\rangle|^2\geqslant 0 \tag{1.107}$$

由$|\psi\rangle$的归一化条件，可得密度矩阵的对角元之和为1

$$\mathrm{Tr}\rho=\sum_n|c_n(t)|^2=1 \tag{1.108}$$

所以，密度算符ρ可以表示为

$$\begin{aligned}\rho=|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|&=\sum_{nn'}|n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|n'\rangle\langle n'|\\&=\sum_{nn'}c_n(t)c_{n'}^{*}(t)|n\rangle\langle n'|\\&=\sum_{nn'}\rho_{nn'}(t)|n\rangle\langle n'|\end{aligned} \tag{1.109}$$

从式(1.106)可以看出，如果$\rho_{nn'}=0$，则$c_n=0$或$c_{n'}=0$，二者必居其一。而只当c_n和$c_{n'}$均不为0时，$\rho_{nn'}$才不为0。所以，与量子态$|\psi\rangle$相应的密度矩阵的矩阵元$\rho_{nn'}$出现(不为0)时，量子态$|\psi\rangle$中必含有$|n\rangle$和$|n'\rangle$态。$\rho_{nn'}$的值与$|n\rangle$和$|n'\rangle$态在$|\psi\rangle$态中出现的概率和相对相位都有关。如$|\psi\rangle$是算符F的某一本征态$|k\rangle$，则$\rho_{nn'}=\langle n|k\rangle\langle k|n'\rangle=\delta_{nk}\delta_{n'k}$，则$\rho$是一个对角矩阵，而且对角元中只有一个元素$\rho_{kk}$不为0($\rho_{kk}=1$)。

3．力学量平均值

在$|\psi\rangle$态下，用密度矩阵计算力学量G的平均值为

$$\langle G\rangle\equiv\bar{G}=\langle\psi|G|\psi\rangle=\sum_{nn'}\langle\psi|n\rangle\langle n|G|n'\rangle\langle n'|\psi\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= \sum_{nn'} c_n^* G_{nn'} c_{n'} = \sum_{nn'} \rho_{n'n} G_{nn'} \\
&= \sum_{nn'} \langle n' | \rho | n \rangle \langle n | G | n' \rangle \\
&= \sum_{n'} (\rho G)_{n'n'} = \sum_{n} (G\rho)_{nn}
\end{aligned}
$$

所以

$$\langle G \rangle \equiv \bar{G} = \mathrm{Tr}(\rho G) = \mathrm{Tr}(G\rho) \tag{1.110}$$

在后面公式的表述中，上述定义的两种平均值的表示符号将都会用到。下面我们来看一个特例。

对于 $G = F$ 的情况，$G_{nn'} = f_n \delta_{nn'}$，$\langle G \rangle = \langle F \rangle = \sum_n |c_n|^2 f_n$。测量 F 时，得本征值 f_n 值的概率为

$$p(f_n) = \mathrm{Tr}(\Pi_n \rho) = \mathrm{Tr}(\rho \Pi_n) = |c_n|^2 \tag{1.111}$$

式中，$\Pi_n = |n\rangle\langle n|$，为投影算符。式(1.111)可如下简单求得：

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Tr}(\rho \Pi_n) &= \mathrm{Tr}\left[\sum_{n'n''} c_{n'} c_{n''}^* |n'\rangle \langle n'' | n \rangle \langle n|\right] \\
&= \mathrm{Tr}\left[\sum_{n'} c_{n'} c_n^* |n'\rangle \langle n|\right] \\
&= \sum_{n'} c_{n'} c_n^* \mathrm{Tr}\left[|n'\rangle\langle n|\right] \\
&= |c_n|^2
\end{aligned}
$$

4．密度算符 $\rho(t)$ 随时间的演化

利用薛定谔方程式(1.26)得到

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho(t) &= \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(t)| \\
&= \frac{H}{i\hbar}|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| + |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\frac{H}{-i\hbar} \\
&= \frac{1}{i\hbar}[H\rho(t) - \rho(t)H]
\end{aligned}
$$

因而得到密度算符的运动方程，称作刘维-冯·诺依曼方程：

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho(t) = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho(t)] \tag{1.112}$$

若定义量子形式的刘维算符：$L = \frac{1}{i\hbar}[H,]$，则上式可以写为

$$\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = L\rho \tag{1.113}$$

式(1.113)又称为刘维方程，L 常称作刘维超算符，这是由于它是作用在一个算符上得到另一个算符。如果选择一个具体的表象，则式(1.113)表述成一个矩阵方程。特别地，若选能量表象，即以

H 本征矢 $|n\rangle$ 为基矢的表象（$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$，$n$ 为一组量子数完全集），则由方程式(1.112)得

$$\langle n|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho(t)|n'\rangle = \frac{1}{i\hbar}\langle n|[H,\rho(t)]|n'\rangle$$

即

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_{nn'}(t) = \frac{1}{i\hbar}(E_n - E_{n'})\rho_{nn'} \tag{1.114}$$

所以

$$\rho_{nn'}(t) = \rho_{nn'}(0)\mathrm{e}^{-i\omega_{nn'}t} \tag{1.115}$$

其中，$\omega_{nn'} = (E_n - E_{n'})/\hbar$。即非对角元 $\rho_{nn'}(t)$（$n \neq n'$）以角频率 $\omega_{nn'}$ 振荡，而对角元不随时间变化。

5．坐标和动量表象中的密度算符

在坐标表象中，密度算符 ρ 的矩阵元可表示为

$$\rho(\vec{r},\vec{r}') = \langle\vec{r}|\rho|\vec{r}'\rangle = \langle\vec{r}|\psi\rangle\langle\psi|\vec{r}'\rangle = \psi(\vec{r})\psi^*(\vec{r}') \tag{1.116}$$

对角元为

$$\rho(\vec{r},\vec{r}) = \psi(\vec{r})\psi^*(\vec{r}) \tag{1.117}$$

即粒子在坐标空间的概率密度。

与此类似，动量表象中密度矩阵元可表示为

$$\rho(\vec{p},\vec{p}') = \langle\vec{p}|\rho|\vec{p}'\rangle = \langle\vec{p}|\psi\rangle\langle\psi|\vec{p}'\rangle = \phi(\vec{p})\phi^*(\vec{p}')$$

对角元为

$$\rho(\vec{p},\vec{p}) = \phi(\vec{p})\phi^*(\vec{p})$$

由上面的介绍可以知道，对于纯态 ψ，凡是能用态矢量 $|\psi\rangle$ 给出的信息，都可以同样用密度算符 ρ 给出。因此，密度算符 ρ 是可以完全代替态矢量来描写纯态的另一种数学量。

1.5.2　混合态的密度矩阵

在大多数实验中，制备出来的体系并非处于一个纯态，如从温度为 T 的炉子中蒸发出来的原子、自然光源发出的非偏振光等。人们对这种状态下的体系，能了解到的信息是不完备的，为此需要推广上面讨论过的密度算符的概念。

1．混合态概念

一个量子系统如果不能用一个态矢量，而需要用一组态矢量及其对应的概率来描述，则称它处于混合态(mixed state)。例如，研究 N 个原子组成的量子系统，如果每个原子都处于相同的状态 $|\psi\rangle$，则系统处于纯态；反之，若 N 个原子的态各不相同，则系统不处于纯态，不能用一个态矢量来描述系统的态。在这种情况下，系统所处的态可能为 $|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle,\cdots$，所对应的概率集为 $p_1,p_2,\cdots$，此时的系统处于混合态。因此，我们需要用一系列态矢量及它们所出现的概率，即这两组集合来描述一个混合系综，有

$$\begin{cases}\{|\psi_i\rangle\}:|\psi_1\rangle,|\psi_2\rangle,\cdots,|\psi_N\rangle \\ \{p_i\}:\quad p_1,\quad p_2,\cdots,\quad p_N\end{cases} \tag{1.118}$$

其中，$0 \leqslant p_k \leqslant 1$，$\sum_k p_k = 1$。即体系处于一系列纯态的某种统计混合态。定义此混合态相应的密度算符为

$$\rho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k| = \sum_k p_k \rho_k \tag{1.119}$$

式中，$\rho_k = |\psi_k\rangle\langle\psi_k|$ 是与纯态 $|\psi_k\rangle$ 相应的密度算符。值得注意的是：

(1) 混合态概念并非物理真实，只是用于统计计算的数学工具。

(2) 制备 ρ 有无限多种可能方式。例如，考虑一个二维空间例子：

$$\rho = \frac{1}{2}\left(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|\right) = \frac{1}{2}\left(|+\rangle\langle +| + |-\rangle\langle -|\right)$$

式中，$|\pm\rangle = \left(|0\rangle \pm |1\rangle\right)/\sqrt{2}$，即 ρ 给出了两种表述方式。

(3) 可以证明，若混合态是由一系列互相正交的态所构成的，则密度算符 ρ 的本征矢就是参与构成此混合态的那些态，而相应的本征值就是权重，即可表述为：$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$，其中应有 $\rho|\psi_i\rangle = p_i|\psi_i\rangle$。由此可通过密度矩阵了解混合系综的状态分布。从这个意义上来说，量子力学的密度矩阵与统计物理学中的分布函数相对应。

2．混合态密度算符的性质

不难证明，混合态密度算符除了 $\rho^2 = \rho$ 不再成立之外，具有与纯态相同的性质：

(1) $\rho^+ = \rho$。

(2) $\mathrm{Tr}\rho = \sum_k p_k \mathrm{Tr}\rho_k = \sum_k p_k = 1$。

(3) $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho = \sum_k p_k \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\rho_k = \frac{1}{i\hbar}\sum_k p_k [H, \rho_k] = \frac{1}{i\hbar}\left[H, \sum_k p_k \rho_k\right] = \frac{1}{i\hbar}[H, \rho]$。

(4) $\mathrm{Tr}\rho^2 = \sum_n \sum_{ij} \langle n|\psi_i\rangle p_i \langle\psi_i|\psi_j\rangle p_j \langle\psi_j|n\rangle = \sum_{ij} \langle\psi_j|\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_j\rangle p_i p_j = \sum_i p_i \left[\sum_j \left|\langle\psi_i|\psi_j\rangle\right|^2 p_j\right]$。

式中，$\{|n\rangle\}$ 是一组完备基矢，满足完备性条件：$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$。由于 $p_i \leqslant 1$，方括号中的值一定小于 1，由此，$\mathrm{Tr}\rho^2 \leqslant 1$（等式对纯态成立）。据此，我们可以定义一个纯度 $P(\rho)$ 为

$$P(\rho) = \mathrm{Tr}\rho^2 \tag{1.120}$$

其中，$(1/d) \leqslant P(\rho) \leqslant 1$，$d$ 是所考虑系统所在的希尔伯特空间的维度。显然，$P(\rho)=1$ 对应的量子态为纯态，$P(\rho) < 1$ 对应的量子态为混合态。相应地，可以定义混合度为

$$M(\rho) = 1 - P(\rho) \tag{1.121}$$

(5) 在用 ρ 描述的混合态下，力学量的平均值公式在形式上与纯态下的相同，即

$$\langle G\rangle \equiv \bar{G} = \sum_k p_k \langle\psi_k|G|\psi_k\rangle = \sum_k p_k \mathrm{Tr}(\rho_k G) = \mathrm{Tr}\left(\sum_k p_k \rho_k G\right) = \mathrm{Tr}(\rho G) \tag{1.122}$$

(6) 在 F 表象 $\left(\hat{F}|n\rangle = f_n|n\rangle\right)$ 中，ρ 的矩阵元可表示如下：

$$\rho_{nn'} = \sum_k p_k \langle n|\psi_k\rangle\langle\psi_k|n'\rangle = \sum_k p_k c_n^k (c_{n'}^k)^* \tag{1.123}$$

其中，$c_n^k = \langle n|\psi_k\rangle$，$(c_{n'}^k)^* = \langle\psi_k|n'\rangle$。其对角元为

$$\rho_{nn} = \sum_k p_k \left|c_n^k\right|^2 \geqslant 0 \tag{1.124}$$

其中，$\left|c_n^k\right|^2$ 是在纯态 $|\psi_k\rangle$ 下测量得到 f_n 值的概率。ρ_{nn} 称为混合态下量子态 $|n\rangle$ 的布居（population），即在混合态下测得体系处于 $|n\rangle$ 态的概率。非对角元 $\rho_{nn'}$ 表征在 ρ 描述的混合态下，$|n\rangle$ 与 $|n'\rangle$ 的相干（coherence）。如果非对角元为零，$\rho_{nn'}=0$，则表示在混合态下 $|n\rangle$ 与 $|n'\rangle$ 不相干。

这里需要注意混合态和叠加态的区别：混合态表明人们对系统到底处于哪个态是无知的；而叠加态则表明系统处于叠加的新的态上。

1.5.3 举例说明密度算符

1．第一个例子

设 $|\chi_1\rangle$、$|\chi_2\rangle$ 是自旋 S_z 的本征态，分别对应于本征值 $+\hbar/2$、$-\hbar/2$，比较下列的纯态和混合态。

纯态：$|\chi\rangle = |\chi_1\rangle\frac{1}{2} + |\chi_2\rangle\frac{\sqrt{3}}{2}$；$c_1 = \frac{1}{2}$，$c_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}$

混合态：$\begin{cases} |\chi_1\rangle, p_1 = \frac{1}{4} \\ |\chi_2\rangle, p_2 = \frac{3}{4} \end{cases}$

我们取 S_z 表象，设

$$|\chi_1\rangle \to \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}，\quad |\chi_2\rangle \to \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{1.125}$$

（1）纯态

$$|\chi\rangle \to \begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2}\end{pmatrix}$$

$$\rho = |\chi\rangle\langle\chi| \to \boldsymbol{\rho} = \begin{pmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{1}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4}\\ \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{3}{4}\end{pmatrix}$$

由此可算出

$$\langle S_x\rangle = \mathrm{Tr}(S_x\rho) = \frac{\sqrt{3}}{4}\hbar，\quad \langle S_y\rangle = 0，\quad \langle S_z\rangle = -\frac{1}{4}\hbar$$

（2）混合态

$$\rho' = \sum_{i=1}^{2}|\chi_i\rangle p_i\langle\chi_i| \to \boldsymbol{\rho}' = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\end{pmatrix}\frac{1}{4} + \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\end{pmatrix}\frac{3}{4} = \begin{pmatrix}\frac{1}{4} & 0\\ 0 & \frac{3}{4}\end{pmatrix}$$

由此算出

$$\langle S_x \rangle = 0，\langle S_y \rangle = 0，\langle S_z \rangle = -\frac{1}{4}\hbar$$

下面就本例做几点讨论。首先，由所得结果可明显看出，混合态的确是两个态的不相干叠加。在混合态中，保存了原有两态的特点，如在$|\chi_1\rangle$和$|\chi_2\rangle$态中，S_x和S_y的平均值均为零；在这两个态的混合态中，S_x和S_y的平均值仍保持为零，而S_z的平均值为原两个态的加权平均值。所以可以说，处于混合态中的粒子，以权重p_1处于$|\chi_1\rangle$态中，以权重p_2处于$|\chi_2\rangle$态中。而纯态则不同，本例的纯态有意选择$c_1^2 = p_1$，$c_2^2 = p_2$，S_z的平均值与混合态相同，但两个态叠加后出现了原来两态中都没有的新性质，叠加态的S_x平均值不再为零。其次，我们把式(1.125)改变一下，给$|\chi_2\rangle$换一个相因子，取

$$|\chi_1\rangle \to \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}，\quad |\chi_2\rangle \to \begin{pmatrix} 0 \\ i \end{pmatrix}$$

则纯态的密度矩阵发生很大变化，有

$$|\chi\rangle \to \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2}i \end{pmatrix}，\quad \boldsymbol{\rho} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & -\frac{\sqrt{3}}{4}i \\ \frac{\sqrt{3}}{4}i & \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

由此得出

$$\langle S_x \rangle = 0，\langle S_y \rangle = \mathrm{Tr} S_y \rho = \frac{\sqrt{3}}{4}\hbar，\langle S_z \rangle = -\frac{1}{4}\hbar$$

我们看到，平均值也发生了很大变化，显然已不是原来那个纯态了，而混合态的密度矩阵则无变化。因此，在相干叠加构成纯态时，两个态的相因子非常重要。

2．第二个例子

处于一定外界环境下的多粒子系统，它的状态可以是其哈密顿算符H的任何一个本征态$|\psi_n\rangle$，有

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle$$

在统计物理中，正则系统是一个混合态，其参与态是全部$|\psi_n\rangle$，参与的概率为$p_n = \mathrm{e}^{-E_n/kT}$。式中，$k$为玻尔兹曼常数，$T$为热力学温度。我们写出这个混合态的密度矩阵：

$$\rho = \frac{1}{Z}\sum_n |\psi_n\rangle \mathrm{e}^{-\frac{E_n}{kT}} \langle \psi_n|$$

因为p_n没有归一化，Z是一个保证$\frac{1}{Z}\sum_n p_n = 1$的常数，或者说是保证$\mathrm{Tr}\rho = 1$的常数，由于$|\psi_n\rangle$是$H$的本征矢量，上式中的$E_n$可以换成算符$H$，有

$$\rho = \frac{1}{Z}\sum_n \mathrm{e}^{-\frac{H}{kT}} |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \frac{1}{Z}\sum_n \mathrm{e}^{-\frac{H}{kT}} \tag{1.126}$$

这时式中的Z也成为一个算符，有

$$Z = \mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\frac{H}{kT}} \tag{1.127}$$

Z称为系统的配分函数，式(1.126)和式(1.127)是正则系统理论的基础。

1.5.4 复合体系和约化密度矩阵

量子力学中描述一个体系的量子态时，通常假定它是一个孤立体系，与外界环境(包括测量装置)完全隔离，但这只是一种近似。实际上，人们所研究的体系总是一个更大的体系的一小部分(子体系)。当人们的注意力局限于那个子体系，而对其余部分没有兴趣时，对于体系的量子态的描述就会出现新的特性。从量子力学理论上来讲，对于一个多自由度的体系，如果只测量与其部分自由度相关的可观测量，则测量就是不完全测量(关于测量理论可参见第 2 章)。与此类似，对于一个复合体系，若只对其子体系的力学量进行观测，也是一个不完全测量。在此情况下，为了描述子体系的量子态，如计算子体系的某个可观测量的平均值，就需要引进约化密度矩阵。

1. 约化密度矩阵概念

考虑分别处于希尔伯特空间 H_A 和 H_B 的两个量子系统 A 和 B 。设 $|i\rangle_A$ 构成子体系 A 的量子态一组完全集，$|\mu\rangle_B$ 构成子体系 B 的量子态另一组完全集，则 $|i\rangle_A\otimes|\mu\rangle_B\equiv|i\rangle_A|\mu\rangle_B\equiv|i_A\mu_B\rangle$ 可以构成复合体系 $A+B$ 的一组完备基，即 $A+B$ 体系的任何一个量子态 $|\psi\rangle_{AB}$ 总可以表示为这一组完备基的线性叠加：

$$|\psi\rangle_{AB}=\sum_{i\mu}a_{i\mu}|i\rangle_A|\mu\rangle_B\text{，}\quad\sum_{i\mu}|a_{i\mu}|^2=1 \tag{1.128}$$

相应的密度矩阵为

$$\boldsymbol{\rho}_{AB}=|\psi\rangle_{AB\ AB}\langle\psi|=\sum_{i\mu j\nu}a_{j\nu}^*a_{i\mu}|i\rangle_A|\mu\rangle_{B\ A}\langle j|_B\langle\nu| \tag{1.129}$$

对复合体系 $A+B$ 来讲，这是一个纯态。

假设 Q_A 是子体系 A 的一个可观测量，即只依赖于系统 A 的动力学变量。在将 A 看成复合体系 $A+B$ 的一个子体系时，这个可观测量应表示为 $Q=Q_A\otimes I_B$ (其中 I_B 为子系统 B 的单位算符，作用于子体系 B 的量子态上)。在 $|\psi\rangle_{AB}$ 下，Q_A 的平均值为

$$\langle Q\rangle\equiv\bar{Q}=\mathrm{Tr}_{AB}\left(\rho_{AB}Q\right) \tag{1.130}$$

在非耦合表象中

$$\begin{aligned}\langle Q\rangle\equiv\bar{Q}&={}_{AB}\langle\psi|Q_A\otimes I_B|\psi\rangle_{AB}\\&=\sum_{j\nu}a_{j\nu}^*\ {}_A\langle j|_B\langle\nu|Q_A\otimes I_B\sum_{i\mu}a_{i\mu}|i\rangle_A|\mu\rangle_B\\&=\sum_{ij\mu}a_{j\mu}^*a_{i\mu}\ {}_A\langle j|Q_A|i\rangle_A\end{aligned} \tag{1.131}$$

它可以表示为

$$\langle Q\rangle\equiv\bar{Q}=\mathrm{Tr}_A(\rho_AQ_A) \tag{1.132}$$

其中

$$\boldsymbol{\rho}_A=\sum_{ij\mu\nu}a_{i\mu}a_{j\mu}^*|i\rangle_{A\ A}\langle j|=\mathrm{Tr}_B(\rho_{AB}) \tag{1.133}$$

$\boldsymbol{\rho}_A=\mathrm{Tr}_B(\rho_{AB})$ 称为约化密度矩阵，即对复合系统密度矩阵求其中一个子系统部分迹为另一个子系统的约化密度矩阵。

可以通过下面的例子了解求部分迹的一个简单操作。设 A 和 B 为两个子系统，$|a_1\rangle$ 和 $|a_2\rangle$ 是 A 的任意两个矢量，$|b_1\rangle$ 和 $|b_2\rangle$ 是 B 的任意两个矢量，则对 B 求部分迹得到

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_B\,|a_1b_1\rangle\langle a_2b_2| &= \mathrm{Tr}_B\left(|a_1\rangle\langle a_2|\otimes|b_1\rangle\langle b_2|\right)\\ &=|a_1\rangle\langle a_2|\cdot\mathrm{Tr}\left(|b_1\rangle\langle b_2|\right)\\ &=|a_1\rangle\langle a_2|\cdot\left(\langle b_2|b_1\rangle\right)\end{aligned}\tag{1.134}$$

2．约化密度矩阵 $\boldsymbol{\rho}_A$ 的性质

(1) $\boldsymbol{\rho}_A^+=\boldsymbol{\rho}_A$。

(2) $\mathrm{Tr}_A\boldsymbol{\rho}_A=1$。

(3) $\boldsymbol{\rho}_A$ 为非负。

(4) $\boldsymbol{\rho}_A^2=\boldsymbol{\rho}_A$ 不一定成立，即子体系不一定为纯态。也就是说，即使大体系为纯态，子体系的态也不一定是纯态，一般来说要用混合态的密度矩阵进行描述。例如，由式(1.133)可见，$\boldsymbol{\rho}_A=\mathrm{Tr}_B\left(|\psi\rangle\langle\psi|\right)=\sum\limits_{\mu ij}a_{j\mu}^*a_{i\mu}\,|i\rangle_A\langle j|$。$\boldsymbol{\rho}_A$ 的混合态特性反映了当 $|\psi\rangle_{AB}$ 可知时对 A 系统纯态的无知。

应当注意的是，对复合系统 $A\otimes B$（$x\in A$，$y\in B$），如果不考虑 B 的影响，在经典情况下，则是对 y 全空间积分；在量子情况下，即是对 B 中变量求迹，若考虑到系统随时间变化，则所得演化方程为主方程，即

$$\boldsymbol{\rho}_A(t)=\mathrm{Tr}_B\rho(t)\tag{1.135}$$

这是最一般的主方程，演化一般不是幺正的。

例 1.2　求下列矩阵的约化密度矩阵。

$$\boldsymbol{\rho}_{AB}=\begin{pmatrix}\rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{14}\\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & 0\\ 0 & \rho_{32} & \rho_{33} & 0\\ \rho_{41} & 0 & 0 & \rho_{44}\end{pmatrix}\tag{1.136}$$

解： 以 $|00\rangle$、$|01\rangle$、$|10\rangle$ 和 $|11\rangle$ 表示此复合体系的基矢时。由式(1.133)，再借助式(1.134)得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\rho}_B&=\mathrm{Tr}_A\rho_{AB}=\mathrm{Tr}_A\big(\rho_{11}|00\rangle\langle00|+\rho_{14}|00\rangle\langle11|+\rho_{22}|01\rangle\langle01|+\rho_{23}|01\rangle\langle10|\\ &\quad+\rho_{32}|10\rangle\langle01|+\rho_{33}|10\rangle\langle10|+\rho_{41}|11\rangle\langle00|+\rho_{44}|11\rangle\langle11|\big)\\ &=\rho_{11}|0\rangle\langle0|+\rho_{22}|1\rangle\langle1|+\rho_{33}|0\rangle\langle0|+\rho_{44}|1\rangle\langle1|\\ &=\begin{pmatrix}\rho_{11}+\rho_{33} & 0\\ 0 & \rho_{22}+\rho_{44}\end{pmatrix}\end{aligned}\tag{1.137}$$

3．Schmidt 分解及纯化

复合量子系统状态的一个重要特征可由所谓的 Schmidt 分解定理给出。由此还可得到在量子信息和量子计算中广泛应用的纯化(purification)概念。

(1) Schmidt 分解定理。设 $|\psi\rangle$ 是复合系统 AB 的一个纯态，则存在系统 A 的正交态 $|i\rangle_A$ 和 B 的正交态 $|i\rangle_B$，使得

$$|\psi\rangle=\sum_i\lambda_i\,|i\rangle_A|i\rangle_B$$

其中，λ_i 是非负实数，称作 Schmidt 系数，并且满足 $\sum_i \lambda_i^2 = 1$。

证明：不失一般性，设系统 A 和 B 有相同的空间维数，$|j\rangle$、$|k\rangle$ 分别为 A、B 的正交基矢，则

$$|\psi\rangle = \sum_{jk} a_{jk} |j\rangle|k\rangle \tag{1.138}$$

式中，对由 a_{jk} 构成的矩阵，利用"单值分解定理"，其矩阵形式为 $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{udv}$，$\boldsymbol{d}$ 是对角矩阵且有非负的矩阵元，$\boldsymbol{u}$、$\boldsymbol{v}$ 是幺正矩阵，因此

$$|\psi\rangle = \sum_{ijk} u_{ji} d_{ii} v_{ik} |j\rangle|k\rangle \tag{1.139}$$

假设 $|i\rangle_A \equiv \sum_j u_{ji}|j\rangle$，$|i\rangle_B \equiv \sum_k v_{ik}|k\rangle$，$\lambda_i \equiv d_{ii}$，则式(1.139)可以表示为

$$|\psi\rangle = \sum_i \lambda_i |i\rangle_A |i\rangle_B \tag{1.140}$$

且由 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的幺正性，知 $|i\rangle_A$ 和 $|i\rangle_B$ 分别是正交的。由于 $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ 是纯态，则有

$$\rho_A = \sum_i \lambda_i^2 |i\rangle_{A\,A}\langle i|, \quad \rho_B = \sum_i \lambda_i^2 |i\rangle_{B\,B}\langle i| \tag{1.141}$$

即 ρ_A、ρ_B 有相同的本征值 λ_i^2。

(2)纯化概念。已知系统 A 的一个任意状态 ρ_A，我们可以引入一个辅助系统 R，使得在复合系统 AR 中能够定义一个纯态 $|AR\rangle$，以至于

$$\rho_A = \mathrm{Tr}_R |AR\rangle\langle AR| \tag{1.142}$$

证明：设系统 A 的一个混合态 ρ_A 有正交分解

$$\rho_A = \sum_i p_i |i\rangle_{A\,A}\langle i|$$

引入系统 R 并使其与系统 A 在同一态空间，且正交基矢为 $|i\rangle_R$。对于复合系统 AR，定义一个纯态

$$|AR\rangle \equiv \sum_i \sqrt{p_i}\, |i\rangle_A |i\rangle_R$$

则

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}_R |AR\rangle\langle AR| &= \sum_{ij} \sqrt{p_i p_j}\, |i\rangle_{A\,A}\langle j| \mathrm{Tr}\left(|i\rangle_{R\,R}\langle j|\right) \\
&= \sum_{ij} \sqrt{p_i p_j}\, |i\rangle_{A\,A}\langle j| \delta_{ij} \\
&= \sum_i p_i |i\rangle_{A\,A}\langle i| = \rho_A
\end{aligned}$$

因此，我们证明了 $|AR\rangle$ 是 ρ_A 的纯化。

1.6 复合体系的关联特性

关联是复合体系具有的自然科学中最基本的特性之一。量子力学中，存在着完全不同于经典物理学特征的全新的关联。

1.6.1　关联的一般定义

1．描述两个变量关系的一种度量

(1)经典关联。在经典概率中，X、Y是两个独立变量，如果联合概率密度可以因子化，即

$$F(x,y)=f_1(x)f_2(y)$$

我们就说这两个变量是不关联的，否则就说这两个变量是相互关联的。

(2)量子关联。最主要的量子关联就是纠缠。可做如下定义：一个混合态是分离的，当且仅当能够实行局域制备态的混合时，即

$$\rho=\sum_i p_i\rho_i^{(A)}\otimes\rho_i^{(B)} \tag{1.143}$$

其中，$\{p_i\}$是概率分布，$p_i\geqslant 0,\ \sum\limits_i p_i=1$；否则是纠缠的。

2．纠缠态

为了清楚起见，下面考察纠缠态的具体实例。

(1)EPR 佯谬。纠缠态的思想最早出自爱因斯坦(Einstein)就量子力学的基本概念与玻尔多年争论之后的一篇文章。1935 年爱因斯坦、波多斯基(Podolsky)和罗森(Rosen)共同发表了一篇重要文章，对正统量子力学基本原理和概念的诠释提出了尖锐的批评，后人将他们的论证称为 EPR 佯谬。下面分别介绍 EPR 佯谬得出的两个论断及由此引出的纠缠态概念。

① 波函数对“物理实在”的描述不完备。

物理实在：爱因斯坦等人认为，一个物理实在的元素，如果所处的系统不受扰动，相应的可以观测的物理量在客观上应当具有确定的数值。例如，一个一维粒子的量子态，$\psi_{p_0}(x)=\mathrm{e}^{ip_0x/\hbar}$，它是动量算符，即$p=-i\hbar\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x$的本征态，本征值为$p_0$。在此态下，粒子的动量值$p_0$确定，所以粒子动量是“物理实在”。但由于$\psi_{p_0}$并非粒子坐标$x$的本征态($x\psi_{p_0}\neq c\psi_{p_0}$，其中$c$是常数)，因此这个量子态不能确切预言粒子的坐标，而要知道粒子的坐标只能靠测量。但测量粒子的坐标后，粒子将不再处于原来的量子态。因此，他们认为，在ψ_{p_0}态下，粒子坐标不是一个“物理实在”。再者，设两个力学量A和B不对易，$[A,B]\neq 0$，则A和B不具有共同本征态，因而A、B不同时是“物理实在”。

② 波函数描述不自洽。

EPR 一文指出：由于两个粒子可以相距很远，对粒子 1 进行的任何测量(动量或坐标)，都不会影响粒子 2 的状态(此即定域假设)。然而按照分析，粒子 2 的状态是不确定的。所以，他们指出量子力学的描述是不自洽的。

(2)Bohm 对 EPR 佯谬的表述。遵循 EPR 佯谬的思路，1951 年 Bohm 提议，可用自旋为1/2的二粒子体系表述 EPR 的思路。例如，设电子偶素e^+-e^-的基态处于自旋单态(自旋量子数$S=0$)，有

$$|\psi\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2-|\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2\right] \tag{1.144}$$

假设两粒子反向飞出，但它们的自旋仍处于状态$|\psi\rangle_{12}$上。反向飞行使它们彼此的距离拉开得越来越大。从经典物理学考虑，我们容易做到对粒子 1 进行测量不对粒子 2 造成任何影响。

首先，考虑可观测量σ_z。若测量粒子 1 得$\sigma_z^{(1)}=+1$，则可以肯定对于粒子 2 有$\sigma_z^{(2)}=-1$。反之，若测得$\sigma_z^{(1)}=-1$，则得$\sigma_z^{(2)}=+1$。总之，一旦对粒子 1 做了σ_z的测量，则粒子 2 的σ_z值在客观上就是确定了的。并且，因为测量时间与距离所构成的间隔是所谓类空的，从狭义相对论的定域因果律得知，对粒子 1 的测量不会影响到粒子 2 的状态。这样，按定域实在论的观点，$\sigma_z^{(2)}$应当是一个物理实在的元素。也就是说，不论人们是否对粒子 2 做测量，$\sigma_z^{(2)}$在客观上都是确定存在的。

其次，考虑可观测量σ_x。若对粒子 1 测得$\sigma_x^{(1)}=+1$，容易推知$\sigma_x^{(2)}=-1$，因为

$$\begin{aligned}{}_1\langle\sigma_x=+1|\psi_{12}\rangle&=\frac{1}{\sqrt{2}}\left({}_1\langle\uparrow|+{}_1\langle\downarrow|\right)|\psi\rangle_{12}\\&=\frac{1}{2}\left(|\downarrow\rangle_2-|\uparrow\rangle_2\right)\\&=\frac{1}{\sqrt{2}}|\sigma_x=-1\rangle_2\end{aligned}\tag{1.145}$$

同样，若测得$\sigma_x^{(1)}=-1$，则知$\sigma_x^{(2)}=1$。总之，对粒子 1 做了σ_x测量，便能肯定地知道$\sigma_x^{(2)}$的数值，而又不会扰动粒子 2 的状态。也就是说，$\sigma_x^{(2)}$也是一个物理实在的元素，客观上也有确定值。σ_y情况与此类似。

概括起来说，$\sigma_x^{(2)}$、$\sigma_y^{(2)}$、$\sigma_z^{(2)}$都是物理实在元素。也就是说，它们在（对粒子 2）测量之前，客观上就是同时确定存在的。然而，按照量子力学的观点，由于这些算符彼此不对易，它们不应该同时具有确定值，甚至每个粒子自旋指向也不确定，由此他们认为，量子力学的波函数描述方法不完备。这正是 EPR 佯谬的内容。

(3) 为了对纠缠态有更清楚的理解，下面来分析几个例子。

设两个粒子处于如下状态：$\left(|00\rangle+|11\rangle\right)/\sqrt{2}$。这里$|0\rangle$和$|1\rangle$分别表示粒子的基态和激发态，或自旋向下态和自旋向上态。

① 首先，容易看到，对粒子 1 进行测量，得$|0\rangle$态的概率为 50%。

② 其次，若测得粒子 2 为$|0\rangle$态，再对粒子 1 进行测量，则测得结果为$|0\rangle$的概率为 1；若测得粒子 2 为$|1\rangle$态，再对粒子 1 进行测量，则测得结果为$|0\rangle$的概率为 0。因此，粒子 1 测量结果为$|0\rangle$的概率与粒子 2 的测量结果有关，此态为纠缠态。

③ 若两个粒子处于下列状态：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|00\rangle+|01\rangle\right)=|0\rangle\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|0\rangle+|1\rangle\right)$$

无论对粒子 2 测量结果如何，粒子 1 总为$|0\rangle$态。无论粒子 1 怎样，粒子 2 结果为$|0\rangle$的概率为 50%。因此，这个态是“非纠缠态”。

简单地说，对于复合体系，子体系之间有纠缠的重要特征是：当系统由两个子系统构成时，子系统 A 和 B 的状态均依赖于对方而各自处于一种不确定的状态。

在纠缠态中，信息不是由单个量子体系所携带的，而是分布于两个量子体系，即每个体系除了有自己的信息外，还有两个体系之间的相互信息，这是量子纠缠的本质。纠缠与量子力学非定域性相关。对于两个分离很远的纠缠体系，每个体系的态是不确定的，即无法确定哪个体系处于哪个态。但是，当对其中一个进行测量而得到确定的态，则将立即影响另一个体系的量子态，并使其处于确定的状态。这是一种比经典关联更强的量子关联。理论和实验研究表明，量子纠缠作

为量子信息科学的重要资源，可以被应用于量子通信、量子密码学、量子密集编码等领域。量子纠缠可以增大量子通道的容量，提高量子通信的效率。

3．Bell 基——自旋为 1/2 的二粒子的自旋纠缠态

设两个自旋$1/2(\hbar=1)$的粒子，自旋角动量分别为

$$\vec{S}_1=\frac{1}{2}\vec{\sigma}_1,\quad \vec{S}_2=\frac{1}{2}\vec{\sigma}_2$$

自旋态用 4 维希尔伯特空间的一个矢量描述。

(1) 角动量非耦合表象。(S_{1z},S_{1z})构成一个力学量完全集，共同本征态为：$\left|\uparrow\uparrow\right\rangle_{12}$、$\left|\downarrow\downarrow\right\rangle_{12}$、$\left|\uparrow\downarrow\right\rangle_{12}$、$\left|\downarrow\uparrow\right\rangle_{12}$都是直积态(或分离态)。

(2) 角动量耦合表象。$(\vec{S}^2,S_z)$构成力学量完全集，其中$\vec{S}=\vec{S}_1+\vec{S}_2$；这里共同本征态记为$\left|SM\right\rangle$，其中$\left|00\right\rangle$为单态，$\left|S=1,M=0,\pm1\right\rangle$为三重态，它们具体表示为

$$\left|11\right\rangle_{12}=\left|\uparrow\uparrow\right\rangle_{12},\quad \left|1-1\right\rangle_{12}=\left|\downarrow\downarrow\right\rangle_{12}$$

$$\left|10\right\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle_{12}+\left|\downarrow\uparrow\right\rangle_{12}\right) \tag{1.146}$$

$$\left|00\right\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle_{12}-\left|\downarrow\uparrow\right\rangle_{12}\right)$$

容易看出，其中后两式为纠缠态。

(3) Bell 基。由$(\sigma_{1x},\sigma_{2x})$、$(\sigma_{1y},\sigma_{2y})$或$(\sigma_{1z},\sigma_{2z})$任何一组算符的共同本征态构成，即

$$\left|\psi^{\pm}\right\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow\downarrow\right\rangle_{12}\pm\left|\downarrow\uparrow\right\rangle_{12}\right),\quad \left|\varphi^{\pm}\right\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\uparrow\uparrow\right\rangle_{12}\pm\left|\downarrow\downarrow\right\rangle_{12}\right) \tag{1.147}$$

这 4 个 Bell 基矢都是纠缠态。

1.6.2　纠缠度量

同能量一样，纠缠也是一种资源，因此需要度量。为了定量地描述纠缠现象，人们引入了纠缠度的概念。我们知道，一个两体纯态$\left|\psi\right\rangle_{AB}$可以有相应的密度算符$\rho=\left|\psi\right\rangle_{AB\,AB}\left\langle\psi\right|$。分别对子系统 B、A 求迹，可以得到关于 A、B 的约化密度算符：

$$\rho_A=\mathrm{Tr}_B\left(\left|\psi\right\rangle_{AB\ AB}\left\langle\psi\right|\right),\quad \rho_B=\mathrm{Tr}_A\left(\left|\psi\right\rangle_{AB\ AB}\left\langle\psi\right|\right)$$

于是，利用 Schmidt 分解定理，系统的纠缠度$E(\psi)$用其中任一子体系态的冯•诺依曼熵 S(见附录 C)定义为

$$E(\psi)=S(\rho_A)=S(\rho_B) \tag{1.148}$$

其中，$S(\rho)=-\mathrm{Tr}(\rho\log_2\rho)$（或$S(\rho)=-\mathrm{Tr}(\rho\ln\rho)$）。

由于可将密度算符ρ写成谱分解形式，即

$$\rho=\sum_a\lambda_a\left|a\right\rangle\left\langle a\right|$$

从而可得到

$$f(\rho)=\sum_a f(\lambda_a)|a\rangle\langle a|$$

所以

$$S(\rho)=-\mathrm{Tr}(\rho\log_2\rho)=-\sum_a\lambda_a\log_2\lambda_a \tag{1.149}$$

对于任何可分离态，如 $|\phi\rangle_{AB}=|\chi\rangle_A\otimes|\lambda\rangle_B$，容易得到，$E(\phi)=0$。在所有两体系(或组分)量子态中，4 个 Bell 态的纠缠度最大，如 $|\varphi^+\rangle$，由于其 $\rho_A=\rho_B=\boldsymbol{I}/2$（$\boldsymbol{I}$ 为单位矩阵)，因此，$E(\varphi^+)=\log 2=1$。其他形式的纯态纠缠度介于 0 和 1 之间。例如，设

$$\boldsymbol{\rho}=\frac{3}{4}|0\rangle\langle 0|+\frac{1}{4}|0\rangle\langle 1|+\frac{1}{4}|1\rangle\langle 0|+\frac{1}{4}|1\rangle\langle 1|=\frac{1}{4}\begin{pmatrix}3 & 1\\ 1 & 1\end{pmatrix}$$

可得 ρ 本征值为

$$\lambda_1=\frac{1}{2}\left(1+\frac{1}{\sqrt{2}}\right),\quad \lambda_2=\frac{1}{2}\left(1-\frac{1}{\sqrt{2}}\right)$$

此密度算符 ρ 的冯·诺依曼熵为

$$S(\rho)=-\lambda_1\log_2\lambda_1-\lambda_2\log_2\lambda_2=0.6009$$

对于由混合态描述的一般系统，其纠缠度可以定义为

$$E(\rho)=\min\sum_i p_i E(\psi_i) \tag{1.150}$$

这里，在所有可能的构造方式中求最小，$E(\psi_i)$ 由式(1.148)给出。显然，求混合态的纠缠度要比求纯态的纠缠度困难很多。

对于两体二维混合态纠缠，目前最为常用的度量是 Wootters 于 20 世纪 90 年代给出的形成纠缠，可以表示为

$$E(\rho_{AB})=h\left(\frac{1+\sqrt{1-C^2(\rho_{AB})}}{2}\right) \tag{1.151}$$

其中，$h(x)$ 为香农(Shannon)函数，有

$$h(x)=-x\log_2 x-(1-x)\log_2(1-x) \tag{1.152}$$

$C(\rho_{AB})$ 称为系统 ρ_{AB} 的 Concurrence，定义为

$$C(\rho_{AB})=\max\{0,\lambda_1-\lambda_2-\lambda_3-\lambda_4\} \tag{1.153}$$

式中，$\lambda_i(i=1,2,3,4)$ 为 $\rho_{AB}(\sigma_y\otimes\sigma_y)\rho_{AB}^*(\sigma_y\otimes\sigma_y)$ 的本征值的平方根按降序排列，ρ_{AB}^* 是 ρ_{AB} 的复共轭，σ_y 为泡利算符。

由于 $C(\rho_{AB})$ 在区间 $[0,1]$ 上单调递增，因此 Concurrence 一般直接被用作量子纠缠度量。例如，对于两体系两量子比特系统密度矩阵 $\boldsymbol{\rho}_{AB}$，在标准计算基矢上 $\{|1\rangle\equiv|e_Ae_B\rangle,|2\rangle\equiv|e_Ag_B\rangle,|3\rangle\equiv|g_Ae_B\rangle,|4\rangle\equiv|g_Ag_B\rangle\}$（其中 $|e\rangle$ 和 $|g\rangle$ 分别代表量子比特的激发态和基态），一个经常讨论的所谓

“X”态为

$$\boldsymbol{\rho}=\begin{pmatrix} a & 0 & 0 & w \\ 0 & b & z & 0 \\ o & z^* & c & 0 \\ w^* & 0 & 0 & d \end{pmatrix} \tag{1.154}$$

式中，a、b、c、d 为正实数，且满足归一化条件 $a+b+c+d=1$，w、z 为复数。上述“X”态的 Concurrence 可以计算得

$$C(\rho)=2\max\left\{0,|z|-\sqrt{ad},|w|-\sqrt{bc}\right\} \tag{1.155}$$

值得注意的是，Concurrence 只是针对两体两量子比特系统的纠缠度量，即系统密度矩阵 $\boldsymbol{\rho}_{AB}$ 的维数为 4×4。而对于两体高维系统甚至多体系统，Concurrence 则不再适用。

对于两体高维系统，常用的纠缠度量是 Negativity，其定义为

$$N(\boldsymbol{\rho}_{AB})=\sum_i|\mu_i| \tag{1.156}$$

式中，$\mu_i(i=1,2,3,4)$ 为 $\boldsymbol{\rho}_{AB}^{T_A}$ 的负本征值，$\boldsymbol{\rho}_{AB}^{T_A}$ 为系统密度矩阵 $\boldsymbol{\rho}_{AB}$ 关于子系统 A 的部分转置矩阵。Negativity 的另一种表示为

$$N(\boldsymbol{\rho}_{AB})=\frac{\left\|\boldsymbol{\rho}_{AB}^{T_A}\right\|-1}{2} \tag{1.157}$$

式中，$\left\|\boldsymbol{\rho}_{AB}^{T_A}\right\|$ 等于转置矩阵 $\boldsymbol{\rho}_{AB}^{T_A}$ 本征值的绝对值之和。

还有一种常用的纠缠度量是 LN（Logarithmic Negativity），其定义为

$$\mathrm{LN}(\boldsymbol{\rho}_{AB})=\log_2\left\|\boldsymbol{\rho}_{AB}^{T_A}\right\| \tag{1.158}$$

例如，对于 Bell 态，LN 及 Concurrence 都等于 1，而 Negativity 为 0.5。因此，很多情况下我们将 Negativity 归一化为

$$N'(\boldsymbol{\rho})=2N(\boldsymbol{\rho}) \tag{1.159}$$

应该指出，在两量子比特系统中，总有 Negativity ≤ Concurrence；对于纯态，总有 Negativity=Concurrence。

不难发现，虽然原则上 Negativity 可用于度量任意两体系统的纠缠态，但是在实际操作中，当系统密度矩阵维数变得很大时，对其转置矩阵本征值的求解将会变得非常复杂，甚至得不到解析解。尤其是对于连续变量系统，其波函数在希尔伯特空间分解为无限维，Negativity 求解变得不可能。这时我们采用协方差矩阵来度量两体连续变量系统的纠缠度（协方差定义可参见附录 B）。

对于两体连续变量系统，其 LN 为 $\tilde{\upsilon}_-$ 的递减函数，有

$$\mathrm{LN}(\boldsymbol{\rho})=\max\{0,-\log_2 2\tilde{\upsilon}_-\} \tag{1.160}$$

其中，$\tilde{\upsilon}_-$ 为

$$\tilde{\upsilon}_-=\sqrt{\frac{\tilde{A}(\boldsymbol{\sigma})-\sqrt{\tilde{A}(\boldsymbol{\sigma})^2-4\mathrm{Det}\boldsymbol{\sigma}}}{2}} \tag{1.161}$$

这里，$\tilde{A}(\boldsymbol{\sigma})=\mathrm{Det}(\boldsymbol{A})+\mathrm{Det}(\boldsymbol{B})-2\mathrm{Det}(\boldsymbol{C})$，协方差矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ 具有如下形式

$$\boldsymbol{\sigma}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{C} \\ \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{B} \end{pmatrix} \tag{1.162}$$

子矩阵 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 分别为

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} \overline{x_1^2} & \overline{\dfrac{x_1p_1+p_1x_1}{2}} \\ \overline{\dfrac{x_1p_1+p_1x_1}{2}} & \overline{p_1^2} \end{pmatrix} \tag{1.163}$$

$$\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix} \overline{x_2^2} & \overline{\dfrac{x_2p_2+p_2x_2}{2}} \\ \overline{\dfrac{x_2p_2+p_2x_2}{2}} & \overline{p_2^2} \end{pmatrix} \tag{1.164}$$

$$\boldsymbol{C}=\begin{pmatrix} \overline{\dfrac{x_1x_2+p_1x_1}{2}} & \overline{\dfrac{x_1p_2+p_2x_1}{2}} \\ \overline{\dfrac{x_2p_1+p_1x_2}{2}} & \overline{\dfrac{p_1p_2+p_2p_1}{2}} \end{pmatrix} \tag{1.165}$$

其中，正交分量 x_1、x_2、p_1、p_2 分别为两体系(或者说，两组分)产生(湮灭)算符 $a^+(a)$ 、$b^+(b)$ 的函数，即

$$x_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(a+a^+)\,,\quad p_1=\frac{1}{\sqrt{2}_i}(a-a^+)$$

$$x_2=\frac{1}{\sqrt{2}}(b+b^+)\,,\quad p_2=\frac{1}{\sqrt{2}_i}(b-b^+)$$

1.6.3　量子力学与经典物理学矛盾的进一步讨论

下面介绍几个与量子关联相关的量子力学与经典物理学矛盾的典型例证。

1．Bell 不等式

我们先看 Bell 于 1964 年给出的量子力学是否完备的一个定量判别式。设自旋 1/2 的两个粒子(处于自旋单态)，角动量为 $\vec{S}=\vec{\sigma}/2$ (其中令 $\hbar=1$)。

(1) 定域隐变量理论。Bell 认为如果量子力学是不完备的，将存在定域隐变量理论，该理论首先满足如下假定。

① 存在隐变量 λ (λ 连续)。

② 存在定域性(测量粒子 1 与粒子 2 无关)。

假定粒子 1 的 $\vec{\sigma}_1$ 沿 $\vec{a}$ 的投影 $(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})$ 结果为 $A(\vec{a},\lambda)$，且知 $A(\vec{a},\lambda)=\pm1$；$\vec{\sigma}_2$ 沿 $\vec{b}$ 的投影 $(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})$ 结果为 $B(\vec{b}\cdot\lambda)$，且 $B(\vec{b}\cdot\lambda)=\pm1$；两粒子自旋沿 $\vec{a}$ 、$\vec{b}$ 投影的关联为 $A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b}\cdot\lambda)$，其中 $\vec{a}$ 、$\vec{b}$ 及下面提到的 $\vec{c}$ 等分别为单位方向矢量。λ 的分布为 $\rho(\lambda)$，且 $\int\rho(\lambda)\mathrm{d}\lambda=1$。在实验中观测到的关联是已经对隐变量进行了平均后的结果，即

$$P(\vec{a},\vec{b})=\int\mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b},\lambda) \tag{1.166}$$

现在我们来计算粒子 A 自旋沿 $\vec{a}$（或 $\vec{a}'$）方向的投影与粒子 B 自旋沿 $\vec{b}$（或 $\vec{b}'$）方向的投影的关系式。可以看出

$$\begin{aligned}
P(\vec{a},\vec{b})-P(\vec{a},\vec{b}')&=\int \mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)[A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b},\lambda)-A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b}',\lambda)]\\
&=\int \mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)[A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b},\lambda)-A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b}',\lambda)\\
&\quad+(\pm A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b},\lambda)A(\vec{a}',\lambda)B(\vec{b}',\lambda))-(\pm A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b},\lambda)A(\vec{a}',\lambda)B(\vec{b}',\lambda))]\\
&=\int \mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)\{A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b},\lambda)[1\pm A(\vec{a}',\lambda)B(\vec{b}',\lambda)]\}\\
&\quad-\int \mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)\{A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b}',\lambda)[1\pm A(\vec{a}',\lambda)B(\vec{b},\lambda)]\}
\end{aligned} \tag{1.167}$$

因为

$$-1\leqslant A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b},\lambda)\leqslant 1,\quad -1\leqslant A(\vec{a},\lambda)B(\vec{b}',\lambda)\leqslant 1 \tag{1.168}$$

所以

$$\begin{aligned}
\left|P(\vec{a},\vec{b})-P(\vec{a},\vec{b}')\right|&\leqslant\int \mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)[1\pm A(\vec{a}',\lambda)B(\vec{b}',\lambda)]+\int \mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)[1\pm A(\vec{a}',\lambda)B(\vec{b},\lambda)]\\
&=2\pm[P(\vec{a}',\vec{b}')+P(\vec{a}',\vec{b})]
\end{aligned} \tag{1.169}$$

设两粒子处于自旋单态，即

$$\left|\psi^-\right\rangle_{12}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left|\uparrow\downarrow\right\rangle_{12}-\left|\downarrow\uparrow\right\rangle_{12}\right] \tag{1.170}$$

并设 $\vec{a}'=\vec{b}'=\vec{c}$，则

$$P(\vec{c},\vec{c})=\int \mathrm{d}\lambda\rho(\lambda)A(\vec{c},\lambda)B(\vec{c},\lambda)=-1 \tag{1.171}$$

$$P(\vec{b},\vec{c})=P(\vec{c},\vec{b}) \tag{1.172}$$

因此

$$\left|P(\vec{a},\vec{b})-P(\vec{a},\vec{c})\right|\leqslant 2\pm[P(\vec{c},\vec{c})P(\vec{c},\vec{b})]=2\pm[-1+P(\vec{b},\vec{c})] \tag{1.173}$$

因为

$$-1+P(\vec{b},\vec{c})\leqslant 0$$

所以

$$\left|P(\vec{a},\vec{b})-P(\vec{a},\vec{c})\right|\leqslant 1+P(\vec{b},\vec{c}) \tag{1.174}$$

式(1.174)即为 Bell 不等式。如果 Bell 不等式成立，将意味着量子力学是不完备的。

(2) 量子力学结果。下面我们将证明量子力学理论与上述 Bell 不等式相抵触。

① 如前所述，设 $\vec{a}$、$\vec{b}$ 为空间任意方向的单位矢量，由量子力学理论可以证明在自旋单态式(1.170)下 $(\vec{\sigma}_1\cdot a)(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})$ 的平均值为

$$\overline{(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})}={}_{12}\left\langle\psi^-\right|(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})\left|\psi^-\right\rangle_{12}=-(\vec{a}\cdot\vec{b})\equiv\langle ab\rangle$$

证明： 首先，容易发现 $\overline{(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})}$ 即是 $P(\vec{a},\vec{b})$，因此我们可以计算得到与定域隐变量理论对应的结果。利用关系

$$\sigma_{1z}\left|\uparrow\right\rangle_1=\left|\uparrow\right\rangle_1,\quad \sigma_{1z}\left|\downarrow\right\rangle_1=-\left|\downarrow\right\rangle_1$$
$$\sigma_{1x}\left|\uparrow\right\rangle_1=\left|\downarrow\right\rangle_1,\quad \sigma_{1x}\left|\downarrow\right\rangle_1=\left|\uparrow\right\rangle_1$$
$$\sigma_{1y}\left|\uparrow\right\rangle_1=i\left|\downarrow\right\rangle_1,\quad \sigma_{1y}\left|\downarrow\right\rangle_1=-i\left|\uparrow\right\rangle_1$$

因为

$$\begin{aligned}(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})=&(\sigma_{1x}\sigma_{2x}a_xb_x+\sigma_{1y}\sigma_{2y}a_yb_y+\sigma_{1z}\sigma_{2z}a_zb_z)\\&+(\sigma_{1x}\sigma_{2y}a_xb_y+\sigma_{1x}\sigma_{2z}a_xb_z+\sigma_{1y}\sigma_{2x}a_yb_x\\&+\sigma_{1y}\sigma_{2z}a_yb_z+\sigma_{1z}\sigma_{2x}a_zb_x+\sigma_{1z}\sigma_{2y}a_zb_y)\end{aligned}\tag{1.175}$$

$\left|\psi^-\right\rangle_{12}$是式(1.175)第一个括号中前3项各项的本征函数，即

$$\sigma_{1x}\sigma_{2x}\left|\psi^-\right\rangle_{12}=\sigma_{1y}\sigma_{2y}\left|\psi^-\right\rangle_{12}=\sigma_{1z}\sigma_{2z}\left|\psi^-\right\rangle_{12}=-\left|\psi^-\right\rangle_{12}$$

因此，式(1.175)前3项平均值为

$$-(a_xb_x+a_yb_y+a_zb_z)=-\vec{a}\cdot\vec{b}$$

容易计算，式(1.175)第二个括号中6项的平均值为0。

设$\vec{a}$、$\vec{b}$、$\vec{c}$三个方向依次差60°。按量子结果，有

$$\langle ab\rangle=-\vec{a}\cdot\vec{b}=-\cos\frac{\pi}{3}=-\frac{1}{2}$$
$$\langle bc\rangle=-\frac{1}{2}$$
$$\langle ac\rangle=-\cos\frac{2\pi}{3}=\frac{1}{2}$$

代入Bell不等式，有

$$左边=\left|-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\right|=1，\quad 右边=1-\frac{1}{2}=\frac{1}{2}$$

然而$1\not\leqslant\frac{1}{2}$，所以，量子力学理论与Bell不等式矛盾。

② 考虑到关联测量实验中的一些失误或误差因素，Bell不等式推广为CHSH(Clauser-Horne-Shimony-Holt)不等式：$\left|P(\vec{a},\vec{b})-P(\vec{a},\vec{c})\right|+\left|P(\vec{d},\vec{c})+P(\vec{d},\vec{b})\right|\leqslant 2$，这里，$\vec{a}$、$\vec{b}$、$\vec{c}$、$\vec{d}$是四个任意的测量自旋的方向。对于特殊的$\vec{d}=\vec{c}$情况，若取理想的反关联，即$P(\vec{c},\vec{c})=-1$，CHSH 不等式就转化为了Bell不等式。利用

$$\left|P(\vec{a},\vec{b})-P(\vec{a},\vec{b}')\right|+\left|P(\vec{a}',\vec{b}')+P(\vec{a}',\vec{b})\right|\leqslant 2$$

为了看出上式与量子力学理论的矛盾，可以分别选$\vec{a}$、$\vec{b}$、$\vec{a}'$、$\vec{b}'$四矢量依次相差$\pi/8$，则有

$$\left\langle(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})\right\rangle=-\vec{a}\cdot\vec{b}=-\cos(\vec{a},\vec{b})$$

量子力学结果

$$\begin{aligned}&\left\langle(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})\right\rangle-\left\langle(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b}')\right\rangle+\left\langle(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a}')(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b}')\right\rangle+\left\langle(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a}')(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})\right\rangle\\&=-\cos\frac{\pi}{4}+\cos\frac{3\pi}{4}-\cos\frac{\pi}{4}-\cos\frac{\pi}{4}\\&=-2\sqrt{2}\end{aligned}$$

此结果在经典范围之外。

另外，这里我们可以引入标志非定域性的 Bell 算符：

$$\begin{aligned}\hat{B}&=(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})\otimes(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})-(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a})\otimes(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b}')+(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a}')\otimes(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b}')+(\vec{\sigma}_1\cdot\vec{a}')\otimes(\vec{\sigma}_2\cdot\vec{b})\\&=\vec{\sigma}\cdot\vec{a}\otimes\vec{\sigma}\cdot(\vec{b}-\vec{b}')+\vec{\sigma}\cdot\vec{a}'\otimes\vec{\sigma}\cdot(\vec{b}+\vec{b}')\end{aligned}\tag{1.176}$$

可证，Bell 基(4 个)是 Bell 算符的本征态。

2．GHZ 态及定域实在论与量子力学的矛盾

前面讨论的大多是二组分量子体系纠缠及相关问题，为普遍起见，下面介绍一种多组分纠缠态——GHZ 态。

(1) 3—量子比特 GHZ 态。以 3—量子比特的 GHZ 态为例，其中 8 个态分别表示为

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\pm|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle\right),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle\pm|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle\right)\\&\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle\pm|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle\right),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle\pm|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle\right)\end{aligned}\tag{1.177}$$

利用泡利算符的性质

$$\sigma_x|\uparrow\rangle=|\downarrow\rangle,\quad \sigma_y|\uparrow\rangle=i|\downarrow\rangle,\quad \sigma_z|\uparrow\rangle=|\uparrow\rangle$$

$$\sigma_x|\downarrow\rangle=|\uparrow\rangle,\quad \sigma_y|\downarrow\rangle=-i|\uparrow\rangle,\quad \sigma_z|\downarrow\rangle=-|\downarrow\rangle$$

可证，GHZ 态是 $(\sigma_{1z}\sigma_{2y}\sigma_{3y},\sigma_{1y}\sigma_{2x}\sigma_{3y},\sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{3x},\sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{3x})$ 中任何一个 3 体自旋算符的本征态(见表 1.1)，且 4 个 3 体算符中任 3 个构成一个力学量完全集。

同理可证

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\pm i|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle\right),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle\pm i|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle\right)\\&\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle\pm i|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle\right),\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle\pm i|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle\right)\end{aligned}\tag{1.178}$$

分别是 $(\sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{3y},\sigma_{1y}\sigma_{2x}\sigma_{3x},\sigma_{1x}\sigma_{2y}\sigma_{3x},\sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{3y})$ 的本征态，其中任 3 个构成一个力学量完全集。

事实上，由上面的介绍我们容易发现，2—量子比特的 GHZ 态就是 Bell 基。

表 1.1　3—量子比特 GHZ 态(归一化因子 $1/\sqrt{2}$ 未写出)

$(\sigma_{1z},\sigma_{2z},\sigma_{3z})$ 表象	$\sigma_{1x}\sigma_{2y}\sigma_{3y}$	$\sigma_{1y}\sigma_{2x}\sigma_{3y}$	$\sigma_{1y}\sigma_{2y}\sigma_{3x}$	$\sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{3x}$
$\lvert\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\pm\lvert\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$	$\mp$	$\mp$	$\mp$	$\pm$
$\lvert\uparrow\uparrow\downarrow\rangle\pm\lvert\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$	$\pm$	$\pm$	$\mp$	$\pm$
$\lvert\uparrow\downarrow\uparrow\rangle\pm\lvert\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$	$\pm$	$\mp$	$\pm$	$\pm$
$\lvert\uparrow\downarrow\downarrow\rangle\pm\lvert\downarrow\uparrow\uparrow\rangle$	$\mp$	$\pm$	$\pm$	$\pm$

(2) 对 GHZ 态，确切预言量子力学与定域实在论的矛盾。

例如，我们取 GHZ 态中的其中之一

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle-|\downarrow\downarrow\downarrow\rangle\right)$$

按定域实在论，3 个自旋1/2 粒子的 $\vec{\sigma}$ 沿 α 方向 $(\alpha = x, y, z)$ 的分量 $m_{i\alpha}$（$i = 1,2,3$）为

$$m_{1x}m_{2y}m_{3y} = 1, \quad m_{1y}m_{2x}m_{3y} = 1, \quad m_{1y}m_{2y}m_{3x} = 1$$

注意到 $m_{i\alpha}^2 = 1(i = 1,2,3,\ \alpha = x, y, z)$，则

$$(m_{1x}m_{2y}m_{3y})(m_{1y}m_{2x}m_{3y})(m_{1y}m_{2y}m_{3x}) = (m_{1x}m_{2x}m_{3x}) = 1$$

然而，由表 1.1 可以看到，$\sigma_{1x}\sigma_{2x}\sigma_{3x}$ 的本征值为 -1（量子力学结果）。因此，定域实在论与量子力学的预言矛盾，而实验测量结果肯定量子力学的预言结果。

3．量子不可克隆定理

在量子信息理论建立过程中，著名物理学家 Wootters 和 Zurek 于 1982 年曾提出过一个重要定理，即量子不可克隆定理。这个定理的实质已经蕴含在量子力学的态叠加原理中，实际上可以认为是量子态叠加原理的一个推论。

定理：一个未知的量子态不可能被完全精确复制。

证明：设 A 和 B 为两个量子系统，分别处于 $|\varphi_A\rangle$ 和 $|0_B\rangle$ 状态，其中 B 为空态。假设某种操作可把 A 的任意量子态复制到系统 B 上，即

$$|\varphi\rangle_A \otimes |0\rangle_B \xrightarrow{\text{复制}} |\varphi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B \tag{1.179}$$

类似地，有

$$|\psi\rangle_A \otimes |0\rangle_B \xrightarrow{\text{复制}} |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B \tag{1.180}$$

设有叠加态

$$|\varPsi\rangle = |\varphi\rangle + |\psi\rangle \tag{1.181}$$

则有

$$|\varPsi_A\rangle \otimes |0_B\rangle = |\varphi_A\rangle \otimes |0_B\rangle + |\psi_A\rangle \otimes |0_B\rangle \tag{1.182}$$

按量子态的复制做法，得到

$$|\varPsi_A\rangle \otimes |0_B\rangle \xrightarrow{\text{复制}} |\varPsi_A\rangle \otimes |\varPsi_B\rangle \tag{1.183}$$

$$|\varphi\rangle_A \otimes |0\rangle_B + |\psi\rangle_A \otimes |0\rangle_B \xrightarrow{\text{复制}} |\varphi\rangle_A \otimes |\varphi\rangle_B + |\psi\rangle_A \otimes |\psi\rangle_B \tag{1.184}$$

然而，由量子力学叠加原理得到，上两式右边并不相等，即

$$|\varphi_A\rangle \otimes |\varphi_B\rangle + |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle \neq |\varPsi_A\rangle \otimes |\varPsi_B\rangle \tag{1.185}$$

这是因为，根据叠加原理有

$$|\varPsi_A\rangle \otimes |\varPsi_B\rangle = |\varphi_A\rangle \otimes |\varphi_B\rangle + |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle + |\varphi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle + |\psi_A\rangle \otimes |\varphi_B\rangle \tag{1.186}$$

即由叠加原理，式(1.183)的右边等于式(1.186)的右边，因此得到式(1.185)的结论。所以，量子态的线性叠加原理与克隆任意量子态矛盾，定理得证。

另外，当且仅当两个量子态正交时，它们才可能被同一个复制装置克隆。关于这个结论我们此处不打算给出证明，仅作为结论提出。

4．量子隐形传态

实际上我们可以利用量子隐形传态方案来打破量子不可克隆定理对量子态传输的限制。1993 年 Bennett 等人提出了一个利用纠缠态来远程传送一个量子态信息的方案，称作量子隐形传态。不久，奥地利和意大利的两个研究小组分别在实验上利用孪生光子对的偏振纠缠态成功地实现了一个光子偏振态的远程传送。这一方案对于量子计算有实际意义，例如，它可能应用于一台量子计算机的不同部分之间的量子信息的传输上。

我们来考察量子隐形传态的一个简单例子。现在要求一个发送员 A 把自旋为1/2 的粒子的自旋态

$$|\phi\rangle_1 = a|\uparrow\rangle_1 + b|\downarrow\rangle_1, \quad |a|^2+|b|^2=1 \tag{1.187}$$

发送给远处的接收员 B，A 与 B 之间有一个经典的通道(如电话)。这也使得这个过程是在不违背爱因斯坦狭义相对论原理(光速是宇宙中速度的极限)的条件下进行的，可交换测量过程中的技术上的信息。但 A 本人对于待传送的量子态$|\phi\rangle$的具体情况可能一无所知，即他并不知道自旋态中 a 和 b 的具体值。他的传送方案是这样的：首先，制备粒子 1(自旋为1/2)处于$|\phi\rangle_1$态，放在 A 处；其次，制备粒子对(粒子 2 和 3，自旋都是1/2)处于如下纠缠态(即自旋单态，或称 EPR 态)：

$$|\psi^-\rangle_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_2|\downarrow\rangle_3 - |\downarrow\rangle_2|\uparrow\rangle_3\right) \tag{1.188}$$

然后，把粒子 2 传送给 A，同时把粒子 3 传送给 B。A 除了粒子 1 外，手头上还拥有同样的自旋为 1/2 的粒子 2。尽管 B 也不知道粒子 1 究竟处于何种量子态，现在出于某种需要，他想获得此量子态。按照经典的传送信息的方法，A 先对粒子 2 进行一番测量，以获得所有有关粒子 1 的信息，然后通过经典通信的方式将此信息传送给 B，再由 B 按照所接收的信息，将这种状态在另外的同样的粒子上构造出来。量子态的复制在量子世界里由于量子态的线性叠加原理及量子态不可克隆定理的限制而不可能成功。量子态超空间传送的方法巧妙地绕过这些限制，并成功利用了量子纠缠与量子测量坍缩的非定域性，使得未知量子态$|\phi\rangle$的信息由粒子 1 传送到粒子 3。通过下面的计算可以很清楚地表明以上说法。

我们可以将粒子 1、2、3 组成的量子态$|\Psi\rangle_{123} = |\psi^-\rangle_{23}|\phi\rangle_1$按照粒子 1 和 2 的量子态构成的 Bell 基展开，即

$$\begin{aligned}|\Psi\rangle_{123} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_2|\downarrow\rangle_3 - |\downarrow\rangle_2|\uparrow\rangle_3\right)\left(a|\uparrow\rangle_1 + b|\downarrow\rangle_1\right)\\ &= \frac{1}{2}\left[|\psi^+\rangle_{12}\left(-a|\uparrow\rangle_3 - b|\downarrow\rangle_3\right) + |\psi^-\rangle_{12}\left(a|\uparrow\rangle_3 - b|\downarrow\rangle_3\right)\right]\\ &\quad + \frac{1}{2}\left[|\varphi^+\rangle_{12}\left(a|\downarrow\rangle_3 + b|\uparrow\rangle_3\right) + |\varphi^-\rangle_{12}\left(a|\downarrow\rangle_3 - b|\uparrow\rangle_3\right)\right]\end{aligned} \tag{1.189}$$

其中，$|\psi^\pm\rangle_{12}$和$|\varphi^\pm\rangle_{12}$是粒子 1 和 2 构成的 Bell 基。如果 A 对粒子 1 和粒子 2 进行 Bell 基联合测量，将导致粒子 1 和粒子 2 的量子态以同样的概率 1/4 向 4 种 Bell 态$|\varphi^\pm\rangle_{12}$或$|\psi^\pm\rangle_{12}$之一坍缩。这样，A 的测量结果将有 4 种可能，得到任何一个结果的概率都为 1/4。测量使得粒子 1 和粒子 2 处于最大纠缠态，而粒子 2 和粒子 3 的纠缠性被破坏，粒子 1 的未知量子态也被破坏。相应于 A 的 4 种测量结果，粒子 3 将处于表 1.2 中所示的 4 种量子态。

表 1.2　测量之后粒子的量子态

测量之后粒子 1 和粒子 2 的量子态	测量之后粒子 3 的量子态
$\left\|\varphi^{+}\right\rangle_{12}$	$\left(a\left\|\downarrow\right\rangle_{3}+b\left\|\uparrow\right\rangle_{3}\right)$
$\left\|\varphi^{-}\right\rangle_{12}$	$\left(a\left\|\downarrow\right\rangle_{3}-b\left\|\uparrow\right\rangle_{3}\right)$
$\left\|\psi^{+}\right\rangle_{12}$	$\left(-a\left\|\uparrow\right\rangle_{3}-b\left\|\downarrow\right\rangle_{3}\right)$
$\left\|\psi^{-}\right\rangle_{12}$	$\left(a\left\|\uparrow\right\rangle_{3}-b\left\|\downarrow\right\rangle_{3}\right)$

从表 1.2 中可以发现，粒子 3 的 4 种量子态与原量子态$|\phi\rangle=a|\uparrow\rangle+b|\downarrow\rangle$实质上只差一个幺正变换(是物理上可实现的量子操作)。利用具有幺正性的泡利矩阵$\boldsymbol{\sigma}_x$、$\boldsymbol{\sigma}_y$、$\boldsymbol{\sigma}_z$和单位矩阵$\boldsymbol{\sigma}_0$，则有

$$\begin{cases}\left(a|\downarrow\rangle_3+b|\uparrow\rangle_3\right)=\boldsymbol{\sigma}_x\left(a|\uparrow\rangle_3+b|\downarrow\rangle_3\right)\\ \left(a|\downarrow\rangle_3-b|\uparrow\rangle_3\right)=-i\boldsymbol{\sigma}_y\left(a|\uparrow\rangle_3+b|\downarrow\rangle_3\right)\\ \left(-a|\uparrow\rangle_3-b|\downarrow\rangle_3\right)=-\boldsymbol{\sigma}_0\left(a|\uparrow\rangle_3+b|\downarrow\rangle_3\right)\\ \left(a|\uparrow\rangle_3-b|\downarrow\rangle_3\right)=\boldsymbol{\sigma}_z\left(a|\uparrow\rangle_3+b|\downarrow\rangle_3\right)\end{cases} \tag{1.190}$$

所以 A 测量之后将测量结果告知 B，B 只要按照测量结果依照式(1.190)对粒子 3 做相应的幺正变换($\boldsymbol{\sigma}_x$、$-i\boldsymbol{\sigma}_y$、$-\boldsymbol{\sigma}_0$、$\boldsymbol{\sigma}_z$中的一种)的逆变换，粒子 3 将处于粒子 1 在测量之前所处的量子态。这样，就完成了粒子未知状态的超空间传送。

这里我们注意到，在传送过程中，原来粒子 1 的自旋态已被破坏，状态已传给了粒子 3，这个结果并不违反量子态不可克隆定理。需要指出的是，A 测量的结果完全是随机的。如果他不将测量的结果告诉 B，B 将无法知道该做何种幺正变换，因而也无法完成量子态的传送。测量的结果只能以经典的方式传送，这也是量子态超空间传送要求 A 与 B 之间能进行经典通信的原因所在。

1.7　维格纳函数

量子态的演化通常由密度算符表述，由于算符的处理比较困难，往往在求解具体问题时，带来很大不便。解决这些问题时，通常将密度算符转化为各种准概率分布函数，如 P 函数、Q 函数和维格纳(Wigner)函数。其中维格纳函数一方面是表述量子态演化的有效工具，另一方面它的负值部分也是判断量子态非经典性的一个重要依据，因而在量子光学、量子信息等领域有着广泛的应用。不过维格纳函数并非真正意义上的概率分布函数，往往需要通过一些可观测量来重构各种量子态的维格纳函数，从而实现对它的有效测量。例如，量子层析理论就是在相空间利用 Radon 变换，使层析图(tomogram)函数与维格纳函数之间建立联系，即根据实验中测定的光场的边缘分布构造维格纳函数，进而获得光场的全部信息。下面我们对维格纳函数做简要介绍。

在量子力学中，单个粒子(或体系)的量子态是不能观测的，即在原则上不能用实验来测定；但对于在同样实验条件下制备出来的粒子(或体系)所构成的系统，量子态的测量却是有意义的。现今的量子态测量，即是测量与波函数或密度矩阵等价的维格纳函数。

与量子态$|\psi\rangle$或密度算符$\rho=|\psi\rangle\langle\psi|$相应的维格纳函数定义如下(为简单起见，以一维粒子为例)。

$$
\begin{aligned}
W(x,p) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*\left(x+\frac{x'}{2}\right)\psi\left(x-\frac{x'}{2}\right)\mathrm{e}^{ipx'/\hbar}\mathrm{d}x' \\
&= \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x-x'|\rho|x+x'\rangle\mathrm{e}^{i2px'/\hbar}\mathrm{d}x' \\
&= \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle x-x'|\psi\rangle\langle\psi|x+x'\rangle\mathrm{e}^{i2px'/\hbar}\mathrm{d}x \\
&= \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^*(x+x')\psi(x-x')\mathrm{e}^{i2px'/\hbar}\mathrm{d}x
\end{aligned}
\tag{1.191}
$$

$W(x,p)$ 也可以表示成动量空间波函数的积分，有

$$
\begin{aligned}
W(x,p) &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle p-p'|\rho|p+p'\rangle\mathrm{e}^{-i2xp'/\hbar}\mathrm{d}p' \\
&= \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle p-p'|\psi\rangle\langle\psi|p+p'\rangle\mathrm{e}^{-i2xp'/\hbar}\mathrm{d}p' \\
&= \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*(p+p')\phi(p-p')\mathrm{e}^{-i2xp'/\hbar}\mathrm{d}p' \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*\left(p+\frac{p'}{2}\right)\phi\left(p-\frac{p'}{2}\right)\mathrm{e}^{-ixp'/\hbar}\mathrm{d}p'
\end{aligned}
\tag{1.192}
$$

这可以由式(1.191)做傅里叶变换得到，即

$$
W(x,p) = \frac{1}{\pi\hbar}\cdot\frac{1}{2\pi\hbar}\iiint \mathrm{d}x'\mathrm{d}p'\mathrm{d}p''\mathrm{e}^{-i(x+x')p'/\hbar}\phi^*(p')\mathrm{e}^{i(x-x')p''/\hbar}\phi(p'')\mathrm{e}^{i2px'/\hbar}
\tag{1.193}
$$

令 $p'=u+v$， $p''=u-v$，则 $p'+p''=2u$， $p'-p''=2v$， $\left|\dfrac{\partial(p',p'')}{\partial(u,v)}\right|=2$， $\mathrm{d}p'\mathrm{d}p''=2\mathrm{d}u\mathrm{d}v$，得

$$
\begin{aligned}
W(x,p) &= \frac{1}{\pi\hbar}\iint \mathrm{d}u\mathrm{d}v\delta(p-u)\mathrm{e}^{-i2vx/\hbar}\phi^*(u+v)\phi(u-v) \\
&= \frac{1}{\pi\hbar}\int \mathrm{d}v\mathrm{e}^{-i2vx/\hbar}\phi^*(p+v)\phi(p-v)
\end{aligned}
\tag{1.194}
$$

将 v 换成 p'，即是式(1.192)。

1．维格纳函数的性质

(1) $W(x,p)$ 为相空间中的实函数，有

$$
W^*(x,p)=W(x,p)
\tag{1.195}
$$

在式(1.191)中令 $x'=-x''$，即可证明上式。

(2) $W(x,p)$ 具有准概率分布的含义，即

$$
\int \mathrm{d}pW(x,p)=\psi^*(x)\psi(x)
\tag{1.196}
$$

$$
\int \mathrm{d}xW(x,p)=\phi^*(p)\phi(p)
\tag{1.197}
$$

把式(1.191)代入式(1.196)，利用 $\int \mathrm{d}p\mathrm{e}^{i2x'p/\hbar}=2\pi\hbar\delta(2x')=\pi\hbar\delta(x')$，得到

$$
\int W(x,p)\mathrm{d}p=\int \mathrm{d}x'\psi^*(x+x')\psi(x-x')\delta(x')=\psi^*(x)\psi(x)
\tag{1.198}
$$

类似可证明式(1.197)。

(3) 对于只与坐标有关的力学量 $f(x)$ （如势能 $V(x)$ ）的平均值，可用 $W(x,p)$ 计算如下：

$$\begin{aligned}\overline{f(x)} &= \int \mathrm{d}x\mathrm{d}p W(x,p) f(x) \\ &= \frac{1}{\pi\hbar}\int \mathrm{d}x\mathrm{d}p\mathrm{d}x'\psi^*(x+x')\psi(x-x')\mathrm{e}^{i2px'/\hbar} f(x) \\ &= \int \mathrm{d}x\mathrm{d}x'\psi^*(x+x')\psi(x-x')\delta\left(x'\right) f(x) \\ &= \int \mathrm{d}x\psi^*(x) f(x)\psi(x)\end{aligned} \tag{1.199}$$

对于只与动量有关的力学量 $g(p)$ （如动能 $T = p^2/2m$ ）的平均值，可类似计算如下：

$$\begin{aligned}\overline{g(p)} &= \int \mathrm{d}x\mathrm{d}p W(x,p) g(p) = \int \phi^*(p) g(p)\phi(p)\mathrm{d}p \\ &= \int \psi^*(x) g\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{1.200}$$

不难证明，对于如下形式 $f(x)+g(p)$ 的力学量（如 $H = p^2/2m + V(x)$ ）的平均值，可如下计算：

$$\begin{aligned}\overline{f(x)+g(p)} &= \int \mathrm{d}x\mathrm{d}p W(x,p)(f(x)+g(p)) \\ &= \int \psi^*(x)\left(f(x)+g\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\right)\psi(x)\mathrm{d}x \\ &= \int \phi^*(p)\left(f\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)+g(p)\right)\phi(p)\mathrm{d}p\end{aligned} \tag{1.201}$$

(4) 由于 $W(x,p)$ 可取正值，也可取负值，所以不能像经典物理学中那样，把 $W(x,p)$ 看成粒子在同一时刻坐标取 x 、动量取 p 的概率密度（那样是违反不确定关系的）。然而可以证明，对于准经典态，$W(x,p) \geqslant 0$ 。

2．维格纳函数随时间的演化

利用薛定谔方程

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

不难证明，$W(x,p,t)$ 满足如下关系：

$$\begin{aligned}\frac{\partial W}{\partial t} &= -\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial W}{\partial p}+\sum_{\lambda(\text{奇})}\left(\frac{\hbar}{2i}\right)^{\lambda-1}\frac{1}{\lambda!}\left(\frac{\partial^\lambda V}{\partial x^\lambda}\right)\left(\frac{\partial^\lambda W}{\partial p^\lambda}\right) \\ &= -\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial W}{\partial p}+\left(\frac{\hbar}{2i}\right)^2\frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 V}{\partial x^3}\right)\left(\frac{\partial^3 W}{\partial p^3}\right)+\cdots\end{aligned} \tag{1.202}$$

当 $O(\hbar^2)$ 项可以忽略（或 $\partial^\lambda V/\partial x^\lambda = 0$ ，对 $\lambda \geqslant 3$ ）时，有

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\frac{p}{m}\frac{\partial W}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial W}{\partial p} \tag{1.203}$$

与经典统计物理中刘维定理形式上相同，有

$$\frac{\partial W_c}{\partial t}=-\frac{p}{m}\frac{\partial W_c}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial W_c}{\partial p} \tag{1.204}$$

方程式(1.202)和式(1.204)可以证明如下：为方便起见，把$W(x,p)$定义式(1.191)改写为

$$W(x,p)=\frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\psi^*(x+y)\psi(x-y)\mathrm{e}^{-i2py/\hbar} \tag{1.205}$$

利用薛定谔方程，可得

$$\begin{aligned}\frac{\partial W}{\partial t}&=\frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\left\{\frac{i\hbar}{2m}\left[-\frac{\partial^2\psi^*(x+y)}{\partial x^2}\psi(x-y)+\psi^*(x+y)\frac{\partial^2\psi(x-y)}{\partial x^2}\right]\right.\\&\quad\left.+\frac{i}{\hbar}\left[V(x+y)-V(x-y)\right]\psi^*(x+y)\psi(x-y)\right\}\mathrm{e}^{i2py/\hbar}\\&=\frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\left\{\frac{i\hbar}{2m}\left[-\frac{\partial^2\psi^*(x+y)}{\partial y^2}\psi(x-y)+\psi^*(x+y)\frac{\partial^2\psi(x-y)}{\partial y^2}\right]\right.\\&\quad\left.+\frac{i}{\hbar}\left[V(x+y)-V(x-y)\right]\psi^*(x+y)\psi(x-y)\right\}\mathrm{e}^{i2py/\hbar}\end{aligned} \tag{1.206}$$

式(1.206)第一部分分部积分后，化为

$$\begin{aligned}&-\frac{p}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\left\{\psi(x-y)\frac{\partial\psi^*(x+y)}{\partial y}-\psi^*(x+y)\frac{\partial\psi(x-y)}{\partial y}\right\}\mathrm{e}^{i2py/\hbar}\\&=-\frac{p}{m}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\left\{\psi(x-y)\frac{\partial\psi^*(x+y)}{\partial x}+\psi^*(x+y)\frac{\partial\psi(x-y)}{\partial x}\right\}\mathrm{e}^{i2py/\hbar}\\&=-\frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial x}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\psi^*(x+y)\psi(x-y)\,\mathrm{e}^{i2py/\hbar}\\&=-\frac{p}{m}\pi\hbar\frac{\partial}{\partial x}W(x,p)\end{aligned} \tag{1.207}$$

第二部分计算，利用$V(x+y)$和$V(x-y)$的泰勒展开式

$$V(x+y)-V(x-y)=2\sum_{\lambda(奇)}\frac{y^\lambda}{\lambda!}\frac{\partial^\lambda V(x)}{\partial x^\lambda} \tag{1.208}$$

于是第二部分化为

$$\begin{aligned}&\frac{2i}{\hbar}\sum_{\lambda(奇)}\frac{1}{\lambda!}\frac{\partial^\lambda V(x)}{\partial x^\lambda}\frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}yy^\lambda\psi^*(x+y)\psi(x-y)\mathrm{e}^{i2py/\hbar}\\&=\frac{2i}{\hbar}\sum_{\lambda(奇)}\frac{1}{\lambda!}\frac{\partial^\lambda V(x)}{\partial x^\lambda}\frac{\partial^\lambda}{\partial p^\lambda}\frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}y\psi^*(x+y)\psi(x-y)\mathrm{e}^{i2py/\hbar}\cdot\left(\frac{2i}{\hbar}\right)^{-\lambda}\\&=\sum_{\lambda(奇)}\left(\frac{\hbar}{2i}\right)^{\lambda-1}\frac{1}{\lambda!}\frac{\partial^\lambda V(x)}{\partial x^\lambda}\frac{\partial^\lambda}{\partial p^\lambda}W(x,p)\end{aligned} \tag{1.209}$$

于是式(1.202)得证。

下面我们再来证明式(1.204)。按经典正则系统分部

$$W_c(x,p)\propto\mathrm{e}^{-\beta E},\quad\beta=1/kT,\quad E=p^2/2m+V(x)$$

式中，k 为玻尔兹曼常数。利用刘维定理，$\mathrm{d}W_c/\mathrm{d}t=0$，而

$$\frac{\mathrm{d}W_c}{\mathrm{d}t}=\left(\frac{\partial W_c}{\partial x}\right)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}+\left(\frac{\partial W_c}{\partial p}\right)\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}+\frac{\partial W_c}{\partial t}=v\frac{\partial W_c}{\partial x}-\frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial W_c}{\partial p}+\frac{\partial W_c}{\partial t} \tag{1.210}$$

所以

$$\frac{\mathrm{d}W_c}{\mathrm{d}t}=-\frac{p}{m}\frac{\partial W_c}{\partial x}+\frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial W_c}{\partial p} \tag{1.211}$$

式(1.204)得证。

1.8 路 径 积 分

20 世纪 40 年代费曼(Feynman)提出了量子力学中不同于矩阵力学和波动力学的另一种理论，即路径积分(path integral)。理论的核心是构造量子力学中的传播子，而传播子包含了量子体系的全部信息。其优点在于把含时间问题和不含时间问题纳入同一个理论框架中来处理。如果说海森伯的矩阵力学是量子力学的一种代数形式，薛定谔的波动力学是量子力学的微分形式，即局域性描述，那么路径积分理论则是量子力学的一种整体性描述，它们是彼此等价的。路径积分理论形式在统计物理、凝聚态物理、粒子物理和核物理理论中已经得到广泛应用。

下面先给出传播子的路径积分表示公式，然后讨论保守量子系统的能谱和能量本征函数与传播子间的关系。为了简单起见，先讨论质点在一维欧氏空间中的运动，由此得到的结果很容易被推广到位形空间是 N 维欧氏空间的系统。

设质点的哈密顿函数为

$$H(q,p,t)=\frac{p^2}{2m}+V(q,t) \tag{1.212}$$

对薛定谔方程

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

积分，可得

$$\left|\psi(t_B)\right\rangle=T\left[\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_A}^{t_B}H(t)\mathrm{d}t\right\}\right]\left|\psi(t_A)\right\rangle=U(t_B,t_A)\left|\psi(t_A)\right\rangle \tag{1.213}$$

式中，T 表示时序积，$U(t_B,t_A)$ 表示把 t_A 时刻状态变换成 t_B 时刻状态的时间演化算符。

令 $\left|q\right\rangle$ 和 $\left|p\right\rangle$ 分别为算符 q 和 p 的本征态，则有

$$\left\langle q|q'\right\rangle=\delta(q-q'),\ \left\langle p|p'\right\rangle=\delta(p-p'),\ \left\langle q|p\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\{ipq/\hbar\} \tag{1.214}$$

及

$$\int\left|q\right\rangle\left\langle q\right|\mathrm{d}q=\int\left|p\right\rangle\left\langle p\right|\mathrm{d}p=1 \tag{1.215}$$

应用关系式(1.215)，可从式(1.213)得出在 q 表象下的波函数随时间的变化：

$$\psi(q_B,t_B)=\left\langle q_B|\psi(t_B)\right\rangle=\left\langle q_B\right|U(t_B,t_A)\left|\psi(t_A)\right\rangle=\int\left\langle q_B\right|U(t_B,t_A)\left|q_A\right\rangle\psi(q_A,t_A)\mathrm{d}q_A \tag{1.216}$$

积分变换式(1.216)的核 $K(q_B,t_B;q_A,t_A)=\left\langle q_B\right|U(t_B,t_A)\left|q_A\right\rangle$ 称作传播子，它给出了波函数在位形空

间中传播的完整描述。特别当我们知道质点在 t_A 时刻的位置为 q_A 时，它在 t_B 时刻出现在 $[q_B, q_B + \mathrm{d}q_B]$ 区间内的条件概率是

$$P(q_B, t_B; q_A, t_A)\mathrm{d}q_B = |K(q_B, t_B; q_A t_A)|^2 \,\mathrm{d}q_B \tag{1.217}$$

传播子 K 能够用路径积分表示的原因，是时间演化算符 U 满足合成规则：

$$U(t_B, t_A) = U(t_B, t_C)U(t_C, t_A) \tag{1.218}$$

与此对应，传播子的合成规则为

$$K(q_B, t_B; q_A t_A) = \int K(q_B, t_B; q_C t_C)K(q_C, t_C; q_A t_A)\mathrm{d}q_C \tag{1.219}$$

它表示了波函数在位形空间中传播的惠更斯原理。现在我们在时间区间 $[t_A, t_B]$ 内插入 n 个等距分割点 t_i，$i = 1,\cdots,n$。重复使用合成规则式(1.219)后，得到

$$K(B, A) = \int\cdots\int \prod_{j=1}^{n+1} K(j, j-1)\mathrm{d}q_1\cdots\mathrm{d}q_n \tag{1.220}$$

这里我们采用简化写法

$$K(B, A) = K(q_B, t_B; q_A, t_A)\text{，}\quad K(j, j-1) = K(q_j, t_j; q_{j-1}, t_{j-1})$$

并设 $q_0 = q_A$，$t_0 = t_A$，$q_{n+1} = q_B$，$t_{n+1} = t_B$。

当 $n \to \infty$ 时，时间间隔 $\varepsilon = t_j - t_{j-1} = (t_B - t_A)/n+1 \to 0$，有

$$\begin{aligned} K(j, j-1) &= \left\langle q_j \left| T\left[\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_{j-1}}^{t_j} H(t)\mathrm{d}t\right\}\right]\right| q_{j-1}\right\rangle \\ &\approx \left\langle q_j \left| \exp\{-i\varepsilon H(t_j)/\hbar\}\right| q_{j-1}\right\rangle \end{aligned} \tag{1.221}$$

考虑到算符 $\varepsilon(p)^2/(2m\hbar)$ 与算符 $\varepsilon V(q,t)/\hbar$ 的对易式含有 ε^2 的因子，略去 ε 的高次项后可得

$$\begin{aligned} \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}H(t)\right\} &= \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left(\frac{(p)^2}{2m} + V(q,t)\right)\right\} \\ &\approx \exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V(q,t)\right\}\exp\left\{-\frac{i\varepsilon}{2m\hbar}(p)^2\right\} \end{aligned} \tag{1.222}$$

将式(1.222)代入式(1.221)，并应用式(1.214)和式(1.215)，得 $K(j, j-1)$ 近似为

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty} \left\langle q_j \left| \exp\left\{-i\varepsilon V(q, t_j)/\hbar\right\}\right| p_j \right\rangle \left\langle p_j \left| \exp\left\{-i\varepsilon(p)^2/(2m\hbar)\right\}\right| q_{j-1}\right\rangle \mathrm{d}p_j \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{\frac{ip_j}{\hbar}(q_j - q_{j-1}) - \frac{i\varepsilon}{\hbar}\left(\frac{{p_j}^2}{2m} + V(q_j, t_j)\right)\right\}\mathrm{d}p_j \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}}\exp\left\{\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_j - q_{j-1}}{\varepsilon}\right)^2 - V(q_j, t_j)\right]\right\} \end{aligned} \tag{1.223}$$

在得出最后的等式时，我们使用了菲涅尔(A.J.Fresnel)积分公式：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{i(ax - bx^2)\}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{ib}}\exp\left\{ia^2/(4b)\right\} \tag{1.224}$$

于是，式(1.220)可写成

$$K(B,A)=\lim_{n\to\infty}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}}\prod_{j=1}^{n}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}}\mathrm{d}q_j\right]\cdot\exp\left\{\frac{i\varepsilon}{\hbar}\sum_{j=1}^{n+1}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_j-q_{j-1}}{\varepsilon}\right)^2-V(q_j,t_j)\right]\right\} \tag{1.225}$$

以 Λ 记全体在 t_A 时刻从 q_A 出发于 t_B 时刻抵达 q_B 的路径集合， $C=\{q(t)\}\in\Lambda$ 是满足条件 $q(t_j)=q_j$（$j=1,\cdots,n$）的一条路径，则

$$\lim_{n\to\infty}\varepsilon\sum_{j=1}^{n+1}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{q_j-q_{j-1}}{\varepsilon}\right)^2-V(q_j,t_j)\right]=\int_{t_A}^{t_B}L(\dot{q}(t),q(t),t)\,\mathrm{d}t=W(C)$$

恰好就是路径 C 的哈密顿主函数。当 $n\to\infty$ 时，式(1.225)中对 $q_1,q_2,\cdots,q_n$ 的积分相当于对 Λ 中全体路径 C 的积分，因此式(1.225)可写成

$$K(B,A)=\int_{\Lambda}D[C]\exp\{iW(C)/\hbar\} \tag{1.226}$$

其中符号

$$\int_{\Lambda}D[C]=\lim_{n\to\infty}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}}\prod_{j=1}^{n}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}}\mathrm{d}q_j\right] \tag{1.227}$$

表示对 Λ 中全体路径 C 的积分。对于具有 N 个自由度的系统，我们假定哈密顿函数可写成

$$H(\vec{q},\vec{p},t)=\sum_{\alpha=1}^{N}\frac{(p^\alpha)^2}{2m_\alpha}+V(\vec{q},t) \tag{1.228}$$

定义

$$\int_{\Lambda}D[C]=\lim_{n\to\infty}\prod_{\alpha=1}^{n}\left\{\sqrt{\frac{m_\alpha}{2\pi\hbar i\varepsilon}}\prod_{j=1}^{n}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{m_\alpha}{2\pi\hbar i\varepsilon}}\mathrm{d}q_j^\alpha\right]\right\} \tag{1.229}$$

则容易证明此时传播子的路径积分表达式仍由式(1.226)给出。

从 $K(B,A)$ 的路径积分表达式(1.226)可知，各条路径 C 对积分的贡献依赖于权函数 $\exp\{iW(C)/\hbar\}$。如果我们用宏观尺度来衡量各个物理量的大小，$\hbar$ 就是一个小量，此时路径的微小改变将引起权函数相因子的巨大变化，从而使得相邻路径对积分的贡献相互抵消。因此，在经典近似下，对传播子 $K(B,A)$ 的主要贡献来自满足极值条件 $\delta W(C_{AB})=0$ 的经典轨道 C_{AB} 及其邻近的路径。换句话说，量子力学的路径积分表示直接给出了经典力学中的哈密顿原理。

对于保守量子系统，能量算符 H 与时间无关，故有

$$U(t_B,t_A)=\exp\{-i(t_B-t_A)H/\hbar\}$$

此时传播子 $K(B,A)$ 可以用 H 的本征值和本征函数来表示，有

$$\begin{aligned}K(B,A)&=\langle q_B|\exp\{-i(t_B-t_A)H/\hbar\}|q_A\rangle\\&=\sum_j\langle q_B|\psi_j\rangle\langle\psi_j|q_A\rangle\exp\{-i(t_B-t_A)E_j/\hbar\}\\&=\sum_j\psi_j^*(q_B)\psi_j(q_B)\exp\{-iE_jt/\hbar\}=K(q_B,q_A,t)\end{aligned} \tag{1.230}$$

其中，$t=t_B-t_A$，E_j 和 ψ_j 分别是 H 的本征值和本征函数。从传播子 $K(B,A)$ 可得到与时间无关

的格林函数：

$$G^+(q_B,q_A,E)=\frac{1}{i\hbar}\int_0^{\infty}\exp\{iEt/\hbar\}K(q_B,q_A,t)\mathrm{d}t \\ =\lim_{\varepsilon\to+0}\sum_j\frac{\psi_j^*(q_A)\psi_j(q_B)}{E-E_j+i\varepsilon} \tag{1.231}$$

利用广义函数的分解公式（P 表示函数在极点处取主部）

$$\lim_{\varepsilon\to+0}\frac{1}{E-E_j+i\varepsilon}=P\left(\frac{1}{E-E_j}\right)-i\pi\delta(E-E_j)$$

将 $G^+(q_B,q_A,E)$ 分解成实部和虚部，求得

$$\operatorname{Im}G^+(q_B,q_A,E)=-\pi\sum_j\psi_j^*(q_A)\psi_j(q_B)\delta(E-E_j) \tag{1.232}$$

我们把

$$\rho(q_B,q_A,E)=\sum_j\psi_j^*(q_A)\psi_j(q_B)\delta(E-E_j)=-\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}G^+(q_B,q_A,E) \tag{1.233}$$

称作所研究量子系统的谱函数。将它对 q 求迹，便可得态密度为

$$\rho(E)=\int_{-\infty}^{+\infty}\rho(q,q,E)\mathrm{d}q=\sum_j\delta(E-E_j) \tag{1.234}$$

因此，只要我们能算出某个量子系统的传播子 $K(B,A)$，就能通过式(1.231)和式(1.233)计算出该系统的能谱与定态波函数。