第四章　量子系统随时间的演化

主要内容

- 对于孤立的量子系统, Schrödinger 方程或者时间演化算子决定了量子态随时间的演化.
- 有两种观点描述量子系统的演化: Schrödinger 图像和 Heisenberg 图像.
- 哈密顿量可以不显含时间, 也可以显含时间, 后者较难处理, 不易获得时间演化算子.
- 随时间演化过程中量子态的相位变化有两方面的来源: 动力学相和几何相.

到目前为止, 我们讨论的内容都不是真正的物理过程, 因为没有出现时间这个重要的参数.

在经典力学中, 在某个时刻物理系统的状态对应于相空间中的点, 其坐标由物理量 (广义坐标和广义动量) 确定. 物理系统随时间的演化过程表现为相空间中的一条曲线, 系统的哈密顿量支配了演化过程.

在量子力学中, 系统的状态和力学量不是一回事. 既可以考虑量子态随时间的演化, 也可以考虑力学量随时间的演化. 前者对应于 Schrödinger 图像, 后者对应于 Heisenberg 图像. 不论在哪一种图像中, 哈密顿量是时间演化过程的生成元.

1 Schrödinger 方程

Schrödinger 方程描述的是孤立量子系统的量子态随时间的变化.

在量子力学中, 孤立的系统随时间的演化是一个酉变换过程, 时间演化算子是

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} \tag{1}$$

这里, H 是系统的哈密顿量, 暂且假设 H 不显含时间. 量子态随时间的演化表示为

$$|\psi(0)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle = e^{-iHt/\hbar}\,|\psi(0)\rangle$$

为了得到 $|\psi(t)\rangle$ 满足的方程, 对上式求时间的导数, 有

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = H\,|\psi(t)\rangle \tag{2}$$

即 Schrödinger 方程.

几点说明.

- 从量子理论的发展历史来说, Schrödinger 首先提出了描述粒子空间波函数的具有波动形式的方程, 然后 Heisenberg 提出了矩阵形式, 再然后 Dirac 将这两种形式统一在变换理论中. 我们采用的是 Dirac 的从变换理论出发的叙述方式, 这与历史的发展顺序正好相反.

- 在方程 (2) 中, 我们并没有指明描述量子系统的 Hilbert 空间是怎样的, 这是抽象形式的 Schrödinger 方程. 对于具体的问题, 需要赋以相应的空间 —— 有限维的或是无限维的, 并选择特定的表象, 然后才能将 (2) 式表示为明确的形式 —— 关于时间的微分方程组或是关于时间和空间的偏微分方程.
- 在上述讨论中, 我们假设系统的哈密顿量不显含时间, 在这种情况下, 方程 (1) 和方程 (2) 是等价的. 而在一般情况下, 系统的哈密顿量可以显含时间, 那么我们应该求解 Schrödinger 方程, 而不是直接运用时间演化变换 (1), 实际上, 在这种情况下, $U(t)$ 不易得到. 关于这一点, 以后在讨论含时问题的时候会给出具体的例子, 不过, 可以先看看 Sakurai 书 Modern quantum mechanics 72 页的内容.

(2) 式是右矢形式, 相应的左矢形式是

$$-i\hbar\frac{\mathrm{d}\langle\psi(t)|}{\mathrm{d}t}=\langle\psi(t)|\,H$$

用密度矩阵表示 $|\psi(t)\rangle$, 记作 $\psi(t)=|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$, 容易得到,

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\psi(t)}{\mathrm{d}t}=[H,\psi(t)]$$

对于混和态, 有相同的形式,

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

类似于经典力学中的 Liouville 方程.

2 能量表象

现在, 在具体的表象中写出方程 (2) 的形式. 设描述某个量子系统的 Hilbert 空间是有限维的 $\mathbb{C}^N$. 该系统的一个观测量是 $A=\sum_i a_i\,|\alpha_i\rangle\langle\alpha_i|$. 在 A 表象中, $\mathscr{H}$ 的基向量是 $\{|\alpha_i\rangle\}$. 哈密顿量 $H=\sum_{i,j}h_{ij}\,|\alpha_i\rangle\langle\alpha_j|$. t 时刻的量子态 $|\psi(t)\rangle=\sum_i c_i(t)\,|\alpha_i\rangle$. Schrödinger 方程写为

$$i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_1(t)\\ \dot{c}_2(t)\\ \vdots\\ \dot{c}_n(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}h_{11}&h_{12}&\cdots&h_{1n}\\ h_{21}&h_{22}&\cdots&h_{2n}\\ \vdots&\vdots&\vdots&\vdots\\ h_{n1}&h_{n2}&\cdots&h_{nn}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1(t)\\ c_2(t)\\ \vdots\\ c_n(t)\end{pmatrix}.$$

这是 N 个一阶微分方程组成的方程组, 各个微分方程之间有耦合, 很难求解.

考虑选择 H 表象, 即能量表象 (惯用的说法). 在 H 表象中, H 是对角的, 表示为

$$H=\sum_j E_j\,|e_j\rangle\langle e_j|$$

E_j 是 H 的本征值, 相应的本征向量是 $|e_j\rangle$. 在能量表象中, 量子态在 $|e_j\rangle$ 上展开, 展开系数仍用 c_j 表示. 这时 Schrödinger 方程中的耦合被去除了. 容易求得

$$c_j(t)=c_j(0)e^{-iE_jt/\hbar}$$

实际上, 由于目前我们讨论的是不含时的 H, 求解 Schrödinger 方程等价于用时间演化算子作用于初态. 在能量表象中, 时间演化算子的形式是对角矩阵,

$$U(t)=e^{-iHt/\hbar}=\sum_j e^{-iE_jt/\hbar}\,|e_j\rangle\langle e_j|$$

于是 t 时刻的量子态是

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle = e^{-iHt/\hbar}\,|\psi(0)\rangle$$

或者用密度矩阵表示, 系统从初态 (纯态或者混合态) $\rho(0)$ 演化到 t 时刻的 $\rho(t)$,

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t).$$

如果系统的初态 $|\psi(0)\rangle$ 碰巧是 H 的某个本征态, 对应的本征值为 E, 即 $H\,|\psi(0)\rangle = E\,|\psi(0)\rangle$, 那么 t 时刻的量子态是

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}\,|\psi(0)\rangle = e^{-iEt/\hbar}\,|\psi(0)\rangle$$

容易看到, $H\,|\psi(t)\rangle = E\,|\psi(t)\rangle$, 也就是说, 系统在以后任意时刻的量子态都是 H 的本征态, 且本征值仍然是 E, 量子态的变化只是体现在相位上, 这就是所谓的**定态** (stationary state).

如果初态 $|\psi(0)\rangle$ 不是 H 的本征态, 那么, 在 H 表象中, 时间演化算子是

在能量表象中具有对角形式, 即

$$U(t) = \mathrm{diag}\left(e^{-iE_1t/\hbar},\quad e^{-iE_2t/\hbar},\quad \cdots,\quad e^{-iE_nt/\hbar}\right)$$

系统的初态

$$|\psi(0)\rangle = \sum_j c_j(0)\,|e_j\rangle$$

在 t 时刻,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j e^{-iE_jt/\hbar}c_j(0)\,|e_j\rangle \tag{3}$$

如果在某个时刻 t, 测量系统的哈密顿量, 那么得到结果 E_j 的几率是

$$|c_j(t)|^2 = |e^{-iE_jt/\hbar}c_j(0)|^2 = |c_j(0)|^2$$

系统处于某个能级的几率没有改变. 当然, 系统的哈密顿量的期望值也没有改变.

一个不恰当的看法

如果看到了 $|\psi\rangle = \sum_j c_j\,|e_j\rangle$, 很可能说这样的话: 系统以几率 $|c_0|^2$ 处于基态, 以几率 $|c_1|^2$ 处于第一激发态, 如此等等. 如果这么说, 那么就应该把相应的量子态表示为混和态,

$$\rho = \sum_j |c_j|^2\,|e_j\rangle\langle e_j|$$

从 $|\psi\rangle$ 到 ρ 暗含了对哈密顿量的测量过程.

简单的含时情形

在任意两个不同的时刻 t_1 和 t_2, 系统的哈密顿量彼此对易, 即 $[H(t_1), H(t_2)] = 0$. 在任意时刻, 哈密顿量的本征值 $E_j(t)$ 依赖于时间, 但是本征向量 $|e_j\rangle$ 是始终不变的. 也就是说, 哈密顿量总是可以表示为对角形式,

$$H = \mathrm{diag}\left(E_1(t)\quad E_2(t)\quad \cdots\quad E_N(t)\right) \tag{4}$$

t 时刻的量子态 $|\psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^{N} c_j(t)\,|e_j\rangle$ 满足 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}c_j(t)}{\mathrm{d}t} = E_j(t)c_j(t)$$

容易得到

$$c_j(t) = c_j(0)\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t E_j(t')\,\mathrm{d}t'\right\}$$

在这种情形下, 时间演化算子可以写为

$$U(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t')\,\mathrm{d}t'\right\}$$

3

观测量的期望值

3.1 纯态情形

在 H 表象中, t 时刻的量子态由 (3) 式给出, 即

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)\,|e_j\rangle\,, \quad c_j(t) = c_j(0)e^{-iE_jt/\hbar}$$

在量子态 $|\psi(t)\rangle$ 中, 观测量 A 的期望值是 $\langle A\rangle(t) = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle$, 具体形式是

$$\langle A\rangle(t) = \sum_{n,m} c_n(0)c_m^*(0)\,\langle e_m|\,A\,|e_n\rangle\ e^{i(E_m-E_n)t/\hbar}$$

若 A 不显含时间, 矩阵元 $\langle e_m|\,A\,|e_n\rangle$ 不依赖于时间. $\langle A\rangle(t)$ 随时间的变化由一系列振荡项相加组成, 各个振荡项的频率是

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}$$

频率 ω_{mn} 仅仅与 H 有关, 与力学量 A 无关, 与初态无关. 频率 ω_{mn} 被称为 **Bohr 频率**.

如果矩阵元 $\langle e_m|\,A\,|e_n\rangle$ $(m\neq n)$ 为零, 那么就没有相应的振荡现象. 力学量 A 的期望值不随时间变化, 是守恒量. 实际上, 既然矩阵元 $\langle e_m|\,A\,|e_n\rangle$ $(m\neq n)$ 为零, 表明 A 在能量表象中是对角的, $[A,H]=0$, 这是守恒量应该满足的条件. 所有与哈密顿量对易的力学量在能量表象中具有对角矩阵的形式, 它们的期望值不随时间变化. 量子态的演化在守恒量的期望值的意义上具有 "稳定" 的表现.

如果矩阵元 $\langle e_m|\,A\,|e_n\rangle$ 不为零, 或者说 $[A,H]\neq 0$, 那么 A 的期望值随时间变化. 量子态 $|\psi(t)\rangle$ 的变化相对于力学量 A 而言不是 "稳定" 的. 在 $|\psi(t)\rangle$ 观测 A, 得到某个结果 a_k (对应的本征向量是 $|\alpha_k\rangle$) 的几率是

$$p(a_k) = |\,\langle\alpha_k|\psi(t)\rangle\,|^2 = \left|\sum_j c_j(0)e^{-iE_jt/\hbar}\,\langle\alpha_k|e_j\rangle\right|^2$$

这个几率随时间改变. 我们说, 对于力学量 A 而言, 可以观测到**跃迁**现象 —— 不同时刻观测到 a_k 的几率是不同的.

3.2 用密度矩阵表示

设 t 时刻系统的量子态是 $\rho(t)$, 则观测量 A 的期望值是

$$\langle A\rangle(t) = \mathrm{Tr}[A\rho(t)] \tag{5}$$

考虑期望值随时间的变化率, 对上式求导,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle(t) = \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle \tag{6}$$

这里, $\left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle$ 的来源是, 力学量 A 可能显含时间, 它的形式中可能包含随时间变化的参数. 例如, 含时谐振子的势能是 $\frac{1}{2}m\omega(t)^2x^2$, 其中频率 ω 随时间变化. 下面推导 (6) 式.

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t} &= \frac{d}{\mathrm{d}t}\mathrm{Tr}[\rho(t)A] \\
&= \mathrm{Tr}\left[\frac{\mathrm{d}\rho(t)}{\mathrm{d}t}A + \rho(t)\frac{\partial A}{\partial t}\right] \\
&= \mathrm{Tr}\left[\frac{1}{i\hbar}[H,\rho(t)]A + \rho(t)\frac{\partial A}{\partial t}\right] \\
&= \mathrm{Tr}\left[\frac{1}{i\hbar}\big(H\rho(t)A - \rho(t)HA\big) + \rho(t)\frac{\partial A}{\partial t}\right] \\
&= \mathrm{Tr}\left[\frac{1}{i\hbar}\big(\rho(t)AH - \rho(t)HA\big) + \rho(t)\frac{\partial A}{\partial t}\right] \\
&= \mathrm{Tr}\left[\frac{1}{i\hbar}\rho(t)[A,H] + \rho(t)\frac{\partial A}{\partial t}\right] \\
&= \frac{1}{i\hbar}\langle [A,H]\rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle
\end{aligned}$$

如果 $\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t} = 0$, 那么观测量 A 是守恒量. 在 Heisenberg 图像一节中将对守恒量再作讨论.

4 自旋 1/2 粒子在磁场中的运动

本节讨论最简单的量子系统随时间的演化: 自旋 1/2 粒子处于磁场 $\mathbf{B}$ 中.

4.1 与电磁学中磁矩的类比

电磁学中, 半径为 a, 面积为 $A = \pi a^2$ 的电流环产生的磁矩

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{A}I$$

而电流强度可以表示为

$$I = \frac{q}{T} = \frac{qv}{2\pi a}$$

令 $\mathbf{s} = \mathbf{r}\times m\mathbf{v}$, $s = rmv = amv$. 电流强度可以重写为

$$I = \frac{qs}{2Am}, \quad A = \pi a^2$$

磁矩

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q\mathbf{s}}{2m}$$

量子情形下, 角动量用算子表示, 记作 $\mathbf{S}$.

对于电子, $q = e < 0$. 还要考虑电子的 g 因子 g_e.

$$\boldsymbol{\mu}_e = g_e \frac{e\mathbf{S}}{2m_e} = -\frac{g_e \mu_B}{\hbar}\mathbf{S}$$

其中 μ_B 是 Bohr 磁子

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e}$$

因子 g_e 的近似值为 2, 代入 $\boldsymbol{\mu}_e$, 并且把角动量 $\mathbf{S}$ 写为 $\frac{\hbar}{2}$,

$$\boldsymbol{\mu}_e = \frac{e\mathbf{S}}{m_e} = \frac{e\hbar}{2m_e}\boldsymbol{\sigma}$$

在磁场 $\mathbf{B}$ 中, 电子的自旋部分的哈密顿量是

$$H = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{B} = -\frac{e\hbar}{2m_e}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$$

4.2 不含时情形

令 $\mathbf{B} = B\mathbf{n}$, $\omega_0 = \frac{|e|B}{m_e}$,

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \sigma_n$$

H 的本征值是 $\pm\frac{1}{2}\hbar\omega_0$. 基态是 $|n-\rangle$, 激发态是 $|n+\rangle$. $|n\pm\rangle$ 是 σ_n 的本征向量, 当然也是 H 的本征向量.

设 $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, $H = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z$. 设系统的初态

$$|\psi(0)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\phi}{2}} \cos\frac{\theta}{2} \\ \\ e^{i\frac{\phi}{2}} \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

$|\psi(0)\rangle$ 的 Bloch 向量是

$$\mathbf{r}(0) = (\sin\theta\cos\phi,\ \sin\theta\sin\phi,\ \cos\theta).$$

求解 Schrödinger 方程

$$i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_0(t) \\ \dot{c}_1(t) \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0(t) \\ c_1(t) \end{pmatrix}.$$

立即有

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2}\ e^{-i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}} \\ \sin\frac{\theta}{2}\ e^{i\frac{\phi+\omega_0 t}{2}} \end{pmatrix}$$

或者, 直接计算

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle\,.$$

时间演化算子 $U(t)$ 的形式是

$$U(t) = e^{-iHt/\hbar} = e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}\sigma_z} = \mathbb{1}\cos\frac{\omega_0 t}{2} - i\sigma_z\sin\frac{\omega_0 t}{2}$$

又可以用密度矩阵表示,

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

$$\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t).$$

$$\rho(0) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \mathbf{r}(0)\cdot\boldsymbol{\sigma}).$$

考虑 $U(t)\sigma_i U^\dagger(t)$, $i = x, y, z$, 可以得到

$$r_1(0)\sigma_x + r_2(0)\sigma_y + r_3(0)\sigma_z \xrightarrow{U(t)}$$

$$\sigma_x\big[r_1(0)\cos\omega_0 t - r_2(0)\sin\omega_0 t\big]$$

$$+\sigma_y\big[r_1(0)\sin\omega_0 t + r_2(0)\cos\omega_0 t\big]$$

$$+\sigma_z\ r_3(0)$$

于是获得 Bloch 向量的变换,

$$\mathbf{r}(0) \longrightarrow \mathbf{r}(t) = R(z, \omega_0 t)\mathbf{r}(0).$$

其中 $R(z, \omega_0 t)$ 表示 $\mathbb{R}^3$ 空间中绕 z 旋转角度 $\omega_0 t$ 的变换矩阵. $\mathbf{r}(t)$ 的具体形式是

$$\begin{pmatrix} r_x(t) \\ r_y(t) \\ r_z(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\omega_0 t & -\sin\omega_0 t & 0 \\ \sin\omega_0 t & \cos\omega_0 t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_x(0) \\ r_y(0) \\ r_z(0) \end{pmatrix} \tag{7}$$

自旋角动量 $\mathbf{S}$ 在 t 时刻的期望值是

$$\left.\begin{aligned} \langle S_x\rangle(t) &= \tfrac{\hbar}{2}\sin\theta\cos(\phi + \omega_0 t), \\ \langle S_y\rangle(t) &= \tfrac{\hbar}{2}\sin\theta\sin(\phi + \omega_0 t), \\ \langle S_z\rangle(t) &= \tfrac{\hbar}{2}\cos\theta. \end{aligned}\right\} \tag{8}$$

注意到 S_z 的期望值不随时间变化, 它是守恒量. 而 S_x 和 S_y 的期望值随时间变化 —— 它们与 H 不对易, 不是守恒量. 期望值向量 $\langle\mathbf{S}\rangle(t)$ 绕 z 轴以角速度 ω_0 进动, 表现出与 Bloch 向量相同的运动行为. 上述结果可以类比于经典电磁学中的磁矩在匀强磁场中的运动行为, 即 Larmor 进动, 因此 ω_0 被称为 Larmor 频率.

如果哈密顿量是 $f\mathbb{1}+\frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z$

态的演化多出来一个相因子

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t f(t')\,\mathrm{d}t'\right\}$$

在密度矩阵的表达式中, 看不到这个相因子.

也就是说, 在 $\mathbb{C}^2$ 空间中, 有无穷多条演化路径对应于 ray space (这里是 Bloch 球面) 中的一条路径.

如果哈密顿量形如 $a\sigma_z+b\sigma_x$, $a,b\in\mathbb{R}$

这样的哈密顿量对应于某个 σ_n.

4.3 含时情形

简单的含时情形

如果磁场的方向不变, 但是大小随时间变化, 那么系统的哈密顿量属于 (4) 式描述的情形. 例如

$$H=\frac{1}{2}\hbar\omega_0(t)\sigma_z$$

其中的 $\omega_0(t)$ 是时间的函数. 这是形如 (4) 式的哈密顿量, 容易得到 t 时刻的量子态.

一个可解的模型

磁场绕 z 轴进动, 但大小不变.

$$\mathbf{B}(t)=B_0\mathbf{e}_z+B_1(\cos\omega t\,\mathbf{e}_x+\sin\omega t\,\mathbf{e}_y)$$

可以将 $\mathbf{B}(t)$ 表示为

$$\mathbf{B}(t)=B\mathbf{n}(t)$$

其中 $B=\sqrt{B_0^2+B_1^2}$ 是磁场的大小, $\mathbf{n}(t)$ 表示磁场的方向,

$$\mathbf{n}(t)=\begin{pmatrix}\frac{B_1}{B}\cos\omega t & \frac{B_1}{B}\sin\omega t & \frac{B_0}{B}\end{pmatrix}$$

哈密顿量是

$$H(t)=-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}=\frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z+\frac{1}{2}\hbar\omega_1(\sigma_x\cos\omega t+\sigma_y\sin\omega t) \tag{9}$$

其中

$$\omega_0=\frac{|e|B_0}{m},\quad \omega_1=\frac{|e|B_1}{m}$$

哈密顿量的本征值不随时间改变, 始终是 $\pm\frac{\hbar}{2}\sqrt{\omega_0^2+\omega_1^2}$, 相应的本征向量随时间改变, 分别是 $|\mathbf{n}(t)\pm\rangle$, 它们是哈密顿量的瞬时本征向量. 以后讨论绝热近似的时候, 将选择 $|\mathbf{n}(t)\rangle$ 作为基向量. 目前, $\mathbb{C}^2$ 空间的基向量仍然是 σ_z 的本征向量 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$.

考虑 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t}=H(t)\,|\psi(t)\rangle$$

可以直接求解, 不过, 可以考虑一下旋转坐标系. $\mathbf{B}(t)$ 绕 z 轴旋转, 在一个绕 z 轴旋转的参考系看来, 磁场的旋转角速度会发生变化. 在绕 z 轴以角速度 ω 旋转的参考系中, 磁场不旋转.

我们用酉矩阵 $V(t)$ 表示绕 z 轴旋转 ωt 的酉变换, 其形式是

$$V(t) = \exp\left\{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z\right\}.$$

参考系的变化, 视作表象的变换. 通过 $V(t)$, 变换到旋转参考系中.

$$\tilde{H}(t) = V^\dagger(t)H(t)V(t) = \frac{1}{2}\hbar\omega_1\sigma_x + \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z,$$

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = V^\dagger(t)\ |\psi(t)\rangle.$$

下面将看到, 变换后哈密顿量不再显含时间.

变换前的 Schrödinger 方程

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = H(t)\,|\psi(t)\rangle$$

将 $|\psi(t)\rangle = V\ |\tilde{\psi}(t)\rangle$ 代入, 有

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = i\hbar V\frac{d\,|\tilde{\psi}(t)\rangle}{dt} + \frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_z\,|\psi(t)\rangle = H(t)\,|\psi(t)\rangle$$

在第二个等号的两端左乘 $V^\dagger(t)$, 在最右端将出现 $\tilde{H}(t)$, 再将 $\tilde{H}(t)$ 的形式代入, 得到在旋转参考系中的方程,

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\tilde{\psi}(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \left[\frac{1}{2}\hbar\omega_1\sigma_x + \frac{1}{2}\hbar(\omega_0-\omega)\sigma_z\right]|\tilde{\psi}(t)\rangle \tag{10}$$

$$\text{令}\quad \Delta = \omega - \omega_0$$

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2}\hbar\omega_1\sigma_x - \frac{1}{2}\hbar\Delta\sigma_z = \frac{1}{2}\,\hbar\Omega\,\mathbf{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}$$

$$\Omega = \sqrt{\omega_1^2+\Delta^2},\quad \mathbf{n} = (\sin\theta,\ 0,\ \cos\theta)$$

$$\sin\theta = \frac{\omega_1}{\sqrt{\omega_1^2+\Delta^2}},\quad \cos\theta = \frac{-\Delta}{\sqrt{\omega_1^2+\Delta^2}}$$

$$U_{\text{eff}}(t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}H_{\text{eff}}\,t\right\} = \mathbb{1}\cos\frac{\Omega t}{2} - i\sigma_x\frac{\omega_1}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2} + i\sigma_z\frac{\Delta}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2} \tag{11}$$

最终,

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z\right\}\ U_{\text{eff}}(t)\ |\psi(0)\rangle \tag{12}$$

这里, 时间演化算子 $U(t)$ 的形式不能简单地表示为

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_0^t H(t')\,\mathrm{d}t'\right\}$$

这是因为, 不同时刻的 $H(t)$ 不对易. 需要求解 Schrödinger 方程.

可以从 (12) 式写出时间演化算子 $U(t)$,

$$U(t) = \exp\left\{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z\right\} U_{\text{eff}}(t) \tag{13}$$

但是, 需要注意的是, 上述形式的酉变换并不满足 $U(t_1)U(t_2) = U(t_1 + t_2)$, 原因在于, 作为生成元的哈密顿量 $H(t)$ 是含时的.

- 从 $|\psi(0)\rangle$ 到 $|\psi(t)\rangle$ 的酉变换的形式不再具有简单的形式.
- 最好从 Schrödinger 方程出发求解 t 时刻的态.

表象的变换会改变 Schrödinger 方程的形式么?

如果只是形式上的变换, 即数学运算意义上的, 不涉及时间的变换, 那么有

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\,|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = H\,|\psi(t)\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$|\psi(t)\rangle = U\,\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle, \quad H = U\tilde{H}U^\dagger$$

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\left|\tilde{\psi}(t)\right\rangle}{\mathrm{d}t} = \tilde{H}\,|\tilde{\psi}(t)\rangle$$

这时, Schrödinger 方程的形式不变. 但是, 上面的含时问题中用到的表象变换与时间有关, 方程的形式因之发生改变. 注意出现在 (10) 中的哈密顿量是 H_{eff} 而不是 $\tilde{H}$.

下面讨论这样两个问题:

1. 跃迁几率.
2. 绝热过程.

假设粒子的初态是 $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$, 即初始时刻粒子的自旋方向指向 $+z$. 如果在 t 时刻测量 σ_z (或者说自旋角动量的 z 分量), 那么得到 -1 的结果 (或者说得到自旋向下) 的几率是多少? 这个几率就是**跃迁几率**, 记作 $p_{+1\to-1}$.

$$p_{+1\to-1} = |\,\langle 1|\psi(t)\rangle\,|^2$$

内积

$$\begin{aligned}\langle 1|\psi(t)\rangle &= \langle 1|\exp\left\{-i\tfrac{\omega t}{2}\sigma_z\right\} U_{\text{eff}}(t)\ |\psi(0)\rangle \\ &= e^{i\frac{\omega t}{2}}\,\langle 1|\,U_{\text{eff}}(t)\,|0\rangle \\ &= e^{i\frac{\omega t}{2}}\left(-i\frac{\omega_1}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}\right)\end{aligned}$$

所以, 跃迁几率是

$$p_{+1\to-1} = \frac{\omega_1^2}{\Omega^2}\sin^2\frac{\Omega t}{2}$$

当 $\frac{\Omega t}{2}=\frac{\pi}{2},\ \frac{3\pi}{2},\ \cdots$ 时, 跃迁几率达到最大, 最大值为

$$\frac{\omega_1^2}{\omega_1^2+\Delta^2}\leqslant 1$$

如果 $\Delta=0$, 那么跃迁几率为 1. 我们称这种情况为**共振**. 在共振时刻, 粒子的自旋指向发生翻转. 此时 $\Omega=\omega_1$. 注意到 $\omega_1\propto B_1$. 足够强的横向磁场可以在短时间内实现翻转.

在共振情形下,

$$U_{\text{eff}}(t)=\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}H_{\text{eff}}\,t\right\}=\mathbb{1}\cos\frac{\Omega t}{2}-i\sigma_x\frac{\omega_1}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}+i\sigma_z\frac{\Delta}{\Omega}\sin\frac{\Omega t}{2}$$

$$\Big\Downarrow\ \Delta=0,\ \Omega=\omega_1$$

$$U_{\text{eff}}^{\text{res}}(t)=e^{-i\frac{\omega_1 t}{2}\sigma_x}$$

时间演化算子是

$$U^{\text{res}}(t)=e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}\ e^{-i\frac{\omega_1 t}{2}\sigma_x}$$

当 $\omega_1 t=\pi$ 时, $U_{\text{eff}}^{\text{res}}(\frac{\pi}{\omega_1})=-i\sigma_x$, 导致了从 $|0\rangle$ 到 $|1\rangle$ 的翻转 (有整体相因子的差异).

下图显示的是非共振情形, 参数选择为

$$\theta=\frac{\pi}{6},\quad \omega_0=1,\quad \omega=0.8,\quad \omega_1=1,\quad \Delta=-0.2$$

接近共振的时候, Bloch 向量描绘的路径就不是很混乱了. 下图对应的的参数是

$$\theta=\frac{\pi}{6},\quad \omega_0=1,\quad \omega=0.99,\quad \omega_1=1,\quad \Delta=-0.01$$

当初态为 $|0\rangle$ 的时候, Bloch 向量的变化如下图所示.

再考虑绝热过程. 在以后讨论近似方法的时候会对绝热过程进行更详细的分析, 这里只给出一个形象的图像.

逐步减小横向磁场绕 z 转动的频率, 即减小 ω. 而且, 在 $t=0$ 时刻, 我们让粒子初态的 Bloch 方向与磁场 $\mathbf{B}(0)$ 一致, 此时它们都位于 xz 平面内, 与 z 轴的夹角为 θ.

选择如下参数

$$\theta = \frac{\pi}{4}, \quad \omega_0 = 1, \quad \omega = 0.1, \quad \omega_1 = 1, \quad B = 1.1$$

在下图中可以看出, 磁场绕 z 轴旋转的频率设为 $\omega = 0.1$. 我们看到, 随着磁场的进动, Bloch 向量在磁场方向周围晃动, 并大体上跟随进动. 如果把 ω 设置得更小, 那么 Bloch 向量基本上与磁场同步进动.

稍作进一步的说明. 哈密顿量 $H(t)$ 显含时间. 在任意某个时刻 t, 瞬时本征值和本征向量分别记作 $E_j(t)$ 和 $|\varphi_j(t)\rangle$, $j = 0, 1$,

$$H(t)\,|\varphi_j(t)\rangle = E_j(t)\,|\varphi_j(t)\rangle$$

注意, 这里的 $|\varphi_j(t)\rangle$ 并不描述系统量子态随时间的演化, 而只是求解 $H(t)$ 的本征态得到的结果. 量子态随时间的演化是由 Schrödinger 方程 $i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = H(t)\,|\psi(t)\rangle$ 决定的. 我们当然可以把 $|\psi(t)\rangle$ 表示为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)\,|\varphi_j(t)\rangle$$

然后把上述表达式代入 Schrödinger 方程, 接着求解 $c_j(t)$. 这种做法留待讨论绝热近似的时候再说. 在这里我们只是形象地描述一下绝热过程.

当 ω 很小的时候, 如果初态 $|\psi(0)\rangle = |\varphi_0(0)\rangle$, 那么在以后某个时刻 t, 有 $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \simeq |\varphi_0(t)\rangle\langle\varphi_0(t)|$. 这反映在 t 时刻的 Bloch 向量基本上与该时刻的磁场方向重合, 而该时刻的磁场方向就是 $|\varphi_0(t)\rangle$ 的 Bloch 向量的方向.

5 Heisenberg 图像

5.1 主动观点和被动观点

考虑测量力学量 A 得到结果 a_j 的几率随时间的变化,

$$p_j(t) = \left| \langle \alpha_j | U(t) | \psi(0) \rangle \right|^2 \tag{14}$$

有两种观点看待上面的结果.

1. 主动观点: 将酉变换 $U(t)$ 作用于初始时刻的态矢量 $|\psi(0)\rangle$, 使之变化到 t 时刻的 $|\psi(t)\rangle$. 这是 Schrödinger 图像.
2. 被动观点: 将酉变换 $U(t)$ 向左作用于 Hilbert 空间的对偶空间的基向量 $\langle \alpha_j|$. 这是 Heisenberg 图像.

现在考虑 Heisenberg 图像. 系统的量子态不再随时间演化, 而观测量随时间演化, 这表现为观测量 A 的本征向量的改变:

$$\langle \alpha_j(t)| = \langle \alpha_j | U(t)$$

或者用右矢形式表示为

$$|\alpha_j(t)\rangle = U^\dagger(t) |\alpha_j\rangle \tag{15}$$

5.2 Heisenberg 运动方程

力学量 A 随时间的变化是

$$A(t) = U^\dagger(t) A(0) U(t), \quad A(0) = A \tag{16}$$

仍然认为这是力学量随时间变化的积分形式. 对 $A(t)$ 求时间的导数, 得到

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}A(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}U^\dagger(t)}{\mathrm{d}t} A U(t) + U^\dagger(t) A \frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t} + U^\dagger(t) \frac{\partial A}{\partial t} U(t) \\
&= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t) H(t) A U(t) + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger(t) A H(t) U(t) + U^\dagger(t) \frac{\partial A}{\partial t} U(t)
\end{aligned} \tag{17}$$

在上面最后的表达式中, 令

$$A^{\mathsf{H}}(t) = U^\dagger(t) A U(t), \quad H^{\mathsf{H}}(t) = U^\dagger(t) H U(t) \tag{18}$$

它们分别是 t 时刻观测量 A 和哈密顿量 H 在 Heisenberg 图像中的形式, 实际上就是 (16) 式所表示的观测量随时间的演化. 在 (17) 式中再令

$$\left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)^{\mathsf{H}} \equiv U^\dagger(t) \frac{\partial A(0)}{\partial t} U(t)$$

得到 Heisenberg 运动方程

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}A^{\mathsf{H}}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar} \left[A^{\mathsf{H}}, H^{\mathsf{H}} \right] + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)^{\mathsf{H}}} \tag{19}$$

可以与力学量的期望值的方程 (6) 比较.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle A \rangle (t) = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

注意, 这里的期望值 $\langle A \rangle (t)$ 可以在 Schrödinger 图像中理解为

$$\langle A \rangle (t) = \mathrm{Tr}[A \rho(t)]$$

也可以在 Heisenberg 图像中理解为

$$\langle A\rangle(t)=\mathrm{Tr}[A(t)\rho(0)]$$

另有一个需要注意的地方: 当观测量或哈密顿量显含时间的时候, 处理 Heisenberg 方程是一件很麻烦的事. 在下一节中举例说明.

5.3 守恒量, 运动常数

在 Schrödinger 图像中, 如果在任意时刻的量子态 $\rho(t)$ 中, 观测量 A 的期望值不随时间改变, 那么它是守恒量, 即

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle(t)}{\mathrm{d}t}=0 \implies A\text{ 是守恒量}$$

在 Heisenberg 图像中,

$$\frac{\mathrm{d}A^{\mathsf{H}}}{\mathrm{d}t}=0 \implies A\text{ 是守恒量}$$

如果 A 不显含时间, 即 $\frac{\partial A}{\partial t}=0$, 那么由方程 (6),

$$[A,H]=0 \implies \frac{\mathrm{d}\langle A\rangle(t)}{\mathrm{d}t}=0 \implies A\text{ 是守恒量}$$

由方程 (19),

$$[A^{\mathsf{H}},H^{\mathsf{H}}]=0 \implies A\text{ 是守恒量}$$

注意到 $[A,H]=0$ 和 $[A^{\mathsf{H}},H^{\mathsf{H}}]=0$ 是等价的.

不论在经典力学还是在量子力学中, 系统的守恒量都具有重要意义. Noether 定理从经典力学一直延伸到量子场论.

6 Heisenberg 图像中的自旋 1/2 粒子

6.1 哈密顿量不显含时间

在 4.2 节中, 磁场的大小和方向都不随时间变化, 系统的哈密顿量不显含时间. 现在考虑观测量随时间的变化. 时间演化算子是

$$U(t)=e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}\sigma_z}=\mathbb{1}\cos\frac{\omega_0 t}{2}-i\sigma_z\sin\frac{\omega_0 t}{2}=\mathrm{diag}\left(e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}}\quad e^{i\frac{\omega_0 t}{2}}\right)$$

讨论自旋角动量的 x 方向上的分量 S_x 随时间的演化, 由于 $S_x=\frac{\hbar}{2}\sigma_x$, 我们把 σ_x 视作观测量.

$$\sigma_x(t)=U^\dagger(t)\sigma_x U(t)=\sigma_x\cos\omega_0 t-\sigma_y\sin\omega_0 t$$

类似地可以得到 σ_y 和 σ_z 随时间的演化, 我们把结果写成如下形式,

$$\begin{pmatrix}\sigma_x(t)\\ \sigma_y(t)\\ \sigma_z(t)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\omega_0 t & -\sin\omega_0 t & 0\\ \sin\omega_0 t & \cos\omega_0 t & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sigma_x(0)\\ \sigma_y(0)\\ \sigma_z(0)\end{pmatrix} \tag{20}$$

与 Bloch 向量的演化形式 (7) 比较, 可以看到, 二者是类似的. Bloch 向量实际上是 Pauli 矩阵的期望值, 也就是说

$$\begin{pmatrix} \langle\sigma_x\rangle(t) \\ \langle\sigma_y\rangle(t) \\ \langle\sigma_z\rangle(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\omega_0 t & -\sin\omega_0 t & 0 \\ \sin\omega_0 t & \cos\omega_0 t & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\sigma_x\rangle(0) \\ \langle\sigma_y\rangle(0) \\ \langle\sigma_z\rangle(0) \end{pmatrix}$$

上式的含义是, $\boldsymbol{\sigma}$ 的三个分量算子的期望值构成 $\mathbb{R}^3$ 中的向量, 表明 $\boldsymbol{\sigma}$ 是一个向量算子, 在以后介绍角动量的时候将讨论标量算子和向量算子.

6.2 哈密顿量显含时间

在 4.3 节中讨论磁场绕 z 轴进动的情形, 这是一个含时问题. 现在考虑观测量 σ_z 随时间的变化.

首先需要时间演化算子 $U(t)$, 这由 (13) 式给出. 然后利用 (16) 或者 (18) 式计算 $\sigma_z^{\mathsf{H}}(t)$, 具体结果是

$$\sigma_z^{\mathsf{H}}(t) = \left[-\frac{2\omega_1\Delta}{\Omega^2}\sin^2\frac{\Omega t}{2}\right]\sigma_x + \left[\frac{\omega_1}{\Omega}\sin\Omega t\right]\sigma_y + \left[\frac{1}{\Omega^2}(\Delta^2+\omega_1^2\cos\Omega t)\right]\sigma_z$$

这个计算过程肯定有些繁琐. 稍微简单一些的办法是考虑 σ_z 的本征向量在 (15) 式作用下的演化,

$$|0(t)\rangle = U^\dagger(t)\,|0\rangle\,, \quad |1(t)\rangle = U^\dagger(t)\,|1\rangle$$

从而给出

$$\sigma_z^{\mathsf{H}}(t) = |0(t)\rangle\langle 0(t)| - |1(t)\rangle\langle 1(t)|$$

接着考虑在 Heisenberg 图像中哈密顿量的形式. 由于哈密顿量显含时间, 所以有必要对 $H^{\mathsf{S}}(t)$ 和 $H^{\mathsf{H}}(t)$ 再作说明. 上标 S 表示 Schrödinger 图像, $H^{\mathsf{S}}(t)$ 就是 (9) 式给出的 $H(t)$. 而 $H^{\mathsf{H}}(t)$ 是 Heisenberg 图像中的哈密顿量, 在 $H^{\mathsf{H}}(t)$ 的形式中, 不仅含有显含时间的函数引起的变化, 而且还包含动力学演化给出的贡献. $H^{\mathsf{H}}(t)$ 的具体形式是

$$H^{\mathsf{H}}(t) = h_x(t)\sigma_x + h_y(t)\sigma_y + h_z(t)\sigma_z$$

其中

$$\begin{aligned} h_x(t) &= \frac{\omega_1\hbar\big[-\omega_0\Delta+\omega_1^2+\Delta(\Delta+\omega_0)\cos\Omega t\big]}{2\Omega^2} \\ h_y(t) &= \frac{\omega_1\hbar(\Delta+\omega_0)\sin\Omega t}{2\Omega} \\ h_z(t) &= \frac{\hbar\big[\Delta(\omega_0\Delta-\omega_1^2)+\omega_1^2(\Delta+\omega_0)\cos\Omega t\big]}{2\Omega^2} \end{aligned}$$

最后来考察一下共振情形下的结果. 当 $\Delta = 0$ 时, 出现了共振现象, 此时 $\Omega = \omega_1$. 在这种情形下,

$$H^{\mathsf{H}}(t) = \frac{\hbar}{2}\big(\sigma_x\omega_1 + \sigma_y\omega_0\sin\omega_1 t + \sigma_z\omega_0\cos\omega_1 t\big)$$

$$\sigma_z^{\mathsf{H}}(t) = \sigma_y\sin\omega_1 t + \sigma_z\cos\omega_1 t$$

可以看到, 在共振情况下, Heisenberg 图像中的哈密顿量就像是自旋 1/2 粒子在一个绕 x 轴以角速度 ω_1 进动的磁场中的哈密顿量, 而自旋角动量的 z 分量则是以角速度 ω_1 绕 x 轴进动. 再注意到 $\sigma_z^{\mathsf{H}}(0) = \sigma_z$, 以及 $\sigma_z^{\mathsf{H}}\big(\frac{\pi}{\omega_1}\big) = -\sigma_z$, 这体现了共振时在特定时刻实现了自旋翻转.

几何相

在时间演化 $U(t)$ 的过程中, 总的相位改变定义为 $\gamma(t) = \arg\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle$. 一个很自然的问题是: 总的相位差是量子态的动力学演化的结果吗? 话句话说, 总相位 $\gamma(t)$ 是可积的吗?

首先需要说明动力学演化带来的相位改变. 系统的动力学演化是在哈密顿量支配下的演化. 在量子力学中, Schrödinger 方程 (或者时间演化算子) 决定了量子态随时间的变化, 即

$$|\psi(0)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle$$

如果相位差 $\gamma(t)$ 可以表示为无穷过程的积分, 那么整体相位是可积的.

考虑无穷小过程, 从 t 到 $t+\mathrm{d}t$. 量子态的改变是 $|\psi(t)\rangle \longrightarrow |\psi(t+\mathrm{d}t)\rangle$, 相位的改变是

$$\mathrm{d}\gamma_d = \arg\langle\psi(t)|\psi(t+\mathrm{d}t)\rangle$$

注意到

$$|\psi(t+\mathrm{d}t)\rangle = |\psi(t)\rangle + |\dot{\psi}(t)\rangle\,\mathrm{d}t, \tag{21}$$

$$\langle\psi(t)|\psi(t+\mathrm{d}t)\rangle = 1 + \langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle\,\mathrm{d}t \tag{22}$$

并且 $\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle$ 是纯虚数, 这是因为

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1,$$

$$\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle + \langle\dot{\psi}(t)|\psi(t)\rangle = 0.$$

所以

$$\mathrm{d}\gamma_d(t) = \arctan\big(-i\,\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle\,\mathrm{d}t\big) \approx -i\,\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle\,\mathrm{d}t, \tag{23}$$

$$\dot{\gamma}_d = -i\,\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle \tag{24}$$

从 $t=0$ 到 τ 时刻的动力学相就是

$$\gamma_d(\tau) = -i\int_0^\tau \langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle\,\mathrm{d}t = -\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau \langle\psi(t)|\,H(t)\,|\psi(t)\rangle\,\mathrm{d}t$$

但是, 总相位 $\gamma(\tau)$ 却不一定等于总的动力学相, 二者的差是几何相,

$$\boxed{\gamma_g(\tau) = \gamma(\tau) - \gamma_d(\tau)} \tag{25}$$

一个简单的例子

考虑 4.2 节中描述的自旋 1/2 粒子在匀强磁场中的演化. 设初探是 $|\psi(0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$, 在 t 时刻, 量子态是

$$|\psi(t)\rangle = U(t)\,|\psi(0)\rangle = e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}}\cos\frac{\theta}{2}\,|0\rangle + e^{i\frac{\omega_0 t}{2}}\sin\frac{\theta}{2}\,|1\rangle$$

$t=0$ 时的量子态和 $t=\tau$ 时刻的量子态的总的相位差是

$$\gamma_t(\tau)=\arg\langle\psi(0)|\psi(\tau)\rangle=-\arctan\left[\cos\theta\tan\frac{\omega_0\tau}{2}\right]$$

从初始时刻 $t=0$ 到 τ 时刻的动力学相是

$$\gamma_d(\tau)=-i\int_0^\tau\left(-i\frac{\omega_0}{2}\right)\cos\theta\,\mathrm{d}t=-\frac{\omega_0\tau}{2}\cos\theta$$

显然 $\gamma_t\neq\gamma_d$, 因而几何相 $\gamma_g(\tau)$ 是

$$\begin{aligned}\gamma_g(\tau)=&\gamma(\tau)-\gamma_d(\tau)\\=&-\arctan\left[\cos\theta\tan\frac{\omega_0\tau}{2}\right]+\frac{\omega_0\tau}{2}\cos\theta\end{aligned}$$

特别地, 当 $\tau=T=\frac{2\pi}{\omega}$, 量子态的 Bloch 向量回到了初始位置, 这是 Bloch 向量的循环演化,

$$\psi(0)=|\psi(0)\rangle\langle\psi(0)|=|\psi(T)\rangle\langle\psi(T)|=\psi(T)$$

但是 $|\psi(T)\rangle=-|\psi(0)\rangle$, 总的相位差是 $\gamma(T)=\pi$, 动力学相 $\gamma_d(T)=-\pi\cos\theta$,

$$\gamma_g(T)=\pi(1+\cos\theta)\mod 2\pi$$

形象地说, Bloch 向量在 Bloch 球面上路径是闭合的, 有相应的立体角. 几何相等于路径围成的立体角的一半. 对于非闭合的路径, 用测地线连接起点和终点, 构成立体角, 仍然有 “立体角的一半” 的结论.

在上面的例子中可以看出几何相的 “几何” 意义: 不依赖于动力学过程, 而是由 base space (这里是 Bloch 球面) 中的路径决定的.

需要对 “不依赖动力学过程” 作说明. 在上面的例子中, 可以让磁场的大小随时间改变, 但保持方向不变. 也就是说, ω_0 可以是时间的函数, 因此, Bloch 向量不再是绕 z 作匀角速度进动. 这是一个不同的动力学演化过程, Bloch 向量的循环演化也需要不同的时间, 但是 Bloch 向量在 Bloch 球面上的路径保持不变. 对于给定的路径, 不同的动力学过程有相同的几何相.

还可以注意到, 如果 (24) 式中的 $\langle\psi|\dot{\psi}\rangle=0$, 那么动力学相等于零, 总的相位差就等于几何相. 这种情况被称为平行输运 (parallel transport). 在上面的例子中, $\langle\psi(t)|\dot{\psi}(t)\rangle=-i\frac{\omega_0}{2}\cos\theta\neq0$, 所以不是平行输运. 但是, 可以对哈密顿量的形式稍作改变, 实现平行输运. 设 $H(t)=-\frac{\hbar\omega_0}{2}\cos\theta+H_0$, 其中 $H_0=\frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z$. 与 $H(t)$ 对应的时间演化算子是

$$U(t)=\exp\left\{i\frac{\omega_0 t}{2}\cos\theta\right\}\ \exp\left\{-i\frac{\omega_0 t}{2}\sigma_z\right\}$$

上式第一项是一个相因子, 可以消除动力学相.

对于 base space 中的一条路径, 在态空间 (即 Hilbert 空间) 中有无穷多条路径与之对应, 其中有且仅有一条路径是平行输运.