第四章　　量子系统随时间的演化

Schrödinger 方程

Hamilton 量是时间演化的生成元

经典力学中关于这方面的讨论见 Goldstein 书, Classical Mechanics, 9.6 节.

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.

时间演化算子作用于量子态, 使其从初始时刻 $t=0$ 演化到 t 时刻, 即

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

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

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

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.

对于孤立量子系统量子态随时间的演化 (即酉演化), Schrödinger 方程是比时间演化算子 $U(t)$ 更为基本的描述方式.

(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, 即

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

类似于经典力学中的 Liouville 方程.

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 方程等价于计算

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

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 $\rho(t)$,

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

在能量表象中, 时间演化算子 $U(t)$ 也是对角的,

$$\begin{aligned} U(t) = e^{-iHt/\hbar} &= \sum_j e^{-iE_jt/\hbar}\,|e_j\rangle\langle e_j| \\ &= \mathrm{diag}\left(e^{-iE_1t/\hbar},\quad e^{-iE_2t/\hbar},\quad \cdots,\quad e^{-iE_nt/\hbar}\right) \end{aligned}$$

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, 系统的初态

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

在 t 时刻,

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

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.

注 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.

观测量的期望值

知道了态的演化, 接下来需要知道力学量的一些事情. 我们能说力学量也随时间变化么?

- 主动观点和被动观点只能选择其一.
- 目前知道的事实是:
  - 量子态随时间的演化, $|\psi(0)\rangle \longrightarrow |\psi(t)\rangle$.
  - 力学量是用来观测的, 观测结果是力学量的本征值, 以一定的几率出现.

那么, 测量结果的几率是如何随时间变化的?

在时刻 $t=0$, 测量力学量 A 得到结果 a_i 的几率是

$$p_i(0) = |\langle\alpha_i|\psi(0)\rangle|^2$$

在时刻 t, 得到结果 a_i 的几率

$$p_i(t) = |\langle\alpha_i|\psi(t)\rangle|^2$$

测量结果的几率随时间变化.

$$p_i(t) = \Big|\left\langle\alpha_i|U(t)|\psi(0)\right\rangle\Big|^2$$

酉变换 $U(t)$ 或者向右作用于 $|\psi(0)\rangle$, 或者向左作用于 $\langle\alpha_i|$. 这也就是说, 或者选择主动观点, 或者选择被动观点. 目前选择了主动观点, 于是, 力学量 A 不随时间变化.

在主动观点下, 可以说力学量的期望值随时间的变化. t 时刻的态 $|\psi(t)\rangle$. 力学量 A 在 t 时刻的期望值 $\langle A\rangle(t) = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle$. 期望值满足的方程是

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle A\rangle(t) = \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle} \tag{3}$$

这里, $\langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle$ 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, 对于自旋 1/2 粒子, 假设有一个形如 $f(t)\sigma_z$ 的观测量, 其中 $f(t)$ 是时间的函数; 再比如, 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.

下面证明 (3) 式.

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

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

设 t 时刻系统处于纯态 $|\psi(t)\rangle$, 可以写出观测量 A 的期望值的具体形式. 选择 H 表象, 将 $|\psi(t)\rangle$ 表示为

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

在 t 时刻 A 的期望值为

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

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

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

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.

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 $\boldsymbol{B}$ 中.

先考虑电磁学中说的磁矩. 面积为 A 的电流环产生的磁矩

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

而电流强度可以表示为

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

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

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

磁矩

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

量子情形下, 角动量用算子表示, 记作 $\boldsymbol{S}$.

对于电子, $q = e < 0$. 还要考虑电子的 g 因子 g_e.

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

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 $\boldsymbol{S}$ 写为 $\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$,

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

在磁场 $\boldsymbol{B}$ 中, 电子的自旋部分的哈密顿量是

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

不含时情形

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

$$H = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \sigma_n = \omega_0 \, S_n = \omega_0 \, \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{S}.$$

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 $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$, $H = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z$. 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

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

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

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

从初态和末态的形式, 可以构造出 $U(t)$ 的矩阵. 实际上,

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

又可以用密度矩阵表示,

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

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

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

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

$$\begin{aligned}&r_1(0)\sigma_x+r_2(0)\sigma_y+r_3(0)\sigma_z\xrightarrow{U(t)}\\ &\sigma_x\big[r_1(0)\cos\omega_0 t-r_2(0)\sin\omega_0 t\big]\\ &+\sigma_y\big[r_1(0)\sin\omega_0 t+r_2(0)\cos\omega_0 t\big]\\ &+\sigma_z\ r_3(0)\end{aligned}$$

于是获得 Bloch 向量的变换,

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

力学量的期望值, $\langle\boldsymbol{S}\rangle$,

$$\left.\begin{aligned}\langle S_x\rangle&=\tfrac{\hbar}{2}\sin\theta\cos(\phi+\omega_0 t),\\ \langle S_y\rangle&=\tfrac{\hbar}{2}\sin\theta\sin(\phi+\omega_0 t),\\ \langle S_z\rangle&=\tfrac{\hbar}{2}\cos\theta.\end{aligned}\right\}\tag{4}$$

与 Bloch 向量一样, 绕 z 轴旋转. 旋转的角速度是 ω_0, 与磁感应强度的大小 B 有关.

还可以注意到, 在 (4) 中, S_z 的期望值不随时间变化, 而 S_x 和 S_y 的期望值是随时间变化的 —— 它们与 H 不对易.

Bloch 向量的三个分量对应于 (实际上是正比于) 自旋角动量的三个分量的期望值. 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, 我们可以将 ω_0 称为 Larmor 频率.

含时情形

考虑随时间变化的磁场 $\boldsymbol{B}(t)$,

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

自旋 1/2 粒子的哈密顿量是

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

其中

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

哈密顿量显含时间, 它的瞬时本征向量与时间有关, 不能作为 Hilbert 空间的基向量. 需要直接求解 Schrödinger 方程.

这种情形下的 Schrödinger 方程是两个彼此间有耦合的微分方程, 直接求解并不困难, 不过, 可以考虑一下旋转坐标系. $\boldsymbol{B}(t)$ 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.

$$\begin{aligned}\tilde{H}(t) &= V^\dagger(t)H(t)V(t) = \frac{1}{2}\hbar\omega_1\sigma_x + \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z,\\ |\tilde{\psi}(t)\rangle &= V^\dagger(t)\ |\psi(t)\rangle\,.\end{aligned}$$

变换后哈密顿量将不再显含时间.

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,

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

$$令\quad \Delta = \omega - \omega_0$$

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

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

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

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

最终,

$$|\psi(t)\rangle = \exp\left\{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z\right\}\ U_{\text{eff}}(t)\ |\psi(0)\rangle \tag{5}$$

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 (5) 式写出时间演化算子 $U(t)$,

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

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.

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

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

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

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

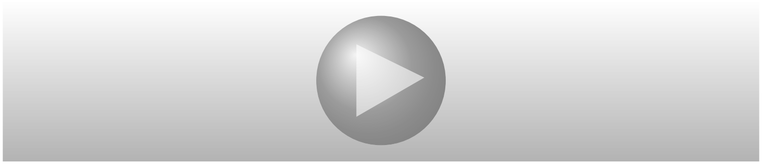
如果 $\Delta = 0$, 那么跃迁几率为 1. 我们称这种情况为**共振**. 在共振时刻, 粒子的自旋指向发生翻转. 此时 $\Omega = \omega_1$. 注意到 $\omega_1 \propto B_1$. 足够强的横向磁场可以在短时间内实现翻转.

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 $\boldsymbol{B}(0)$ 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 $|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \simeq |\varphi_0(t)\rangle\langle\varphi_0(t)|$. 这体现在, t 时刻的量子态 $|\psi(t)\rangle$ 对应的 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.

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

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

$$\Downarrow$$

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

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

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.

Heisenberg 图像

考虑测量力学量 A 得到结果 a_j 的几率随时间的变化,

$$p_j(t)=\left|\,\langle\alpha_j|U(t)|\psi(0)\rangle\,\right|^2 \tag{6}$$

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 $|\psi(t)\rangle$. 主动观点对应于 Schrödinger 图像.

被动观点: 在 (6) 式中, 将酉变换 $U(t)$ 向左作用于 $\langle\alpha_j|$, 令

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

或者

$$|\alpha_j(t)\rangle=U^{\dagger}(t)\,|\alpha_j\rangle \tag{7}$$

(7) 式描述的是 $|\alpha_j\rangle$ 的变换.

在几率 $p_j(t)$ 的表达式 (6) 中, 对于内积 $\langle\alpha_j|U(t)|\psi(0)\rangle$ 就有了两种看法. 可以说是 $|\psi(t)\rangle$ 和 $|\alpha_j\rangle$ 的内积, 而且 $|\psi(t)\rangle$ 是量子态向着时间的正方向演化的结果; 也可以说是 $|\psi(0)\rangle$ 和 $|\alpha_j(t)\rangle$ 的内积, 不过 $|\alpha_j(t)\rangle$ 是 A 的本征向量 $|\alpha_j\rangle$ 向着时间的负方向演化的结果. 结合在经典力学中对刚体运动的研究方式, 很自然地把后一种看法说成是被动观点.

在被动观点中, 系统的量子态不再改变, 随时间变化的是观测量. 观测量 A 随时间的变化是

$$A(t)=U^{\dagger}(t)AU(t) \tag{8}$$

这里, 需要对 A 显含时间的情形作些说明. 以 $\mathbb{C}^2$ 上的力学量为例. 设系统的哈密顿量为 $H=\frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_z$, 有待考察的观测量是 $A(t)=f(t)\sigma_x$, 其中 $f(t)$ 时间 t 的函数, 这就是说, 观测量 A 显含时间. 系统的初态是 $|\psi\rangle$.

在主动观点中, 或者在 Schrödinger 图像中, 量子态随时间演化, 力学量没有随时间的动力学演化, 但是, 由于 $f(t)$ 是时间的函数, 观测量 $A(t)$ 有其自身的随时间的变化, 从 $t=0$ 时刻的 $f(0)\sigma_x$ 变化到 t 时刻的 $f(t)\sigma_x$.

在被动观点中, 量子态不再变化, 观测量 A 随时间的变化来自于两方面: 一是时间的函数 $f(t)$ 随时间的变化, 这不属于动力学演化过程; 一是力学量 σ_x 随时间的演化, 这属于动力学演化过程. 观测量 $A(t)$ 随时间的变化由下式给出,

$$A(0)=f(0)\sigma_x \longrightarrow A^H(t)=f(t)\sigma_x(t)$$

其中 $U(t)=e^{-iHt/\hbar}$, 并且 $\sigma_x(t)=U^\dagger(t)\sigma_x U(t)$, 上标 H 表示 Heisenberg 图像.

接着考虑 $A^H(t)$ 满足的微分方程, 即计算 $A^H(t)$ 关于时间的导数. 显然, 在 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A^H(t)$ 的表达式中, 有一项是

$$\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}\ U^\dagger(t)\sigma_x U(t)$$

我们把这一项记作 $\frac{\partial}{\partial t}A^H(t)$, 即

$$\frac{\partial}{\partial t}A^H(t)=\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}\ U^\dagger(t)\sigma_x U(t)=U^\dagger(t)\frac{\partial A(t)}{\partial t}U(t) \tag{9}$$

其中 $\frac{\partial A(t)}{\partial t}:=\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}\sigma_x$, 而 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A^H(t)$ 的其余部分来自于 $U(t)$ 和 $U^\dagger(t)$ 关于时间的导数.

一般地, 当观测量显含时间的时候, 将 (8) 式写为更一般的形式,

$$A^H(t)=U^\dagger(t)A(t)U(t) \tag{10}$$

然后关于时间求导, 有

$$\frac{\mathrm{d}A^H(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}U^\dagger(t)}{\mathrm{d}t}A(t)U(t)+U^\dagger(t)A(t)\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t}+\frac{\partial A^H(t)}{\partial t} \tag{11}$$

其中 $\frac{\partial A^H(t)}{\partial t}$ 实际上就是 $U^\dagger(t)\frac{\partial A(t)}{\partial t}U(t)$. 为了给出 $\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t}$ 和 $\frac{\mathrm{d}U^\dagger(t)}{\mathrm{d}t}$ 的形式, 考虑 Schrödinger 方程,

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

考虑到 $|\psi(t)\rangle=U(t)\,|\psi(0)\rangle$, 将 Schrödinger 方程改写为

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t}\,|\psi(0)\rangle=HU(t)\,|\psi(0)\rangle$$

上述方程对于任意初态 $|\psi(0)\rangle$ 均成立, 所以有

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}U(t)}{\mathrm{d}t}=HU(t)$$

这便是 $U(t)$ 满足的方程[1], 对方程的两端作厄密共轭, 得到 $U^\dagger(t)$ 满足的方程. 回到 (11) 式, 有

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

在上式右端, 出现了 $U^\dagger(t)HU(t)$ 和 $U^\dagger(t)A(t)U(t)$, 它们分别是被动观点中 t 时刻的哈密顿量和观测量, 也就是

$$H^H(t) = U^\dagger(t)HU(t), \quad A^H(t) = U^\dagger(t)A(t)U(t)$$

当哈密顿量不显含时间的时候, 才有 $H^H(t) = H$.

至此得到 Heisenberg 运动方程

$$\boxed{\frac{dA^H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[A^H(t), H^H] + \left(\frac{\partial A(t)}{\partial t}\right)^H} \tag{12}$$

其中

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

这也就是我们在 (9) 式中写过的 $\frac{\partial A^H(t)}{\partial t}$.

可以将 Heisenberg 运动方程 (12) 与力学量的期望值的方程 (3) 比较.

守恒量, 运动常数

从 Heisenberg 运动方程 (12) 可以看出, 如果 $\frac{dA^H(t)}{dt} = 0$, 那么力学量 A 是守恒量.

特别地, 如果观测量不显含时间, 即 $\frac{\partial A(t)}{\partial t} = 0$, 那么

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

如果进一步地, H 不显含时间, 即 $H^H(t) = H$, 那么 $[A^H(t), H] = 0$ 就意味着 A 是守恒量, 注意到

$$[A^H(t), H] = [U^\dagger(t)AU(t), H] = U^\dagger(t)[A, H]U(t)$$

上式的第二个等号用到了 (当哈密顿量不显含时间的时候) $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$ 以及 $[U(t), H] = 0$, 于是,

$$\frac{\partial A(t)}{\partial t} = 0 \ \&\ [A, H] = 0 \implies A \text{ 是守恒量}$$

也可以在主动观点的 Schrödinger 绘景中说守恒量. 如果对于任意量子态 ρ,

$$\frac{d\langle A\rangle_\rho}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle [A, H]\rangle_\rho + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle_\rho = 0$$

那么 A 在任意时刻的期望值都不随时间改变, A 是守恒量.

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.

[1] 当哈密顿量 H 显含时间的时候, 该方程很难求解.

Heisenberg 图像, $\mathbb{C}^2$ 空间

以自旋 1/2 粒子在磁场中运动为例. 令

$$U(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z} = \mathbb{1}\cos\frac{\omega t}{2} - i\sigma_z \sin\frac{\omega}{2} = \mathrm{diag}\begin{pmatrix} e^{-i\frac{\omega t}{2}} & e^{i\frac{\omega t}{2}} \end{pmatrix}$$

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

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

或者, 用密度矩阵和 Bloch 向量表示,

$$\rho(0) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \sigma_x \sin\theta\cos\phi + \sigma_y \sin\theta\sin\phi + \sigma_z\cos\theta)$$

$$\Downarrow$$

$$\rho(t) = \frac{1}{2}\left[\mathbb{1} + U(t)\sigma_x U^\dagger(t)\sin\theta\cos\phi + U(t)\sigma_y U^\dagger(t)\sin\theta\sin\phi + U(t)\sigma_z U^\dagger(t)\cos\theta\right]$$

$$\boxed{U(t)\sigma_x U^\dagger(t) = \sigma_x\cos\omega t + \sigma_y \sin\omega t}$$

$$\boxed{U(t)\sigma_y U^\dagger(t) = -\sigma_x\sin\omega t + \sigma_y \cos\omega t}$$

$$\boxed{U(t)\sigma_z U^\dagger(t) = \sigma_z}$$

$$\Downarrow$$

$$\rho(t) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} + \sigma_x \sin\theta\cos(\phi+\omega t) + \sigma_y \sin\theta\sin(\phi+\omega t) + \sigma_z\cos\theta)$$

$$\boldsymbol{r}(0) = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{r}(t) = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos(\phi+\omega t) & \sin\theta\sin(\phi+\omega t) & \cos\theta \end{pmatrix}$$

在上述计算中, 出现了对 σ_x 的变换, $U(t)\sigma_x U^\dagger(t)$, 以及类似的对 σ_y 的变换. 但这只是数学推导中遇到的一个计算过程, 并不意谓着 σ_x 或 σ_y 作为力学量将随时间发生改变. 实际上, 在用 Bloch 向量表示密度矩阵的时候, 表达式一端的密度矩阵表示的是量子态, 另一端虽然出现了 Pauli 矩阵, 但不能把它们看作力学量 —— 量子态和力学量是全然不同的概念.

在考虑 t 时刻的量子态 ρ 的具体形式的时候, 我们应该将它表示为

$$\rho(t) = \frac{1}{2}[\mathbb{1} + r_x(t)\sigma_x + r_y(t)\sigma_y + r_z(t)\sigma_z] \tag{13}$$

在这种表示中, 三个 Pauli 矩阵前面的系数随时间变化, 可以类比于纯态情形下的演化过程:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_j c_j(0)\,|\alpha_j\rangle \;\longrightarrow\; |\psi(t)\rangle = \sum_j c_j(t)\,|\alpha_j\rangle$$

共同点是, 随时间的变化体现在态的展开系数上, 纯态的右矢形式在基向量 $|\alpha_j\rangle$ 展开, 密度矩阵在单位阵和三个 Pauli 矩阵上展开.

在 (13) 中, 随时间变化的展开系数 $r_{x,y,z}(t)$ 是力学量 $\sigma_{x,y,z}$ 在 t 时刻的量子态 $\rho(t)$ 中的期望值, 即 $r_{x,y,z}(t) = \langle\psi(t)|\,\sigma_{x,y,z}\,|\psi(t)\rangle$. 它们与初始时刻的 Bloch 向量的分量之间的关系是

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

这也就是

$$\boldsymbol{r}(t) = \mathrm{Rotation}(z, \omega t)\boldsymbol{r}(0)$$

另一方面, 期望值又可以写为

$$r_x(t) = \langle\psi(0)|\,U^\dagger(t)\,\sigma_x\,U(t)\,|\psi(0)\rangle = \langle\psi(0)|\sigma_x(t)|\psi(0)\rangle$$

这里, 在 Heisenberg 绘景中, σ_x 变为 $\sigma_x(t) = U^\dagger(t)\,\sigma_x\,U(t)$. 可以看到

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

表现出与 Bloch 向量相同的变换关系.

几何相

两个量子态, $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, 二者的相位差定义为[2].

$$\boxed{\gamma = \arg\langle\psi_1|\psi_2\rangle} \tag{14}$$

这是总的相位差, 可以在干涉仪中观察到.

内积的模 $|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|$ 衡量了两个量子态的重叠程度, 内积的幅角 $\arg\langle\psi_1|\psi_2\rangle$ 给出了两个量子态的相位差.

当两个量子态正交的时候, 即 $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$, 相位差无法确定.

[2] S. Pancharatnam, Generalized theory of interference, and its applications. Proc. Indian Acad. Sci. **44**, 247-262 (1956).

例 设 $|\psi(0)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$, 经历酉变换 $U(t) = e^{-i\frac{\omega t}{2}\sigma_z}$, 在 t 时刻的量子态是

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle = e^{-i\frac{\omega t}{2}}\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\frac{\omega t}{2}}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle \tag{15}$$

$|\psi(0)\rangle$ 和 $|\psi(t)\rangle$ 的内积是

$$\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle = \cos\frac{\omega t}{2} - i\cos\theta\sin\frac{\omega t}{2} = we^{i\gamma},$$

$$w = \sqrt{\cos^2\frac{\omega t}{2} + \cos^2\theta\sin^2\frac{\omega t}{2}},$$

$$\gamma = -\arctan\left[\cos\theta\tan\frac{\omega t}{2}\right].$$

几何相

系统的量子态从 $t=0$ 时的初态 $|\psi(0)\rangle$ 演化到 t 时刻的 $|\psi(t)\rangle$, 相位的变化是 $\gamma(t) = \arg\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle$. 我们知道, 量子态随时间的演化是一个动力学过程, 系统的哈密顿量是演化的生成元. 考虑动力学演化带来的相位的改变, 称之为动力学相, 记作 $\gamma_d(t)$.

动力学相 $\gamma_d(t)$ 能否等于 $\gamma(t)$?

所谓动力学相, 顾名思义, 就是系统的动力学演化导致的相位改变.

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

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

注意到

$$|\psi(t+\mathrm{d}t)\rangle = |\psi(t)\rangle + |\dot\psi(t)\rangle\,\mathrm{d}t, \tag{16}$$

$$\langle\psi(t)|\psi(t+\mathrm{d}t)\rangle = 1 + \langle\psi(t)|\dot\psi(t)\rangle\,\mathrm{d}t \tag{17}$$

而 $\langle\psi(t)|\dot\psi(t)\rangle$ 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

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

$$\dot\gamma_d = -i\langle\psi(t)|\dot\psi(t)\rangle$$

从 $t=0$ 到 τ 时刻的动力学相就是

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

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,

$$\boxed{\gamma_g(\tau) = \gamma(\tau) - \gamma_d(\tau)} \tag{18}$$

例 对于 t 时刻的量子态 (15),

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

动力学相是

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

几何相 $\gamma_g(\tau)$,

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

特别地, 对于循环演化 (cyclic evolution), $\omega T = 2\pi$,

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

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, 几何相等于路径围成的立体角的一半. 对于非循环的演化, 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.

Hilbert 空间和投影空间

这部分内容尚在整理中.